

INSTITUTO TECNOLÓGICO DE CELAYA

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA

MODELACIÓN MATEMÁTICA DE SISTEMAS DE
FERMENTACIÓN SUMERGIDA A TRAVÉS DE DINÁMICA DE
FLUIDOS COMPUTACIONAL

POR

OSCAR MARTÍN HERNÁNDEZ CALDERÓN

TESIS PRESENTADA AL DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA COMO
REQUISITO PARCIAL PARA OBTENER EL GRADO DE:

DOCTOR EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

CELAYA, GUANAJUATO. DICIEMBRE DE 2006.

RESUMEN

En este proyecto de investigación, se presenta la formulación y resolución de un modelo matemático para procesos de fermentación sumergida, desarrollado a través de dinámica de fluidos multifase. Se asume a un proceso fermentativo como un sistema binario: medio de cultivo, fase líquida; microorganismos, fase sólida.

La fase continua se formuló bajo un enfoque Euleriano, mediante el sistema matemático conformado por las ecuaciones locales de continuidad y transporte de *momentum*, promediadas volumétricamente. La fase dispersa desde la perspectiva de un enfoque Lagrangiano, se expresó a través de un sistema de ecuaciones de movimiento que describen el desplazamiento de un conjunto de partículas. Para el transporte de *momentum* interfacial se utilizó un acoplamiento bidireccional .

Se introdujo una representación dual para la fase dispersa, mediante la asociación unívoca nodo-partícula; es decir, a través de la implementación de una malla, donde cada nodo representó a una partícula. De forma tal, que el movimiento de la fase dispersa se redujo al simple desplazamiento específico de un conjunto de nodos, regido por un conjunto de ecuaciones de movimiento para tal fase.

El esquema numérico utilizado, consistió de una metodología híbrida del método Euleriano Lagrangiano Arbitrario (ALE) y el método Lagrangiano Euleriano Acoplado (CEL). Esto es, una malla Euleriana para la fase continua y una malla Lagrangiana para la fase dispersa, con una rezoñificación constante de la malla Lagrangiana en cada iteración.

La inconveniencia de un excesivo tiempo de ejecución debido a la constante rezo-
nificación de la malla Lagrangiana, se evitó por la utilización de una interpolación gaussiana
sobre una rejilla. Tal interpolación contribuyó benéficamente, como una herramienta de
transformación del sistema discreto concerniente a la fase discreta, a un sistema conti-
nuo, lo que simplificó las típicas inherencias existentes en un acople de transferencia de
momentum interfacial entre un sistema discreto y un sistema continuo.

Asimismo, la formulación discreta de la fase continua y discreta, se implementó numéri-
camente a través del método del elemento finito y una discretización explícita de Runge-
Kutta de orden 4, respectivamente. Se incorporó el método del Lagrangiano aumentado a
la formulación discreta de la fase continua, lo cual propicio estabilidad en la convergencia
durante la simulación numérica.

El modelo matemático se ensayó sobre el estado hidrodinámico que conforma el mo-
vimiento de un fluido monofásico, dentro de un par de cilindros concéntricos (un cilindro
estacionario y otro móvil), ante la perturbación que genera la adición de un pulso de
partículas. Y de la solución numérica obtenida, se evaluó la dinámica del torque que ex-
perimentó el sistema físico durante la evolución de la perturbación, así como el proceso
de homogeneización que sufrió la fase dispersa.

Dirigida por: Dr. Eleazar M. Escamilla Silva

AGRADECIMIENTOS

A mi asesor, por la amistad y confianza depositada en mi persona. Condición personal que deseo no haber defraudado en la culminación de este proyecto.

A CONACyT y CONCyTEG, por el soporte económico otorgado, sin el cual hubiese sido imposible realizar mis estudios de posgrado.

Al cuerpo de docentes que participó en mi formación académica. En especial al Dr. Javier Alvarado y al Dr. Vicente Rico, cuyas enseñanzas fueron indispensables para el desarrollo de este proyecto.

A mis padres y hermanos, por el constante apoyo brindado en cada una de mis etapas profesionales.

A mi esposa e hijo, por los gratos momentos de compañía compartida, que me permitieron alcanzar la tranquilidad para dar respuesta a muchos de los obstáculos presentados durante esta investigación.

A Dios, por regalarme la existencia.

A mi esposa e hijo

ÍNDICE GENERAL

RESUMEN	I
AGRADECIMIENTOS	III
ÍNDICE GENERAL	V
ÍNDICE DE FIGURAS	IX
ÍNDICE DE CUADROS	XI
1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. Objetivos	3
1.1.1. Objetivo General	3
1.1.2. Objetivos Particulares	3
1.2. Justificación	3
2. BIOPROCESOS	4
2.1. Metabolismo	4
2.2. Cinética de crecimiento microbiano	4
2.3. Descripción de un bioproceso	6
2.4. Mejoramiento de un bioproceso	7
2.4.1. Aplicación de la mutagénesis	7
2.4.2. Control de las variables de proceso	8
2.4.3. Teoría de control	9
2.4.4. Optimización de la constitución del medio de cultivo	10
2.4.5. Control sobre la actividad metabólica	10

3. DINÁMICA DE FLUIDOS	12
3.1. Ecuaciones Generales de Transporte	12
3.1.1. Principios fundamentales de conservación	12
3.1.2. Teoremas de Transporte	13
3.1.3. Conservación de la masa	15
3.1.4. Conservación del <i>momentum</i>	16
3.1.5. Enfoque Euleriano y Lagrangiano	18
3.1.6. Formulación Navier-Stokes	20
3.1.7. Condiciones Frontera	22
3.2. Dinámica de Fluido Multifase	26
3.2.1. Formulación de campo continuo para flujos multifásicos	26
3.2.2. Formulación Lagrangiana-Euleriana	33
4. DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL	36
4.1. Introducción	36
4.1.1. Notas históricas	36
4.1.2. Situación actual	37
4.2. Simulación Numérica	40
4.2.1. Beneficios	40
4.2.2. Procedimiento general de resolución	40
4.3. Métodos Basados en Mallas	43
4.3.1. Mallas Lagrangianas	43
4.3.2. Mallas Eulerianas	45
4.3.3. Malla Lagrangiana-Euleriana	46
4.3.4. Limitaciones de los métodos basados en mallas	47
4.4. Métodos de Partículas Libres de Malla	49
4.4.1. Hidrodinámica de Partículas Suavizadas	49
4.4.2. Mínimos Cuadrados Móviles	53
5. MÉTODO DEL ELEMENTO FINITO	55
5.1. Generalidades	55

5.1.1.	Aproximación de una solución	56
5.1.2.	Partición de un dominio	59
5.1.3.	Elemento de referencia	62
5.1.4.	Funciones de forma e interpolación	65
5.2.	Formulación Variacional	70
5.2.1.	Método de los Residuos ponderados	70
5.2.2.	Transformación de integrales	73
5.2.3.	Funcionales	76
5.2.4.	Discretización	79
5.3.	Formulación Discreta	85
5.3.1.	Discretización para un elemento finito	85
5.3.2.	Ensamble	90
5.4.	Técnicas Computacionales	93
5.4.1.	Almacenamiento	93
5.4.2.	Introducción de condiciones fronteras	98
5.4.3.	Integración numérica	100
5.4.4.	Sistemas de ecuaciones algebraicas lineales	105
5.4.5.	Resolución de sistemas no lineales	117
6.	MATERIALES Y MÉTODOS	122
6.1.	Generación de malla	122
6.1.1.	Software	122
6.2.	Lenguaje de programación	124
6.2.1.	Elección de lenguaje	124
6.2.2.	Software	126
6.3.	Implementación numérica: fase continua	127
6.3.1.	Preprocesamiento de la malla	127
6.3.2.	Optimización de la numeración global de los nodos	127
6.3.3.	Funciones y gradientes de interpolación	128
6.3.4.	Integración numérica	129

6.3.5.	Generación de los vectores unitarios normales	130
6.3.6.	Matrices locales de rigidez y vectores locales de carga	131
6.3.7.	Proceso de ensamble	133
6.3.8.	Introducción de condiciones de contorno tipo Dirichlet	134
6.3.9.	Resolución de sistemas algebraicos lineales	134
6.4.	Implementación numérica: fase dispersa	135
6.4.1.	Interpolación gaussiana sobre una rejilla homogénea	135
6.4.2.	Interpolación gaussiana sobre una rejilla deformada	136
7.	RESULTADOS Y DISCUSIÓN	138
7.1.	Descripción del modelo	138
7.1.1.	Introducción	138
7.1.2.	Descripción matemática	140
7.1.3.	Formulación débil: fase continua	142
7.1.4.	Método del Lagrangiano aumentado	143
7.1.5.	Discretización de la fase dispersa	145
7.2.	Esquema numérico general	146
7.3.	Ensayo del modelo	148
7.4.	Evaluación de parámetros macroscópicos	160
7.5.	Interpolación gaussiana	162
7.5.1.	Sobre una rejilla homogénea	162
7.5.2.	Sobre una rejilla deformada	163
7.5.3.	Proceso de refinamiento	165
8.	CONCLUSIONES	167
A.	FUNCIONES DE INTERPOLACIÓN	168
B.	GRADIENTES DE INTERPOLACIÓN: DOMINIO	174
C.	GRADIENTES DE INTERPOLACIÓN: CONTORNO	178
	BIBLIOGRAFÍA	182

ÍNDICE DE FIGURAS

2.1. Etapas del crecimiento microbiano.	5
2.2. Etapas de un bioproceso.	7
5.1. Fronteras comunes entre elementos distintos.	60
5.2. Restricciones involucradas en el proceso de partición.	60
5.3. Técnicas para decrementar el error de discretización geométrica.	60
5.4. Formas clásicas de los elementos.	61
5.5. Conectividad elemental	62
5.6. Transformación de un elemento de referencia a un elemento real.	64
5.7. Transformación de una integral de contorno sobre un dominio 2D.	69
5.8. Transformación de una integral de contorno sobre un dominio 3D.	70
5.9. Etiquetado global (izquierda); y etiquetado local (derecha).	91
5.10. Esquema de una matriz dispersa y una matriz banda.	93
6.1. Triangulaciones que cumplen y no cumplen la condición de Delaunay . . .	124
6.2. Transformación de los puntos de cuadratura para el contorno de un elemento geométrico de referencia.	130
7.1. Dominio discretizado en elementos triangulares.	150
7.2. Dinámica de la fracción volumétrica para la fase continua.	152
(a). $t^* = 0,00000$	152
(b). $t^* = 0,00110$	152
7.2. Dinámica de la fracción volumétrica para la fase continua.	153
(c). $t^* = 0,00225$	153
(d). $t^* = 0,00335$	153

7.3. Dinámica del componente x de la velocidad para la fase continua.	154
(a). $t^* = 0,00000$	154
(b). $t^* = 0,00110$	154
7.3. Dinámica del componente x de la velocidad para la fase continua.	155
(c). $t^* = 0,00225$	155
(d). $t^* = 0,00335$	155
7.4. Dinámica del componente y de la velocidad para la fase continua.	156
(a). $t^* = 0,00000$	156
(b). $t^* = 0,00110$	156
7.4. Dinámica del componente y de la velocidad para la fase continua.	157
(c). $t^* = 0,00225$	157
(d). $t^* = 0,00335$	157
7.5. Dinámica de la presión para la fase continua.	158
(a). $t^* = 0,00000$	158
(b). $t^* = 0,00110$	158
7.5. Dinámica de la presión para la fase continua.	159
(c). $t^* = 0,00225$	159
(d). $t^* = 0,00335$	159
7.6. Dinámica de homogeneización ante una perturbación.	161
7.7. Dinámica del torque ante una perturbación.	161
7.8. Naturaleza de la función $f(x, y) = \text{sen}(\pi xy)$	162
7.9. Errores relativos de una interpolación gaussiana sobre una rejilla homogénea.	163
7.10. Errores relativos de una interpolación gaussiana sobre una rejilla deformada.	164
7.11. Interpolación gaussiana con $n = 300$	165
7.12. Interpolación gaussiana sobre una rejilla homogénea.	166

ÍNDICE DE CUADROS

6.1. Ventajas de los lenguajes de programación FORTRAN y C++	125
6.2. Desventajas de los lenguajes de programación FORTRAN y C++	126
6.3. Formulaciones variacionales codificadas computacionalmente para la construcción de las matrices locales de rigidez	132
6.4. Formulaciones variacionales codificadas computacionalmente para la construcción de los vectores locales de carga	132

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

El estudio hidrodinámico de los procesos fermentativos siempre ha sido de relevante importancia. Incluso, se puede ser presuntuoso y declarar: no es posible discutir el mejoramiento de un proceso fermentativo sin el apoyo de un análisis hidrodinámico. De hecho, estos estudios son de suma utilidad en la toma de decisiones durante el escalamiento de un proceso.

Los estudios hidrodinámicos tienen como objeto evidenciar la dependencia del estado de un proceso (la naturaleza del flujo) con respecto a sus variables. Por ejemplo, es posible evaluar la dependencia que ejerce la concentración de biomasa sobre la potencia requerida para alcanzar el mezclado deseado. Evidentemente, tales análisis requieren de la realización de un conjunto de estudios experimentales y un procesamiento de los datos experimentales recabados.

Con respecto a como describir matemáticamente las dependencias existentes entre el estado de un proceso y sus variables; dentro de los análisis hidrodinámicos, es común la formulación de correlaciones a través de números adimensionales, cuyas definiciones incluyen a los parámetros que se desean estudiar.

Aunque las correlaciones adimensionales han demostrado ser una herramienta valiosa que permiten describir matemáticamente la naturaleza hidrodinámica de un proceso y posteriormente utilizarlas para su mejoramiento; no capturan explícitamente los fenómenos de transporte que imperan sobre el mismo. En contraste, la modelación de un proceso

a través de la inclusión de los mecanismos de transporte, permite al investigador indagar la verdadera influencia que ejerce cada uno de ellos, sobre el comportamiento hidrodinámico de un proceso.

La búsqueda de modelos establecidos a través de los axiomas fundamentales de conservación, que permiten sustituir las correlaciones adimensionales, día a día se vuelve una opción mas viable, dado el impulso tecnológico que existe en el desarrollo de ordenadores con mayor velocidad de cálculo y memoria para procesamiento de datos. En cuanto a la naturaleza de los modelos matemáticos, estos generalmente corresponden a un sistema de ecuaciones integrodiferenciales, con condiciones iniciales y de contorno preescritas. Y su descripción depende estrictamente del conjunto de hipótesis asumidas por el investigador.

El desarrollo de este proyecto de investigación, tiene como objeto el planteamiento y resolución de un modelo matemático para un sistema de fermentación sumergida, basado en los principios fundamentales de conservación, y el cual considere los efectos de transporte de *momentum* interfaciales entre los microorganismos y el medio de cultivo.

Adicional a lo expresado previamente, es necesario comentar que el desarrollo de esta tesis tiene como meta adicional, proveer un conjunto de herramientas numéricas y de modelación matemática, para proyectos enfocados en el estudio hidrodinámico de sistemas bacterianos en fermentación sumergida.

1.1. Objetivos

1.1.1. Objetivo General

Presentar la formulación y resolución de un modelo matemático para un proceso de fermentación sumergida, bajo la abstracción de un sistema multifásico disperso: microorganismos, fase sólida; y medio de cultivo, fase líquida.

1.1.2. Objetivos Particulares

1. Construcción de una librería desarrollada en lenguaje C++, para resolver sistemas integrodiferenciales mediante el método del elemento finito.
2. Implementación y resolución de una nueva formulación Euleriana-Lagrangiana para la modelación de un sistema disperso de dos fases, con acoplamiento bidireccional en el transporte de *momentum* interfacial.
3. Desarrollo de una interpolación gaussiana sobre una rejilla homogénea o ligeramente deformada, como herramienta numérica en la conversión de un sistema discreto a un sistema continuo.

1.2. Justificación

El principal motor en el desarrollo de este proyecto, es la aridez de las investigaciones en procesos de fermentación sumergidas abordados como sistemas multifásicos a través de dinámica de fluidos computacional. Cuyos resultados sin duda, pueden ser de valioso interés y gran utilidad como herramienta de apoyo en el análisis hidrodinámico de sistemas fermentativos.

2.1. Metabolismo

Los procesos metabólicos se pueden clasificar en dos categorías principales. Por un lado está el catabolismo, que es el conjunto de reacciones mediante las cuales la célula fragmenta las moléculas complejas que utiliza como fuente energética (los alimentos) hasta sus componentes esenciales (azúcares, aminoácidos o ácidos grasos), transformando éstos en energía o en elementos disponibles para el mantenimiento de sus propias estructuras biológicas.

Por otro lado está el anabolismo, que es el conjunto de reacciones mediante las cuales la célula sintetiza las macromoléculas que necesita para subsistir a partir de las sustancias sencillas obtenidas mediante el catabolismo.

El metabolismo es un proceso sumamente complejo en el que existe un sutil equilibrio entre todas las reacciones químicas que lo constituyen, las cuales no se interfieren entre ellas aunque sí se regulan las unas a las otras, teniendo las enzimas un papel muy importante en el mismo.

2.2. Cinética de crecimiento microbiano

A diferencia de los organismos superiores, los microorganismos presentan una alta tasa de reproducción celular. La tasa de crecimiento microbiana está influenciada por

un número de parámetros tales como: tipo de cepa, disponibilidad de substrato, y las condiciones ambientales. El crecimiento microbiano bajo condiciones favorables se puede modelizar en 4 fases (Moo-Young y Chisti, 1994):

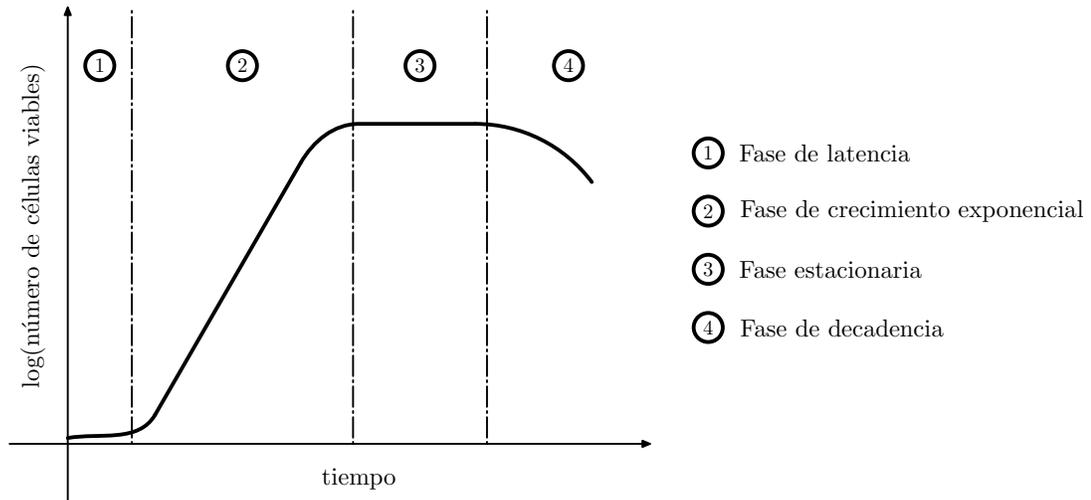


Figura 2.1: Etapas del crecimiento microbiano.

- **Fase de Latencia.** Es la fase de adaptación al medio, existe aumento de la masa celular pero no hay aumento en el número de células.
- **Fase de crecimiento exponencial.** Fase en la que predomina una rápida reproducción celular plenamente adaptadas al medio.
- **Fase estacionaria.** El número de microorganismos se vuelve constante. La causa de esta etapa es el agotamiento en el medio de los recursos esenciales para su crecimiento. La disponibilidad limitante del substrato controla el proceso de crecimiento microbiano.
- **Fase de decadencia.** El medio está agotado de los constituyentes necesarios para el sustento de los microorganismos. Las tasa de mortalidad de las células exceden cualquier posible recrecimiento.

Este conjunto de fases anteriormente descritas, inciden directamente sobre la hidrodinámica de un sistema fermentativo, debido a que el incremento celular de los microor-

ganismos afectan a los mecanismos de transporte de *momentum*. Y que desde un punto de vista reológico, sus propiedades que inicialmente expresan un comportamiento newtoniano, concluyen con un comportamiento no-newtoniano.

2.3. Descripción de un bioproceso

Se califica como un bioproceso, aquel proceso que se vale de la acción biocatalítica que ejercen enzimas, microorganismos, células vegetales o animales, sobre la materia prima para transformarla a productos de valor agregado, tales como alimentos o medicamentos; o alternativamente, sobre contaminantes para control de la polución ambiental (Moo-Young y Chisti, 1994). Un bioproceso, típicamente se divide en tres etapas, tal como se muestra en la figura 2.2.

La materia prima que puede ser de origen biológico o no, debe transformarse a una forma mas adecuada para su procesamiento. Esta etapa de pretratamiento, involucra operaciones tales como: selección, reducción de tamaño, hidrólisis química o enzimática, formulación, esterilización del medio, y otras operaciones preparatorias.

Después de la etapa de pretratamiento, continua la etapa de biorreacción, que tiene como objetivo la conversión de los substratos (materia prima) a biomasa (masa celular) y bioproductos. Incluso, la bioconversión puede utilizar células enteras no viables (inmovilizadas o libremente suspendidas) o enzimas purificadas, como agentes biocatalíticos.

El material producido en los biorreactores, generalmente debe ser procesado posteriormente, mediante una etapa de separación (*downstream*). Esta etapa, consiste predominantemente de una serie de operaciones físicas, que tienen como único objetivo purificar o concentrar el producto de interés; tales como: separación sólido-líquido (centrifugación, filtración, sedimentación, flotación), ruptura celular, precipitación, cristalización, adsorción, separación cromatográfica, separación por membrana (ultrafiltración, microfiltración), extracción líquido-líquido, destilación y secado.

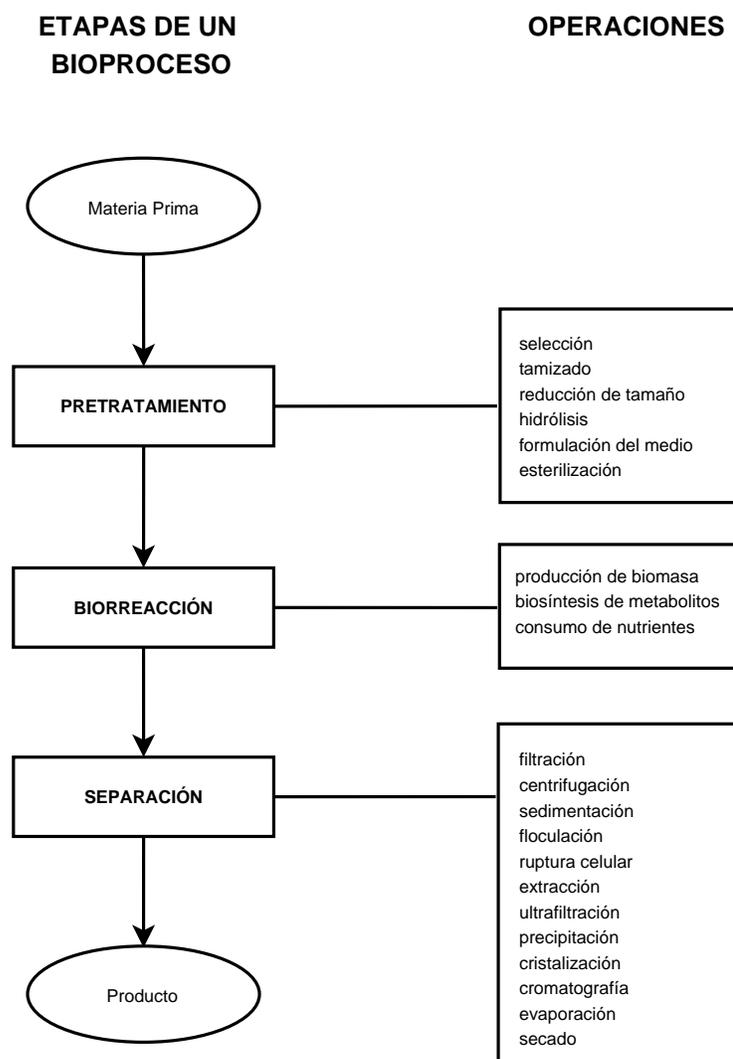


Figura 2.2: Etapas de un bioproceso.

2.4. Mejoramiento de un bioproceso

2.4.1. Aplicación de la mutagénesis

El procedimiento de mutación mediante el empleo de un agente determinado implica dos etapas, el tratamiento de la población con el mutágeno elegido y luego el aislamiento de los mutantes para su posterior ensayo y selección. Empíricamente el empleo de diferentes agentes resulta en el aislamiento de distintos espectros de mutantes.

La elección de un agente mutagénico depende en general de consideraciones prácticas. En algunos de los casos es más conveniente el empleo de más de uno en lugar del uso masivo de uno solo. La técnica a emplear puede producir una alta tasa de mutación o puede favorecer la separación de un número reducido de tipos deseables de un gran número de productores mediocres.

Hasta donde sea posible el aislamiento del mutante debería utilizar la característica mejorada del mismo como factor de selección. El incremento de su productividad podría ser el resultado de una modificación en los mecanismos de control que limitan el nivel de producción y/o de una variación en los precursores que llevan al producto. En este sentido el conocimiento de las rutas y mecanismos de control de la biosíntesis de un producto facilitan la estrategia a seguir en el aislamiento (Vogel y Todaro, 1996).

2.4.2. Control de las variables de proceso

Una estrategia alternativa aplicada en el mejoramiento de un bioproceso, involucra el control de las variables de proceso, entre las más importantes se pueden citar: pH, oxígeno disuelto, grado de mezclado y temperatura.

En algunos casos, mantener las condiciones óptimas de las variables del bioproceso, no tiene como única finalidad incrementar la productividad y eficiencia de un bioproceso, sino incluso hacer factible su desarrollo. Cuando un bioproceso se desarrolla sin control de sus variables de proceso, la distintas biotransformaciones involucradas en el desarrollo de su crecimiento, frecuentemente alteran su pH, variando su valor del parámetro óptimo. Por tanto, impera la necesidad de corregir esas desviaciones a través de la adición de una disolución ácida o alcalina; es decir, aplicar un control sobre el pH.

Otro control muy usual corresponde al de oxígeno disuelto (el cual incluso suele servir como pauta de medida del grado de mezclado). Esta variable es controlada mutuamente a través de la agitación del sistema y la tasa de aireación. Desempeña un papel muy importante en los bioprocursos aeróbicos, debido a su naturaleza de elemento limitante.

2.4.3. Teoría de control

A través de un evidente balance de materia, es claro que una alta producción de un metabolito de interés, involucra un alto consumo de alguno o varios de los nutrientes del medio de cultivo. Sí al momento del diseño del medio de cultivo, todo fuera tan simple como preveer que los nutrientes de alto consumo se introduzcan en altas concentraciones, entonces no existiría ninguna problemática con respecto algún nutriente limitante. Desafortunadamente, dentro de los procesos biológicos, es común el fenómeno de represión catabólica, el cual limita las concentraciones de los nutrientes que conforman al medio de cultivo.

El desarrollo tecnológico de la actual era digital, así como el diseño de biosensores que permiten cuantificar *in situ* las concentraciones de algún compuesto de interés (Sonnleitner, 2000), han permitido implementar la teoría de control para el desarrollo de perfiles óptimos de alimentación en línea, de algún nutriente limitante sujeto a represión catabólica.

La teoría de control, considera a un bioproceso como un sistema dinámico, cuyo estado modifica de acuerdo a una serie de criterios preestablecidos, a través de la búsqueda de un estado óptimo o deseado. Para este propósito, sensa alguna propiedad mensurable del sistema, que utiliza para determinar su estado, y así tomar una decisión sobre que acción deberá aplicarse para modificarlo hasta el estado de sistema deseado.

La factibilidad de esta metodología ha mostrado, que incluso a través de un monitoreo del proceso respiratorio, en conjunto con la teoría de control, es posible establecer perfiles óptimos de alimentación, que conducen a la mejora de un bioproceso (Kiss y Stephanopoulos, 1991).

2.4.4. Optimización de la constitución del medio de cultivo

Definida una cepa mejorada, típicamente el siguiente paso corresponde a la búsqueda de un medio de cultivo que satisfaga sus requerimientos metabólicos de manera eficiente y productiva.

Para alcanzar este propósito, es necesario conocer el papel que desempeñan la diferentes fuentes de carbono, fuentes de nitrógeno, vitaminas y/o sales minerales, en su crecimiento y producción. Se realizan diseños experimentales, en los que se ensayan medios de cultivos donde se varía su constitución y la concentración de sus constituyentes. Se cuantifica el efecto que distintos medios de cultivos ejercen sobre el metabolito de interés, y mediante un análisis de estas interacciones se determina la constitución del medio de cultivo óptimo.

A pesar de la naturaleza simplista de esta metodología de causa-efecto, genera información de relevante importancia. Permite conocer: los requerimientos vitamínicos y de aminoácidos esenciales, y el grado de asimilación de las fuentes de carbono y nitrógeno. Y en dado caso de presentar represión catabólica con respecto a algún nutriente, ayuda a establecer un criterio de adición al medio de cultivo.

Dado el esfuerzo en tiempo y material que se requiere invertir en el desarrollo de esta metodología, se considera de suma importancia el planteamiento de un buen diseño experimental.

2.4.5. Control sobre la actividad metabólica

Otra línea de investigación que ha contribuido de manera muy significativa en el mejoramiento de los bioprocesos, corresponde a la bioingeniería metabólica, que tiene como objetivo, elucidar las transformaciones metabólicas de la materia prima requerida en un bioproceso, hasta el metabolito de interés.

Elucidadas las reacciones bioquímicas asociadas a un bioproceso, la segunda etapa que persigue esta disciplina, consiste en evaluar los fluxes de los metabolitos intermedios, e identificar a aquellos que desempeñan un papel crucial en el rendimiento de un metabolito de interés. Esta información permite la implementación directa de estrategias de mejoramiento; tal como la adición de un metabolito intermediario al medio de cultivo en cierto estadio de un bioproceso, que coadyude a redirigir la ruta metabólica hacia el producto deseado (Christensen y Nielsen, 2000).

3.1. Ecuaciones Generales de Transporte

3.1.1. Principios fundamentales de conservación

A través de los siglos, con el deseo de obtener una descripción precisa de la naturaleza de los fenómenos, los investigadores han descubierto que algunas cantidades mensurables físicas, siempre se encuentran sujetas a ciertos principios fundamentales de conservación: de carácter axiomáticos, validados por la experiencia e imposibles de ser comprobados mediante expresiones mas sencillas.

Desde la perspectiva de la mecánica clásica, existen un conjunto de estos principios fundamentales de conservación que deben ser satisfechos, entre los más importantes se citan a continuación.

1. Conservación de la masa. La tasa temporal de cambio de masa de una región material es cero.
2. Conservación del *momentum* lineal. La tasa temporal de cambio del *momentum* lineal de una región material, equivale a la suma de fuerzas que actúa sobre dicha región. Esto es la generalización de Euler de la segunda ley de Newton del movimiento.
3. Conservación del *momentum* angular. La tasa temporal de cambio del *momentum* angular de una región material, es igual a la suma de los torques que actúan sobre tal región.

4. Conservación de la energía. La tasa temporal de cambio de la energía dentro de una región material equivale a la suma de las tasas de energías que recibe mediante calor y las interacciones de trabajo. Lo cual corresponde a la primera ley de la termodinámica.
5. Desigualdad de la entropía. La tasa temporal de cambio de entropía dentro de una región material es mayor o igual que la razón de la tasa de calor transferido a la región entre la temperatura absoluta de la región. Esta es la segunda ley de la termodinámica.

Por tanto, cualquier descripción matemática que se desarrolle para el movimiento de un fluido, siempre debe formularse sujeta a estos principios fundamentales de conservación.

3.1.2. Teoremas de Transporte

Teorema de Leibnitz

Considérese alguna cantidad de interés Φ , que es el resultado de la integración de una función $\phi(\vec{x}, t)$ sobre un dominio de volumen móvil $V(t)$

$$\Phi \equiv \int_{V(t)} \phi(\vec{x}, t) dv \quad (3.1)$$

De la definición anterior, resulta claro que la evaluación de la derivada temporal de la cantidad Φ es algo complicada, debido a la naturaleza de los límites de integración, los cuales son dependientes del tiempo. Sin embargo, a través del teorema de Leibnitz, es posible obtener tal expresión

$$\frac{d\Phi}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{V(t)} \phi(\vec{x}, t) dv = \int_{V(t)} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{x}, t) dv + \int_{S(t)} \phi(\vec{x}, t) (\vec{w} \cdot \vec{n}) ds \quad (3.2)$$

donde \vec{w} es el campo vectorial de velocidad asociado a la superficie móvil $S(t)$, la cual corresponde al contorno del volumen móvil $V(t)$; y el vector \vec{n} , es el vector normal unitario de tal superficie.

Una variante de este teorema, puede obtenerse aplicando el teorema de la divergencia

$$\frac{d\Phi}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{V(t)} \phi(\vec{x}, t) dv = \int_{V(t)} \left[\frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{x}, t) + \nabla \cdot \phi(\vec{x}, t) \vec{w} \right] dv \quad (3.3)$$

Para una descripción formal de este teorema es posible consultar algún libro de cálculo avanzado (Kaplan, 2002).

Teorema del Transporte General

Sea A una propiedad termodinámica extensiva arbitraria, y α su correspondiente propiedad termodinámica intensiva. Así, se satisface que

$$\delta A = \alpha \delta m \quad (3.4)$$

debido a que el producto de una cantidad diferencial de masa por una propiedad intensiva, corresponde a una cantidad diferencial de la propiedad extensiva. Y como de la definición de la densidad ρ se tiene que

$$\delta m = \rho \delta v \quad (3.5)$$

donde δv es una cantidad diferencial de volumen. Entonces

$$\delta A = \alpha \rho \delta v \quad (3.6)$$

Si se considera que la cantidad $\rho\alpha$ corresponde a la cantidad arbitraria ϕ del teorema de Leibnitz, entonces se formula el teorema del transporte general, el cual se expresa como

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} (\rho\alpha) dv = \int_{V(t)} \frac{\partial}{\partial t} (\rho\alpha) dv + \int_{S(t)} (\rho\alpha) (\vec{w} \cdot \vec{n}) ds \quad (3.7)$$

Aplicando el teorema de la divergencia al teorema de transporte general

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} (\rho\alpha) dv = \int_{V(t)} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho\alpha) + \nabla \cdot (\rho\alpha) \vec{w} \right] dv \quad (3.8)$$

Teorema del Transporte de Reynolds

Si se considera que la velocidad arbitraria \vec{w} del teorema de transporte general corresponde a la velocidad \vec{u} de un elemento de fluido. Y además, el volumen móvil $V(t)$, deja de ser arbitrario, y en lugar de ello, es un volumen de control que contiene a ese mismo

elemento de fluido, cuyo volumen $V_m(t)$ ahora se denomina volumen material. Bajo estas consideraciones se obtiene el teorema de transporte de Reynolds

$$\frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} (\rho\alpha) dv = \int_{V_m(t)} \frac{\partial}{\partial t} (\rho\alpha) dv + \int_{S_m(t)} (\rho\alpha) (\vec{u} \cdot \vec{n}) ds \quad (3.9)$$

Básicamente, el teorema de transporte de Reynolds establece que la tasa o razón temporal de incremento de la cantidad total de alguna propiedad extensiva A dentro de un sistema, es exactamente igual a la tasa temporal de incremento de la propiedad A dentro del volumen de control (fijo), más la tasa neta de flujo de A a través de la frontera del volumen de control.

3.1.3. Conservación de la masa

El transporte de masa puede expresarse a través del teorema de transporte de Reynolds (3.9), mediante la asignación de:

$$A = m \quad \alpha = 1 \quad (3.10)$$

Bajo este contexto, la masa corresponde a la propiedad extensiva que se desea analizar sobre el volumen de control $V_m(t)$ de un elemento de fluido. Resultando, que el transporte de masa se exprese como

$$\frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} \rho dv = \int_{V_m(t)} \frac{\partial \rho}{\partial t} dv + \int_{S_m(t)} \rho \vec{u} \cdot \vec{n} ds \quad (3.11)$$

Por otro lado, evaluando la cantidad masa que existe sobre ese mismo volumen de control $V_m(t)$, se tiene que esta corresponde a

$$m = \int_{V_m(t)} \rho dv \quad (3.12)$$

e introduciendo el principio fundamental de la conservación de la masa

$$\frac{dm}{dt} = 0 \quad (3.13)$$

se puede formular que

$$\frac{dm}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} \rho dv = 0 \quad (3.14)$$

Esto conduce a que el transporte de masa corresponda simplemente a

$$\int_{V_m(t)} \frac{\partial \rho}{\partial t} dv + \int_{S_m(t)} \rho \vec{u} \cdot \vec{n} ds = 0 \quad (3.15)$$

lo cual, al aplicar teorema de la divergencia se obtiene

$$\int_{V_m(t)} \frac{\partial \rho}{\partial t} dv + \int_{V_m(t)} \nabla \cdot \rho \vec{u} dv = 0 \quad (3.16)$$

En estas circunstancias es posible agrupar las integrales, es decir

$$\int_{V_m(t)} \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{u} \right] dv = 0 \quad (3.17)$$

Puesto que el volumen de control del elemento de fluido es absolutamente arbitrario, la única solución posible a la ecuación integral anterior, es que su integrando sea nulo en todos los puntos de integración

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{u} = 0 \quad (3.18)$$

A ésta última expresión se le denomina ecuación de continuidad, y expresa el transporte de masa que satisface la conservación de la masa.

3.1.4. Conservación del *momentum*

Para el caso del transporte de *momentum*, su expresión mediante el teorema de transporte de Reynolds (3.9), se requiere de la siguiente asignación:

$$A = m\vec{u} \quad \alpha = \vec{u} \quad (3.19)$$

Bajo este contexto, el *momentum* corresponde a la propiedad extensiva que se desea analizar sobre el volumen de control $V_m(t)$ de un elemento de fluido. Con esto resulta, que el transporte de *momentum* se expresa como

$$\frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} \rho \vec{u} dv = \int_{V_m(t)} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) dv + \int_{S_m(t)} \rho \vec{u} \vec{u} \cdot \vec{n} ds \quad (3.20)$$

Por otro lado, evaluando la cantidad *momentum* \vec{p} que existe sobre ese mismo volumen de control $V_m(t)$, se tiene que esta corresponde a

$$\vec{p} = \int_{V_m(t)} \rho \vec{u} dv \quad (3.21)$$

e introduciendo el principio fundamental de la conservación del *momentum*

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \int_{V_m(t)} d\vec{f}^v + \int_{S_m(t)} d\vec{f}_t^s \quad (3.22)$$

donde la primer integral corresponde a las fuerzas de volumen y la segunda integral a las fuerzas de superficie. Se puede formular que

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \int_{V_m(t)} d\vec{f}^v + \int_{S_m(t)} d\vec{f}_t^s = 0 \quad (3.23)$$

Esto conduce a que el transporte de *momentum* corresponda simplemente a

$$\int_{V_m(t)} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\vec{u}) dv + \int_{S_m(t)} \rho\vec{u}\vec{u} \cdot \vec{n} ds = \int_{V_m(t)} d\vec{f}^v + \int_{S_m(t)} d\vec{f}_t^s \quad (3.24)$$

Introduciendo, la descripción dada a las fuerzas de volumen y superficie

$$d\vec{f}^v = \rho\vec{\phi} dv \quad d\vec{f}_t^s = \vec{\sigma}(\vec{n}) ds \quad (3.25)$$

se obtiene

$$\int_{V_m(t)} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\vec{u}) dv + \int_{S_m(t)} \rho\vec{u}\vec{u} \cdot \vec{n} ds = \int_{V_m(t)} \rho\vec{\phi} dv + \int_{S_m(t)} \vec{\sigma}(\vec{n}) ds \quad (3.26)$$

o en su forma equivalente la cual incluye el tensor general de esfuerzos

$$\int_{V_m(t)} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\vec{u}) dv + \int_{S_m(t)} \rho\vec{u}\vec{u} \cdot \vec{n} ds = \int_{V_m(t)} \rho\vec{\phi} dv + \int_{S_m(t)} \boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{n} ds \quad (3.27)$$

Aplicando el teorema de la divergencia

$$\int_{V_m(t)} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\vec{u}) dv + \int_{V_m(t)} \nabla \cdot \rho\vec{u}\vec{u} dv = \int_{V_m(t)} \rho\vec{\phi} dv + \int_{V_m(t)} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} dv \quad (3.28)$$

En estas circunstancias es posible agrupar todas las integrales, es decir

$$\int_{V_m(t)} \left[\frac{\partial}{\partial t}(\rho\vec{u}) + \nabla \cdot \rho\vec{u}\vec{u} - \rho\vec{\phi} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \right] dv = 0 \quad (3.29)$$

Puesto que el volumen de control del elemento de fluido es absolutamente arbitrario, la única solución posible a la ecuación integral anterior, es que su integrando sea nulo en todos los puntos de integración

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\vec{u}) + \nabla \cdot \rho\vec{u}\vec{u} = \rho\vec{\phi} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (3.30)$$

A esta última expresión se le denomina ecuación de transporte general de *momentum*.

Dado que el tensor esfuerzo $\boldsymbol{\sigma}$, es la composición de una parte isotrópica, tensor presión $-p\mathbf{I}$; y otra anisótropa, tensor esfuerzo viscoso $\boldsymbol{\tau}$. Entonces la ecuación de transporte de *momentum* generalizada puede reescribirse en términos de estos tensores, como sigue

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\vec{u}) + \nabla \cdot \rho\vec{u}\vec{u} = \rho\vec{f} - \nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (3.31)$$

3.1.5. Enfoque Euleriano y Lagrangiano

Para describir la variables dinámicas de un fluido con respecto al tiempo, existen dos clases de derivadas temporales: la Euleriana y la Lagrangiana. La derivada Euleriana, denotada por derivada parcial del tiempo, implica la diferenciación con respecto al tiempo en un punto fijo que pertenece a un marco de referencia definido. Por otro lado, se puede seguir a un elemento de fluido en movimiento con un marco de referencia que se mueve con la misma velocidad, y así obtener la diferenciación con respecto al tiempo de alguna propiedad asociada con este elemento de fluido en movimiento. A este tipo de derivada temporal, se le denomina derivada Lagrangiana, y es denotada por la derivada completa con respecto al tiempo. Si \vec{x} y $\vec{x} + \delta\vec{x}$, son las posiciones de un fluido en los tiempos t y $t + \delta t$, respectivamente, el cual se mueve con una velocidad \vec{u} ; entonces la derivada temporal Lagrangiana de alguna propiedad $Q(\vec{x}, t)$ se define como

$$\frac{DQ}{Dt} = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{Q(\vec{x} + \vec{u}\delta t, t + \delta t) - Q(\vec{x}, t)}{\delta t} \quad (3.32)$$

Aplicando la expansión de la serie de Taylor en $Q(\vec{x} + \vec{u}\delta t, t + \delta t)$ para las coordenadas \vec{x} y t , con una aproximación del orden $O(h^2)$, entonces

$$Q(\vec{x} + \vec{u}\delta t, t + \delta t) = Q(\vec{x}, t) + \frac{\partial Q}{\partial t}\delta t + \vec{u} \cdot \nabla Q\delta t \quad (3.33)$$

así, la relación que hay entre la derivada temporal Euleriana y la derivada temporal Lagrangiana de una propiedad Q de un elemento de fluido, está dada por

$$\frac{DQ}{Dt} = \frac{\partial Q}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla Q \quad (3.34)$$

Si la propiedad Q de un elemento de fluido en movimiento, es la densidad local $\rho(\vec{x}, t)$, la ecuación hidrodinámica de ésta propiedad es

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla\rho \quad (3.35)$$

con esto, la ecuación de continuidad (3.18) puede escribirse como

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (3.36)$$

la cuál pertenece al enfoque Lagrangiano.

Bajo un razonamiento similar, es posible obtener una expresión para la ecuación de transporte de *momentum*, en función de la derivada temporal Lagrangiana. La ecuación hidrodinámica para la propiedad *momentum* volumétrico $\rho\vec{u}$, se expresa como

$$\frac{D}{Dt}(\rho\vec{u}) = \frac{\partial}{\partial t}(\rho\vec{u}) + \vec{u} \cdot \nabla\rho\vec{u} \quad (3.37)$$

por tanto, la ecuación de transporte de *momentum* (3.31), se puede reescribir como

$$\frac{D}{Dt}(\rho\vec{u}) + \rho\vec{u} \cdot \nabla\vec{u} = \rho\vec{\phi} - \nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (3.38)$$

la cuál pertenece al enfoque Lagrangiano.

Profundizando un poco más en la expresión obtenida para la ecuación de continuidad, bajo el enfoque Lagrangiano, se tiene que el cambio de volumen V de un elemento de fluido, que resulta del movimiento de cada elemento de superficie infinitesimal $d\vec{s}$ que confina al elemento de fluido, está dado como

$$\frac{DV}{Dt} = \int_{\partial V} \vec{u} \cdot d\vec{s} \quad (3.39)$$

donde el campo vectorial de velocidad \vec{u} , corresponde a la velocidad del elemento de superficie $d\vec{s}$. Por el teorema de la divergencia se tiene que

$$\frac{DV}{Dt} = \int_V \nabla \cdot \vec{u} dv \quad (3.40)$$

Y como el coeficiente de expansión volumétrica β se define como

$$\beta \equiv \lim_{V \rightarrow 0} \frac{1}{V} \frac{DV}{Dt} \quad (3.41)$$

entonces, mediante la expresión (3.40) se tiene que

$$\beta = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{1}{V} \int_V \nabla \cdot \vec{u} \, dv \quad (3.42)$$

utilizando la definición de divergencia de un campo vectorial

$$\nabla \cdot \vec{u} \equiv \lim_{V \rightarrow 0} \frac{1}{V} \int_V \nabla \cdot \vec{u} \, dv \quad (3.43)$$

con esto

$$\beta = \nabla \cdot \vec{u} \quad (3.44)$$

Es decir, la expansión volumétrica de un elemento de fluido, corresponde a la divergencia de su campo vectorial de velocidades. Así, se tiene que la variación temporal Lagrangiana de la densidad local de un elemento de fluido, corresponde al valor negativo del producto de la densidad por el coeficiente de expansión volumétrica.

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho\beta \quad (3.45)$$

Por tanto para un fluido incompresible; es decir, de densidad constante, se tiene de la expresión anterior, que el coeficiente de expansión volumétrica es nulo para cada elemento de volumen del fluido; por tanto la divergencia del campo de velocidades en cada elemento de fluido, es nula también.

$$\beta = \nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (3.46)$$

3.1.6. Formulación Navier-Stokes

Es posible conseguir una formulación menos estricta para la ecuación de transporte de *momentum* generalizada, sí se considera que las propiedades locales del fluido, densidad ρ y viscosidad μ , son independientes de la coordenadas espacio-tiempo.

Un fluido cuya densidad es constante, presenta un coeficiente de expansión volumétrico β nulo; es decir, el campo vectorial de velocidad es solenoidal. Esto reduce a la ecuación de continuidad en

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (3.47)$$

Considerando que el tensor esfuerzo viscoso ($\boldsymbol{\tau}$) solo captura las deformaciones de naturaleza anisótropa, originadas por simples movimientos de corte; éstos es, carecen de deformaciones debidas a una expansión de simetría esférica. Y asumiendo además que es proporcional al tensor velocidad de deformación ($\dot{\boldsymbol{\epsilon}}$). Este par de hipótesis conducen a la siguiente relación

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu \mathbf{dev} \dot{\boldsymbol{\epsilon}} \quad (3.48)$$

donde \mathbf{dev} denota a la parte desviatórica de un tensor. Mediante la definición del tensor velocidad de deformación, el cual se considera la parte simétrica del tensor gradiente de velocidad \boldsymbol{v}

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}} \equiv \frac{1}{2} [\boldsymbol{v} + \boldsymbol{v}^T] \quad \text{donde} \quad \boldsymbol{v} \equiv \nabla \vec{u} \quad (3.49)$$

se consigue

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \left[\boldsymbol{v} + \boldsymbol{v}^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{u}) \mathbf{I} \right] \quad (3.50)$$

pero dada la libre divergencia del campo vectorial de velocidad

$$\boldsymbol{\tau} = \mu [\boldsymbol{v} + \boldsymbol{v}^T] \quad (3.51)$$

Aplicando el operador divergencia a ambos lados de la ecuación anterior, resulta

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = \mu [\nabla \cdot \boldsymbol{v} + \nabla \cdot \boldsymbol{v}^T] \quad (3.52)$$

esto debido a que el escalar viscosidad no es afectado por el operador divergencia, puesto que por hipótesis, es un escalar constante. Y dado que

$$\nabla \cdot \boldsymbol{v}^T = \nabla (\nabla \cdot \vec{u}) \quad (3.53)$$

entonces el término anterior es nulo, debido que el campo vectorial de velocidad es de libre divergencia. Así la divergencia del tensor esfuerzo viscoso se expresa solamente como

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = \mu \nabla \cdot \boldsymbol{v} \quad (3.54)$$

Con esto, la ecuación de transporte de *momentum* generalizada (3.31), se reformula a

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho \nabla \cdot \vec{u} \vec{u} = \rho \vec{\phi} - \nabla p + \mu \nabla \cdot \boldsymbol{v} \quad (3.55)$$

y puesto que el término $\rho \nabla \cdot \vec{u}\vec{u}$ también se puede expresar como

$$\rho \nabla \cdot \vec{u}\vec{u} = \rho \vec{u} \cdot \mathbf{v} + \rho \vec{u} \nabla \cdot \vec{u} \quad (3.56)$$

entonces se reduce a

$$\rho \nabla \cdot \vec{u}\vec{u} = \rho \vec{u} \cdot \mathbf{v} \quad (3.57)$$

debido a que el campo vectorial de velocidad es solenoidal. Con ello, la ecuación de transporte de *momentum* generalizada se reescribe a

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho \vec{u} \cdot \mathbf{v} = \rho \vec{\phi} - \nabla p + \mu \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (3.58)$$

a esta última expresión, se le denomina ecuación de Navier-Stokes, la cuál fue obtenida inicialmente por Navier en 1822, mediante consideraciones moleculares. Bajo el enfoque Lagrangiano, esta ecuación corresponde a

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = \rho \vec{\phi} - \nabla p + \mu \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (3.59)$$

3.1.7. Condiciones Frontera

Flujos de entrada y salida

En muchas aplicaciones solo es de interés el comportamiento del fluido en una pequeña región. Por ejemplo, si se desea estudiar la ventilación ejercida dentro de una habitación por su entorno ambiental, la introducción de la atmósfera completa de la tierra dentro del modelo, resultaría demasiado impráctico. Lo mas adecuado sería modelar simplemente la habitación y tratar la interacción con el resto del mundo, mediante condiciones de entrada y salida del flujo de aire. Con esto, la prescripción de un flujo de entrada o salida sobre la frontera, algunas veces resulta suficiente.

Interfase sólido-líquido (superficies sólidas)

La mayoría de los sólidos se consideran impermeables a los fluidos, y asimismo, se presume que los fluidos se encuentran *adheridos* a sus superficies. Es decir, para una interfase sólido-fluido es típico que se apliquen las condiciones de no deslizamiento y

no penetración, implicando que los elementos de fluidos sobre la pared de un sólido, se muevan con la velocidad de la pared. Por tanto, sí se considera, que la interfase sólido-fluido (denotada por $\Gamma(t)$) está descrita por la función

$$\vartheta(\vec{x}, t) = 0 \quad \text{para todo } \vec{x} \in \Gamma(t) \quad (3.60)$$

y la velocidad del sólido dentro de la interfase está prescrita mediante el campo vectorial

$$\vec{v}(\vec{x}, t) \quad \text{para todo } \vec{x} \in \Gamma(t) \quad (3.61)$$

entonces, la velocidad del fluido dentro de la interfase satisface la restricción

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \vec{v}(\vec{x}, t) \quad \text{para todo } \vec{x} \in \Gamma(t) \quad (3.62)$$

Interfase fluido-fluido (superficies libres)

En el caso de una interfase fluido-fluido, ésta se representa mediante una superficie libre, y es necesario aplicar dos clases de condiciones fronteras: una condición cinemática, la cual relaciona el movimiento de la interfase libre con las velocidades de los fluidos en la superficie libre; y una condición dinámica, la cual satisface el balance de fuerzas dentro de la superficie libre.

Condición frontera cinemática. Considerando que la superficie libre de una interfase fluido-fluido, denotada por $\Gamma(t)$, se describe matemáticamente mediante

$$\vartheta(\vec{x}, t) = 0 \quad \text{para todo } \vec{x} \in \Gamma(t) \quad (3.63)$$

entonces la condición frontera cinemática que se debe satisfacer, corresponde a:

$$\frac{d\vartheta}{dt} = \frac{\partial\vartheta}{\partial t} + \vec{w} \cdot \nabla\vartheta = 0 \quad \text{para todo } \vec{x} \in \Gamma(t) \quad (3.64)$$

donde el campo vectorial $\vec{w} \equiv \vec{w}(\vec{x}, t)$, corresponde a la velocidad puntual de la interfase.

En caso de estacionaridad

$$\frac{\partial\vartheta}{\partial t} = 0 \quad \text{para todo } \vec{x} \in \Gamma(t) \quad (3.65)$$

la condición frontera cinemática se reduce a

$$\vec{w} \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{para todo } \vec{x} \in \Gamma(t) \quad (3.66)$$

donde el vector \vec{n} corresponde al vector normal unitario sobre la interfase. Lo que implica que no hay flujo a través de la superficie libre, pero sí tangencialmente.

Condición frontera dinámica. Está condición requiere que el esfuerzo sea continuo a través de la superficie libre, la cual separa a ambos fluidos. La tracción ejercida por el fluido (1) sobre el fluido (2), es igual y opuesta a la ejercida por el fluido (2) sobre el fluido (1).

$$\boldsymbol{\sigma}^{(1)}(\vec{x}, t) = -\boldsymbol{\sigma}^{(2)}(\vec{x}, t) \quad \text{para todo } \vec{x} \in \Gamma(t) \quad (3.67)$$

puesto que los vectores normales unitarios de cada fase sobre la superficie libre satisfacen

$$\vec{n}^{(1)} = -\vec{n}^{(2)} \quad \text{para todo } \vec{x} \in \Gamma(t) \quad \text{para todo } \vec{x} \in \Gamma(t) \quad (3.68)$$

la condición frontera dinámica exige que se cumpla

$$\vec{n}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(1)} = \vec{n}^{(2)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(2)} \quad \text{para todo } \vec{x} \in \Gamma(t) \quad (3.69)$$

En la situación de superficies libres curvas, la tensión superficial puede crear un salto de presión a través de la superficie libre, la cual puede ser expresada mediante

$$\delta p = \sigma \kappa \quad (3.70)$$

En esta expresión el escalar σ denota la tensión superficial, y la cantidad κ equivale a dos veces la curvatura media de la superficie libre. La tensión superficial actúa como una membrana tensa en la superficie libre, la cual induce a minimizar el área superficial. En estos casos, cuando la tensión superficial es importante, la condición frontera dinámica, se modifica a

$$\vec{n}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(1)} + \sigma \kappa \vec{n}^{(1)} = \vec{n}^{(2)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(2)} \quad \text{para todo } \vec{x} \in \Gamma(t) \quad (3.71)$$

donde $\kappa > 0$ si el centro de la curvatura se localiza dentro del fluido (1).

Notas adicionales

Es factible demostrar que para una frontera de un fluido newtoniano incompresible, el introducir la condición de no penetración, da como resultado que el esfuerzo local normal sea idéntico a la presión mecánica.

Para un fluido newtoniano, la conexión entre el tensor esfuerzo viscoso y el tensor velocidad de deformación, está dada por

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu \left[\dot{\boldsymbol{\epsilon}} - \frac{1}{3}(\nabla \cdot \vec{u})\mathbf{I} \right] \quad (3.72)$$

por tanto, evaluando el esfuerzo local normal del esfuerzo viscoso en la frontera, donde el vector normal unitario es \vec{n} , se tiene

$$\vec{n} \cdot \boldsymbol{\tau} \cdot \vec{n} = 2\mu \vec{n} \cdot \left[\dot{\boldsymbol{\epsilon}} - \frac{1}{3}(\nabla \cdot \vec{u})\mathbf{I} \right] \cdot \vec{n} \quad (3.73)$$

Utilizando la definición del tensor velocidad de deformación, esto equivale a

$$\vec{n} \cdot \boldsymbol{\tau} \cdot \vec{n} = 2\mu \vec{n} \cdot \left[\frac{1}{2}(\mathbf{v} + \mathbf{v}^T) - \frac{1}{3}(\nabla \cdot \vec{u})\mathbf{I} \right] \cdot \vec{n} \quad (3.74)$$

para la parte simétrica del tensor gradiente de velocidad es sencillo probar la identidad

$$\vec{n} \cdot \left[\frac{1}{2}(\mathbf{v} + \mathbf{v}^T) \right] \cdot \vec{n} = \vec{n} \cdot \nabla(\vec{n} \cdot \vec{u}) \quad (3.75)$$

así, se consigue que

$$\vec{n} \cdot \boldsymbol{\tau} \cdot \vec{n} = 2\mu \left[\vec{n} \cdot \nabla(\vec{n} \cdot \vec{u}) - \frac{1}{3}(\nabla \cdot \vec{u}) \right] \quad (3.76)$$

Asumiendo que en la frontera, se cumple la condición de no penetración, entonces la expresión anterior, se reduce a

$$\vec{n} \cdot \boldsymbol{\tau} \cdot \vec{n} = -\frac{2\mu\beta}{3} \quad (3.77)$$

donde el escalar β es el coeficiente de expansión volumétrico definido en §3.1.5. Por tanto, para un fluido incompresible, el esfuerzo local normal debido a los esfuerzos viscosos, es nulo en la frontera

$$\vec{n} \cdot \boldsymbol{\tau} \cdot \vec{n} = 0 \quad (3.78)$$

Y el esfuerzo local normal del tensor esfuerzo sobre la frontera, corresponde

$$\vec{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{n} = p \quad (3.79)$$

donde el escalar p denota a la presión mecánica que se ejerce en cada punto de la frontera.

3.2. Dinámica de Fluido Multifase

Dentro del contexto típico de la ingeniería, la materia existe en uno de los tres estados físicos (o fases): sólido, líquido y gas. Con respecto a la dinámica de fluidos, un flujo multifásico se refiere a un flujo donde dos o más fases están presentes simultáneamente. En algunos casos, las distintas fases pueden consistir de diferentes estados físicos de un mismo material – tal como burbujas de vapor en agua (gas-líquido). En otros casos, cada una de las fases consiste de un material diferente – tal como partículas de polvo en aire (sólido - gas).

Para describir el movimiento de un fluido multifase no solo basta con expresar un conjunto de ecuaciones que satisfagan las leyes generales de conservación para cada una de las especies que constituye el fluido; sino también, hay que considerar la posibilidad de transferencia de masa, *momentum* y energía entre cada una de las fases.

Dentro de los sistemas multifases es común que una de las fases se encuentre en mayor proporción que las demás fases. En estos casos, es habitual que a la fase en mayor proporción se le denomine fase continua; y a las fases en menor proporción fases dispersas.

Existen dos enfoques básicos para tratar sistemas multifásicos binarios dispersos: el enfoque euleriano-euleriano, donde tanto la fase continua como la dispersa son tratadas bajo una descripción de campo continuo; y el enfoque lagrangiano-euleriano, donde la fase continua y la fase dispersa, se tratan bajo una descripción de campo continua y discreta, respectivamente.

3.2.1. Formulación de campo continuo para flujos multifásicos

Bajo este tratamiento, se asume que para cada punto espacial dentro del dominio, existe un conjunto de ecuaciones continuas que satisfacen las leyes de conservación del movimiento del fluido (masa, *momentum* y energía) para cada una de las fases involucradas. En teoría todas las fases coexisten en cada punto espacial del dominio, y para conse-

guir este propósito se introduce la noción fracción volumétrica, desarrollada a través del concepto del promedio sobre pequeños volúmenes arbitrarios. Ambos conjuntos de ecuaciones deben ser acopladas a través de la fracción volumétrica así como de las fuerzas interfaciales y las relaciones de transferencia de masa y calor.

Función indicadora de fase

Considérese dos fluidos o fases, los cuales ocupan dominios disjuntos dependientes del tiempo Ω_k , $k = 1, 2$; de forma tal, que el dominio

$$\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \quad (3.80)$$

es constante en cualquier tiempo. Si se denota las fronteras de los respectivos dominios mediante $\partial\Omega_1$, $\partial\Omega_2$ y $\partial\Omega$, entonces la interfase que separa a los fluidos está definida por

$$S_i = (\partial\Omega_1 \cup \partial\Omega_2) / \partial\Omega \quad (3.81)$$

Es posible definir para cada fase, una función indicadora de fase $X_k(\vec{x}, t)$, la cuál es unitaria, sí la posición vectorial \vec{x} está dentro del fluido k en el tiempo t , de lo contrario es nula.

$$X_k(\vec{x}, t) = \begin{cases} 1 & \vec{x} \in \Omega_k(t) \\ 0 & \vec{x} \notin \Omega_k(t) \end{cases} \quad (3.82)$$

Las dos funciones indicadoras de fase, están relacionadas mediante la condición

$$X_1 + X_2 = 1 \quad (3.83)$$

Asimismo, el gradiente de la función indicadora de fase, está ligada al vector normal unitario de la interfase \vec{n} , y a la función delta de Dirac de la interfase $\delta(\vec{x} - \vec{x}^*, t)$, mediante la relación

$$\nabla X_k = \vec{n} \delta(\vec{x} - \vec{x}^*, t) \quad (3.84)$$

donde \vec{x}^* es un punto sobre la interfase. Y además, otra importante relación es la ecuación topológica

$$\frac{\partial X_k}{\partial t} + \vec{w} \cdot \nabla X_k = 0 \quad (3.85)$$

donde el campo vectorial \vec{w} corresponde al movimiento de la interfase. La interpretación física de esta expresión, es que la derivada material de la función indicadora es nula (Drew y Passman, 1999).

Operador de promedio volumétrico

Con el propósito de introducir el concepto de operador de promedio volumétrico (Whitaker, 1998), considérese un elemento de volumen representativo general V definido por el dominio Ω , y asimismo confinado dentro de la superficie $\partial\Omega$ que es invariante con respecto al tiempo y al espacio. Y además, sea el dominio Ω un sistema multifase, donde la fase k esta definida por el dominio Ω_k y ocupa el volumen V_k . Entonces para cualquier propiedad ψ_k de la fase k , su valor promedio con respecto al dominio Ω , puede ser obtenido a través de la expresión

$$\langle \psi_k \rangle_{\Omega} \equiv \frac{1}{V} \int_{\Omega} \psi_k(\vec{x}, t) X_k(\vec{x}, t) dv \quad (3.86)$$

Y su valor promedio con respecto al dominio Ω_k , puede evaluarse mediante

$$\langle \psi_k \rangle_{\Omega_k} \equiv \frac{1}{V_k} \int_{\Omega} \psi_k(\vec{x}, t) X_k(\vec{x}, t) dv \quad (3.87)$$

Por otro lado, como la fracción volumétrica de la fase k , está dada por

$$\alpha_k \equiv \frac{1}{V} \int_{\Omega} X_k(\vec{x}, t) dv = \frac{V_k}{V} \quad (3.88)$$

entonces, ambos promedios están relacionados linealmente mediante

$$\langle \psi_k \rangle_{\Omega} = \alpha_k \langle \psi_k \rangle_{\Omega_k} \quad (3.89)$$

Regla de Gauss y Leibnitz

Para obtener cualquier derivación de una ecuación, aplicando el método del promedio volumétrico, es necesario introducir dos reglas de suma importancia: la regla de Gauss y la regla Leibnitz.

En primer instancia, la regla de Gauss (Drew y Passman, 1999) se expresa mediante

$$\frac{1}{V} \int_{\Omega} \nabla \psi_k X_k dv = \nabla \left[\frac{1}{V} \int_{\Omega} \psi_k X_k dv \right] - \frac{1}{V} \int_{\Omega} \psi_k \nabla X_k dv \quad (3.90)$$

Al introducir la ecuación (3.84), se obtiene

$$\langle \nabla \psi_k \rangle_\Omega = \nabla \langle \psi_k \rangle_\Omega - \frac{1}{V} \int_{S_i \cap \Omega} \psi_k \vec{n} ds \quad (3.91)$$

donde $S_i \cap \Omega$ denota la parte de la interfase que está dentro del volumen promediado en el dominio Ω , y el vector \vec{n} corresponde al vector normal unitario de la interfase.

De manera similar a la ecuación anterior, es posible obtener el promedio volumétrico que involucra a la derivada temporal, lo cual resulta en la regla de Leibnitz (Drew y Passman, 1999)

$$\frac{1}{V} \int_\Omega \frac{\partial \psi_k}{\partial t} X_k dv = \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{V} \int_\Omega \psi_k X_k dv \right] - \frac{1}{V} \int_\Omega \psi_k \frac{\partial X_k}{\partial t} dv \quad (3.92)$$

utilizando la ecuación topológica (3.85), se consigue

$$\left\langle \frac{\partial \psi_k}{\partial t} \right\rangle_\Omega = \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_k \rangle_\Omega + \frac{1}{V} \int_{S_i \cap \Omega} \psi_k \vec{u} \cdot \vec{n} ds \quad (3.93)$$

Ecuaciones de movimiento promediadas volumétricamente

Considerando un sistema isotérmico compuesto por dos fluidos que se comportan de manera incompresible, y por tanto se asumen constantes las densidades locales de cada fase. Las ecuaciones de conservación local para la masa y el *momentum* dentro del dominio $\Omega_k(t)$ son

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_k \vec{u}_k = 0 \quad (3.94)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_k \vec{u}_k) + \nabla \cdot \rho_k \vec{u}_k \vec{u}_k = \rho_k \vec{\phi}_k + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_k \quad (3.95)$$

respectivamente, donde $k \in \{1, 2\}$.

Multiplicando cada una de las ecuaciones gobernantes de flujo, por la función indicadora de fase, y desarrollando el promedio volumétrico sobre un elemento de volumen, se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_k \rho_k) + \nabla \cdot \alpha_k \rho_k \langle \vec{u}_k \rangle_{\Omega_k} = \Gamma_k \quad (3.96)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_k \rho_k \langle \vec{u}_k \rangle_{\Omega_k}) + \nabla \cdot \alpha_k \rho_k \langle \vec{u}_k \vec{u}_k \rangle_{\Omega_k} = \alpha_k \rho_k \langle \vec{\phi}_k \rangle_{\Omega_k} + \nabla \cdot \alpha_k \langle \boldsymbol{\sigma}_k \rangle_{\Omega_k} + \vec{\Theta}_k \quad (3.97)$$

donde el origen de los términos Γ_k y $\vec{\Theta}_k$ es debido a las reglas de Gauss y Leibnitz.

El término Γ_k , representa la transferencia de masa a través de la interfase debido al cambio de fase

$$\Gamma_k \equiv \frac{1}{V} \int_{S_i \cap \Omega} \rho_k (\vec{u}_k - \vec{w}) \cdot \vec{n} \, ds \quad (3.98)$$

Y de acuerdo a la ley de la conservación de masa, los términos Γ_1 y Γ_2 , satisfacen la condición de salto

$$\Gamma_1 + \Gamma_2 = 0 \quad (3.99)$$

El término $\vec{\Theta}_k$ representa la transferencia de *momentum* a través de la interfase

$$\vec{\Theta}_k \equiv -\frac{1}{V} \int_{S_i \cap \Omega} \vec{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_k \, ds \quad (3.100)$$

y los términos $\vec{\Theta}_1$ y $\vec{\Theta}_2$, satisfacen la condición de salto

$$\vec{\Theta}_1 + \vec{\Theta}_2 = \frac{1}{V} \int_{S_i \cap V} (2H\sigma\vec{n} + \nabla_s \sigma) \, dS \quad (3.101)$$

donde σ es el coeficiente de tensión superficial, y H es la curvatura local de la interfase.

Es importante mencionar, que las ecuaciones promediadas respecto al volumen, son válidas dentro del dominio entero Ω . Además, el movimiento de la interfase o turbulencia, podría introducir fluctuaciones de velocidad dentro de cada fase. Si se considera, que \vec{u}_k^f representa el campo vectorial de fluctuación de velocidad para la fase k , entonces

$$\vec{u}_k^f \equiv \vec{u}_k - \langle \vec{u}_k \rangle_{\Omega_k} \quad (3.102)$$

Debido a la no linealidad del término convectivo, la descomposición de dicho término da origen al tensor esfuerzo de sub-malla $\boldsymbol{\tau}_k^{sgs}$, esto es

$$\alpha_k \rho_k \langle \vec{u}_k \vec{u}_k \rangle_{\Omega_k} = \alpha_k \rho_k \langle \vec{u}_k \rangle_{\Omega_k} \langle \vec{u}_k \rangle_{\Omega_k} - \alpha_k \boldsymbol{\tau}_k^{sgs} \quad (3.103)$$

el cual corresponde a la suma de tres tensores esfuerzo

$$-\boldsymbol{\tau}_k^{sgs} \equiv \mathbf{L}_k + \mathbf{C}_k + \mathbf{R}_k \quad (3.104)$$

Tensor esfuerzo de Leonard:

$$\mathbf{L}_k \equiv \rho_k [\langle \langle \vec{u}_k \rangle_{\Omega_k} \langle \vec{u}_k \rangle_{\Omega_k} \rangle_{\Omega_k} - \langle \vec{u}_k \rangle_{\Omega_k} \langle \vec{u}_k \rangle_{\Omega_k}] \quad (3.105)$$

Tensor esfuerzo de cruce:

$$\mathbf{C}_k \equiv \rho_k \left[\langle \langle \vec{u}_k \rangle_{\Omega_k} \langle \vec{u}_k^f \rangle_{\Omega_k} \rangle_{\Omega_k} - \langle \langle \vec{u}_k^f \rangle_{\Omega_k} \langle \vec{u}_k \rangle_{\Omega_k} \rangle_{\Omega_k} \right] \quad (3.106)$$

Tensor esfuerzo de Reynolds de escala sub-malla:

$$\mathbf{R}_k \equiv \rho_k \langle \vec{u}_k^f \vec{u}_k^f \rangle_{\Omega_k} \quad (3.107)$$

Es importante aclarar, que en el caso de un promedio temporal, el tensor esfuerzo de escala sub-malla, es reemplazado por el tensor esfuerzo de turbulencia.

Adicional a todo lo anterior, sí se aplica al teorema del promedio volumétrico a la expresión (3.83), se tiene la siguiente restricción sobre las fracciones volumétricas:

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1 \quad (3.108)$$

a la cual se deben sujetar las ecuaciones de movimiento promediadas.

Cerradura del sistema

Con respecto a la cerradura del sistema de ecuaciones gobernantes del movimiento de un fluido multifásico, existen una serie de consideraciones aplicables. Entre ellas, destaca la asunción de que ambas fases comparten el mismo campo escalar de presión. Asimismo, se asumen despreciables los efectos del tensor esfuerzo de sub-malla. Y adicional a todo esto, se define la funcionalidad para el campo vectorial de velocidad relativa, $\vec{u}_r = \langle \vec{u}_2 \rangle_{\Omega_2} - \langle \vec{u}_1 \rangle_{\Omega_1}$, existente entre ambas fases:

Modelo Homogéneo. Es el modelo más simple de todos, debido a que considera que los campos de velocidad en cada fase son idénticos. Desde un punto de vista computacional, un campo vectorial de velocidades compartido para ambas fases puede ser aceptablemente razonable bajo dos circunstancias completamente distintas: (1) un flujo finamente

disperso; (2) un flujo cuyas fases se encuentran prácticamente separadas.

Modelo de Difusión (Sokolichin y Eigenberger, 1999). En este modelo, el campo vectorial de velocidad relativa es expresado a través de una ley constitutiva que involucra algunas de las propiedades físicas del fluido.

$$\vec{u}_r = \vec{\mathcal{D}}(\rho_1, \rho_2, \mu_1, \mu_2, \sigma, \langle \vec{u}_1 \rangle_{\Omega_1}, \langle \vec{u}_2 \rangle_{\Omega_2}, \alpha_1, \dots) \quad (3.109)$$

Y una de las ecuaciones requeridas para constituir el sistema de ecuaciones gobernantes del flujo, corresponde a la ecuación que satisface a la ley de conservación de la masa de la fase dispersa, misma que es expresada como

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2 \rho_2) + \nabla \cdot \alpha_2 \rho_2 \vec{u}_m = -\nabla \cdot \alpha_1 \alpha_2 \frac{\rho_1 \rho_2}{\rho_m} \vec{u}_r \quad (3.110)$$

donde el campo escalar ρ_m corresponde a la densidad local de la mezcla; y el campo vectorial \vec{u}_m a la velocidad del centro de masa de la mezclas. Y están definidas como

$$\rho_m \equiv \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2 \quad (3.111)$$

$$\vec{u}_m \equiv \frac{\alpha_1 \rho_1 \langle \vec{u}_1 \rangle_{\Omega_1} + \alpha_2 \rho_2 \langle \vec{u}_2 \rangle_{\Omega_2}}{\alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2} \quad (3.112)$$

Por ello, este modelo toma el nombre de una analogía simple: se puede observar que en el lado derecho de la expresión (3.110), el campo vectorial de velocidad relativa funge un papel similar al del coeficiente de difusión en un sistema de dos componentes de una fase.

Modelo Flux de Arrastre (Zuber y Findlay, 1965). Para este modelo se define un campo vectorial denominado velocidad de arrastre de la fase dispersa, el cual corresponde a la velocidad relativa entre la fase dispersa y la velocidad de la mezcla con respecto al centro de volumen

$$\vec{u}_2^{(d)} \equiv \langle \vec{u}_2 \rangle_{\Omega_2} - (\alpha_1 \langle \vec{u}_1 \rangle_{\Omega_1} + \alpha_2 \langle \vec{u}_2 \rangle_{\Omega_2}) \quad (3.113)$$

Y es a partir de esta expresión que se puede evaluar el campo vectorial de velocidad relativa entre las fases, el cual corresponde a

$$\vec{u}_2^{(d)} = -(1 - \alpha_2) \vec{u}_r \quad (3.114)$$

Al igual que en el modelo de difusión, es necesario introducir una ley constitutiva; pero con la única diferencia, que esta se debe utilizar para definir a la velocidad de arrastre de la fase dispersa.

3.2.2. Formulación Lagrangiana-Euleriana

Este enfoque es adecuado solamente para sistemas multifásicos dispersos. En la fase continua, las variables de flujo son función del espacio y tiempo, y por tanto representadas como variables de campo. En cambio, la fase dispersa, es representada por un conjunto de partículas donde la posición y velocidad de cada partícula se consideran función solamente del tiempo.

Las ecuaciones de conservación de masa y *momentum* son resueltas para la fase continua, similar al enfoque euleriano-euleriano. Para la fase dispersa, en contraste, la posición y velocidad de cada una de las partículas es obtenida a través de la Segunda Ley de Newton. Ello requiere de la interpolación de la velocidad de la fase continua desde la malla euleriana a la posición local de la partícula.

Para flujos que involucran (comparativamente) un pequeño número de partículas dispersas es posible resolver un conjunto de ecuaciones lagrangiana para cada elemento. Sin embargo, sí el número de partículas es grande, un tratamiento estadístico resulta lo mas conveniente. Así, la población total es representada por un número finito de parcelas (muestras) de cada uno de los grupos de partículas que presentan las mismas propiedades.

Acoplamiento entre fases

El método Lagrangiano-Euleriano puede ser clasificado con respecto a la clase de acoplamiento entre las fases. El mas simple de estos acoplamientos es el acoplamiento en un solo sentido, dado que se asume que la carga másica de la fase dispersa es bastante pequeña, y por tanto cualquier efecto sobre la fase continua es despreciable. Así, solamente la velocidad local de la fase continua tiene un impacto directo sobre el movimiento del

sistema de partículas que integran a la fase dispersa. En cuanto al acoplamiento de dos sentidos, el efecto del movimiento de la fase dispersa sobre la fase continua debe ser tomado en cuenta. Adicionalmente, en la literatura se maneja el acoplamiento de 4 sentidos, en el cual además se toman en cuenta los efectos de las colisiones de partícula-partícula debido a la alta fracción de vacío de la fase dispersa y a la modificación turbulenta de las partículas (Crowe y col., 1998).

Ecuación de movimiento de una partícula

Para describir el movimiento traslacional de partícula, es necesario resolver la parte Lagrangiana del método Lagrangiano-Euleriano. Denótese al vector posición para el centro de masa de la partícula k , como $\vec{x}_k \equiv \vec{x}_k(t)$. Así la velocidad de traslación del centro de masa de la partícula k puede ser expresada mediante

$$\vec{u}_k(t) \equiv \frac{d\vec{x}_k}{dt} \quad (3.115)$$

Considerando que m_k corresponde a la partícula k , y asimismo está expuesta a las fuerzas de volumen \vec{f}_k^v y superficie \vec{f}_k^s , respectivamente. De acuerdo a la Segunda Ley de Newton es posible expresar que

$$\frac{d}{dt}(m_k \vec{u}_k) = \int_{V_m} d\vec{f}_k^v + \int_{S_m} d\vec{f}_k^s \quad (3.116)$$

Con respecto a las fuerzas de volumen y superficie, existe un marco teórico basado sobre el análisis de una partícula esférica sumergida en fluido en movimiento, que ha permitido conocer la naturaleza de estas fuerzas; y en adición con las observaciones experimentales, estas descripciones se ha complementado en el siguiente conjunto de expresiones generales:

1. Fuerza de flotación: debida a la influencia que ejerce la diferencia de densidades entre la fase dispersa y y la fase continua, bajo un marco de referencia acelerado. Típicamente, originado por efecto de la gravedad

$$F_\alpha^D = -F_\beta^D = (\rho_\beta - \rho_\alpha)\vec{a} \quad (3.117)$$

2. Fuerza de arrastre (Brennen, 1995): originada por el flujo de la fase continua que tiende a arrastrar en su misma dirección a la fase dispersa

$$F_{\alpha}^D = -F_{\beta}^D = \frac{3}{8} \frac{C_D}{r_{\beta}} w_{\beta} \rho_{\alpha} |\vec{u}_{\beta} - \vec{u}_{\alpha}| (\vec{u}_{\beta} - \vec{u}_{\alpha}) \quad (3.118)$$

3. Fuerza de masa añadida o virtual (Laurien y Niemann, 2004): representa a la fuerza requerida para acelerar el fluido circundante que se encuentra en reposo con respecto a la partícula

$$F_{\alpha}^V = -F_{\beta}^V = C_V w_{\beta} \rho_{\alpha} \frac{\partial}{\partial t} (\vec{u}_{\beta} - \vec{u}_{\alpha}) \quad (3.119)$$

4. Fuerza de basset (Thomas, 1992): debida a una capa frontera rezagada que se desarrolla por el cambio de velocidad

$$F_{\alpha}^B = -F_{\beta}^B = \frac{9w_{\beta}}{2} \sqrt{\frac{\rho_{\alpha}\mu_{\alpha}}{\pi r_{\beta}^2}} \int_{t_0}^t \frac{d}{d\tau} (\vec{u}_{\beta} - \vec{u}_{\alpha}) \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}} \quad (3.120)$$

5. Fuerza Magnus (Crowe y col., 2000): ocasionada por las fuerzas transversales que actúan sobre un cuerpo en rotación

$$F_{\alpha}^L = -F_{\beta}^L = C_L w_{\beta} \rho_{\alpha} (\vec{u}_{\beta} - \vec{u}_{\alpha}) \times \nabla \times \vec{u}_{\alpha} \quad (3.121)$$

6. Fuerza por dispersion turbulenta (Yeoh y Tu, 2004): se introduce para contabilizar las fuerzas de fluctuación, y por tanto presenta una funcionalidad dependiente de la energía cinética turbulenta de la fase continua k_{α}

$$F_{\alpha}^{TD} = -F_{\beta}^{TD} = C_{TD} \rho_{\alpha} k_{\alpha} \nabla w_{\beta} \quad (3.122)$$

Donde el subíndice α denota la fase continua, y el subíndice β denota la fase dispersa; el campo escalar w denota la fracción volumétrica; el vector \vec{u} denota el campo vectorial de velocidad; el campo escalar ρ corresponde a la densidad; y la cantidad r_{β} expresa el radio de la partícula.

4.1. Introducción

Los principios físicos fundamentales que rigen la mecánica del movimiento de un fluido se pueden expresar mediante un sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. Se ha dedicado mucho esfuerzo a la búsqueda de una solución analítica de esas ecuaciones, pero debido a que este sistema de ecuaciones es no lineal, solo ha sido posible encontrar soluciones analíticas para casos sencillos. La Dinámica de Fluidos Computacional (Computational Fluid Dynamics, CFD) se encarga de aproximar estas ecuaciones mediante relaciones más sencillas de carácter algebraico, que puedan resolverse numéricamente empleando operaciones elementales: suma, resta, multiplicación y división. Esta técnica, muy empleada en otras ramas del conocimiento, se denomina discretización. Debido a la forma en que se realizará esta aproximación, la solución resultará ser un conjunto de valores correspondientes a las magnitudes físicas del flujo localizadas en un número discreto de puntos en el campo del fluido. El volumen de datos que se requiere manejar de forma repetitiva para hallar una solución numérica de un problema de mecánica de fluidos es generalmente tan alto, que el desarrollo de la CFD en las tres últimas décadas ha seguido al de los computadores digitales. Incluso hoy en día, la mayoría de los problemas de interés industrial no pueden ser abordados satisfactoriamente.

4.1.1. Notas históricas

Una de las primeras aportaciones a la Dinámica de Fluidos desde un enfoque computacional es la debida al trabajo de Kopal (1947), que compiló tablas masivas de datos

referentes a un flujo supersónico alrededor de conos afilados, resolviendo numéricamente las ecuaciones que rigen el problema. Los cálculos fueron realizados en un ordenador digital primitivo del Instituto Tecnológico de Massachusetts. Sin embargo, la primera generación de soluciones numéricas aplicando mecánica de fluidos computacional data de los años 50's y principios de los 60's, ante la necesidad de calcular flujos hipersónicos alrededor de vehículos de reentrada. Dichos flujos están caracterizados por fenómenos físicos muy complejos, como son las reacciones químicas, que combinados con las ecuaciones de la mecánica de fluidos hacen imposible obtener soluciones analíticas incluso para las geometrías más sencillas (Eggers y Savin, 1951; Newman, 1964) .

La segunda generación de soluciones de la CFD, que hoy en día sigue siendo representativa de la disciplina, proviene de la resolución de problemas de mecánica de fluidos que son complejos por sí solos, sin necesidad de añadir ecuaciones adicionales. La única posibilidad para resolver estos problemas es el uso de computadoras. Algunos ejemplos de estos problemas son flujos con zonas subsónicas y supersónicas o flujos viscosos en los que se requiere resolver las ecuaciones de Navier-Stokes para obtener soluciones satisfactorias. Éste es el caso de la turbulencia. Esta segunda generación de soluciones surgió en los años 70's, al amparo del enorme crecimiento que experimentaron las prestaciones de los ordenadores (Jameson, 1974; Murman y Cole, 1974).

4.1.2. Situación actual

El papel de la CFD en las ciencias y en la ingeniería se ha hecho tan importante hoy en día, que se puede considerar una tercera rama de la Mecánica de Fluidos, junto con las ramas teórica y experimental, complementando y alimentándose de ambas. La CFD cubre un amplio espectro de problemas, que se extiende desde la generación de métodos de diseño en ingeniería hasta el cálculo detallado de soluciones de las ecuaciones de Navier-Stokes, complementando los resultados experimentales. En un extremo, existen paquetes de diseño para sistemas de tuberías que requieren tiempos de cálculo del orden de segundos en un ordenador personal. En el otro, existen códigos que emplean cientos de horas de cálculo en los superordenadores.

Los modelos teóricos que proporcionan soluciones analíticas en forma cerrada suelen obtenerse tras simplificar las ecuaciones de Navier-Stokes, después de eliminar los términos menos importantes en cada caso particular. De esta forma, las soluciones teóricas identifican los parámetros fundamentales que rigen cada problema, y proporcionan información de la influencia de la variación de dichos parámetros sobre el fenómeno físico que representan. Sin embargo, el campo de aplicación de estos modelos teóricos está restringido a problemas muy sencillos, de escaso interés práctico. La CFD permite extender el estudio detallado a problemas más complejos y de mayor interés práctico.

Sin embargo, el aspecto más importante de la aplicación de la CFD a la industria ha sido su impacto sobre los ensayos en túnel y en banco, debido a la rápida reducción del costo de computación promovida por el gran incremento de las prestaciones de los ordenadores. Hoy en día resulta más barato calcular numéricamente las propiedades de una aeronave que medirlas en un túnel aerodinámico. De hecho, en la industria aeronáutica el diseño preliminar se basa principalmente en cálculos realizados por ordenador, empleándose los ensayos en túnel para afinar detalles en las fases finales de diseño. Esto era impensable hace años, cuando la totalidad de la información empleada en el diseño provenía de ensayos en túnel.

Las ecuaciones de la dinámica de fluidos adimensionalizadas dependen de un gran número de parámetros adimensionales, como son el número de Reynolds, el número de Strouhal, el número de Prandtl, el número de Mach, etc. Los ensayos en túnel aprovechan aquellos casos en los que el flujo depende de un número reducido de parámetros (uno o dos), realizándose ensayos en geometrías semejantes a escala, seleccionando adecuadamente las propiedades del fluido para que conserven los parámetros adimensionales de que depende el flujo. De esta manera, en base a la semejanza dimensional, los resultados obtenidos en el ensayo serán aplicables al caso real que se quiere estudiar una vez escalados convenientemente. El problema de estos ensayos experimentales es que la mayoría de los flujos requieren varios parámetros adimensionales para su descripción, por lo que resulta imposible preparar experimentos que verifiquen los principios de la semejanza

dimensional en estos casos. En particular, esto es lo que ocurre con los flujos a altos números de Reynolds.

Otro inconveniente adicional de los ensayos consiste en la dificultad para realizar medidas experimentales, bien porque el instrumento de medida perturba el campo fluido, porque no tenga la precisión adecuada, porque el punto en el que se quiera medir sea inaccesible o por la dificultad de medir una determinada variable del flujo con la tecnología actual. En principio todas estas dificultades no existen en los experimentos numéricos.

Es muy importante señalar que en el ordenador se pueden llevar a cabo experimentos irrealizables en el laboratorio. Por ejemplo, basta pensar en la dificultad técnica de imponer una condición de contorno adiabática en un ensayo en laboratorio, frente a simular esa misma condición en un ordenador. Incluso se pueden implementar condiciones de contorno exóticas, aplicar filtros o representar las contribuciones de los distintos términos en las ecuaciones, a fin de identificar los mecanismos físicos que gobiernan un determinado problema. Este último punto es sin duda el valor más importante de la CFD en el campo de la investigación fundamental.

Además, mientras que las simulaciones numéricas permiten obtener soluciones detalladas del campo de fluido, en los experimentos estas soluciones son difíciles de obtener, calculándose parámetros globales del flujo como por ejemplo los coeficientes de sustentación, resistencia, convección, etc.

Las razones anteriores, que justifican la incorporación de la CFD como una nueva rama de la Mecánica de Fluidos, están condicionadas a la capacidad de resolver de forma precisa las ecuaciones de Navier-Stokes, lo que es prácticamente imposible con los recursos computacionales disponibles en la actualidad para la mayor parte de los flujos de interés industrial.

4.2. Simulación Numérica

4.2.1. Beneficios

En la actualidad, la simulación numérica asistida por computadores (simulación computacional) es una herramienta muy importante para resolver problemas complejos de manera práctica en la ciencia y la ingeniería. La simulación numérica traduce los aspectos más relevantes de un problema físico, a una descripción matemática de forma discreta; recrea y resuelve el problema mediante el uso de un computador; y revela virtualmente el fenómeno físico de acuerdo a los intereses del analista. Más allá de adoptar la teoría tradicional, desarrollada sobre una estructura de asunciones y aproximaciones, los métodos numéricos modernos atacan el problema original en todo su detalle, sin aplicar demasiadas acotaciones a la descripción matemática concebida del fenómeno físico, solo limitada por el poder de cálculo del computador.

La simulación numérica provee una herramienta alternativa de investigación científica, frecuentemente más útil que los métodos experimentales tradicionales en términos de que brinda una información completa que quizás no podría ser medida u observada directamente.

La simulación computacional juega un papel muy importante en la validación de teorías, comprensión de resultados experimentales, y asiste en la interpretación o incluso descubrimientos de nuevos fenómenos. También actúa como un puente entre los modelos experimentales y las predicciones teóricas.

4.2.2. Procedimiento general de resolución

Las simulaciones numéricas siguen un procedimiento similar que sirve a un propósito práctico. En principio, existen algunos pasos necesarios dentro del procedimiento. Después de que un fenómeno físico es observado, es necesario establecer un modelo matemático bajo algunas posibles asunciones y simplificaciones. Este modelo matemático es general-

mente expresado en la forma de ecuaciones gobernantes con sus apropiadas condiciones iniciales y de frontera. Las ecuaciones gobernantes pueden ser un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias, ecuaciones diferenciales parciales, ecuaciones integrodiferenciales, o ecuaciones de algunas otras formas posibles de las leyes físicas. Las condiciones frontera e iniciales son necesarias para la determinación de las variables de campo en el espacio-tiempo.

Para resolver numéricamente las ecuaciones gobernantes, la geometría involucrada del dominio del problema debe ser dividido en componentes discretos. Las técnicas de discretización de dominios pueden ser diferentes para los distintos métodos numéricos. La discretización del dominio, usualmente se refiere a representar al dominio de un problema continuo, con un número finito de elementos, lo cual constituye el marco computacional para las aproximaciones numéricas. El marco computacional es tradicionalmente un conjunto de mallas o rejillas, las cuales consisten de una retícula de puntos, o nodos de malla que aproximan a la geometría del dominio del problema. Los nodos de malla son las posiciones espaciales donde las variables de campo son evaluadas, y sus relaciones están definidas por alguna clase de conectividad nodal. Los nodos de malla están conectados para formar una malla de acuerdo a una conectividad predefinida. La precisión de la aproximación numérica está estrechamente relacionada al tamaño de las celdas de la malla y al patrón de la malla.

La discretización numérica provee de los recursos necesarios para transformar las expresiones integrodiferenciales de las ecuaciones gobernantes de una forma continua a una representación discreta. Asimismo, está estrechamente relacionada con la técnica de discretización de dominio aplicada. La discretización numérica se basa en una teoría de aproximación de funciones. Después de la discretización de dominio y la discretización numérica, las ecuaciones físicas originales son transformadas a un conjunto de ecuaciones algebraicas o ecuaciones diferenciales ordinarias, que pueden ser resueltas utilizando las rutinas numéricas existentes. Incluso, dentro del proceso que permite establecer al conjunto de ecuaciones algebraicas o diferenciales ordinarias, también es posible introducir

alguna clase de formulación fuerte o débil.

La implementación de una simulación numérica involucra traducir la descomposición del dominio y los algoritmos numéricos a un código computacional en algún lenguaje de programación. En la codificación computacional, existen dos consideraciones muy importantes a tomar en cuenta: la precisión y la eficiencia (velocidad de cálculo y almacenamiento de datos). Otras consideraciones a tomar en cuenta, corresponden a su robusticidad y amigabilidad del código. Antes de desarrollar una simulación numérica, el código debe ser verificado a través de la reproducción de un conjunto de datos experimentales, soluciones teóricas, o resultados exactos de otros métodos establecidos de problemas patrones.

Una típica simulación numérica, inevitablemente involucra los siguientes factores:

1. Ecuaciones gobernantes;
2. Apropriadadas condiciones frontera e iniciales;
3. Técnicas de discretización del dominio;
4. Técnicas de discretización numérica;
5. Técnicas numéricas para la resolución del conjunto resultante de ecuaciones algebraicas y/o diferenciales parciales;

Con respecto a las técnicas numéricas que requieren de una rejilla o malla para la descomposición del dominio, que da el soporte a la solución numérica con un orden de convergencia algebraico, existen tres métodos de relevante importancia: el método del elemento finito, el método de diferencias finitas, y el método de volúmenes finitos. Estos métodos conforman a la familia de métodos basados en mallas.

Los investigadores han constatado que la generación de malla tiene un alto costo computacional. Esto ha promovido la búsqueda de nuevos métodos numéricos donde se permita liberarse de las mallas o rejillas. Y han encontrado que el empleo de un conjunto

de partículas discretas para representar el dominio continuo, resulta ser una alternativa bastante aceptable. A esta nueva clase de formulación, se le denomina método de partículas libre de malla, y tiene como sus principales representantes a: la hidrodinámica de partículas suavizadas, y mínimos cuadrados móviles.

4.3. Métodos Basados en Mallas

Existen dos marcos fundamentales para describir las ecuaciones gobernantes de un fenómeno físico: la descripción Euleriana y la descripción Lagrangiana. La descripción Euleriana es una descripción de carácter espacial, y es típicamente representada por el Método de Diferencias Finitas (Finite Difference Method, FDM) (Hirsch, 1988; Anderson, 1995; Wilkins, 1999). La descripción Lagrangiana es una descripción de tipo material, y es típicamente representada por el Método del Elemento Finito (Finite Element Method, FEM) (Zienkiewicz y Taylor, 2000; Liu y Quek, 2003). De este modo, las descripciones Euleriana y Lagrangiana requieren de dos clases dispares de malla para el dominio discretizado: la malla Euleriana y la malla Lagrangiana.

4.3.1. Mallas Lagrangianas

En los métodos basados en mallas Lagrangianas, tal como el reconocido y ampliamente utilizado FEM, la malla requiere ser fijada o ligada sobre un elemento material dentro de todo el proceso de computo, y así la malla se mueve junto con los elementos materiales.

Puesto que cada nodo de la malla sigue la ruta del elemento material localizado en el mismo punto de la malla, el movimiento relativo de los nodos conectados, resulta en la expansión, compresión y deformación del elemento o celda a la que pertenecen. La masa, la energía y el *momentum* son transportados con el movimiento de las celdas. Debido a que la masa dentro de cada celda permanece fija, no existe un flux a través de la frontera de la celda. Así, cuando el material se deforma, la malla se deforma de acuerdo a él.

Los métodos basados en mallas Lagrangianas, ofrecen varias ventajas:

1. Puesto que no existe término convectivo dentro de las ecuaciones diferenciales parciales relacionadas, el código es conceptualmente mas simple y su tiempo de ejecución debe ser mas rápido.
2. Puesto que la malla es fija con respecto al movimiento del cuerpo material bajo estudio, la historia temporal completa de todas las variables de campo en un punto material, puede ser fácilmente registrada y obtenida.
3. Dentro del computo Lagrangiano, alguno nodos de la malla pueden ser localizados a lo largo de las fronteras y las interfases materiales. De esta manera, las condiciones frontera en superficies libres, la fronteras móviles, y las interfases materiales, pueden ser automáticamente impuestas, registradas y determinadas simplemente por el movimiento de esos nodos de la malla.
4. Geometrías irregulares o complejas pueden ser convenientemente tratadas mediante el uso de mallas irregulares.
5. Puesto que la malla es solamente requerida dentro del dominio del problema, no es necesaria ninguna malla adicional mas allá del dominio del problema. En este sentido, los métodos basados en mallas Lagrangianas son computacionalmente mas eficientes.

Debido a estas ventajas, los métodos Lagrangianos son muy populares y exitosos en la resolución de problemas de mecánica de sólidos computacional (Computational Solid Mechanics, CSM), donde la deformación no es tan excesiva como en el movimiento de un fluido.

Sin embargo, los métodos basados en mallas Lagrangianas son complicados para aplicarlos en casos de mallas extremadamente distorsionadas. Cuando la malla es excesivamente distorsionada, la exactitud de la formulación, y por tanto, la solución, podrían ser severamente afectadas. En adición a todo esto, el paso de tiempo, el cual es controlado por el tamaño del elemento mas pequeño, podría ser demasiado pequeño para ser eficiente

durante el tiempo de simulación, o incluso podría conducir a la ruptura del computo.

Una posible opción para realzar el computo Lagrangiano, consiste en reubicar la malla sobre el dominio del problema, lo cual involucra superponer una malla nueva no distorsionada sobre la malla vieja distorsionada. Las propiedades físicas de las celdas de la malla nueva, son aproximadas desde las celdas de la malla vieja a través del transporte de masa, energía y *momentum* dentro del marco de una descripción Euleriana. Los procedimientos de rezonificación en cómputos Lagrangianos pueden resultar tediosos y consumir mucho tiempo. Además, con cada rezonificación, se pierde la historia del movimiento de los elementos materiales. En adición a esto, los códigos Lagrangianos bajo frecuente remallado se vuelve semejante, en un sentido general, a un código Euleriano. Así, aunque existan muy buenas ventajas en los métodos basados en mallas Lagrangianas, las desventajas pueden resultar en dificultades numéricas cuando se simulan eventos de deformación extremadamente grandes (Benson, 1992).

4.3.2. Mallas Eulerianas

Contrario a la malla Lagrangiana, la malla Euleriana se encuentra fija en el espacio, dentro de la cual el elemento material simulado, se localiza y se mueve a través de las celdas fijas de la malla. De esta manera, todos los nodos y celdas de la malla permanecen fijos espacialmente con respecto al dominio del problema, y no cambian con el tiempo, mientras los elementos materiales fluyen a través de la malla. Los fluxes de masa, energía y *momentum*, que cruzan las fronteras de las celdas de la malla, requieren ser simulados para computar las distribuciones de masa, energía y *momentum* dentro del dominio del problema. La forma y volumen de las celdas de la malla permanecen sin cambios durante todo el proceso completo de computo.

Puesto que la malla Euleriana se encuentra fija con respecto al espacio y tiempo, grandes deformaciones del cuerpo bajo estudio, no causan distorsión en la malla asociada, y por tanto, no provocan ninguna clase de problemas numéricos como sucedería en los métodos basados en malla Lagrangiana. Con esto, los métodos Eulerianos son dominantes

dentro de la disciplina de CFD, en la región donde el movimiento del fluido predomina. En principio, todos los problemas hidrodinámicos pueden ser abordados utilizando métodos Eulerianos multifásicos, para calcular la masa, energía y *momentum*, que fluyen a través de la frontera de cada una de las celdas de una malla Euleriana. Las primeras simulaciones de problemas que exhibían grandes deformaciones, tales como explosiones o impactos a alta velocidad, fueron desarrolladas utilizando alguna clase de los métodos Eulerianos (Benson, 1992). Sin embargo, existen muchas desventajas con los métodos Eulerianos:

1. Es muy difícil analizar la historia temporal de las variables de campo con respecto a un punto fijo en un cuerpo material bajo estudio, debido a que el movimiento de los elementos materiales no puede ser registrados utilizando una malla fija.
2. No es fácil tratar con geometrías irregulares o complejas de un cuerpo material mediante los métodos basados en malla Euleriana. Debido a que es necesario implementar procedimientos de generación de mallas, que conviertan la geometría irregular del dominio de un problema, a un dominio computacional regular.
3. La determinación de la posición de superficies libres, fronteras deformables, e interfases materiales móviles, es sumamente complicada.
4. Los métodos Eulerianos requieren de una malla sobre un dominio amplio, el cual debe considerar toda la región espacial donde posiblemente un elemento material puede fluir. El alto costo computacional que involucra esta clase de malla, obliga a que los investigadores tengan que usar mallas burdas.

4.3.3. Malla Lagrangiana-Euleriana

Las diferentes pero complementarias características de las descripciones Eulerianas y Lagrangianas, sugieren que podría ser computacionalmente benéfico, la combinación de estas dos descripciones; de forma tal, que se fortalezcan sus ventajas y se eviten sus desventajas. Esta idea ha conducido al desarrollo de dos métodos complejos que aplican tanto la descripción Euleriana como la descripción Lagrangiana: el método CEL

(Coupled Eulerian Lagrangian) (Noh, 1964); y el método ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian) (Hirt y col., 1974; Benson, 1992; Belytschko y col., 2000).

El método CEL emplea ambas formulaciones, Euleriana y Lagrangiana, en regiones separadas (o con alguna superposición) dentro del dominio del problema bajo estudio. Una de las prácticas más comunes, es discretizar la parte material sólida desde un marco de referencia Lagrangiano, y la parte material que se comporta como un fluido desde un marco de referencia Euleriano. La región Lagrangiana y la región Euleriana interactúan de forma continua, una con otra, a través de un módulo de acoplamiento, en el cual la información computacional es intercambiada por mapeo o por un tratamiento interfacial entre los dos conjuntos de mallas.

El método ALE está estrechamente relacionado a las técnicas de rezonificación para mallas Lagrangianas, y tiene como objetivo mover la malla independientemente de los elementos materiales, con lo cual la distorsión de la malla puede ser minimizada.

Ambas formulaciones han cautivado el interés de los investigadores, lo cual ha conducido a la obtención de soluciones más estables. Existen muchos códigos comerciales que han incorporado las formulaciones ALE y/o CEL para el análisis acoplado de fenómenos dinámicos con comportamiento de interacción sólido-fluido: MSC/Dytran (MSC/DYTRAN, 1997); DYNA2D y DYNA3D (Hallquist y Benson, 1986; Hallquist, 1988); LS-DYNA (Hallquist, 1998). Desafortunadamente, aún con las formulaciones CEL y ALE, una malla altamente distorsionada puede introducir severos errores en las simulaciones numéricas (Hirt y col., 1974; Benson, 1992; Belytschko y col., 2000).

4.3.4. Limitaciones de los métodos basados en mallas

Los métodos numéricos convencionales basados en mallas, tal como el FDM y el FEM, han sido aplicados ampliamente en varias áreas de la CFD y la CSM, y actualmente son los métodos dominantes en las simulaciones numéricas de la discretización de dominios y la discretización numérica. A pesar de sus grandes éxitos, los métodos numéricos ba-

sados en mallas sufren dificultades inherentes en muchos aspectos, las cuales limitan sus aplicaciones en una amplia gama de problemas.

En los métodos numéricos basados en mallas, la generación de mallas del dominio del problema, es un prerequisite para la simulación numérica. Para los métodos de malla Euleriana, como el FMD, construir una malla regular para una geometría irregular nunca ha sido una tarea sencilla, y usualmente requiere de adicionales transformaciones matemáticas complejas, que pueden ser aun mas costosas que la resolución del problema mismo. La determinación de la localización precisa de las inhomogeneidades, superficies libres, fronteras deformables e interfases móviles con respecto a un marco de referencia Euleriano es una tarea formidable. Los métodos Eulerianos no son muy adecuados para problemas donde se requieren monitorear propiedades materiales en volúmenes fijos, tal como los flujos de partículas. Para los métodos basados en malla Lagrangiana como el FEM, la generación de la malla es necesaria para los cuerpos que serán simulados, y usualmente ocupa una porción significativa del esfuerzo computacional. El tratamiento de grandes deformaciones es un problema importante en los métodos basados en malla Lagrangiana. Usualmente requiere de técnicas como es la rezoñificación. La rezoñificación de una malla, es tediosa y consume mucho tiempo de computo, y podría introducir posibles imprecisiones dentro de la solución.

Las dificultades y limitaciones de los métodos basados en mallas son especialmente evidentes cuando se simulan fenómenos hidrodinámicos tales como explosiones e impactos a altas velocidades. En ambos fenómenos existen características especiales, tales como grandes deformaciones, grandes inhomogeneidades, interfases materiales móviles, fronteras deformables, y superficies libres. Estas características especiales plantean un gran reto a las simulaciones numéricas utilizando métodos basados en mallas. Los problemas de impacto a alta velocidad involucran ondas de choque que se propagan a través de los cuerpos que colisionan, los cuales se comportan como fluidos. Analíticamente, las ecuaciones de movimiento y de estado para altas presiones, son los descriptores claves del comportamiento del material.

Los métodos numéricos basados en mallas, tampoco son adecuados para situaciones donde el interés principal del cuerpo material bajo estudio, es un conjunto de partículas físicas discretas en lugar de un continuo. Por tal motivo, la simulación de tales sistemas mediante el uso de mallas, no corresponde a una buena elección.

4.4. Métodos de Partículas Libres de Malla

Los Métodos de Partículas Libres de Malla (Meshfree Particle Methods, MPMs), por lo general se refieren a aquellos métodos que emplean un conjunto de un número finito de partículas discretas para representar el estado de un sistema y registrar su movimiento. Cada partícula puede ser directamente asociada con un objeto físico discreto, o ser generado para representar una parte de un dominio continuo. Para problemas de CFD, cada partícula posee un conjunto de variables de campo, tales como la masa, *momentum*, energía, posición, y otras variables relacionadas con el movimiento de un fluido. La evolución del sistema físico es determinada por la conservación de la masa, *momentum* y energía.

Aunque existen una diversidad de métodos que toman como punto de partida abordar un fenómeno físico como un sistema de partículas discretas, dos familias merecen una atención especial: (1) Hidrodinámica de Partículas Suavizadas; y (2) Mínimos Cuadrados Móviles.

4.4.1. Hidrodinámica de Partículas Suavizadas

La Hidrodinámica de Partículas Suavizadas (Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH) surgió en el contexto de simulaciones en Astrofísica a principios de los años 70 (Lucy, 1977; Monaghan, 1992). Pese a sus 30 años de existencia, no ha sido enteramente aceptada por la comunidad de física computacional a pesar de que los astrofísicos se refieren a ella como una técnica avanzada y sofisticada. Se trata básicamente de una discretización Lagrangiana de las ecuaciones de Navier-Stokes con ayuda de una función peso. El procedimiento transforma las ecuaciones diferenciales parciales a ecuaciones diferenciales ordinarias que

se pueden interpretar como ecuaciones de movimiento para un conjunto de partículas que interactúan con leyes de fuerza preescritas. Es decir, la técnica permite resolver ecuaciones diferenciales parciales con códigos de Dinámica Molecular (en realidad el método es aplicable a otras ecuaciones en derivadas parciales, no necesariamente hidrodinámicas). Se ha aplicado a una cantidad enorme de problemas en Astrofísica: estrellas binarias, colisiones de estrellas, colisión y fragmentación de nubes, movimiento cerca de agujeros negros, supernovas, magnetohidrodinámica, formación planetaria, problemas cosmológicos y formación de galaxias. Recientemente se ha aplicado al estudio de flujos térmicos en geometrías simples (Kum y Posch, 1995) y a flujos viscosos (Takeda y col., 1994; Sigalotti y col., 2003).

Detalles del modelo SPH

La SPH es una técnica de simulación Lagrangiana libre de malla en la que el fluido está representado por pseudo-partículas que interactúan entre ellas, moviéndose con el flujo y transportando en su movimiento toda la información computacional relacionada con el fluido. Las propiedades del fluido se interpolan entre las partículas. El método está basado en dos conceptos matemáticos que se presentan rápidamente en esta subsección: el interpolante integral y la aproximación de la suma de Monte-Carlo.

El interpolante integral (un filtro de convolución estándar) de cualquier función $f(\vec{r})$ se define como la siguiente integral extendida a todo el espacio

$$\langle f(\vec{r}) \rangle = \int_{\Omega} f(\vec{r}') w(\vec{r} - \vec{r}', h) d\vec{r}' \quad (4.1)$$

La función kernel o núcleo, $w(\vec{r} - \vec{r}', h)$, debe ser una función bastante picada entorno a cero, para que se aproxime a una función delta de Dirac a medida que $h \rightarrow 0$, donde la longitud de suavizado h representa la anchura efectiva del kernel y es equivalente a la anchura de la celda del mallado en los métodos de diferencias finitas. Algunos de los kernels más usados en la literatura son el exponencial, super-gaussiano, spline, la función de Lucy, la función de Monaghan y diversos polinomios. Uno de los primeros kernels que

se utilizó fue el gaussiano (Gingold y Monaghan, 1977)

$$w(\delta\vec{r}, h) = \frac{1}{\sqrt{\pi}h} \exp\left\{-\frac{\|\delta\vec{r}\|^2}{h^2}\right\} \quad (4.2)$$

Generalmente el kernel es esféricamente simétrico, con segunda derivada continua y soporte compacto, de tal manera que sólo contribuye a la integración el volumen dentro de una esfera de diámetro $2h$. Además el kernel debe cumplir la condición de normalización

$$\int_{\Omega} w(\vec{r}, h) d\vec{r} = 1 \quad (4.3)$$

y satisfacer el límite

$$\lim_{h \rightarrow 0} f(\vec{r}) = f(\vec{r}) \quad (4.4)$$

Si se utiliza la aproximación de la suma de Monte Carlo, que se sabe que converge a medida que el número de puntos N (o partículas en la nomenclatura SPH) tiende a infinito, y si los puntos de integración \vec{r}_k^{\prime} están distribuidos uniformemente, se tiene

$$\langle f(\vec{r}) \rangle = \sum_{k=1}^N \frac{m_k}{\rho_k} f(\vec{r}_k^{\prime}) w(\vec{r} - \vec{r}_k^{\prime}, h) \quad (4.5)$$

donde el factor m_k/ρ_k es el elemento de volumen asociado a la partícula k , es decir, la razón entre su masa y la densidad másica. Si se aplica la expresión (4.5) al campo de densidad másica se tiene

$$\langle \rho(\vec{x}) \rangle = \sum_{k=1}^N m_k f(\vec{r}_k^{\prime}) w(\vec{r} - \vec{r}_k^{\prime}, h) \quad (4.6)$$

Por lo tanto la densidad másica asociada a la partícula situada en \vec{r}_k^{\prime} es

$$\rho_i = \langle \rho(\vec{r}_i) \rangle = \sum_{k=1}^N m_k f(\vec{r}_k^{\prime}) w(\vec{r}_i - \vec{r}_k^{\prime}, h) \quad (4.7)$$

Analizando el sentido de esta expresión: cada partícula de masa m_k está suavizada en el espacio de acuerdo con la función núcleo, considerada como su distribución de densidad numérica espacial. La densidad en un punto del espacio se calcula sumando para dicho punto las contribuciones de todas las partículas del sistema (dentro del rango del kernel). Precisamente, el nombre de la técnica SPH proviene de esta interpretación.

Además, en SPH los gradientes se calculan por diferenciación de (4.5)

$$\langle \nabla f(\vec{r}) \rangle = \sum_{k=1}^N \frac{m_k}{\rho_k} f(\vec{r}_k) \nabla w(\vec{r} - \vec{r}_k, h) \quad (4.8)$$

Se ha considerado por simplicidad $\langle \nabla f(\vec{r}) \rangle = \nabla \langle f(\vec{r}) \rangle$ y despreciado los términos de superficie. Las ecuaciones (4.5) y (4.8) reúnen toda la información esencial de SPH. Los gradientes se calculan, por tanto, sin ayuda de una malla computacional auxiliar. En realidad, este método es aplicable a cualquier ecuación en derivadas parciales, pero ha sido muy utilizado para resolver problemas hidrodinámicos. El método de interpolación, aplicando (4.5) a los campos hidrodinámicos y a sus ecuaciones de evolución, convierte las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales en un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias en términos de partículas fluidas. El punto clave de SPH viene de sus propiedades Lagrangianas. Las partículas SPH automáticamente siguen al flujo y pueden mantener la resolución a masa constante fácilmente. Esto se obtiene usando longitudes de suavizamiento variables, $h(\vec{r})$, y manteniendo constante el número de vecinos de cada partícula en el radio h , (típicamente se requiere del orden de 30-70 vecinos en el rango de acción definido por el soporte del kernel), lo cual permite abarcar un amplio rango dinámico de densidad.

Problemas en SPH

Una dificultad característica del método SPH es la implementación de condiciones de contorno sólidas. Hernquist (1993) señaló ésta y otras dificultades que emergen en la SPH cuando se utilizan distancias de suavizamiento variables y de adaptabilidad temporal que conduce a errores y violaciones de las leyes de conservación del fluido. En sus propias palabras dice: Aunque la SPH es una herramienta muy útil para muchos problemas de interés astrofísico, claramente es necesaria una formulación rigurosa, que cumpla las propiedades de conservación. En principio, se sabe que para cualquier esquema de diferencias finitas se tiene una familia infinita de representaciones discretas que convergen a las ecuaciones que se desea simular. Mientras que converjan hasta cierto orden, se es libre para elegir la discretización que más convenga los propósitos deseados (Monaghan, 1992). Por lo tanto la aplicación del método descrito anteriormente sobre las ecuaciones del continuo no es

única a la hora de asignar valores de magnitudes hidrodinámicas a las partículas SPH.

4.4.2. Mínimos Cuadrados Móviles

El Método de los Mínimos Cuadrados Móviles (Moving Least Squares, MLS) (Lancaster y Salkauskas, 1986), tiene como objetivo obtener una interpolación similar a la que ofrece el Método SPH, con una alta exactitud aún en dominios acotados. Considérese un dominio Ω , acotado o no acotado. La idea básica del Método MSL es aproximar una función $u(\vec{x})$ para un punto dado \vec{x} , a través de un ajuste de mínimos cuadrados polinomiales de la función $u(\vec{x})$ en la vecindad del punto \vec{x} . Esto es, para un punto fijo $\vec{x} \in \Omega$, y un punto \vec{z} cerca de \vec{x} , la función $u(\vec{z})$ puede ser aproximada mediante una expresión polinomial. Considérese a la función $u^*(\vec{x}, \vec{z})$, la función aproximada, entonces

$$u(\vec{z}) \approx \hat{u}(\vec{x}, \vec{z}) = \vec{p}(\vec{z}) \cdot \vec{\alpha}(\vec{x}) \quad (4.9)$$

donde los componentes del vector $\vec{p}(\vec{z})$, es una base polinomial completa; y el vector $\vec{\alpha}(\vec{x})$ corresponde a un conjunto de parámetros que minimiza al siguiente funcional de error ponderado

$$J[\vec{\alpha}(\vec{x})] = \int_{\vec{y} \in \Omega_x} w(\vec{x} - \vec{y}, h) [u(\vec{y}) - \vec{p}(\vec{y}) \cdot \vec{\alpha}(\vec{x})]^2 dv \quad (4.10)$$

donde $w(\vec{x} - \vec{y}, h)$ es un nucleo simétrico con soporte compacto Ω_x , y el parámetro h corresponde a una longitud de suavizado. La minimización del funcional $J[\vec{\alpha}(\vec{x})]$ conduce a

$$\int_{\vec{y} \in \Omega_x} \vec{p}(\vec{y}) w(\vec{x} - \vec{y}, h) u(\vec{y}) dv = \mathbf{M}(\vec{x}) \cdot \vec{\alpha}(\vec{x}) \quad (4.11)$$

donde la matriz de momentos $\mathbf{M}(\vec{x})$ (Matriz Gram) está dada por

$$\mathbf{M}(\vec{x}) = \int_{\vec{y} \in \Omega_x} \vec{p}(\vec{y}) w(\vec{x} - \vec{y}, h) \vec{p}(\vec{y}) dv \quad (4.12)$$

En las formulaciones libres de malla, se elige un conjunto de n partículas del dominio global Ω , de modo que la evaluación de las integrales en (4.11) y (4.12) puede realizarse usando las partículas del interior del dominio Ω_x como puntos de cuadratura (esto es, llevar a cabo una integración nodal), lo que conduce a

$$\vec{\alpha}(\vec{x}) = \mathbf{M}^{-1}(\vec{x}) \cdot \mathbf{P}_{\Omega_x} \cdot \mathbf{w}^*(\vec{x}) \cdot \vec{u}_{\Omega_x} \quad (4.13)$$

donde el vector \vec{u}_{Ω_x} contiene los parámetros nodales de las partículas de Ω_x , la versión discreta de

$$\mathbf{M} = \mathbf{P}_{\Omega_x} \cdot \mathbf{w}^*(\vec{x}) \cdot \mathbf{P}_{\Omega_x}^t \quad (4.14)$$

y las matrices \mathbf{P}_{Ω_x} y $\mathbf{w}^*(\vec{x})$ vienen dadas por

$$\mathbf{P}_{\Omega_x} = [\vec{p}(\vec{x}_1) \quad \vec{p}(\vec{x}_2) \quad \vec{p}(\vec{x}_3) \quad \dots \quad \vec{p}(\vec{x}_{n_x})] \quad (4.15)$$

$$\mathbf{w}^*(\vec{x}) = \text{diag} \{w(\vec{x} - \vec{x}_k) v_k\} \quad k = 1, 2, 3, \dots, n_x \quad (4.16)$$

En las expresiones anteriores, n_x denota el número total de partículas en el entorno de un punto \vec{x} ; y v_k y \vec{x}_k son, respectivamente, el volumen estadístico (empleado como peso de la cuadratura numérica) y las coordenadas asociadas a la partícula k . Obsérvese que los volúmenes estadísticos de las partículas del entorno están incluidas en la matriz $\mathbf{w}^*(\vec{x})$, obteniéndose la versión MLS del *Reproducing Kernel Particle Method* (Li y Liu, 1996). Por otra parte, puede emplearse $\mathbf{w}(\vec{x})$ en lugar de $\mathbf{w}^*(\vec{x})$,

$$\mathbf{w}(\vec{x}) = \text{diag} \{w(\vec{x} - \vec{x}_k)\} \quad k = 1, 2, 3, \dots, n_x \quad (4.17)$$

que se corresponde con la aproximación de mínimos cuadrados móviles clásica (en la integración nodal del funcional (4.10) se asocia el mismo peso de integración a todas las partículas). Si ahora se sustituye (4.13) en (4.9), el esquema de interpolación se puede identificar fácilmente y ser escrito en la forma:

$$u(\vec{x}) \approx \hat{u}(\vec{x}) = \vec{p}(\vec{x}) \cdot \mathbf{M}^{-1}(\vec{x}) \cdot \mathbf{P}_{\Omega_x} \cdot \mathbf{w}^*(\vec{x}) \cdot \vec{u}_{\Omega_x} = \vec{N}(\vec{x}) \cdot \vec{u}_{\Omega_x} \quad (4.18)$$

por lo que las funciones de forma de mínimos cuadrados móviles vienen dadas por:

$$\vec{N}(\vec{x}) = \vec{p}(\vec{x}) \cdot \mathbf{M}^{-1}(\vec{x}) \cdot \mathbf{P}_{\Omega_x} \cdot \mathbf{w}^*(\vec{x}) \quad (4.19)$$

Con respecto a la elección de los núcleos, éstos deben satisfacer los requisitos tales como se describieron para el Método SPH.

5.1. Generalidades

El Método del Elemento Finito (FEM) es uno de los métodos numéricos de aproximación de soluciones para problemas de ecuaciones diferenciales parciales más potente y utilizado en la actualidad; y también posiblemente, uno de los más activos como campo de investigación tanto teórica como aplicada. Su potencial se basa principalmente en su sólida base matemática, su capacidad para ser aplicado a una gran variedad de problemas de diferente origen y su aptitud cuando los dominios de análisis son complejos, debido a que las mallas de elementos finitos se adaptan fácilmente, considerando no-linealidades y distintos tipos de condiciones de contorno. Para resolver un problema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales por el FEM se comienza planteándolo en su forma débil, que bajo ciertas condiciones puede resultar análoga a un problema de minimización de un funcional. El FEM permite convertir el problema continuo en su forma débil en un problema discreto, que finalmente resulta en un sistema de ecuaciones algebraicas. Para ello, se utiliza el Método de Galerkin en el cual el espacio de funciones ensayo (*test and trial*) se construye de una forma que es característica del FEM. Primero se divide el dominio de análisis en subdominios denominados elementos finitos. Dentro de cada subdominio las funciones de prueba se construyen como polinomios a los cuales se les impone un determinado orden de continuidad con los elementos adyacentes. Por lo tanto, la solución obtenida estará formada por funciones que resultarán polinómicas a trozos en el dominio completo. La reformulación de la ecuación diferencial parcial original en su forma débil diferencia este método del Método de Diferencias Finitas (FDM), otro

método popular de aproximación de soluciones. En FDM se parte directamente de la ecuación diferencial y se discretiza la misma convirtiéndola en una ecuación en diferencias en los nodos de una malla. Otros métodos numéricos de aproximación de ecuaciones diferenciales parciales menos utilizados tienen en común parte de su formulación con el FEM. En el Método de Volúmenes Finitos las funciones de peso son funciones tipo *hat* (constantes en parte del dominio y nulas en el resto). El Método de Elementos de Contorno utiliza una segunda integración por partes para obtener ecuaciones algebraicas en el contorno del dominio. Se han propuesto gran variedad de elementos finitos diferentes, de formas triangulares o cuadrilaterales en 2 dimensiones, tetraédricas o hexaédricas en 3 dimensiones, con funciones de interpolación de distintos grados y distinta continuidad en los contornos de 2 o más elementos. Además se utilizan distintas ubicaciones de los nodos de los elementos. Las bases matemáticas del método están relacionadas íntimamente con las teorías de operadores en espacios de Hilbert y de Sobolev.

5.1.1. Aproximación de una solución

Es común, que los procesos físicos exhiban un alto grado de complejidad, y por tanto, sus descripciones matemáticas carezcan de una resolución analítica. En tales situaciones, la elección de un caso límite del proceso físico, puede conducir a una formulación matemática analíticamente resoluble. Sin embargo, este procedimiento no es muy adecuado cuando se desea evitar la pérdida de generalidad en la representación matemática del proceso físico. Para ello, es más conveniente proponer una solución aproximada, cuyo margen de error con respecto a la solución exacta, sea aceptable.

Aproximación generalizada

Una forma práctica de hacer frente a la problemática de soluciones analíticas inexistentes, es a través de la formulación de una descripción analítica aproximada. Básicamente, esto consiste en construir una función paramétrica, cuyos parámetros indeterminados se deban ajustar de forma tal, que conduzca a una aproximación aceptable de una función a aproximar $u^*(\vec{x})$. Obviamente, la función aproximada $u(\vec{x})$, debe satisfacer las condi-

ciones de admisibilidad a las cuales está sujeta la función a aproximar; asimismo, poseer una naturaleza simple, que permita una fácil implementación numérica. Por tal motivo, la función aproximada, se elige como la combinación lineal de un conjunto de parámetros, denominados coordenadas generales de la aproximación; y matemáticamente se expresa como

$$u^*(\vec{x}) \approx u(\vec{x}) \equiv \vec{p}(\vec{x}) \cdot \vec{\alpha} \quad \forall \vec{x} \in \Omega \quad (5.1)$$

donde los elementos del vector $\vec{\alpha}$, corresponden a las coordenadas generalizadas de la aproximación; y los elementos del vector de funciones $\vec{p}(\vec{x})$, pertenecen a un conjunto de funciones base, que satisfacen las condiciones de admisibilidad, a las que está sujeta la función a aproximar. Asimismo, cuando las condiciones de admisibilidad del conjunto de funciones base, están limitadas a la satisfacción de ciertas restricciones de continuidad y diferenciación, la implementación de esta función aproximada, corresponde a una aproximación generalizada.

Aproximación nodal

Aunque una aproximación generalizada, provee de una opción para construir la aproximación de una función, presenta un grave inconveniente, las coordenadas generalizadas no tienen un significado específico. Ante esta situación, se puede plantear la siguiente alternativa. Primero, es necesario elegir un conjunto de puntos donde se desee evaluar la función aproximada; mismos que se pueden designar mediante

$$\hat{x}_k \in \Omega; \quad 1 \leq k \leq n \quad (5.2)$$

y reciben la denominación de nodos de interpolación. Enseguida, a través de los nodos de interpolación elegidos, es necesario construir un conjunto de funciones base, que satisfagan

$$\phi_j(\hat{x}_i) = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases}; \quad 1 \leq i \leq n; \quad 1 \leq j \leq n \quad (5.3)$$

Usualmente, a este conjunto de funciones, se le denomina funciones de interpolación. Así, la nueva aproximación se reformula como

$$u(\vec{x}) \equiv \vec{\phi}(\vec{x}) \cdot \vec{v} \quad \forall \vec{x} \in \Omega \quad (5.4)$$

donde el vector de parámetros \vec{v} , es el conjunto de parámetros indeterminados que se debe evaluar. El punto central de esta aproximación, es que presenta una definición preestablecida, expresada por

$$v_k \equiv u(\hat{x}_k); \quad 1 \leq k \leq n \quad (5.5)$$

Es decir, cada uno de los parámetros indeterminados, representa a la función aproximada, evaluada en cada uno de los nodos de interpolación. Por tal motivo, el vector de parámetros indeterminados, recibe la denominación de vector de variables nodales.

Aproximación nodal por subdominios

Indudablemente, aunque una aproximación nodal es mas descriptiva que una aproximación generalizada, presenta una inevitable dificultad. La construcción de cada una de las funciones de interpolación, requiere que se considere a cada uno de los nodos de interpolación elegidos. Por tanto, cuando el número de nodos de interpolación es demasiado alto, las funciones de interpolación se vuelven demasiado complejas para su implementación numérica. Una solución a este inconveniente, es utilizar una aproximación nodal por subdominios. Para obtener esta aproximación, esencialmente se requieren de dos pasos: subdivisión del dominio en subdominios; y elección de una aproximación nodal diferente sobre cada subdominio. Respecto a la subdivisión del dominio, ésta puede expresarse mediante

$$\Omega^k \subset \Omega; \quad 1 \leq k \leq n; \quad \Omega = \sum_{k=1}^n \Omega^k \quad (5.6)$$

En cuanto a la aproximación nodal para cada subdominio, ésta corresponde a

$$u^k(\vec{x}) \equiv \vec{\phi}^k(\vec{x}) \cdot \vec{v}^k; \quad \forall \vec{x} \in \Omega^k; \quad 1 \leq k \leq n \quad (5.7)$$

Y considerando que los nodos de interpolación para cada subdominio, se denotan por

$$\hat{x}_j^k \in \Omega^k; \quad 1 \leq k \leq n; \quad 1 \leq j \leq m_k \quad (5.8)$$

entonces las funciones de interpolación, deben estar definidas mediante

$$\phi_i^k(\hat{x}_j^k) = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases}; \quad 1 \leq k \leq n; \quad 1 \leq j \leq m_k; \quad 1 \leq i \leq m_k \quad (5.9)$$

Por tanto, la aproximación nodal por subdominios de una función, está dada por el siguiente ensamble de funciones

$$u(\vec{x}) \equiv \sum_{k=1}^n u^k(\vec{x}); \quad \forall \vec{x} \in \Omega \quad (5.10)$$

Las características principales de esta aproximación son: las variables nodales dependen exclusivamente del subdominio al que pertenecen; sobre cada subdominio y en su frontera con otro subdominio adyacente, se debe garantizar cierto grado de continuidad de parte de las funciones de interpolación. Asimismo, para definir completamente esta aproximación, es necesario que en cada subdominio se conozca la definición analítica de su geometría y las funciones de interpolación asociadas.

5.1.2. Partición de un dominio

Debido a que el FEM es un caso particular de una aproximación nodal por subdominios; la partición del dominio tiene un papel crucial en ésta técnica numérica. Por ello, es importante definir un conjunto de reglas, a través de las cuales se rija el proceso de subdivisión. Entre las reglas más importantes, es necesario que la subdivisión del dominio se realice de forma tal, que cada subdominio corresponda a un elemento geométrico de forma simple. Asimismo, cada uno de estos elementos geométricos, debe ser definido analíticamente por un conjunto único de nodos, a los que comúnmente, se le denominan nodos de forma. Aunque los nodos de forma pueden corresponder a los nodos de interpolación, no es una condición necesaria.

Reglas de partición de un dominio

La subdivisión de un dominio en el FEM, debe satisfacer los siguientes requerimientos:

1. Dos elementos geométricos distintos, pueden tener puntos comunes solamente en sus fronteras comunes, si tales fronteras existen; no permitiéndose la sobreposición. Las fronteras comunes pueden ser puntos, líneas o superficies.
2. Los elementos geométricos ensamblados, no deben dejar huecos dentro del dominio, y deben aproximarse a la geometría real del dominio lo mas adecuadamente posible.

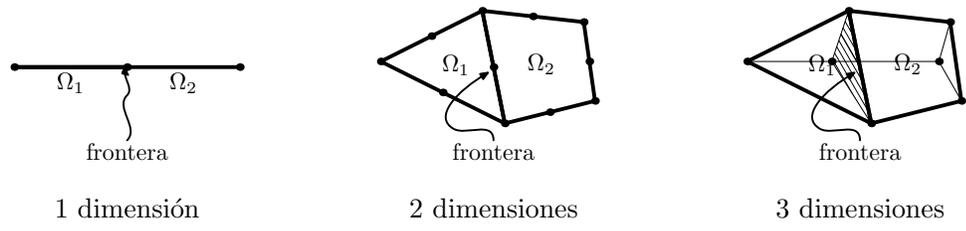


Figura 5.1: Fronteras comunes entre elementos distintos.

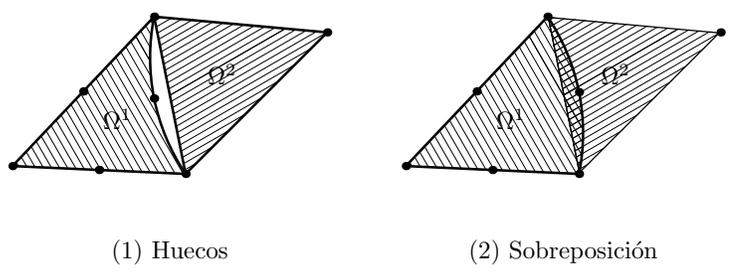


Figura 5.2: Restricciones involucradas en el proceso de partición.

Frecuentemente, cierto error es introducido cuando la frontera de un dominio no puede ser exactamente representada por los elementos geométricos seleccionados. Tal error, se denomina error por discretización geométrica, y puede ser minimizado por reducción del tamaño de los elementos geométricos, o por el uso de elementos geométricos que permiten fronteras curvas.

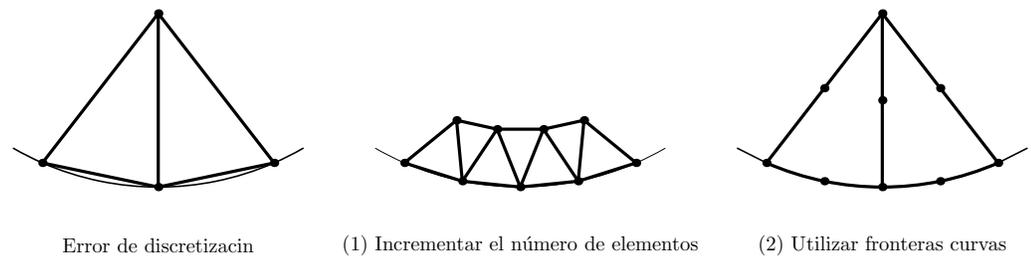


Figura 5.3: Técnicas para decrementar el error de discretización geométrica.

Elementos clásicos

En la figura 5.4 se exponen las formas clásicas de los elementos utilizados en la partición de dominios.

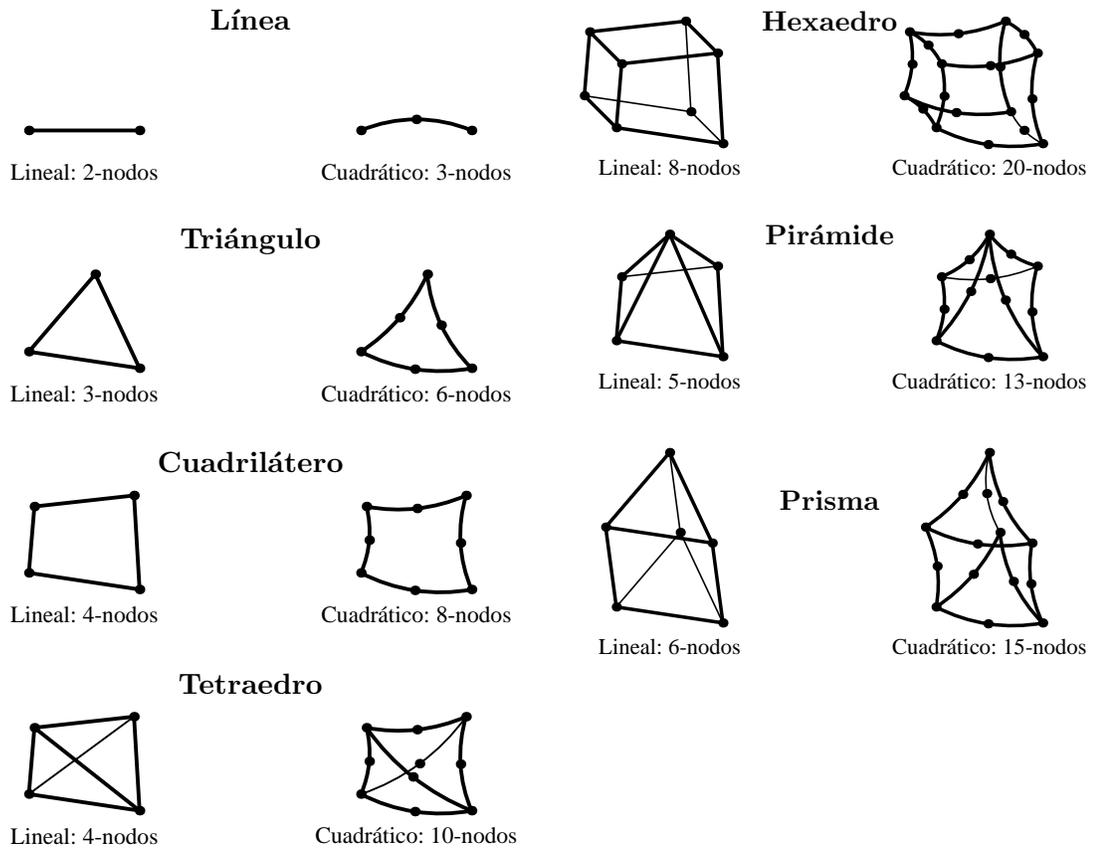


Figura 5.4: Formas clásicas de los elementos.

Configuración geométrica elemental

Con el propósito de que las reglas de partición sean satisfechas, es necesario que la definición analítica de los elementos geométricos, esté dada bajo los siguientes lineamientos:

1. La definición analítica de un elemento geométrico, solamente debe depender de los nodos de forma ubicados sobre del espacio geométrico que delimita su frontera.
2. La definición analítica de una sección de frontera compartida entre dos o más elementos geométricos, debe ser única; ésto es, solamente debe depender de los nodos de forma ubicados sobre la sección de frontera compartida.

Conectividad elemental

Todos los nodos, ya sean de forma o interpolación, deben ser numerados secuencialmente, no permitiéndose mas de una etiqueta por nodo, ni la ausencia de la misma; así mismo, deben ser identificadas las coordenadas geométricas que corresponden a cada nodo. Existen dos tipos de enumeraciones, una local y otra global: la primera corresponde a la posición que ocupa un nodo dentro de un elemento geométrico, y la segunda corresponde a la posición que ocupa un nodo dentro del dominio. De igual forma, cada elemento geométrico debe ser numerado secuencialmente, no permitiéndose mas de una etiqueta por elemento geométrico, ni la ausencia de la misma; así mismo, deben ser identificados los nodos que conforman cada elemento geométrico. Así, para cada elemento geométrico, es posible agrupar dentro de un vector, las posiciones globales de los nodos que lo conforman. Este vector, recibe generalmente el nombre de conectividad elemental.

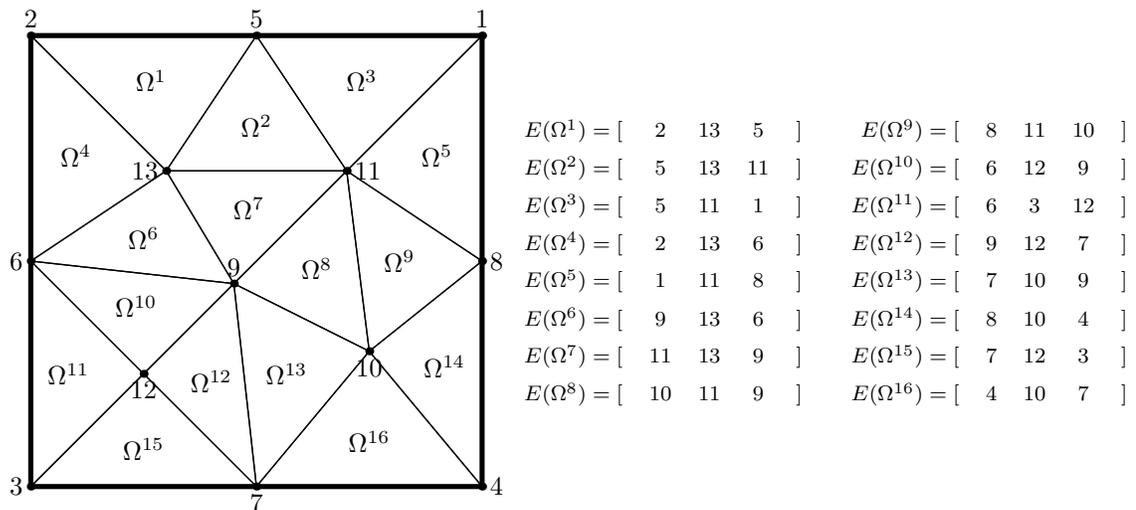


Figura 5.5: Conectividad elemental

5.1.3. Elemento de referencia

Como se ha descrito previamente, una aproximación nodal por subdominios, requiere de la construcción de un conjunto de funciones de interpolación, para cada uno de los elementos geométricos distintos que conforman el dominio del sistema matemático. Esta tarea, aunque es factible debe llevarse a cabo mediante una implementación computacio-

nal, involucra un consumo excesivo de tiempo y memoria en un computador. Ante esta problemática, existe un proceso numérico alternativo. Básicamente, consiste en construir sobre una configuración geométrica elemental preestablecida por un elemento de referencia, un conjunto de funciones de interpolación que al someterlo a una serie de transformaciones geométricas, resulten los distintos conjuntos de funciones de interpolación requeridos en cada uno de los elementos geométricos, cuya configuración geométrica elemental, sea idéntica a la del elemento de referencia.

Partiendo del hecho, que el conjunto de funciones de interpolación sobre un elemento de referencia preestablecido, ha sido definido sobre el siguiente conjunto de nodos de interpolación

$$\hat{\xi}_k \in \Omega^r; \quad 1 \leq k \leq l \quad (5.11)$$

entonces las funciones de interpolación sobre tal elemento de referencia, deben satisfacer las siguientes restricciones

$$\Phi_j(\hat{\xi}_i) = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases}; \quad 1 \leq i \leq l; \quad 1 \leq j \leq l \quad (5.12)$$

por tanto la aproximación nodal para cada uno de los elementos geométricos que guardan la misma configuración geométrica elemental que el elemento de referencia, puede expresarse mediante

$$u^k(\vec{\xi}) \equiv \vec{\Phi}(\vec{\xi}) \cdot \vec{v}^k; \quad \forall \vec{\xi} \in \Omega^r; \quad 1 \leq k \leq n \quad (5.13)$$

Obviamente, puede percatarse que la aproximación nodal por subdominios aún no está completamente definida. Para ello, es necesario describir la naturaleza matemática de cada una de las transformaciones geométricas, que ligan a cada uno de los elementos geométricos con el elemento de referencia.

Considérese que la geometría del elemento de referencia está definida por el siguiente conjunto de nodos de forma

$$\tilde{\xi}_k \in \Omega^r; \quad 1 \leq k \leq m \quad (5.14)$$

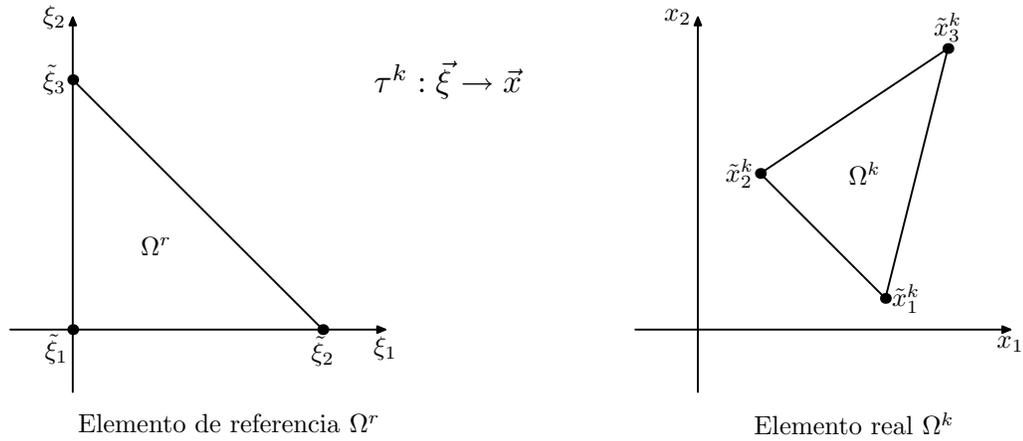


Figura 5.6: Transformación de un elemento de referencia a un elemento real.

a través del cual, es posible construir el siguiente conjunto de funciones de forma

$$\Psi_j(\tilde{\xi}_i) = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases}; \quad 1 \leq i \leq m; \quad 1 \leq j \leq m \quad (5.15)$$

entonces, una función a aproximar sobre cada uno de los nodos de forma, puede expresarse como

$$r(\vec{\xi}) \equiv \vec{\Psi}(\vec{\xi}) \cdot \vec{\rho}; \quad \forall \vec{\xi} \in \Omega^r \quad (5.16)$$

Aplicando esta aproximación nodal, en cada una de las coordenadas de los nodos de forma del elemento geométrico ubicado sobre el subdominio Ω^k , resulta

$$\vec{x}(\vec{\xi}) \equiv \tilde{\mathbf{x}}^k \cdot \vec{\Psi}(\vec{\xi}) \quad \forall \vec{\xi} \in \Omega^r \quad (5.17)$$

que es la transformación geométrica requerida para el elemento geométrico ubicado sobre el subdominio Ω^k . Aquí la matriz $\tilde{\mathbf{x}}^k$, corresponde a las coordenadas de los nodos de forma del elemento geométrico al que se desea transformar el elemento de referencia. Tal transformación geométrica, también puede denotarse mediante la siguiente expresión generalizada

$$\tau^k : \vec{\xi} \rightarrow \vec{x}; \quad 1 \leq k \leq n \quad (5.18)$$

Por supuesto, cada una de estas transformaciones geométricas, debe satisfacer las reglas de partición descritas anteriormente. Para lograr este propósito, cada transformación geométrica debe ser elegida de forma tal que cumpla con las siguientes propiedades:

1. La transformación geométrica debe ser uno a uno.
2. Los nodos de forma e interpolación del elemento de referencia, corresponden a los nodos de forma e interpolación del elemento geométrico al que se desea transformar, respectivamente.
3. Cada sección de frontera del elemento de referencia, definida por los nodos de forma de esa frontera, corresponde a la sección de frontera, definida por los nodos de forma correspondientes al elemento geométrico al que se desea transformar.

Como se ha mencionado desde un principio, la importancia de introducir un elemento de referencia, reside principalmente, en que sobre un mismo elemento de referencia, pueden ser mapeados todos los elementos geométricos del mismo tipo, mediante la utilización de diferentes transformaciones geométricas; facilitando así, su implementación computacional. Y aunque las transformaciones geométricas propuestas, no son las únicas en desarrollarse, al menos satisfacen las reglas de partición adecuadamente.

5.1.4. Funciones de forma e interpolación

Restricciones de continuidad

Con el propósito de describir aproximadamente el comportamiento exacto de una función, es indispensable que la función aproximada, satisfaga el mayor número de condiciones de admisibilidad a las cuales está sujeta la función a aproximar. Específicamente en el FEM, entre las condiciones de admisibilidad mas importantes, se incluyen ciertos requerimientos de continuidad sobre la función aproximada y sus derivadas, que deben ser satisfechos sobre cada uno de los elementos geométricos que conforman el dominio del sistema matemático bajo estudio.

1. *Continuidad sobre un elemento geométrico.* Sí sobre un elemento geométrico dado, la función aproximada requiere ser continua junto con todas sus derivadas hasta un orden s ; entonces, es necesario, que cada una de las funciones de interpolación junto con sus derivadas de hasta un orden s , sean continuas.

2. *Continuidad entre elementos geométricos adyacentes.* Sí la función aproximada y sus derivadas hasta orden s , son requeridas sobre una frontera común de dos o mas elementos geométricos; entonces, la función aproximada y sus derivadas hasta orden s , solamente deben depender de las variables nodales ubicadas sobre tal frontera común.

Minimización del error por truncamiento

Para que el error por truncamiento de una función aproximada, pueda ser minimizado por reducción del tamaño de los elementos geométricos, es necesario, que cada término matemático al que se desea minimizar su error por truncamiento, pertenezca al conjunto de funciones linealmente independientes que conforma a la función aproximada. En concreto, sí la función $u^*(\vec{x})$, representa a la función a aproximar, y la función denota a la función aproximada $u(\vec{x})$, y se desea que el error por truncamiento de la expresión

$$\frac{\partial^m}{\partial x_k^m} [u(\vec{x}) - u^*(\vec{x})] \quad (5.19)$$

sea minimizado por reducción del tamaño de los elementos geométricos. Entonces, es necesario que la aproximación incluya al término matemático x_k^{m+1} .

Método general de construcción

Considérese que sobre un dominio Ω^* , se ha implementado una aproximación generalizada definida mediante

$$u(\vec{\zeta}) = \vec{\alpha} \cdot \vec{p}(\vec{\zeta}); \quad \forall \vec{\zeta} \in \Omega^* \quad (5.20)$$

Asimismo, se desea construir una aproximación nodal descrita por

$$u(\vec{\zeta}) = \vec{v} \cdot \vec{\Phi}(\vec{\zeta}); \quad \forall \vec{\zeta} \in \Omega^* \quad (5.21)$$

donde las funciones de interpolación satisfacen

$$\Phi_j(\hat{\zeta}_i) = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases}; \quad 1 \leq i \leq l; \quad 1 \leq j \leq l \quad (5.22)$$

para un conjunto de nodos de interpolación expresados por

$$\hat{\zeta}_k \in \Omega^*; \quad 1 \leq k \leq l \quad (5.23)$$

Considerando que ambas aproximaciones son idénticas; al evaluar la aproximación generalizada, en cada uno de los nodos de interpolación se obtiene

$$v_k = \vec{\alpha} \cdot \vec{p}(\hat{\zeta}_k); \quad 1 \leq k \leq l \quad (5.24)$$

Definiendo a la matriz $\boldsymbol{\pi}$ como

$$\pi_{ij} = p_i(\hat{\zeta}_j); \quad 1 \leq i \leq l; \quad 1 \leq j \leq l \quad (5.25)$$

la expresión (5.24), se puede reformular como

$$\vec{v} = \vec{\alpha} \cdot \boldsymbol{\pi} \quad (5.26)$$

y con ello la aproximación generalizada se replantea como

$$u(\vec{\zeta}) = \boldsymbol{\pi}^{-1} \cdot \vec{p}(\vec{\zeta}) \cdot \vec{v}; \quad \forall \vec{\zeta} \in \Omega^* \quad (5.27)$$

cuya comparación con la aproximación nodal exige que se satisfaga

$$\vec{\Phi}(\vec{\zeta}) = \boldsymbol{\pi}^{-1} \cdot \vec{p}(\vec{\zeta}); \quad \forall \vec{\zeta} \in \Omega^* \quad (5.28)$$

lo cual corresponde a la definición analítica de las funciones de interpolación. Obviamente, para alcanzar este resultado es necesario que la matriz $\boldsymbol{\pi}$ sea invertible; lo cual se satisface siempre, debido a que una adecuada implementación de una aproximación generalizada, debe garantizar que los elementos del vector de funciones $\vec{p}(\vec{\zeta})$ sean linealmente independientes.

Bajo un razonamiento similar, es posible construir el conjunto de funciones de forma, necesario para establecer la definición analítica de la transformación geométrica de un dominio Ω^* con coordenadas geométricas $\vec{\zeta}$, a un dominio Ω^* con coordenadas geométricas $\vec{\eta}$. Considérese que tal transformación está dada por una aproximación nodal por subdominios que corresponde a

$$\vec{\eta}(\vec{\zeta}) = \vec{\eta} \cdot \vec{\varphi}(\vec{\zeta}) \quad \forall \vec{\zeta} \in \Omega^* \quad (5.29)$$

donde la columna k -ésima de la matriz $\vec{\eta}$ corresponde al nodo de forma con coordenadas $\vec{\eta}_k$. Tales nodos de forma definen al elemento finito en el espacio de transformación Ω^* .

Con respecto a las funciones de forma $\vec{\varphi}(\vec{\zeta})$, éstas son construidas mediante un vector de funciones base $\vec{q}(\vec{\zeta})$, a través de la expresión

$$\vec{\varphi}(\vec{\zeta}) = \boldsymbol{\rho}^{-1} \cdot \vec{q}(\vec{\zeta}); \quad \forall \vec{\zeta} \in \Omega^* \quad (5.30)$$

donde la matriz $\boldsymbol{\rho}$ se define como

$$\rho_{ij} = q_i(\tilde{\zeta}_j) \quad \forall \tilde{\zeta}_j \in \Omega^* \quad (5.31)$$

Aquí las coordenadas $\tilde{\zeta}_j$, describen la posición geométrica de los nodos de forma del mismo elemento finito, bajo el espacio geométrico Ω^* .

Primeras derivadas

Definiendo al operador gradiente ∇_{ζ} , como la diferenciación con respecto a las coordenadas geométricas $\vec{\zeta}$, las primeras derivadas de las funciones interpolación, corresponden a

$$\nabla_{\zeta} [u(\vec{\zeta})] = \nabla_{\zeta} [\vec{\Phi}(\vec{\zeta})] \cdot \vec{v} \quad \forall \vec{\zeta} \in \Omega^* \quad (5.32)$$

Transformación de coordenadas de las primeras derivadas

Mediante la regla de la cadena, es posible demostrar la transformación de las primeras derivadas del sistema de coordenadas $\vec{\zeta}$ al sistema de coordenadas $\vec{\eta}$, corresponde a

$$\nabla_{\eta} \equiv \mathbf{J} \cdot \nabla_{\zeta} \quad (5.33)$$

donde el tensor \mathbf{J} corresponde al jacobiano de la transformación geométrica del sistema de coordenadas $\vec{\zeta}$ al sistema de coordenadas $\vec{\eta}$. Y está definido como

$$J_{ij} \equiv \frac{\partial \zeta_j}{\partial \eta_i} \quad (5.34)$$

Para la transformación geométrica inversa, utilizando la regla de la cadena, se tiene que

$$\nabla_{\zeta} \equiv \mathbf{J}^* \cdot \nabla_{\eta} \quad (5.35)$$

donde el tensor \mathbf{J}^* corresponde al jacobiano de la transformación geométrica del sistema de coordenadas $\vec{\eta}$ al sistema de coordenadas $\vec{\zeta}$. Y está definido como

$$J_{ij}^* \equiv \frac{\partial \eta_j}{\partial \zeta_i} \quad (5.36)$$

Sustituyendo (5.33) en (5.35), se demuestra que la transformación geométrica de las primeras derivadas satisface

$$\mathbf{J}^* = \mathbf{J}^{-1} \tag{5.37}$$

Transformación de coordenadas de una integral

Mediante una transformación de coordenadas geométricas, es posible cambiar la integración de una función en el dominio Ω^* de un sistema de coordenadas geométricas \vec{x} , por una integración sobre el dominio Ω^* de un sistema de coordenadas geométricas $\vec{\xi}$. Dicha transformación de la integral corresponde a

$$\int_{\Omega^*} f(\vec{x}) dx_1 dx_2 dx_3 = \int_{\Omega^*} f(\vec{\xi}) \det(\mathbf{J}) d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \tag{5.38}$$

donde $\det(\mathbf{J})$ es el determinante del jacobiano de la transformación geométrica del sistema de coordenadas \vec{x} al sistema de coordenadas $\vec{\xi}$.

Para el caso de una integral de contorno definida sobre una línea, la transformación está dada mediante:

$$\iint_{\partial\Omega^k} f(\vec{x}) dz = \iint_{\partial\Omega^r} f(\vec{\xi}) \mathbf{J}_L d\zeta \quad \text{con} \quad \mathbf{J}_L = \left\| \frac{\partial \vec{x}}{\partial \zeta} \right\| \tag{5.39}$$

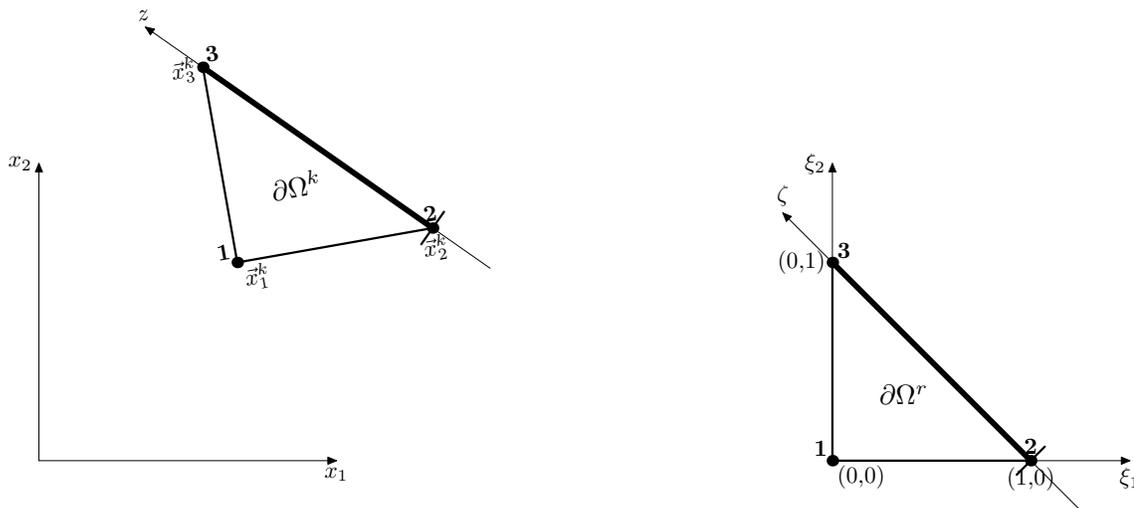


Figura 5.7: Transformación de una integral de contorno sobre un dominio 2D.

Y para el caso de una integral de contorno definida sobre una superficie, la transformación está dada mediante:

$$\iint_{\partial\Omega^k} f(\vec{x}) dz_1 dz_2 = \iint_{\partial\Omega^r} f(\vec{\xi}) \mathbf{J}_S d\zeta_1 d\zeta_2 \quad \text{con} \quad \mathbf{J}_S = \left\| \frac{\partial \vec{x}}{\partial \zeta_1} \times \frac{\partial \vec{x}}{\partial \zeta_2} \right\| \quad (5.40)$$

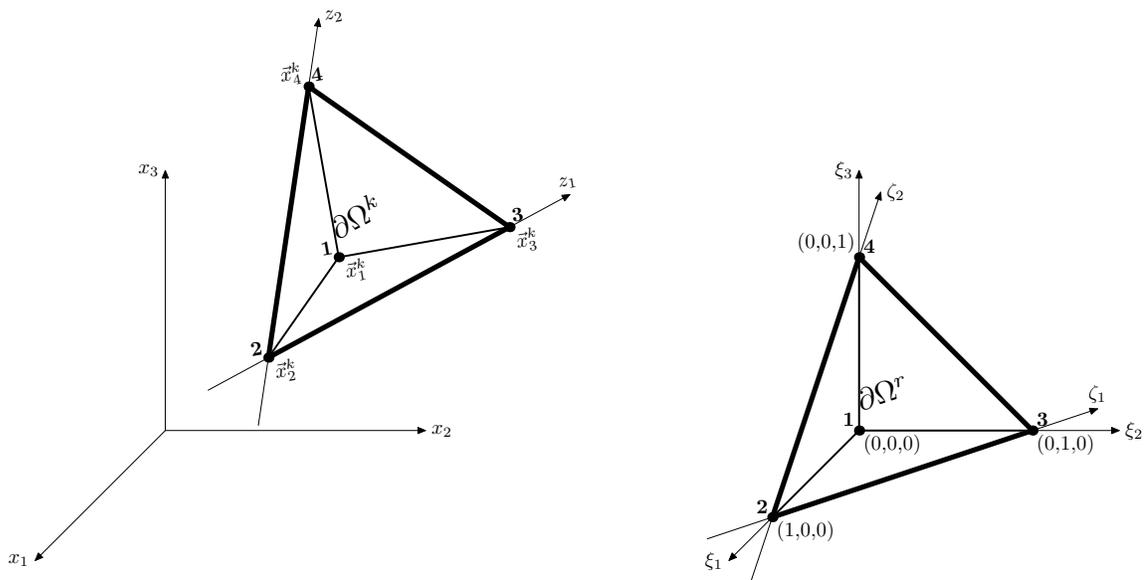


Figura 5.8: Transformación de una integral de contorno sobre un dominio 3D.

5.2. Formulación Variacional

5.2.1. Método de los Residuos ponderados

Existen una gran variedad de técnicas numéricas, mediante las cuales se puede obtener la solución aproximada de un sistema integrodiferencial previamente planteado. Entre las técnicas numéricas más versátiles, se puede mencionar al método de los residuos ponderados; cuya implementación, se describe a través de las siguientes etapas:

1. Proponer para un sistema integrodiferencial, una solución aproximada a través de un conjunto de funciones paramétricas.
2. Evaluar para cada punto del dominio, la desviación paramétrica que introduce una solución aproximada con respecto a la solución exacta.

3. Otorgar a cada una de estas desviaciones paramétricas, un grado de ponderación, siguiendo un criterio previamente definido.
4. Asignar el valor cero, a la media de todas las desviaciones paramétricas ponderadas.

En conjunto, este procedimiento conduce a la formulación de un sistema discreto, cuya solución corresponde a la evaluación de los parámetros indeterminados, a través de los cuales, la solución aproximada se define explícitamente. De este modo, se puede expresar que el principio del método de los residuos ponderados, tiene como objeto obtener el mejor ajuste global de una solución paramétrica propuesta, sobre un sistema integrodiferencial previamente establecido.

Residuales

Considérese un sistema físico en estado estacionario, representado por el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales parciales de orden m

$$\mathbf{L}_k[\bar{u}(\vec{x})] + f_k(\vec{x}) = 0; \quad \forall \vec{x} \in \Omega; \quad 1 \leq k \leq \dim \bar{u}(\vec{x}) \quad (5.41a)$$

sujeto a las condiciones de contorno

$$\mathbf{C}_k[\bar{u}(\vec{x})] + g_k(\vec{x}) = 0; \quad \forall \vec{x} \in \partial\Omega_k; \quad 1 \leq k \leq n \quad (5.41b)$$

donde el vector de funciones $\bar{u}(\vec{x})$ representa la solución sin determinar, que satisface exactamente al sistema matemático.

El poder representar matemáticamente la descripción de un fenómeno físico, no implica necesariamente la existencia de una solución analítica para el mismo. De hecho, es muy común dentro de las ciencias, el planteamiento de modelos matemáticos, irresolubles en forma exacta. Aún así, existe la posibilidad de obtener una solución aproximada. Una metodología para lograr este propósito, puede ser la siguiente. Puesto que las exigencias del contorno, son de menor complejidad que las del dominio; podría deducirse analíticamente de (5.41b) un vector de funciones que lo satisfaga exactamente, y así utilizarlo como parte del conjunto de funciones base, para la construcción de un vector de funciones que satisfaga aproximadamente a (5.41a). Por supuesto, para ello hay que definir

una forma para evaluar la calidad de la aproximación. Una extensa variedad de métodos numéricos, emplean el concepto de residual como una medida de la aproximación; así, para el sistema diferencial parcial (5.41), es posible definir un vector de residuales, donde cada uno de sus elementos esté definido por

$$r_k[\vec{u}(\vec{x})] \equiv \mathbf{L}_k[\vec{u}(\vec{x})] + f_k(\vec{x}) \quad \forall \vec{x} \in \Omega; \quad 1 \leq k \leq \dim \vec{u}(\vec{x}) \quad (5.42)$$

Es importante mencionar, que éste vector de residuales solo mide la calidad de la aproximación con respecto al dominio, así que es necesario implementar las restricciones necesarias, para aproximar la solución con respecto a las condiciones de contorno, en dado caso de que no puedan satisfacer exactamente.

Formulación integral

El método de los residuos ponderados consiste básicamente en sustituir un sistema diferencial previamente planteado, por una formulación integral del mismo. Así, la formulación integral asociada al sistema diferencial (5.41), corresponde a

$$\mathbf{W} \equiv \int_{\Omega} \vec{\omega}(\vec{x}) \cdot \vec{r}[\vec{u}(\vec{x})] dV = 0 \quad (5.43a)$$

sujeta a las condiciones de contorno

$$\mathbf{C}_k[\vec{u}(\vec{x})] + \vec{g}_k(\vec{x}) = 0 \quad \forall \vec{x} \in \partial\Omega_k \quad 1 \leq k \leq n \quad (5.43b)$$

Donde el vector de residuales $\vec{r}[\vec{u}(\vec{x})]$, se define mediante (5.42). Y el vector de funciones $\vec{\omega}(\vec{x})$, al cual comúnmente se le designa vector de funciones pesadas, es un vector de funciones elegidos arbitrariamente. Es importante señalar, que esta formulación integral debe satisfacerse exactamente para cualquier vector de funciones pesadas, asimismo, exige que las condiciones de contorno sean satisfechas exactamente.

Aunque cualquier solución que satisface al sistema diferencial (5.41), también satisface a la formulación integral (5.43), sin importar la elección del vector de funciones pesadas; una solución de la formulación integral (5.43) no necesariamente es una solución exacta del sistema diferencial (5.41); en dado caso que lo fuera, es necesario que la dimensión

del conjunto de funciones base de cada uno de los componentes del vector de funciones pesadas, sea infinita. Esto significa, que una formulación integral como la definida en (5.43), en forma práctica, solo es capaz de ofrecer una solución aproximada para el sistema diferencial (5.41). Sin embargo, aún así una formulación integral puede ser preferible con respecto al sistema diferencial al cual está asociado, debido a que ofrece más facilidades en la implementación de una metodología para su resolución.

5.2.2. Transformación de integrales

Cuando una formulación integral satisface de manera exacta cada una de las condiciones de contorno, a las cuales ésta sujeta el sistema diferencial mediante el cual se plantea; se le denomina formulación integral fuerte. Es muy usual que la formulación integral fuerte asociado a un sistema diferencial, no corresponda a la forma mas adecuada para obtener su resolución, y por tal motivo, es necesario someterla a una serie de transformaciones; siendo la mas común, la integración por partes.

Formas integrales débiles

Una formulación integral fuerte previamente planteada, puede ser transformada mediante integración por partes, para obtener una formulación integral denominada débil. Sí es necesario, se puede integrar por partes sucesivamente hasta obtener la formulación integral débil deseada. Tales expresiones son deseables debido a las siguientes razones:

1. Reduce el orden de la más alta derivada en la función aproximada, relajando de esta forma las condiciones de continuidad requeridas para la convergencia.
2. La función aproximada no tiene que satisfacer exactamente algunas de las condiciones de contorno impuestas por el sistemas matemático, puesto que aparecen de manera natural en la formulación integral débil.

Sin embargo, una formulación integral débil también trae consecuencias no deseables, pero aún así permisibles; entre ellas, la diferenciación de las funciones pesadas, ocasionando con ello, que la selección del conjunto de funciones base, bajo la cual se construyen

las funciones pesadas, esté mas restringida con respecto a las condiciones de continuidad.

El efecto neto de la integración por partes, es el relajamiento de las condiciones de continuidad sobre el espacio de funciones admisibles, utilizadas en la construcción de la solución aproximada. Así, en la búsqueda de una solución para la formulación integral fuerte, que está asociado a un sistema diferencial parcial de orden m , las funciones solución admisibles deben ser diferenciables m veces y satisfacer todas las condiciones de contorno. En cambio para una formulación integral débil asociada a ese mismo sistema diferencial, en cuya formulación se redujo s ordenes su derivada mas alta, las condiciones de admisibilidad son distintas y corresponden a:

1. Las funciones solución deben ser $m - s$ veces diferenciables.
2. Las funciones pesadas deben ser s veces diferenciables.
3. Las funciones solución deben satisfacer solamente las condiciones de contorno que contienen hasta las derivadas de orden $m - s - 1$.
4. Las funciones pesadas son nulas sobre los contornos, donde las funciones solución aún deben satisfacer las condiciones fronteras.
5. Las condiciones de contorno que contienen derivadas de orden mas alto que $m - s$ son naturalmente satisfechas de manera aproximada.

Bajo todo estos argumentos, una formulación integral débil para (5.43), puede representarse por

$$\mathbf{W}^* \equiv \int_{\Omega} F [\vec{u}(\vec{x})] dV + \sum_{k=1}^{l-1} \int_{\partial\Omega_k} G_k [\vec{u}(\vec{x})] dS = 0 \quad (5.44a)$$

sujeta solamente a las condiciones de contorno

$$\mathbf{C}_k [\vec{u}(\vec{x})] + g_k(\vec{x}) = 0 \quad \forall \vec{x} \in \partial\Omega_k \quad l \leq k \leq n \quad (5.44b)$$

Formas integrales adicionales

Es común, que los fenómeno físicos puedan ser descritos mediante un par de sistemas matemáticos, acoplados a través de un conjunto de variables suplementarias; de forma

tal, que uno de los sistemas matemáticos, represente leyes de equilibrio, y el otro leyes constitutivas. Aunque en la práctica, es usual que estas variables suplementarias puedan suprimirse, mediante la reducción de una cantidad idéntica de ecuaciones, algunas veces es imposible. Por tanto, para el caso de un modelo matemático definido sobre un dominio continuo, es necesario adaptar la metodología de los residuos ponderados, de forma tal, que tome en cuenta esta consideración. Así, sin perder generalidad, considérese el siguiente par de sistemas matemáticos definidos sobre un dominio continuo, el cual expone de manera explícita un conjunto de variables suplementarias, adicionales al conjunto de variables primitivas; representados por la expresiones

$$\mathbf{P}_k[\bar{v}(\vec{x}), \bar{u}(\vec{x})] + f_k(\vec{x}) = 0; \quad \forall \vec{x} \in \Omega; \quad 1 \leq k \leq \dim \bar{v}(\vec{x}) \quad (5.45a)$$

$$\mathbf{Q}_k[\bar{v}(\vec{x}), \bar{u}(\vec{x})] + g_k(\vec{x}) = 0; \quad \forall \vec{x} \in \Omega; \quad 1 \leq k \leq \dim \bar{u}(\vec{x}) \quad (5.45b)$$

que están sujetas a las condiciones de contorno

$$\mathbf{C}_k[\bar{v}(\vec{x})] + s_k(\vec{x}) = 0 \quad \forall \vec{x} \in \partial\Omega_k \quad 1 \leq k < l \quad (5.45c)$$

$$\mathbf{D}_k[\bar{u}(\vec{x})] + t_k(\vec{x}) = 0 \quad \forall \vec{x} \in \partial\Omega_k \quad l \leq k \leq n \quad (5.45d)$$

Aquí, el vector de funciones $\bar{u}(\vec{x})$, representa a la solución exacta de las variables primitivas; y el vector de funciones $\bar{v}(\vec{x})$, representa a la solución exacta de las variables suplementarias.

Es importante señalar, que aunque el modelo matemático expresado anteriormente, pueda ser sujeto a una reducción de variables suplementarias, a veces es mas conveniente no hacerlo; esto debido, a que las condiciones de admisibilidad, de los vectores de funciones mediante los cuales se puede obtener una solución aproximada, son menos restrictivas cuando conserva a las variables suplementarias. De hecho, a través de la metodología de residuos ponderados, es posible obtener una solución aproximada conservando a las variables suplementarias. Para ello se requiere, que la formulación integral asociada al mismo, tome en consideración los residuales de ambos sistemas matemáticos, mediante una formulación mixta. Así, la formulación integral mixta se puede denotar mediante

$$\mathbf{W}_m \equiv \int_{\Omega} \bar{\omega}_E(\vec{x}) \cdot \bar{r}_E [\bar{v}(\vec{x}), \bar{u}(\vec{x})] dV + \int_{\Omega} \bar{\omega}_C(\vec{x}) \cdot \bar{r}_C [\bar{v}(\vec{x}), \bar{u}(\vec{x})] dV = 0 \quad (5.46a)$$

sujeta a las condiciones de contorno

$$\mathbf{C}_k[\vec{v}(\vec{x})] + s_k(\vec{x}) = 0 \quad \forall \vec{x} \in \partial\Omega_k \quad 1 \leq k < l \quad (5.46b)$$

$$\mathbf{D}_k[\vec{u}(\vec{x})] + t_k(\vec{x}) = 0 \quad \forall \vec{x} \in \partial\Omega_k \quad l \leq k \leq n \quad (5.46c)$$

donde los vectores de funciones $\vec{v}(\vec{x})$ y $\vec{u}(\vec{x})$, representan la solución aproximada de las variables suplementarias y primitivas, respectivamente. Asimismo, los vectores de funciones $\vec{\omega}_E(\vec{x})$ y $\vec{\omega}_C(\vec{x})$, denotan a los vectores de funciones pesadas de los sistemas matemáticos asociados a las leyes de equilibrio y a las leyes constitutivas, respectivamente. Y con respecto a los vectores de residuales $\vec{r}_E[\vec{v}(\vec{x}), \vec{u}(\vec{x})]$ y $\vec{r}_C[\vec{v}(\vec{x}), \vec{u}(\vec{x})]$, están definidos mediante

$$\vec{r}_{E,k}[\vec{v}(\vec{x}), \vec{u}(\vec{x})] \equiv \mathbf{P}_k[\vec{v}(\vec{x}), \vec{u}(\vec{x})] + f_k(\vec{x}); \quad \forall \vec{x} \in \Omega; \quad 1 \leq k \leq \dim \vec{v}(\vec{x}) \quad (5.47)$$

$$\vec{r}_{C,k}[\vec{v}(\vec{x}), \vec{u}(\vec{x})] \equiv \mathbf{Q}_k[\vec{v}(\vec{x}), \vec{u}(\vec{x})] + g_k(\vec{x}); \quad \forall \vec{x} \in \Omega; \quad 1 \leq k \leq \dim \vec{u}(\vec{x}) \quad (5.48)$$

Y puesto que se puede elegir un par de vectores de funciones pesadas, linealmente independientes, entonces la expresión (5.46a), puede sustituirse por

$$\mathbf{W}_E \equiv \int_{\Omega} \vec{\omega}_E(\vec{x}) \cdot \vec{r}_E[\vec{v}(\vec{x}), \vec{u}(\vec{x})] dV = 0 \quad (5.46a)$$

$$\mathbf{W}_C \equiv \int_{\Omega} \vec{\omega}_C(\vec{x}) \cdot \vec{r}_C[\vec{v}(\vec{x}), \vec{u}(\vec{x})] dV = 0$$

Y aún más, es posible relajar las restricciones que imponen las condiciones de contorno de la formulación integral mixta, mediante la introducción de una formulación integral débil mixta.

5.2.3. Funcionales

Básicamente, un funcional se define como un ensamble de funciones y sus derivadas; es decir, una función de funciones. Así, un funcional construido mediante un vector de funciones $\vec{u}(\vec{x})$ y sus derivadas $\mathbf{D}[\vec{u}(\vec{x})]$, puede expresarse como

$$\Pi \equiv f(\vec{u}(\vec{x}), \mathbf{D}[\vec{u}(\vec{x})]); \quad \forall \vec{x} \in \Omega \quad (5.49)$$

Primera variación

Uno de los operadores más importantes dentro del cálculo de variaciones, corresponde a la primera variación. Y en concreto, la primera variación para un funcional como el definido en (5.49), se denota mediante

$$\delta\Pi \equiv \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \frac{\partial\Pi}{\partial u_k} \delta u_k + \sum_{k=1}^{\dim \mathbf{D}(\vec{u})} \frac{\partial\Pi}{\partial D_k} \delta D_k \quad (5.50)$$

La importancia de este operador radica en el hecho, de que a través de él, es posible conocer las condiciones necesarias que permiten alcanzar la estacionaridad de un funcional; misma que se obtiene, cuando su primera variación es nula

$$\delta\Pi = 0 \quad (5.51)$$

lo que implica, que se deba satisfacer el siguiente sistema diferencial

$$\frac{\partial\Pi}{\partial u_k} = 0 \quad 1 \leq k \leq \dim \vec{u}(\vec{x}) \quad (5.52)$$

junto con

$$\frac{\partial\Pi}{\partial D_k} = 0 \quad 1 \leq k \leq \dim \mathbf{D}(\vec{u}) \quad (5.53)$$

Esta concepción matemática, es de gran utilidad, debido a que las condiciones de equilibrio de una gran variedad de fenómenos físicos, pueden expresarse a través de la estacionaridad de un funcional.

Por otro lado, la primera variación sobre un vector de funciones permite formular una versión de parámetros arbitrarios del mismo, la cual puede ser utilizada para obtener una aproximación del vector de funciones que satisface exactamente a un sistema matemático. Respecto a la calidad de la aproximación, depende exclusivamente de la dimensión del conjunto de funciones base mediante el cual se construye el vector de funciones. Así, la primera variación para el vector de funciones $\vec{u}(\vec{x})$, el cual representa una solución aproximada de un sistema matemático, se expresa como

$$\delta\vec{u}(\vec{x}) \equiv \vec{u}(\vec{x}) - \vec{u}^*(\vec{x}); \quad \forall \vec{x} \in \Omega \quad (5.54)$$

donde el vector de funciones $\vec{u}^*(\vec{x})$ corresponde a la solución exacta a la cual se desea aproximar. Y en dado caso de poseer una definición explícita para el vector de funciones $\vec{u}(\vec{x})$, tal como

$$u_k(\vec{x}) \equiv \vec{\Phi}_k(\vec{x}) \cdot \vec{\alpha}_k; \quad \forall \vec{x} \in \Omega; \quad 1 \leq k \leq \dim \vec{u}(\vec{x}) \quad (5.55)$$

donde el vector de funciones $\vec{\Phi}_k$ es el conjunto de funciones base del elemento k del vector de funciones $\vec{u}(\vec{x})$. Entonces la primera variación de cada elemento del vector de funciones $\vec{u}(\vec{x})$, se puede escribir como

$$\delta u_k(\vec{x}) \equiv \vec{\Phi}_k(\vec{x}) \cdot \delta \vec{\alpha}_k; \quad \forall \vec{x} \in \Omega; \quad 1 \leq k \leq \dim \vec{u}(\vec{x}) \quad (5.56)$$

donde los elementos del vector $\delta \vec{\alpha}_k$, es un conjunto de parámetros arbitrarios.

Funcional asociado a una formulación integral

En ciertos sistemas matemáticos, es posible construir un funcional a través de una formulación integral previamente planteada. Para alcanzar este objetivo, es necesario que el vector de funciones pesadas de la formulación integral (5.43), se designe como la primera variación del vector de funciones solución, lo que conduce a la siguiente formulación integral

$$\mathbf{W} = \int_{\Omega} \delta \vec{u}(\vec{x}) \cdot \vec{r} [\vec{u}(\vec{x})] dV = 0 \quad (5.57a)$$

sujeta a las condiciones de contorno, las cuales se han desglosado en dos bloques

$$\mathbf{C}_k[\vec{u}(\vec{x})] + g_k(\vec{x}) = 0 \quad \forall \vec{x} \in \partial\Omega_k; \quad 1 \leq k < l \quad (5.57b)$$

$$\mathbf{C}_k[\vec{u}(\vec{x})] + g_k(\vec{x}) = 0 \quad \forall \vec{x} \in \partial\Omega_k; \quad l \leq k \leq n \quad (5.57c)$$

Enseguida, mediante una serie de transformaciones sobre la formulación integral anterior, las cuales pueden incluir integración por partes, y con ello la relajación de algunas condiciones contorno; podría ser posible que el operador primera variación sea puesto fuera de la integral de dominio, de manera tal, que la formulación integral se pueda describir como

$$\mathbf{W} = \delta \int_{\Omega} F(\vec{u}(\vec{x}), \mathbf{D}[\vec{u}(\vec{x})]) dV + \delta \sum_{k=1}^{l-1} \int_{\partial\Omega_k} G_k(\vec{u}(\vec{x}), \mathbf{D}[\vec{u}(\vec{x})]) dS = 0 \quad (5.58a)$$

sujeta solamente a las condiciones de contorno

$$\mathbf{C}_k[\vec{u}(\vec{x})] + g_k(\vec{x}) = 0 \quad \forall \vec{x} \in \partial\Omega_k; \quad l \leq k \leq n \quad (5.58b)$$

Esto debido a que la integración por partes ha hecho posible relajar el bloque de condiciones de contorno (5.57b), a través de su inclusión en las nuevas integrales de contorno de (5.58a). Así, es posible discernir al funcional asociado, el cual corresponde a

$$\Pi \equiv \int_{\Omega} F[(\vec{u}(\vec{x}), \mathbf{D}[\vec{u}(\vec{x})])] dV + \sum_{k=1}^{l-1} \int_{\partial\Omega_k} G_k(\vec{u}(\vec{x}), \mathbf{D}[\vec{u}(\vec{x})]) dS \quad (5.59)$$

Y con ello, exponer la expresión que relaciona a una formulación integral con su funcional asociado, la cual está dada por

$$\mathbf{W} = \delta\Pi = 0 \quad (5.60)$$

Esto significa, que el funcional asociado a la formulación integral (5.57), corresponde a aquel funcional cuya estacionaridad se alcanza con las mismas condiciones que hacen posible que se satisfaga la integral de dominio (5.57a) y las condiciones de contorno (5.57b). A esta declaración, se le denomina principio de estacionaridad.

5.2.4. Discretización

La implementación de métodos numéricos, es inevitable cuando se desea obtener una solución aproximada de un sistema matemático. Sin embargo, debido a la naturaleza de tales procedimientos numéricos, es requisito imprescindible que el sistema matemático a resolver, se presente en una forma discreta para su tratamiento. Así, para el caso de un sistema matemático descrito sobre un dominio continuo, es necesario someterlo a un proceso de discretización, el cual tiene como objeto, transformarlo a un sistema discreto. En específico, el proceso de discretización de una formulación integral, requiere que se lleven a cabo las siguientes acciones:

1. Aproximar el vector de funciones solución mediante una representación paramétrica. Estos parámetros de aproximación pueden ser o no, valores nodales; pueden abarcar el dominio completo o ser restringidos a un subdominio. Así, para un vector

de funciones solución $\vec{u}(\vec{x})$ que se desee que satisfaga la formulación integral (5.43), se puede proponer para cada uno de sus elementos, la siguiente definición

$$u_k(\vec{x}) \equiv \vec{\Phi}_k(\vec{x}) \cdot \vec{\alpha}_k; \quad \forall \vec{x} \in \Omega; \quad 1 \leq k \leq \dim \vec{u}(\vec{x}) \quad (5.61)$$

donde el vector de funciones $\vec{\Phi}_k(\vec{x})$, conforma un conjunto de funciones base que respetan las condiciones de admisibilidad de la formulación integral (5.43); y se define mediante

$$\vec{\Phi}_k(\vec{x}) \equiv [\Phi_{k,1}(\vec{x}) \ \Phi_{k,2}(\vec{x}) \ \dots \ \Phi_{k,n}(\vec{x})]; \quad n = \dim \vec{\alpha}_k \quad (5.62)$$

Y el vector de parámetros indeterminados $\vec{\alpha}_k$, esta constituido por una serie de parámetros los cuales se deben ajustar, de forma tal, que el vector de funciones solución $\vec{u}(\vec{x})$ satisfaga adecuadamente a la formulación integral (5.43); y asimismo, se expresa por

$$\vec{\alpha}_k \equiv [\alpha_{k,1} \ \alpha_{k,2} \ \dots \ \alpha_{k,n}]; \quad n = \dim \vec{\alpha}_k \quad (5.63)$$

2. Elegir arbitrariamente un vector de funciones pesadas. Es importante señalar, que la dimensión del conjunto de funciones base, bajo la cual se construya cada uno de los elementos del vector de funciones pesadas, debe ser idéntica, al número de parámetros indeterminados que posee el correspondiente elemento del vector de funciones solución. Así, cada elemento del vector de funciones pesadas $\vec{w}(\vec{x})$ puede denotarse como

$$\omega_k(\vec{x}) = \vec{w}_k(\vec{x}) \cdot \vec{\beta}_k; \quad \forall \vec{x} \in \Omega; \quad 1 \leq k \leq \dim \vec{w}(\vec{x}) \quad (5.64)$$

donde el vector de funciones $\vec{w}_k(\vec{x})$ constituye el conjunto de funciones base del componente k en el vector de funciones pesadas $\vec{w}(\vec{x})$; y asimismo, ésta definido por

$$\vec{w}_k(\vec{x}) \equiv [w_{k,1}(\vec{x}) \ w_{k,2}(\vec{x}) \ \dots \ w_{k,n}(\vec{x})]; \quad n = \dim \vec{\alpha}_k \quad (5.65)$$

Adicionalmente, se puede expresar, que la elección del conjunto de funciones base del vector de funciones pesadas, conduce a una amplia variedad de métodos, siendo los más populares: el método de colocación, el método de Galerkin y el método de los mínimos cuadrados.

Bajo estas dos consideraciones, la formulación integral (5.43), se puede replantear a través del siguiente sistema discreto

$$\int_{\Omega} w_{i,j}(\vec{x}) r_i [\vec{u}(\vec{x}, \hat{\alpha})] dV = 0; \quad \begin{array}{l} 1 \leq i \leq \dim \vec{u}(\vec{x}) \\ 1 \leq j \leq \dim \vec{\alpha}_i \end{array} \quad (5.66)$$

donde cada una las funciones $w_{i,j}(\vec{x})$ conforma el conjunto de funciones bases del vector de funciones pesadas $\vec{\omega}(\vec{x})$; tal como lo expresa (5.64) y (5.65). Y además, el conjunto de vectores de parámetros indeterminados $\hat{\alpha}$, está definido mediante

$$\hat{\alpha} \equiv [\vec{\alpha}_1 \ \vec{\alpha}_2 \ \dots \ \vec{\alpha}_n]; \quad n = \dim \vec{u}(\vec{x}) \quad (5.67)$$

El sistema discreto descrito previamente, consiste de un conjunto de ecuaciones algebraicas, cuya solución corresponde a la determinación de los vectores de parámetros indeterminados; mismos, que son necesarios para definir explícitamente al vector de funciones solución que satisface aproximadamente a la formulación integral.

Elección de las funciones pesadas

La elección del conjunto de funciones base, mediante la cual se construirá al vector funciones pesadas, es de suma importancia. Pues a través de ella, se define específicamente el procedimiento que se utilizará para la resolución del sistema diferencial bajo estudio. Entre los procedimientos mas usuales, destacan los siguientes:

1. Colocación por puntos. Una descripción breve de este método, consiste en seleccionar un punto de integración para cada uno de los parámetros indeterminados que conforman al vector de funciones solución. Asimismo, el conjunto de funciones base del vector de funciones pesadas, debe estar constituido por un conjunto de funciones delta de Dirac; de forma tal, que cada una de ellas, esté asociada a un punto de integración; ésto es

$$w_{i,j}(\vec{x}) \equiv \delta(\vec{x} - \vec{x}_{\alpha_{i,j}}); \quad \forall \vec{x} \in \Omega; \quad \begin{array}{l} 1 \leq i \leq \dim \vec{u}(\vec{x}) \\ 1 \leq j \leq \dim \vec{\alpha}_i \end{array} \quad (5.68)$$

En esta expresión, el punto de integración $\vec{x}_{\alpha_{i,j}}$ se encuentra asociado al parámetro indeterminado $\alpha_{i,j}$. Es importante señalar, que el sentido de la expresión anterior,

solamente tiene como objeto denotar que el punto de integración será utilizado para cerrar al sistema matemático con respecto a dicho parámetro indeterminado, y no el establecimiento de un vínculo específico entre ellos. Así, la formulación integral (5.43) resuelta mediante el vector de funciones solución definido por (5.61), se transforma al siguiente sistema discreto

$$\int_{\Omega} \delta(\vec{x} - \vec{x}_{\alpha_{i,j}}) r_i [\vec{u}(\vec{x}, \hat{\alpha})] dV = 0; \quad \begin{array}{l} 1 \leq i \leq \dim \vec{u}(\vec{x}) \\ 1 \leq j \leq \dim \vec{\alpha}_i \end{array} \quad (5.69)$$

Mismo que al integrarlo, se obtiene el siguiente conjunto de ecuaciones algebraicas

$$r_i [\vec{u}(\vec{x}_{\alpha_{i,j}}, \hat{\alpha})] = 0; \quad \begin{array}{l} 1 \leq i \leq \dim \vec{u}(\vec{x}) \\ 1 \leq j \leq \dim \vec{\alpha}_i \end{array} \quad (5.70)$$

La precisión de la solución depende del número y posición de los puntos de colocación. La ubicación de los puntos juega un papel muy importante en este método, pues de ello depende la simetría de la solución. El procedimiento evita la integración sobre el dominio, y de manera general, siempre conduce a sistemas de ecuaciones no simétricas.

2. Colocación por subdominios. Presenta una gran similitud al método de colocación por puntos, a excepción, de que las integraciones no son puntuales sino sobre subdominios. Básicamente, consiste en asociar a cada uno de los parámetros indeterminados un subdominio sobre el cual integrar la formulación integral. De este modo, con el objetivo de implementar este procedimiento, es necesario que la base de funciones del vector de funciones pesadas, se defina mediante

$$w_{i,j}(\vec{x}) = \begin{cases} 0 & \forall \vec{x} \in \Omega_{\alpha_{i,j}} \\ 1 & \forall \vec{x} \in \Omega_{\alpha_{i,j}} \end{cases}; \quad \Omega_{\alpha_{i,j}} \subset \Omega; \quad \begin{array}{l} 1 \leq i \leq \dim \vec{u}(\vec{x}) \\ 1 \leq j \leq \dim \vec{\alpha}_i \end{array} \quad (5.71)$$

donde el subdominio $\Omega_{\alpha_{i,j}}$ previamente se ha asociado al parámetro indeterminado $\alpha_{i,j}$. Con ello, la formulación integral (5.43) resuelta mediante el vector de funciones solución definido por (5.61), se transforma al sistema discreto

$$\int_{\Omega_{\alpha_{i,j}}} r_i [\vec{u}(\vec{x}, \hat{\alpha})] dV = 0 \quad \begin{array}{l} 1 \leq i \leq \dim \vec{u}(\vec{x}) \\ 1 \leq j \leq \dim \vec{\alpha}_i \end{array} \quad (5.72)$$

Es importante señalar, que durante la selección de los subdominios, no es requisito evitar el solapamiento, así como no es necesario que en conjunto cubran enteramente al dominio.

3. Método de Galerkin. Mediante un planteamiento variacional, este método consiste en definir al vector de funciones pesadas como la primera variación del vector de funciones solución

$$\vec{\omega}(\vec{x}) \equiv \delta \vec{u}(\vec{x}) \quad \forall \vec{x} \in \Omega \quad (5.73)$$

por tanto, la formulación integral (5.43) se replantea como

$$\int_{\Omega} \delta \vec{u}(\vec{x}) \cdot \vec{r} [\vec{u}(\vec{x}, \hat{\alpha})] dV = 0 \quad (5.74)$$

y puesto que la primera variación de cada uno de los elementos del vector de funciones solución, el cual previamente se ha definido mediante (5.61), corresponde a

$$\delta u_k(\vec{x}) = \vec{\Phi}_k(\vec{x}) \cdot \delta \vec{\alpha}_k; \quad \forall \vec{x} \in \Omega \quad 1 \leq k \leq \dim \vec{u}(\vec{x}) \quad (5.75)$$

donde el vector $\delta \vec{\alpha}_k$ es un vector de variaciones arbitrarias; la formulación integral genera el siguiente sistema discreto

$$\int_{\Omega} \Phi_{i,j}(\vec{x}) r_i [\vec{u}(\vec{x}, \hat{\alpha})] dV = 0; \quad \begin{array}{l} 1 \leq i \leq \dim \vec{u}(\vec{x}) \\ 1 \leq j \leq \dim \vec{\alpha}_i \end{array} \quad (5.76)$$

En un sentido práctico, este método consiste en elegir al conjunto de funciones base del elemento k -ésimo del vector de funciones pesadas, de forma tal, que sea idéntico al conjunto de funciones base del elemento k -ésimo del vector de funciones solución. Por otro lado, aunque la formulación discreta anterior, es suficiente para evaluar a los parámetros indeterminados, puede utilizarse la integración por partes, con el objetivo de relajar las condiciones de admisibilidad del vector de funciones solución propuesto; y por supuesto, da la posibilidad de utilizar un conjunto de funciones base más simple en su construcción.

4. Método de los mínimos cuadrados. Este método, consiste en la minimización de la suma de cuadrados de los residuales del vector de funciones solución, evaluados en

cada uno de los puntos que conforman al dominio; con respecto a los parámetros indeterminados asociados. Es decir, en la minimización de la siguiente expresión parametrizada

$$\pi(\hat{\alpha}) \equiv \int_{\Omega} \vec{r} [\vec{u}(\vec{x}, \hat{\alpha})] \cdot \vec{r} [\vec{u}(\vec{x}, \hat{\alpha})] dV \quad (5.77)$$

misma que se puede obtener a través del principio de estacionaridad, el cual conduce a la construcción del siguiente sistema discreto

$$\int_{\Omega} \delta \vec{r} [\vec{u}(\vec{x}, \hat{\alpha})] \cdot \vec{r} [\vec{u}(\vec{x}, \hat{\alpha})] dV = 0 \quad (5.78)$$

y específicamente, para el caso en que la definición del vector de residuales, solamente incluya operadores diferenciales lineales, y considerando que el k -ésimo elemento del vector de funciones solución puede expresarse como la combinación lineal de un conjunto de funciones base, denotado por $\vec{\Phi}_k$; entonces el sistema discreto anterior, se reduce simplemente

$$\int_{\Omega} \mathbf{L}[\Phi_{i,j}(\vec{x})] r_i [\vec{u}(\vec{x}, \hat{\alpha})] dV = 0; \quad \begin{array}{l} 1 \leq i \leq \dim \vec{u}(\vec{x}) \\ 1 \leq j \leq \dim \vec{\alpha}_i \end{array} \quad (5.79)$$

Método de Ritz

El método de Ritz provee una solución aproximada, idéntica al método de Galerkin, debido a que en ambas se obtiene la misma formulación discretizada. Partiendo de un funcional, la diferencia solamente estriba en el orden de las etapas del procedimiento de resolución. Así, por el método de Galerkin, la secuencia de etapas necesarias para obtener una solución aproximada de un funcional, consiste en primero aplicar las condiciones de estacionaridad y enseguida obtener una discretización. En cambio por el método de Ritz, esta secuencia de etapas, se aplica de modo inverso.

De esta forma, considérese que un fenómeno físico, que se puede describir a través de un funcional, construido sobre un vector de funciones $\vec{u}(\vec{x})$ y sus derivadas $\mathbf{D}[\vec{u}(\vec{x})]$, denotado por

$$\Pi \equiv f(\vec{u}(\vec{x}), \mathbf{D}[\vec{u}(\vec{x})]) \quad (5.80)$$

Mediante el empleo del método de Ritz, es posible obtener una solución aproximada del comportamiento del fenómeno físico expresado por el funcional anterior. Primero, es necesario someterlo a un proceso de discretización, lo cual se puede lograr mediante la introducción de un vector de funciones definido como en (5.61); y así, obtener el siguiente funcional parametrizado

$$\Pi(\hat{\alpha}) \equiv f(\vec{u}(\vec{x}, \hat{\alpha}), \mathbf{D}[\vec{u}(\vec{x}, \hat{\alpha})]) \quad (5.81)$$

donde el conjunto de vectores de parámetros indeterminados $\hat{\alpha}$, se define como en (5.67) y (5.63). Enseguida, es necesario aplicar las condiciones de estacionaridad, lo que conduce al sistema discreto

$$\frac{\partial \Pi(\hat{\alpha})}{\partial \alpha_{i,j}} = 0; \quad \begin{array}{l} 1 \leq i \leq \dim \vec{u}(\vec{x}) \\ 1 \leq j \leq \dim \vec{\alpha}_i \end{array} \quad (5.82)$$

del cual es posible evaluar los parámetros indeterminados, mediante los cuales se define explícitamente el vector de funciones propuesto; y con esto, obtener una solución aproximada del comportamiento del fenómeno físico planteado inicialmente.

5.3. Formulación Discreta

5.3.1. Discretización para un elemento finito

La primer etapa del proceso del FEM, inicia con la forma integral de Galerkin

$$\mathbf{W} \equiv \int_{\Omega} \delta \vec{u}(\vec{x}) \cdot \vec{r} [\vec{u}(\vec{x})] dV = 0 \quad (5.83)$$

donde el residual se define mediante

$$r_k[\vec{u}(\vec{x})] \equiv \mathbf{L}_k[\vec{u}(\vec{x})] + f_k(\vec{x}) \quad 1 \leq k \leq \dim \vec{u}(\vec{x}) \quad (5.84)$$

La integral sobre el dominio completo Ω , es reemplazado por la suma de las integrales sobre los subdominios Ω^e

$$\mathbf{W} = \sum_{e=1}^n \mathbf{W}^e = \sum_{e=1}^n \int_{\Omega^e} \delta \vec{u}(\vec{x}) \cdot \vec{r} [\vec{u}(\vec{x})] dV = 0 \quad (5.85)$$

Posteriormente, en cada una de las formulaciones \mathbf{W}^e , la función aproximada $\vec{u}(\vec{x})$ es sustituida por una aproximación por subdominios

$$\vec{u}(\vec{x}) = \sum_{e=1}^n \vec{u}^e(\vec{x}) \quad \text{donde} \quad \vec{u}(\vec{x}) = \vec{u}^e(\vec{x}) \quad \text{para} \quad \vec{x} \in \Omega^e \quad (5.86)$$

y cada una de estas aproximaciones por subdominios, corresponde a una aproximación nodal descrita por

$$u_k^e(\vec{x}) = \vec{\phi}_k^e(\vec{x}) \cdot \vec{v}_k^e \quad \text{para} \quad \vec{x} \in \Omega^e \quad (5.87)$$

o en su forma variacional

$$\delta u_k^e(\vec{x}) = \vec{\phi}_k^e(\vec{x}) \cdot \delta \vec{v}_k^e \quad \text{para} \quad \vec{x} \in \Omega^e \quad (5.88)$$

Así, la formulación integral para el subdominio Ω^e expresada mediante el producto punto vectorial desarrollado

$$\mathbf{W}^e = \int_{\Omega^e} \delta \vec{u}^e(\vec{x}) \cdot \vec{r} [\vec{u}^e(\vec{x})] dV = \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \int_{\Omega^e} \delta u_k^e(\vec{x}) r_k [\vec{u}^e(\vec{x})] dV \quad (5.89)$$

se transforma a

$$\mathbf{W}^e = \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \delta \vec{v}_k^e \cdot \int_{\Omega^e} \vec{\phi}_k^e(\vec{x}) r_k [\vec{u}^e(\vec{x})] dV \quad (5.90)$$

incluyendo la definición del residual

$$\mathbf{W}^e = \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \delta \vec{v}_k^e \cdot \int_{\Omega^e} \left[\vec{\phi}_k^e(\vec{x}) \mathbf{L}_k [\vec{u}^e(\vec{x})] + \vec{\phi}_k^e(\vec{x}) f_k(\vec{x}) \right] dV \quad (5.91)$$

En muchas ocasiones los operadores diferenciales $\mathbf{L}_k [\vec{u}(\vec{x})]$ pueden romperse o dividirse, como la suma de varios operadores diferenciales cuya característica principal, corresponde a que en forma parcial, operan linealmente al menos sobre uno de los componentes del campo vectorial de funciones $\vec{u}(\vec{x})$,

$$\mathbf{L}_k [\vec{u}(\vec{x})] = \sum_{s=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \mathbf{L}_k^{(s)} [\vec{u}(\vec{x}) : u_s(\vec{x})] \quad (5.92)$$

La notación implementada para el operador diferencial $\mathbf{L}_k^{(s)} [\vec{u}(\vec{x}) : u_s(\vec{x})]$, indica que actúa al menos linealmente sobre el componente $u_s(\vec{x})$ del vector de funciones $\vec{u}(\vec{x})$. Con esto

$$\mathbf{W}^e = \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \delta \vec{v}_k^e \cdot \int_{\Omega^e} \left[\vec{\phi}_k^e(\vec{x}) \sum_{s=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \mathbf{L}_k^{(s)} [\vec{u}^e(\vec{x}) : u_s^e(\vec{x})] + \vec{\phi}_k^e(\vec{x}) f_k(\vec{x}) \right] dV \quad (5.93)$$

retirando el operador de suma fuera de la integral

$$\mathbf{W}^e = \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \sum_{s=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \delta \vec{v}_k^e \cdot \int_{\Omega^e} \left[\vec{\phi}_k^e(\vec{x}) \mathbf{L}_k^{(s)}[\vec{u}^e(\vec{x}) : u_s^e(\vec{x})] + \vec{\phi}_k^e(\vec{x}) f_k(\vec{x}) \right] dV \quad (5.94)$$

Sustituyendo cada uno de los componentes $u_s(\vec{x})$, por una interpolación nodal como se definió en (5.87)

$$\mathbf{W}^e = \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \sum_{s=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \delta \vec{v}_k^e \cdot \int_{\Omega^e} \left[\vec{\phi}_k^e(\vec{x}) \mathbf{L}_k^{(s)}[\vec{u}^e(\vec{x}) : \vec{\phi}_s^e(\vec{x}) \cdot \vec{v}_s^e] + \vec{\phi}_k^e(\vec{x}) f_k(\vec{x}) \right] dV \quad (5.95)$$

lo cual conduce a

$$\mathbf{W}^e = \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \sum_{s=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \delta \vec{v}_k^e \cdot \int_{\Omega^e} \left[\vec{\phi}_k^e(\vec{x}) \mathbf{L}_k^{(s)}[\vec{u}^e(\vec{x}) : \vec{\phi}_s^e(\vec{x})] \cdot \vec{v}_s^e + \vec{\phi}_k^e(\vec{x}) f_k(\vec{x}) \right] dV \quad (5.96)$$

donde el operador diferencial $\mathbf{L}_k^{(s)}[\vec{u}^e(\vec{x}) : \vec{\phi}_s^e(\vec{x})]$, es ahora de naturaleza vectorial

$$\mathbf{L}_k^{(s)}[\vec{u}^e(\vec{x}) : \vec{\phi}_s^e(\vec{x})] = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_k^{(s)}[\vec{u}^e(\vec{x}) : \phi_{s,1}^e(\vec{x})] \\ \mathbf{L}_k^{(s)}[\vec{u}^e(\vec{x}) : \phi_{s,2}^e(\vec{x})] \\ \mathbf{L}_k^{(s)}[\vec{u}^e(\vec{x}) : \phi_{s,3}^e(\vec{x})] \\ \vdots \\ \mathbf{L}_k^{(s)}[\vec{u}^e(\vec{x}) : \phi_{s,m}^e(\vec{x})] \end{bmatrix} \quad (5.97)$$

Y así, la formulación integral se puede expresar como

$$\begin{aligned} \mathbf{W}^e = \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \sum_{s=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \delta \vec{v}_k^e \cdot \int_{\Omega^e} \vec{\phi}_k^e(\vec{x}) \mathbf{L}_k^{(s)}[\vec{u}^e(\vec{x}) : \vec{\phi}_s^e(\vec{x})] dV \cdot \vec{v}_s^e \\ + \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \delta \vec{v}_k^e \cdot \int_{\Omega^e} \vec{\phi}_k^e(\vec{x}) f_k(\vec{x}) dV \end{aligned} \quad (5.98)$$

Sí se definen al conjunto de matrices \mathbf{m}_{ks}^e mediante

$$[\mathbf{m}_{ks}^e]_{ij} \equiv \int_{\Omega^e} \phi_{k,i}^e(\vec{x}) \mathbf{L}_k^{(s)}[\vec{u}^e(\vec{x}) : \phi_{s,j}^e(\vec{x})] dV \quad (5.99)$$

y al conjunto de vectores \vec{g}_k^e como

$$[\vec{g}_k^e]_i \equiv \int_{\Omega^e} \phi_{k,i}^e(\vec{x}) f_k(\vec{x}) dV \quad (5.100)$$

se consigue

$$\mathbf{W}^e = \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \sum_{s=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \delta \vec{v}_k^e \cdot \mathbf{m}_{ks}^e \cdot \vec{v}_s^e + \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \delta \vec{v}_k^e \cdot \vec{g}_k^e \quad (5.101)$$

Esta última expresión corresponde a la formulación discreta para el subdominio Ω^e , obtenida mediante una formulación integral tipo Galerkin, que utiliza una aproximación nodal por subdominios. Es muy común que a las matrices \mathbf{m}_{ks}^e , se les denomine matrices de rigidez local, y al conjunto de vectores \vec{g}_k^e , se denoten como vectores de carga local; debido al origen del FEM, cuya aplicación inició en el diseño de estructuras rígidas. Por supuesto, en este caso se ha partido de un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales; sin embargo, si la descripción matemática requiriera de un funcional, entonces el método consistiría en aplicar las técnicas de discretización numéricas y de dominio, descritas previamente; y enseguida utilizar el principio de estacionaridad, lo cual conduciría a la descripción discreta deseada.

No menos importante resulta comentar, que sí existe la posibilidad de introducir un relajamiento a la formulación integral fuerte mediante integración por partes, es necesario llevar a cabo tal procedimiento. Debido a la complejidad de la expresión discreta resultante, este procedimiento generalizado se ha omitido. Empero, se puede manifestar que el resultado implicaría la inclusión de una integral de contorno, cuya discretización podría tanto adicionarse a las matrices de rigidez como a los vectores de carga, todo dependiendo de las condiciones de contorno que implique tal procedimiento en reducir. Sin embargo, en un intento de dar una explicación a tal procedimiento, considérese la formulación integral tipo Galerkin para el elemento finito definido por el subdominio Ω^e y el residual definido explícitamente

$$\mathbf{W}^e = \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \int_{\Omega^e} \delta u_k^e(\vec{x}) (\mathbf{L}_k[\vec{u}^e(\vec{x})] + f_k(\vec{x})) dV \quad (5.102)$$

Bajo este punto de partida, el relajamiento mediante integración por partes conduciría a

una formulación integral débil similar a

$$\begin{aligned} \mathbf{W}^e = & \sum_{k=1}^{\dim \bar{u}(\bar{x})} \int_{\Omega^e} \mathbf{P}_k[\delta u_k^e(\bar{x})] \mathbf{Q}_k[\bar{u}^e(\bar{x})] dV \\ & + \sum_{k=1}^{\dim \bar{u}(\bar{x})} \int_{\Omega^e} \delta u_k^e(\bar{x}) f_k(\bar{x}) dV \\ & + \sum_{k=1}^{\dim \bar{u}(\bar{x})} \int_{\partial\Omega^e} \delta u_k^e(\bar{x}) \mathbf{R}_k[\bar{u}^e(\bar{x})] dS \end{aligned} \quad (5.103)$$

Por supuesto, se ha expresado una integración por partes de una sola etapa, lo cual es muy común dentro de las formulaciones integrales asociadas a planteamientos físicos. Ahora, considérese que el operador diferencial $\mathbf{P}_k[\delta u_k^e(\bar{x})]$ es un operador lineal, y asimismo el operador diferencial $\mathbf{Q}_k[\bar{u}^e(\bar{x})]$ puede romperse bajo un esquema similar tal como se hizo con el operador diferencial $\mathbf{L}_k[\bar{u}^e(\bar{x})]$. Introduciendo una aproximación nodal para cada uno de los elementos del vector de funciones $\bar{u}(\bar{x})$, sin mas preámbulo se obtiene

$$\begin{aligned} \mathbf{W}^e = & \sum_{k=1}^{\dim \bar{u}(\bar{x})} \sum_{s=1}^{\dim \bar{u}(\bar{x})} \delta \vec{v}_k^e \cdot \mathbf{m}_{\mathbf{k}s}^e \cdot \vec{v}_s^e + \sum_{k=1}^{\dim \bar{u}(\bar{x})} \delta \vec{v}_k^e \cdot \vec{g}_k^e \\ & + \sum_{k=1}^{\dim \bar{u}(\bar{x})} \int_{\partial\Omega^e} \delta u_k^e(\bar{x}) \mathbf{R}_k[\bar{u}^e(\bar{x})] dS \end{aligned} \quad (5.104)$$

con la única diferencia, que ahora la matriz de rigidez se define mediante

$$[\mathbf{m}_{\mathbf{k}s}^e]_{ij} \equiv \int_{\Omega^e} \mathbf{P}_k[\phi_{k,i}^e(\bar{x})] \mathbf{Q}_k^{(s)}[\bar{u}^e(\bar{x}) : \phi_{s,j}^e(\bar{x})] dV \quad (5.105)$$

Para la integral de superficie pueden acontecer dos situaciones, después de introducir las condiciones de contorno (sí es posible), los operadores diferenciales $\mathbf{R}_k[\bar{u}^e(\bar{x})]$ puedan tomar una forma independiente del vector de funciones $\bar{u}(\bar{x})$

$$\mathbf{R}_k[\bar{u}^e(\bar{x})] \equiv p_k(\bar{x}) \quad (5.106)$$

Bajo esta situación, la expresión (5.104) se modifica a

$$\mathbf{W}^e = \sum_{k=1}^{\dim \bar{u}(\bar{x})} \sum_{s=1}^{\dim \bar{u}(\bar{x})} \delta \vec{v}_k^e \cdot \mathbf{m}_{\mathbf{k}s}^e \cdot \vec{v}_s^e + \sum_{k=1}^{\dim \bar{u}(\bar{x})} \delta \vec{v}_k^e \cdot [\vec{g}_k^e + \vec{h}_k^e] \quad (5.107)$$

donde el conjunto de vectores \vec{h}_k^e se define como

$$[\vec{h}_k^e]_i \equiv \int_{\partial\Omega^e} \phi_{k,i}^e(\bar{x}) p_k(\bar{x}) dV \quad (5.108)$$

O bien, ni introduciendo condiciones de contorno pueda eliminarse la dependencia del vector de funciones $\vec{u}(\vec{x})$. Con lo cual se recurre a la ruptura del operador diferencial $\mathbf{R}_k[\vec{u}^e(\vec{x})]$ bajo una descripción similar al operador diferencial $\mathbf{L}_k[\vec{u}^e(\vec{x})]$. Con esto se tiene que la expresión (5.104) se modifica a

$$\mathbf{W}^e = \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \sum_{s=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \delta \vec{v}_k^e \cdot [\mathbf{m}_{ks}^e + \mathbf{h}_{ks}^e] \cdot \vec{v}_s^e + \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \delta \vec{v}_k^e \cdot \vec{g}_k^e \quad (5.109)$$

donde el conjunto de matrices \mathbf{h}_{ks}^e se definen mediante la expresión

$$[\mathbf{h}_{ks}^e]_{ij} \equiv \int_{\partial \Omega^e} \phi_{k,i}^e(\vec{x}) \mathbf{R}_k^{(s)}[\vec{u}^e(\vec{x}) : \phi_{s,j}^e(\vec{x})] dS \quad (5.110)$$

5.3.2. Ensamble

La segunda etapa de proceso del FEM corresponde al proceso de ensamble, que básicamente consiste en realizar la suma de todas las formulaciones discretas obtenidas para cada subdominio. Esto es

$$\mathbf{W} = \sum_{e=1}^n \mathbf{W}^e = \sum_{e=1}^n \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \sum_{s=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \delta \vec{v}_k^e \cdot \mathbf{m}_{ks}^e \cdot \vec{v}_s^e + \sum_{e=1}^n \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \delta \vec{v}_k^e \cdot \vec{g}_k^e = 0 \quad (5.111)$$

Sin embargo, surge un pequeño inconveniente debido a que en la descripción obtenida para cada formulación \mathbf{W}^e , las variables nodales $\vec{v}_k^e = \{v_{k,1}^e \quad v_{k,2}^e \quad \dots \quad v_{k,m}^e\}$, presentan un etiquetado local definido sobre el subdominio donde se requiere. Esto ocasiona ambigüedad en la forma de definir a cada una de las variables nodales.

Tómese como ejemplo la malla ilustrada mediante la figura 5.9, donde por cada nodo existe una variable nodal o grado de libertad. La variable nodal referenciada mediante $v_{k,2}^7$ localizada dentro del subdominio Ω^7 , también se denomina como $v_{k,1}^{10}$ y $v_{k,2}^{13}$, dentro del subdominio Ω^{10} y Ω^{13} respectivamente. Una forma de simplificar esta problema, consiste en identificar unívocamente a cada una de estas variables nodales etiquetadas localmente con una variable nodal etiquetada globalmente. En este caso muy particular, el esquema muestra la propuesta de identificar a esta variable nodal mediante v_9^g .

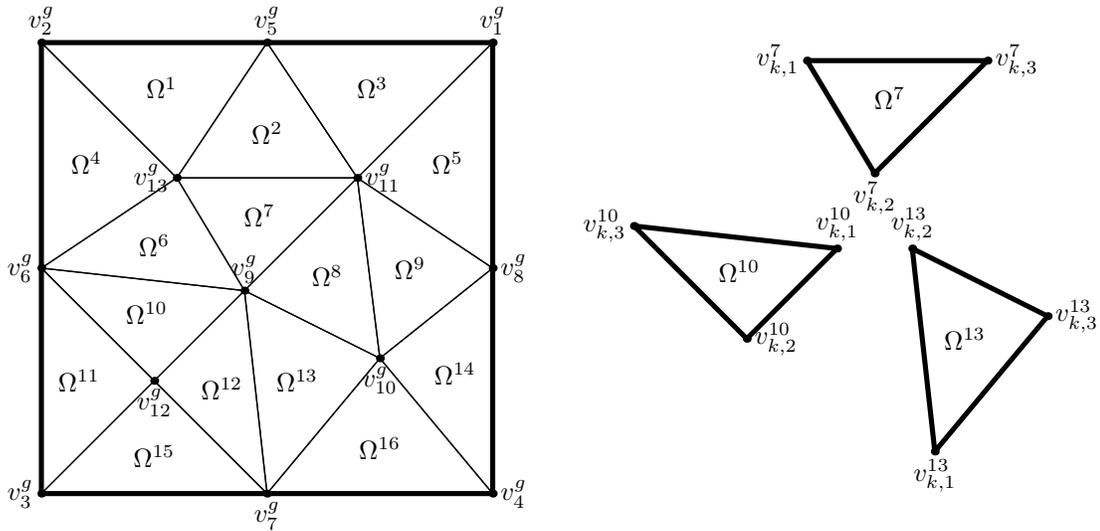


Figura 5.9: Etiquetado global (izquierda); y etiquetado local (derecha).

Considérese que el vector \vec{v}^g esta conformado por todas la variables nodales (etiquetadas globalmente). Una manera concisa de transformar un etiquetado local a un etiquetado global puede darse mediante una transformación vectorial. Por tanto, para el caso de los subdominios Ω^7 , Ω^{10} y Ω^{13} las matrices de transformación requeridas son la siguientes:

$$\mathbf{T}_k^7 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.112a)$$

$$\mathbf{T}_k^{10} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.112b)$$

$$\mathbf{T}_k^{13} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.112c)$$

puesto que permiten satisfacer la relación generalizada

$$\vec{v}_k^e = \mathbf{T}_k^e \cdot \vec{v}^g \quad (5.113)$$

Sí la matriz \mathbf{t}_k^e se considera la forma transpuesta de la matriz \mathbf{T}_k^e , entonces la relación a

satisfacer se expresa en la forma alternativa

$$\vec{v}_k^e = \vec{v}^g \cdot \mathbf{t}_k^e \quad (5.114)$$

Bajo esta premisa, el proceso de ensamble se define mediante

$$\begin{aligned} \mathbf{W} = \sum_{e=1}^n \mathbf{W}^e &= \sum_{e=1}^n \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \sum_{s=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \delta \vec{v}^g \cdot \mathbf{t}_k^e \cdot \mathbf{m}_{ks}^e \cdot \mathbf{T}_s^e \cdot \vec{v}^g \\ &+ \sum_{e=1}^n \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \delta \vec{v}^g \cdot \mathbf{t}_k^e \cdot \vec{g}_k^e = 0 \end{aligned} \quad (5.115)$$

Definiendo a la matriz global de rigidez \mathbf{M}_{ks} y al vector global de carga \vec{G} como las siguientes sumas

$$\mathbf{M} = \sum_{e=1}^n \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \sum_{s=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \mathbf{t}_k^e \cdot \mathbf{m}_{ks}^e \cdot \mathbf{T}_s^e \quad \vec{G} = \sum_{e=1}^n \sum_{k=1}^{\dim \vec{u}(\vec{x})} \mathbf{t}_k^e \cdot \vec{g}_k^e \quad (5.116)$$

La expresión discretizada deseada corresponde a

$$\mathbf{W} = \delta \vec{v}^g \cdot \mathbf{M} \cdot \vec{v}^g + \delta \vec{v}^g \cdot \vec{G} = 0 \quad (5.117)$$

o en su forma simplificada

$$\mathbf{W} = \delta \vec{v}^g \cdot \left[\mathbf{M} \cdot \vec{v}^g + \vec{G} \right] = 0 \quad (5.118)$$

Puesto que los elementos del conjunto de vectores $\delta \vec{v}^g$, son variaciones arbitrarias, la única forma de satisfacer la expresión anterior, es que se cumpla

$$\mathbf{M} \cdot \vec{v}^g + \vec{G} = 0 \quad (5.119)$$

Esta expresión corresponde a un conjunto de ecuaciones algebraicas, cuya solución es el conjunto de vectores \vec{v}^g , conformados por las variables nodales que satisfacen a la aproximación por elemento finito.

Aunque se partió de una formulación integral fuerte para exponer el proceso de ensamble dentro del FEM, un procedimiento similar también debe ser aplicado en el caso de partir de una formulación integral débil. Esta elección no discrepa en la forma del sistema de ecuaciones algebraicas resultantes.

5.4. Técnicas Computacionales

5.4.1. Almacenamiento

Organización de las matrices globales de rigidez

El primer reto que surge para el FEM, al igual que en otras técnicas numéricas, corresponde al almacenamiento de datos que conforman a la matriz global de rigidez \mathbf{M} ,

$$\mathbf{M} \cdot \vec{v}^g + \vec{G} = 0 \quad (5.120)$$

Dentro del FEM es muy común que la matriz \mathbf{M} sea muy dispersa; es decir, que la mayoría de sus entradas sean cero. La admisión de esta clase de matrices dentro de un código computacional, implica un alto consumo de memoria de almacenamiento, así como un excesivo computo de cálculos no requeridos. Una solución ante esta problemática, consiste en la búsqueda de un etiquetado global de nodos, que permita organizar los datos distintos de cero alrededor de la diagonal principal; esto es, obtener una matriz banda.

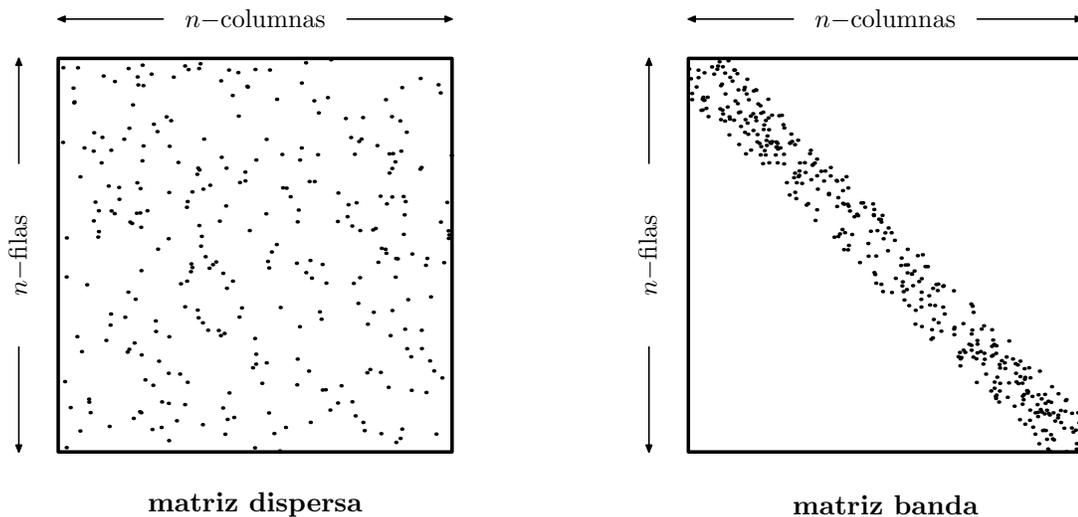


Figura 5.10: Esquema de una matriz dispersa y una matriz banda.

Matriz banda

La utilización de una matriz banda, ofrece diversas ventajas, debido a que computacionalmente solo es necesario almacenar la diagonal principal y las diagonales secundarias adyacentes que presentan datos distintos de cero. Con esto los requerimientos de memoria de datos, disminuyen notablemente, y consecuentemente el número de ejecución de cálculos se aminora también. Con el propósito de ejemplificar lo expresado anteriormente, considérese la siguiente matriz banda:

$$\mathbf{d} = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_{42} & d_{43} & d_{44} & d_{45} & d_{46} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d_{53} & d_{54} & d_{55} & d_{56} & d_{57} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{64} & d_{65} & d_{66} & d_{67} & d_{68} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_{75} & d_{76} & d_{77} & d_{78} & d_{79} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{86} & d_{87} & d_{88} & d_{89} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{97} & d_{98} & d_{99} \end{pmatrix} \quad (5.121)$$

Computacionalmente, solo basta con almacenar el siguientes conjunto de datos

$$\mathbf{d}' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & d_{11} & d_{12} & d_{13} \\ 0 & d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} \\ d_{42} & d_{43} & d_{44} & d_{45} & d_{46} \\ d_{53} & d_{54} & d_{55} & d_{56} & d_{57} \\ d_{64} & d_{65} & d_{66} & d_{67} & d_{68} \\ d_{75} & d_{76} & d_{77} & d_{78} & d_{79} \\ d_{86} & d_{87} & d_{88} & d_{89} & 0 \\ d_{97} & d_{98} & d_{99} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.122)$$

Bajo este esquema, definitivamente la matriz \mathbf{d} solo tendrá una existencia virtual dentro de las técnicas computacionales, puesto que los códigos de programación no tendrán

que lidiar con ella. Sin embargo, debe implementarse un conjunto de reglas de transformación, las cuales permitan conectar ambas representaciones matriciales. Debido a que las técnicas numéricas del FEM están basadas sobre una representación matricial como la expresada para la matriz \mathbf{d} .

Primero, es necesario definir el ancho de la semibanda (W_{SB}). Esta corresponde a la distancia máxima que existe entre un elemento de la diagonal y un elemento distinto de cero ubicado sobre la misma fila. Considerando que la matriz \mathbf{M} es dimensión $n \times n$, entonces

$$W_{SB}(\mathbf{M}) = \text{máx}[W_k(\mathbf{M})] \quad \text{con} \quad 1 \leq k \leq n \quad (5.123a)$$

donde

$$W_i(\mathbf{M}) = \text{máx}[\vartheta(\mathbf{M}, i, j)] \quad \begin{array}{l} 1 \leq i \leq n \\ 1 \leq j \leq n \end{array} \quad (5.123b)$$

y

$$\vartheta(\mathbf{M}, i, j) = \begin{cases} 0 & \text{sí } M_{ij} = 0 \\ \text{abs}(j - i) + 1 & \text{sí } M_{ij} \neq 0 \end{cases} \quad (5.123c)$$

Definido el ancho de la semibanda de la matriz \mathbf{M} , la conexión que existe con la matriz \mathbf{M}' esta dada por la relación

$$M'_{ik} = M_{ij} \quad \text{con} \quad k = (j - i) + W_{SB}(\mathbf{M}) \quad (5.124)$$

siempre y cuando se satisfaga la restricción $1 \leq k \leq 2[W_{SB}(\mathbf{M})] + 1$. Por supuesto, los elementos de la matriz \mathbf{M}' que no se contemplan en esta relación, se consideran nulos.

En el FEM no se requiere que el proceso de ensamble este concluido, para iniciar el proceso de evaluación del ancho de la semibanda. Solo se necesita conocer la naturaleza de la conexión que existe entre la numeración local y la numeración global de las variables nodales, para poder determinar el ancho de la semibanda de la matriz \mathbf{M} . Y así dimensionar a la matriz \mathbf{M}' , misma que servirá como la entidad que represente a los datos almacenados de la matriz global de rigidez \mathbf{M} .

Optimización de la conectividad elemental

La numeración global designada a cada uno de los nodos, que conforman los elementos de la malla del dominio, es de suma importancia. Debido, a que de ella depende la dispersión de la matriz global del sistema; y por tanto, el ancho de la semibanda de la matriz. Puesto que la dispersión de la matriz global del sistema, está asociada a la dispersión de la conectividad elemental. La búsqueda de una numeración global, que permita disminuir la dispersión de la conectividad elemental, se traduce en búsqueda de una numeración global que permita disminuir la dispersión global del sistema; sin embargo, esto es impráctico desde la perspectiva de una implementación computacional.

Aún así, existe una manera de obtener una numeración global óptima, la cuál consiste en describir la malla del dominio, a través de un grafo. Sí el grafo asociado a la malla del dominio es $G(V, E)$, el cuál es de dimensión n ; y la función de enumeración global es $f : V \rightarrow \{1, 2, 3, \dots, n\}$. Entonces una formulación equivalente a la búsqueda de una numeración global óptima, corresponde a disminuir la dispersión de las adyacencias de cada nodo; esto es, disminuir el ancho de banda $B(G)$ del grafo asociado con la función $f(u)$. Puesto que el ancho de banda, se define como

$$B(G) \equiv \max_{(u,v) \in E(G)} |f(u) - f(v)| \quad (5.125)$$

así la solución del problema, es encontrar una función $f^*(u)$ de forma tal que garantice que el ancho de banda $B^*(G)$, sea el mínimo de todos los posibles generados por las distintas funciones de enumeración

$$f^*(u) = \{f(u) \mid B^*(G) = \min B(G)\} \quad (5.126)$$

Para resolver este problema existen una serie de algoritmos, entre los cuales destacan el algoritmo de Cuthill-McKee (Cuthill y McKee, 1969) y el de Gibbs-Poole-Stockmeyer (Gibbs y col., 1976). Aunque éste último, ha probado ser mas eficiente, ocho veces más rápido (Lim y col., 2004), que el anterior. Este algoritmo, se basa sobre la estructura de nivel del grafo. Una descripción informal es como sigue. Se elige un nodo raíz, que

presente el menor número de grados de libertad, para generar un árbol del grafo. Enseguida, en los nodos pseudoperiféricos¹ del árbol generado, se elige aquel nodo que tenga el menor grado de libertad, y se construye sobre él, un nuevo árbol del grafo, se compara el número de niveles con el árbol anterior, y sí contiene un número igual o menor se enumera al nodo como el primer nodo en la lista de permutaciones, la cuál contendrá la nueva numeración nodal del grafo. Para los siguientes nodos de la lista de permutaciones, se procede igual, y se va enumerando conforme se va iterando el algoritmo.

A través del algoritmo de Gibbs-Poole-Stockmeyer, es posible optimizar la conectividad elemental de la malla, y asegurar la construcción de una matriz global del sistema, que presente el menor ancho de semibanda. Y así, manejar la matriz global del sistema como una matriz banda, lo cuál eficientizará los procesos computacionales con respecto a tiempo y uso de memoria.

Método frontal

Este método trata de evitar el ensamble de las matrices globales de rigidez. Consiste básicamente en ensamblar la menor cantidad de elementos y eliminar las variables al mismo tiempo, formando matrices de menor tamaño. Esto es, inmediatamente después de que los coeficientes de una ecuación se ensamblan a partir de la contribución de todos los elementos relevantes, o que inciden sobre este coeficiente, la variable de este puede eliminarse. Como resultado, la matriz completa de toda la estructura jamás se forma. A diferencia del método que emplea matrices banda, la adecuada enumeración de los elementos es de gran importancia, no así la enumeración global de los nodos ya que estos son tratados por su numeración local. Como primer medida, esta característica del método frontal, lo hace mas versátil ya que como la cantidad de elementos siempre es menor que la cantidad de nodos, independientemente de la forma de la estructura, siempre se tendrá mayor facilidad para enumerar los elementos que los nodos.

¹Se le denomina nodo pseudoperiférico, aquel nodo cuya excentricidad sea lo más aproximada al diámetro del grafo.

Sin embargo, presenta el inconveniente de no permitir una estructura modular de los procesos que se involucran en el FEM, puesto que entremezcla al proceso de ensamble y solución de variables; restándole claridad al código computacional por implementar.

5.4.2. Introducción de condiciones fronteras

Cuando alguna condición frontera, no se elimina dentro del proceso de relajación de las condiciones de contorno que involucra una formulación débil. Es necesario implementar un proceso que permita incluirlas. Lo más sutil, corresponde a integrarlas como una formulación integral. Considérese, la condición frontera

$$\mathbf{C}_k[\vec{u}(\vec{x})] + g_k(\vec{x}) = 0 \quad \forall \vec{x} \in \partial\Omega_k \quad (5.127)$$

Suponiendo que la formulación integral fuerte o débil, esta representada por \mathbf{W} , ésta se debe sustituir por otra \mathbf{W}^* , la cual exprese

$$\mathbf{W}^* = \mathbf{W} + \int_{\partial\Omega_k} [\mathbf{C}_k[\vec{u}(\vec{x})] + g_k(\vec{x})] dS = 0 \quad (5.128)$$

Luego la integral de contorno, debe someterse a un proceso de discretización numérica y de dominio, con el propósito de incorporarla al sistema de ecuaciones algebraicas.

Sin embargo, cuando la condición frontera corresponde a simplemente una prescripción de carácter

$$u_k(\vec{x}) = g_k(\vec{x}) \quad \forall \vec{x} \in \partial\Omega_k \quad (5.129)$$

no existe necesidad de someterla a un proceso de integración en la formulación variacional. Debido a que directamente es posible incluirla dentro del sistema de ecuaciones algebraicas. Solo basta con evaluarla en los nodos de la malla, que están definidos dentro de la región de contorno $\partial\Omega_k$, y asignar los resultados a las variables nodales correspondientes.

Las condiciones de fronteras en su forma discretizada pueden ser introducidos al sistema algebraico por varios métodos:

Utilizando un número grande

La matriz M es ensamblada sin importar que condiciones fronteras deben satisfacerse, y enseguida, cada valor especificado \tilde{v}_k^g de la variable desconocida v_k^g debe ser introducido como sigue:

- El término M_{kk} es reemplazado por $M_{kk} + \alpha$ donde α es un número bastante grande con respecto a todos los otros términos de la misma fila, M_{kj} . Al cumplirse $M_{kk} + \alpha \approx \alpha$, la correspondiente variable desconocida x_k^g dentro de la misma fila necesariamente se vuelve despreciable con respecto a todos los valores de las otras variables desconocidas.
- A todos los términos del vector \vec{G} le es sustraído el valor $M_{ik}\tilde{v}_k^g$, con esto el vector \vec{G} se transforma a \vec{G}^* donde $G_i^* = G_i - M_{ik}\tilde{v}_k^g$. Esta acción puede mostrarse como sigue, para la fila i se tiene

$$\begin{aligned} \text{antes:} \quad & M_{i1}v_1^g + M_{i2}v_2^g + \cdots + M_{ik}\tilde{v}_k^g + \cdots + M_{in}v_n^g = G_i \\ \text{después:} \quad & M_{i1}v_1^g + M_{i2}v_2^g + \cdots + M_{ik}x_k^g + \cdots + M_{in}v_n^g = G_i - M_{ik}\tilde{v}_k^g \end{aligned} \quad (5.130)$$

Puesto que $M_{ik}x_k^g$ es despreciable con respecto a los otros términos, la ecuación modificada puede ser idéntica a la ecuación no modificada, con una apropiada elección de α . Para la ecuación k

$$\begin{aligned} \text{antes:} \quad & M_{k1}v_1^g + M_{k2}v_2^g + \cdots + M_{kk}\tilde{v}_k^g + \cdots + M_{kn}v_n^g = R_k \\ \text{después:} \quad & M_{k1}v_1^g + M_{k2}v_2^g + \cdots + \alpha x_k^g + \cdots + M_{kn}v_n^g = -M_{kk}\tilde{v}_k^g \end{aligned} \quad (5.131)$$

Sustrayendo la ecuación modificada de la ecuación no modificada

$$M_{kk}\tilde{v}_k^g - \alpha x_k^g = R_k + M_{kk}\tilde{v}_k^g \quad (5.132)$$

se tiene $R_k = -\alpha x_k^g$, donde R_k es la reacción correspondiente al valor especificado. Este método es muy simple de codificar y dar después de la solución, todas las variables desconocidas y las reacciones sin pérdida de precisión. La matriz de los coeficientes conserva la simetría puesto que sólo la diagonal es modificada.

Limpiando filas y columnas

En este método el vector de carga \vec{G} es modificado como en el caso previo para todos los valores especificados \tilde{v}_k^g de las variables desconocidas v_k^g , excepto para G_k el cual es reemplazado por \tilde{v}_k^g . Además, la columna k y la fila k son *limpiadas* (sus términos se consideran nulos); a excepción del término M_{kk} que es reemplazado por 1. Esto, elimina la ecuación k del sistema sin cambiar el tamaño y la simetría de la matriz \mathbf{M} .

Suprimiendo las ecuaciones con los valores conocidos

Este método requiere de una completa reestructuración de la matriz \mathbf{M} . El vector de carga es modificado como en los dos casos previos, pero la fila k y la columna k son eliminadas completamente, reduciendo el tamaño de la matriz \mathbf{M} . Para evitar esta costosa manipulación de la matriz, el proceso de ensamble es modificado para prevenir la construcción de tales ecuaciones innecesarias.

5.4.3. Integración numérica

La integración numérica es una operación frecuente en las técnicas computacionales. Obtener la primitiva de una función puede ser complicado, incluso imposible. De hecho muchas funciones se definen a partir de integrales que no pueden calcularse de manera exacta, como pueden ser la función de error, las funciones logaritmo y seno integral o la función gamma de Euler, por citar algunos ejemplos. Por otro lado, cuando únicamente se conoce el valor de la función en un conjunto de puntos (x_i, f_i) , como ocurre con los resultados de un experimento o de simulaciones numéricas, sus integrales solo se pueden obtener numéricamente, lo cual motiva aún más la necesidad de poder obtener derivadas e integrales a partir de conjuntos discretos de datos.

Aunque el término integración numérica cubre varios aspectos distintos en el campo del cálculo numérico, como la evaluación de integrales o la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias, aquí solo se empleará para referirse a la evaluación numérica de integrales definidas, también conocido como cuadratura numérica. Este término de cua-

dratura hace remembranza a la técnica más elemental para hallar el área debajo de una función: dibujar la misma en papel cuadrulado y contar el número de cuadrados bajo la curva. Los algoritmos de cuadratura modernos son mucho más avanzados, modificando adaptivamente el paso de integración durante la evaluación de la integral.

Las técnicas de integración numérica dentro del FEM son de suma importancia, debido a la propia naturaleza del método, que se cimienta sobre formulaciones integrales. De hecho, los elementos que conforman las matrices locales de rigidez o los vectores locales de carga, corresponde a integrales sobre dominio

$$\int_{\Omega^e} \mathbf{P}_k[\phi_{k,i}^e(\vec{x})] \mathbf{Q}_k^{(s)}[\vec{u}^e(\vec{x}) : \phi_{s,j}^e(\vec{x})] dV \quad (5.133)$$

o integrales sobre contorno

$$\int_{\partial\Omega^e} \phi_{k,i}^e(\vec{x}) \mathbf{R}_k^{(s)}[\vec{u}^e(\vec{x}) : \phi_{s,j}^e(\vec{x})] dS \quad (5.134)$$

que requieren ser evaluadas. Por tanto, es un requisito indispensable la utilización de integración numérica dentro del FEM.

Integración numérica unidimensional

Método de Gauss. En este método, un conjunto de pesos w_k y puntos de integración x_k donde $1 \leq k \leq n$, se eligen de forma tal que integren exactamente polinomios de grado $m \leq 2n - 1$. Considérese la siguiente fórmula

$$\int_a^b f(r) dr = \sum_{k=1}^n w_k f(x_k) \quad (5.135)$$

el conjunto de coeficientes pesos w_k y coordenadas x_k , son determinados mediante la integración exacta del siguiente polinomio de grado $2n - 1$

$$f(r) = \sum_{i=1}^{2n} \alpha_i r^{2i-1} \quad (5.136)$$

sustituyendo este polinomio (5.136) en el miembro izquierdo de la expresión (5.135)

$$\int_a^b f(r) dx = \sum_{i=1}^{2n} \frac{\alpha_i}{2i} r^{2i} \Big|_a^b \quad (5.137)$$

y ahora sustituyendo el polinomio (5.136) en el lado derecho de la expresión (5.135)

$$\sum_{k=1}^n w_k f(x_k) = \sum_{k=1}^n w_k \sum_{i=1}^{2n} \alpha_i x_k^{2i-1} = \sum_{i=1}^{2n} \alpha_i \sum_{k=1}^n w_k x_k^{2i-1} \quad (5.138)$$

con esto

$$\sum_{i=1}^{2n} \alpha_i \sum_{k=1}^n w_k x_k^{2i-1} = \sum_{i=1}^{2n} \frac{\alpha_i}{2^i} r^{2i} \Big|_a^b \quad (5.139)$$

Puesto que los coeficientes α_i son arbitrarios, la relación anterior se satisface cuando se cumple

$$\sum_{k=1}^n w_k x_k^{2i-1} = \frac{1}{2^i} r^{2i} \Big|_a^b \quad 1 \leq i \leq 2n \quad (5.140)$$

Así, los coeficientes w_k y x_i son determinados a través de la resolución del anterior sistema de ecuaciones algebraicas. Y puedan ser utilizados en la formulación (5.135), para evaluar una integral unidimensional, en forma numérica.

Método de Newton-Cotes. En este método, los puntos de integración son especificados *a priori*, así solamente los coeficientes pesos w_k quedan por determinar; de forma tal que la formulación

$$\int_a^b f(r) dr = \sum_{k=1}^n w_k f(x_k) \quad (5.141)$$

integra exactamente un polinomio de grado $n - 1$. En el método de Newton-Cotes, los puntos x_k son espaciados regularmente

$$x_k = (b - a) \frac{k - 1}{n - 1} + a \quad 1 \leq k \leq n \quad (5.142)$$

Para calcular los coeficientes w_k , éste método utiliza un polinomio de Lagrange de grado $n - 1$ que toma los valores en todos los puntos de integración x_k . Las fórmulas de Lagrange están definidas como

$$f(r) = \sum_{k=1}^n N_k(r) f(x_k) \quad \text{donde} \quad N_k \equiv \prod_{i=1; i \neq k}^n \frac{x_i - r}{x_i - x_k} \quad (5.143)$$

sustituyendo en la formulación (5.141)

$$\sum_{k=1}^n \int_a^b N_k(r) dr f(x_k) = \sum_{k=1}^n w_k f(x_k) \quad (5.144)$$

Es fácil identificar que los coeficientes pesos, corresponde a

$$w_k = \int_a^b N_k(r) dr \quad 1 \leq k \leq n \quad (5.145)$$

Para un mismo número de puntos de integración, la fórmulas de Newton-Cotes no se ejecutan tan bien como el método de Gauss para funciones polinomiales. Sin embargo, la fórmula permite que los puntos de integración coincidan con los puntos de interpolación. La integración de expresiones que contienen funciones de interpolación son por tanto más simplificadas, puesto que las funciones $N_k(r)$ son nulas en todos los otros nodos de interpolación.

Integración numérica bidimensional

Método bidireccional. En este método, una fórmula unidimensional es seleccionada tanto para la coordenada r como para la coordenada s , dentro del plano de integración.

$$\int_{a_s}^{b_s} \int_{a_r}^{b_r} f(r, s) dr ds = \sum_{i=1}^{n_r} \sum_{j=1}^{n_s} w_{r,i} w_{s,j} f(x_i, y_j) \quad (5.146)$$

Si se tiene n_r puntos de integración en la dirección r y n_s puntos de integración en la dirección s , el método de Gauss integra el producto de un polinomio grado $2n_r - 1$ en r , por un polinomio de grado $2n_s - 1$ en s , exactamente. El método utiliza $n = n_r \cdot n_s$ puntos de integración; es decir, integra todos los monomios expresados mediante

$$r^i s^j \quad \text{donde} \quad \begin{aligned} 0 \leq i \leq 2n_r - 1 \\ 0 \leq j \leq 2n_s - 1 \end{aligned} \quad (5.147)$$

Los coeficientes pesos $w_{r,i}$ y $w_{s,j}$, son determinados, por alguno de los métodos establecidos para las formulaciones unidimensionales: Gauss ó Newton-Cotes.

Método directo. El método de Gauss puede también ser extendido directamente a dos dimensiones:

$$\int_{a_s}^{b_s} \int_{a_r}^{b_r} f(r, s) dr ds = \sum_{k=1}^n w_k f(x_k, y_k) \quad (5.148)$$

De manera particular, es posible construir fórmulas muy similares a las fórmulas de Gauss que integran exactamente todos los monomio de orden m , los cuales están conformados

por el siguiente conjunto de monomios

$$r^i s^j \quad \text{donde} \quad i + j \leq m \quad (5.149)$$

Tales métodos son más efectivos que los métodos bidireccionales. Sin embargo, para elementos cuadrilaterales, las fórmulas bidireccionales son más adecuadas que los métodos directos; en contraste, para elementos triangulares los métodos directos son más viables que los métodos directos.

Integración numérica tridimensional

Método tridireccional. En este método, una fórmula unidimensional es seleccionada para cada una de las coordenadas de integración: r , s y t ; dentro del volumen de integración.

$$\int_{a_t}^{b_t} \int_{a_s}^{b_s} \int_{a_r}^{b_r} f(r, s, t) dr ds dt = \sum_{i=1}^{n_r} \sum_{j=1}^{n_s} \sum_{k=1}^{n_t} w_{r,i} w_{s,j} w_{t,k} f(x_i, y_j, z_k) \quad (5.150)$$

Considerando que se tienen n_r , n_s y n_t , puntos de integración en las coordenadas r , s y t , respectivamente. Este método integra el producto de un polinomio grado $2n_r - 1$ en r , por un polinomio de grado $2n_s - 1$ en s , y por un polinomio de grado $2n_t - 1$ en t , exactamente. El método utiliza $n = n_r \cdot n_s \cdot n_t$ puntos de integración; es decir, integra todos los monomios expresados mediante

$$r^i s^j t^k \quad \text{donde} \quad \begin{aligned} 0 &\leq i \leq 2n_r - 1 \\ 0 &\leq j \leq 2n_s - 1 \\ 0 &\leq k \leq 2n_t - 1 \end{aligned} \quad (5.151)$$

Los coeficientes pesos $w_{r,i}$, $w_{s,j}$ y $w_{t,k}$, son determinados, por alguno de los métodos establecidos para las formulaciones unidimensionales: Gauss ó Newton-Cotes. Esta clase de integración numérica es muy adecuada para elementos de forma paralelepípeda.

Método directo. El método de Gauss también puede ser extendido directamente a tres dimensiones, similar a como hizo en el caso una integración numérica bidimensional:

$$\int_{a_t}^{b_t} \int_{a_s}^{b_s} \int_{a_r}^{b_r} f(r, s, t) dr ds dt = \sum_{k=1}^n w_k f(x_k, y_k, z_k) \quad (5.152)$$

Así, es posible construir fórmulas muy similares a las fórmulas de Gauss que integran exactamente todos los monomios de orden m , los cuales están conformados por el siguiente conjunto de monomios

$$r^i s^j t^k \quad \text{donde} \quad i + j + k \leq m \quad (5.153)$$

Este tipo de formulación, es muy adecuada para elementos tetraédricos.

Calidad de la aproximación

En general, para geometrías curvas, las funciones a ser integradas no pueden ser expresadas como en polinomios simples. En tales casos, las fórmulas de integración numérica darán valores aproximados para las integrales a ser evaluadas. En mecánica de sólidos se ha observado que los errores de integración numérica generalmente compensan los errores de discretización en el resultado global. Para elementos rectangulares y triangulares simples, con lados rectos, es sin embargo generalmente posible obtener resultados exactos para la integración numérica puesto que el proceso de elementos finitos normalmente reduce las funciones a ser integradas, a simples polinomios.

5.4.4. Sistemas de ecuaciones algebraicas lineales

Al igual que en cualquier método numérico utilizado para resolver un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales con valores en la frontera, el FEM requiere resolver un sistema de ecuaciones algebraicas, cuyas incógnitas corresponden a las variables que se desean determinar en un conjunto de puntos previamente definidos dentro del dominio.

Considérese, que el sistema de ecuaciones algebraicas pueden ser representada por

$$\mathbf{A} \cdot \vec{x} = \vec{b} \quad (5.154)$$

donde los componentes de la matriz \mathbf{A} y el vector \vec{b} , están definidos. Y los elementos del vector \vec{x} es el conjunto de incógnitas a determinar.

La elección del método específico para resolver el sistema de ecuaciones depende de las propiedades particulares de la matriz \mathbf{A} . Los métodos de resolución del sistema al-

gebraico de ecuaciones se clasifican en dos grandes grupos: los métodos directos y los métodos iterativos.

En los métodos directos la solución \vec{x} se obtiene en un número fijo de pasos y sólo están sujetos a los errores de redondeo. En los métodos iterativos, se realizan iteraciones para aproximarse a la solución \vec{x} aprovechando las características propias de la matriz \mathbf{A} , tratando de usar un menor número de pasos que en un método directo.

Los métodos iterativos rara vez se usan para resolver sistemas lineales de dimensión pequeña (el concepto de dimensión pequeña es muy relativo), ya que el tiempo necesario para conseguir una exactitud satisfactoria rebasa el que requieren los métodos directos. Sin embargo, en el caso de sistemas grandes con un alto porcentaje de elementos cero, son eficientes tanto en el almacenamiento en la computadora como en el tiempo que se invierte en su solución. Por ésta razón al resolver estos sistemas algebraicos de ecuaciones es preferible aplicar los métodos iterativos tales como: Jacobi, Gauss-Seidel, sobre-relajación sucesiva (SOR), etc.

Cabe hacer mención de que la mayoría del tiempo de cómputo necesario para resolver el problema de ecuaciones diferenciales parciales, es consumido en la solución del sistema algebraico de ecuaciones asociado a la discretización, por ello es determinante elegir aquel método numérico que minimice el tiempo invertido en este proceso.

Métodos directos

Los métodos directos de resolución de sistemas lineales de ecuaciones son aquellos que permiten obtener la solución después de un número finito de operaciones aritméticas. Este número de operaciones es, obviamente, función del tamaño de la matriz. Sí los ordenadores pudieran almacenar y operar con todas las cifras de los números reales, es decir, si emplearan una aritmética exacta, con los métodos directos se obtendría la solución exacta del sistema en un número finito de pasos. Puesto que los ordenadores tienen una precisión finita, los errores de redondeo se propagan y la solución numérica obtenida

siempre difiere de la solución exacta. La cota del error, para una matriz y término independiente dados, se asocia por lo general al número de operaciones de cada método. Se pretende, por lo tanto, obtener métodos con el mínimo número de operaciones posible. Otra particularidad de los métodos directos es que siempre conducen, después de ciertas operaciones, a la resolución de uno o varios sistemas con solución inmediata. Es decir, sistemas donde la matriz es diagonal o triangular. Los métodos para sistemas de resolución inmediata son, de hecho, métodos directos. Una clasificación habitual de estos procedimientos de resolución es aquella que considera que los mismos pertenecen a una de las dos categorías siguientes: métodos de eliminación y métodos de descomposición.

Eliminación Gaussiana. Tal vez es el método más utilizado para encontrar la solución usando métodos directos. Este algoritmo sin embargo no es eficiente, ya que en general, un sistema de N ecuaciones requiere para su almacenaje en memoria de N^2 entradas para la matriz \mathbf{A} , pero cerca de $\frac{1}{3}N^3 + O(N^2)$ multiplicaciones y $\frac{1}{3}N^3 + O(N^2)$ adiciones para encontrar la solución, siendo muy costoso computacionalmente.

Este método se aplica para resolver sistemas lineales de la forma

$$\mathbf{A} \cdot \vec{x} = \vec{b} \quad (5.155)$$

El método de eliminación Gaussiana (simple), consiste en escalonar la matriz aumentada del sistema, para obtener un sistema equivalente

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,n} \\ 0 & a'_{2,2} & \cdots & a'_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a'_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b'_2 \\ \vdots \\ b'_n \end{pmatrix} \quad (5.156)$$

donde la notación primada se usa simplemente para denotar que el elemento posiblemente cambió durante el proceso de eliminación. Enseguida, se despejan las incógnitas comenzando con la última ecuación y hacia arriba. Por esta razón, muchas veces se dice que el método de eliminación Gaussiana consiste en la eliminación hacia adelante y sustitución

hacia atrás.

Durante el proceso de eliminación es posible aplicar la técnica de pivoteo, la cual consiste en un intercambio de las filas del sistema de ecuaciones, esto con el propósito de minimizar los errores por redondeo.

Método de descomposición. Básicamente, este método consiste en descomponer a la matriz \mathbf{A} como el producto de una matriz triangular inferior \mathbf{L} y una matriz triangular superior \mathbf{U}

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{U} \quad (5.157)$$

Con esto, el sistema de ecuaciones

$$\mathbf{A} \cdot \vec{x} = \vec{b} \quad (5.158)$$

se transforma a dos sistemas de ecuaciones más simples

$$\mathbf{L} \cdot \vec{y} = \vec{b} \quad (5.159a)$$

$$\mathbf{U} \cdot \vec{x} = \vec{y} \quad (5.159b)$$

los cuales son resueltos con suma facilidad, debido a la naturaleza propia de las matrices triangulares. De hecho, el procedimiento consiste en resolver (5.159a) mediante sustitución hacia adelante, y posteriormente resolver (5.159b) mediante sustitución hacia atrás.

Esta clase de descomposición se clasifica típicamente en tres tipos: descomposición Doolittle, $L_{ii} = 1$; descomposición Crout, $U_{ii} = 1$; descomposición Cholesky, $\mathbf{U} = \mathbf{L}^t$. Es evidente que la descomposición Cholesky involucra inevitablemente a una matriz simétrica \mathbf{A} .

Con respecto al proceso de descomposición de la matriz \mathbf{A} , este se puede aplicar con pivoteo o sin pivoteo. Aunque al aplicar la técnica de pivoteo se permite minimizar los errores de redondeo, esto trae como consecuencia, que el orden original de las ecuaciones

sea alterado. Por tanto, es necesario registrar esta secuencia de cambios en el orden de las ecuaciones, a través de un vector de permutaciones; y así emplear tal información, al aplicar la sustitución hacia adelante y hacia atrás. Es común que los algoritmos computacionales factoricen a la matriz de coeficientes en el mismo bloque de memoria, con el propósito de minimizar el uso de memoria, lo que conduce a que los datos de la matriz de coeficientes se pierdan.

También es posible refinar la solución obtenida por un método de descomposición, a través de un método iterativo, y así homogenizar los errores de redondeo. Sin embargo, este refinamiento requiere tanto de la matriz de coeficientes original, como de la matriz factorizada. Por tanto, en esta decisión se manifiesta el dilema de emplear un mayor bloque de memoria (almacenar la matriz original y la matriz factorizada), o un mayor tiempo de ejecución (multiplicar a la matriz factorizada).

Métodos iterativos estacionarios

Esta denominación se aplica a los primeros métodos iterativos que empezaron a ser utilizados para la resolución de grandes sistemas de ecuaciones lineales. Se basan en la relajación de coordenadas, empezando con una solución aproximada y modificando los componentes de la aproximación hasta que se alcanza la convergencia. Estos métodos pueden expresarse como:

$$\vec{x}^{(k)} = \mathbf{C} \cdot \vec{x}^{(k-1)} + \vec{d} \quad (5.160)$$

donde ni la matriz \mathbf{C} ni el vector \vec{d} depende del número de iteraciones efectuadas. De ahí la razón para denominar a estos métodos, métodos estacionarios.

Método Gauss-Jacobi. Este método es fácilmente derivable si se examina cada una de las ecuaciones del sistema lineal de manera aislada. Si la i -ésima ecuación

$$\sum_{j=1}^n A_{ij}x_j = b_i \quad (5.161)$$

se resuelve para la incógnita x_i , asumiendo que las otras incógnitas están definidas; se

obtiene

$$x_i = \frac{1}{A_{ii}} \left[b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n A_{ij} x_j \right] \quad (5.162)$$

Esto sugiere un método iterativo definido por

$$x_i^{(k)} = \frac{1}{A_{ii}} \left[b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n A_{ij} x_j^{(k-1)} \right] \quad (5.163)$$

el cual corresponde al método Gauss-Jacobi. Claramente se observa que el orden en el cual las ecuaciones son examinadas es completamente irrelevante, puesto que el método Gauss-Jacobi trata con ellas independientemente. Por esta razón, el método de Gauss-Jacobi es conocido también como el método de los desplazamientos simultáneos, puesto que las actualizaciones, podrían en principio, ser realizadas simultáneamente.

Matricialmente, el método Gauss-Jacobi puede ser expresado mediante

$$\vec{x}^{(k)} = \mathbf{D}^{-1} \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{U}) \cdot \vec{x}^{(k-1)} + \mathbf{D}^{-1} \cdot \vec{b} \quad (5.164)$$

donde las matrices \mathbf{D} , $-\mathbf{L}$ y $-\mathbf{U}$, representan: la diagonal, la matriz triangular inferior, y la matriz triangular superior, de la matriz \mathbf{A} , respectivamente.

Método Gauss-Seidel. Considerando otra vez al sistema de ecuaciones lineales expresado como

$$\sum_{j=1}^n A_{ij} x_j = b_i \quad 1 \leq i \leq n \quad (5.165)$$

Y procediendo como en el método Gauss-Jacobi, pero ahora se asume que las ecuaciones son examinadas una a la vez secuencialmente, y así los resultados computados previamente son utilizados tan pronto como ellos están disponibles, se obtiene el método de Gauss-Seidel

$$x_i^{(k)} = \frac{1}{A_{ii}} \left[b_i - \sum_{j < i} A_{ij} x_j^{(k)} - \sum_{j > i} A_{ij} x_j^{(k-1)} \right] \quad \begin{array}{l} 1 \leq i \leq n \\ 1 \leq j \leq n \end{array} \quad (5.166)$$

El método Gauss-Seidel, presenta dos notables características. Primero, los cálculos son seriales, puesto que cada componente de la nueva iteración depende de todos los

componentes previamente computados, así las actualizaciones no puede ser aplicadas simultáneamente como en el método Gauss-Jacobi. Segundo, la nueva iteración depende del orden en que las ecuaciones son examinadas. El método Gauss-Seidel, es denominado como el método de los desplazamientos sucesivos, con el propósito de indicar la dependencia de las iteraciones con respecto al orden de las ecuaciones. Sí el orden de las ecuaciones es alterado, los componentes de la nueva iteración también deben ser alterados.

Matricialmente, el método Gauss-Seidel puede ser expresado mediante

$$\vec{x}^{(k)} = (\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1} \cdot (\mathbf{U} \cdot \vec{x}^{(k-1)} + \vec{b}) \quad (5.167)$$

donde las matrices \mathbf{D} , $-\mathbf{L}$ y $-\mathbf{U}$, representan: la diagonal, la matriz triangular inferior, y la matriz triangular superior, de la matriz \mathbf{A} , respectivamente.

Método de Sobre-relajación Sucesiva (SOR). Este método fue ideado mediante la aplicación de una extrapolación al método Gauss-Seidel. Esta extrapolación toma la forma de un promedio ponderado entre la iteración previa, y la iteración computada por el método Gauss-Seidel sucesivamente para cada componente.

$$x_i^{(k)} = \omega x_i^{(k,GS)} + (1 - \omega)x_i^{(k-1)} \quad (5.168)$$

donde $x_i^{(k,GS)}$ denota la iteración Gauss-Seidel, y ω al factor de extrapolación. La idea, es elegir un valor de ω , el cual acelere la velocidad de convergencia de las iteraciones a la solución.

Matricialmente, el método SOR puede ser expresado mediante

$$\vec{x}^{(k)} = (\mathbf{D} - \omega\mathbf{L})^{-1} \cdot (\omega\mathbf{U} + (1 - \omega)\mathbf{D}) \cdot \vec{x}^{(k-1)} + \omega(\mathbf{D} - \omega\mathbf{L})^{-1} \cdot \vec{b} \quad (5.169)$$

donde las matrices \mathbf{D} , $-\mathbf{L}$ y $-\mathbf{U}$, representan: la diagonal, la matriz triangular inferior, y la matriz triangular superior, de la matriz \mathbf{A} , respectivamente.

Método de Sobre-relajación Sucesiva Simétrica (SSOR). EL método SSOR combina dos despejes simultáneamente de forma tal que la iteración resultante es similar a una

matriz simétrica. Específicamente, el primer despeje de SOR es llevado a cabo como lo describe la expresión (5.169), pero en el segundo despeje las variables desconocidas son actualizadas en orden inverso. Esto es, el método SSOR consiste en un despeje SOR hacia adelante seguido por un despeje SOR hacia atrás. La similitud de la matriz de iteración a una matriz simétrica, permite la aplicación del SSOR como un preconditionador en otros esquemas iterativos para matrices simétricas. Así, esta es la principal motivación del SSOR puesto que su velocidad de convergencia, con valor óptimo de ω , es usualmente mas bajo que la velocidad de convergencia del SOR con valor óptimo ω .

Matricialmente, el método SSOR puede ser expresado mediante

$$\vec{x}^{(k)} = \mathbf{B}_1 \cdot \mathbf{B}_2 \cdot \vec{x}^{(k-1)} + \omega(2 - \omega)(\mathbf{D} - \omega\mathbf{U})^{-1} \cdot \mathbf{D} \cdot (\mathbf{D} - \omega\mathbf{L})^{-1} \cdot \vec{b} \quad (5.170a)$$

$$\mathbf{B}_1 = (\mathbf{D} - \omega\mathbf{U})^{-1} \cdot (\omega\mathbf{L} + (1 - \omega)\mathbf{D}) \quad (5.170b)$$

$$\mathbf{B}_2 = (\mathbf{D} - \omega\mathbf{L})^{-1} \cdot (\omega\mathbf{U} + (1 - \omega)\mathbf{D}) \quad (5.170c)$$

donde las matrices \mathbf{D} , $-\mathbf{L}$ y $-\mathbf{U}$, representan: la diagonal, la matriz triangular inferior, y la matriz triangular superior, de la matriz \mathbf{A} , respectivamente.

Métodos iterativos no estacionarios

Corresponden a los métodos iterativos para los cuales, en cada iteración se minimiza los residuales obtenidos a través de la construcción y empleo sucesivo de directores de búsqueda. Para lograr este objetivo, se vale de ciertas propiedades de ortogonalización entre los residuales y los directores de búsqueda. Estos métodos pueden expresarse como:

$$\vec{x}^{(k)} = \mathbf{C}^{(k)} \cdot \vec{x}^{(k-1)} + \vec{d}^{(k)} \quad (5.171)$$

donde la matriz $\mathbf{C}^{(k)}$ y el vector $\vec{d}^{(k)}$ dependen del número de iteraciones efectuadas.

Método del gradiente conjugado (CG). El método del gradiente conjugado ha recibido mucha atención y ha sido ampliamente utilizado en años recientes. Aunque los pioneros de este método fueron Hestenes y Stiefel (1952), el interés actual arranca a partir de que

Reid (1971) lo planteara como un método iterativo, que es la forma en que se le usa con mayor frecuencia en la actualidad.

Este es un efectivo método para sistemas simétricos definidos positivamente. Es el más antiguo de los mejores métodos no estacionarios conocidos. La idea básica en que descansa el método del gradiente conjugado, consiste en construir una base de vectores ortogonales y utilizarla para realizar la búsqueda de la solución en forma más eficiente. Aunque tal forma de proceder generalmente no es aconsejable, porque la construcción de una base ortogonal utilizando el procedimiento de Gramm-Schmidt, requiere al seleccionar cada nuevo elemento de la base, asegurar su ortogonalidad con respecto a cada uno de los vectores construidos previamente. La gran ventaja del método de gradiente conjugado radica en que cuando se utiliza este procedimiento, basta con asegurar la ortogonalidad de un nuevo miembro con respecto al último que se ha construido, para que automáticamente esta condición se cumpla con respecto a todas los anteriores. Así, una breve descripción de este método se da a continuación.

Los iterantes $\vec{x}^{(k)}$ son actualizados en cada iteración mediante un múltiplo α_k del vector dirección de búsqueda $\vec{p}^{(k)}$

$$\vec{x}^{(k)} = \vec{x}^{(k-1)} + \alpha_k \vec{p}^{(k)} \quad (5.172)$$

Los residuales correspondientes

$$\vec{r}^{(k-1)} = \vec{b} - \mathbf{A} \cdot \vec{x}^{(k-1)} \quad (5.173)$$

son actualizados mediante

$$\vec{r}^{(k)} = \vec{r}^{(k-1)} - \alpha \vec{q}^{(k)} \quad \text{donde} \quad \vec{q}^{(k)} = \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(k)} \quad (5.174)$$

La elección de

$$\alpha = \alpha_k = \frac{\vec{r}^{(k-1)} \cdot \vec{r}^{(k-1)}}{\vec{p}^{(k)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(k)}} \quad (5.175)$$

minimiza $\vec{r}^{(k)} \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \vec{r}^{(k)}$, sobre todas las posibles elecciones para α en la expresión (5.174).

La dirección de búsqueda es actualizada mediante los residuales

$$\vec{p}^{(k)} = \vec{r}^{(k)} + \beta_{k-1} \vec{p}^{(k-1)} \quad (5.176)$$

donde la elección

$$\beta_k = \frac{\vec{r}^{(k)} \cdot \vec{r}^{(k)}}{\vec{r}^{(k-1)} \cdot \vec{r}^{(k-1)}} \quad (5.177)$$

asegura que $\vec{p}^{(k)}$ y $\mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(k-1)}$ (o equivalentemente, $\vec{r}^{(k)}$ y $\vec{r}^{(k-1)}$), sean ortogonales. De hecho, es posible mostrar que la elección de β_k hacen que $\vec{p}^{(k)}$ y $\vec{r}^{(k)}$ sean ortogonales a todo los vectores previos $\mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(k)}$ y $\vec{r}^{(k)}$, respectivamente.

Método del Gradiente Biconjugado (BiCG). El método CG no es apropiado para sistemas no simétricos, debido a que los vectores residuales no pueden ser ortogonales en recurrencias cortas. El método BiCG se basa en reemplazar las secuencias ortogonales de residuales por dos secuencias mutuamente ortogonales (Fletcher, 1976).

La actualización de relaciones para los residuales son aumentadas en el método BiCG por relaciones que son similares pero basadas en la matriz \mathbf{A}^t en lugar de la matriz \mathbf{A} . Así se actualizan dos secuencias de residuales:

$$\vec{r}^{(k)} = \vec{r}^{(k-1)} - \alpha_k \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(k)} \quad \vec{r}'^{(k)} = \vec{r}'^{(k-1)} - \alpha_k \mathbf{A}^t \cdot \vec{p}'^{(k)} \quad (5.178)$$

y dos secuencias de direcciones de búsqueda

$$\vec{p}^{(k)} = \vec{r}^{(k-1)} - \beta_{k-1} \vec{p}^{(k-1)} \quad \vec{p}'^{(k)} = \vec{r}'^{(k-1)} - \beta_{k-1} \vec{p}'^{(k-1)} \quad (5.179)$$

Las elecciones

$$\alpha_k = \frac{\vec{r}'^{(k-1)} \cdot \vec{r}^{(k-1)}}{\vec{p}'^{(k)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(k)}} \quad \beta_k = \frac{\vec{r}'^{(k)} \cdot \vec{r}^{(k)}}{\vec{r}'^{(k-1)} \cdot \vec{r}^{(k-1)}} \quad (5.180)$$

aseguran las relaciones de bi-ortogonalidad

$$\vec{r}'^{(i)} \cdot \vec{r}^{(j)} = 0; \quad \vec{p}'^{(i)} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{p}^{(j)} = 0; \quad i \neq j \quad (5.181)$$

Método del Gradiente Conjugado Cuadrado (CGS). Sonneveld (1989), observó que en el método BiCG, el vector residual $\vec{r}^{(k)}$ puede ser considerado como el producto del vector $\vec{r}^{(0)}$ y un polinomio de grado k de la matriz \mathbf{A} , esto es

$$\vec{r}^{(k)} = P_k(\mathbf{A})\vec{r}^{(0)} \quad (5.182)$$

Y este mismo polinomio también satisface a la relación

$$\vec{r}'^{(k)} = P_k(\mathbf{A}^t)\vec{r}'^{(0)} \quad (5.183)$$

Con esto

$$\vec{r}'^{(k)} \cdot \vec{r}^{(k)} = P_k(\mathbf{A}^t)\vec{r}'^{(0)} \cdot P_k(\mathbf{A})\vec{r}^{(0)} = \vec{r}'^{(0)} \cdot P_k^2(\mathbf{A})\vec{r}^{(0)} \quad (5.184)$$

Esto sugiere que si $P_k(\mathbf{A})$ contrae $\vec{r}^{(0)}$ a un vector más pequeño $\vec{r}^{(k)}$, entonces podría ser ventajoso aplicar el operador de contracción dos veces y computar $P_k^2(\mathbf{A})\vec{r}^{(0)}$. Y además se evitan los cálculos con la matriz \mathbf{A}^t , lo cual puede ser beneficioso en algunos casos.

Método del Gradiente Biconjugado Estabilizado (Bi-CGSTAB). Este método fue desarrollado para resolver sistemas lineales no simétricos, evitando los frecuentes patrones irregulares de convergencia del método CGS (Van-deVorst y Vuik, 1994). En lugar de computar la secuencia $P_k^2(\mathbf{A})\vec{r}^{(0)}$, el método Bi-CGSTAB computa la secuencia $Q_k(\mathbf{A})P_k(\mathbf{A})\vec{r}^{(0)}$, donde $Q_k(\mathbf{A})$ es un polinomio de grado k que introduce una actualización de descenso abrupta.

Precondicionadores

Puesto que los métodos iterativos convergen a la solución a un ritmo que depende de las propiedades espectrales de la matriz² de coeficientes. A menudo, es necesario transformar la matriz en otra con un espectro más apropiado. Un preconditionador \mathbf{M} es la matriz que se encarga de realizar dicha transformación. Como ejemplo, consideremos un problema $\mathbf{A} \cdot \vec{x} = \vec{b}$, y una matriz \mathbf{M} tal que el producto $\mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{A}$ posee un radio espectral inferior al de la matriz \mathbf{A} . En estas condiciones, la solución al sistema transformado $\mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{x} = \mathbf{M}^{-1} \cdot \vec{b}$, es equivalente a la solución de $\mathbf{A} \cdot \vec{x} = \vec{b}$, pero sus propiedades espectrales permiten alcanzar más rápidamente la convergencia. Si se desea introducir mejoras en el esquema numérico con el fin de acelerar la convergencia, la principal mejora se logra mediante la introducción de un preconditionador. Existen tres opciones básicas: usar los llamados preconditionadores clásicos, usar los multinivel, o usar aquellos basados

²Se denomina espectro de una matriz al conjunto de sus autovalores. Se denomina Radio Espectral de una matriz al máximo de sus autovalores, en valor absoluto.

en descomposición en dominios.

Con respecto a la naturaleza de un buen preconditionador, este debe reunir las siguientes características:

1. Al aplicar un preconditionador \mathbf{M} al sistema original de ecuaciones $\mathbf{A} \cdot \vec{x} = \vec{b}$, se debe reducir el número de iteraciones necesarias para que la solución aproximada tenga la convergencia a la solución exacta con una exactitud prefijada.
2. La matriz \mathbf{M} debe ser fácil de calcular, es decir, el costo computacional de la construcción del preconditionador debe ser pequeño comparado con el costo total de resolver el sistema de ecuaciones $\mathbf{A} \cdot \vec{x} = \vec{b}$.
3. El sistema preconditionado debe ser fácil de resolver. Esto debe interpretarse de dos maneras: (a) El monto de operaciones por iteración debido a la aplicación del preconditionador debe ser pequeño o del mismo orden que las que se requerirían sin preconditionamiento. Esto es importante si se trabaja en máquinas secuenciales; (b) El tiempo requerido por iteración debido a la aplicación del preconditionador debe ser pequeño.

El preconditionamiento de un sistema de ecuaciones, se puede realizar de tres maneras:

- Precondicionamiento a la izquierda:

$$\mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{x} = \mathbf{M}^{-1} \cdot \vec{b} \quad (5.185)$$

- Precondicionamiento a la derecha:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{M} \cdot \vec{x} = \vec{b} \quad (5.186)$$

- Precondicionamiento a ambos lados:

$$\mathbf{M}_1^{-1} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{M}_2^{-1} \cdot \mathbf{M}_2 \cdot \vec{x} = \mathbf{M}_1^{-1} \cdot \vec{b} \quad (5.187)$$

Algunos preconditionadores clásicos, se describe a continuación:

- Precondicionador Jacobi

$$\mathbf{M} = \mathbf{D} \quad (5.188)$$

- Precondicionador Gauss Seidel

$$\mathbf{M} = \mathbf{D} + \mathbf{L} \quad (5.189)$$

- Precondicionador SOR

$$\mathbf{M} = \frac{1}{\omega}(\mathbf{D} + \omega\mathbf{L}) \quad (5.190)$$

- Precondicionador SSOR

$$\mathbf{M} = \frac{1}{\omega(2-\omega)}(\mathbf{D} + \omega\mathbf{L}) \cdot \mathbf{D}^{-1} \cdot (\mathbf{D} + \omega\mathbf{U}) \quad (5.191)$$

donde las matrices \mathbf{D} , \mathbf{L} , \mathbf{U} , corresponde a la matriz diagonal, matriz triangular inferior, matriz triangular superior, respectivamente.

5.4.5. Resolución de sistemas no lineales

Es común que en la formulación de problemas físicos se obtengan sistemas matemáticos no lineales. Estas no linealidades tienen su origen en dos causas: (1) las propiedades de los materiales; (2) y la geometría.

Típicamente la discretización de un sistema de ecuaciones diferenciales no lineal, conduce a un sistema de ecuaciones algebraicas no lineal expresado mediante

$$\mathbf{K}(\vec{u}) \cdot \vec{u} = \vec{F} \quad (5.192)$$

donde la matriz $\mathbf{K}(\vec{u})$ es también función de las variables nodales \vec{u} . Desafortunadamente, no existe método numérico que permita resolver esta clase de sistemas no lineales, sin una previa transformación a un sistema lineal.

Método de sustitución

Este método consiste, en construir una secuencia de soluciones $\vec{u}^{(1)}, \vec{u}^{(2)}, \dots, \vec{u}^{(n)}$, donde la solución $\vec{u}^{(k)}$ es calculada de la solución previa $\vec{u}^{(k-1)}$, y satisface al sistema lineal

$$\mathbf{K}(\vec{u}^{(k-1)}) \cdot \vec{u}^{(k)} = \vec{F} = 0 \quad (5.193)$$

En este caso, es más conveniente exponer la expresión anterior en una forma incremental

$$\mathbf{K}(\vec{u}^{(k-1)}) \cdot \Delta \vec{u}^{(k)} = \vec{R}^{(k)} \quad (5.194a)$$

donde

$$\vec{R}^{(k)} \equiv \vec{F} - \mathbf{K}(\vec{u}^{(k-1)}) \cdot \vec{u}^{(k-1)} \quad (5.194b)$$

$$\vec{u}^{(k)} \equiv \vec{u}^{(k-1)} + \delta \vec{u}^{(k)} \quad (5.194c)$$

Asumiendo que el vector solución $\vec{u}^{(k-1)}$ es conocido, entonces es posible computar a la matriz $\mathbf{K}(\vec{u}^{(k-1)})$ y el residual $\vec{R}^{(k)}$ definido mediante (5.194b), y así obtener un sistema algebraico lineal (5.194a), cuya solución corresponde al vector $\delta \vec{u}^{(k)}$. Y posteriormente, determinar al vector $\vec{u}^{(k)}$ mediante (5.194c). Obviamente el vector inicial $\vec{u}^{(0)}$ no es conocido, y en muchos casos se presume como un vector nulo. Esto vuelve evidente, que la convergencia de la solución en este método, depende del tipo de no linealidad a tratar y el valor del vector inicial.

También es posible introducir un factor de relajamiento ω , con el propósito de mejorar la tasa de convergencia, cuyo valor numérico es dependiente de la naturaleza del sistema no lineal, y usualmente determinado por experimentación numérica. Así, la expresión (5.194b), se reemplaza por

$$\vec{u}^{(k)} \equiv \vec{u}^{(k-1)} + \omega \Delta \vec{u}^{(k)} \quad (5.195)$$

Con respecto al criterio a utilizar para manifestar que una solución $\vec{u}^{(k)}$ es aceptable, se define un escalar ϵ como parámetro de aceptabilidad, y se compara con la norma definida para el vector $\delta \vec{u}^{(k)}$ o el vector $\vec{R}^{(k)}$. Si considera una norma euclideana, el criterio a satisfacer corresponde a

$$\sqrt{\delta \vec{u}^{(k)} \cdot \delta \vec{u}^{(k)}} < \epsilon \quad \text{ó} \quad \sqrt{\vec{R}^{(k)} \cdot \vec{R}^{(k)}} < \epsilon \quad (5.196)$$

También es muy usual que se utilice una norma relativa del vector solución

$$\sqrt{\frac{\delta \vec{u}^{(k)} \cdot \delta \vec{u}^{(k)}}{\vec{u}^{(k)} \cdot \vec{u}^{(k)}}} < \epsilon \quad (5.197)$$

Método Newton-Raphson

Uno de los métodos más populares utilizado en la búsqueda de soluciones, pero que presenta mayores implicaciones que el método de sustitución. Considérese al sistema no lineal,

$$\mathbf{K}(\vec{u}) \cdot \vec{u} = \vec{F} \quad (5.198)$$

y al residual asociado a este sistema como

$$\vec{R}(\vec{u}) \equiv \vec{F} - \mathbf{K}(\vec{u}) \cdot \vec{u} \quad (5.199)$$

Aplicando el desarrollo de una serie de Taylor alrededor del punto \vec{u} para el residual $\vec{R}(\vec{u}^*)$

$$\vec{R}(\vec{u}^* + \delta \vec{u}^*) = \vec{R}(\vec{u}^*) + \sum_{j=1}^{\dim \vec{u}} \left. \frac{\partial \vec{R}}{\partial u_j} \right|_{u_j=u_j^*} \delta u_j^* + h(O^2) \quad (5.200)$$

Sí se asume que la vector $\vec{u}^* + \delta \vec{u}^*$ satisface al sistema no lineal

$$\vec{R}(\vec{u}^* + \delta \vec{u}^*) = 0 \quad (5.201)$$

y bajo la consideración que los términos de orden 2 o mayor, son despreciables en el desarrollo de Taylor, entonces

$$\vec{R}(\vec{u}^*) = - \sum_{j=1}^{\dim \vec{u}} \left. \frac{\partial \vec{R}}{\partial u_j} \right|_{u_j=u_j^*} \delta u_j^* \quad (5.202)$$

De la definición de residual, es posible obtener sus derivadas con respecto a u_j

$$-\frac{\partial R_i}{\partial u_j} = K_{ij} + \sum_{l=1}^{\dim \vec{u}} \frac{\partial K_{il}}{\partial u_j} u_l \quad (5.203)$$

asumiendo que el vector \vec{F} , es independiente de las variables u_j . Si se introduce una nueva matriz \mathbf{T} , la cual se define mediante

$$T_{ij} = K_{ij} + \sum_{l=1}^{\dim \vec{u}} \frac{\partial K_{il}}{\partial u_j} u_l \quad (5.204)$$

Entonces

$$\vec{R}(\vec{u}^*) = \sum_{j=1}^{\dim \vec{u}} T_{ij}|_{u_j=u_j^*} \delta u_j^* \quad (5.205)$$

o en forma matricial

$$\mathbf{T}(\vec{u}^*) \cdot \delta \vec{u}^* = \vec{R}(\vec{u}^*) \quad (5.206)$$

Aplicando un esquema recursivo similar al aplicado en el método de sustitución, conduce al siguiente sistema lineal

$$\mathbf{T}(\vec{u}^{(k-1)}) \cdot \delta \vec{u}^{(k)} = \vec{R}^{(k)} \quad (5.207a)$$

donde

$$\vec{R}^{(k)} \equiv \vec{F} - \mathbf{K}(\vec{u}^{(k-1)}) \cdot \vec{u}^{(k-1)} \quad (5.207b)$$

$$\vec{u}^{(k)} \equiv \vec{u}^{(k-1)} + \delta \vec{u}^{(k)} \quad (5.207c)$$

Comparando el método Newton Raphson con el método de sustitución, se observa que la diferencia estriba, en que la matriz \mathbf{K} es sustituida por la suma de la matriz \mathbf{K} y la *tangente* de la matriz \mathbf{K} ; la inclusión de esta matriz, acelera el ritmo de convergencia, siendo más eficaz el método Newton Raphson que el método de sustitución.

Si se asume que el vector solución $\vec{u}^{(k-1)}$ es conocido, entonces es posible computar a la matriz $\mathbf{T}(\vec{u}^{(k-1)})$ y el residual $\vec{R}^{(k)}$ definido mediante (5.207b), y así obtener un sistema algebraico lineal (5.207a), cuya solución corresponde al vector $\delta \vec{u}^{(k)}$. Posteriormente se puede determinar al vector $\vec{u}^{(k)}$ mediante (5.207c). Procediendo secuencialmente, hasta que alguna solución $\vec{u}^{(k)}$ satisfaga algún criterio de convergencia predefinido.

Obviamente, este algoritmo parte bajo el supuesto que la matriz \mathbf{T} es conocida. Sin embargo, de acuerdo a la forma en que se definió a esta matriz, esto implicaría la necesidad de conocer a la matriz \mathbf{K} explícitamente, y así construir a la matriz \mathbf{T} . Desafortunadamente, debido a la naturaleza compleja de la matriz \mathbf{K} , resulta imposible o indeseable, obtener una expresión explícita para ella. Empero, existe una manera alternativa para construir la matriz \mathbf{T} . Considérese la formulación integral discretizada \mathbf{W} asociada al problema algebraico,

$$\mathbf{W}(\vec{u}) = \delta \vec{u} \cdot \left[\mathbf{K}(\vec{u}) \cdot \vec{u} - \vec{F} \right] = -\delta \vec{u} \cdot \vec{R}(\vec{u}) = 0 \quad (5.208)$$

Aplicando la primera variación a la expresión anterior

$$\delta \mathbf{W}(\vec{u}) = -\delta \vec{u} \cdot \delta \vec{R} \quad (5.209)$$

Puesto que la primera variación del residual $\vec{R}(\vec{u})$ por componente, esta dada mediante

$$-\delta R_i = \sum_{l=1}^{\dim \vec{u}} \delta K_{il} \cdot u_l + \sum_{j=1}^{\dim \vec{u}} K_{ij} \cdot \delta u_j \quad (5.210)$$

y la primera variación de los elementos δK_{il} , corresponden a

$$\delta K_{il} = \sum_{j=1}^{\dim \vec{u}} \frac{\partial K_{il}}{\partial u_j} \delta u_j \quad (5.211)$$

así,

$$-\delta R_i = \sum_{j=1}^{\dim \vec{u}} \left[\sum_{l=1}^{\dim \vec{u}} \frac{\partial K_{il}}{\partial u_j} u_l + K_{ij} \right] \delta u_j = \sum_{j=1}^{\dim \vec{u}} T_{ij} \delta u_j \quad (5.212)$$

o en su forma matricial

$$-\delta \vec{R} = \mathbf{T} \cdot \delta \vec{u} \quad (5.213)$$

Con esto, la primera variación de la formulación integral discreta corresponde a

$$\delta \mathbf{W}(\vec{u}) = \delta \vec{u} \cdot \mathbf{T} \cdot \delta \vec{u} = 0 \quad (5.214)$$

Esto demuestra, que la matriz \mathbf{T} puede ser construida por una vía alternativa, que consiste en la discretización de la primera variación de la formulación integral asociada al problema físico.

6.1. Generación de malla

6.1.1. Software

La discretización del dominio, se realizó mediante un software de código libre (licencia GPL), denominado Gmsh. Esta herramienta es un generador automático de malla de elemento finito 3D, basado en la triangulación de Delaunay, con capacidades incorporadas de pre-procesamiento y post-procesamiento.

El diseño de este software tiene como origen, el proveer una herramienta simple de mallaje, para problemas académicos con entradas paramétricas de datos y capacidades avanzadas de visualización. Y sus autores Christophe Geuzaine y Jean-François Remacle, han trabajado desde 1997 en su mejoramiento.

Gmsh esta construido a través de cuatro módulos: geometría, malla, resolvidor (*solver*) y post-procesamiento. Todas las instrucciones para cada módulo, pueden ser preescritas mediante el uso de una interfase gráfica de usuario (GUI) o un archivo de datos en código ASCII; un lenguaje propio de Gmsh.

Así, un dominio es definido mediante un código de instrucciones paramétricas que representan a un conjunto de entidades geométricas: puntos, líneas, superficies y/o volúmenes. Y utilizando el módulo de geometría, es posible realizar modificaciones adicionales

a un dominio predefinido en un fichero código ASCII; como son: rotación, traslación, extrusión, y adición o eliminación de entidades geométricas, entre otras.

Gmsh, también permite la introducción de entidades físicas (materiales), a través de las cuales, es posible definir de manera individual porciones del dominio o su contorno. Lo que resulta muy conveniente, durante la asignación de condiciones de contorno o frontera, en el procesamiento numérico de un problema.

Durante la discretización del dominio, Gmsh puede utilizar una variedad de entidades geométricas: líneas, triángulos, cuadriláteros, tetraedros, hexaedros, primas y pirámides. Estas entidades geométricas corresponde a elementos finitos de primer o segundo orden. Tal como se muestran en la figura 5.4.

Condición de Delaunay

La condición de Delaunay dice que una red de triángulos es una triangulación de Delaunay si todas las circunferencias circunscritas de todos los triángulos de la red son vacías¹. Esa es la definición original para espacios bidimensionales. Aunque también es posible ampliarla para espacios tridimensionales usando la esfera circunscrita en vez de la circunferencia circunscrita. Esa condición asegura que los ángulos del interior de los triángulos son lo más grandes posible. Es decir, maximiza la extensión del ángulo más pequeño de la red.

Las triangulaciones de Delaunay tienen las propiedades siguientes:

- La triangulación forma la envolvente convexa del conjunto de puntos.
- El ángulo mínimo dentro de todos los triángulos está maximizado.
- La triangulación es unívoca, si en ningún borde de circunferencia circunscrita hay más que tres vértices.

¹Según la definición de Delaunay la circunferencia circunscrita es vacía, si no contiene otros vértices aparte de los tres que la definen.

El hecho de que la triangulación de Delaunay maximice los ángulos interiores de los triángulos de la triangulación, resulta muy práctico, porque al usar la triangulación como modelo tridimensional, los errores de redondeo son mínimos.

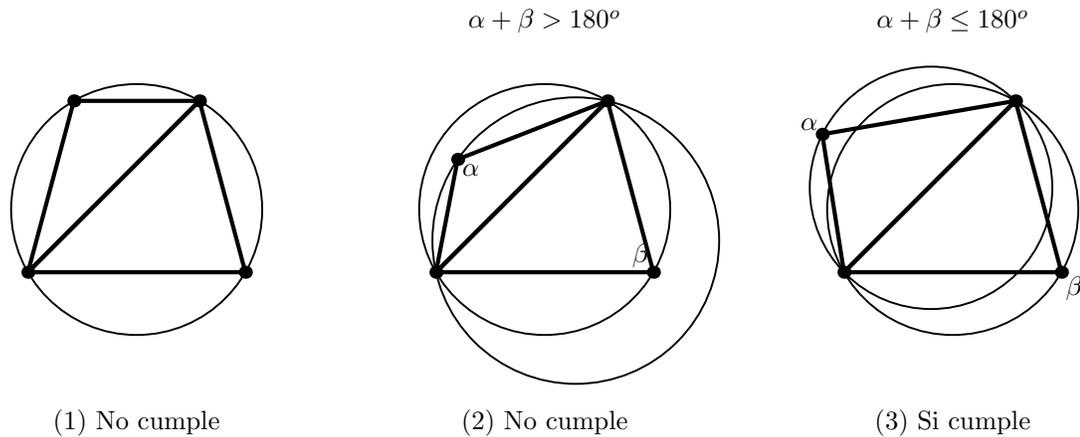


Figura 6.1: Triangulaciones que cumplen y no cumplen la condición de Delaunay

Asimismo, otra condición que se debe satisfacer durante la triangulación de Delaunay, corresponde a que la suma de los ángulos opuestos de una arista común, debe ser menor o igual que dos ángulos rectos.

6.2. Lenguaje de programación

6.2.1. Elección de lenguaje

Para el desarrollo del código computacional, se revisó las prestaciones que ofrecían el lenguaje Fortran y el lenguaje C++, y se concluyó que la mejor elección era C++.

Un breve análisis de las ventajas y desventajas de ambos lenguajes de programación, se presentan mediante los cuadros 6.1 y 6.2, respectivamente. Es necesario precisar que solo se describen las características C++ del código heredado del lenguaje C. Por tanto, los beneficios adicionales de C++ como lenguaje orientado a objetos no se detallan.

En este punto es necesario indicar, que C++ maneja de manera práctica el uso de

Cuadro 6.1: Ventajas de los lenguajes de programación FORTRAN y C++

FORTRAN	C++
Existe multitud de software ya programado, lo cual permite tener a disposición una multitud de código.	C++ es un lenguaje estructurado, lo que permite una mejor depuración del código propio y ajeno, y así sea más legible.
Es un lenguaje muy arraigado entre la comunidad científica.	C++ es un lenguaje de propósito general.
Existe multitud de documentación sobre FORTRAN.	El código generado por C++ es uno de los más rápidos en ejecución, con la excepción del código generado en ensamblador.
	Existen y son fáciles de encontrar compiladores de C++ para cualquier plataforma.
	Existe bastante información y tutoriales sobre programación en C++.
	La sintaxis de los lenguajes que continuamente aparecen es muy parecida a la de C++.
	Existen multitud de entornos de desarrollo para C++.

memoria dinámica, lo que permite asignar o liberar memoria durante la ejecución del código. En contraste, para FORTRAN es común que los códigos, incluyan en su primeras instrucciones la asignación memoria, misma que permanece estática durante la ejecución del código. Esta flexibilidad de C++ con respecto a FORTRAN, le permite proveer de una mejor administración de recursos de memoria.

Adicional a las desventajas de FORTRAN, existe una de carácter muy particular, que corresponde al paso de argumentos en las funciones; mismas que frecuentemente son de una naturaleza muy compleja cuando se desea realizar el paso de argumentos de datos estructurados en arreglos (*arrays*).

Cuadro 6.2: Desventajas de los lenguajes de programación FORTRAN y C++

FORTRAN	C++
No es un lenguaje estructurado. Con lo cual la legibilidad del código empeora en cuanto el programa es mayor. Esto hace que la depuración de código propio o ajeno, pueda llegar a ser algo tedioso.	Su aprendizaje es complejo.
En FORTRAN se recurre mucho a las sentencias <i>goto</i> . La legibilidad del código empeora aún más.	Normalmente cuando alguien aprende a programar en C++, siempre será este lenguaje su primera opción para cualquier tipo de programación.
No existen muchos entornos de programación para FORTRAN.	No existe tanta información sobre programación científica como para FORTRAN.
Al momento de mostrar gráficos y/o acceder a bases de datos, es necesario recurrir a soluciones ajenas a FORTRAN	Existe un menor número de programadores científicos de C++ que de FORTRAN. Aunque la distancia disminuye a pasos agigantados.

6.2.2. Software

Para el desarrollo del código computacional, se utilizó Bloodshed Dev-C++, que es un Entorno Integrado de Desarrollo (Integrated Development Environment, IDE) para programar en lenguaje C/C++. Utiliza como compilador a Mingw (Minimalist GNU* for Windows), una versión de GCC (GNU Compiler Colletion).

Dev-C++ puede además ser usado en combinación con Cygwin y cualquier compilador basado en GCC. El Entorno está desarrollado en el lenguaje Delphi de Borland. Y su compilador de C++ genera código objeto para DOS (modo consola) y para Windows con un entorno de programación visual integrado. Por supuesto, es un software de uso gratuito (licencia GPL); desarrollado por Colin Laplace y Hongli Lai.

Con respecto al compilador GCC, se puede expresar sin duda alguna, que es el compilador que cada vez se acerca más al estándar ANSI/ISO C++, lo que permite obtener

códigos mejor estructurados y de mayor portabilidad. A diferencia de otros compiladores, cuya única preocupación es el desarrollo de interfases gráficas de forma práctica y eficiente; lo que es coherente con la directriz que siguen la mayoría de los compiladores comerciales. Y como ejemplo, puede expresarse el uso de plantillas (*templates*), las cuales alcanzan en el compilador GCC, una forma casi completamente estructurada, lo que no se logra en otro compilador.

6.3. Implementación numérica: fase continua

6.3.1. Preprocesamiento de la malla

A pesar del conjunto de beneficios que ofrece el software Gmsh, para la discretización de un dominio predefinido, no es capaz de otorgar una relación entre los elementos de dominio y los elementos de contorno generados. Por tanto, fue necesario determinar a que elemento de dominio pertenece cada elemento de contorno, así como su posición dentro del mismo.

Para lograr este propósito, se construyeron los elementos frontera de cada elemento de dominio, y posteriormente se compararon con los elementos de contorno. Esto permitió realizar una completa vinculación entre los elementos de contorno y los elementos de dominio.

La necesidad de este proceso relacional, radica en que la evaluación numérica de las integrales de contorno, se realiza sobre el marco geométrico de referencia del elemento de dominio al que pertenece el elemento de contorno que se desea integrar.

6.3.2. Optimización de la numeración global de los nodos

Debido a que el software Gmsh no incorpora la capacidad de realizar una numeración global de nodos, basada en la menor dispersión de la conectividad elemental; fue necesario transformar la numeración global de los nodos, generada en la construcción de la malla.

La transformación de la numeración global de nodos, requirió del algoritmo de Gibbs-Poole-Stockmeyer. Así, para alcanzar este propósito, el algoritmo codificado se tomó de la colección de ACS (Association for Computing Machinery), mismo que corresponde al algoritmo 582 (Lewis, 1982).

El algoritmo 582, se encuentra escrito en lenguaje FORTRAN. Por tanto, fue necesario compilarlo mediante el compilador G77 (FORTRAN 77) de la colección de compiladores GNU (GCC). Asimismo, para interpretar en lenguaje C++ al objeto compilado, se requirió de la librería `libg2c.a`.

Este algoritmo genera una nueva numeración global de nodos, que permite disminuir el ancho de la semibanda de la matriz de coeficientes, del sistema algebraico resultante de la discretización del problema físico planteado.

La reducción del ancho de la semibanda, depende de sí el problema físico se encuentra descrito en un marco de referencia 2D o 3D; asimismo, del número de variables introducidas. Por lo general, la eficiencia del algoritmo, otorga una reducción del 1%-10% en el almacenamiento de datos, con respecto a conservar la numeración global de nodos, propuesta por el software Gmsh.

Dada la naturaleza del algoritmo 582, también fue necesario implementar una subrutina que evaluara las adyacencias para cada nodo dentro de la malla, puesto que el algoritmo 582 no trabaja directamente sobre las conectividades elementales.

6.3.3. Funciones y gradientes de interpolación

La librería desarrollada en este proyecto, incorpora funciones de interpolación para las siguientes entidades geométricas: línea, triángulo, cuadrilátero, tetraedro, hexaedro, prisma y pirámide. Las funciones de interpolación consideran elementos geométricos de orden lineal y cuadrático. Para su construcción se utilizaron las técnicas descritas en §5.1.4. La descripción de estas funciones de interpolación pueden consultarse en el Apéndice A.

Es necesario precisar que las funciones de interpolación, son indiferentes al hecho sobre sí serán utilizadas en una integral de dominio o contorno. En contraste, con la naturaleza de los gradientes de interpolación, que sí son dependientes del tipo de integral donde serán requeridas.

Los gradientes de interpolación son indispensables durante la transformación de una integral de dominio, desde un sistema geométrico de referencia, a un sistema geométrico del dominio real; debido a que se requiere el determinante del Jacobiano asociado a la transformación de coordenadas, mismo que es computado a través de los componentes del gradiente de interpolación.

En el caso de la transformación geométrica de una integral de contorno, se requiere el cálculo de los parámetros:

$$\mathbf{J}_L = \left\| \frac{\partial \vec{x}}{\partial \zeta} \right\| \quad \text{ó} \quad \mathbf{J}_S = \left\| \frac{\partial \vec{x}}{\partial \zeta_1} \times \frac{\partial \vec{x}}{\partial \zeta_2} \right\| \quad (6.1)$$

dependiendo de sí es una integral sobre una línea ó una integral sobre una superficie, respectivamente. Esto introduce la construcción de un conjunto adicional de gradientes de interpolación, pero definido sobre el contorno donde se realiza la integración. La descripción de estos gradientes de interpolación pueden consultarse en los Apéndices B y C, respectivamente.

6.3.4. Integración numérica

Se implementaron los puntos de cuadratura para las siguientes entidades geométricas: línea, triángulo y tetraedro. El cálculo de los puntos de integración y los coeficientes peso para elementos lineales se realizó mediante la subrutina `gauleg` descrita en *Numerical Recipes in C++* (Press y col., 2002). Esta subrutina esta basada en el método de Gauss-Legendre. En el caso de elementos triangulares y tetraédricos, los puntos de cuadratura se tomaron de la librería `quadraturelib.f`, propiedad del Prof. Ed Akin².

²Accesibles en <http://www.owlnet.rice.edu/>.

Para la evaluación de integrales de contorno, fue necesario construir un conjunto de puntos de cuadratura adicionales. Debido que los elementos geométricos de contorno, se definen sobre el mismo marco geométrico de referencia del elemento finito al que pertenece.

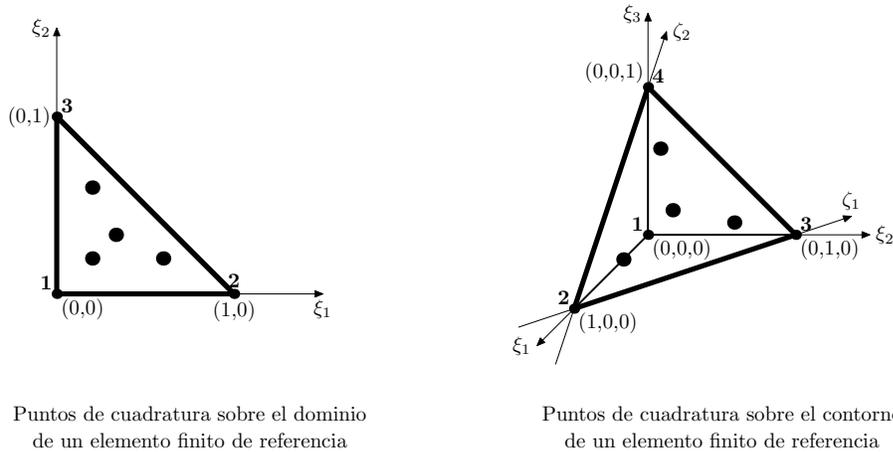


Figura 6.2: Transformación de los puntos de cuadratura para el contorno de un elemento geométrico de referencia.

Por tanto, fue indispensable realizar una transformación geométrica de los puntos de cuadratura, de un dominio base al contorno prescrito del elemento finito donde se desea realizar una integración numérica de contorno.

6.3.5. Generación de los vectores unitarios normales

Los vectores unitarios normales son intrínsecamente parte de las integrales de contorno, sobre dominios bidimensionales y tridimensionales. Por tanto, la generación numérica de estos vectores unitarios normales, resulta necesaria para cualquier discretización numérica basada en el método de los residuos ponderados.

La metodología utilizada para el cómputo de estos vectores unitarios normales, bajo la premisa de evitar el excesivo consumo de tiempo de ejecución, fue construirlos sobre un elemento finito de referencia, y luego mediante una transformación geométrica, tras-

ladarlos al dominio real.

Para dominios bidimensionales sobre un marco de referencia $\vec{\xi}$, si los puntos $(\xi_{i,1}, \xi_{j,1})$ y $(\xi_{i,2}, \xi_{j,2})$ definen al contorno donde se desea evaluar el vector unitario normal \vec{n} , entonces

$$\vec{n} = \frac{1}{\sqrt{(\xi_{i,2} - \xi_{i,1})^2 + (\xi_{j,2} - \xi_{j,1})^2}} [(\xi_{j,2} - \xi_{j,1}), -(\xi_{i,2} - \xi_{i,1})] \quad (6.2)$$

Y en el caso de dominios tridimensionales sobre un marco de referencia $\vec{\xi}$, si los puntos $(\xi_{i,1}, \xi_{j,1}, \xi_{k,1})$, $(\xi_{i,2}, \xi_{j,2}, \xi_{k,2})$ y $(\xi_{i,3}, \xi_{j,3}, \xi_{k,3})$ definen al contorno donde se desea evaluar el vector unitario normal \vec{n} , entonces

$$\vec{n} = \frac{\vec{l}_1 \times \vec{l}_2}{\|\vec{l}_1 \times \vec{l}_2\|} \quad \text{donde} \quad \begin{aligned} \vec{l}_1 &= (\xi_{i,2}, \xi_{j,2}, \xi_{k,2}) - (\xi_{i,1}, \xi_{j,1}, \xi_{k,1}) \\ \vec{l}_2 &= (\xi_{i,3}, \xi_{j,3}, \xi_{k,3}) - (\xi_{i,2}, \xi_{j,2}, \xi_{k,2}) \end{aligned} \quad (6.3)$$

6.3.6. Matrices locales de rigidez y vectores locales de carga

Dentro de la formulación variacional de un problema físico, es común la aparición de integrales por subdominio del tipo:

$$\int_{\Omega^e} \mathbf{P}_k[\delta u_k^e(\vec{x})] \mathbf{Q}_k[\vec{u}^e(\vec{x})] dV \quad (6.4)$$

donde el operador \mathbf{Q}_k es lineal con respecto al componente $u_s(\vec{x})$ del vector de funciones $\vec{u}(\vec{x})$, y por tanto su formulación discreta conduce a la construcción de las siguientes matrices locales de rigidez

$$[\mathbf{m}_{ks}^e]_{ij} \equiv \int_{\Omega^e} \mathbf{P}_k[\phi_{k,i}^e(\vec{x})] \mathbf{Q}_k^{(s)}[\vec{u}^e(\vec{x}) : \phi_{s,j}^e(\vec{x})] dV \quad (6.5)$$

Con el propósito de simplificar la codificación computacional de estas matrices locales de rigidez; se ha creado un conjunto de subrutinas, las cuales contienen las instrucciones necesarias para la construcción numérica de las matrices locales de rigidez, que tienen origen en las formulaciones variacionales listadas en el cuadro 6.3.

Los escalares u y v , y los vectores \vec{u} y \vec{v} , corresponden a las funciones a aproximar mediante una interpolación nodal por subdominios. El escalar w y el vector \vec{w} , son funciones conocidas; así como el coeficiente $\alpha(\vec{x})$.

Cuadro 6.3: Formulaciones variacionales codificadas computacionalmente para la construcción de las matrices locales de rigidez

$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) \delta u v dV$	$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) \delta \vec{u} \cdot \nabla v dV$	$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) \nabla \delta u \cdot \vec{v} dV$
$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) \nabla \delta u \cdot \nabla v dV$	$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) \delta u (\nabla \cdot \vec{v}) dV$	$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) (\nabla \cdot \delta \vec{u}) v dV$
$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) (\nabla \cdot \delta \vec{u}) (\nabla \cdot \vec{v}) dV$	$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) (\nabla \delta \vec{u}) : (\nabla \vec{v}) dV$	$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) \delta u (\vec{w} \cdot \nabla v) dV$
$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) \delta \vec{u} \cdot (\vec{w} \cdot \nabla \vec{v}) dV$	$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) (\nabla \delta \vec{u}) : (\nabla \vec{v})^t dV$	$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) \nabla \delta u \cdot \vec{w} v dV$
$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) \delta \vec{u} : (\vec{w} \vec{v}) dV$	$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) \delta \vec{u} : (\vec{v} \vec{w}) dV$	$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) \delta \vec{u} \cdot \nabla \vec{w} \cdot \vec{v} dV$
$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) \delta \vec{u} \cdot (\nabla \vec{w})^t \cdot \vec{v} dV$	$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) \delta \vec{u} \cdot \vec{w} \cdot \nabla \vec{v} dV$	$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) \delta \vec{u} \cdot \vec{w} \cdot (\nabla \vec{v})^t dV$

Asimismo, puede suceder que el operador diferencial \mathbf{Q}_k , sea independiente del vector de funciones $\vec{u}(\vec{x})$. La discretización numérica de esta clase de formulación variacional, conduce a la construcción de los vectores locales de carga (cuadro 6.4).

Cuadro 6.4: Formulaciones variacionales codificadas computacionalmente para la construcción de los vectores locales de carga

$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) \delta u w dV$	$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) \delta \vec{u} \vec{w} dV$	$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) (\nabla \cdot \delta \vec{u}) w dV$	$\int_{\Omega} \alpha(\vec{x}) \nabla \delta u \cdot \vec{w} dV$
---	---	--	--

Por supuesto, el origen de las matrices locales de rigidez y de los vectores de carga, no compete solamente a las integrales de dominio, sino también a las integrales de contorno; tal como se expuso en §5.3.1. En este caso, las rutinas codificadas para las formulaciones variacionales correspondientes, igualmente son válidas.

6.3.7. Proceso de ensamble

Aunque matemáticamente, una transformación vectorial puede describir la conexión entre las matrices locales de rigidez y los vectores locales de carga, con las matrices globales de rigidez y los vectores globales de carga, respectivamente. La codificación computacional de este proceso mediante productos matriciales, resulta en un alto consumo de tiempo de ejecución. Una solución a este problema, consiste en generar un conjunto de vectores guía que sirvan para dirigir el proceso de ensamble de cada elemento finito del dominio discretizado.

El proceso de ensamble, prácticamente inicia desde la generación de los grados de libertad (ó variables nodales) requeridos en cada nodo de interpolación. Pues directamente de este proceso es posible generar los vectores guía del proceso de ensamble.

Primero es necesario determinar el número de grados de libertad que existe en cada nodo de interpolación; así como identificar a que variable pertenecen. Definidas las variables involucradas en el modelo matemático y su orden de interpolación, es posible generar una matriz de datos lógicos, donde la posición de la fila indique el número de nodo y la posición de la columna indique el número de variable. De forma tal que un valor verdadero o falso, determine sí existe o no, un grado de libertad para un par nodo-variable dado.

Construida la matriz de datos lógicos que definen los grados de libertad involucrados, es posible realizar la numeración de los grados de libertad, fila por fila. Esta información en conjunto con la conectividad elemental, permiten construir los vectores guía del proceso de ensamble.

Los vectores guía del proceso de ensamble, simplemente indican donde colocar cada elemento de las matrices locales de rigidez en la matriz global de rigidez, y donde colocar los elementos de los vectores locales de carga en el vector global de carga.

Este procedimiento, permite la generalización del uso variado de distintos órdenes de interpolación entre las variables del modelo matemático por resolver.

6.3.8. Introducción de condiciones de contorno tipo Dirichlet

Para la introducción de condiciones de contorno preescritas

$$u_k(\vec{x}) = g_k(\vec{x}) \quad \forall \vec{x} \in \partial\Omega_k \quad (6.6)$$

Se codificaron el método de la penalidad (utilizando un número grande) y el método de limpieza (limpiando filas y columnas), tal como se describieron en la §5.4.2.

Por supuesto, durante la codificación de estos algoritmos, se consideraron dos esquemas de almacenamiento de datos con respecto a la matriz de coeficientes del sistema algebraico lineal resultante: matriz completa y matriz banda.

La introducción de estas condiciones esenciales, se realizó en tres etapas:

- Selección. Se codificaron las expresiones matemáticas que prescriben a los valores de las variables nodales, para cada entidad física de contorno donde se requirió.
- Carga. Se asignó en un mismo bloque de memoria, cada uno de los conjuntos de valores preescritos de las variables nodales, pertenecientes a las entidades física de contorno requeridas.
- Aplicación. Se aplicaron las condiciones esenciales al sistema algebraico lineal resultante, mediante alguno de los dos métodos descritos anteriormente.

6.3.9. Resolución de sistemas algebraicos lineales

En este rubro, se codificaron una serie de algoritmos, mismos que permiten resolver sistemas algebraicos lineales. Es necesario precisar que los algoritmos se codificaron considerando dos esquemas de almacenamiento de datos, con respecto a la matriz de coeficientes del sistema algebraico lineal resultante: matriz completa y matriz banda. Incluso

en los métodos directos por descomposición.

Métodos iterativos estacionarios: Richardson, Gauss-Jacobi, Gauss-Seidel, Sobre-relajación Sucesiva, Sobrerrelajación Sucesiva Simétrica.

Métodos iterativos no estacionarios: Gradiente conjugado, Gradiente Biconjugado, Gradiente Conjugado Cuadrado, Gradiente Biconjugado Estabilizado.

Métodos directos: Eliminación Gauss-Jordan, Descomposición LU Dolittle con y sin pivoteo, Descomposición LU Crout con y sin pivoteo, Descomposición LU Cholesky con y sin pivoteo.

6.4. Implementación numérica: fase dispersa

6.4.1. Interpolación gaussiana sobre una rejilla homogénea

El uso de funciones gaussianas como funciones ensayos en la búsqueda de una solución, en los métodos de partículas SHP y MLS es una práctica común. Tales requerimientos son debido a que al igual que en el FEM, requieren el uso de interpolaciones por subdominios. Quizá esta declaración en una primera instancia parece incongruente; sin embargo dada la naturaleza de una función gaussiana o de las funciones *splines* utilizadas en estos métodos, es posible afirmar que el dominio donde estas funciones se consideran no nulas (para fines numéricamente prácticos) es simplemente un subdominio.

Una situación de interés numérico, corresponde a: ¿que sucede si se realiza una interpolación nodal sobre una rejilla de celdas cuadradas, donde las funciones nodales ensayo corresponden a una función gaussiana?

Considérese un espacio de referencia acotado, y definido por los límites; $-1 \leq x \leq 1$; $-1 \leq y \leq 1$. La construcción de una rejilla con un factor de subdivisión n , puede ser

descrita mediante una representación nodal, donde las coordenadas de cada nodo están expresadas como

$$x_i = -L + \frac{2L}{n}i; \quad y_j = -L + \frac{2L}{n}j; \quad \text{con } L = 1; \quad (6.7)$$

y donde $0 \leq i \leq n$ y $0 \leq j \leq n$. La interpolación que se sugiere corresponde a

$$g(x, y) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n \alpha_{ij} \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{1}{2}z_{ij}^2\right) \quad \text{con } z_{ij} = \frac{n\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_j)^2}}{2L} \quad (6.8)$$

Una interesante propiedad que ofrece esta clase de interpolación, corresponde a $g(x_i, y_j) = \alpha_{ij}$ en el límite $n \rightarrow \infty$. Aún para valores $n = 100$, esta clase de interpolación ofrece una excelente resolución, bajo ciertos refinamientos numéricos que serán detallados posteriormente. Por supuesto, esta característica ubica a esta clase de interpolación como nodal para casos límites donde el factor de subdivisión es alto.

Como nota adicional, es importante comentar, que los valores que definen al espacio de referencia, no son relevantes en la implementación de esta interpolación; sin embargo, el dominio elegido simplifica su descripción. Así como, la imprecisión de las interpolaciones en la vecindad de la frontera del dominio donde se define la interpolación, situación que puede ser corregida incrementando los límites del dominio donde se requiere realizar la interpolación, y así asegurar nunca estar cerca de la vecindad del contorno.

6.4.2. Interpolación gaussiana sobre una rejilla deformada

Aunque la interpolación gaussiana, ha sido definida sobre una rejilla homogénea, también es válida sobre una rejilla deformada ligeramente de una forma homogénea. Evidentemente, esto ocasiona un cierto grado de pérdida de exactitud en la aproximación, misma que es dependiente del grado de deformación.

Assumiendo que el grado de deformación de la rejilla no ocasiona desviaciones importantes en el proceso de interpolación. Es factible transformar la interpolación de una rejilla deformada a una rejilla homogénea sin gran costo computacional.

Considérese que la rejilla homogénea a la cual se desea trasladar la deformación está definida mediante

$$x_i = -L + \frac{2L}{n}i; \quad y_j = -L + \frac{2L}{n}j \quad (6.9)$$

y la rejilla deformada corresponde a

$$x'_i = x_i + \delta x_{ij}; \quad y'_j = y_j + \delta y_{ij} \quad (6.10)$$

la cuál ha sido definida con respecto a la rejilla homogénea; y con ello, las cantidades δx_{ij} y δy_{ij} son las desviaciones existentes en el nodo P_{ij} .

Una formulación matemática, que permite distribuir el error sobre el dominio, en el cambio de interpolación de una rejilla deformada a una rejilla homogénea, es

$$\int_{\Omega} \delta g[g(x, y) - g'(x, y)] dv = 0 \quad (6.11)$$

sin embargo su implementación numérica genera un sistema discreto de $n \times n$, lo cuál es costoso computacionalmente. Por tanto, se sugiere una transformación iterativa con un resultado admisible.

Una primera solución bruta para evaluar a los parámetros α_{ij} , corresponde a

$$\alpha_{ij} = g'(x_i, y_j) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n \alpha'_{ij} \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{1}{2}z_{ij}^2\right) \quad \text{con} \quad z_{ij} = \frac{n\sqrt{(x-x'_i)^2 + (y-y'_j)^2}}{2L} \quad (6.12)$$

Esta solución es factible refinarla. Sí se define al error existente entre ambos esquemas de aproximación como

$$e_{ij} = g(x_i, y_j) - g'(x_i, y_j) \quad (6.13)$$

así la corrección sobre los parámetros α_{ij} , es

$$\alpha_{ij} \leftarrow \alpha_{ij} - e_{ij} \quad (6.14)$$

Este refinamiento puede aplicarse sucesivamente hasta alcanzar un grado de aproximación preescrito.

7.1. Descripción del modelo

7.1.1. Introducción

Un caldo de cultivo en fermentaciones sumergidas, frecuentemente involucra tres fases: gaseosa, debido al requerimiento de oxígeno en sistemas aeróbicos; líquida, corresponde al medio que acarrea los nutrientes necesarios para el desarrollo del microorganismo; sólida, el microorganismo mismo, el cual puede ser libre o inmovilizado.

Conocer las propiedades reológicas de un sistema fermentativo es de suma importancia. Debido a que juegan un papel crucial en los procesos de escalamiento. A través de esta información, se juzgan una variedad de parámetros para el diseño industrial de un bioproceso, entre los cuales destacan: dimensión geométrica del biorreactor; número, posición espacial y clase de impulsores; potencia a suministrar para la agitación; y tasa de aireación.

Algunos estudios reológicos toman al sistema de fermentación como un todo, no distinguiéndose los mecanismos de interacción de cada componente (aireación, medio de cultivo, microorganismo), sino solo el efecto neto. Por tanto, el estudio consiste en variar algunos parámetros del sistema fermentativo como: velocidad de agitación, tasa de aireación, tipo de impulsores, etc.; y cuantificar el efecto neto sobre la potencia requerida sobre el bioproceso. Después de obtener un cúmulo de información sobre varios ensayos

experimentales, se procede a realizar un estudio adimensional, buscando una serie de relaciones entre un conjunto de números adimensionales (número de Reynolds, número de potencia, número de Froud, etc.), que satisfagan las variables cuantificadas en los ensayos experimentales (Chisti y Jauregui-Haza, 2002).

Otras investigaciones, se enfocan únicamente a la naturaleza reológica del medio de cultivo y el microorganismo que soporta. Con la finalidad, de ajustar típicamente a algún modelo no newtoniano el comportamiento del medio de cultivo en conjunto con el microorganismo, a diferentes estadios de la fermentación. Es muy común que se utilice el modelo de la potencia, y los parámetros índice de consistencia e índice de comportamiento del flujo, se describan dinámicamente en el transcurso de la fermentación. Incluso estos parámetros, que de forma indirecta manifiestan los cambios morfológicos¹ del microorganismo, han sido relacionados con la teoría de los fractales. Encontrándose que los patrones de cambio de dimensión fractal del microorganismo, tienen una gran similitud con el comportamiento del índice de consistencia (Kim y col., 2005).

También, existen numerosos estudios dentro de la simulación numérica, para describir matemáticamente el fenómeno de la aireación dentro de un sistema fermentativo. Básicamente, tratan el medio de cultivo incluyendo al microorganismo como la fase líquida, y a las burbujas de aire, como la fase gaseosa. Se valen de la dinámica de fluidos multifase para realizar el planteamiento del conjunto de ecuaciones de continuidad y transporte de *momentum*, cuya resolución obtienen numéricamente, asistidos por un ordenador. Frecuentemente a la fase líquida, la consideran como un fluido con comportamiento no newtoniano, tomando en cuenta el efecto neto de la interacción del medio de cultivo y la fase líquida. Con respecto a la fase gaseosa, esta se expresa mediante una distribución de tamaños de burbujas, a través de un balance poblacional, el cual incorpora en su descripción los fenómenos de coalescencia y ruptura de burbujas (Mouza y col., 2004). Incluso se han realizado mejoras a las predicciones del coeficiente de transferencia de masa en

¹considerando que los nutrientes o metabolitos excretados, no contribuyen significativamente al comportamiento del fluido.

sistemas de burbujas mediante mediciones de esfericidad de las burbujas (Botello-Álvarez y col., 2004).

Sin embargo, a diferencia de la investigación del efecto de la aireación, existe poco desarrollo en el estudio de los mecanismos de interacción microorganismo-medio de cultivo, desde el punto de vista del fenómeno de transporte de *momentum*. Quizá debido en parte, a que no representa la excesiva complejidad de la interacción aire-medio de cultivo. Esta simplicidad y desinformación, lo convierte en un caso de estudio muy atractivo, que toma como objeto esta tesis.

7.1.2. Descripción matemática

El modelo matemático que se formula en este proyecto considera la posible interacción microorganismo-medio de cultivo bajo un enfoque Lagrangiano-Euleriano. Donde el medio de cultivo se considera como la fase continua, y el microorganismo como la fase dispersa.

Fase continua

El medio de cultivo, se describe matemáticamente a través de la ecuaciones de continuidad y transporte de *momentum*, promediadas volumétricamente.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \rho_1) + \nabla \cdot \alpha_1 \rho_1 \langle \vec{u}_1 \rangle_{\Omega_1} = \Gamma_1 \quad (7.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \rho_1 \langle \vec{u}_1 \rangle_{\Omega_1}) + \nabla \cdot \alpha_1 \rho_1 \langle \vec{u}_1 \vec{u}_1 \rangle_{\Omega_1} = \alpha_1 \rho_1 \langle \vec{\phi}_1 \rangle_{\Omega_1} + \nabla \cdot \alpha_1 \langle \boldsymbol{\sigma}_1 \rangle_{\Omega_1} + \vec{\Theta}_1 \quad (7.2)$$

Por supuesto, esta es una formulación generalizada, cuyo tratamiento directo podría ser quizás infructuoso, dada su compleja naturaleza. Se asumirán un conjunto de ciertas restricciones.

Se considerará que no existe transferencia interfacial de masa, $\Gamma_1 = 0$, así como despreciables los efectos de tensión superficial.

Asimismo, dada la escala de tiempo del crecimiento microbiano con respecto al tiempo necesario para que el sistema fermentativo alcance un estado de estacionaridad en el transporte de *momentum*, se considera al sistema estacionario. Aunado al hecho de que no se pretende introducir ninguna dependencia temporal en ninguna propiedad reológica.

Con respecto, a la definición del tensor esfuerzo, está dada por una relación constitutiva newtoniana para su componente desviatórico, descrita como

$$\langle \boldsymbol{\sigma}_1 \rangle_{\Omega_1} = -\langle p \rangle_{\Omega_1} \mathbf{I} + \mu \left[\nabla \langle \vec{u}_1 \rangle_{\Omega_1} + \nabla \langle \vec{u}_1 \rangle_{\Omega_1}^t \right] \quad (7.3)$$

evidentemente, se ha despreciado la interacción interfacial. Sin embargo se asume que tal contribución será contabilizada en el término de transporte interfacial de *momentum* ($\vec{\Theta}_1$).

Con respecto al término de transporte interfacial de *momentum*, solo se ha tomado como relevante la fuerza de arrastre, sin embargo la expresión se puede generalizar mediante

$$\vec{\Theta}_1 = \sum_s \vec{F}_1^s \quad (7.4)$$

donde \vec{F}_1^s representa al conjunto de fuerzas de fricción a las cuales se asume está sometida la fase dispersa. Una breve descripción de estas fuerzas puede encontrarse en §3.2.2.

Dada la naturaleza compleja de tensor esfuerzo de submalla, se asume como despreciable, con lo cual el término convectivo se reduce a

$$\nabla \cdot \alpha_1 \rho_1 \langle \vec{u}_1 \vec{u}_1 \rangle_{\Omega_1} \approx \nabla \cdot \alpha_1 \rho_1 \langle \vec{u}_1 \rangle_{\Omega_1} \langle \vec{u}_1 \rangle_{\Omega_1} \quad (7.5)$$

Además, se considera como única fuerza de volumen, a la acción de la fuerza de gravedad.

Bajo todos estos argumentos, las ecuaciones de continuidad y transporte de *momentum*, promediadas volumétricamente, se simplifican a

$$\nabla \cdot \alpha_1 \rho_1 \langle \vec{u}_1 \rangle_{\Omega_1} = 0 \quad (7.6a)$$

$$\alpha_1 \rho_1 \langle \vec{u}_1 \rangle_{\Omega_1} \cdot \nabla \langle \vec{u}_1 \rangle_{\Omega_1} = -\nabla \alpha_1 \langle p \rangle_{\Omega_1} + \nabla \cdot \alpha_1 \langle \boldsymbol{\tau}_1 \rangle_{\Omega_1} + \alpha_1 \rho_1 \vec{g} + \vec{\Theta}_1 \quad (7.6b)$$

$$\langle \boldsymbol{\tau}_1 \rangle_{\Omega_1} = \mu \left[\nabla \langle \vec{u}_1 \rangle_{\Omega_1} + \nabla \langle \vec{u}_1 \rangle_{\Omega_1}^t \right] \quad (7.6c)$$

$$\vec{\Theta}_1 = \sum_s \vec{F}_1^s \quad (7.6d)$$

Fase dispersa

Bajo un enfoque Lagrangiano, el movimiento de cada célula microbiana se describe mediante

$$\alpha_2 \rho_2 \frac{d\vec{u}_2}{dt} = \sum_s \vec{F}_2^s + \alpha_2 \rho_2 \vec{g} \quad (7.7)$$

donde el conjunto de fuerzas F_2^s representan a las reacciones de las fuerzas F_1^s , ésto es

$$\vec{F}_1^s + \vec{F}_2^s = 0 \quad (7.8)$$

Además, las fracciones volumétricas satisfacen la restricción

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 0; \quad (7.9)$$

7.1.3. Formulación débil: fase continua

Puesto que se ha propuesto el método del elemento finito para resolver la fase continua, a continuación se presenta la formulación débil elegida para la expresión matemática que la describe²:

Transporte de *momentum*

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \delta \vec{u}_1 \cdot \alpha_1 \rho_1 \vec{u}_1 \cdot \nabla \vec{u}_1 \, dv + \int_{\Omega} \alpha_1 \mu \nabla \delta \vec{u}_1 : \nabla \vec{u}_1 \, dv + \int_{\Omega} \alpha_1 \mu \nabla \delta \vec{u}_1 : \nabla \vec{u}_1^t \, dv \\ & - \int_{\Omega} \alpha_1 (\nabla \cdot \delta \vec{u}_1) p \, dv - \int_{\Omega} \alpha_1 \rho_1 \delta \vec{u}_1 \cdot \vec{g} \, dv - \int_{\Omega} \delta \vec{u}_1 \cdot \vec{\Theta}_1 \, dv = \int_{\partial \Omega} \delta \vec{u}_1 \cdot \alpha_1 \mu \nabla \vec{u}_1 \cdot \vec{n} \, ds \\ & \quad + \int_{\partial \Omega} \delta \vec{u}_1 \cdot \alpha_1 \mu \nabla \vec{u}_1^t \cdot \vec{n} \, ds - \int_{\partial \Omega} \delta \vec{u}_1 \alpha_1 p \cdot \vec{n} \, ds \quad (7.10) \end{aligned}$$

²Con el propósito de presentar una expresión legible se ha suprimido al operador promedio volumétrico.

Ecuación de continuidad

$$\int_{\Omega} \delta p \rho_1 \alpha_1 \nabla \cdot \vec{u}_1 \, dv + \int_{\Omega} \delta p \rho_1 \nabla \alpha_1 \cdot \vec{u}_1 \, dv = 0 \quad (7.11)$$

Se ha aplicado integración por partes a la ecuación de transporte de *momentum*, en los términos de difusión y presión, con el propósito de relajar las condiciones de admisibilidad de las funciones ensayo, y así permitir una adecuada implementación de elementos finitos de orden cuadráticos para el campo vectorial de la velocidad, y elementos finitos de orden lineal para el campo escalar presión.

7.1.4. Método del Lagrangiano aumentado

La transformación discreta requerida para el esquema matemático propuesto en §7.1.3, corresponde simplemente a una tarea de codificación computacional directa. Sin embargo, aún considerando la fracción volumétrica conocida, el sistema discreto resultante corresponde a un conjunto de ecuaciones algebraicas desacopladas en la variable presión, la cual está restringida a la naturaleza de la ecuación de continuidad. Es por ello indispensable la introducción de un técnica numérica que permita lidiar con esta inconveniencia.

En este trabajo se optó por manejar al método del Lagrangiano aumentado como la herramienta que permita dirigir la convergencia numérica del modelo matemático de la fase continua. Básicamente, este método introduce una variable ficticia \tilde{p} cuyo valor es aproximado al escalar presión p , de forma tal que la ecuación de continuidad³:

$$\nabla \cdot \alpha_1 \rho_1 \vec{u}_1 = 0 \quad (7.12)$$

se sustituye por la expresión

$$\kappa \nabla \cdot \alpha_1 \rho_1 \vec{u}_1 = \alpha_1 (\tilde{p} - p) \quad (7.13)$$

³Con el propósito de presentar una expresión legible se ha suprimido al operador promedio volumétrico.

donde κ es un parámetro que coadyuva a facilitar la aproximación

$$\nabla \cdot \alpha_1 \rho_1 \vec{u}_1 = \frac{\alpha_1}{\kappa} (\tilde{p} - p) \approx 0 \quad (7.14)$$

la introducción de esta variable ficticia transforma la formulación débil obtenida en §7.1.3,

Transporte de *momentum*

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \delta \vec{u}_1 \cdot \alpha_1 \rho_1 \vec{u}_1 \cdot \nabla \vec{u}_1 \, dv + \int_{\Omega} \alpha_1 \mu \nabla \delta \vec{u}_1 : \nabla \vec{u}_1 \, dv + \int_{\Omega} \alpha_1 \mu \nabla \delta \vec{u}_1 : \nabla \vec{u}_1^t \, dv \\ & + \kappa \int_{\Omega} \alpha_1 (\nabla \cdot \delta \vec{u}_1) (\nabla \cdot \vec{u}_1) \, dv + \kappa \int_{\Omega} (\nabla \cdot \delta \vec{u}_1) (\nabla \alpha_1) \vec{u}_1 \, dv \\ & \quad - \int_{\Omega} \alpha_1 \rho_1 \delta \vec{u}_1 \cdot \vec{g} \, dv - \int_{\Omega} \delta \vec{u}_1 \cdot \vec{\Theta}_1 \, dv \\ & = \kappa \int_{\partial\Omega} \delta \vec{u}_1 \cdot \alpha_1 (\nabla \cdot \vec{u}_1) \cdot \vec{n} \, ds + \kappa \int_{\partial\Omega} \delta \vec{u}_1 \cdot (\nabla \alpha_1 \cdot \vec{u}_1) \cdot \vec{n} \, ds \\ & \quad + \int_{\partial\Omega} \delta \vec{u}_1 \cdot \alpha_1 \mu \nabla \vec{u}_1 \cdot \vec{n} \, ds + \int_{\partial\Omega} \delta \vec{u}_1 \cdot \alpha_1 \mu \nabla \vec{u}_1^t \cdot \vec{n} \, ds \\ & \quad - \int_{\Omega} \delta \vec{u}_1 \cdot \nabla \alpha_1 \tilde{p} \, dv - \int_{\Omega} \delta \vec{u}_1 \cdot \alpha_1 \cdot \nabla \tilde{p} \, dv \quad (7.15) \end{aligned}$$

Ecuación de continuidad

$$\kappa \int_{\Omega} \delta p \rho_1 \alpha_1 \nabla \cdot \vec{u}_1 \, dv + \kappa \int_{\Omega} \delta p \rho_1 \nabla \alpha_1 \cdot \vec{u}_1 \, dv + \int_{\Omega} \delta p \alpha p \, dv = \int_{\Omega} \delta p \alpha \tilde{p} \, dv \quad (7.16)$$

Puesto que la resolución del sistema discreto asociado a la formulación variacional anterior, se desarrolla sobre un proceso iterativo, debido en primer instancia al término convectivo; o bien, a la naturaleza de algunos de los términos de transporte de *momentum* interfacial, como es el caso de la fuerza de arrastre. Esto ocasiona que se genere una serie consecutiva de soluciones para el campo escalar presión: $p^{(1)}, p^{(2)}, \dots, p^{(k)}$; que bajo un esquema de convergencia numérica estable, satisface

$$\|p^{(2)} - p^{(1)}\| > \|p^{(3)} - p^{(2)}\| > \dots > \|p^{(k)} - p^{(k-1)}\| > \dots \quad (7.17)$$

Por tanto, una excelente elección de la variable ficticia \tilde{p} , corresponde a la solución obtenida previamente para la variable presión con respecto a la iteración actual que se desea computar; medida que regularmente asegura la estabilidad de la convergencia para la iteración posterior.

7.1.5. Discretización de la fase dispersa

Independientemente del tipo de fuerzas que se introducen para modelar el comportamiento del movimiento de una partícula, el método de discretización utilizado en este proyecto sobre tales ecuaciones es invariante. Por tanto, si se generaliza para cada una de las partículas la ecuación de conservación de *momentum*, esta corresponde a

$$\alpha_2 \rho_2 \frac{d\vec{u}_2}{dt} = \sum_k \vec{F}_2^k \quad (7.18)$$

donde las cantidades vectoriales \vec{F}_2^k , denotan a las fuerzas de arrastre, basset, Magnus, etc. Entonces, si el campo vectorial \vec{a} , denota a la aceleración neta que sufre una partícula, la ecuación de conservación de *momentum* se transforma⁴

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = \vec{a} \quad (7.19)$$

La primera asunción impuesta a la ecuación de transporte anterior, es considerar que en la vecindad del valor de t , la aceleración es aproximadamente constante; por supuesto, todo esto bajo el esquema de utilizar intervalos de tiempo pequeños δt . Así, la ecuación de traslación de una partícula, está dada por

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{a}(t - t_0) + \vec{u}_0 \quad (7.20)$$

Si asume que el estado de una partícula en un tiempo t_n está dada por las coordenadas (\vec{x}_n, \vec{u}_n) , después de un intervalo de tiempo δt , el estado final de la partícula corresponde a las coordenadas $(\vec{x}_{n+1}, \vec{u}_{n+1})$, donde

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n + \frac{1}{3}\delta\vec{x}^1 + \frac{1}{6}\delta\vec{x}^2 + \frac{1}{6}\delta\vec{x}^3 + \frac{1}{3}\delta\vec{x}^4 \quad (7.21)$$

$$\vec{u}_{n+1} = \vec{u}_n + \frac{1}{3}\delta\vec{u}^1 + \frac{1}{6}\delta\vec{u}^2 + \frac{1}{6}\delta\vec{u}^3 + \frac{1}{3}\delta\vec{u}^4 \quad (7.22)$$

los desplazamientos parciales $\delta\vec{x}^1$, $\delta\vec{x}^2$, $\delta\vec{x}^3$, $\delta\vec{x}^4$, son definidos mediante

$$\begin{aligned} \delta\vec{x}^1 &= \vec{a}(\vec{x}_n, t_n)\delta t^2 + \vec{u}_n\delta t \\ \delta\vec{x}^2 &= \vec{a}(\vec{x}_n + \frac{1}{2}\delta\vec{x}^1, t_n + \frac{1}{2}\delta t)\delta t^2 + \vec{u}_n\delta t \\ \delta\vec{x}^3 &= \vec{a}(\vec{x}_n + \frac{1}{2}\delta\vec{x}^2, t_n + \frac{1}{2}\delta t)\delta t^2 + \vec{u}_n\delta t \\ \delta\vec{x}^4 &= \vec{a}(\vec{x}_n + \delta\vec{x}^3, t_n + \delta t)\delta t^2 + \vec{u}_n\delta t \end{aligned}$$

⁴Se ha suprimido el subíndice para obtener una representación más legible.

las variaciones parciales de la velocidad $\delta\vec{u}^1, \delta\vec{u}^2, \delta\vec{u}^3, \delta\vec{u}^4$, se sugiere que correspondan a

$$\begin{aligned}\delta\vec{u}^1 &= \vec{a}(\vec{x}_n, t_n)\delta t \\ \delta\vec{u}^2 &= \vec{a}(\vec{x}_n + \frac{1}{2}\delta\vec{x}^1, t_n + \frac{1}{2}\delta t)\delta t \\ \delta\vec{u}^3 &= \vec{a}(\vec{x}_n + \frac{1}{2}\delta\vec{x}^2, t_n + \frac{1}{2}\delta t)\delta t \\ \delta\vec{u}^4 &= \vec{a}(\vec{x}_n + \delta\vec{x}^3\delta t, t_n + \delta t)\delta t\end{aligned}$$

Es necesario precisar que la metodología aplicada anteriormente está basada sobre una discretización explícita Runge-Kutta de orden 4. Y tiene como objeto minimizar las desviaciones generadas por la consideración de asumir una aceleración constante.

7.2. Esquema numérico general

La metodología desarrollada para la resolución del modelo matemático planteado previamente, consistió en una implementación híbrida CEL-ALE; puesto que considera una formulación Euleriana para la fase continua y una formulación Lagrangiana para la fase dispersa, valiéndose de una constante rezoñificación de la malla Lagrangiana para evitar los problemas asociados a las deformaciones excesivas.

El costo computacional de implementar una constante rezoñificación en la formulación Lagrangiana, se evita a través de una interpolación gaussiana sobre una rejilla, misma que ha sido definida en §6.4.1. Esta clase de interpolación posee la característica de requerir un bajo tiempo de ejecución para su construcción, dada la naturaleza de su implementación.

La resolución del sistema integrodiferencial asociado a la fase continua se obtuvo a través del método del elemento finito auxiliado por la técnica del Lagrangiano aumentado (§7.1.4). La fracción volumétrica se computo a través de la fase dispersa; por tanto, el resultado de este sistema diferencial condujo a la evaluación del campo vectorial de velocidad y al campo escalar de presión correspondiente a la fase continua.

Con respecto a la fase dispersa, aunque su desarrollo numérico se plantea desde una rejilla, esta representación solo tiene como objeto la formulación de un módulo de acople entre la fase dispersa y la fase continua. De hecho, los nodos de la rejilla se consideraron como partículas individuales cuyo desplazamiento está sujeto a las fuerzas interfaciales a las cuales se encuentran sometidas por la fase continua.

La resolución del sistema diferencial que describe el movimiento individual de cada partícula, se desarrolló a través de una discretización explícita Runge-Kutta de orden 4, tal como se expresa en §7.1.5. Como resulta evidente, esta discretización requirió interpolaciones en la vecindad de cada partícula, mismas que fueron obtenidas mediante la interpolación gaussiana construida para la fase dispersa.

La fracción volumétrica se trató de manera similar al método del punto material (York y col., 2000), una interesante técnica que opera sobre una representación dual (discreta-continua) de un fenómeno físico, la cual es muy utilizada en simulaciones de mecánica estructural. Se basa en la utilización de un conjunto de partículas, las cuales capturan las propiedades mecánicas del material (masa, velocidad, esfuerzo, deformación) sobre los puntos espaciales donde se localizan. Posteriormente, estas propiedades son conferidas a un conjunto de nodos que conforman una malla estructurada sobre el dominio, a través de una ponderación con funciones de forma asociadas a las celdas de la malla, y así se genera la formulación de un sistema discreto de carácter nodal.

En este caso, dada la particularidad de la metodología aplicada en esta tesis, la partícula en su desplazamiento arrastra el valor de la fracción volumétrica de su posición inicial a su posición final. La conexión partícula-nodo, ocasiona que la rejilla que inicialmente presenta una forma homogénea, se deforme ligeramente (dependiente del intervalo de tiempo considerado). Por tanto, es necesaria la rezoñificación de la rejilla, proceso numérico que se logra utilizando la técnica expresada en §6.4.2; y con ello, es posible determinar el nuevo valor de la fracción volumétrica en la posición inicial del desplazamiento de la partícula. Por supuesto, este proceso de rezoñificación constante de

la rejilla, conlleva a que en cada iteración se pierda el rastro del conjunto de partículas desplazadas, y se genere un nuevo conjunto de partículas a desplazar para la próxima iteración. El valor de la fracción volumétrica y su gradiente, utilizado en la descripción matemática para la fase continua, se realizó a través de un mapeo de la interpolación gaussiana sobre una rejilla, a la interpolación de elemento finito, lo que resultó en una implementación numérica natural para la formulación por elementos finitos implementada para la fase continua.

En conclusión, el esquema general utilizado para resolver al conjunto de sistemas integrodiferenciales expresados para la fase continua y dispersa, fue iterativo, puesto que ambos sistemas integrodiferenciales no se resolvieron simultáneamente; sino que, la información de un sistema integrodiferencial de una fase, aporta la información numérica necesaria para resolver al sistema integrodiferencial de la otra fase, de manera secuencial.

7.3. Ensayo del modelo

El modelo matemático propuesto, se ensayó sobre el estado hidrodinámico que conforma el movimiento de un fluido dentro de un par de cilindros concéntricos (un cilindro estacionario y otro móvil), ante la perturbación que genera la adición de un pulso de partículas (donde el tamaño de cada partícula fue del orden de una bacteria).

El sistema integrodiferencial de la fase continua y discreta, se adimensionalizó a través de las siguientes transformaciones:

$$\vec{u}_k^* = \frac{\vec{u}_k}{U_c}; \quad p^* = \frac{p - p_0}{\rho_1 U_c}; \quad t^* = \frac{t U_c}{R_c} \quad (7.23)$$

$$x^* = \frac{x}{R_c}; \quad y^* = \frac{y}{R_c}; \quad r_2^* = \frac{r_2}{R_c} \quad (7.24)$$

donde r_2 corresponde al radio de las partículas; la notación \vec{u}_k , generaliza al campo vectorial de la fase continua \vec{u}_1 , y la fase dispersa \vec{u}_2 ; el escalar ρ_2 , representa a la densidad de la fase continua; y p_0 a un valor de referencia de la presión p . Los parámetros utilizados en la adimensionalización, corresponden a: U_c , la velocidad lineal del cilindro móvil (cilindro

exterior); y R_c , al radio del cilindro exterior.

Los valores de los parámetros físicos utilizados fueron:

$$R_c = 0,25 \text{ m}; \quad U_c = 0,008 \frac{\text{m}}{\text{s}}; \quad \mu = 0,001 \frac{\text{kg}}{\text{m} \cdot \text{s}}; \quad \rho_1 = 1000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

$$r_2 = 1 \mu\text{m}; \quad C_D = 10,0; \quad \rho_2 = 1000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

considerando al número de Reynolds como

$$Re \equiv \frac{\rho_1 U_c R_c}{\mu} \quad (7.25)$$

el régimen de flujo analizado, corresponde al laminar, $Re = 2000$.

Se utilizó un pulso circular de radio 0,1 con ubicación del origen en las coordenadas (0.00, 0.75); medidas geométricas referidas al dominio adimensionalizado. El pulso estaba conformado por la fase dispersa con una fracción volumétrica de $\alpha_2 = 0,05$.

El sistema integrodiferencial para la fase continua, se resolvió mediante el FEM, sobre una malla conformada por 7 834 elementos triangulares de orden cuadrático. Se utilizó interpolación lineal para el campo escalar de presión e interpolación cuadrática para los dos componentes del campo vectorial de velocidad, lo cual implicó un sistema discreto de 36 163 grados de libertad.

La malla se generó mediante el software generador Gmsh. Y la conectividad elemental se optimizó mediante el algoritmo de Gibbs-Poole-Stockmeyer, el cual redujo la semibanda al valor de 589, lo que se traduce en un 3,2% del número de datos necesarios para una matriz completa.

La resolución del sistema diferencial para la fase dispersa, se realizó a través del esquema numérico propuesto en §7.2. Esto requirió de una rejilla homogénea definida sobre el dominio: $-1,1 \leq x \leq 1,1$; $-1,1 \leq y \leq 1,1$; con el propósito de evitar posibles errores de interpolación en la vecindad del contorno. Los nodos de la rejilla fuera del

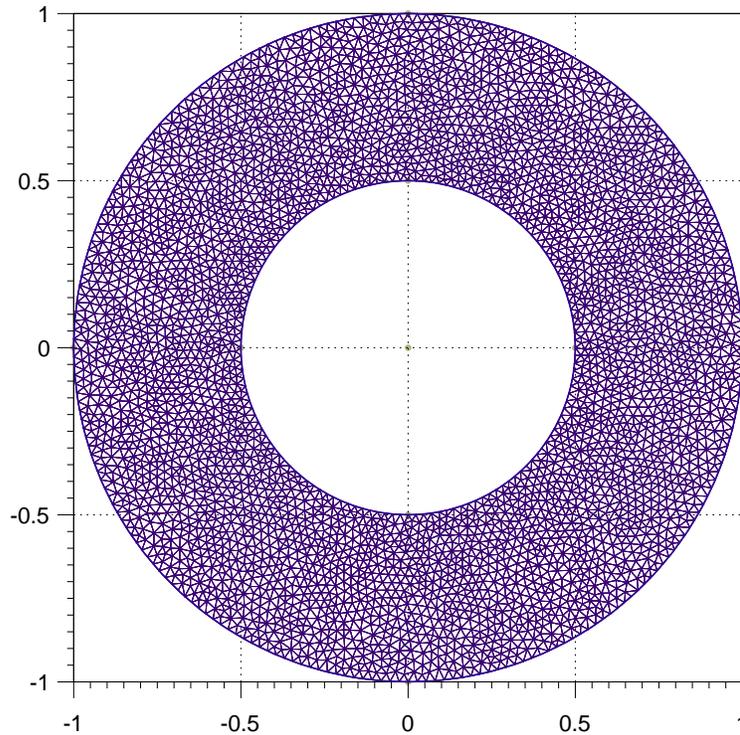


Figura 7.1: Dominio discretizado en elementos triangulares.

dominio preescrito, se consideraron inactivos dentro del proceso numérico. El factor de subdivisión utilizado en la discretización, permitió la generación de celdas de tamaño $\frac{2}{300}$; resolución que permite que cada elemento triangular contenga aproximadamente 6 celdas.

Para evitar la problemática asociada como sucede con el SPH por el uso de funciones gaussianas y que concierne a la conservación de la masa de las partículas, se realizó un ajuste numérico sobre la fracción volumétrica de las partículas. Aunque las desviaciones de la conservación de la masa de las partículas siempre fueron del orden 0,1 % por cada iteración, la corrección se aplicó para evitar un error acumulativo significativo.

Con respecto al error numérico, la tolerancia permitida fue del orden de 1×10^{-13} para la norma del error relativo de la solución algebraica del sistema discreto. Y el criterio de convergencia fue del orden de 1×10^{-5} para la solución iterativa del sistema matemático

implementado para la fase continua. Se ensayó con el método iterativo Bi-CGSTAB, mismo que manifestó deficiencia debido a que en el mismo tiempo de ejecución utilizado por los métodos de descomposición LU, solamente se alcanzó un error relativo del orden de 1×10^{-8} . Los resultados gráficos obtenidos para la fase continua en la simulación numérica, se exponen a través de las figuras 7.2, 7.3, 7.4 y 7.5.

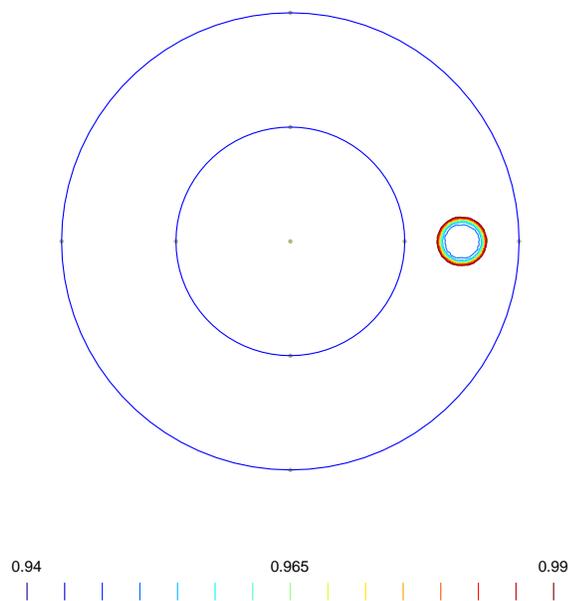
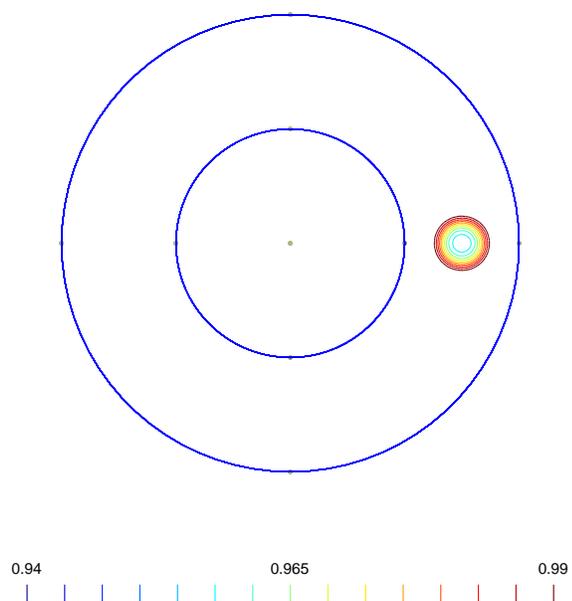
(a) $t^* = 0,00000$.(b) $t^* = 0,00110$.

Figura 7.2: Dinámica de la fracción volumétrica para la fase continua.

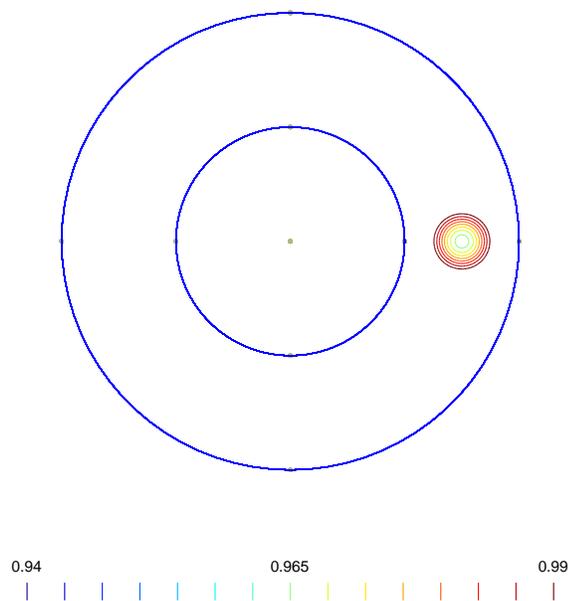
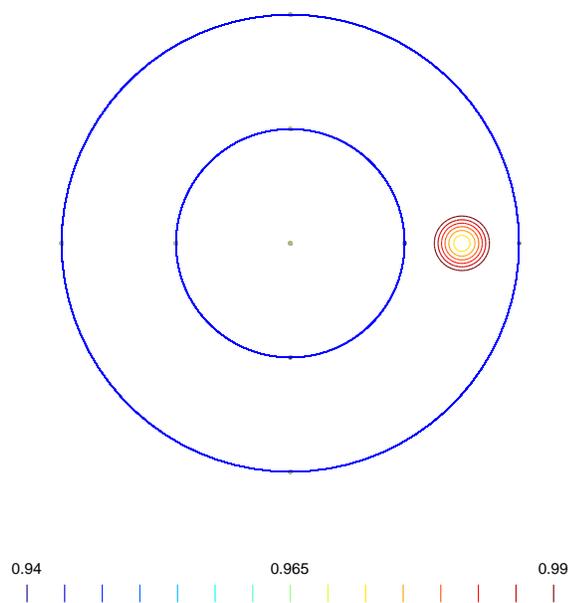
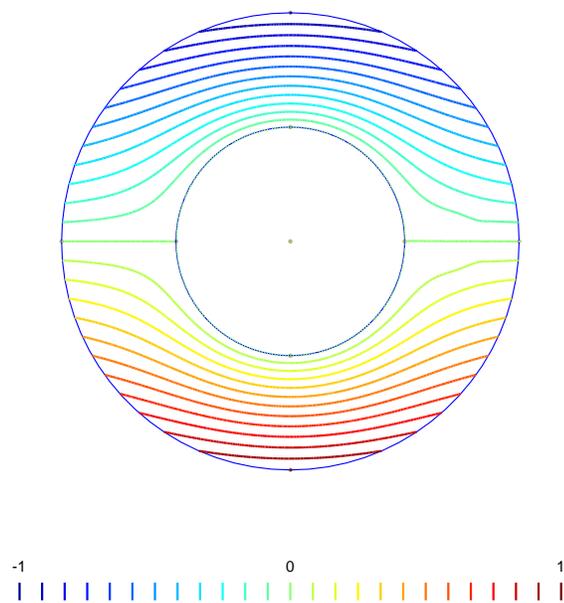
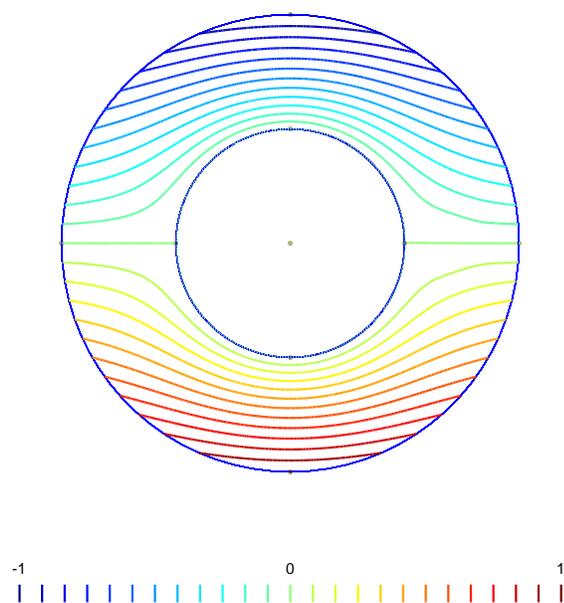
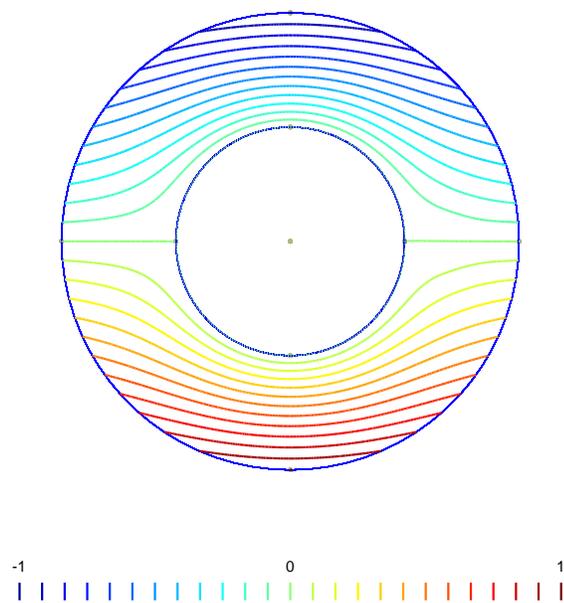
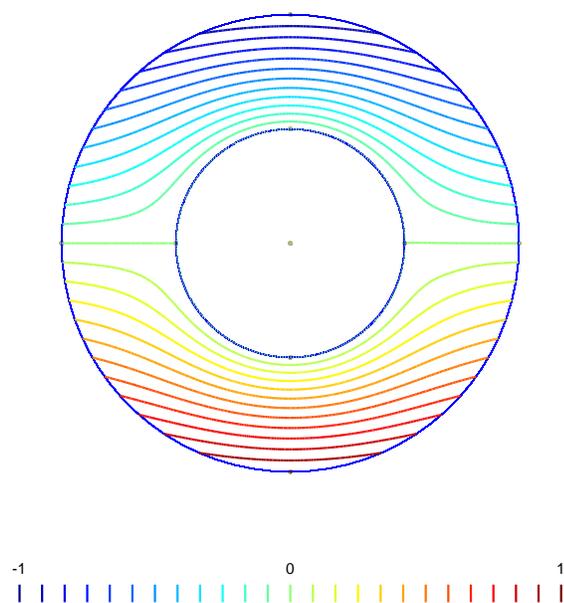
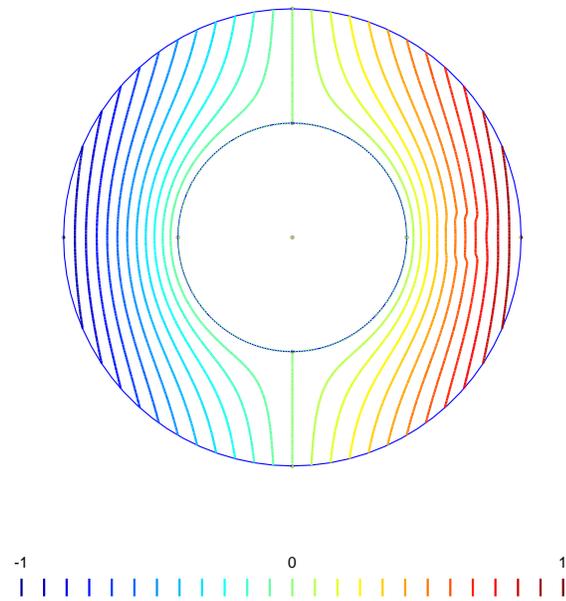
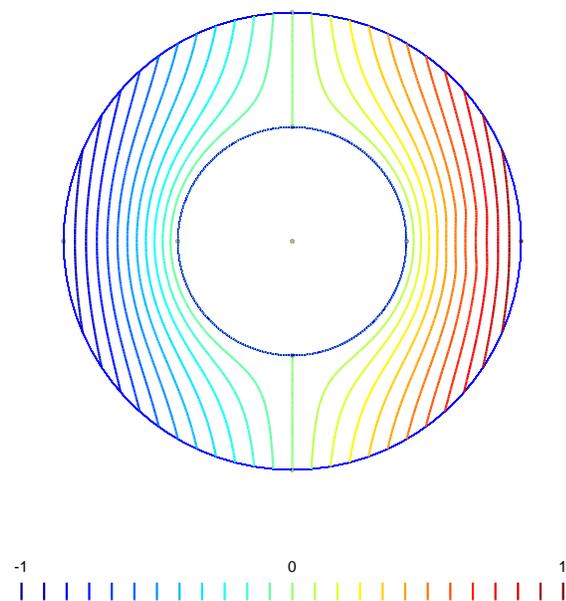
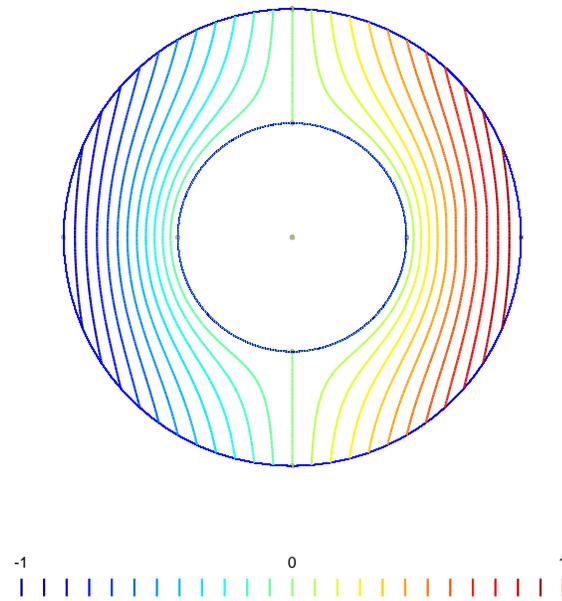
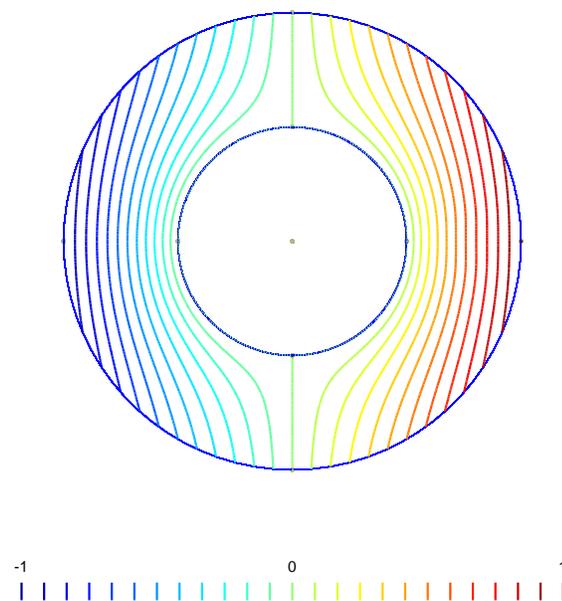
(c) $t^* = 0,00225$.(d) $t^* = 0,00335$.

Figura 7.2: Dinámica de la fracción volumétrica para la fase continua.

(a) $t^* = 0,00000$.(b) $t^* = 0,00110$.Figura 7.3: Dinámica del componente x de la velocidad para la fase continua.

(c) $t^* = 0,00225$.(d) $t^* = 0,00335$.Figura 7.3: Dinámica del componente x de la velocidad para la fase continua.

(a) $t^* = 0,00000$.(b) $t^* = 0,00110$.Figura 7.4: Dinámica del componente y de la velocidad para la fase continua.

(c) $t^* = 0,00225$.(d) $t^* = 0,00335$.Figura 7.4: Dinámica del componente y de la velocidad para la fase continua.

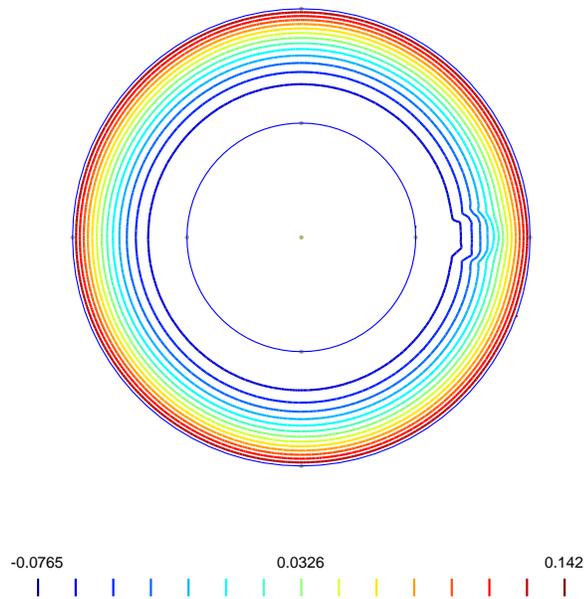
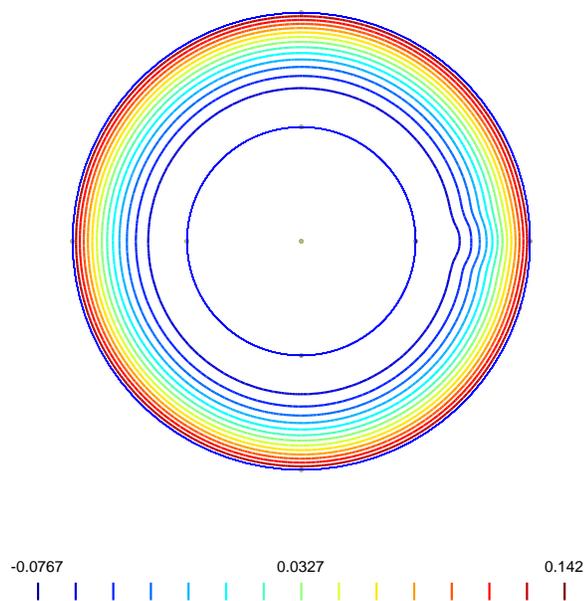
(a) $t^* = 0,00000$.(b) $t^* = 0,00110$.

Figura 7.5: Dinámica de la presión para la fase continua.

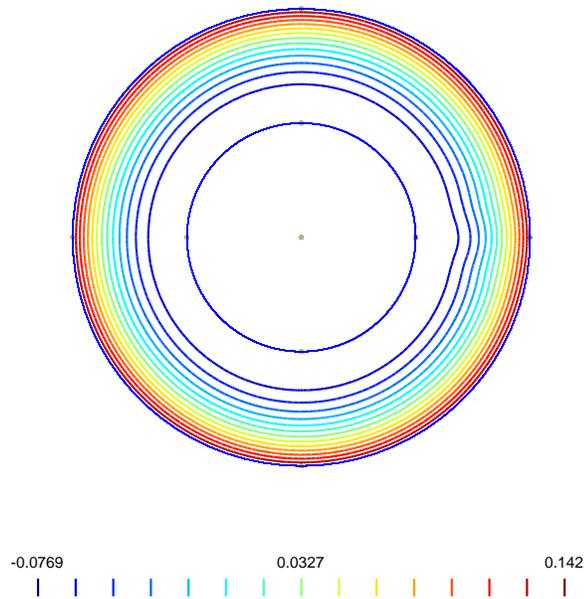
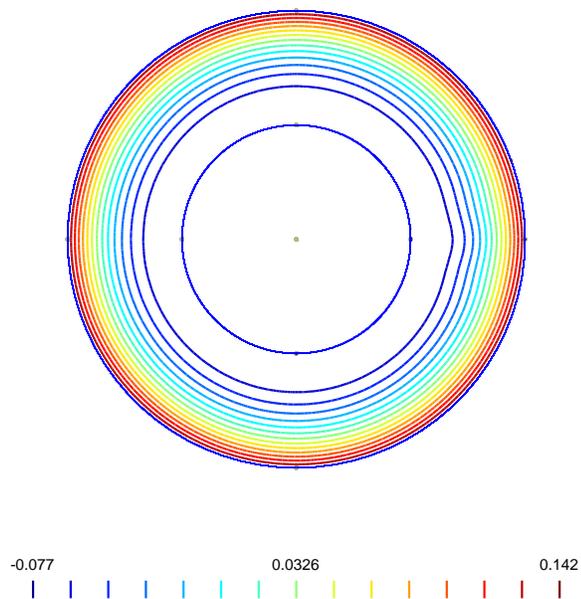
(c) $t^* = 0,00225$.(d) $t^* = 0,00335$.

Figura 7.5: Dinámica de la presión para la fase continua.

7.4. Evaluación de parámetros macroscópicos

La potencia y el tiempo de mezclado, corresponden a dos de los parámetros macroscópicos considerados mas importantes del estado hidrodinámico de un sistema físico. La potencia P , definida directamente del producto entre el torque $\|\vec{T}\|$ y la velocidad angular ω , en el caso de sistemas rotativos, presenta la complejidad de su evaluación en la determinación del torque, el cuál corresponde a

$$\vec{T} = \int_S \vec{x} \times (\boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{n}) ds \quad (7.26)$$

donde S es la superficie desde donde se impulsa al sistema a rotar, y el vector \vec{n} corresponde al vector unitario normal a la superficie S localizado en \vec{x} . También es posible construir una variable adimensional para el torque a través de la expresión,

$$\vec{T}^* = \frac{1}{\mu U_c D_c^2} \vec{T} \quad (7.27)$$

Con respecto al tiempo de mezclado, se puede manifestar que corresponde a la amplitud temporal necesaria para homogenizar la perturbación, generada a un sistema hidrodinámico por la adición de un elemento traza, a través de mecanismos convectivos y difusivos. Por tanto, ello vuelve necesario la introducción de un parámetro que cuantifique el grado de inhomogeneidad de una perturbación aplicada a la hidrodinámica de un sistema físico. En esta tesis se proponen las expresiones

$$\gamma(t^*) = \sqrt{\frac{\int_{\Omega} [\alpha_1(t_{\infty}^*, \vec{x}) - \alpha_1(t^*, \vec{x})]^2 dV}{\int_{\Omega} dV}}; \quad \gamma^*(t^*) = \frac{\gamma(t^*)}{\gamma(t^* = 0)} \quad (7.28)$$

donde α_1 corresponde a la fracción volumétrica de la fase continua.

En el caso del problema abordado §7.3, a pesar de que la perturbación utilizada presenta su total homogeneización cuando $\alpha_1(t_{\infty}^*, \vec{x}) = 0,9993333\bar{3}$. En una amplitud temporal del orden de $t^* \sim 0,003$, se generó una perturbación en el torque del 9,5 %, y un detrimento de la inhomogeneidad inicial del 50 %.

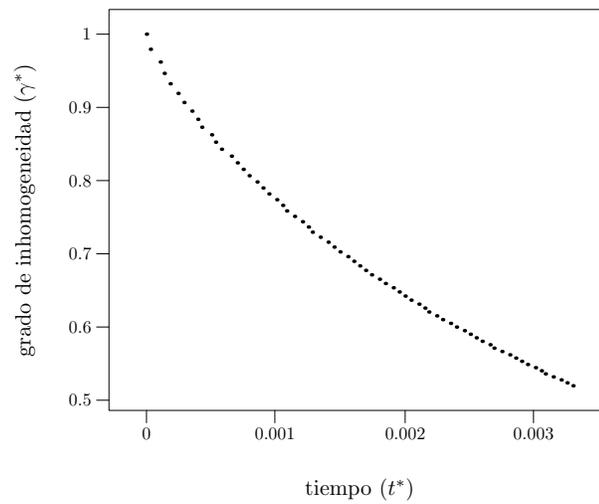


Figura 7.6: Dinámica de homogeneización ante una perturbación.

Este resultado, pone en manifiesto el grado de sensibilidad que captura el modelo matemático multifásico propuesto, aún para partículas del orden de $1\mu m$. A través de las figuras 7.6 y 7.7 se expone la dinámica del torque y del grado de inhomogeneidad durante la evolución de la perturbación.

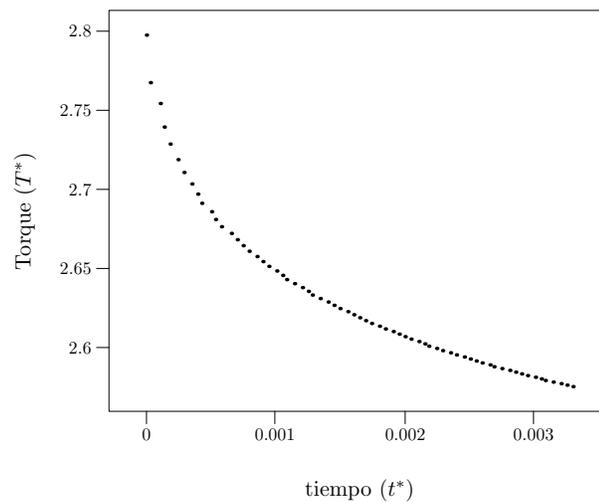


Figura 7.7: Dinámica del torque ante una perturbación.

7.5. Interpolación gaussiana

A continuación se expone el grado de aproximación que genera el uso de una interpolación gaussiana sobre una rejilla tanto homogénea como deformada. Lo cual se ejemplifica a través de una función que puede considerarse problemática durante la implementación de una interpolación.

7.5.1. Sobre una rejilla homogénea

Con el propósito de evaluar el grado de exactitud, que ofrece el método de interpolación gaussiana mediante una rejilla, descrito en §6.4.1; considérese la función $f(x, y) = \text{sen}(\pi xy)$ cuya naturaleza se muestra en la figura 7.8, definida en el dominio: $-1 \leq x \leq 1$; $-1 \leq y \leq 1$.

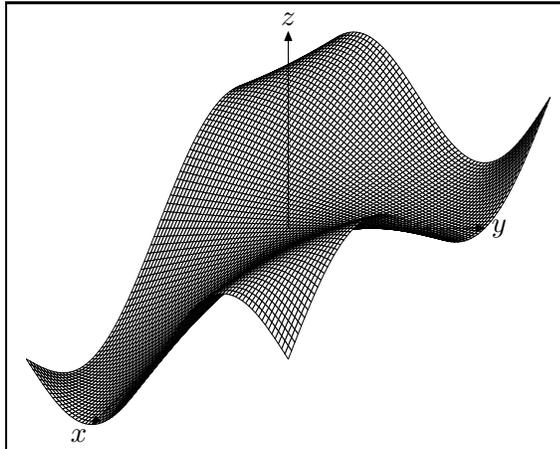


Figura 7.8: Naturaleza de la función $f(x, y) = \text{sen}(\pi xy)$.

Tomando un factor de subdivisión n , cada uno de los nodos P_{ij} ($-\lambda \leq i \leq n + \lambda$; $-\lambda \leq j \leq n + \lambda$), que conforman la rejilla requerida para esta función, están definidos mediante las coordenadas

$$x_i = -L + \frac{2L}{n}i; \quad y_j = -L + \frac{2L}{n}j; \quad \text{donde } L = 1 \quad (7.29)$$

La introducción del parámetro λ tiene como objeto detrimenar el error en las interpolaciones realizadas en vecindad de la frontera del dominio. Por lo regular, es suficiente con

$\lambda > 3$. Con esto, la interpolación se expresa mediante

$$g(x, y) = \sum_{i=-\lambda}^{n+\lambda} \sum_{j=-\lambda}^{n+\lambda} \alpha_{ij} \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{1}{2} z_{ij}^2\right) \quad \text{con} \quad z_{ij} = \frac{n\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_j)^2}}{2L} \quad (7.30)$$

El asumir que los parámetros α_{ij} , están determinados mediante $\alpha_{ij} = f(x_i, y_j)$, trae consigo un error relativo $\epsilon(x, y)$ dependiente del factor de subdivisión n utilizado en la rejilla

$$\epsilon(x, y) = \frac{g(x, y) - f(x, y)}{f(x, y)} \quad (7.31)$$

Evaluando aleatoriamente a 10000 puntos dentro del dominio definido para la función $f(x, y)$, los errores relativos de interpolación se presentan en la figura 7.9.

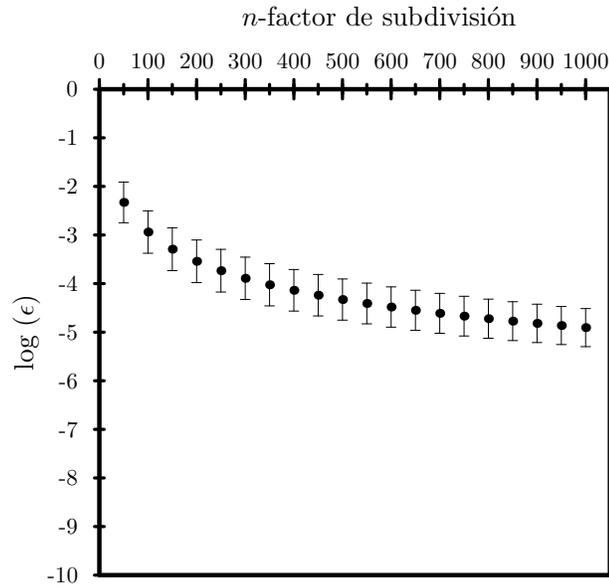


Figura 7.9: Errores relativos de una interpolación gaussiana sobre una rejilla homogénea.

7.5.2. Sobre una rejilla deformada

Considérese a ϕ una variable aleatoria comprendida en el rango $-1 \leq \phi \leq 1$, y al parámetro d_{max} la máxima desviación que puede sufrir un nodo con respecto a algunos de sus ejes coordenados durante la deformación de una rejilla. Así, la deformación aleatoria de una rejilla homogénea modifica la posición de los nodos expresados por (7.29) a

$$x_i = -L + \frac{2L}{n}i + \phi_x^{ij} d_{max}; \quad y_j = -L + \frac{2L}{n}j + \phi_y^{ij} d_{max}; \quad \text{donde} \quad L = 1 \quad (7.32)$$

Refiriendo el parámetro d_{max} con respecto al tamaño de la celda de la rejilla, se tiene

$$d_{max} = \frac{2L}{n}\gamma \quad \text{con} \quad 0 \leq \gamma \leq 0,1 \quad (7.33)$$

Se ha considerado en esta definición, una deformación máxima del 10% del tamaño de la celda. Lo cual corresponde a una deformación excesiva, de acuerdo al grado de aproximación expuesto en la figura 7.10.

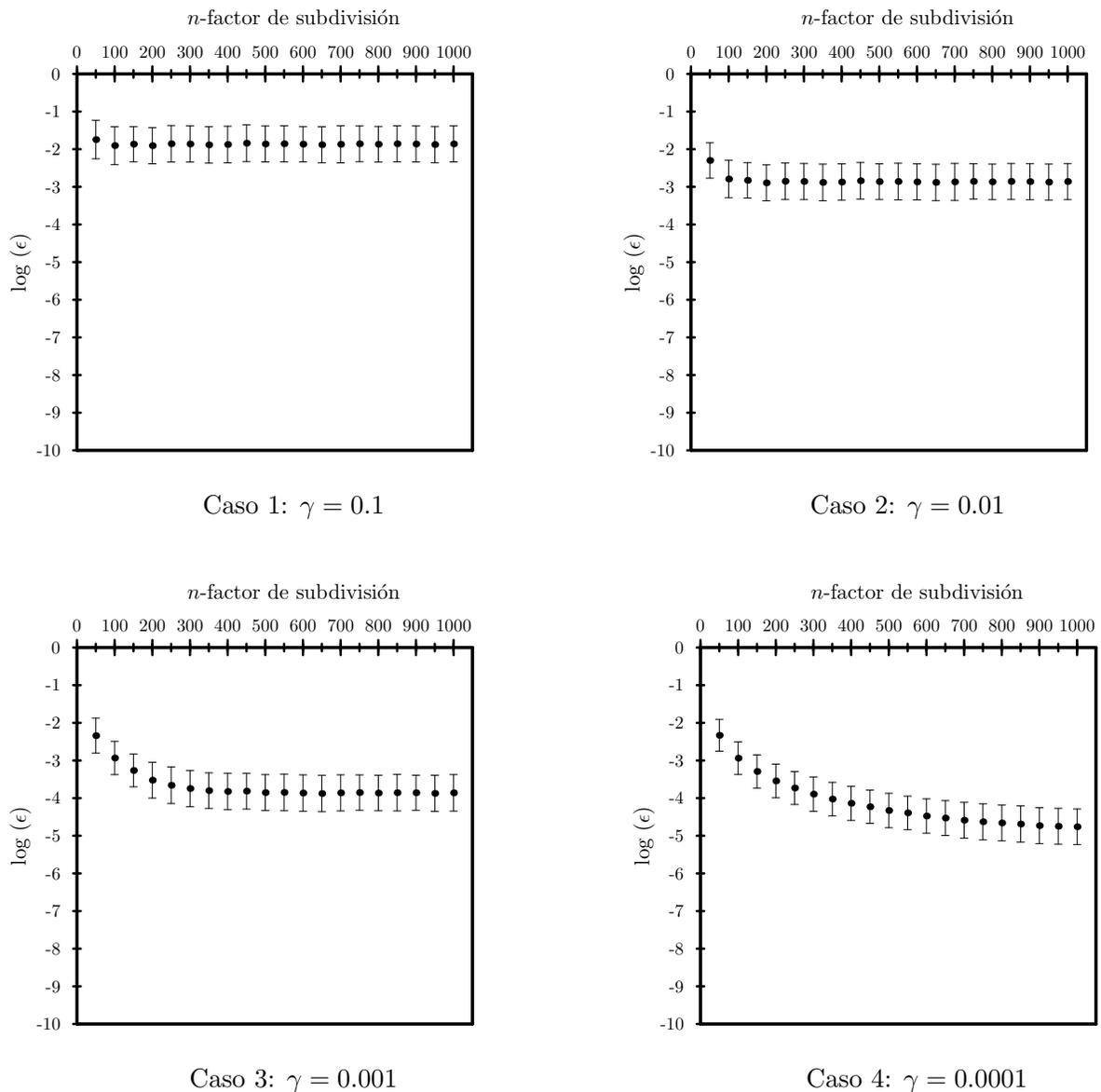


Figura 7.10: Errores relativos de una interpolación gaussiana sobre una rejilla deformada.

7.5.3. Proceso de refinamiento

En los ejemplos anteriores no se ha introducido el proceso de refinamiento en la implementación de las interpolaciones sobre una rejilla homogénea o deformada. A continuación se expone el efecto que ocasiona sobre la implementación de una interpolación gaussiana.

En la figura 7.11 se muestra el efecto que ocasiona el grado de deformación de una rejilla.

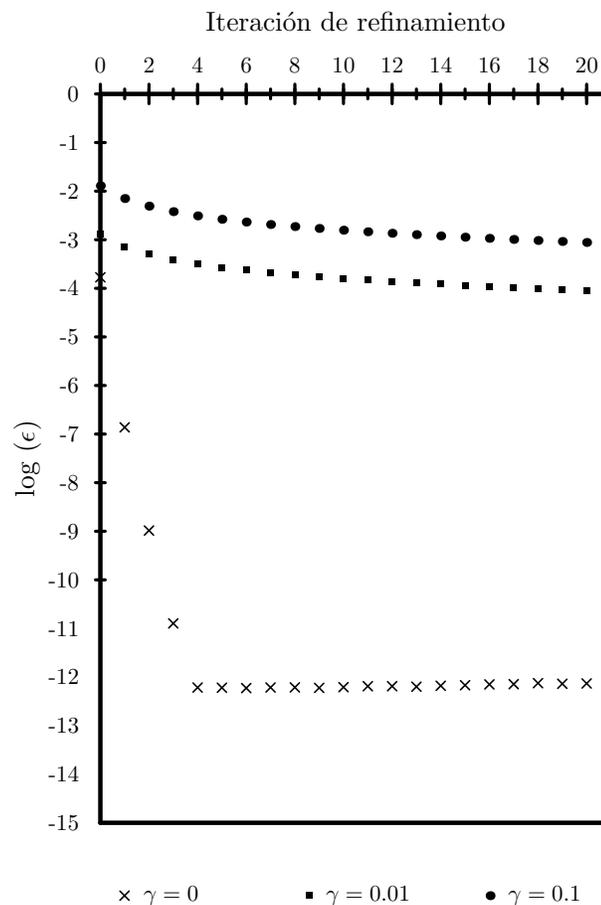


Figura 7.11: Interpolación gaussiana con $n = 300$.

Y en la figura 7.12 se muestra el efecto que ocasiona el factor de subdivisión en una rejilla homogénea.

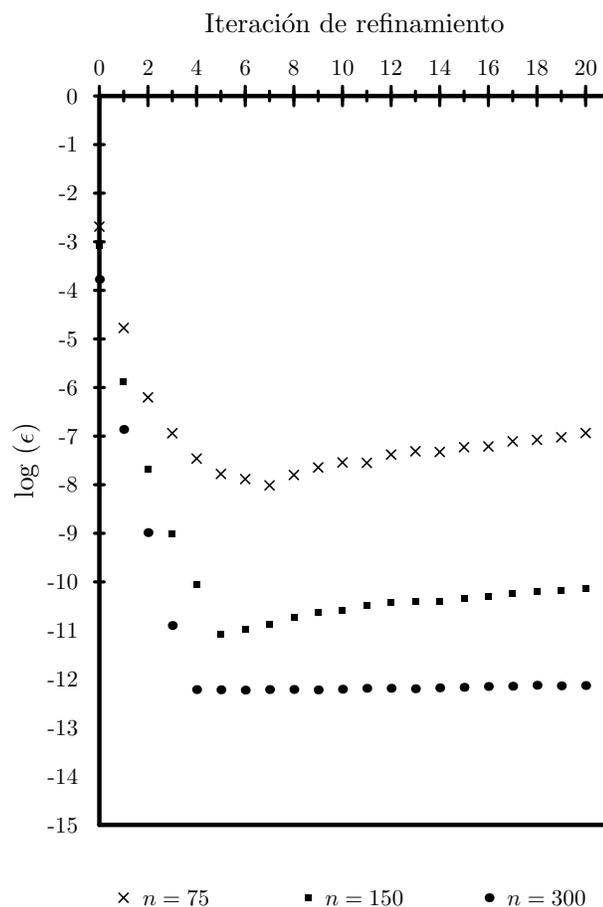


Figura 7.12: Interpolación gaussiana sobre una rejilla homogénea.

Estos resultados exponen la calidad que puede ser alcanzada a través de unas cuantas iteraciones de refinamiento en una interpolación gaussiana sobre una rejilla homogénea. Con respecto a la rejilla ligeramente deformada, aunque los resultados no son tan precisos, son aceptables. Sin embargo, la fortaleza de esta interpolación, radica en la rapidez computacional de su construcción.

Capítulo 8

CONCLUSIONES

Las conclusiones del presente proyecto de investigación se detallan a continuación:

1. Se desarrolló una librería en lenguaje C++ para la resolución de sistemas integrodiferenciales mediante el FEM, completamente funcional para dominios discretizados en elementos geométricos triangulares y tetraédricos.
2. Se formuló un modelo matemático para un fluido multifásico sólido-líquido; en el cual, el tamaño de las partículas utilizadas fue del orden de una bacteria. La resolución numérica mostró una adecuada estabilidad de convergencia, condicionada a una discretización refinada del dominio y a un breve paso de tiempo.
3. La implementación de una representación dual (discreta-continua) para la fase dispersa descrita bajo un enfoque Lagrangiano, en conjunto con una interpolación gaussiana sobre una rejilla, condujo una rápida ejecución numérica de la rezoñificación de la malla Lagrangiana. Requerimiento numérico indispensable, debido a que el esquema numérico utilizado fue una conjunción de los métodos ALE y CEL.
4. Se obtuvo proceso numérico eficiente durante el acoplamiento de transferencia interfacial a través de la utilización de una interpolación gaussiana sobre una rejilla.
5. El modelo matemático se ensayó sobre el flujo monofásico desarrollado dentro de un par de cilindros concéntricos, perturbado por la adición de un pulso de partículas. A pesar de que la relación de volúmenes de la fase discreta y la fase continua fue del orden 1×10^{-4} , el esquema numérico implementado mostró una adecuada sensibilidad, lo cual se hace evidente en la dinámica del torque y de homogeneización, obtenida.

APÉNDICE A

FUNCIONES DE INTERPOLACIÓN

Línea de Orden Lineal

$$\phi_1 = 1 - r$$

$$\phi_2 = r$$

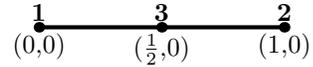


Línea de Orden Cuadrática

$$\phi_1 = (2r - 1)(r - 1)$$

$$\phi_2 = r(2r - 1)$$

$$\phi_3 = 1 - (2r - 1)^2$$



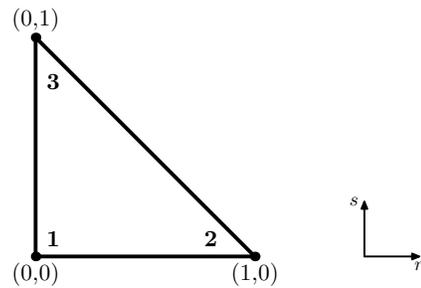
Triángulo de Orden Lineal

$$u = 1 - r - s$$

$$\phi_1 = u$$

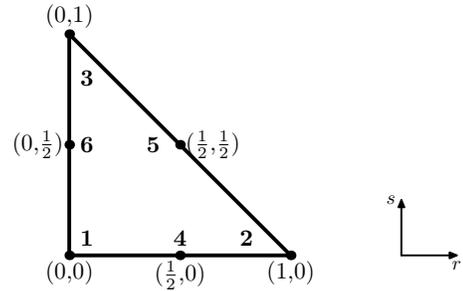
$$\phi_2 = r$$

$$\phi_3 = s$$



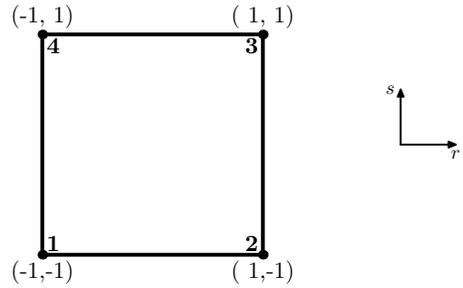
Triángulo de Orden Cuadrático

$$\begin{aligned}
 u &= 1 - r - s \\
 \phi_1 &= -u(1 - 2u) \\
 \phi_2 &= -r(1 - 2r) \\
 \phi_3 &= -s(1 - 2s) \\
 \phi_4 &= 4ru \\
 \phi_5 &= 4rs \\
 \phi_6 &= 4su
 \end{aligned}$$



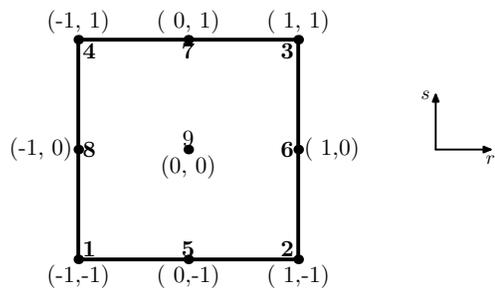
Cuadrilátero de Orden Lineal

$$\begin{aligned}
 \phi_1 &= \frac{1}{4}(1 - r)(1 - s) \\
 \phi_2 &= \frac{1}{4}(1 + r)(1 - s) \\
 \phi_3 &= \frac{1}{4}(1 + r)(1 + s) \\
 \phi_4 &= \frac{1}{4}(1 - r)(1 + s)
 \end{aligned}$$



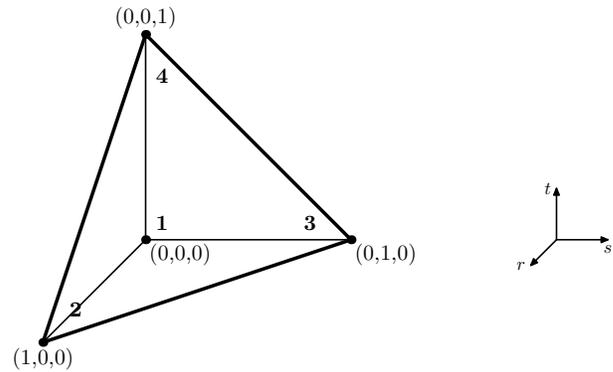
Cuadrilátero de Orden Cuadrático

$$\begin{aligned}
 \phi_1 &= \frac{1}{4}rs(1 - r)(1 - s) \\
 \phi_2 &= -\frac{1}{4}rs(1 + r)(1 - s) \\
 \phi_3 &= \frac{1}{4}rs(1 + r)(1 + s) \\
 \phi_4 &= -\frac{1}{4}rs(1 - r)(1 + s) \\
 \phi_5 &= -\frac{1}{2}s(1 - r^2)(1 - s) \\
 \phi_6 &= \frac{1}{2}r(1 - s^2)(1 + r) \\
 \phi_7 &= \frac{1}{2}s(1 - r^2)(1 + s) \\
 \phi_8 &= -\frac{1}{2}r(1 - s^2)(1 - r) \\
 \phi_9 &= (1 - r^2)(1 - s^2)
 \end{aligned}$$



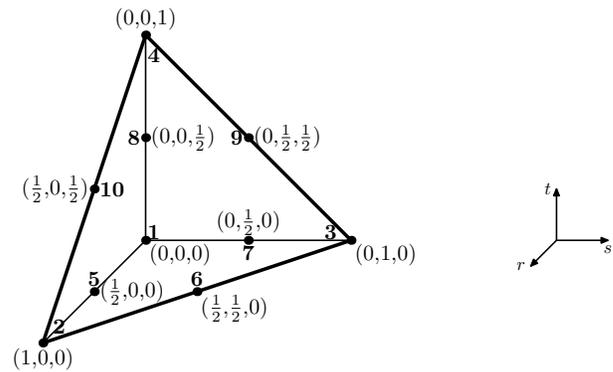
Tetraedro de Orden Lineal

$$\begin{aligned}
 u &= 1 - r - s - t \\
 \phi_1 &= u \\
 \phi_2 &= r \\
 \phi_3 &= s \\
 \phi_4 &= t
 \end{aligned}$$



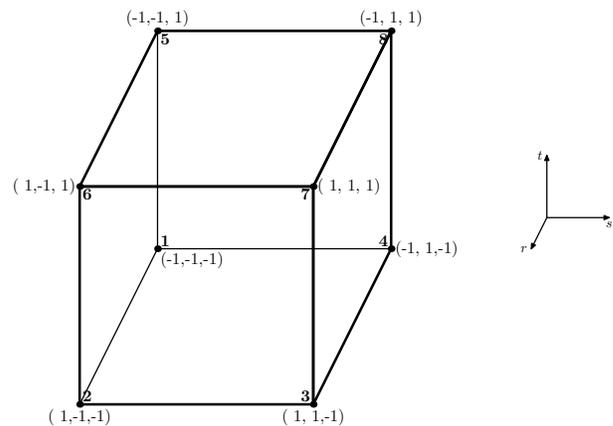
Tetraedro de Orden Cuadrático

$$\begin{aligned}
 u &= 1 - r - s - t \\
 \phi_1 &= -u(1 - 2u) & \phi_6 &= 4rs \\
 \phi_2 &= -r(1 - 2r) & \phi_7 &= 4su \\
 \phi_3 &= -s(1 - 2s) & \phi_8 &= 4tu \\
 \phi_4 &= -t(1 - 2t) & \phi_9 &= 4st \\
 \phi_5 &= 4ru & \phi_{10} &= 4rt
 \end{aligned}$$



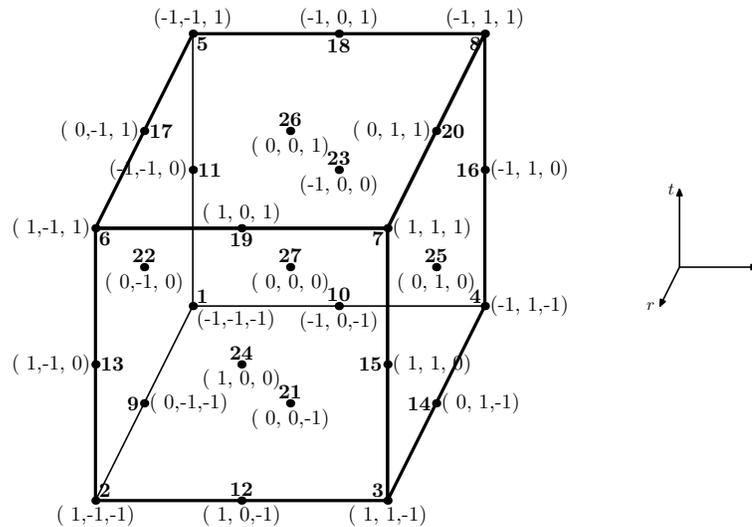
Hexaedro de Orden Lineal

$$\begin{aligned}
 a_1 &= 1 + r & \phi_1 &= \frac{1}{8}a_2b_2c_2 \\
 a_2 &= 1 - r & \phi_2 &= \frac{1}{8}a_1b_2c_2 \\
 b_1 &= 1 + s & \phi_3 &= \frac{1}{8}a_1b_1c_2 \\
 b_2 &= 1 - s & \phi_4 &= \frac{1}{8}a_2b_1c_2 \\
 c_1 &= 1 + t & \phi_5 &= \frac{1}{8}a_2b_2c_1 \\
 c_2 &= 1 - t & \phi_6 &= \frac{1}{8}a_1b_2c_1 \\
 & & \phi_7 &= \frac{1}{8}a_1b_1c_1 \\
 & & \phi_8 &= \frac{1}{8}a_2b_1c_1
 \end{aligned}$$



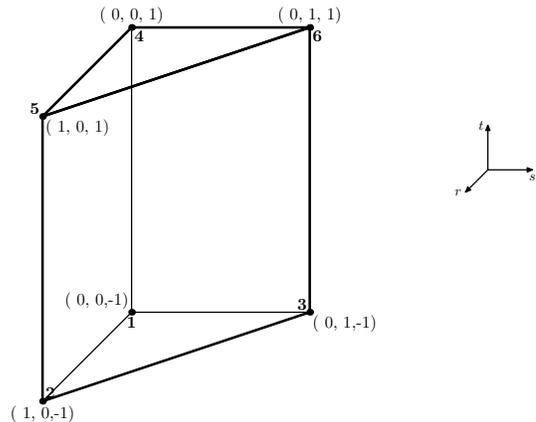
Hexaedro de Orden Cuadrático

$\phi_1 = -\frac{1}{8}rst(1-r)(1-s)(1-t)$	$\phi_{10} = \frac{1}{4}rt(1-s^2)(1-r)(1-t)$	$\phi_{19} = \frac{1}{4}rt(1-s^2)(1+r)(1+t)$
$\phi_2 = \frac{1}{8}rst(1+r)(1-s)(1-t)$	$\phi_{11} = \frac{1}{4}rs(1-t^2)(1-r)(1-s)$	$\phi_{20} = \frac{1}{4}st(1-r^2)(1+s)(1+t)$
$\phi_3 = -\frac{1}{8}rst(1+r)(1+s)(1-t)$	$\phi_{12} = -\frac{1}{4}rt(1-s^2)(1+r)(1-t)$	$\phi_{21} = -\frac{1}{2}t(1-r^2)(1-s^2)(1-t)$
$\phi_4 = \frac{1}{8}rst(1-r)(1+s)(1-t)$	$\phi_{13} = -\frac{1}{4}rs(1-t^2)(1+r)(1-s)$	$\phi_{22} = -\frac{1}{2}s(1-r^2)(1-t^2)(1-s)$
$\phi_5 = \frac{1}{8}rst(1-r)(1-s)(1+t)$	$\phi_{14} = -\frac{1}{4}st(1-r^2)(1+s)(1-t)$	$\phi_{23} = -\frac{1}{2}r(1-s^2)(1-t^2)(1-r)$
$\phi_6 = -\frac{1}{8}rst(1+r)(1-s)(1+t)$	$\phi_{15} = \frac{1}{4}rs(1-t^2)(1+r)(1+s)$	$\phi_{24} = \frac{1}{2}r(1-s^2)(1-t^2)(1+r)$
$\phi_7 = \frac{1}{8}rst(1+r)(1+s)(1+t)$	$\phi_{16} = -\frac{1}{4}rs(1-t^2)(1-r)(1+s)$	$\phi_{25} = \frac{1}{2}s(1-r^2)(1-t^2)(1+s)$
$\phi_8 = -\frac{1}{8}rst(1-r)(1+s)(1+t)$	$\phi_{17} = -\frac{1}{4}st(1-r^2)(1-s)(1+t)$	$\phi_{26} = \frac{1}{2}t(1-r^2)(1-s^2)(1+t)$
$\phi_9 = \frac{1}{4}st(1-r^2)(1-s)(1-t)$	$\phi_{18} = -\frac{1}{4}rt(1-s^2)(1-r)(1+t)$	$\phi_{27} = (1-r^2)(1-s^2)(1-t^2)$



Prisma de Orden Lineal

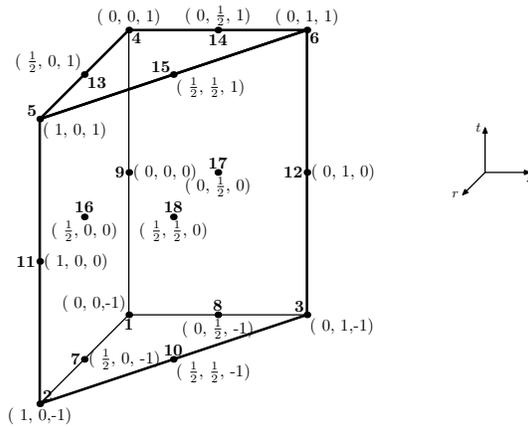
$$\begin{aligned}
 u &= 1 - r - s \\
 a &= \frac{1}{2}(1 - t) \\
 b &= \frac{1}{2}(1 + t) \\
 \phi_1 &= ua \\
 \phi_2 &= ra \\
 \phi_3 &= sa \\
 \phi_4 &= ub \\
 \phi_5 &= rb \\
 \phi_6 &= sb
 \end{aligned}$$



Prisma de Orden Cuadrático

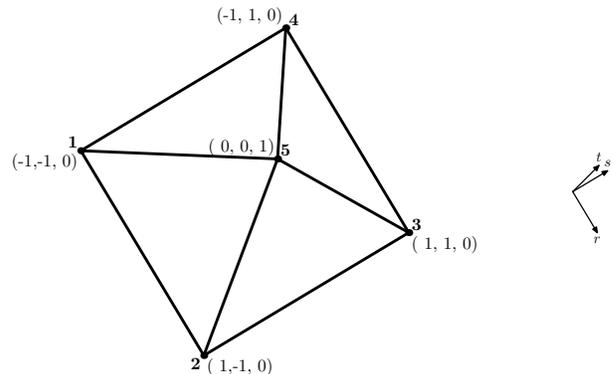
$$u = 1 - r - s$$

$\phi_1 = \frac{1}{2}ut(1 - 2u)(1 - t)$	$\phi_{10} = -2rst(1 - t)$
$\phi_2 = \frac{1}{2}rt(1 - 2r)(1 - t)$	$\phi_{11} = -r(1 - 2r)(1 - t^2)$
$\phi_3 = \frac{1}{2}st(1 - 2s)(1 - t)$	$\phi_{12} = -s(1 - 2s)(1 - t^2)$
$\phi_4 = -\frac{1}{2}ut(1 - 2u)(1 + t)$	$\phi_{13} = 2urt(1 + t)$
$\phi_5 = -\frac{1}{2}rt(1 - 2r)(1 + t)$	$\phi_{14} = 2ust(1 + t)$
$\phi_6 = -\frac{1}{2}st(1 - 2s)(1 + t)$	$\phi_{15} = 2rst(1 + t)$
$\phi_7 = -2urt(1 - t)$	$\phi_{16} = 4ur(1 - t^2)$
$\phi_8 = -2ust(1 - t)$	$\phi_{17} = 4us(1 - t^2)$
$\phi_9 = -u(1 - 2u)(1 - t^2)$	$\phi_{18} = 4rs(1 - t^2)$



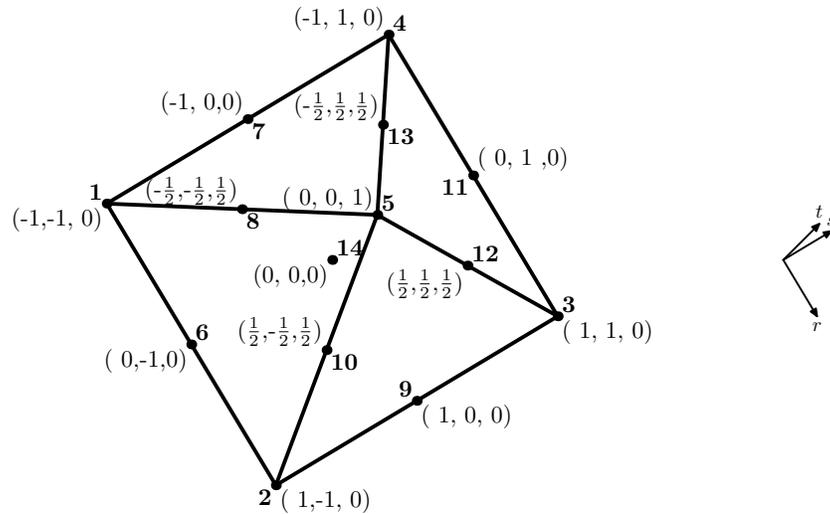
Pirámide de Orden Lineal

$$\begin{aligned} \phi_1 &= (1 - s - t)(1 - r - t)(4(1 - t))^{-1} \\ \phi_2 &= (1 - s - t)(1 + r - t)(4(1 - t))^{-1} \\ \phi_3 &= (1 + s - t)(1 + r - t)(4(1 - t))^{-1} \\ \phi_4 &= (1 + s - t)(1 - r - t)(4(1 - t))^{-1} \\ \phi_5 &= t; \end{aligned}$$



Pirámide de Orden Cuadrático

$$\begin{aligned} \phi_1 &= (1-r-t)(-r-t)(1-s-t)(-s-t)(4(1-t)(1-2t))^{-1} \\ \phi_2 &= (1+r-t)(r-t)(1-s-t)(-s-t)(4(1-t)(1-2t))^{-1} \\ \phi_3 &= (1+r-t)(r-t)(1+s-t)(s-t)(4(1-t)(1-2t))^{-1} \\ \phi_4 &= (1-r-t)(-r-t)(1+s-t)(s-t)(4(1-t)(1-2t))^{-1} \\ \phi_5 &= t(2t-1) \\ \phi_6 &= (1-r-t)(1+r-t)(1-s-t)(-s-t)(2(1-t)(1-2t))^{-1} \\ \phi_7 &= (1-r-t)(-r-t)(1-s-t)(1+s-t)(2(1-t)(1-2t))^{-1} \\ \phi_8 &= t(1-r-t)(1-s-t)(1-t)^{-1} \\ \phi_9 &= (1+r-t)(r-t)(1-s-t)(1+s-t)(2(1-t)(1-2t))^{-1} \\ \phi_{10} &= t(1+r-t)(1-s-t)(1-t)^{-1} \\ \phi_{11} &= (1-r-t)(1+r-t)(1+s-t)(s-t)(2(1-t)(1-2t))^{-1} \\ \phi_{12} &= t(1+r-t)(1+s-t)(1-t)^{-1} \\ \phi_{13} &= t(1-r-t)(1+s-t)(1-t)^{-1} \\ \phi_{14} &= (1-r-t)(1+r-t)(1-s-t)(1+s-t)((1-t)(1-2t))^{-1} \end{aligned}$$



APÉNDICE B

GRADIENTES DE INTERPOLACIÓN: DOMINIO

Línea de Orden Lineal

$$\nabla \vec{\phi} = \left(-\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right)$$

Línea de Orden Cuadrático

$$\nabla \vec{\phi} = \left(\frac{1}{2}(2r-1) \quad \frac{1}{2}(2r+1) \quad -2r \right)$$

Triángulo de Orden Lineal

$$\nabla \vec{\phi} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Triángulo de Orden Cuadrático

$$\nabla \vec{\phi} = \begin{pmatrix} 1-4u & -1+4r & 0 & 4(u-r) & 4s & -4s \\ 1-4u & 0 & -1+4s & -4r & 4r & 4(u-s) \end{pmatrix}$$

Cuadrilátero de Orden Lineal

$$\nabla \vec{\phi} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(-1+s) & \frac{1}{4}(1-s) & \frac{1}{4}(1+s) & \frac{1}{4}(-1-s) \\ \frac{1}{4}(-1+r) & \frac{1}{4}(-1-r) & \frac{1}{4}(1+r) & \frac{1}{4}(1-r) \end{pmatrix}$$

Cuadrilátero de Orden Cuadrático

$$\nabla \vec{\phi}^t = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(1-2r)(1-s)s & \frac{1}{4}(1-2s)(1-r)r \\ -\frac{1}{4}(1+2r)(1-s)s & -\frac{1}{4}(1-2s)(1+r)r \\ \frac{1}{4}(1+2r)(1+s)s & \frac{1}{4}(1+2s)(1+r)r \\ -\frac{1}{4}(1-2r)(1+s)s & -\frac{1}{4}(1+2s)(1-r)r \\ (1-s)rs & -\frac{1}{2}(1-r^2)(1-2s) \\ \frac{1}{2}(1-s^2)(1+2r) & -(1+r)rs \\ -(1+s)rs & \frac{1}{2}(1-r^2)(1+2s) \\ -\frac{1}{2}(1-s^2)(1-2r) & (1-r)rs \\ -2(1-s^2)r & -2(1-r^2)s \end{pmatrix}$$

Tetraedro de Orden Lineal

$$\nabla \vec{\phi} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Tetraedro de Orden Cuadrático

$$\nabla \vec{\phi} = \begin{pmatrix} 1-4u & -1+4r & 0 & 0 & 4(u-r) & 4s & -4s & -4t & 0 & 4t \\ 1-4u & 0 & -1+4s & 0 & -4r & 4r & 4(u-s) & -4t & 4t & 0 \\ 1-4u & 0 & 0 & -1+4t & -4r & 0 & -4s & 4(u-t) & 4s & 4r \end{pmatrix}$$

Hexaedro de Orden Lineal

$$\nabla \vec{\phi} = \begin{pmatrix} -b_2c_2 & b_2c_2 & b_1c_2 & -b_1c_2 & -b_2c_1 & b_2c_1 & b_1c_1 & -b_1c_1 \\ -a_2c_2 & -a_1c_2 & a_1c_2 & a_2c_2 & -a_2c_1 & -a_1c_1 & a_1c_1 & a_2c_1 \\ -a_2b_2 & -a_1b_2 & -a_1b_1 & -a_2b_1 & a_2b_2 & a_1b_2 & a_1b_1 & a_2b_1 \end{pmatrix} \begin{matrix} a_1 = 1 + r \\ a_2 = 1 - r \\ b_1 = 1 + s \\ b_2 = 1 - s \\ c_1 = 1 + t \\ c_2 = 1 - t \end{matrix}$$

Hexaedro de Orden Cuadrático

$$\nabla \vec{\phi}^t = \begin{pmatrix} -\frac{1}{8}st(1-2r)(1-s)(1-t) & -\frac{1}{8}rt(1-r)(1-2s)(1-t) & -\frac{1}{8}rs(1-r)(1-s)(1-2t) \\ \frac{1}{8}st(1+2r)(1-s)(1-t) & \frac{1}{8}rt(1+r)(1-2s)(1-t) & \frac{1}{8}rs(1+r)(1-s)(1-2t) \\ -\frac{1}{8}st(1+2r)(1+s)(1-t) & -\frac{1}{8}rt(1+r)(1+2s)(1-t) & -\frac{1}{8}rs(1+r)(1+s)(1-2t) \\ \frac{1}{8}st(1-2r)(1+s)(1-t) & \frac{1}{8}rt(1-r)(1+2s)(1-t) & \frac{1}{8}rs(1-r)(1+s)(1-2t) \\ \frac{1}{8}st(1-2r)(1-s)(1+t) & \frac{1}{8}rt(1-r)(1-2s)(1+t) & \frac{1}{8}rs(1-r)(1-s)(1+2t) \\ -\frac{1}{8}st(1+2r)(1-s)(1+t) & -\frac{1}{8}rt(1+r)(1-2s)(1+t) & -\frac{1}{8}rs(1+r)(1-s)(1+2t) \\ \frac{1}{8}st(1+2r)(1+s)(1+t) & \frac{1}{8}rt(1+r)(1+2s)(1+t) & \frac{1}{8}rs(1+r)(1+s)(1+2t) \\ -\frac{1}{8}st(1-2r)(1+s)(1+t) & -\frac{1}{8}rt(1-r)(1+2s)(1+t) & -\frac{1}{8}rs(1-r)(1+s)(1+2t) \\ -\frac{1}{2}rst(1-s)(1-t) & \frac{1}{4}t(1-r^2)(1-2s)(1-t) & \frac{1}{4}s(1-r^2)(1-s)(1-2t) \\ \frac{1}{4}t(1-s^2)(1-2r)(1-t) & -\frac{1}{2}rst(1-r)(1-t) & \frac{1}{4}r(1-s^2)(1-r)(1-2t) \\ \frac{1}{4}s(1-t^2)(1-2r)(1-s) & \frac{1}{4}r(1-t^2)(1-r)(1-2s) & -\frac{1}{2}rst(1-r)(1-s) \\ -\frac{1}{4}t(1-s^2)(1+2r)(1-t) & \frac{1}{2}rst(1+r)(1-t) & -\frac{1}{4}r(1-s^2)(1+r)(1-2t) \\ -\frac{1}{4}s(1-t^2)(1+2r)(1-s) & -\frac{1}{4}r(1-t^2)(1+r)(1-2s) & \frac{1}{2}rst(1+r)(1-s) \\ \frac{1}{4}s(1-t^2)(1+2r)(1+s) & \frac{1}{4}r(1-t^2)(1+r)(1+2s) & -\frac{1}{2}rst(1+r)(1+s) \\ -\frac{1}{4}s(1-t^2)(1-2r)(1+s) & -\frac{1}{4}r(1-t^2)(1-r)(1+2s) & \frac{1}{2}rst(1-r)(1+s) \\ \frac{1}{2}rst(1-s)(1+t) & -\frac{1}{4}t(1-r^2)(1-2s)(1+t) & -\frac{1}{4}s(1-r^2)(1-s)(1+2t) \\ -\frac{1}{4}t(1-s^2)(1-2r)(1+t) & \frac{1}{2}rst(1-r)(1+t) & -\frac{1}{4}r(1-s^2)(1-r)(1+2t) \\ \frac{1}{4}t(1-s^2)(1+2r)(1+t) & -\frac{1}{2}rst(1+r)(1+t) & \frac{1}{4}r(1-s^2)(1+r)(1+2t) \\ -\frac{1}{2}rst(1+s)(1+t) & \frac{1}{4}t(1-r^2)(1+2s)(1+t) & \frac{1}{4}s(1-r^2)(1+s)(1+2t) \\ rt(1-s^2)(1-t) & st(1-r^2)(1-t) & -\frac{1}{2}(1-r^2)(1-s^2)(1-2t) \\ rs(1-t^2)(1-s) & -\frac{1}{2}(1-r^2)(1-t^2)(1-2s) & st(1-r^2)(1-s) \\ -\frac{1}{2}(1-s^2)(1-t^2)(1-2r) & rs(1-t^2)(1-r) & rt(1-s^2)(1-r) \\ \frac{1}{2}(1-s^2)(1-t^2)(1+2r) & -rs(1-t^2)(1+r) & -rt(1-s^2)(1+r) \\ -rs(1-t^2)(1+s) & \frac{1}{2}(1-r^2)(1-t^2)(1+2s) & -st(1-r^2)(1+s) \\ -rt(1-s^2)(1+t) & -st(1-r^2)(1+t) & \frac{1}{2}(1-r^2)(1-s^2)(1+2t) \\ -2r(1-s^2)(1-t^2) & -2s(1-r^2)(1-t^2) & -2t(1-r^2)(1-s^2) \end{pmatrix}$$

Prisma de Orden Lineal

$$\nabla \vec{\phi} = \begin{pmatrix} -a & a & 0 & -b & b & 0 \\ -a & 0 & a & -b & 0 & b \\ -\frac{1}{2}u & -\frac{1}{2}r & -\frac{1}{2}s & \frac{1}{2}u & \frac{1}{2}r & \frac{1}{2}s \end{pmatrix} \quad \begin{aligned} a &= \frac{1}{2}(1-t) \\ b &= \frac{1}{2}(1+t) \\ u &= 1-r-s \end{aligned}$$

Prisma de Orden Cuadrático

$$\nabla \vec{\phi}^t = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}(4r+4s-3)t(1-t) & -\frac{1}{2}(4r+4s-3)t(1-t) & \frac{1}{2}u(1-2u)(1-2t) \\ -\frac{1}{2}(4r-1)t(1-t) & 0 & \frac{1}{2}r(1-2r)(1-2t) \\ 0 & -\frac{1}{2}(4s-1)t(1-t) & \frac{1}{2}s(1-2s)(1-2t) \\ \frac{1}{2}(4r+4s-3)t(1+t) & \frac{1}{2}(4r+4s-3)t(1+t) & -\frac{1}{2}u(1-2u)(1+2t) \\ \frac{1}{2}(4r-1)t(1+t) & 0 & -\frac{1}{2}r(1-2r)(1+2t) \\ 0 & \frac{1}{2}(4s-1)t(1+t) & -\frac{1}{2}s(1-2s)(1+2t) \\ 2(2r+s-1)t(1-t) & 2rt(1-t) & -2ur(1-2t) \\ 2st(1-t) & 2(r+2s-1)t(1-t) & -2us(1-2t) \\ (4r+4s-3)(1-t^2) & (4r+4s-3)(1-t^2) & 2u(1-2u)t \\ -2st(1-t) & -2rt(1-t) & -2rs(1-2t) \\ (4r-1)(1-t^2) & 0 & 2r(1-2r)t \\ 0 & (4s-1)(1-t^2) & 2s(1-2s)t \\ -2(2r+s-1)t(1+t) & -2rt(1+t) & 2ur(1+2t) \\ -2st(1+t) & -2(r+2s-1)t(1+t) & 2us(1+2t) \\ 2st(1+t) & 2rt(1+t) & 2rs(1+2t) \\ -4(2r+s-1)(1-t^2) & -4r(1-t^2) & -8urt \\ -4s(1-t^2) & -4(r+2s-1)(1-t^2) & -8ust \\ 4s(1-t^2) & 4r(1-t^2) & -8rst \end{pmatrix}$$

Pirámide de Orden Lineal

$$\nabla \vec{\phi}^t = \begin{pmatrix} -(1-s-t)(4(1-t))^{-1} & -(1-r-t)/(4(1-t))^{-1} & -(1-rs-2t+t^2)(2(1-t))^{-2} \\ (1-s-t)(4(1-t))^{-1} & -(1+r-t)(4(1-t))^{-1} & -(1+rs-2t+t^2)(2(1-t))^{-2} \\ (1+s-t)(4(1-t))^{-1} & (1+r-t)(4(1-t))^{-1} & -(1-rs-2t+t^2)(2(1-t))^{-2} \\ -(1+s-t)(4(1-t))^{-1} & (1-r-t)(4(1-t))^{-1} & -(1+rs-2t+t^2)(2(1-t))^{-2} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

APÉNDICE C

GRADIENTES DE INTERPOLACIÓN: CONTORNO

Triángulo de Orden Lineal

Contorno: $s = 0$

$$\nabla \vec{\phi} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{donde} \quad \nabla \equiv \left[\frac{\partial}{\partial r} \right]$$

Contorno: $1 - r - s = 0$

$$\nabla \vec{\phi} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{donde} \quad \nabla \equiv \left[\frac{\partial}{\partial r'} \right]$$

Contorno: $r = 0$

$$\nabla \vec{\phi} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{donde} \quad \nabla \equiv \left[\frac{\partial}{\partial s} \right]$$

Triángulo de Orden Cuadrático

Contorno: $s = 0$

$$\nabla \vec{\phi} = \begin{pmatrix} 4r - 3, & 4r - 1, & 0, & 4 - 8r, & 0, & 0 \end{pmatrix} \quad \text{donde} \quad \nabla \equiv \left[\frac{\partial}{\partial r} \right]$$

Contorno: $1 - r - s = 0$

$$\nabla \vec{\phi} = \begin{pmatrix} 0, & 1 - 4r, & 3 - 4r, & 0, & 8r - 4, & 0 \end{pmatrix} \quad \text{donde} \quad \nabla \equiv \left[\frac{\partial}{\partial r'} \right]$$

Contorno: $r = 0$

$$\nabla \vec{\phi} = \left(4s - 3, 0, 4s - 1, 0, 0, 4 - 8s \right) \quad \text{donde} \quad \nabla \equiv \left[\frac{\partial}{\partial s} \right]$$

Tetraedro de Orden Cuadrático

Contorno: $t = 0$

$$l = 1 - r - s \quad \nabla \equiv \left[\frac{\partial}{\partial r}, \frac{\partial}{\partial s} \right]$$

$$\nabla \vec{\phi} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Contorno: $s = 0$

$$l = 1 - r - t \quad \nabla \equiv \left[\frac{\partial}{\partial r}, \frac{\partial}{\partial t} \right]$$

$$\nabla \vec{\phi} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Contorno: $r = 0$

$$l = 1 - s - t \quad \nabla \equiv \left[\frac{\partial}{\partial s}, \frac{\partial}{\partial t} \right]$$

$$\nabla \vec{\phi} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Contorno: $1 - r - s - t = 0$

$$l = 1 - s - t \quad \nabla \equiv \left[\frac{\partial}{\partial s'}, \frac{\partial}{\partial t'} \right]$$

$$\nabla \vec{\phi} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Tetraedro de Orden Cuadrático

Contorno: $t = 0$

$$l = 1 - r - s \quad \nabla \equiv \left[\frac{\partial}{\partial r}, \frac{\partial}{\partial s} \right]$$

$$\nabla \vec{\phi} = \begin{pmatrix} 1 - 4l & -1 + 4r & 0 & 0 & 4(l - r) & 4s & -4s & 0 & 0 & 0 \\ 1 - 4l & 0 & -1 + 4s & 0 & -4r & 4r & 4(l - s) & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Contorno: $s = 0$

$$l = 1 - r - t \quad \nabla \equiv \left[\frac{\partial}{\partial r}, \frac{\partial}{\partial t} \right]$$

$$\nabla \vec{\phi} = \begin{pmatrix} 1 - 4l & -1 + 4r & 0 & 0 & 4(l - r) & 0 & 0 & -4t & 0 & 4t \\ 1 - 4l & 0 & 0 & -1 + 4t & -4r & 0 & 0 & 4(l - t) & 0 & 4r \end{pmatrix}$$

Contorno: $r = 0$

$$l = 1 - s - t \quad \nabla \equiv \left[\frac{\partial}{\partial s}, \frac{\partial}{\partial t} \right]$$

$$\nabla \vec{\phi} = \begin{pmatrix} 1 - 4l & 0 & -1 + 4s & 0 & 0 & 0 & 4(l - s) & -4t & 4t & 0 \\ 1 - 4l & 0 & 0 & -1 + 4t & 0 & 0 & -4s & 4(l - t) & 4s & 0 \end{pmatrix}$$

Contorno: $1 - r - s - t = 0$

$$l = 1 - s - t \quad \nabla \equiv \left[\frac{\partial}{\partial s'}, \frac{\partial}{\partial t'} \right]$$

$$\nabla \vec{\phi} = \begin{pmatrix} 0 & 1 - 4l & -1 + 4s & 0 & 0 & 4(l - s) & 0 & 0 & 4t & -4t \\ 0 & 1 - 4l & 0 & -1 + 4t & 0 & -4s & 0 & 0 & 4s & 4(l - t) \end{pmatrix}$$

BIBLIOGRAFÍA

- ANDERSON, JOHN D.: *Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications*. Jr. Mc Graw Hill, 1995.
- BELYTSCHKO, T.; LIU, W. K. y MORAN, B.: *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structure*. John Wiley & Sons, New York, 2000.
- BENSON, D. J.: «Computational methods in lagrangian and eulerian hydrocodes». *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering.*, 1992, **99**, pp. 235–394.
- BOTELLO-ÁLVAREZ, J. ENRIQUE; NAVARRETE-BOLAÑOS, J. LUIS; JIMÉNEZ-ISLAS, HUGO; ESTRADA-BALTAZAR, ALEJANDRO y RICO-MARTÍNEZ, RAMIRO: «Improving Mass Transfer Coefficient Prediction in Bubbling Columns via Sphericity Measurements». *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2004, **23(40)**, pp. 6527–6533.
- BOYCE, WILLIAM E. y DIPRIMA, RICHARD C.: *Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems*. Wiley, 7 edition, 2000.
- BRENNEN, CHRISTOPHER E.: *Cavitation and Bubble Dynamics*. Oxford University Press, 1995.
- BRODKEY, ROBERT S. y HERSHEY, HARRY C.: *Transport Phenomena: A Unified Approach*. Mcgraw-Hill College, 1987.
- CHISTI, Y. y JAUREGUI-HAZA, U. J.: «Oxygen transfer and mixing in mechanically-agitated airlift bioreactors». *Biochem. Eng. J.*, 2002, **10**, pp. 143–153.
- CHRISTENSEN, N. y NIELSEN, J.: «Metabolic Network Analysis: A Powerful Tool in Metabolic Engineering. Bioanalysis and Biosensors for Bioprocess Monitoring». *Advances in Biochemical Engineering/Biotechnology.*, 2000, **66**, pp. 209–231.

- CROWE, C.; SOMMERFEL, M. y TSUJI: *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. CRC Press, 1998.
- CROWE, CLAYTON T.; ELGER, DONALD F. y ROBERSON, JOHN A.: *Engineering Fluid Mechanics*. John Wiley & Sons, Inc., 2000.
- CUTHILL, E. H. y MCKEE, J.: «Reducing the bandwidth of sparse symmetric matrices». En: *Proceed. 24th Nat. Conf. Assoc. Comp. Mach., ACM Publications*, pp. 157–172, 1969.
- DARBY, RONALD: *Chemical Engineering Fluid Mechanics*. CRC, 2 edition, 2001.
- DREW, D. A. y PASSMAN, S. L.: *Theory Of Multicomponent Fluids. Applied Mathematical Sciences*. volumen 135. Springer, New York, 1999.
- EGGERS, A. J. y SAVIN, RAYMOND C.: «Approximate Methods for Calculating the Flow About Nonlifting Bodies of Revolution at High Supersonic Airspeeds». *Informe técnico 2579*, NACA TN, 1951.
- EISENHART, L. P.: *An Introduction to Differential Geometry, with Use of the Tensor Calculus*. Princeton University Press, Princeton, 1947.
- ENGLEZOS, PETROS: *Applied parameter estimation for chemical engineers*. Marcel Dekker Inc.; 1 edition, 2000.
- FLETCHER, C. A.: *Computational Techniques for Fluid Dynamics : Specific Techniques for Differential Flow Categories (Volume 2)*. Springer-Verlag, 2 edition, 1996.
- FLETCHER, C.A.J. y FLETCHER, C. A.: *Computational Techniques for Fluid Dynamics: Fundamental and General Techniques (Volume 1)*. Springer, 2 edition, 1996.
- FLETCHER, R.: «Conjugate Gradient Methods for Indefinite Systems». *Lecture Notes in Mathematics*, 1976, **506**, pp. 73–89.
- FLICKINGER, MICHAEL y DREW, STEPHEN: *The Encyclopedia of Bioprocess Technology Fermentation, Biocatalysis and Bioseparation*. John Wiley & Sons Inc, 1999.

- GALLAVOTTI, GIOVANNI: *Foundations of Fluid Dynamics*. Springer; 1 edition, 2006.
- GIBBS, N.; POOLE, W. y STOCKMEYER, P.: «An Algorithm for Reducing the Bandwidth and Profile of a Sparse Matrix». *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 1976, **13**, pp. 236–250.
- GINGOLD, R. A. y MONAGHAN, J. J.: *MNRAS*, 1977, **181**, p. 375.
- HALLQUIST, J. O.: *User's manual for DYNA2D - An explicit two-dimensional hydrodynamic finite element code with interactive rezoning and graphical display*. Lawrence Livermore National Laboratory report UCID-18756, Rev. 3, 1988.
- : *LS-DYNA Theoretical Manual*. Livermore Software Technology Corporation, 1998.
- HALLQUIST, J. O. y BENSON, D. J.: *DYNA3D users manual (nonlinear dynamic analysis of structures in three dimensions)*. Lawrence Livermore National Laboratory, Report No. UCID-19592, Revision 2, 1986.
- HERNQUIST, L.: *ApJ*, 1993, **404**, p. 717.
- HESTENES, M. R. y STIEFEL, E.: «Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems». *J. Res. Natl. Bur. Stand*, 1952, **49**, pp. 409–436.
- HIRSCH, C.: *Numerical Computation of Internal and External Flows. Vol. 1: Fundamentals of Numerical Discretization*. John Wiley & Sons, New York, 1988.
- HIRT, C.; AMSDEN, A. y COOK, J.: «An Arbitrary Lagrangian-Eulerian Computing Method for All Flow Speeds». *Journal of Computational Physics*, 1974, **14**, pp. 227–253.
- JAMESON, A.: «Iterative solution of transonic flows over airfoils and wings, including flow at Mach 1». *Comm. Pure. Appl. Math.*, 1974, **27**, pp. 238–309.
- KAPLAN, WILFRED: *Advanced Calculus*. Addison Wesley, fifth edition, 2002.

- KIM, J. C.; LIM, J. S. y KIM, J. M.: «Relationship between morphology and viscosity of the main culture broth of *Cephalosporium acremonium* M25». *Korea-Australia Rheology Journal*, 2005, **17(1)**, pp. 15–20.
- KISS, R. D. y STEPHANOPOULOS, G.: «Metabolic activity control of the L-lysine fermentation by restrained growth fed-batch strategies». *Biotechnol. Prog.*, 1991, **7**, pp. 501–509..
- KOPAL, ZDENGK: «Tables of Supersonic Flow Around Cones». *Informe técnico 1*, Staff of the Computing Section, Center of Analysis, M.I.T., 1947.
- KUM, O. y POSCH, W. G. HOOVERAND H. A.: «Viscous conducting flows with smooth-particle applied mechanics». *Phys. Rev. E*, 1995, **52**, pp. 4899–4908.
- LANCASTER, P. y SALKAUSKAS, K.: *Curve and Surface Fitting: An Introduction*. Academic Press, 1986.
- LAURIEN, E. y NIEMANN, J.: «Determination of the Virtual Mass Coefficient for Dense Bubbly Flows by Direct Numerical Simulation». En: *Proc. 5th Int. Conf. on Multiphase Flow*, 386, 2004.
- LEWIS, J. G.: «ACM». *TOMS*, 1982, **8**, pp. 190–194.
- LI, SHAOFAN y LIU, W. K.: «Moving least-square reproducing kernel methods. Part II: Fourier analysis». *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1996, **139**, pp. 159–194.
- LIM, A.; XIAO, F. y RODRIGUES, B.: «A Centroid-based approach to solve the Bandwidth Minimization Problem». En: *Hawaii International Conference on Information Sciences*, , 2004.
- LIU, G. R. y QUEK, S. S.: *Finite Element Method: A Practical Course*. Butterworth Heinemann, Oxford, 2003.
- LUCY, L. B.: *Astron. J.*, 1977, **82**, p. 1013.

- MONAGHAN, J. J.: *Annu. Rev. Astro. Astrophys.*, 1992, **30**, p. 543.
- MOO-YOUNG, M. y CHISTI, Y.: «Biochemical engineering in biotechnology (Technical Report) Commission on Biotechnology». *Pure & Appl. Chem.*, 1994, **66(1)**, pp. 117–136.
- MOUZA, A. A.; KAZAKIS, N. A. y PARAS, S. V.: «Bubble column reactor design using a CFD code». En: *1st Intern. Conference: From scientific computing to computational engineering*, Athens, Greece, 2004.
- MSC/DYTRAN: *User's Manual V4*. The MacNeal-Schwendler Corporation, 1997.
- MURMAN, E. M. y COLE, J. D.: «Calculation of plane steady transonic flows». *AIAA*, 1974, **12**, pp. 626–633.
- NEWMAN, P. A.: «Approximate calculation of hypersonic conical flow parameters for air in thermodynamic equilibrium». *Informe técnico*, Langley Research. N Center. NASA. Washington, 1964.
- NOH, W. F.: *CEL: A Time Dependent, Two-Space-Dimensional Coupled Eulerian-Lagrange Code. Methods in Computational Physics*. B. J. Alder et al. Academic Press, N.Y., 1964.
- PRENTER, P. M.: *Splines and Variational Methods*. John Wiley & Sons Inc, 1975.
- PRESS, WILLIAM H.; TEUKOLSKY, SAUL A.; VETTERLING, WILLIAM T. y FLANNERY, BRIAN P.: *Numerical Recipes in C++: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, Second Edition, 2002.
- REID, J. K.: «On the Method of Conjugate Gradients for the Solution of Large Sparse Systems of Linear Equations». En: *Large Sparce Sets of Linear Equations*, pp. 231–254. J. K. Reid, 1971.
- RICE, RICHARD G. y DUONG, D. DO: *Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers*. John Wiley & Sons, 1995.

- SIGALOTTI, L. D.; KLAPP, J.; SIRA, E.; MELEÁN, Y. y HASMY, A.: «SPH simulations of time-dependent Poiseuille flow at Low Reynolds numbers». *Journal of Computational Physics*, 2003, **191**, pp. 622–638.
- SOKOLICHIN, A. y EIGENBERGER, G.: «Applicability of the standard $k-\varepsilon$ turbulent model to the dynamic simulation of bubble columns: Part I. Detail numerical simulations». *Chem. Eng. Science*, 1999, **54**, pp. 2273–2284.
- SONNEVELD, P.: «CGS, A Fast Lanczos Type Solver for Nonsymmetric Linear Systems». *SIAM J. Sci. Stat. Comput*, 1989, **10(1)**, pp. 36–52.
- SONNLEITNER, B.: «Instrumentation of Biotechnological Processes. Bioanalysis and Biosensors for Bioprocess Monitoring.» *Advances in Biochemical Engineering/Biotechnology*, 2000, **66**, pp. 1–64.
- TAKEDA, H.; MIYAMA, S.M. y SEKIYA, M.: «Numerical simulation of viscous flow with smoothed particle hydrodynamics». *Prog. Theor. Phys.*, 1994, **92(5)**, p. 939.
- THOMAS, P. J.: «On the influence of the Basset history force on the motion of a particle through a fluid. Physics of Fluids A: Fluid Dynamics». *Phys. Fluids A*, 1992, **4(9)**, pp. 2090–2093.
- VAN-DEVORST, H. A. y VUIK, C.: «GMRESR: a family of nested GMRES methods». *Numer. Lin. Alg. with Appl.*, 1994, **1**, pp. 369–386.
- VOGEL, HENRY C. y TODARO, CELESTE C.: *Fermentation and Biochemical Engineering Handbook*. William Andrew Publishing, 1996.
- WHITAKER, S.: *The Method of Volume Averaging*. Kluwer Academic Publishers, 1998.
- WILKINS, M. L.: *Computer Simulation of Dynamic Phenomena*. Springer, 1999.
- YEOH, G. H. y TU, J.: «Modelling gas-liquid bubbly flows». En: *Proceedings of 15th Australasian Fluid Mechanics Conference*, , 2004.
- YORK, A. R.; SULSKY, D. y SCHREYER, H.: «Fluid-Membrane Interaction Based on the MaterialPoint Method». *Int. J. Num. Meths. Engng*, 2000, **48**, pp. 901–924.

ZIENKIEWICZ, O. C. y TAYLOR, R. L.: *Finite Element Method: Volume 3, Fluid Dynamics*. Butterworth-Heinemann, 2000.

ZUBER, N. y FINDLAY, J. A.: «Average volumetric concentration in two-phase flow systems». *J. Heat Transfer*, 1965, **87**, pp. 453–468.