

00586

UNAM
POSGRADO
Ciencia e Ingeniería
de Materiales



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

SIMULACIÓN DE UN SISTEMA DE PROTECCIÓN CATÓDICA
UTILIZANDO MEF.

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

DOCTOR EN INGENIERÍA QUÍMICA

P R E S E N T A :

RODRIGO MONTOYA LÓPEZ



MÉXICO, D.F.

2005

0350044



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

FACULTAD DE QUÍMICA
UNAM

ASESOR DEL TEMA: GENESCÁ LLONGUERAS JOAN
COMITÉ TUTORAL: CARRERA BOLAÑOS JORGE Y
RODRÍGUEZ GÓMEZ FRANCISCO

AGRADECIMIENTOS

Por enseñarme que las preocupaciones están de más en esta vida, gracias Miller.

Por volar conmigo, gracias Vanessa.

Por las pláticas interminables, gracias Doi, gracias Marquiño.

Gracias a mi tutor Joan Genesca y a todos mis sinodales, pero en especial a Alfredo Nicolás y a Francisco Javier por sus muy adecuados comentarios sobre la tesis y a Jorge Carrera y Jorge Uruchurtu por su amabilidad y humanismo.

Gracias a Bin y a Jan Carlo Por su ayuda en el trabajo experimental.

Resumen

En este trabajo se desarrolló un programa computacional, para resolver el sistema numérico generado por la formulación variacional obtenida de la ecuación bidimensional de Laplace en coordenadas rectangulares con condiciones de frontera tipo Neumann. El método del elemento finito (MEF) se utilizó para resolver el problema de dimensión finita.

Funciones de soporte compacto se utilizaron para simular los electrodos inertes sometidos a una corriente externa, el soporte de dicha función fue igual al diámetro de los electrodos. La validación del modelo se corroboró al encontrar que los resultados obtenidos fueron muy similares a los determinados experimentalmente. Se simularon tres aspectos de interés en la protección catódica:

- Distribución de electrodos dentro y fuera de un tanque metálico.
- Irregularidades de baja conductividad en el electrolito.
- Diferentes resistividades en el electrolito.

Abstract

A computer program was developed, to solve the numerical system generated by the variational formulation obtained by the Laplace bidimensional equation in rectangular coordinates at boundary conditions, Neumann's type. The finite element method (FEM) was used to solve the finite dimensional problem. Compact support functions were used to simulate inert electrodes under an external current, this support was equal to the electrodes diameter.

The validation of the model was corroborated when the results obtained by modeling were very similar to those given by experimentation. Three aspects of interest about cathodic protection were simulated:

- Electrodes distribution inside and outside of a metallic tank.
- Low conductivity irregularities in the electrolyte.
- Different resistivities in the electrolyte.

SÍMBOLOS.			
Símbolo	Significado	Unidades usuales	Primera página en donde aparece
ϕ	potencial eléctrico	V	30
i	corriente	A	30
S	área	m^2	41
\bar{J}	densidad de corriente	A/m^2	41
Q	magnitud de carga eléctrica	C	41
q	carga eléctrica	C	41
$\bar{\phi}$	campo eléctrico	V/C	41
k	conductividad eléctrica	\mathcal{U}	42
\hat{k}	tensor de conductividades	\mathcal{U}	42
ρ	densidad de carga		42
∇	operador gradiente		42
∇^2	operador laplaciano		42
V	subespacio de un espacio de Hilbert		43
V^h	subespacio de dimensión finita		43
$a(\cdot, \cdot)$	forma bilineal, continua, simétrica y V-elíptica		43
$\langle l, \cdot \rangle$	funcional lineal		43
\forall	para todo		43
u_h o v_h	elementos de V^h		43
Ω	dominio		45
H	espacio de Hilbert		45
$\partial\Omega$	frontera de Ω		45
Δ	operador laplaciano		45

SÍMBOLOS.			
Símbolo	Significado	Unidades usuales	Primera página en donde aparece
∂_i	derivada parcial con respecto a x_i		46
∞	infinito		47
\mathbb{R}	los números reales		47
φ	Polinomios continuos		48
C_N	Espacio de dimensión finita		48
U	solución en V		48
U_N	solución en C-N		49

ÍNDICE

• 1 Antecedentes teóricos	11
– 1.1 Protección catódica	11
– 1.2 Corriente impresa.	16
– 1.3 PC con ánodos de sacrificio.	19
– 1.4 Diseño de sistemas de protección catódica.	21
* 1.4.1 Gradientes de potencial.	22
* 1.4.2 Distribuciones de corriente y potencial	23
* 1.4.3 Requerimientos de corriente.	25
* 1.4.4 Ánodos de corriente impresa.	25
* 1.4.5 Corrosión por corrientes parásitas.	26
* 1.4.6 Procedimientos de monitoreo y diseño.	26
– 1.5 Criterios de Protección catódica.	29
* 1.5.1 Otros criterios de Protección catódica.	30
– 1.6 Modelos matemáticos en protección catódica.	34
* 1.6.1 Diferentes modelos y sus características.	34
* 1.6.2 Historia de los modelos matemáticos en PC.	36
– 1.7 Ecuación de Laplace.	42
– 1.8 Elemento finito.	45
• 2 Problemas matemáticos	46
– 2.1 Problema Dirichlet homogéneo.	47
* 2.1.1 Problema homogéneo en 1D.	48
* 2.1.2 Problema homogéneo en 2D.	57
– 2.2 Problema Mixto homogéneo.	67
* 2.2.1 Problema Mixto en 1D.	67
* 2.2.2 Problema Mixto en 2D.	70

– 2.3 Problema Dirichlet no homogéneo.	73
– 2.4 Problema Neumann.	75
• 3 Un problema electroquímico	79
• 4 Resultados	111
– 4.1 Situación física 1.	111
– 4.2 Situación física 2.	119
– 4.3 Situación física 3.	123
– 4.4 Situación física 4.	126
• 5 Metodología de los valores experimentales	133
• 6 Conclusiones	137
• 7 Apéndice	141
• 8 Bibliografía	169

“...tengo una fe completa en lo dicho, y estoy resuelto a comparecer delante de un juez con el alma tan pura como pueda. Por lo tanto, despreciando lo que la mayor parte de los hombres estiman, y no teniendo otra guía que la verdad, haré lo que pueda por vivir y morir, cuando el tiempo se haya cumplido, tan virtuoso como me sea posible. Invito a todos y te invito a ti mismo, a mi vez, para adoptar este género de vida, y ejercitarte en este combate, el más interesante a mi juicio de todos los de este mundo. Te digo que no estarás en estado de auxiliarte a ti mismo, cuando sea preciso comparecer y sufrir el juicio de que hablo, y que cuando hayas llegado a la presencia de tu juez, el hijo de Egina; cuando te haya cogido y llevado delante de su tribunal, bostezarás y perderás la cabeza ahí, ni más ni menos que yo la perdería delante de los jueces de esta ciudad. Quizá entonces te abofetearán ignominiosamente y te dirigirán toda clase de ultrajes.

Probablemente miras todo esto como un cuento de viejas, y no haces de ello ningún aprecio y no sería extraño que no lo tomáramos en cuenta, si, después de muchas indagaciones, pudiéramos encontrar algo más verdadero y mejor. Pero ya ves que vosotros tres, que sois hoy día los más sabios de la Hélade, tú, Polo y Gorgias, no podéis probar que se deba adoptar otra vida que la que nos será útil allá abajo. Por el contrario, de tantas opiniones como hemos discutido, todas las demás han sido combatidas, y la única que subsiste inquebrantable es ésta; que se debe antes sufrir una injusticia que hacerla, y que en todo caso es preciso procurar no parecer hombre de bien, sino serlo en realidad, tanto en público como en privado; y que si alguno se hace malo en algo, es preciso castigarle; y que después de ser justo, el segundo bien consiste en volver a serlo, recibiendo el castigo que sea merecido; que es preciso huir de

toda adulación, tanto respecto de sí mismo como respecto de los demás, sean muchos o pocos; y que jamás se debe hacer uso de la retórica, ni de ninguna otra profesión, sino en obsequio a la justicia. Ríndete pues, a mis razones, y sígueme en el camino que te conducirá a la felicidad en esta vida y después de la muerte, como mis razonamientos lo acaban de demostrar. Sufre que se te desprecie como un insensato, que se te insulte si se quiere, y déjate con grandeza del alma maltratar de esa manera, que te parece tan ultrajante. Ningún mal te resultará, si eres realmente hombre de bien y te consagras a la práctica de la virtud. Después de que la hayamos cultivado en común, entonces, si nos parece conveniente, tomaremos parte en los negocios públicos; y cualquiera que sea aquel sobre que tengamos que deliberar, deliberaremos con más acierto que podríamos hacerlo ahora. Porque es una vergüenza para nosotros que en la situación en la que al parecer estamos, presumamos como si valiéramos algo, siendo así que mudamos de opinión a cada instante sobre los mismos objetos, y hasta lo que hay de más importante, ¡tan profunda es nuestra ignorancia! Por lo tanto, sirvámonos de la luz que arroja esta discusión, como una guía que nos hace ver que el mejor partido que podemos tomar es vivir y morir en la práctica de la justicia y de las demás virtudes. Marchemos por el camino que nos traza, y comprometamos a los demás a que nos imiten. No demos oídos al discurso, que te ha reducido, y que me suplicabas que yo admitiese como bueno; porque no vale nada, mi querido Calicles".¹

¹Fragmento de una conversación entre Sócrates y Calicles, según Platón.

Objetivo

Predecir numéricamente los potenciales eléctricos en dos dimensiones de un sistema de protección catódica utilizando el método del elemento Finito (MEF).

Hipótesis

Se formulará variacionalmente el problema de valores a la frontera que describa al fenómeno de interés, se verificará matemáticamente que la solución exista y que ésta sea única, y se procederá a encontrar la solución numérica utilizando el MEF.

Para trabajar un problema Neumann², se utilizará una condición de frontera tipo Robin para aproximar una condición de flujo a través de una perturbación ϵ (es decir, si la condición es " $U'(x, y) = f$ " ésta se sustituirá por " $U'(x, y) + \epsilon U(x, y) = f$ " con alguna ϵ suficientemente pequeña), y evitar trabajar con la condición de compatibilidad requerida en este tipo de problemas.

Justificación del trabajo

Es de suma importancia aclarar que la conocida (en el área de la corrosión) condición de frontera que considera una estabilidad del potencial en una región relativamente lejos de la zona afectada por las interacciones eléctricas

²por el tipo de condiciones de frontera

[1] y [2], (problema Dirichlet o Mixto) no es práctica para modelarla con el método del elemento finito ya que para simular de manera correcta dicha condición se necesita un gran dominio, lo cual conlleva a un enorme manejo de datos, además, existen muchas aplicaciones reales en donde dicha condición no se cumple y sería un grave error aplicarla³, por lo que necesariamente se deben resolver (o aproximar) problemas del tipo Neumann en el área de la ingeniería de la corrosión.

³El hecho de mantener constante el potencial de una cierta región, podría considerarse válido bajo ciertas condiciones específicas, como considerar regiones en donde se encuentren metales no polarizables [3], [4] o cuando se trabaja con sistemas gigantes en donde las regiones alejadas de la zona de perturbación eléctrica en realidad no son afectadas.

Capítulo 1

Antecedentes teóricos

1.1 Protección catódica

El propósito de esta sección es introducir el concepto de protección catódica (PC), el cual es uno de los métodos más utilizados para controlar el fenómeno de la corrosión electroquímica, y a la vez proporcionar un panorama general de la misma.

El dar una definición que aparezca en algún texto relacionado con la corrosión no es de gran utilidad si lo que se desea es tener un panorama general de la PC, sin embargo a continuación se proporciona una de ellas, con el objetivo de introducir el concepto antes de hablar de él: “Es un medio electroquímico de control de corrosión en el cual se disminuye la corrosión en el cátodo y la reacción de oxidación en una celda galvánica se concentra en el ánodo” [5].

Con respecto a sus orígenes se sabe que fueron los británicos los primeros en utilizar la PC en accesorios de cobre para embarcaciones de madera en 1823[6]. Desafortunadamente, la eliminación de los productos de corrosión tóxicos permitió el crecimiento de organismos marinos, los cuales reducían la

velocidad de navegación. La PC fue usada extensivamente por primera vez en la década de los 30¹[5], [6] para tuberías de acero enterradas que transportaban productos petroleros en los campos de la Costa del Golfo de los Estados Unidos. La PC de los cascos de acero de los barcos se volvió común en 1950, como complemento de los recubrimientos resistentes a la corrosión y a los depósitos.

La PC encuentra su mayor uso en aceros al carbón recubiertos con velocidad de corrosión intermedia. Por lo tanto, extiende la vida de servicio de miles de kilómetros de tuberías de acero enterradas, cubiertas de pozos de petróleo y gas, estructuras costeras de extracción de petróleo, cascos de barcos en alta mar, tanques de agua, y algunos equipos químicos.

La PC reduce la velocidad de corrosión al polarizar catódicamente la superficie de un metal que se corroe, es decir, la polarización catódica reduce la velocidad de la reacción de disolución con un exceso de electrones, lo cual también aumenta la velocidad de la reacción catódica.

La polarización catódica de la que se habla puede lograrse mediante un rectificador, el cual suministra corriente impresa al convertir la corriente alterna de las líneas eléctricas² a corriente directa, como se muestra en la Figura 1.2 o bien, la polarización se logra al conectar el metal de interés a un segundo metal, llamado ánodo de sacrificio, el cual tiene un potencial de corrosión

¹El libro [7] comenta que este hecho sucedió en la década de los 20.

²En las localidades donde no hay líneas eléctricas, la corriente impresa externa puede suministrarse a través de generadores de gas o diesel o a través de celdas solares. Para las estructuras enterradas, frecuentemente se emplean ánodos inertes de grafito. Para estructuras sumergidas en aguas marinas, los ánodos pueden ser de hierro colado con alto porcentaje de silicio o de titanio recubierto con platino (ver la sección 1.2)..

más activo. El potencial más noble (positivo) de la estructura en este par galvánico hace que ésta se polarice catódicamente, mientras que el metal activo se disuelve anódicamente (ver la Figura 1.1). Ánodos de sacrificio de magnesio, zinc y aluminio cuyo peso puede ser de pocas libras o de varios cientos de libras, soldados a estructuras enterradas o sumergidas, le brindan protección catódica a largo plazo (sección 1.3). Los ánodos de sacrificio se deben reemplazar periódicamente conforme se consumen por la disolución anódica.

Los ánodos enterrados, ya sea de sacrificio o de corriente impresa, usualmente se empacan con material conductor (con frecuencia coque granulado), porque proporciona un ambiente uniforme para el ánodo, lo que se refleja en una salida de corriente del ánodo predecible y constante, y porque dicho material conductor posee una resistividad mucho menor que el terreno³ [6]. Las estructuras de acero al carbón en ambientes acuosos neutros ligeramente corrosivos, como el suelo, agua y agua de mar, son los grandes beneficiarios de la PC -algunas aleaciones como los aceros inoxidable y el cobre, son intrínsecamente resistentes a la corrosión⁴ y no necesitan protección adicional-. Finalmente se debe decir que la PC no es conveniente en muchas circunstancias aun cuando ésta es posible; en soluciones fuertemente ácidas, abundante evolución de hidrógeno por la reacción catódica puede ser peligrosa y los recubrimientos empleados para reducir las corrientes requeridas generalmente fallan.

³Esto produce una disminución de la resistencia del ánodo.

⁴Sólo bajo ciertas condiciones.

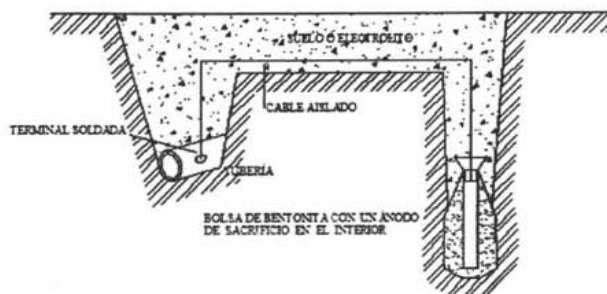


Figura 1.1: Representación de un sistema de PC con un ánodo de sacrificio.

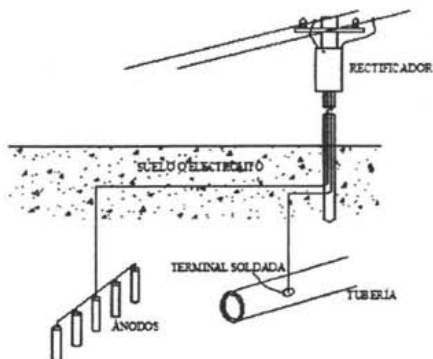


Figura 1.2: Representación de un sistema de PC por corriente impresa.

La PC es un complemento ideal para sistemas con recubrimientos. La corrosión normalmente se concentra en las imperfecciones de los recubrimientos, dañando interiormente el recubrimiento y apresurando la falla. El recubrimiento es una trayectoria de alta resistencia para las corrientes catódicas aplicadas, las cuales por consecuencia se concentran en las imperfecciones del mismo. Por lo tanto, la PC es efectiva en los puntos débiles del recubrimiento, lo cual reduce los requerimientos de corriente a un nivel práctico para el diseño.

La mayoría de las estructuras de acero enterradas utilizan una combinación de recubrimientos orgánicos con PC para prevenir la corrosión. Muchas de estas estructuras se recubren durante su fabricación. Sin embargo, algunas estructuras costeras se dejan sin recubrir, debido a que es difícil mantener un recubrimiento en ambientes marinos hostiles, profundos e inaccesibles.

Las reacciones de reducción en condiciones neutras o alcalinas aumentan el pH en la superficie protegida por la generación de OH^- durante la polarización catódica. Hasta cierto grado esto es benéfico ya que las aleaciones de hierro son resistentes en soluciones ligeramente alcalinas en las cuales es estable una capa de óxido protector[7]. Sin embargo, las soluciones alcalinas degradan los recubrimientos orgánicos. Existen recubrimientos con resinas resistentes a la alcalinidad, pero se debe evitar la sobreprotección. El exceso de polarización catódica en las superficies expuestas también puede generar hidrógeno por la reducción directa del agua, lo cual puede ocasionar ampollas en el recubrimiento.

Los depósitos calcáreos provocan una continua disminución en la densidad de corriente límite para la reducción del oxígeno conforme aumenta el espesor

del depósito. La corriente necesaria para la PC disminuye correspondientemente. En algunos casos, las corrientes catódicas reducidas permiten la PC de estructuras sumergidas en agua de mar sin recubrimientos.

1.2 PC por corriente impresa

En la PC por corriente impresa se conecta una fuente externa de corriente directa entre la estructura a proteger y el ánodo. La terminal positiva de la fuente de poder siempre debe conectarse al ánodo, esto es importante porque si por error se conecta a la estructura a proteger, ésta se convertirá en ánodo en lugar de convertirse en cátodo y se corroerá activamente, lo que es opuesto al resultado deseado. La curva de polarización catódica da una indicación de la densidad de corriente impresa, necesaria para la PC⁵.

Es necesario aclarar que se debe ser en extremo cuidadoso en no realizar una protección catódica excesiva, ya que es posible que se presente la evolución de hidrógeno aun en soluciones neutras o alcalinas debido a que la reducción directa del agua se vuelve termodinámicamente posible y esta evolución de hidrógeno destruye los recubrimientos y produce varias formas de daño por hidrógeno, además de que la nueva reacción de reducción derrocha corriente catódica adicional [7].

Los ánodos utilizados para descargar la corriente de PC se corroerán, es por esto que es importante utilizar materiales que se consuman a relativamente bajas velocidades de corrosión y que por lo tanto permitan diseñar lechos

⁵Según Ewing y Pearson, para más información ver la sección 1.5.

anódicos que puedan descargar grandes cantidades de corriente y tener una expectativa de vida larga.

Los materiales más comunes que se utilizan para fabricar este tipo de ánodos son carbón o grafito, aleaciones de plomo-plata para ambientes marinos y platino.

El grafito fue el primer material en utilizarse para la fabricación de ánodos permanentes[6] y aun cuando no posee propiedades, mecánicas y eléctricas, ideales por ser quebradizo y poroso, se ha comprobado que para la tierra es un muy buen material anódico siempre y cuando se le proteja de los impactos mecánicos.

Las aleaciones de plomo-plata se han desarrollado para utilizarse en agua de mar y se ha encontrado que ánodos con entre 1 y 2 por ciento de plata son ideales cuando se utilizan densidades de corriente bajas en agua de mar. Los primeros experimentos se llevaron a cabo en barcos de la armada británica con 1 por ciento de plata y en barcos de la armada canadiense con 2 por ciento[6]. Estos ánodos funcionan como tales por la formación en su superficie de una capa de peróxido conductora, promovida por la presencia de la plata, la cual actúa como ánodo y posee la propiedad de destruirse muy lentamente. Este tipo de aleaciones no son útiles con altas densidades de corriente, ya que ésta causa el desarrollo de cloruros de plomo no conductores en la intercara peróxido/plomo, lo que termina por aislar el peróxido del plomo[6].

El platino por su alto costo se utiliza depositado en otro material menos caro, como el titanio o el niobio, éstos materiales platinizados se utilizan también en ambientes marinos y a diferencia de los ánodos de aleaciones de plomo,

estos ánodos sí pueden utilizarse con altas densidades de corriente.

La fuente más común de corriente directa utilizada en la PC es un rectificador, el cual es un aparato que se alimenta de energía a partir de las líneas eléctricas y convierte la corriente alterna en una corriente directa de menor voltaje por medio de un transformador y un instrumento rectificador utilizando, comúnmente, elementos de selenio o silicio. Estos elementos tienen una baja resistencia al flujo de corriente en una dirección y una alta resistencia en la dirección opuesta.

Los rectificadores operan a menos del 100% de eficiencia, lo que significa que la salida de corriente directa es menor que la entrada de corriente alterna de la línea de alimentación. La eficiencia de un rectificador se puede determinar multiplicando la salida de corriente directa en volts y amperes por 100 y dividiendo este resultado por la entrada de corriente alterna en watts[7]. La diferencia entre la energía de entrada de corriente alterna y la energía de salida de corriente directa representa la energía perdida en el proceso de rectificación. Esta energía se convierte en calor, por lo que algunas veces es necesario utilizar procesos de enfriamiento para prevenir que los componentes del rectificador se calienten demasiado y fallen.

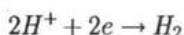
La industria de la PC ha cambiado extensivamente en los recientes años de rectificadores con corriente fija a rectificadores que automáticamente controlan la salida de corriente. Las ventajas de un sistema de potencial controlado radica en que sólo se suministra la corriente necesaria de modo que nunca se sobreprotege a la estructura. La PC con potencial controlado se usa extensamente para cascos de barcos y para muchas instalaciones marinas en las cuales la velocidad de flujo es variable.

En los casos en los que no se tenga disponible una línea de corriente, se pueden utilizar otras fuentes de corriente directa como son: baterías, generadores termoeléctricos, celdas de combustible y celdas solares, entre otros.

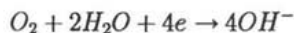
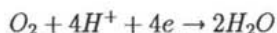
1.3 PC con ánodos de sacrificio

En un par galvánico entre metales diferentes, la corriente galvánica protege catódicamente al metal más noble y disuelve preferencialmente al metal más activo. Los electrones fluyen a partir del ánodo activo al cátodo de la estructura noble. La reacción anódica en la estructura del cátodo se reduce por el suministro de electrones proveniente del ánodo (llamado ánodo de sacrificio). Al mismo tiempo la reacción catódica se acelera. La estructura del cátodo se protege catódicamente, y las mismas reacciones electroquímicas se presentan en el cátodo como cuando la polarización es suministrada por corriente impresa:

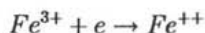
evolución de hidrógeno en soluciones ácidas y neutras respectivamente,



reducción de oxígeno disuelto en soluciones ácidas y neutras respectivamente,



reducción de un oxidante disuelto tal como,



En principio, cuando se acopla galvánicamente cualquier metal o aleación, el más activo de los dos en la serie galvánica se convierte en un ánodo de sacrificio y protege catódicamente al otro. La disolución anódica consume continuamente los ánodos de sacrificio, los cuales deben reemplazarse periódicamente. Por consiguiente, la vida máxima de un ánodo requiere sólo la corriente mínima para la protección adecuada.

Las aleaciones para ánodos de sacrificio se caracterizan por ciertas propiedades electroquímicas deseables:

- El potencial de corrosión de la aleación debe ser lo suficientemente activo (negativo) para que la corriente de protección llegue al cátodo a través del electrolito. Mientras mayor sea la resistencia del electrolito y la separación entre el ánodo y la estructura, el potencial del ánodo debe ser más negativo.
- La polarización en el ánodo de sacrificio debe ser baja para permitir el flujo de la corriente. Se excluyen a las aleaciones que se pasivan como materiales para ánodos de sacrificio.
- El número de equivalentes electroquímicos del material del ánodo, los cuales son la carga teóricamente disponible para abastecer de corriente galvánica por unidad de masa de la aleación, debe ser grande.
- La eficiencia de la aleación, que es el porcentaje de salida de corriente observada en la práctica, debe ser alta.

Las aleaciones de magnesio, zinc y aluminio tienen la combinación necesaria de propiedades físicas, químicas y económicas para fabricar ánodos de sacrificio.

El magnesio tiene un potencial de corrosión muy activo y baja polarización por lo que se usan en suelos, ya que su potencial de corrosión es tan activo que es suficiente para vencer las grandes resistividades que frecuentemente se presentan allí. Sin embargo, no son apropiados en agua de mar, debido a que las bajas resistividades de la solución permiten el flujo de grandes corrientes galvánicas y el rápido consumo de los ánodos. También se usan frecuentemente en tanques domésticos de agua caliente, donde la alta resistencia del electrolito nuevamente limita la velocidad de consumo del magnesio. Por su parte el zinc tiene la combinación ideal de potencial de corrosión intermedio, baja polarización y alta eficiencia en agua de mar; las aleaciones de aluminio fabricadas recientemente con pequeñas cantidades de zinc y mercurio, indio o estaño permanecen activas en la presencia de cloruros en agua de mar y tienen un número de equivalentes electroquímicos grande y baja densidad, además de un bajo costo. A continuación se presenta una tabla, proporcionada por Crundwell [8], en donde se observan las aleaciones de ánodos de sacrificio disponibles comercialmente y algunas de sus propiedades.

Aleaciones de ánodos de sacrificio disponibles comercialmente.				
Aleación	Ambiente	potencial** mV	capacidad (Ah/kg)	consumo (Kg/A año)
Mg 1.5%Mn	suelo y agua	-1700*	1200	7.5
Mg 6%Al 3%Zn	suelo y agua	-1500*	1200	7.5
Zn 0.5%Al 0.1%Cd	agua de mar	-1050	780	11.25
Al 0.4%Zn 0.4%Hg	agua de mar	-1050	>2800	3.1
Al 5%Zn 0.04%Hg	fondo del mar	-1050	>2700	3.25
Al 3-5%Zn 0.01-0.03%In	agua de mar	-1100	2400-2700	3.25-3.65

**El potencial es de circuito abierto vs. Ag/AgCl. *En este caso se reporta vs. Cu/CuSO₄

Los principios electroquímicos de la PC son muy claros, sin embargo, su aplicación en sistemas reales con frecuencia es lo suficientemente compleja como para imposibilitar determinaciones cuantitativas. Como resultado de esto, usualmente el diseño de los sistemas de PC es inexacto y depende en gran medida de la experiencia del diseñador.

1.4 Diseño de sistemas de PC

Los factores que se deben considerar al evaluar los diseños propuestos para los sistemas de PC son los siguientes:

1.4.1 Gradientes de potencial

En cualquier sistema de PC, ya sea por corriente impresa o por ánodos de sacrificio, el cambio total de potencial entre el ánodo y el cátodo incluye lo siguiente:

- Sobrepotencial catódico
- Caída óhmica alrededor de la estructura del cátodo
- Caída óhmica a través del electrolito
- Caída óhmica alrededor del ánodo
- Sobrepotencial anódico

La dificultad principal en el diseño de los sistemas de PC es la medición correcta o el cálculo de los pequeños sobrepotenciales en la superficie del

cátodo, sin la interferencia de las grandes caídas óhmicas. El cambio total de potencial entre el ánodo y el cátodo se debe vencer por la salida de voltaje del rectificador en un sistema de corriente impresa o por la diferencia de potencial galvánico en un sistema de ánodos de sacrificio. Por lo tanto, para una estructura enterrada, donde se deben proteger grandes áreas y las resistencias son muy grandes, frecuentemente se necesitan sistemas de corriente impresa. Cuando no se desea hacer el gasto y el mantenimiento de un sistema de corriente impresa se pueden usar ánodos de sacrificio de magnesio, los cuales tienen un potencial de corrosión muy activo.

1.4.2 Distribuciones de corriente y potencial en la estructura protegida

El comportamiento ideal de un sistema de PC es distribuir uniformemente el potencial catódico necesario y la corriente sobre toda la superficie de la estructura. Por desgracia, este estándar es virtualmente imposible de lograr en la práctica, debido a ciertas restricciones físicas que incluyen:

- Las corrientes originadas por la localización finita de los ánodos. Es decir, diferentes puntos de la superficie de la estructura tendrán acceso variable a la corriente debido a las diferentes distancias hacia la superficie anódica más cercana.
- Muchos de los ambientes apropiados para PC tienen conductividad baja o intermedia, por lo que los potenciales en la estructura tienden a ser no uniformes debido a que la baja conductividad del medio atenúa el potencial en diferentes grados, dependiendo de la trayectoria hacia un

determinado punto de la estructura.

- Las estructuras protegidas son geoméricamente complejas. La corriente de los ánodos frecuentemente tiene dificultad para llegar a los lugares remotos o cubiertos de la superficie de la estructura.

Como resultado de esto, los acercamientos analíticos para determinar la distribución de corriente y potencial se han restringido a geometrías no complicadas con numerosas consideraciones para simplificar el problema. Uno de esos acercamientos propone el uso de ecuaciones de atenuación para el potencial y la corriente las cuales llevan implícitas las siguientes consideraciones:

- Los ánodos se encuentran separados suficientemente de la estructura, de manera que la corriente tiene un acceso uniforme a todas las partes de la estructura. Frecuentemente esto no es válido para ánodos de corriente impresa y casi nunca para ánodos de sacrificio.
- La solución electrolítica es uniforme en el volumen que rodea los ánodos y la estructura catódica. Esto es usualmente falso para suelos en grandes distancias con ánodos de corriente impresa.
- La resistencia del recubrimiento es alta, uniforme y óhmica. Los recubrimientos son imperfectos y la PC se usa como complemento.
- La polarización en el cátodo es lineal (óhmica) cuando aumenta la corriente. Por el contrario, la corriente en las imperfecciones del recubrimiento varía de manera exponencial (control activacional) o no varía (control por concentración) con la corriente.

Las curvas teóricas de atenuación se distorsionan en la práctica en o cerca de los ánodos que se encuentran suficientemente cerca como para concentrar la corriente, en las imperfecciones de los recubrimientos y en las heterogeneidades del suelo. No obstante, las ecuaciones de atenuación se usan frecuentemente como aproximaciones para el diseño de los sistemas de PC para tuberías. La complejidad de la mayoría de los sistemas corrosivos no permiten el análisis por los métodos analíticos convencionales. La gran cantidad de variables y las restricciones físicas requieren procesamiento por computadora a través de métodos numéricos.

1.4.3 Requerimientos de corriente

El tamaño de los rectificadores se basa en el área de la superficie a proteger y en la densidad de corriente requerida para un medio ambiente dado. Los requerimientos de corriente se pueden determinar a partir de curvas de polarización realizadas en el laboratorio o a pequeña escala, pero el escalar a estructuras reales es difícil. Generalmente la demanda de corriente para los rectificadores se estima a partir de la experiencia. Existen tablas de demanda de corriente para suelos, agua de mar y una variedad de medios ambientes diferentes.

1.4.4 Ánodos de corriente impresa

Usualmente los ánodos se colocan en "camas" que pueden ser horizontales o verticales dependiendo del equipo de excavación disponible, la naturaleza del estrato del suelo y la proximidad de las estructuras cercanas. La selección del mejor material para el ánodo debe ser considerada como parte del diseño

del sistema de PC. Las propiedades deseables de un ánodo son baja resistencia al flujo de corriente, baja velocidad de consumo, resistencia física, que sean fáciles de fabricar y que tengan un costo mínimo. Los materiales más usados son hierro colado, hierro colado con alto contenido de silicio, grafito, aleaciones de plomo, algunos óxidos conductores y platino.

1.4.5 Corrosión por corrientes parásitas

Los principales problemas de corrosión por corrientes parásitas actualmente son resultado de la interacción de los sistemas de PC. La mejor solución a este problema es conectar las dos estructuras protegidas. La instalación de ánodos adicionales y la posibilidad de aumentar la capacidad del rectificador da como resultado la protección de ambas estructuras.

1.4.6 Procedimientos de monitoreo y diseño

El seguimiento del funcionamiento de un sistema de PC durante el diseño, la instalación y la operación requiere que se efectúen mediciones de potencial en la estructura protegida. Los electrodos de referencia de $Cu/CuSO_4$ se usan para estructuras enterradas y los de $Ag/AgCl$ para estructuras sumergidas en agua de mar. El electrodo de calomel se utiliza en algunas investigaciones de campo aunque se utiliza por lo regular como una referencia en los estudios de laboratorio. El zinc puro empacado con materiales de relleno puede ser un buen electrodo de referencia instalado permanentemente en puntos clave. Cualquier medida de potencial incluye de manera inevitable una porción de la caída óhmica ya que el medir un potencial de polarización libre de caída óhmica es difícil y a veces imposible para superficies a las cuales no se tiene

acceso en estructuras complejas. No obstante las mediciones de potencial que incluyen caída óhmica son comunes y aún así son útiles para el monitoreo del desempeño de la PC, especialmente para estructuras enterradas.

Para medir el potencial de estructuras costeras y tuberías se requiere que el electrodo de referencia se coloque lo más cerca posible de la superficie de la estructura protegida para minimizar los errores ocasionados por la caída óhmica. Para estas aplicaciones existen electrodos de referencia portátiles y en otras ocasiones se pueden instalar de manera permanente en lugares estratégicos con objeto de facilitar la obtención de los datos.

Con objeto de realizar mediciones de potencial libres de la contribución de la caída óhmica se han desarrollado métodos en los que la corriente se interrumpe y se registra la respuesta del potencial, la interferencia de la caída óhmica se distingue por un decaimiento inicial rápido seguido por una depolarización más lenta de la superficie protegida. Este método también presenta dificultades, sin embargo puede dar al menos un estimado del potencial de polarización libre de caída óhmica para el monitoreo y diseño de sistemas de PC. Un método alternativo que vence la mayoría de las dificultades del anterior consiste en utilizar una pieza enterrada cerca de la estructura protegida y del mismo material de la misma, la cual actúa como un defecto del recubrimiento cuando se le conecta a la estructura y la corriente de PC que llega a la pieza se puede interrumpir para medir el potencial sin efecto de la estructura protegida o de las estructuras cercanas.

El diseño de los sistemas de PC por corriente impresa o por ánodos de sacrificio tienen algunos pasos en común, los cuales se mencionan a continuación:

1. Cálculo del área a proteger.

2. Cálculo del potencial de polarización.
3. Cálculo de la demanda de corriente.
4. Cálculo del consumo de los ánodos.
5. Cálculo del número y la distribución de los ánodos.
6. Cálculo de la resistencia del ánodo.
7. Cálculo de la corriente de salida.

La mayoría de los procedimientos de diseño ignoran muchos de los factores fundamentales que se han discutido anteriormente, sin embargo, se han logrado diseñar sistemas de PC exitosos usando procedimientos desarrollados a partir de la experiencia.

Se puede concluir que el diseño y la ingeniería de los sistemas de PC son inexactos. La experiencia juega un papel muy importante y no se recomienda que personal sin experiencia diseñe sistemas complejos de PC.

Recientemente se han realizado esfuerzos para simular matemáticamente o modelar los sistemas de PC. El modelado puede incluir la distribución de la corriente y/o del potencial en geometrías complejas así como la polarización en las superficies del ánodo y del cátodo. Los primeros estimados analíticos han sido mejorados por las técnicas de análisis numérico.

El modelado se ha aplicado principalmente en sistemas de PC en agua de mar con gran uniformidad en la conductividad. Las estructuras enterradas no son fáciles de modelar debido a que el electrolito no es uniforme y tiene baja conductividad lo cual lo convierte en un problema más complejo. Sin

embargo, el modelado parece ser un buen candidato para el desarrollo posterior de los sistemas de PC por corriente impresa ya que los campos de corriente y potencial que se presentan en estructuras enterradas son grandes y éstas son inaccesibles.

Es posible que los avances en el modelado se vean limitados por la falta de datos experimentales para proveer a los modelos. Sin embargo, la meta final del modelado, el diseño por computadora de los sistemas de PC, esto es, especificar el número, tamaño y colocación de los ánodos para corriente impresa o de sacrificio, parece que puede lograrse en algún grado en un futuro próximo.

1.5 Criterios de PC

La Asociación Nacional de Ingenieros de Corrosión (NACE, por sus siglas en inglés de National Association of Corrosion Engineers) recomienda algunos criterios de PC, los cuales fueron revisados recientemente por Gummow[7], quien concluyó que todos los criterios son de alguna manera deficientes y por lo tanto se consideran en forma cualitativa en la práctica; sin embargo la PC es efectiva a pesar de las incertidumbres inherentes a los criterios NACE. De esta manera, el uso de cualquiera de estos criterios redundará en una PC adecuada si se aplica juiciosamente por personal con experiencia. A continuación se nombran algunos de los criterios que la NACE propone para determinar cuándo una estructura de acero o aleación de hierro se encuentra protegida[5];

*Un voltaje de -0.85 V relativo al electrodo de $Cu/CuSO_4$ saturado.

**Un cambio de voltaje negativo (Catódico) de al menos 300 mV causado por la aplicación de una corriente de protección catódica.

***Un cambio de voltaje negativo de 100 mV determinado al interrumpir la corriente y medir la caída de voltaje.

****Un voltaje negativo al menos del valor que presenta el inicio del comportamiento de Tafel en la curva $\phi - \log(i)$.

El criterio establecido de -0.85 V relativo al electrodo $Cu/CuSO_4$, o -0.8 V relativo al electrodo $Ag/AgCl$ para sistemas en agua marina, cambia con respecto a la temperatura 2 mV/ $^{\circ}C$ siendo más negativo entre mayor sea la temperatura [6].

Algunos ingenieros en corrosión utilizan el criterio en condiciones aeróbicas, de que el potencial de la estructura sea 300 mV más negativo que su potencial natural, mientras que para condiciones anaeróbicas el criterio en el mismo sentido es 400 mV.

1.5.1 Otros criterios de PC

Se ha establecido que cuando la estructura se polariza al potencial de media celda de la reacción anódica, la superficie tiene una velocidad de corrosión de cero ya que la velocidad de la reacción de depositación es la misma que la de la reacción de disolución [7]. Debido a que la determinación exacta del potencial de media celda de la reacción anódica no es una tarea fácil, se ha optado por reducir la velocidad de corrosión usando la constante de Tafel para la reacción anódica ya que se ha descubierto que el proceso anódico controla el grado de protección proporcionado por la PC. De esta manera la

constante de Tafel anódica brinda una guía o criterio razonable para reducir la velocidad de corrosión a un valor adecuadamente bajo. Este criterio está arraigado en teoría electroquímica aceptada y lleva a un mejor entendimiento de cómo y por qué la PC es efectiva. Sin embargo, la determinación exacta de la constante de Tafel anódica para la estructura protegida tiene grandes dificultades y el tiempo que lleve la estructura protegida provocará un cambio en los requerimientos de protección considerados apropiados inicialmente para el ambiente en el que se encuentra.

Otro buen criterio práctico de que la PC está funcionando se puede obtener utilizando trozos del mismo material de la estructura a proteger. Estos fragmentos se pesan cuidadosamente con anterioridad y se conectan eléctricamente a la estructura a proteger. Estos trozos se deben colocar donde estén expuestos a la misma corriente de PC que recibe la estructura y después de un tiempo de exposición conocido, se retiran y se pesan. Cualquier pérdida de peso indicará que la PC es incompleta. Los trozos deben considerarse donde los potenciales de protección sean menores o en lugares donde se sospeche que el grado de protección sea bajo[9].

Cuando se trabaja con estructuras grandes y sin recubrimiento, algunas veces se utiliza un cambio de potencial de 0.2 a 0.3 V cuando se aplica la corriente de protección, como indicación de un grado razonable de PC. Esto incluye la medición del potencial de la estructura con un electrodo de referencia primero sin paso de corriente y luego con paso de corriente. Esto no quiere decir que se ha alcanzado el valor mínimo de PC de -0.85 V para el acero con respecto al electrodo de cobre-sulfato de cobre, y como resultado

no se puede decir que se ha detenido la corrosión; sin embargo, se puede reducir en gran medida la velocidad de corrosión.

Por último se menciona un criterio que ha demostrado su correcto funcionamiento sólo en electrolitos de alta conductividad eléctrica y gran homogeneidad, el cual fue dado por Ewing y Pearson y consiste en considerar como corriente de protección catódica a aquella que se encuentra en el inicio del comportamiento Tafeliano de la curva de polarización catódica[6]. En resumen, la PC es un método electroquímico para controlar la corrosión, en el cual la reacción de oxidación en una celda galvánica se lleva a cabo en el ánodo, disminuyendo la corrosión en el cátodo de la misma celda. La efectividad de la PC permite utilizar aceros al carbón - los cuales tienen una muy baja resistencia a la corrosión - en ambientes corrosivos, como agua de mar, suelos de elevada acidez, concretos de alta salinidad, etc.

Las modernas tuberías industriales se recubren con películas orgánicas o inorgánicas que tienen como función aislarlas del medio, sin embargo, esta protección se complementa con un sistema de PC para proteger las regiones donde el recubrimiento pudiese encontrarse dañado.

Existen dos tipos de PC: con ánodos de sacrificio -protección pasiva- y con corriente impresa -protección activa-.

Los sistemas que utilizan ánodos de sacrificio son simples, sólo requieren un material anódico -con respecto al acero- para proteger al acero en el ambiente de interés, la Figura 1.1 muestra un simple sistema de PC de ánodo de sacrificio para proteger una tubería enterrada.

La Figura 1.2 representa un sistema de corriente impresa. Los ánodos enterrados y la tubería se conectan a un rectificador eléctrico que suministra

corriente directa a los ánodos del sistema. A diferencia de los ánodos de sacrificio no necesitan ser anódicos con respecto al acero. La mayoría de los ánodos en corriente impresa están hechos de material no consumible que son catódicos con respecto al acero, así que si se conectaran directamente a la tubería, terminarían por acelerar la corrosión en el sistema a proteger. La fuente de corriente directa invierte la polaridad y permite a los materiales actuar como ánodos. Como los ánodos no se consumen, ocurren otras reacciones de oxidación sobre su superficie, como la formación de oxígeno.

Los sistemas de corriente impresa son más complejos que los sistemas de ánodo de sacrificio, debido a que el costo de una fuente de corriente directa es mucho mayor que la simple conexión entre un ánodo y un cátodo.

Las diferencias de voltaje entre un ánodo y un cátodo se limitan a aproximadamente 1V para sistemas de ánodos de sacrificio, mientras que los sistemas de corriente impresa pueden utilizar grandes diferencias de potencial. Estas grandes diferencias de potencial utilizadas en corriente impresa, permite un mayor espaciado entre los ánodos, lo que se refleja en un patrón de distribución de corrientes más eficiente en la estructura catódica a proteger. Por estas razones es común utilizar corriente impresa en ambientes de baja conductividad.

1.6 Modelos matemáticos en protección catódica

El uso de modelos matemáticos para predecir la PC es ahora factible incluso para estructuras muy complejas. Con la creciente potencia de las computadoras y con la creciente sofisticación y eficiencia de los algoritmos de cómputo empleados, cada vez más el ingeniero en corrosión puede hacer uso de estas herramientas para el diseño de la PC empleando una computadora personal. A partir de una perspectiva científica, la posibilidad de predecir las distribuciones de corriente y potencial en terrenos físicos permite aumentar el énfasis en el desarrollo de un mejor entendimiento de los fenómenos físicos y electroquímicos asociados con estos sistemas complejos de reacciones.

Una meta importante en el desarrollo de programas para computadoras que permitan el análisis de sistemas de PC ha sido la optimización de los diseños de PC. Los objetivos principales han sido incrementar la exactitud de los cálculos y por lo tanto la reducción de los márgenes de seguridad y con esto permitir la disminución en los costos. Además, los sistemas de computadoras más sofisticados intentan mejorar la eficiencia al reducir el tiempo y el esfuerzo requerido en los preparativos para introducir los datos de entrada y para el análisis de los datos de salida.

1.6.1 Diferentes modelos y sus características.

Los programas que se utilizan para modelar los sistemas de protección catódica se basan en el Método de Diferencias Finitas (MDF), en el MEF y en el MEFr, adaptados para el cálculo de las distribuciones de corriente y potencial

en estructuras protegidas catódicamente. Estos procedimientos numéricos de discretización se combinan con una base de datos y con procedimientos para trabajar con las condiciones de frontera electroquímicas.

En términos generales los tres métodos consideran la discretización del electrolito y/o la superficie de la estructura en pequeños elementos, en los cuales la ecuación de Laplace y las ecuaciones de la superficie metálica se reducen a través de diferentes técnicas a simples ecuaciones lineales y éstas pueden resolverse con técnicas bien conocidas de inversión de matrices.

En resumen, el MDF y el MEF requieren la discretización de todo el electrolito y la superficie de la estructura en un gran número de elementos, lo que se refleja directamente en un gran tiempo de respuesta del programa creado. Además el MDF presenta poca flexibilidad con respecto a la forma de los elementos.

El MEFr requiere únicamente de la discretización de las superficies del ánodo y del cátodo, de esta manera el tamaño del problema numérico se puede reducir significativamente, lo cual permite obtener una mayor resolución o una reducción en el tiempo de cómputo al compararlo con los métodos anteriores, particularmente para geometrías complejas. Por consiguiente el MEFr se ha convertido desde los años ochenta en la técnica más utilizada, al menos en los programas desarrollados para tratar problemas de geometrías complejas, sin embargo, a través de este método no se determina de manera directa la distribución de voltaje en el electrolito, sino que se obtiene a través de un cálculo adicional[10]⁶.

⁶En este trabajo de tesis, el programa desarrollado utiliza el MEF y no el MEFr, ya que el MEFr a pesar de ser muy versátil con lo que respecta a la frontera, es menos eficiente

1.6.2 Historia de los modelos matemáticos en la PC.

En la realización de este trabajo sólo se han consultado artículos relacionados al tema elaborados después de 1980, sin embargo, la introducción del artículo de Kasper R.G. y April M.G.[11] proporciona una adecuada idea de lo que sucedía, antes de esta fecha, en las investigaciones del tema :

“La idea de predecir matemáticamente el comportamiento de la corrosión electroquímica para una determinada situación física, tuvo su origen hace más de cuatro ⁷ décadas. En un inicio, las herramientas matemáticas se limitaron a predecir distribuciones de corriente de electrodo con geometrías simplificadas.

Para los años 50 la ecuación de Laplace gobernó en la mayoría de los estudios con la consideración adicional que el medio electrolítico y los materiales utilizados como electrodos poseían propiedades eléctricas constantes.

El concepto de modelación continua lineal, es decir; espacios electromagnéticos utilizando el MEF, se propuso a finales de los años 60. La idea de expresar las relaciones electroquímicas en electrodos para un medio continuo en términos de la ecuación de Laplace tuvo su origen en diferentes publicaciones de esta década.

Resolver ecuaciones electroquímicas a través del análisis de transferencia de y versátil en el dominio (a diferencia del MEF). Por otro lado, el MEFr tiene grandes ventajas sólo cuando se tratan geometrías complejas [1], y este no es el caso del presente trabajo, ya que como se verá más adelante, el programa desarrollado se utilizará para calcular la distribución del potencial en un dominio de geometría simple.

⁷En la actualidad 5 décadas.

calor independiente del tiempo, se sugirió a mediados de la década de los setenta para estructuras de gran escala sometidas a efectos macroscópicos de campo eléctrico sin la integración directa de efectos de polarización local o de superficies. El primer estudio vasto que incluyó efectos de polarización reales utilizando métodos de elemento finito para espacios bidimensionales electrodo / electrolito se terminó en 1977 y se publicó en 1981".

La motivación y los antecedentes para desarrollar métodos más sofisticados para el análisis de la PC se relaciona con el incremento de la actividad en la exploración y la producción de petróleo y gas en el Mar del Norte[12]. Desde entonces a la fecha, las técnicas de mayor aplicación en la PC y otras áreas son la del elemento finito y la del elemento frontera, simplificando siempre las condiciones reales del electrolito, esto es, considerando en la mayoría de los casos un medio homogéneo.

A continuación se mencionan a los principales investigadores (actuales) y sus correspondientes contribuciones en el área de modelado matemático de procesos que involucran PC:

El trabajo de Munn R. y Devereux O. del centro naval de sistemas sumergidos en agua de USA y de la Universidad de Connecticut USA respectivamente, es de considerable valor en el uso del MEF para modelación numérica de sistemas de corrosión galvánica, ellos han utilizado un programa comercial de conducción de calor para el análisis electroquímico, debido a la analogía que existe entre la conducción térmica y la conducción eléctrica. Este programa se modificó para utilizar condiciones de frontera que representaran una cinética de electrodo no lineal [3].

En el prefacio de las memorias de *CORROSION* 99 [13], se puede leer un

breve resumen de los orígenes e historia de uno de los grupos más importantes en el desarrollo de programas computacionales de PC: "El grupo de Mecánica Computacional BEASY fue el primero en aplicar la tecnología de Elemento Frontera para aplicaciones de corrosión y el primero en desarrollar herramientas comerciales capaces de modelar estructuras a gran escala. El valor de la técnica fue demostrado por su aplicación a la plataforma Conoco TCP a principios de los ochenta. Ellos desarrollaron el software BEASY CP y SEACORR/CP basados en estos primeros avances. Durante el desarrollo de SEACORR/CP, la representación transitoria de la cinética fue desarrollada con CorrOcean de Noruega y el soporte de Conoco.

El modelado por computadora del funcionamiento de un sistema de protección catódica para estructuras costeras, utilizadas para la producción de gas y de petróleo, ha sido una actividad importante en CorrOcean desde principios de los ochenta."

Una de las mayores contribuciones de este grupo ha sido la simulación de la PC para estructuras costeras con condiciones de frontera reales (dependientes del tiempo) que reflejan la influencia del crecimiento de depósitos calcáreos en las curvas de polarización [14].

El grupo del Profesor Shigeru Aoki, en el Departamento de Informática Mecánica y Ambiental, del Instituto de Tecnología en Tokio, comenzó a investigar la aplicación del método del elemento frontera (MEFr) a principios de los años ochenta. A finales de la década de los 90 han publicado un artículo en el que optimizan la posición de los electrodos y el requerimiento de energía en un sistema de PC por corriente impresa, para lo cual han utilizado

algoritmos de genética⁸ [15] y más adelante lo han logrado al minimizar una relación de costo que ellos han propuesto [16], también han resuelto el problema inverso en PC para un barco [16].

El Grupo de Cómputo en Electroquímica del Departamento de Ingeniería Electrotécnica de la Vrije Universiteit Brussel, dirigido por el Profesor Johan Deconinck, está involucrado con el modelado electroquímico desde 1977. Los modelos desarrollados por este grupo se han usado para simular procesos de corrosión localizada en tuberías de acero envueltas en concreto y protegidas con ánodos de sacrificio, este grupo ha utilizado el MEF y el MEFt en sus modelos y ha considerado caídas de voltaje óhmicas en las tuberías modeladas[17].

El grupo de Telles en la Universidad Federal de Río de Janeiro fue uno de los primeros en aplicar elementos de frontera para simular sistemas de PC. Su trabajo es la simulación numérica de problemas prácticos ingenieriles, como las fallas en el recubrimiento de tuberías enterradas y plataformas semisumergibles [18], [2]. Además han estudiado numéricamente el efecto de parámetros críticos en sistemas de PC para estructuras sumergidas en agua, como lo son; la salinidad del agua, la velocidad, la conductividad, la temperatura y el oxígeno disuelto en la misma [19].

De nuevo es muy útil el prefacio de las memorias de *CORROSION* 99 [13] para conocer la trayectoria del grupo de la Universidad de Florida encabezados por M.E. Orazem:

“Este grupo fue el primero en desarrollar cálculos de elemento finito y de ele-

⁸Dicho algoritmo lo han trabajado ultimamente con excelentes resultados Miltiadou y Wrobel [26]

mento frontera para PC de tuberías recubiertas con huecos en el recubrimiento, los cuales dejaban expuesto el acero. Estos cálculos, desarrollados para la tubería Trans-Alaska, fueron validados por experimentos de laboratorio en secciones completas a escala de la tubería Trans-Alaska. Actualmente están generalizando el desarrollo de modelos de elemento frontera para tomar en cuenta las interacciones entre tuberías múltiples, para considerar las corrientes parásitas entre redes independientes de PC, y para permitir el cálculo de secciones muy grandes de tuberías.”

Este grupo ha acoplado el método iterativo de Newton Rapson al MEFr para resolver su sistema numérico [20], [21]. Ellos no sólo han manejado el MEFr sino que también han modelado distribuciones de potencial y de corriente, en tuberías enterradas con fallas discretas en el recubrimiento, utilizando el MEF [22], [23].

Por su parte, el grupo del Laboratorio de Investigación naval de USA, dirigidos por Virginia De Giorgi, se ha caracterizado por modelar sistemas de PC aplicados a barcos y por haber sido el primero en corroborar los resultados de la simulación a través de la elaboración de modelos a escala de los barcos [24].

En la actualidad se trabaja en esta rama de la PC en gran parte de los países desarrollados y también en algunos países en vías de desarrollo [25] (además de Brasil, como ya se ha hecho notar), por lo que sería imposible mencionar a todos los trabajos actuales, sin embargo, en relación a los artículos de las revistas más importantes en el tema se han considerado sólo los trabajos más significativos para esta breve perspectiva del presente de los modelos matemáticos en PC.

1.7 Ecuación de Laplace

Asumiendo que la corriente eléctrica constituye un flujo de carga eléctrica, entonces, la corriente eléctrica que atraviesa un área dada se define como la carga efectiva total que atraviesa dicha área por unidad de tiempo. En el sistema de unidades *MKS* la unidad básica de corriente eléctrica es el *ampere* y se define como $1 A = 1 C/s$.

Una cantidad más importante o definitiva que la corriente i es la densidad de corriente \bar{J} . La magnitud de la densidad de corriente se define como la corriente por unidad de área. Su dirección se selecciona opuesta a la dirección del flujo de carga negativa. Así, por ejemplo, en un conductor uniforme de área de sección transversal S por la que pasa una corriente i la magnitud de la densidad de corriente \bar{J} es

$$\bar{J} = i/S, \quad \text{con} \quad i = \Delta Q/\Delta t$$

donde Q es la magnitud de una carga q [28].

Las cargas no pasan libremente a través de los conductores. Un conductor generalmente impide el paso de un flujo de corriente a través de él. Por esta razón, generalmente se requiere de una fuente de poder externa para conseguir un flujo de cargas. Esta fuente suministra el poder que se disipa en el conductor, lográndolo al establecer un campo eléctrico para oponerse a la fuerza de disipación promedio que se encuentra, por el paso de cargas, en el conductor.

Considerando materiales conductores para los cuales la relación entre la densidad de corriente macroscópica en cualquier punto dado de un medio conductor, se relaciona linealmente con el campo eléctrico macroscópico en ese punto, es decir, para las cuales

$$\bar{J} = \hat{k}\bar{\phi} \quad (1.1)$$

donde \hat{k} se refiere al tensor de conductividad de un medio conductor y $\bar{\phi}$ representa la intensidad del campo eléctrico, o bien para materiales isotrópicos, donde \hat{k} es diagonal

$$\bar{J} = k\bar{\phi}, \quad (1.2)$$

el flujo de corriente eléctrica en un medio conductor está gobernado por la ley de conservación de carga, la cual en forma de ecuación diferencial se escribe de la siguiente manera [27]

$$\nabla \cdot \bar{J} = - \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (1.3)$$

donde ρ representa la densidad de carga macroscópica, es decir $\rho = Q/Vol$. La relación constitutiva (ley de Ohm) entre la densidad de corriente y la intensidad de campo eléctrico en términos de la conductividad está descrita por la ecuación 1.2 donde por definición, la intensidad de campo eléctrico, en términos del potencial eléctrico ϕ , es

$$\bar{\phi} = - \nabla \phi \quad (1.4)$$

y sustituyendo las ecuaciones 1.2 y 1.4 en la ecuación 1.3 se obtiene

$$\nabla \cdot k \nabla \phi = - \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (1.5)$$

pero asumiendo un medio de conductividad constante y considerando que la densidad de carga superficial no cambia con respecto al tiempo, entonces se obtiene la ecuación de Laplace

$$\nabla^2 \phi = 0 \quad (1.6)$$

1.8 Elemento finito

Las soluciones aproximadas que se basan en formulaciones variacionales de problemas han sido utilizadas con mayor frecuencia que las aproximaciones que se basan en formulaciones clásicas (como el MDF) desde principios de la década de los años setenta [29], particularmente desde el establecimiento del método del elemento finito, el cual es probablemente el mejor caso particular del método de Galerkin.

La idea básica detrás del método de Galerkin es extremadamente simple. Si se considera el problema variacional de valores a la frontera VBVP (por sus siglas en inglés) de encontrar $u \in V$ que satisfaga

$$a(u, v) = \langle l, v \rangle \quad \forall v \in V$$

donde V es un subespacio de un espacio de Hilbert H . La dificultad de tratar de resolver dicho problema radica en que V es un espacio realmente grande (de dimensión infinita), por lo que resulta que no es posible un método práctico para construir la solución. Pero suponiendo, que en lugar de plantear el problema en V , se escogen algunas funciones linealmente independientes $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N$ en V y definimos a V^h como el subespacio de V de dimensión

finita generado por las funciones ϕ_i . Es decir,

$$V^h \subset V, \text{span}(\phi_i)_{i=1}^N = V^h$$

El problema se puede plantear en V^h en lugar de en V , con lo que ahora se deben encontrar funciones $u_h \in V^h$ que satisfagan

$$a(u_h, v_h) = \langle l, v_h \rangle \quad \forall v_h \in V^h$$

Esto es en esencia el método de Galerkin. Con el fin de resolver para u_h simplemente se observa que tanto u_h como v_h deben ser combinaciones lineales de las funciones base de V^h .

En situaciones prácticas, la determinación de funciones base requeridas en el método de Galerkin puede ser extremadamente difícil, especialmente cuando el dominio no tiene una geometría simple. El método del elemento finito (MEF) salva esta dificultad al proveer un método sistemático para generar funciones base en dominios de forma casi arbitraria. Lo que lo convierte en un método atractivo es que dichas funciones base son polinomios por pedazos que adquieren valores diferentes a cero sólo en pequeñas regiones del dominio Ω , lo que significa que los cálculos computacionales pueden realizarse de manera modular, cosa que es bien vista por un programador⁹.

El concepto del MEF involucra la discretización del medio en un número de subdominios o elementos y formula la solución del problema de una manera seccional sobre cada elemento utilizando una o varias aproximaciones para describirlo. Entonces las soluciones elementales se suman sobre el dominio

⁹En el capítulo dos (Problemas matemáticos) se explicará como construir los elementos base finitos para un problema de segundo orden con dominios en \mathbb{R} y \mathbb{R}^2 respectivamente.

entero, resultando un sistema de ecuaciones simultáneas que se pueden resolver para el campo por métodos numéricos conocidos.

El método del elemento finito involucra: (1) la representación matemática de un medio continuo por ensamble de elementos conectados; (2) la asignación de propiedades, condiciones de frontera y el ensamble de relaciones constitutivas y continuas; y (3) la solución de un conjunto de ecuaciones algebraicas que representan las ecuaciones diferenciales gobernantes.

Capítulo 2

Problemas matemáticos

2.1 Problema Dirichlet homogéneo

El problema¹ $\Delta u = -f$ en Ω y $u(\partial\Omega) = 0$, donde $\partial\Omega$ es la frontera del dominio Ω , tiene solución y ésta es única ya que el operador $a(u, v)$ que resulta de la correspondiente formulación débil del problema es bilineal, continuo, simétrico y V -elíptico² (A.1) y (l, u) es continuo. Las tres primeras propiedades pueden probarse fácilmente, a continuación la prueba de la V -elipticidad de $a(u, v)$ y la continuidad de (l, u) .

Proposición 1. *El operador $a(v, v) = \sum_{i=1}^N \partial_i u \partial_i v dx$ resultante de la formulación variacional del problema anterior, es V -elíptico.*

¹A partir de aquí y hasta que se especifique lo contrario, se entenderá por problema homogéneo un problema Dirichlet homogéneo, lo que se significa que el valor del campo en la frontera quedará determinado como cero.

²Aquí V es el espacio de funciones admisibles que consiste de todas aquellas funciones en $H^1(\Omega)$ que satisfacen las condiciones de frontera esenciales (más adelante se especifica quién es $H^1(\Omega)$ y cuáles son las condiciones esenciales).

Demostración.

$$a(v, v) = \int_{\Omega} \|\nabla v\|^2 dx = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \|\nabla v\|^2 dx + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \|\nabla v\|^2 dx \geq \int_{\Omega} \frac{1}{2} \|\nabla v\|^2 dx + \int_{\Omega} \frac{1}{2c} v^2 dx \geq \min\left\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2c}\right\} \left[\int_{\Omega} \|\nabla v\|^2 dx + \int_{\Omega} v^2 dx \right] \quad \square$$

Proposición 2. *El operador (l, v) resultante de la formulación variacional del problema anterior, es continuo.*

Demostración.

si $(l, v) = \int_{\Omega} f v dx$ entonces⁴

$$|(l, v)| = \left| \int_{\Omega} f v dx \right| \leq \|f\|_{L^2} \|v\|_{L^2} \leq \|f\|_{L^2} \|v\|_{H^1}$$

□

Una vez que se sabe que el problema anterior tiene solución y ésta es única, se procede a obtener dicha solución en una y dos dimensiones para el caso de una línea recta y de un rectángulo respectivamente;

2.1.1 Problema homogéneo en una dimensión

Si el problema de valores a la frontera es el siguiente:

$$-kU''(x) = f(x) \quad \text{en } \Omega^5 = (0, 1) \quad p1$$

³Utilizando la desigualdad de Poincaré.

⁴Donde la primera desigualdad se debe a la desigualdad del triángulo y la segunda a como se definen las normas en L^2 y en H^1 .

⁵Es claro que que el dominio pudiera ser arbitrario, digamos (a, b) , sin embargo, más adelante se resolverá numéricamente dicho problema y se comparará con la solución analítica, lo que obliga a especificar tanto a a como a b . En realidad los valores 0 y 1 se han seleccionado arbitrariamente.

$$C.F. \{U(0) = 0; U(1) = 0\}$$

donde Ω es el dominio de la función f

$$f \in L^2([0, 1]) \text{ y}$$

$$L^2([0, 1]) = \left\{ f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R} \mid \int_0^1 |f(x)|^2 dx < \infty \right\}^6$$

Con las condiciones de frontera esenciales⁷ se define el espacio de variaciones

$$\mathcal{V} = \{v \in H^1[0, 1] : v(0) = v(1) = 0\}$$

con

$$H^m(\Omega) = \{v : \partial_\alpha v \in L^2(\Omega) \forall \alpha \text{ tal que } |\alpha| \leq m\}$$

y se fija un $v \in \mathcal{V}$, el cual se multiplica por cada miembro de la ecuación p1

y el resultado se integra por partes

$$-\int_0^1 U''(x)v(x)dx = \int_0^1 \frac{f(x)v(x)}{k} dx$$

para obtener

$$-v(x)U'(x)\Big|_0^1 + \int_0^1 U'(x)v'(x)dx = \int_0^1 \frac{f(x)v(x)}{k} dx$$

es decir;

$$-v(1)U'(1) + v(0)U'(0) + \int_0^1 U'(x)v'(x)dx = \int_0^1 \frac{f(x)v(x)}{k} dx$$

lo que al considerar las condiciones de frontera y el espacio de variaciones se reduce a

$$\int_0^1 U'(x)v'(x)dx = \int_0^1 \frac{f(x)v(x)}{k} dx$$

⁶No olvidar que esta integral se utiliza en el sentido de Lebesgue.

⁷Las condiciones de frontera esenciales se definen como las condiciones de orden menor a m , donde $2m$ es el orden del operador en el problema de valores a la frontera en cuestión.

De esta manera se ha llegado al problema de valores a la frontera generalizado (PVFG) de encontrar $U \in H^1[0, 1]$:

$$\int_0^1 U'(x)v'(x)dx = \int_0^1 \frac{f(x)v(x)}{k} dx \quad \forall v \in \mathcal{V}$$

utilizando la siguiente notación

$$a(u, v) := \int_0^1 U'(x)v'(x)dx$$

$$(f, v) := \int_0^1 f(x)v(x)dx$$

el problema se reduce a encontrar $U \in H^1[0, 1]$ tal que

$$a(U, v) = \frac{1}{k}(f, v) \quad \forall v \in \mathcal{V}$$

donde

$$\mathcal{V} = \{v \in H^1 : v(0) = v(1) = 0\}$$

A continuación se procede a plantear el problema en un espacio de dimensión finita.

Se fija una partición del intervalo $[0, 1]$, por ejemplo:

$$0 = x_0 < x_1 < \dots < x_{N-1} < x_N = 1$$

y se considera el subespacio de dimensión N C_N de \mathcal{V} : C_N se forma por funciones

$\varphi : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ tales que,

- φ es continua, es decir, $\varphi \in C^0[0, 1]$
- $\varphi|_{[x_{i-1}, x_i]}$ es un polinomio⁸ para $i = 1, \dots, N$

⁸El menor grado de este polinomio será $n/2$, donde n es el grado del operador[33]. En el caso del operador laplaciano $n = 2$.

- $\varphi(0) = \varphi(1) = 0$

después, se define a las funciones nodales base⁹ de C_N :

$$\phi_i(x_j) = \delta_{i,j} : i, j = 0, \dots, 1$$

$$\delta_{i,j} = \begin{cases} 0, & \text{si } i = j \\ 1, & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

Con lo que el problema de valores a la frontera generalizado (PVFG) o el problema variacional de valores a la frontera VBVP por sus siglas en inglés queda planteado en C_N y ahora se trata de encontrar $U_N \in C_N$:

$$a(U_N, v) = \frac{1}{k}(f, v) \quad \forall v \in C_N$$

Solución numérica del problema discreto.

La solución U_N se expresa como una combinación lineal de los elementos de la base de C_N , es decir:

$$U_N = \sum_{i=1}^N a_i \phi_i$$

donde los coeficientes a_i son las incógnitas a determinar.

Así, el problema se simplifica a,

$$\sum_{i=1}^N a_i \int_1^0 \phi_i'(x) v'(x) dx = \int_0^1 \frac{f(x)v(x)}{k} dx$$

⁹Es un simple ejercicio probar que dichas funciones nodales son una base del subespacio C_N -sólo se debe garantizar que son linealmente independientes y que generan al subespacio mencionado-.

y en particular, si se sustituye a v por elementos de la base, se tiene:

$$\sum_{i=1}^N a_i \int_1^0 \phi'_i(x) \phi'_j(x) dx = \int_0^1 \frac{f(x) \phi_j(x)}{k} dx; j = 1, \dots, N$$

Lo que se representa de forma matricial de la siguiente manera:

$$\begin{bmatrix} \int_0^1 \phi'_1 \phi'_1 dx & \int_0^1 \phi'_2 \phi'_1 dx & \dots & \int_0^1 \phi'_N \phi'_1 dx \\ \int_0^1 \phi'_2 \phi'_1 dx & \int_0^1 \phi'_2 \phi'_2 dx & \dots & \int_0^1 \phi'_N \phi'_2 dx \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \int_0^1 \phi'_1 \phi'_N dx & \int_0^1 \phi'_2 \phi'_N dx & \dots & \int_0^1 \phi'_N \phi'_N dx \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix} = 1/k \begin{bmatrix} \int_0^1 f(x) \phi_1 \\ \int_0^1 f(x) \phi_2 \\ \vdots \\ \int_0^1 f(x) \phi_N \end{bmatrix}$$

El problema se termina al utilizar un método numérico ¹⁰ para resolver este sistema de ecuaciones, pero se debe tener presente que la solución encontrada es la solución en el espacio de dimensión finita C_N y no la solución en el espacio original \mathcal{V} , sin embargo, no sólo se puede probar que la solución numérica U_N es la mejor aproximación en C_N de la solución U en \mathcal{V} , sino que además U_N converge a U conforme N crece, lo cual se demuestra a detalle en [29] y se omite en el presente trabajo. En otras palabras; lo que se encuentra al utilizar un método numérico para resolver el anterior sistema matricial es un vector en \mathbb{R}^N que no parece tener relación con la solución buscada en \mathcal{V} , sin embargo, la teoría matemática garantiza que al multiplicar cada componente del mismo por la correspondiente función base y después sumar los N sumandos, el resultado será una aproximación a $U \in \mathcal{V}$ que se acerca a ésta tanto como se desee. Esto mismo ocurrirá en todos los problemas numéricos que se resuelvan en este trabajo.

¹⁰En este trabajo se utilizó el algoritmo iterativo de Gauss-Seidal (B.1).

ejemplo numérico 1

Realizando un simple algoritmo para llenar las matrices anteriores (obtenidas a partir de $p1$), con datos numéricos, definiendo con anterioridad el número de elementos en el dominio, el dominio mismo y la función f del lado derecho, se utiliza un procedimiento numérico para encontrar la solución (en este caso la matriz \underline{a}); cada elemento de ésta se multiplica por la correspondiente función nodal base ϕ_i , y al sumar cada uno de estos productos se puede ver la solución de manera gráfica. En la Figura 2.1 se presentan algunos resultados donde se compara la solución obtenida por MEF contra la solución analítica del problema 1 considerando un número diferente de elementos en el dominio, $f = 1$ y $k = 1$ por simplicidad.

ejemplo numérico 2

Nótese que si el problema $p1$ se modifica en el operador sin alterar las condiciones de frontera, el proceso de resolución es sumamente parecido, considere el BVP unidimensional;

$$-U'' + U = f(x) \quad \text{con } x \in (0, 1) \quad p2$$

$$C.F. \{U(0) = 0; U(1) = 0\}$$

El correspondiente VBVP se encuentra siguiendo el procedimiento del problema $p1$ resultando de ello;

$$\int_0^1 U'(x)v'(x) + U(x)v(x)dx = \int_0^1 f(x)v(x)dx$$

es decir, encontrar $U \in H^1[0, 1]$:

$$\int_0^1 U'(x)v'(x) + U(x)v(x)dx = \int_0^1 f(x)v(x)dx \quad \forall v \in \mathcal{V}$$

donde \mathcal{V} es el mismo espacio de variaciones del problema $p1$, por lo que procediendo de manera similar al problema $p1$ se sigue que el sistema matricial a resolver en este problema es;

$$\begin{bmatrix} \int_0^1 \phi_1' \phi_1' + \phi_1 \phi_1 dx & \int_0^1 \phi_2' \phi_1' + \phi_2 \phi_1 dx & \cdots & \int_0^1 \phi_N' \phi_1' + \phi_N \phi_1 dx \\ \int_0^1 \phi_2' \phi_1' + \phi_2 \phi_1 dx & \int_0^1 \phi_2' \phi_2' + \phi_2 \phi_2 dx & \cdots & \int_0^1 \phi_N' \phi_2' + \phi_N \phi_2 dx \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \int_0^1 \phi_1' \phi_N' + \phi_1 \phi_N dx & \int_0^1 \phi_2' \phi_N' + \phi_2 \phi_N dx & \cdots & \int_0^1 \phi_N' \phi_N' + \phi_N \phi_N dx \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix} =$$

$$1/k \begin{bmatrix} \int_0^1 f(x) \phi_1 \\ \int_0^1 f(x) \phi_2 \\ \vdots \\ \int_0^1 f(x) \phi_N \end{bmatrix}$$

Los resultados de la aproximación por MEF y la solución analítica considerando $f(x) = \pi \sin x$ y $k = 1$ se muestran en la Figura 2.2

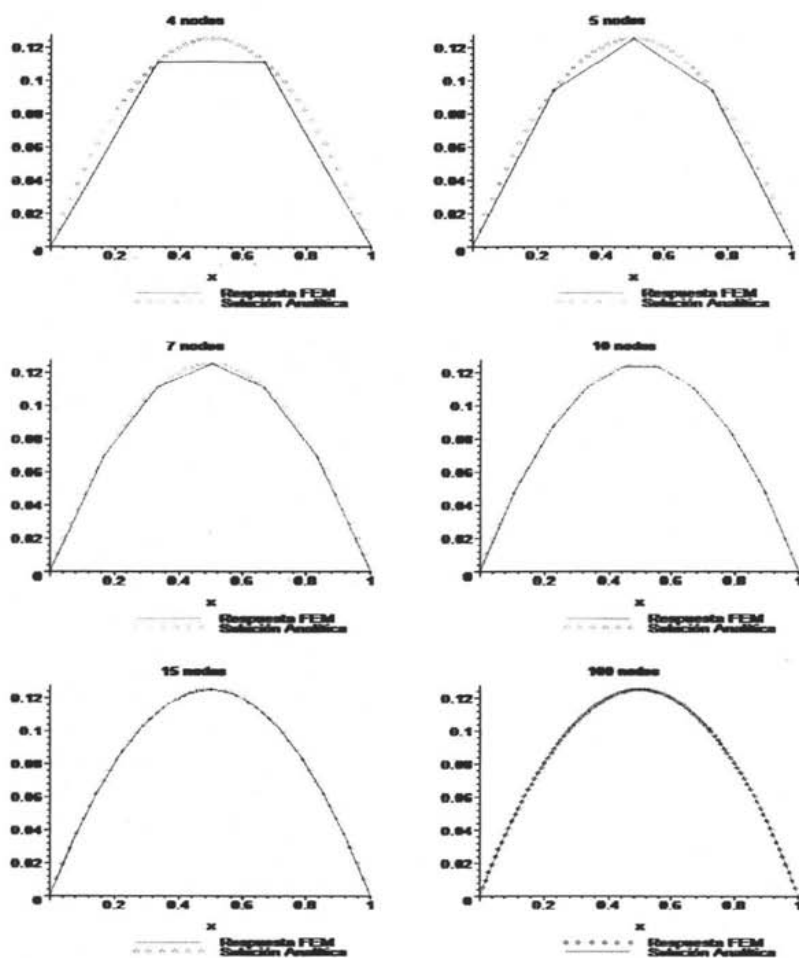
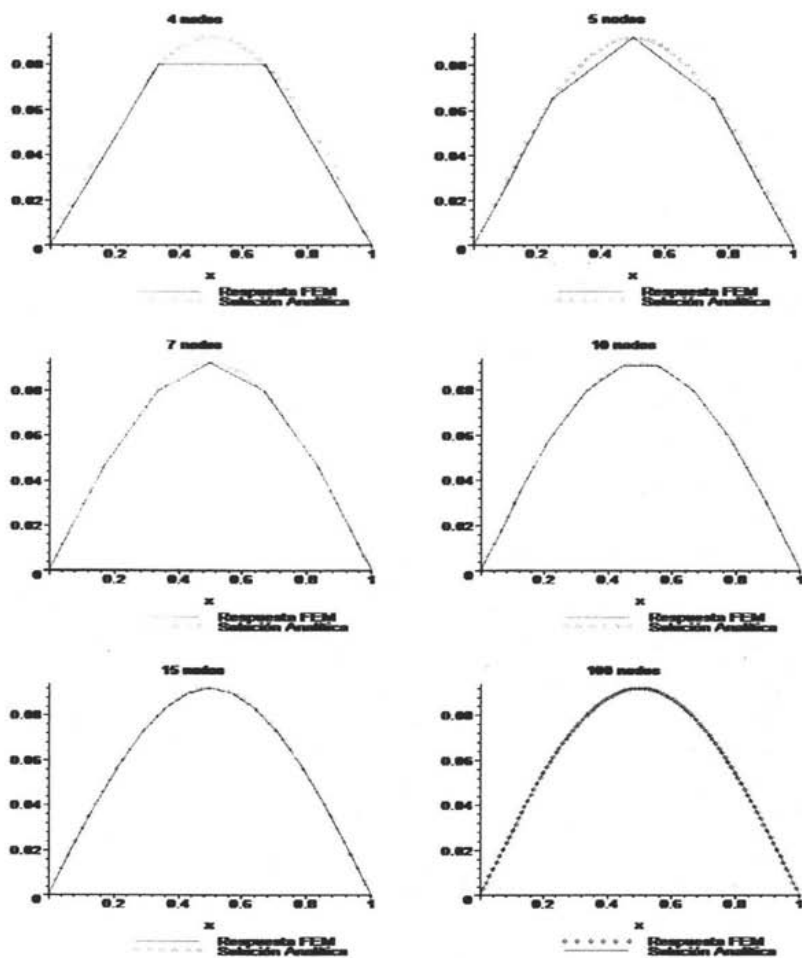


Figura 2.1: Solución analítica vs solución por MEF de p_1 .

Figura 2.2: Solución analítica vs solución por MEF de $p2$.

2.1.2 Problema homogéneo en dos dimensiones

Si el problema de valores a la frontera es el siguiente ¹¹:

$$-k\Delta U(x, y) = f(x, y) \quad \text{en } \Omega^{12} = (0, 1) \times (0, 1) \quad (p3)$$

$$C.F. \{U(0, y) = 0; U(1, y) = 0; U(x, 0) = 0; U(x, 1) = 0\}$$

donde Ω es el dominio de la función $f(x, y) \quad f \in L^2(0, 1) \times (0, 1)$ y

$$L^2\{(0, 1) \times (0, 1)\} = \{f : (0, 1) \times (0, 1) \rightarrow \mathbb{R} \mid \int_0^1 \int_0^1 |f(x, y)|^2 dx dy < \infty\}$$

Con las condiciones de frontera esenciales se define el espacio de variaciones

$$\mathcal{V} = \{v \in H^1[(0, 1) \times (0, 1)] : v(0, y) = v(1, y) = v(x, 0) = v(x, 1) = 0\}$$

de donde se fija un $v \in \mathcal{V}$, el cual se multiplica por cada miembro de la ecuación y el resultado se integra por partes ¹³

$$-\int_{\Omega} \Delta U(x) v(x) dx = \int_{\Omega} \frac{f(x)v(x)}{k} dx$$

para obtener

$$\int_{\Gamma} -v(x) \nabla U(x, y) \cdot \underline{n} + \int_{\Omega} \nabla U \cdot \nabla v dx = \int_{\Omega} \frac{f(x, y)v}{k} dx \quad \forall v \in \mathcal{V}$$

Analizando el espacio de variaciones \mathcal{V} lo anterior se reduce a

$$\int_{\Omega} \nabla U \cdot \nabla v dx = \int_{\Omega} \frac{f(x, y)v}{k} dx \quad \forall v \in \mathcal{V}$$

¹¹Recordar que el término homogéneo se utiliza en el sentido Dirichlet homogéneo, en referencia a las condiciones de frontera.

¹²Claro es que al igual que en la subsección anterior, el dominio Ω se ha seleccionado de manera totalmente arbitraria para los ejemplos numéricos, pero de manera general el dominio es $(a, b) \times (c, d)$.

¹³Recordando que el primer teorema de Green es $\int \int (u_x w_x + u_y w_y) dx dy = \int u(w_x + w_y) ds - \int \int u(w_{xx} \frac{dx}{dn} + w_{yy} \frac{dy}{dn}) dx dy$, para mayores detalles consultar [34].

De esta manera se ha llegado al problema de valores a la frontera generalizado (PVFG) de encontrar $U \in H^1[(0, 1) \times (0, 1)]$:

$$\int_{\Omega} \nabla U \cdot \nabla v dx = \int_{\Omega} \frac{f(x, y)v}{k} dx \quad \forall v \in \mathcal{V}$$

es decir, encontrar $U \in H^1[(0, 1) \times (0, 1)]$ tal que

$$a(U, v) = \frac{1}{k}(l, v) \quad \forall v \in \mathcal{V}$$

aclarando que $a(U, v) = \int_{\Omega} \nabla U \cdot \nabla v$ es bilineal, continua y V-elíptica¹⁴ y $(l, v) = \int_{\Omega} \frac{f(x, y)v}{k}$ continua.

A continuación se plantea el problema anterior en un espacio de dimensión finita.

Se fija una partición de Ω con N partes en x y M partes en y , por ejemplo:

$$0 = x_0 < x_1 < \dots < x_{N-1} < x_N = 1$$

$$0 = y_0 < y_1 < \dots < y_{M-1} < y_M = 1$$

y se considera el subespacio de dimensión N C_N de \mathcal{V} donde C_N se forma por funciones

$\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ tales que,

- φ es continua, es decir, $\varphi \in C^0\Omega$
- φ es un polinomio en \mathbb{R}^2 para $i = 1, \dots, N \times M$
- $\varphi(0, y) = 0, \varphi(1, y) = 0, \varphi(x, 0) = 0, \varphi(x, 1) = 0$

después, se define a las funciones nodales base de C_N *: Con lo anterior sólo resta resolver el problema de dimensión finita de encontrar $U_N \in C_N$:

$$a(U_N, v) = \frac{1}{k}(l, v) \quad \forall v \in C_N$$

¹⁴Este hecho ya se ha demostrado al iniciar la sección 2.

Funciones base de C_N en 2D *

Primero se definirá un elemento de referencia en $\xi \times \eta$ (Figura2.3) y las funciones de deformación f_1, f_2, \dots, f_6 ¹⁵ para establecer la función base $\phi_i \in \Omega$ (Figura2.4).

La función base que se muestra en la Figura 2.4 es una pirámide hexagonal cuyos valores en la dirección que sale del papel son cero en su frontera y uno en el centro, de esta manera sólo se tiene que “acomodar” el triángulo de referencia (Figura 2.3) y dependiendo de cuál de sus vértices coincida con el centro de la pirámide en cada una de sus seis partes, el triángulo deberá “ser levantado” en su correspondiente vértice una unidad de longitud (en la dirección saliente del papel) mientras que el lado opuesto al vértice en cuestión mantendrá un valor de cero. Lo anterior se logra con las siguientes funciones;

$$\begin{aligned}\Phi_1(\xi, \eta) &= 1 - \xi - \eta \\ \Phi_2(\xi, \eta) &= \xi \\ \Phi_3(\xi, \eta) &= \eta\end{aligned}\tag{t1}$$

ahora se procede a construir las 6 funciones de deformación que “manden” el elemento de referencia a cada una de las partes de la función base. Se

¹⁵En este caso se consideran funciones base hexagonales, pero se pueden considerar tetragonales o de otro tipo. El caso de tetragonos se especifica a detalle en [29].

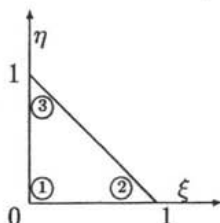
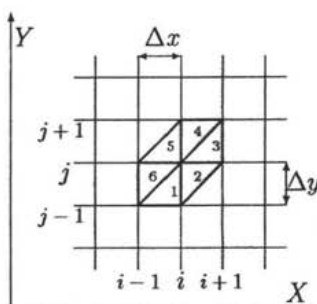


Figura 2.3: Elemento de referencia triangular.

Figura 2.4: función base en Ω .

propone un polinomio lineal para cada función y con (t1) son encontradas las constantes correspondientes.

A continuación se muestra la manera de encontrar la primera función $f_1(\eta, \xi)$: sea

$$f_1(\eta, \xi) = (A\xi + B\eta + C, D\xi + E\eta + F) \quad (f1s)$$

se observa que a cada punto del elemento de referencia (Fig.2.3) le corresponde una pareja ordenada en $\xi \times \eta$ y otra en el espacio de la función base, es decir, al punto 1 con coordenadas $(0,0)$ le corresponde las coordenadas $(i, j - 1)$ y así

$$(0, 0) \mapsto (i, j - 1); (1, 0) \mapsto (i, j); (0, 1) \mapsto (i - 1, j - 1) \quad (mp1)$$

con lo cual se sigue

$$f_1(0, 0) = (C, F) = (i\Delta x, (j-1)\Delta y)$$

$$f_1(0, 1) = (B + C, E + F) = ((i-1)\Delta x, (j-1)\Delta y)$$

$$f_1(1, 0) = (A + C, D + F) = (i\Delta x, j\Delta y)$$

y al resolver el sistema de ecuaciones se encuentra

$$A = 0; \quad B = -\Delta x; \quad C = i\Delta x; \quad D = \Delta y; \quad E = 0$$

por lo que la función de deformación queda finalmente como;

$$f_1(\xi, \eta) = (\Delta x(i - \eta), \Delta y(\xi + j - 1))$$

de manera similar se obtiene el resto de las funciones,

$$f_2(\xi, \eta) = (\Delta x(i + \eta), -\Delta y(\xi + j))$$

$$f_3(\xi, \eta) = (\Delta x(i + 1 - \eta), \Delta y(\xi + j)) \quad (fs)$$

$$f_4(\xi, \eta) = (\Delta x(i + \eta), \Delta y(-\xi + j + 1))$$

$$f_5(\xi, \eta) = (\Delta x(i - \eta), \Delta y(\xi + j))$$

$$f_6(\xi, \eta) = (\Delta x(i - 1 + \eta), \Delta y(-\xi + j))$$

La función base ϕ involucra 6 diferentes funciones, las cuales corresponden a cada una de sus partes (Fig.2.4), esto es;

$$\phi = \varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3 + \varphi_4 + \varphi_5 + \varphi_6$$

donde φ_1 queda definida en función del elemento de referencia y de f_1 de la siguiente manera, de f_1 (fs) se observa que $x = \Delta x(i - \eta) : y = \Delta y(\xi + j - 1)$, por lo que $\eta = i - \frac{x}{\Delta x}$ y $\xi = 1 - j + \frac{y}{\Delta y}$, si adicionalmente se considera que

el elemento 1 de la función base corresponde al vértice 1 del elemento de referencia se tiene que;

$$\varphi_1(x, y) = 1 - j + \frac{y}{\Delta y} = \phi_2(\xi, \eta) = \xi$$

y de manera similar se encuentran las cinco funciones restantes

$$\varphi_2(x, y) = 1 - \xi - \eta$$

$$\varphi_3(x, y) = \eta$$

$$\varphi_4(x, y) = \xi \tag{ft}$$

$$\varphi_5(x, y) = 1 - \xi - \eta$$

$$\varphi_6(x, y) = \eta$$

Una representación gráfica de cómo se ven las funciones base seleccionadas (hexagonales para este caso) en un dominio Ω (en particular $(0,1) \times (0,1)$) antes de ser multiplicadas por su correspondiente valor (a_i) y sumadas entre sí, se muestra en la Fig.2.5.

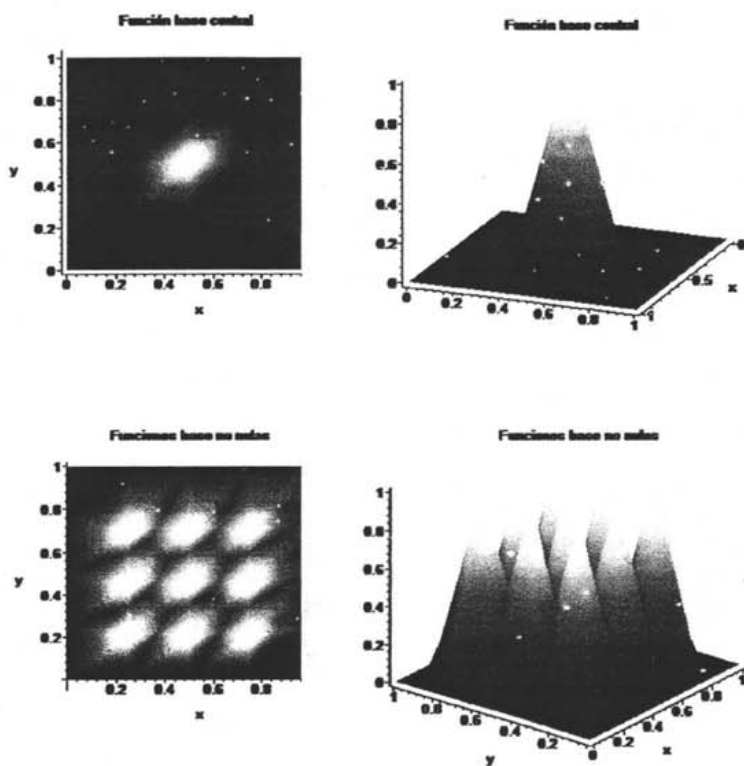


Figura 2.5: función base central en diferentes perspectivas y todas las funciones base no nulas en diferentes perspectivas para un dominio con 25 nodos.

Solución numérica del problema discreto.

La solución U_N se expresa como una combinación lineal de los elementos de la base de C_N , es decir:

$$U_N = \sum_{i=1}^{N \times M} a_i \phi_i$$

donde los coeficientes a_i son las incógnitas a determinar. Así, el problema se reduce a,

$$\sum_{i=1}^{N \times M} a_i \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial x}(x, y), \frac{\partial \phi_i}{\partial y}(x, y) \right) \cdot \nabla v(x, y) dA = \int_{\Omega} \frac{f(x, y)v(x, y)}{k} dA$$

en particular, si se sustituye a v por los elementos de la base, se tiene:

$$\sum_{i=1}^N a_i \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial x}(x, y), \frac{\partial \phi_i}{\partial y}(x, y) \right) \cdot \left(\frac{\partial \phi_j}{\partial x}(x, y), \frac{\partial \phi_j}{\partial y}(x, y) \right) dA = \int_{\Omega} \frac{f(x, y)\phi_j(x, y)}{k} dA; j = 1, \dots, M$$

Lo que se representa de forma matricial de la siguiente manera:

$$\begin{bmatrix} \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_1}{\partial x} \frac{\partial \phi_1}{\partial x} + \frac{\partial \phi_1}{\partial y} \frac{\partial \phi_1}{\partial y} dx & \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_2}{\partial x} \frac{\partial \phi_1}{\partial x} + \frac{\partial \phi_2}{\partial y} \frac{\partial \phi_1}{\partial y} dx & \dots & \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_N}{\partial x} \frac{\partial \phi_1}{\partial x} + \frac{\partial \phi_N}{\partial y} \frac{\partial \phi_1}{\partial y} dx \\ \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_1}{\partial x} \frac{\partial \phi_2}{\partial x} + \frac{\partial \phi_1}{\partial y} \frac{\partial \phi_2}{\partial y} dx & \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_2}{\partial x} \frac{\partial \phi_2}{\partial x} + \frac{\partial \phi_2}{\partial y} \frac{\partial \phi_2}{\partial y} dx & \dots & \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_N}{\partial x} \frac{\partial \phi_2}{\partial x} + \frac{\partial \phi_N}{\partial y} \frac{\partial \phi_2}{\partial y} dx \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_1}{\partial x} \frac{\partial \phi_N}{\partial x} + \frac{\partial \phi_1}{\partial y} \frac{\partial \phi_N}{\partial y} dx & \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_2}{\partial x} \frac{\partial \phi_N}{\partial x} + \frac{\partial \phi_2}{\partial y} \frac{\partial \phi_N}{\partial y} dx & \dots & \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_N}{\partial x} \frac{\partial \phi_N}{\partial x} + \frac{\partial \phi_N}{\partial y} \frac{\partial \phi_N}{\partial y} dx \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix} = 1/k \begin{bmatrix} \int_{\Omega} f(x, y)\phi_1 \\ \int_{\Omega} f(x, y)\phi_2 \\ \vdots \\ \int_{\Omega} f(x, y)\phi_N \end{bmatrix}$$

El problema se termina al utilizar un método numérico ¹⁶

¹⁶En este trabajo se utilizó el algoritmo de Gauss-Seidal para resolver este sistema de ecuaciones.

ejemplo numérico 3

En este ejemplo se resuelve el problema (p3).

Al construir un simple algoritmo para llenar las matrices anteriores (obtenidas a partir de p3), con datos numéricos, definiendo con anterioridad el número de elementos en el dominio, el dominio mismo y la función f del lado derecho, se utiliza un procedimiento numérico para encontrar la solución (en este caso la matriz \underline{a}); cada elemento de ésta se multiplica por la correspondiente función nodal base ϕ_i y al sumar cada uno de estos productos se puede ver la solución de manera gráfica. Se consideraron diferente número de elementos en el dominio, $f = 2(x(x - 1) + y(y - 1))$ y $k = 1$ por simplicidad. En la Figura 2.6 se presentan algunos resultados donde se compara la solución obtenida por MEF contra la solución analítica, $U(x, y) = -xy(x - 1)(y - 1)$, de (p3) indicando sobre el eje vertical el valor de U .

Nótese que en la Fig2.6 parece que las 2 gráficas superiores poseen respuestas numéricas diferentes a pesar de tener el mismo número de nodos en el dominio, esto se debe a la perspectiva (ver los ejes coordenados x y y) ya que como se observa en la gráfica inferior izquierda de la Fig.2.5, al tomar elementos triangulares en un dominio rectangular, las esquinas inferior derecha y superior izquierda son mal aproximadas¹⁷ debido a que no hay funciones base interiores en tales lugares, sin embargo este “detalle” se soluciona fácilmente al aumentar el número de nodos en el dominio como se aprecia en la excelente aproximación que se logra con 225 nodos.

¹⁷este problema “insignificante” para el caso, puede resolverse al utilizar elementos rectangulares, lo cual se especifica a detalle en [29].

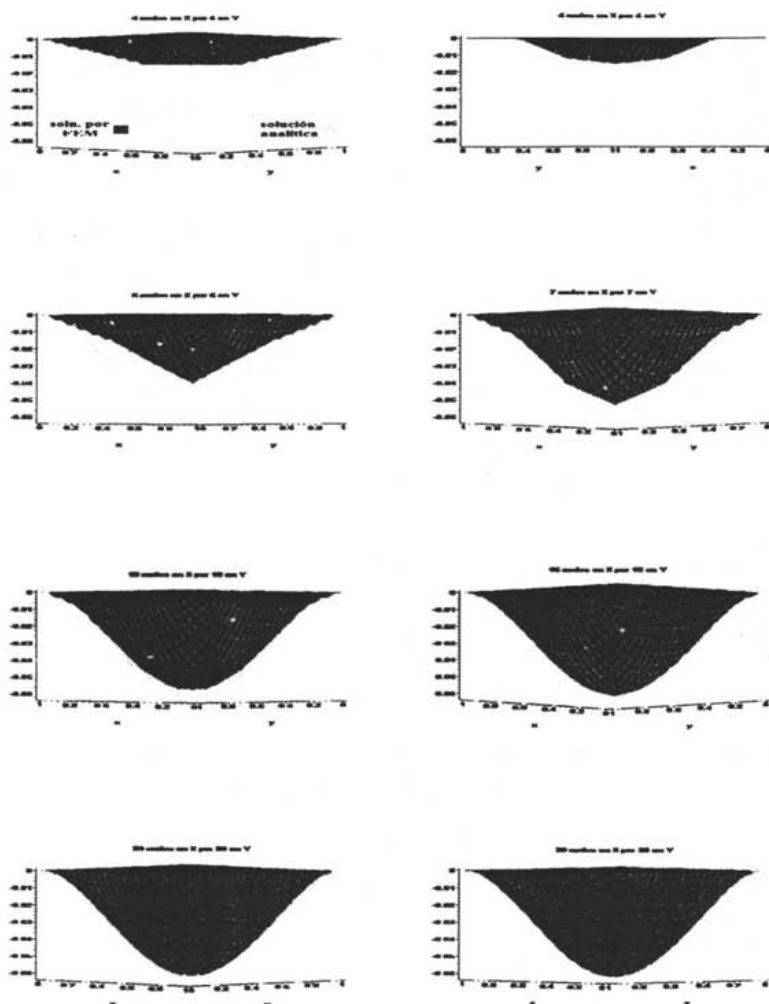


Figura 2.6: Solución analítica vs solución por MEF de p_3 .

2.2 Problema Mixto homogéneo

El problema

$\Delta u = f$ en Ω y $u(\Gamma_1) = 0; \nabla u(\Gamma_2) \cdot n = 0$ donde $\Gamma_2 \cup \Gamma_1 = \partial\Omega$ y $\partial\Omega$ es la frontera del dominio Ω ,¹⁸

tiene la misma formulación variacional que el problema Dirichlet homogéneo, por lo que la proposición 1 también aquí se cumple y se garantiza la existencia y unicidad de la solución al problema, lo único que lo distingue en relación al problema Dirichlet-homogéneo es que no todas las funciones base de la frontera se anulan, es decir en este caso las fronteras sujetas a condiciones Neumann cuentan con funciones base ϕ_i cuyas "alturas" a_i son incógnitas a determinar.

2.2.1 Problema Mixto en una dimensión

Para el problema

$$-kU''(x) = f(x) \quad \text{en } \Omega = (0, 1) \quad (p4)$$

$$C.F. \{U(0) = 0; U'(1) = 0\}$$

se procede de manera idéntica a como se procedió en el problema p1 y el sistema a resolver será el mismo, es decir,

¹⁸Este tipo de problema, Mixto, también es conocido como un problema Neumann-Dirichlet [36]. Este problema también es homogéneo debido al tipo de condiciones de frontera, en donde el flujo y el campo tienen un valor de cero.

$$\begin{bmatrix} \int_0^1 \phi_1' \phi_1' dx & \int_0^1 \phi_2' \phi_1' dx & \cdots & \int_0^1 \phi_N' \phi_1' dx \\ \int_0^1 \phi_2' \phi_1' dx & \int_0^1 \phi_2' \phi_2' dx & \cdots & \int_0^1 \phi_N' \phi_2' dx \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \int_0^1 \phi_1' \phi_N' dx & \int_0^1 \phi_2' \phi_N' dx & \cdots & \int_0^1 \phi_N' \phi_N' dx \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix} = 1/k \begin{bmatrix} \int_0^1 f(x) \phi_1 \\ \int_0^1 f(x) \phi_2 \\ \vdots \\ \int_0^1 f(x) \phi_N \end{bmatrix}$$

debido a que el espacio de variaciones y las condiciones de frontera llevan a tal a pesar de ser diferentes

$$\mathcal{V} = \{v \in H^1[0, 1] : v(0) = 0\}^{19},$$

sin embargo no se debe pasar por alto el “fino” detalle que aquí se presenta, esto es: a_N es una incógnita a determinar y no es cero como se supo de antemano en el problema p1.

ejemplo numérico 4

Al elaborar un algoritmo simple para llenar las matrices anteriores (obtenidas a partir de p4), con datos numéricos, definiendo con anterioridad el número de elementos en el dominio, el dominio mismo y la función f del lado derecho, se utiliza un procedimiento numérico para encontrar la solución (en este caso la matriz \underline{a}); cada elemento de ésta se multiplica por la correspondiente función nodal base ϕ_i y al sumar cada uno de estos productos se puede ver la solución de manera gráfica. En la Figura 2.7 se presentan algunos resultados donde se compara la solución obtenida por MEF contra la solución analítica de (p4) indicando sobre el eje vertical el valor de U . Se consideró diferente número de elementos en el dominio, $f = 1$ y $k = 1$ por simplicidad.

¹⁹Recordar que el espacio de variaciones se define en términos de las condiciones esenciales.

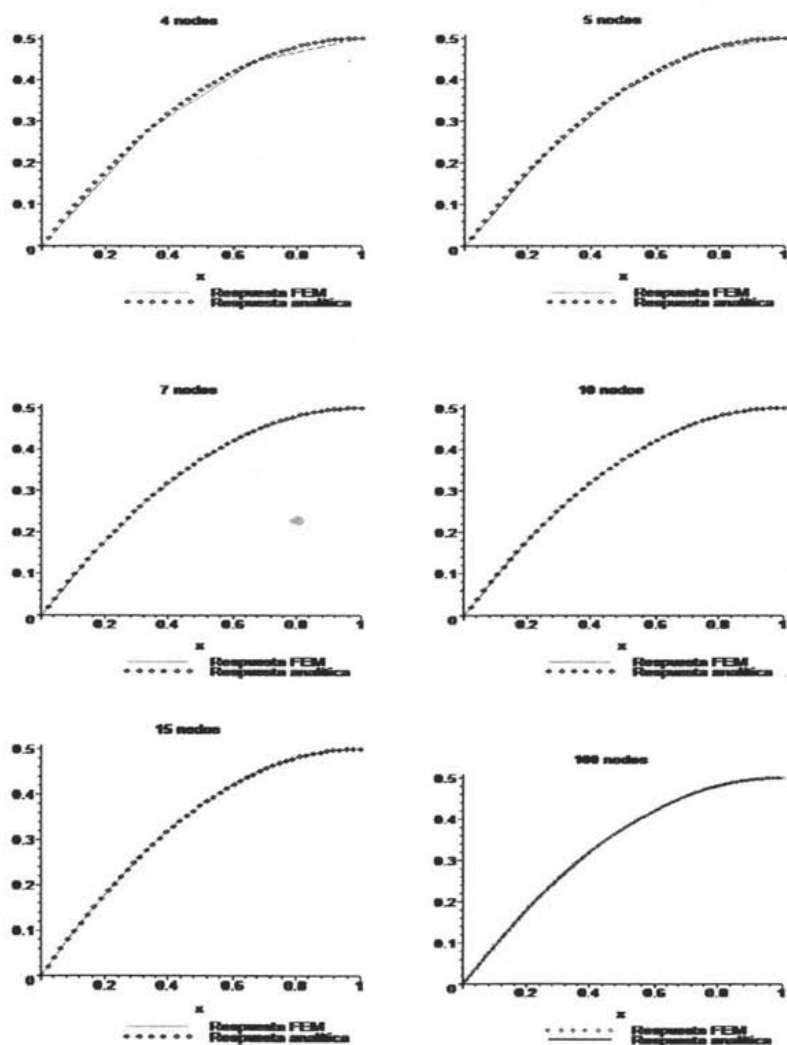


Figura 2.7: Solución analítica vs solución por MEF de p_4 .

2.2.2 Problema Mixto en 2D

Para el problema

$$-k\Delta U = f \quad \text{en } \Omega = (0, 1) \times (0, 1) \quad (p5)$$

$$C.F. \{U(0, y) = 0; U(x, 1) = 0; \nabla U(1, y) \cdot n = 0; \nabla U(x, 0) \cdot n = 0\}$$

se procede de manera idéntica a como se procedió en el problema p3 y el sistema a resolver será el mismo, es decir,

$$\begin{bmatrix} \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_1}{\partial x} \frac{\partial \phi_1}{\partial x} + \frac{\partial \phi_1}{\partial y} \frac{\partial \phi_1}{\partial y} dx & \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_2}{\partial x} \frac{\partial \phi_1}{\partial x} + \frac{\partial \phi_2}{\partial y} \frac{\partial \phi_1}{\partial y} dx & \cdots & \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_N}{\partial x} \frac{\partial \phi_1}{\partial x} + \frac{\partial \phi_N}{\partial y} \frac{\partial \phi_1}{\partial y} dx \\ \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_1}{\partial x} \frac{\partial \phi_2}{\partial x} + \frac{\partial \phi_1}{\partial y} \frac{\partial \phi_2}{\partial y} dx & \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_2}{\partial x} \frac{\partial \phi_2}{\partial x} + \frac{\partial \phi_2}{\partial y} \frac{\partial \phi_2}{\partial y} dx & \cdots & \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_N}{\partial x} \frac{\partial \phi_2}{\partial x} + \frac{\partial \phi_N}{\partial y} \frac{\partial \phi_2}{\partial y} dx \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_1}{\partial x} \frac{\partial \phi_N}{\partial x} + \frac{\partial \phi_1}{\partial y} \frac{\partial \phi_N}{\partial y} dx & \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_2}{\partial x} \frac{\partial \phi_N}{\partial x} + \frac{\partial \phi_2}{\partial y} \frac{\partial \phi_N}{\partial y} dx & \cdots & \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_N}{\partial x} \frac{\partial \phi_N}{\partial x} + \frac{\partial \phi_N}{\partial y} \frac{\partial \phi_N}{\partial y} dx \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix} \\ = 1/k \begin{bmatrix} \int_{\Omega} f(x, y) \phi_1 \\ \int_{\Omega} f(x, y) \phi_2 \\ \vdots \\ \int_{\Omega} f(x, y) \phi_N \end{bmatrix}$$

debido a que el espacio de variaciones y las condiciones de frontera llevan a tal a pesar de ser diferentes

$$\mathcal{V} = \{v \in H^1[0, 1] \times [0, 1] : v(0, y) = v(x, 1) = 0\},$$

sin embargo no se debe pasar por alto el “fino” detalle que aquí -al igual que en p4- se presenta, esto es: todas las a_i que se encuentren en la frontera $(x, 0) \cup (1, y)$ son una incógnita a determinar y no son cero como se supo de antemano en el problema p3.

ejemplo numérico 5

Al elaborar un algoritmo simple para llenar las matrices anteriores (obtenidas a partir de $p5$), con datos numéricos, definiendo con anterioridad el número de elementos en el dominio, el dominio mismo y la función f del lado derecho, se utiliza un procedimiento numérico para encontrar la solución (en este caso la matriz \underline{a}); cada elemento de ésta se multiplica por la correspondiente función nodal base ϕ_i y al sumar cada uno de estos productos se puede ver la solución de manera gráfica. En la Figura 2.8 se presentan algunos resultados donde se compara la solución obtenida por MEF contra la solución analítica de $(p5)$ indicando sobre el eje vertical el valor de U . Se consideró diferente número de elementos en el dominio , $f = 1$ y $k = 1$ por simplicidad.

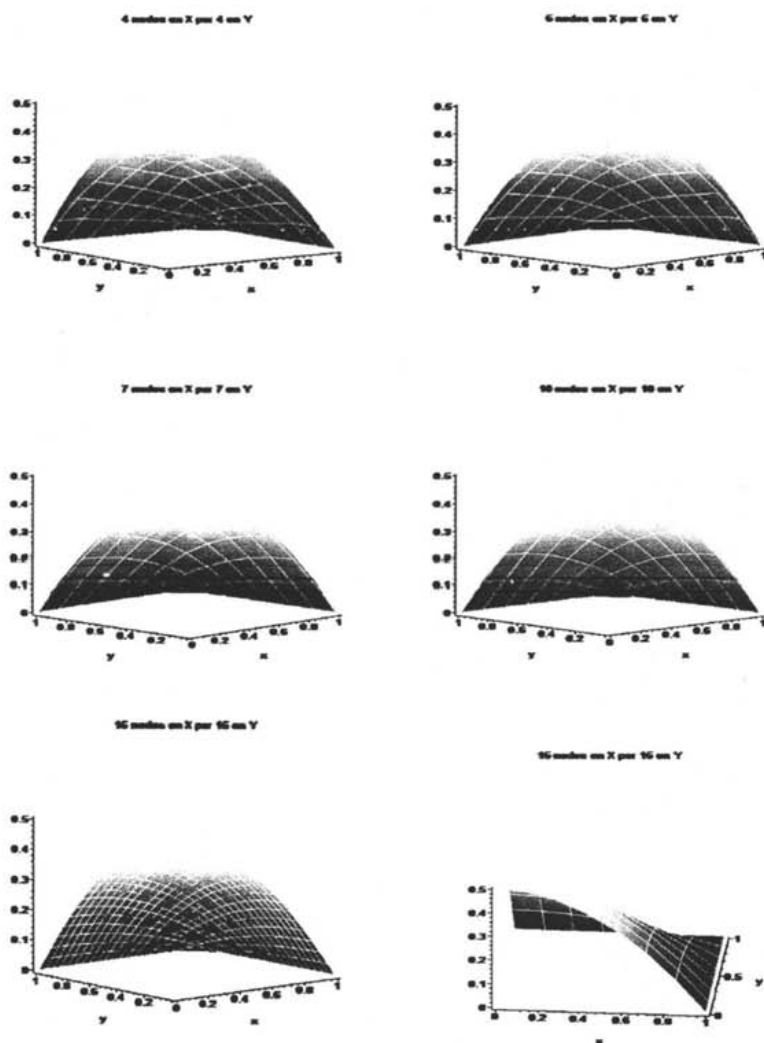


Figura 2.8: Solución analítica vs solución por MEF de p_5 .

2.3 Problema Dirichlet no homogéneo

Existen diferentes maneras de tratar este problema, una de ellas es homogenizar el problema, es decir, resolver un problema adjunto (homogéneo) al original y a la solución encontrada sumarle un término adicional que no es otro más que una función que satisfaga las condiciones de frontera. El ejemplo numérico 6 aclara la situación.

ejemplo numérico 6

si

$$-k\Delta U(x, y) = f(x, y) \quad \text{en } \Omega = (0, 1) \times (0, 1) \quad (p6)$$

$$C.F. \{U(0, y) = a; U(1, y) = a; U(x, 0) = a; U(x, 1) = a : a \text{ está fijo } \in \mathbb{R}\}$$

es el problema a resolver, entonces se procede a encontrar una función $h(x, y)$ que satisfaga las condiciones de frontera, en este caso $h(x, y) = xy(x-1)(y-1) + a$, y con esto se define a \bar{U} como $\bar{U}(x, y) = U(x, y) - (x^2 - x)(y^2 - y) - a$ por lo que el nuevo problema homogéneo es;

$$-k\Delta \bar{U}(x, y) = f(x, y) + 2yk(y-1) + 2xk(x-1) \quad \text{en } \Omega = (0, 1) \times (0, 1)$$

$$C.F. \{\bar{U}(0, y) = 0; \bar{U}(1, y) = 0; \bar{U}(x, 0) = 0; \bar{U}(x, 1) = 0\}$$

es decir p3, por lo que \bar{U} se puede encontrar sin dificultad y finalmente obtener $U(x, y) = \bar{U}(x, y) + h(x, y)$. En la Figura 2.9 se presentan algunos resultados donde se compara la solución obtenida por MEF contra la solución analítica de (p6) indicando sobre el eje vertical el valor de U . Se consideró diferente número de elementos en el dominio, $f = -2(x(x-1) + y(y-1))$, $k = 1$ por simplicidad y $a = 1, a = 2, a = 3$ en cada caso.

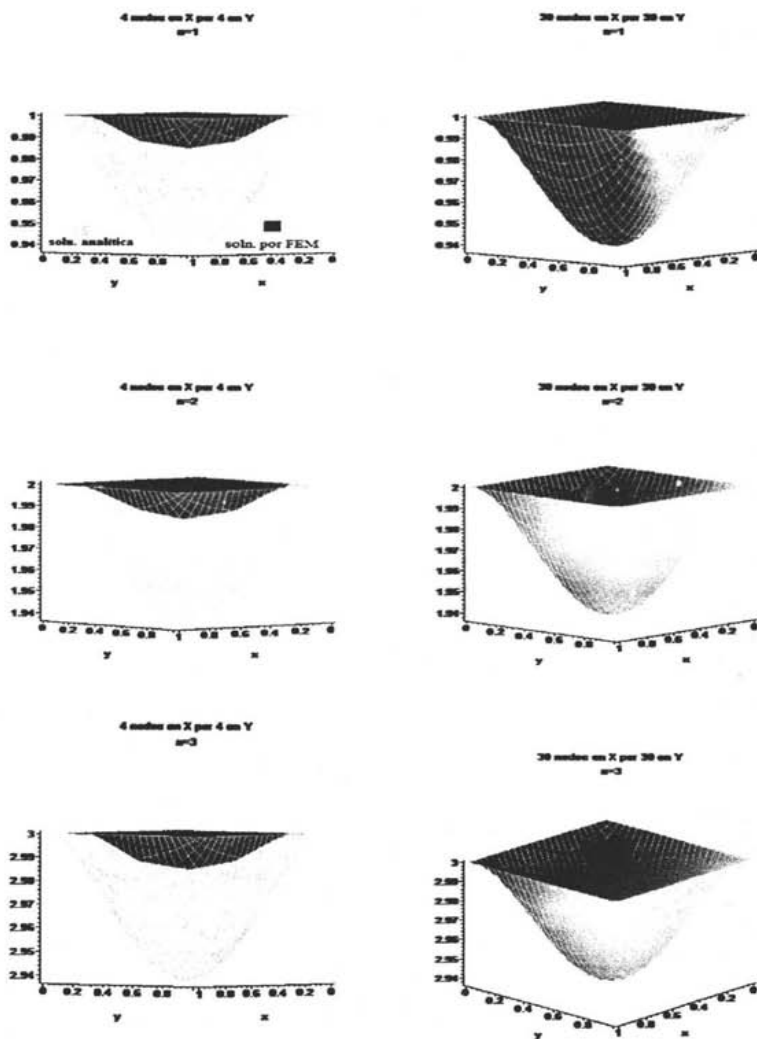


Figura 2.9: Solución analítica vs solución por MEF de p_6 .

2.4 Problema Neumann

Considere el problema Neumann

$$\Delta u = f, \text{ en } \Omega \text{ y } \underline{\nabla} u \cdot \underline{n} = \frac{\partial u}{\partial \underline{n}} = h \text{ en } \partial\Omega \quad (2.1)$$

Sea $v \in H^1(\Omega)$ donde $H^m(\Omega) = \{v : \partial_\alpha v \in L^2(\Omega) \forall \alpha \text{ tal que } |\alpha| \leq m\}$ y $L^2(\Omega) = \{f : (\Omega) \rightarrow \mathbb{R} \mid \int_0^1 |f(x)|^2 dx < \infty\}$, si se multiplica cada miembro de la ecuación anterior por v se obtiene:

$$\int v \Delta u = - \int f v$$

y al aplicar el teorema de Green se convierte en

$$\int_{\Omega} \text{div}(u \underline{\nabla} v) dx - \int_{\Omega} \underline{\nabla} u \cdot \underline{\nabla} v dx = - \int_{\Omega} f v$$

que con el teorema de la divergencia queda resumido a

$$\int_{\partial\Omega} v \underline{\nabla} u \cdot \underline{n} - \int_{\Omega} \underline{\nabla} u \cdot \underline{\nabla} v dx = - \int_{\Omega} f v$$

utilizando las condiciones de frontera se tiene

$$\int_{\partial\Omega} v h d\Gamma - \int_{\Omega} \underline{\nabla} u \cdot \underline{\nabla} v dx = - \int_{\Omega} f v dx \quad \forall v \in H^1(\Omega) \quad (2.2)$$

al considerar $a(u, v) \equiv \int_{\Omega} (\sum_{i=1}^n \partial_i u \partial_i v) dx$

y $l(v) \equiv \int_{\Omega} f v dx + \int_{\partial\Omega} h v d\Gamma$ se genera la formulación débil del problema, es decir;

$$a(u, v) = l(v) \quad \forall v \in H^1(\Omega)$$

Fácilmente se puede probar que que el operador $a(\cdot, \cdot)$ es bilineal, simétrico y continuo, sin embargo para que se garantice la existencia y unicidad de la

solución al problema, se necesita garantizar adicionalmente la V -elipticidad del operador, cosa que en realidad no se cumple, ya que $v_1(x) \equiv 1$ es un elemento de $H^1(\Omega)$ y $\|v_1\|_{H^1(\Omega)} = \sqrt{\int_{\Omega} \sum_{i=1}^{i=n} \partial_i v_1^2 dx + \int_{\Omega} v_1^2 dx} > 0$ pero por otra parte por la definición de $a(\cdot, \cdot)$ se observa que $a(v_1, v_1) = 0$ por lo que $a(v_1, v_1) > \alpha \|v_1\|_{H^1(\Omega)}^2$ con $\alpha > 0$ es imposible, es decir, se viola la condición de V -elipticidad por lo que no se garantiza la existencia y unicidad de la solución. Sin embargo si la solución existiese entonces se debería satisfacer una condición adicional como se muestra a continuación. Asuma que u es solución del problema $a(u, v) = l(v) \quad \forall v \in H^1(\Omega)$, ya que cualquier función constante pertenece a $H^1(\Omega)$ considere $v_c(x) = C$, entonces $a(u, v_c) = l(v_c) \quad \forall C \in \mathbb{R}$ y por como se define $a(\cdot, \cdot)$ se sigue que $0 = \int_{\Omega} f(x)v_c dx + \int_{\partial\Omega} h(x)v_c d\Gamma = C \int_{\Omega} f(x) dx + C \int_{\partial\Omega} h(x) d\Gamma = C(\int_{\Omega} f(x) dx + \int_{\partial\Omega} h(x) d\Gamma)$, de donde se concluye que si hay solución se debe satisfacer

$$\int_{\Omega} f(x) dx + \int_{\partial\Omega} h(x) d\Gamma = 0, \quad (2.3)$$

conocida como la condición de compatibilidad.

Además.

Proposición 3. Si u es una solución al problema anterior y $v_c = C \quad \forall C \in \mathbb{R}$ entonces $u + v_c$ también es solución.

Demostración.

En efecto

$$a(u + v_c, v) = \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n \partial_i (u + v_c) \partial_i v dx = \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n (\partial_i u + \partial_i v_c) \partial_i v dx = a(u, v)$$

ya que la derivada de una constante es cero. \square

Otra manera de ver el problema anterior, es modificar el espacio de variaciones de la siguiente manera: sea

$$Q(\Omega) = \{v \in H^1(\Omega) : \int_{\Omega} v dx = 0\}$$

Al utilizar la desigualdad de Poincaré

$$\|v\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq k \left[\sum_{i=1}^n \int_{\Omega} (\partial_i v)^2 dx + \left[\int_{\Omega} v dx \right]^2 \right]; \quad k > 0$$

se cumple lo siguiente:

$$a(v, v) \geq \|v\|_{H^1(\Omega)}^2$$

por lo que $a(\cdot, \cdot)$ es Q -elíptico y se garantiza la existencia de una solución. Lo anterior es de suma importancia ya que si se encuentra una solución en $Q(\Omega)$ ésta puede ser la solución al problema original si se prueba que los problemas son equivalentes, a continuación la prueba de la equivalencia en ambos problemas;

Proposición 4. *Los siguientes problemas son equivalentes:*

1. encuentre $u \in Q(\Omega)$:

$$a(u, v) = l(v) \quad \forall v \in H^1(\Omega)$$

2. encuentre $u \in Q(\Omega)$:

$$a(u, v) = l(v) \quad \forall v \in Q(\Omega)$$

Demostración. $1 \rightarrow 2$ es trivial al considerar que $Q(\Omega) \subseteq H^1(\Omega)$.

$2 \rightarrow 1$ asuma que u es la solución de 2, p.d. $a(u, v) = l(v) \quad \forall v \in H^1(\Omega)$.

Sea $p_0 = \{v \in H^1(\Omega) : v_c = C \quad \forall C \in \mathbb{R}\} \subseteq H^1(\Omega)$ y $v \in H^1(\Omega)$, debido a que p_0 es el complemento ortogonal de Q entonces v puede escribirse como $v = v_Q + v_p$ donde $v_Q \in Q(\Omega)$ y $v_p \in p_0$, además, ya que $a(u, v_p) = 0$ porque v_p es constante por definición y considerando $\int_{\Omega} f(x)dx + \int_{\partial\Omega} h(x)d\Gamma = 0$ se sigue que $a(u, v_p) = v_p \int_{\Omega} f(x)dx + \int_{\partial\Omega} h(x)d\Gamma = 0 = l(v_p)$ por lo que $a(u, v_p) + a(u, v_Q) = a(u, v_p + v_Q) = l(v_p + v_Q)$ por lo tanto $a(u, v) = l(v)$.

Así pues se ha demostrado que la condición 2.3 no sólo es necesaria para resolver el problema sino suficiente²⁰. □

²⁰Para mayores detalles ver [32]

Capítulo 3

Un problema electroquímico

Encontrar la solución numérica de cualquiera de los problemas anteriores generalmente no presenta complicación alguna, sin embargo, dichos problemas no representan un modelo para un fenómeno electroquímico, sino sólo para un problema eléctrico o bien para un problema de transferencia de transferencia de calor en donde se aísla alguna frontera o se mantiene el potencial (o la temperatura) en un valor fijo determinado.

Para modelar un fenómeno electroquímico en donde alguna parte de la frontera del dominio represente a un metal que se encuentra en contacto con un medio electrolítico, el cual está sometido a una corriente eléctrica externa $f(x)$, es necesario modificar de alguna forma alguno de los problemas anteriores.

Se puede pensar en trabajar con un problema Dirichlet no homogéneo -para aproximar la parte de la frontera que representa al metal en contacto con el electrolito- y así suponer un valor inicial de potencial en el metal como condición de frontera, después encontrar la solución $U(x)$ y con este dato

aproximar la corriente para que a la vez se pueda volver a calcular el nuevo potencial utilizando la ecuación de Butler-Volmer¹ que aparecerá como la nueva condición de frontera. El proceso de iteración duraría lo que tarde en converger el valor calculado $U(x)$ al valor utilizado como condición de frontera.

Sin embargo este proceso tiene como consecuencia que las aproximaciones del flujo (la corriente) son burdas, por lo que de ninguna manera se garantiza la convergencia a la solución del problema². Es necesario aclarar que lo anterior puede evitarse si se calculan tanto el campo como el flujo de manera simultánea, cosa que puede realizarse utilizando la teoría del análisis convexo, en donde se sustenta el método de elemento finito híbrido [35], sin embargo en este trabajo se utilizó únicamente el MEF clásico. Lo anterior obliga a plantear el problema en otro sentido, para poder modelar el fenómeno electroquímico. Lo que se cambiará serán las condiciones de frontera, es decir, en lugar de fijar en la frontera el valor del potencial, se fijará el valor del flujo. De esta manera las nuevas iteraciones considerarán sólo el campo obtenido en la solución con el método de elemento finito y la ecuación de Butler-Volmer, evitando con eso aproximar el flujo.

Considerando que los dos extremos del dominio poseen condiciones electroquímicas (metal desnudo en contacto con un electrolito) el problema de va-

¹Existen diferentes trabajos en donde se utilizan como condiciones de frontera simplificaciones lineales [3], la ecuación de Butler-Volmer [15] o expresiones experimentales desarrolladas en el laboratorio [23] e incluso [30] en donde considera los tres tipos de condiciones.

²Complicación con la que en realidad se encuentra al tratar de utilizar este procedimiento.

lores a la frontera en una dimensión se escribe de la siguiente manera³ :

$$-kU''(x) = f(x) \quad \Omega = (0, 1)$$

$$C.F. \begin{cases} kU'(0) = \operatorname{arcsinh}(U(0)) \\ -kU'(1) = \operatorname{arcsinh}(U(1)) \end{cases} \quad (3.1)$$

Procediendo de igual manera que en el problema p1; después de integrar por partes se llega a la siguiente expresión,

$$\begin{aligned} -U'(1)v(1) + U'(0)v(0) + \int_0^1 U'(x)v'(x)dx \\ = \int_0^1 \frac{f(x)v(x)}{k} dx \end{aligned}$$

que al utilizar las condiciones de frontera se reduce a

$$\begin{aligned} \frac{\operatorname{arcsinh}(U(1))v(1)}{k} + \frac{\operatorname{arcsinh}(U(0))v(0)}{k} + \\ \int_0^1 U'(x)v'(x)dx = \int_0^1 \frac{f(x)v(x)}{k} dx \end{aligned}$$

y al convertirlo en un problema de dimensión finita, se trata de encontrar

$U_N \in C_N$:

$$\begin{aligned} \frac{\operatorname{arcsinh}(U_N(1))v(1)}{k} + \frac{\operatorname{arcsinh}(U_N(0))v(0)}{k} \\ + \int_0^1 U'_N(x)v'(x)dx = \int_0^1 \frac{f(x)v(x)}{k} dx \quad \forall v \in C_N \end{aligned}$$

sabiendo que

$$U_N = \sum_{i=1}^N a_i \phi_i$$

³Por simplificación se consideran $\beta = 0.5$ y $\alpha = 0.5$ en la ecuación de Butler Volmer.

ya que ϕ_i son las funciones base nodales que generan al subespacio C_N mientras que las a_i son los parámetros a determinar, el sistema a resolver es

$$\frac{\operatorname{arcsinh}(U_N(1))\phi_N(1)}{k} + \frac{\operatorname{arcsinh}(U_N(0))\phi_1(0)}{k} + \sum_{i=1}^N a_i \int_0^1 \phi_i'(x)\phi_j'(x)dx = \int_0^1 \frac{f(x)\phi_j(x)}{k} dx \quad ; j = 1, \dots, N$$

ya que $U_N(0) = a_1\phi_1(0)$ y $U_N(1) = a_N\phi_N(1)$ el problema se reduce a

$$\frac{\operatorname{arcsinh}(a_1\phi_1(0))\phi_1(0)}{k} + \frac{\operatorname{arcsinh}(a_N\phi_N(1))\phi_N(1)}{k} + \sum_{i=1}^N a_i \int_0^1 \phi_i'(x)\phi_j'(x)dx = \int_0^1 \frac{f(x)\phi_j(x)}{k} dx \quad ; j = 1, \dots, N$$

pero $\phi_1(0) = \phi_N(1) = 1$ por lo que la expresión se simplifica aún más para obtener,

$$\frac{\operatorname{arcsinh}(a_1)}{k} + \frac{\operatorname{arcsinh}(a_N)}{k} + \sum_{i=1}^N a_i \int_0^1 \phi_i'(x)\phi_j'(x)dx = \int_0^1 \frac{f(x)\phi_j(x)}{k} dx \quad ; j = 1, \dots, N$$

lo cual se resolvería al iterar los valores de a_1 y a_2 iniciando con valores arbitrarios.

Lo anterior pareciese ser la “panacea” para el problema que se desea resolver como objetivo de este trabajo -modelar un sistema de protección catódica utilizando MEF-, pero las complicaciones continúan cuando se observa el problema anterior y se identifica que se trata de un problema tipo Neumann, el cual como ya se analizó en la sección 2.4 debe satisfacer la condición de compatibilidad o bien, plantear el problema en $Q(\Omega)$. En este trabajo se pretende aproximar dicha solución perturbando al sistema, es decir, manejar

una aproximación de las condiciones de frontera 3.1 para que dejen de ser condiciones tipo Neumann aproximándose lo más posible a ellas.

En lugar de utilizar en el problema las condiciones 3.1 se utiliza la siguiente aproximación de ellas:

$$\begin{aligned}
 & -kU''(x) = f(x) \quad \Omega = (0, 1) \\
 \text{C.F.} \quad & \begin{cases} kU'(0) + \epsilon U(0) = \operatorname{arcsinh}(U(0)) \\ -kU'(1) + \epsilon U(1) = \operatorname{arcsinh}(U(1)) \end{cases} \quad (3.2)
 \end{aligned}$$

en donde ϵ es un número positivo, de esta manera se evita manejar las condiciones tipo Neumann pero se aproxima a ellas manejando una ϵ pequeña. Procediendo de manera similar a la manera en que se trató cada uno de los problemas anteriores, se obtiene la siguiente expresión,

$$\begin{aligned}
 & -U'(1)v(1) + U'(0)v(0) + \int_0^1 U'(x)v'(x)dx \\
 & = \int_0^1 \frac{f(x)v(x)}{k} dx
 \end{aligned}$$

y utilizando las condiciones de frontera se llega a

$$\begin{aligned}
 & \frac{(\operatorname{arcsinh}(U(1)) - \epsilon U(1))v(1)}{k} + \frac{(\operatorname{arcsinh}(U(0)) - \epsilon U(0))v(0)}{k} + \int_0^1 U'(x)v'(x)dx \\
 & = \int_0^1 \frac{f(x)v(x)}{k} dx
 \end{aligned}$$

que al convertirlo en un problema de dimensión finita, se trata de encontrar $U_N \in C_N$:

$$\frac{(\operatorname{arcsinh}(U_N(1)) - \epsilon U_N(1))v(1)}{k} + \frac{(\operatorname{arcsinh}(U_N(0)) - \epsilon U_N(0))v(0)}{k}$$

$$+ \int_0^1 U'_N(x)v'(x)dx = \int_0^1 \frac{f(x)v(x)}{k}dx \quad \forall v \in C_N$$

sabiendo que

$$U_N = \sum_{i=1}^N a_i \phi_i$$

y que ϕ_i son las funciones base nodales que generan al subespacio C_N mientras que las a_i son los parámetros a determinar, el sistema a resolver es

$$\frac{(\operatorname{arcsinh}(U_N(1)) - \epsilon U_N(1))\phi_N(1)}{k} + \frac{(\operatorname{arcsinh}(U_N(0)) - \epsilon U_N(0))\phi_1(0)}{k} \\ + \sum_{i=1}^N a_i \int_0^1 \phi'_i(x)\phi'_j(x)dx = \int_0^1 \frac{f(x)\phi_j(x)}{k}dx \quad ; j = 1, \dots, N$$

ya que $U_N(0) = a_1\phi_1(0)$ y $U_N(1) = a_N\phi_N(1)$ el problema se reduce a

$$\frac{(\operatorname{arcsinh}(a_1\phi_1(0)) - \epsilon\phi_1(0))\phi_1(0)}{k} + \frac{(\operatorname{arcsinh}(a_N\phi_N(1)) - \epsilon\phi_N(1))\phi_N(1)}{k} \\ + \sum_{i=1}^N a_i \int_0^1 \phi'_i(x)\phi'_j(x)dx = \int_0^1 \frac{f(x)\phi_j(x)}{k}dx \quad ; j = 1, \dots, N$$

pero $\phi_1(0) = \phi_N(1) = 1$ por lo que la expresión se simplifica aún más para obtener,

$$\frac{\operatorname{arcsinh}(a_1) - \epsilon}{k} + \frac{\operatorname{arcsinh}(a_N) - \epsilon}{k} \\ + \sum_{i=1}^N a_i \int_0^1 \phi'_i(x)\phi'_j(x)dx = \int_0^1 \frac{f(x)\phi_j(x)}{k}dx \quad ; j = 1, \dots, N$$

ejemplo numérico 7

Los resultados numéricos del problema 3.2 se presentan en la Figura 3.1 considerando a $f(x)$ como se muestra en la Figura 3.2, valores arbitrarios en el inicio de las iteraciones para a_1 y a_N , $K=0.1$, $\epsilon = 0.55$ y finalmente un número diferente de nodos en el dominio.

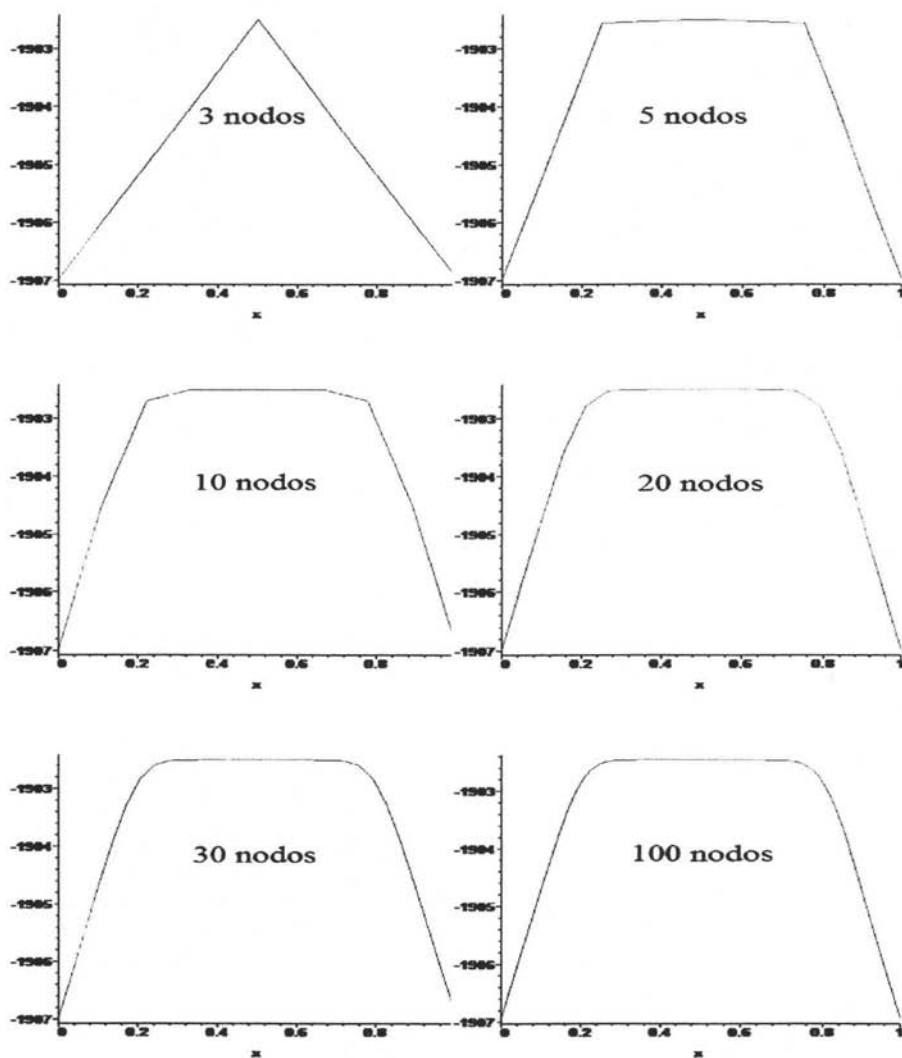
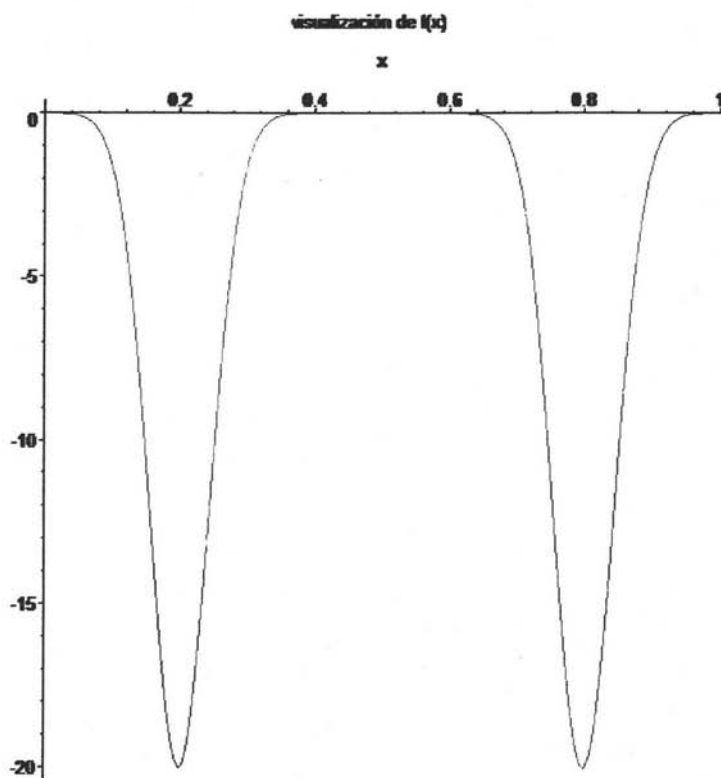


Figura 3.1: Solución por MEF del sistema 3.2.

Figura 3.2: $f(x)$ utilizada en el sistema 3.2.

No se debe olvidar que los resultados anteriores pertenecen a una modelación de un problema electroquímico unidimensional en donde dos puntos metálicos $x=0$ y $x=1$ se encuentran en contacto con un medio electroquímico, el cual a su vez está sometido a una corriente eléctrica $f(x) \in \Omega$. Lo que quiere decir que los resultados mostrados son los valores del potencial eléctrico en cada punto del sistema (incluyendo la frontera), sin embargo no hay que ignorar el hecho que dichos resultados pertenecen a una solución que depende de ϵ , por lo que dependiendo del valor de ϵ se encontrarán diferentes soluciones que variarán entre sí por una constante, sin embargo el valor de ϵ es arbitrario y no existe alguna razón que justifique el hecho de que para una ϵ , la solución numérica del problema 3.2 sea igual a la solución física del problema 3.1, ante esta situación se presenta una alternativa: Encontrar la constante que separa a la solución física de 3.1 de la solución numérica de 3.2 y sumársela a esta última. Como ya se ha mencionado, el problema 3.1 debe satisfacer algunas condiciones en el equilibrio, sin embargo, dicho problema no presenta tales condiciones en el estado no estacionario, por lo que se presenta la posibilidad de resolver el problema en el tiempo (el inconveniente sería un mayor tiempo-máquina para obtener la respuesta, pero con esta respuesta se encontraría la constante de la que se habla en el párrafo anterior).

Así que si se desea resolver un problema electroquímico como el problema 3.1 pero conociendo su historia de potenciales, lo que se debe hacer es formular variacionalmente el siguiente problema y resolverlo de manera numérica utilizando el MEF.

$$\frac{\partial U}{\partial t} = k \frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2} + f(x) \quad \Omega = (0, 1)$$

$$C.F. \begin{cases} kU'(0) = \operatorname{arcsinh}(U(0)) \\ -kU'(1) = \operatorname{arcsinh}(U(1)) \end{cases} \quad (3.3)$$

es decir,

$$\frac{U(x, t + \Delta t) - U(x, t)}{\Delta t} = k \frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2} + f(x)$$

o lo que es lo mismo,

$$U(x, t + \Delta t) - U(x, t) = k\Delta t \frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2} + \Delta t f(x)$$

y al multiplicar a cada miembro de esta ecuación por un elemento $v(x)$ del espacio de variaciones y proceder a integrar por partes,

$$\int U(x, t + t)v(x) = \int U(x, \Delta t)v(x) + \int k\Delta t \frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2} v(x) + \int \Delta t f(x)v(x)$$

se llega a

$$\begin{aligned} \int U(x, t + \Delta t)v(x) &= \int U(x, t)v(x) + k\Delta t U'(x)v(x) \Big|_0^1 \\ &\quad + \int \Delta t f(x)v(x) + \int k\Delta t U'(x)v'(x) \\ &= \int U(x, t)v(x) + k\Delta t (U'(1)v(1) - U'(0)v(0)) \\ &\quad + \int \Delta t f(x)v(x) + \int k\Delta t U'(x)v'(x) \\ &= \int U(x, t)v(x) + \Delta t (-\operatorname{arcsinh}(U(1))v(1) - \operatorname{arcsinh}(U(0))v(0)) \\ &\quad + \int \Delta t f(x)v(x) + \int k\Delta t U'(x)v'(x) \end{aligned}$$

finalmente, al proceder de manera similar que en los ejemplos anteriores se llega a la situación de resolver el siguiente problema discreto.

$$\phi_j(x)(\phi_{cte} + f(x)\Delta t) = \sum_{i=1}^N a_i \int \phi_i \phi_j - k\Delta t \sum_{i=1}^N a_i \int \phi'_i \phi'_j +$$

$$\Delta t(-\operatorname{arcsinh}(a_N \phi_N(1))\phi_j(1) - \operatorname{arcsinh}(a_1 \phi_1(0))\phi_j(0)); \quad j = 1, \dots, N$$

ejemplo numérico 8

Los resultados numéricos del problema 3.3 se presentan en las Figuras que van desde la 3.3 hasta la 3.17⁴ considerando a $f(x)$ como se muestra en la Figura 3.2, valores arbitrarios en el inicio de las iteraciones para a_1 y a_N , $K=0.1$ y un número de nodos en el dominio igual a 10, para los cuales se presentan resultados del potencial cada décima de unidad de tiempo (s) utilizada.

⁴Esta serie de figuras tienen al tiempo como variable y éste varía desde una décima de unidad de tiempo hasta 9.6 unidades de tiempo (s), la serie tiene una secuencia de izquierda a derecha y de arriba hacia abajo.

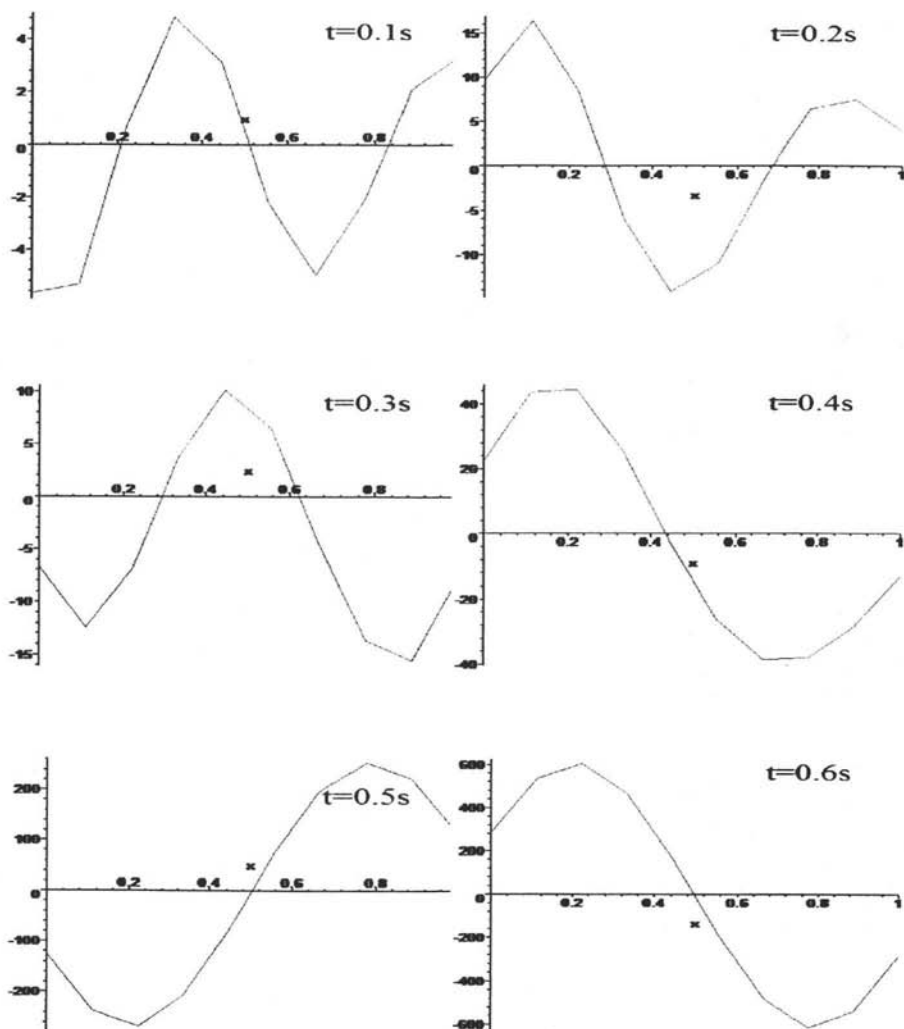


Figura 3.3: Inicio de la Serie "solución por MEF del sistema 3.3".

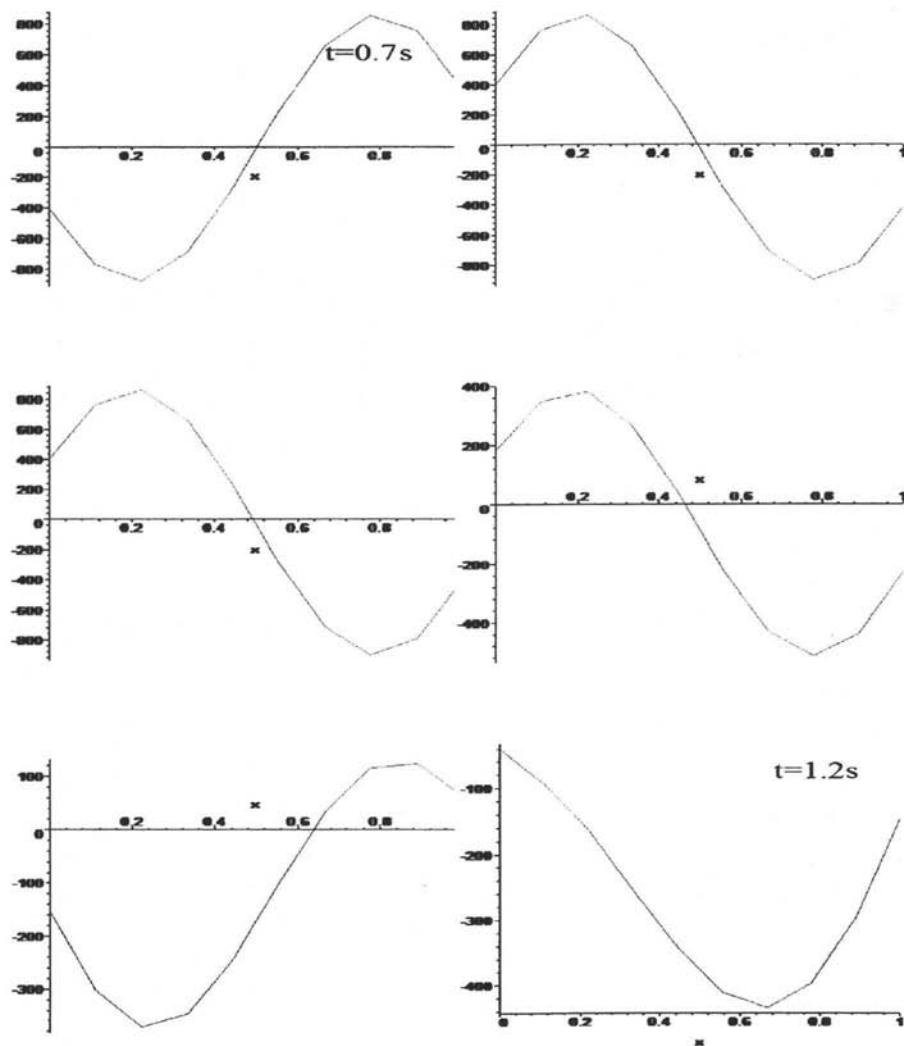


Figura 3.4: "Solución por MEF del sistema 3.3, Serie IP".

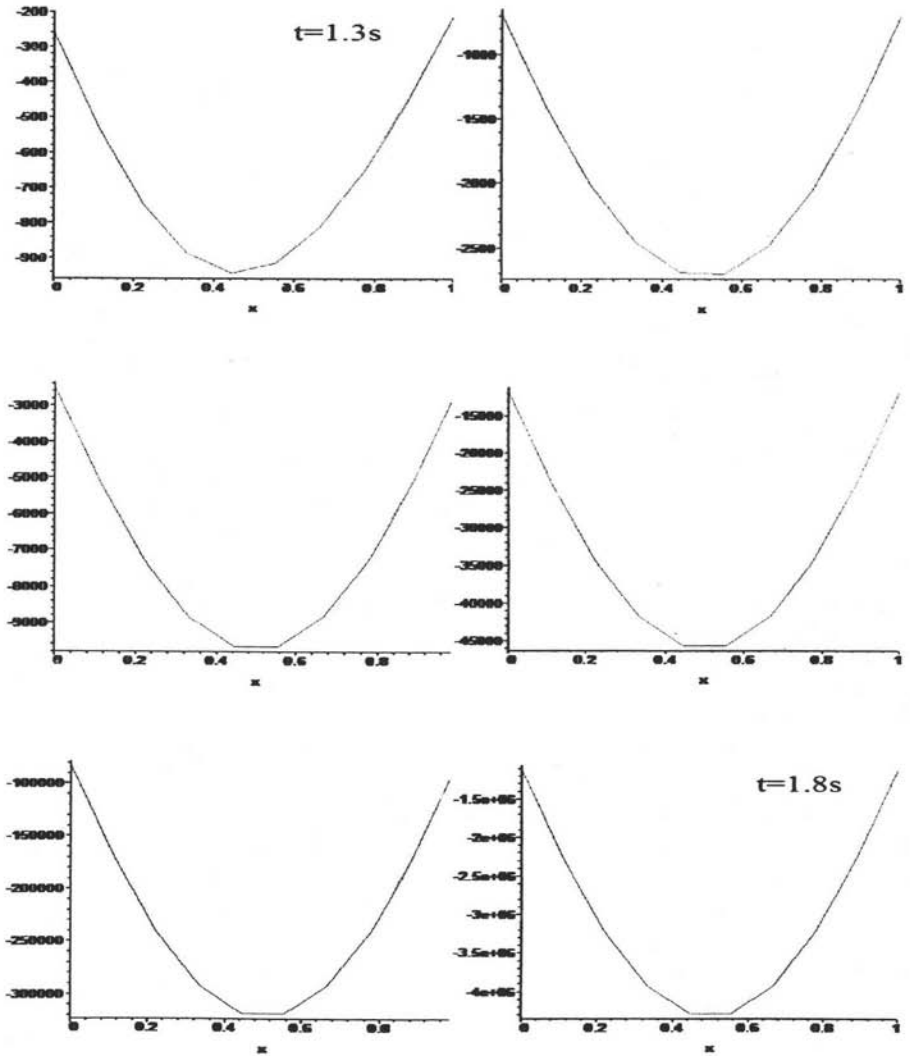


Figura 3.5: "Solución por MEF del sistema 3.3, Serie III".

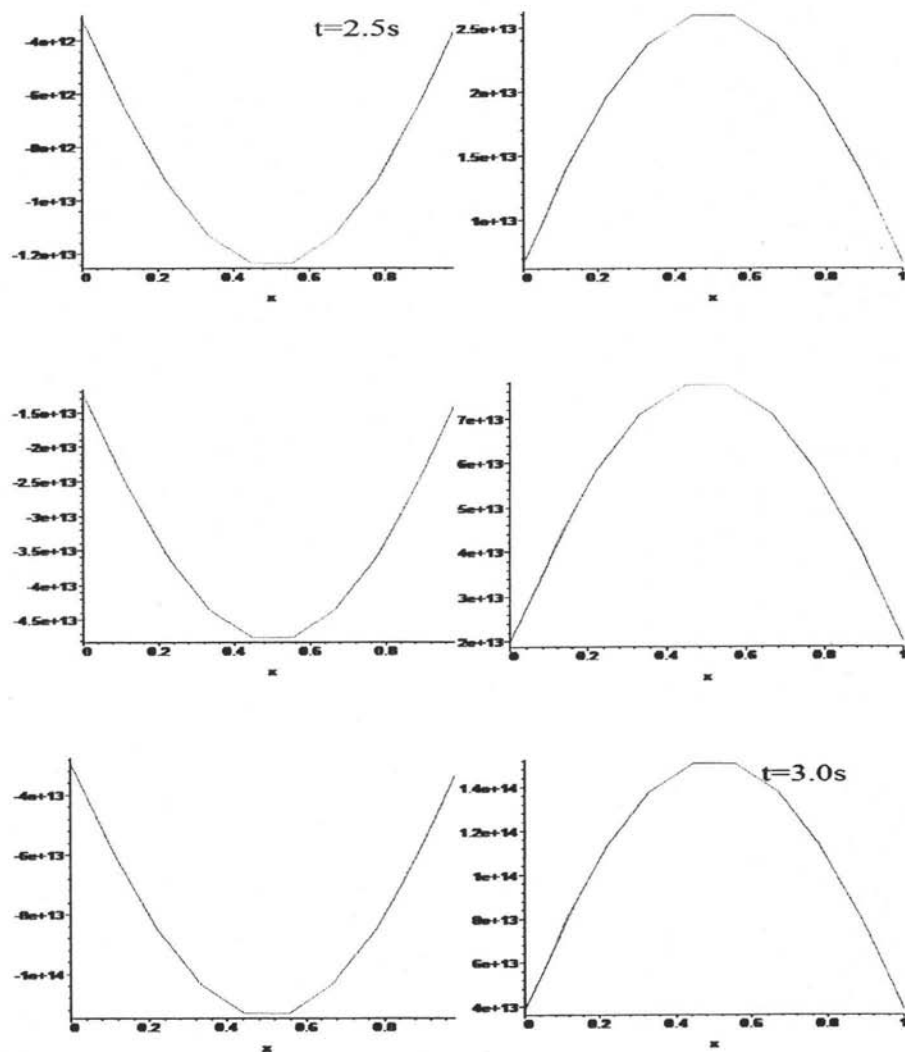


Figura 3.6: "Solución por MEF del sistema 3.3, Serie IV".

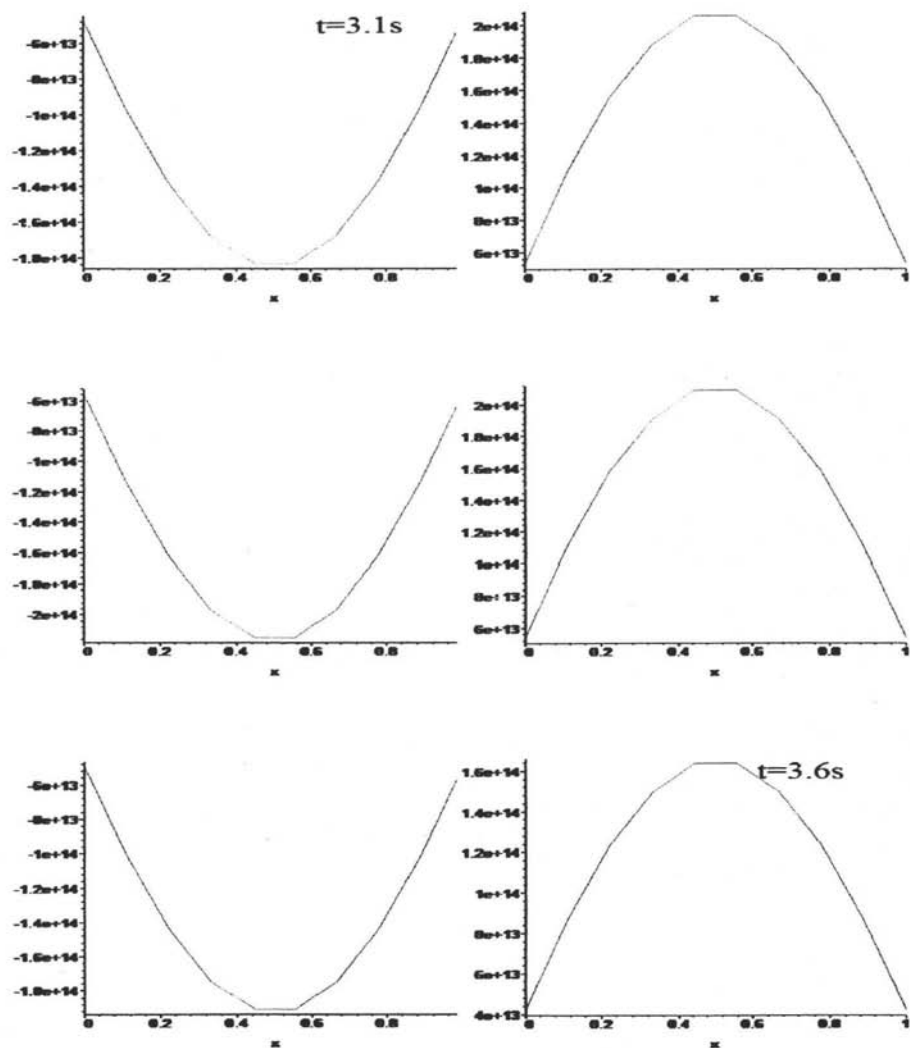


Figura 3.7: "Solución por MEF del sistema 3.3, Serie V".

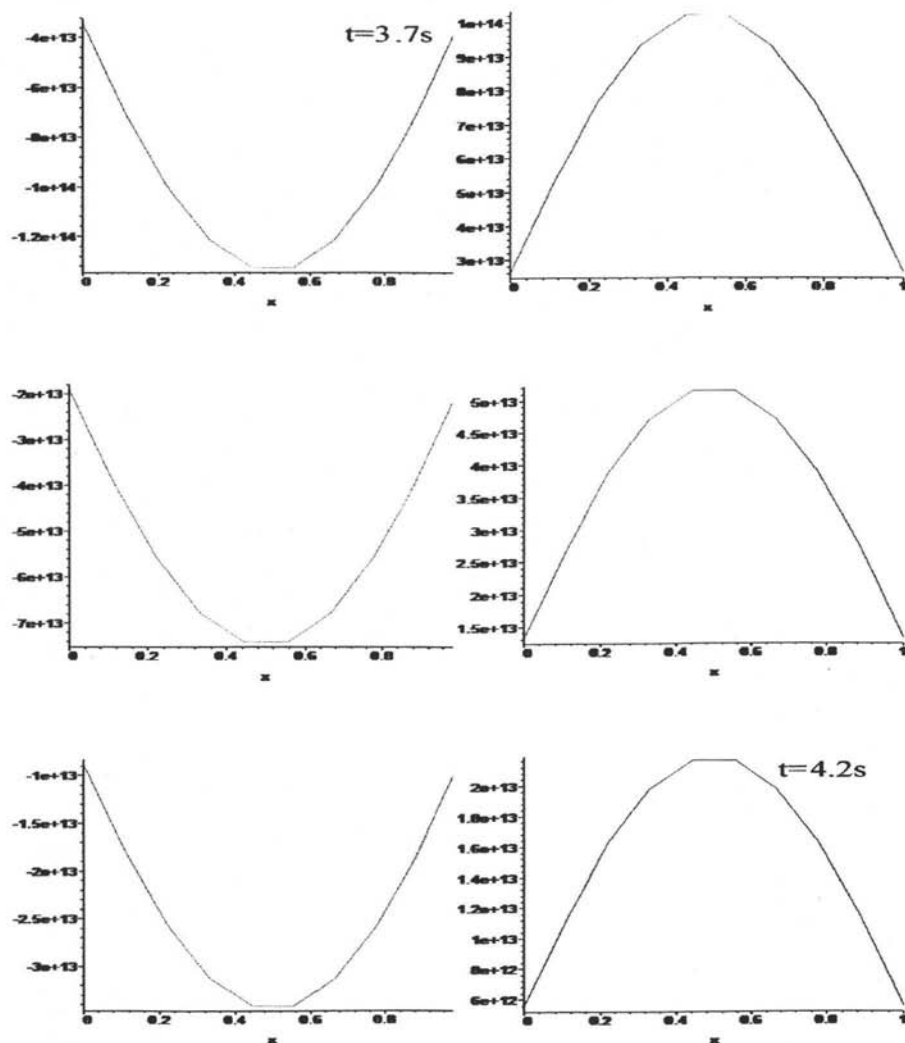


Figura 3.8: "Solución por MEF del sistema 3.3, Serie VI".

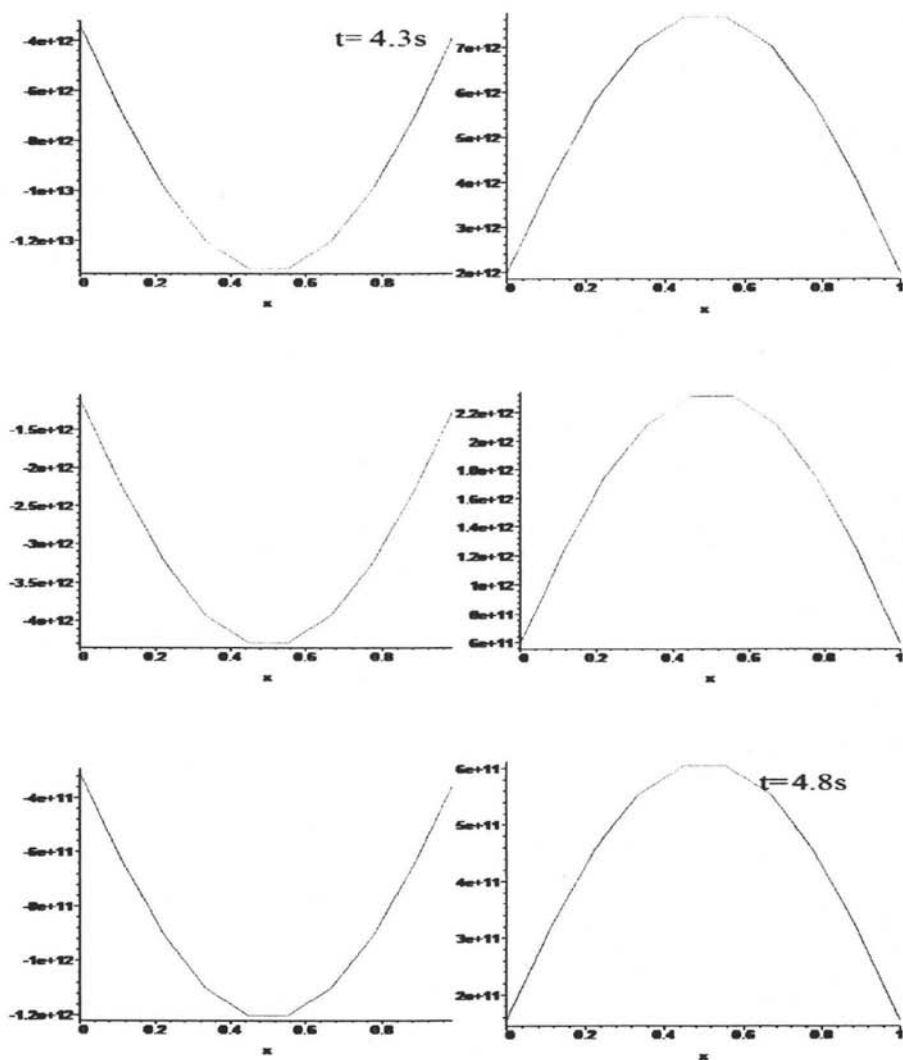


Figura 3.9: "Solución por MEF del sistema 3.3, Serie VII".

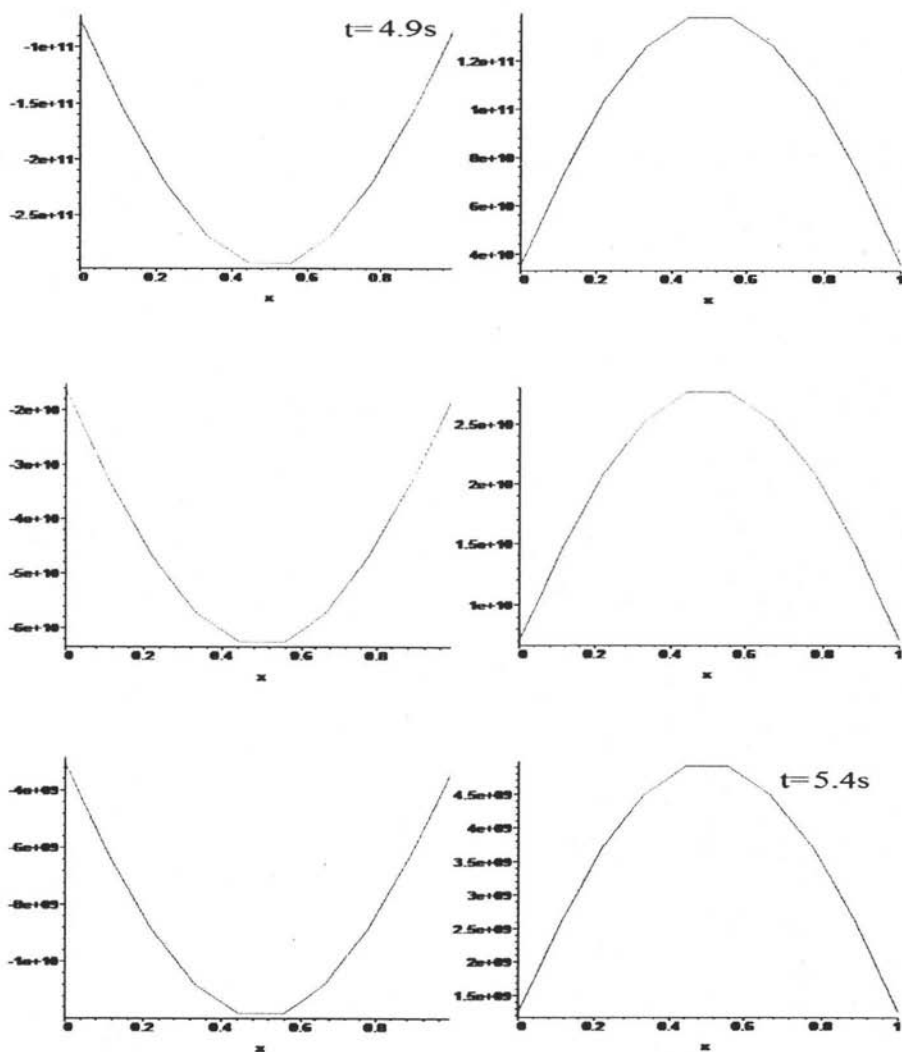


Figura 3.10: "Solución por MEF del sistema 3.3, Serie VIII".

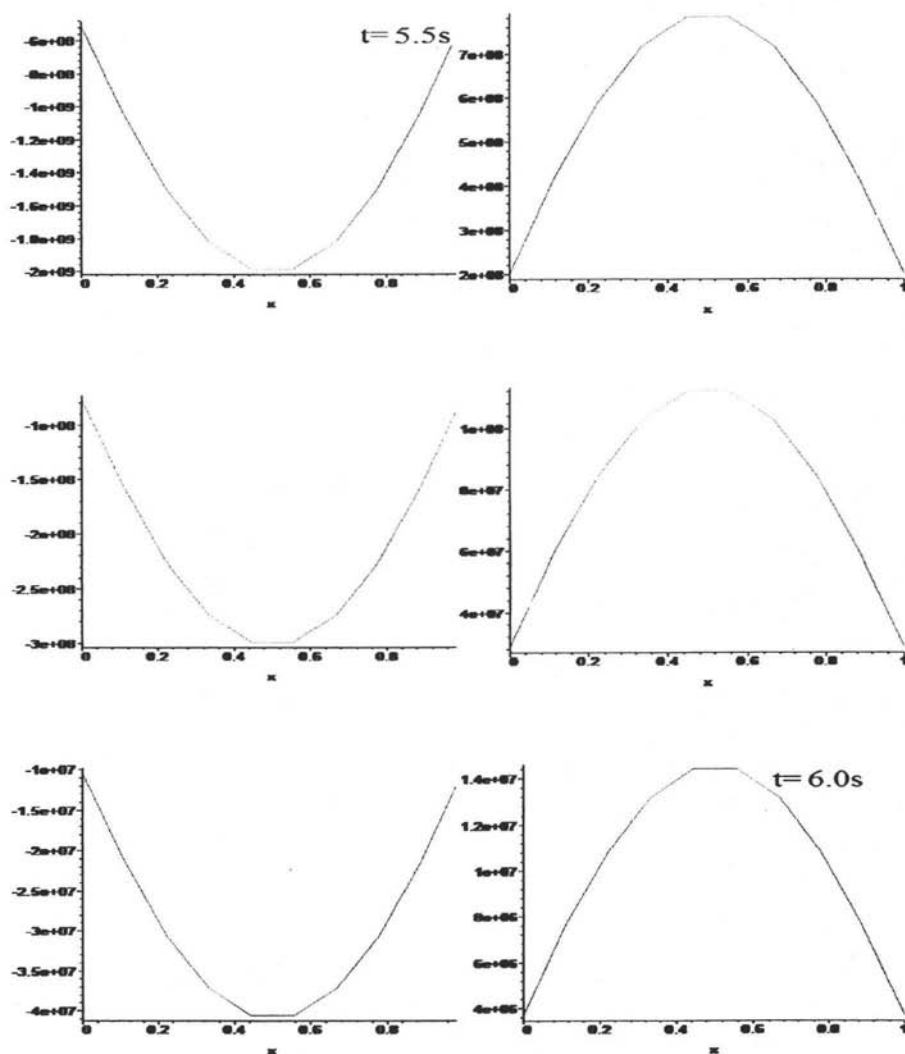


Figura 3.11: "Solución por MEF del sistema 3.3, Serie IX".

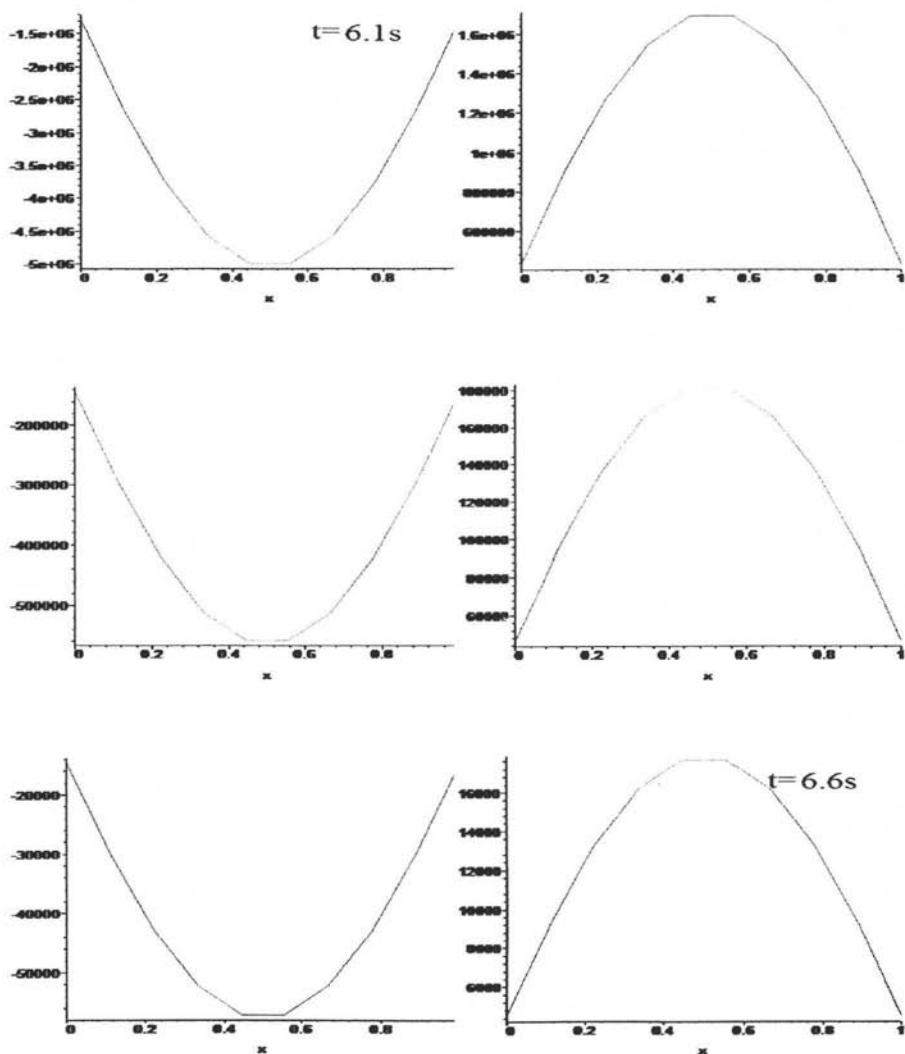


Figura 3.12: "Solución por MEF del sistema 3.3, Serie X".

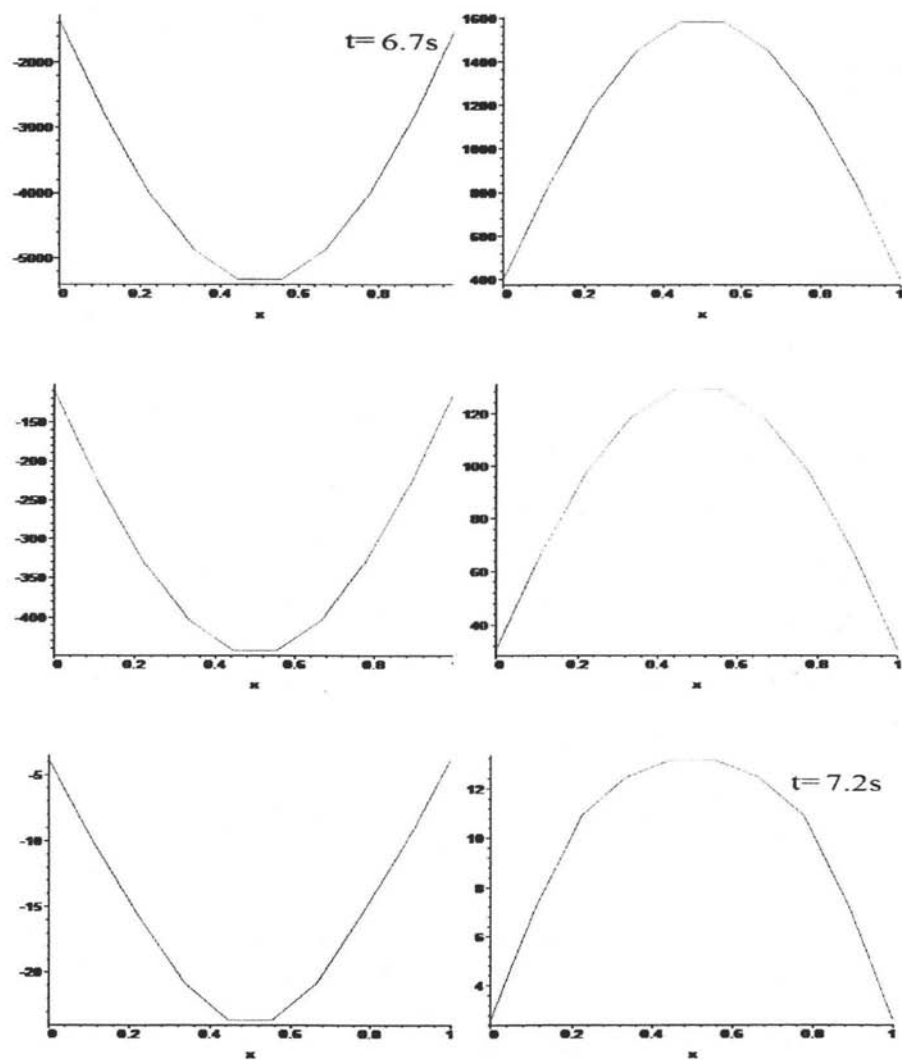


Figura 3.13: "Solución por MEF del sistema 3.3, Serie XI".

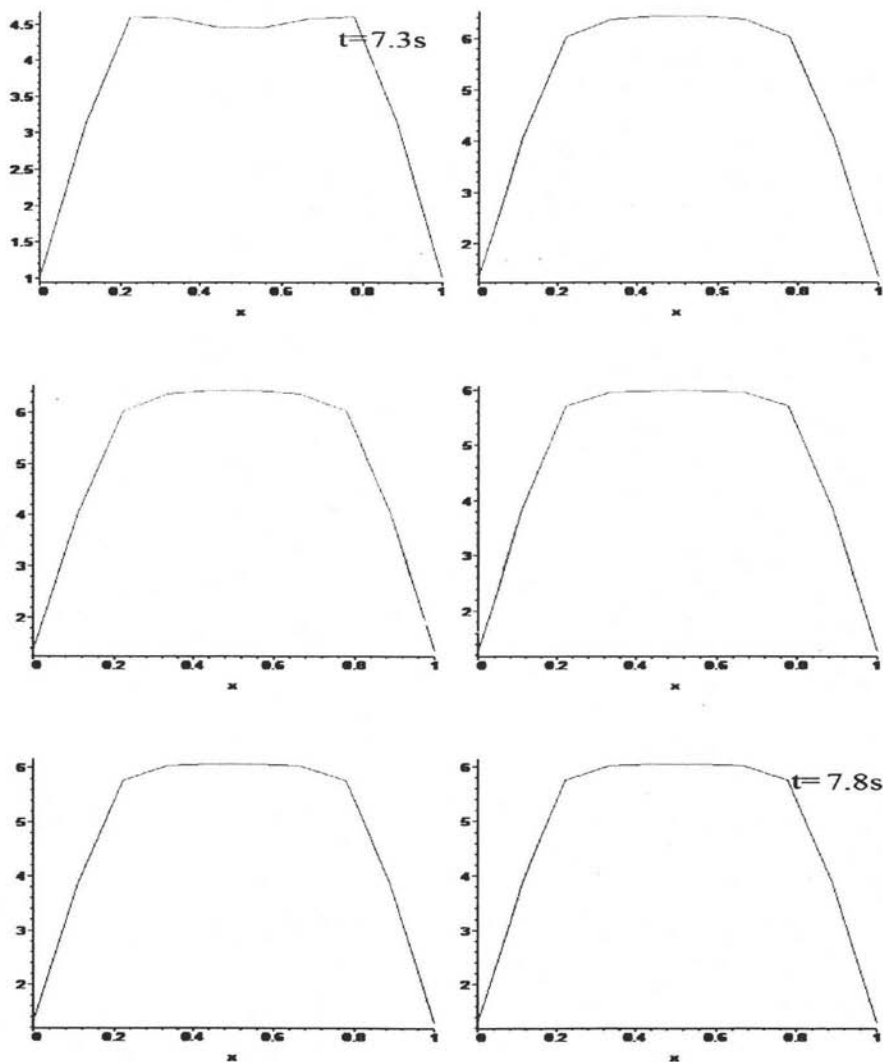


Figura 3.14: "Solución por MEF del sistema 3.3, Serie XII".

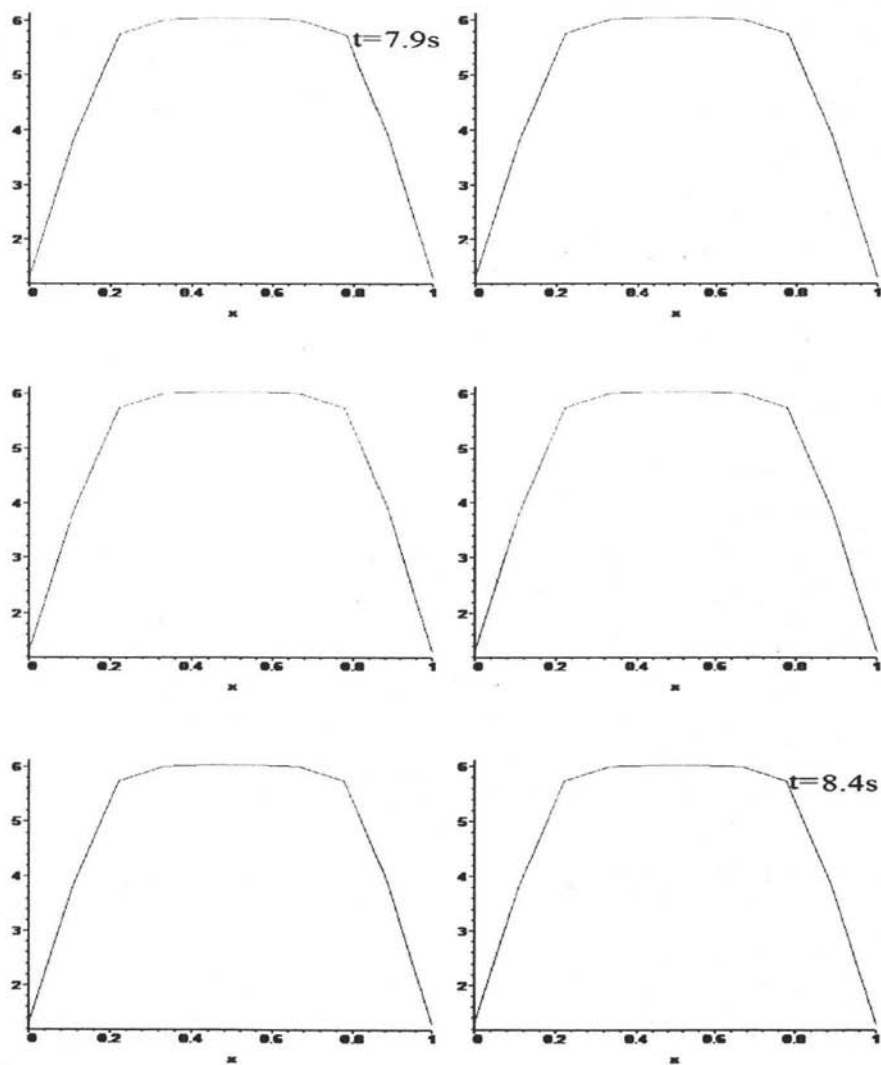


Figura 3.15: "Solución por MEF del sistema 3.3, Serie XIII".

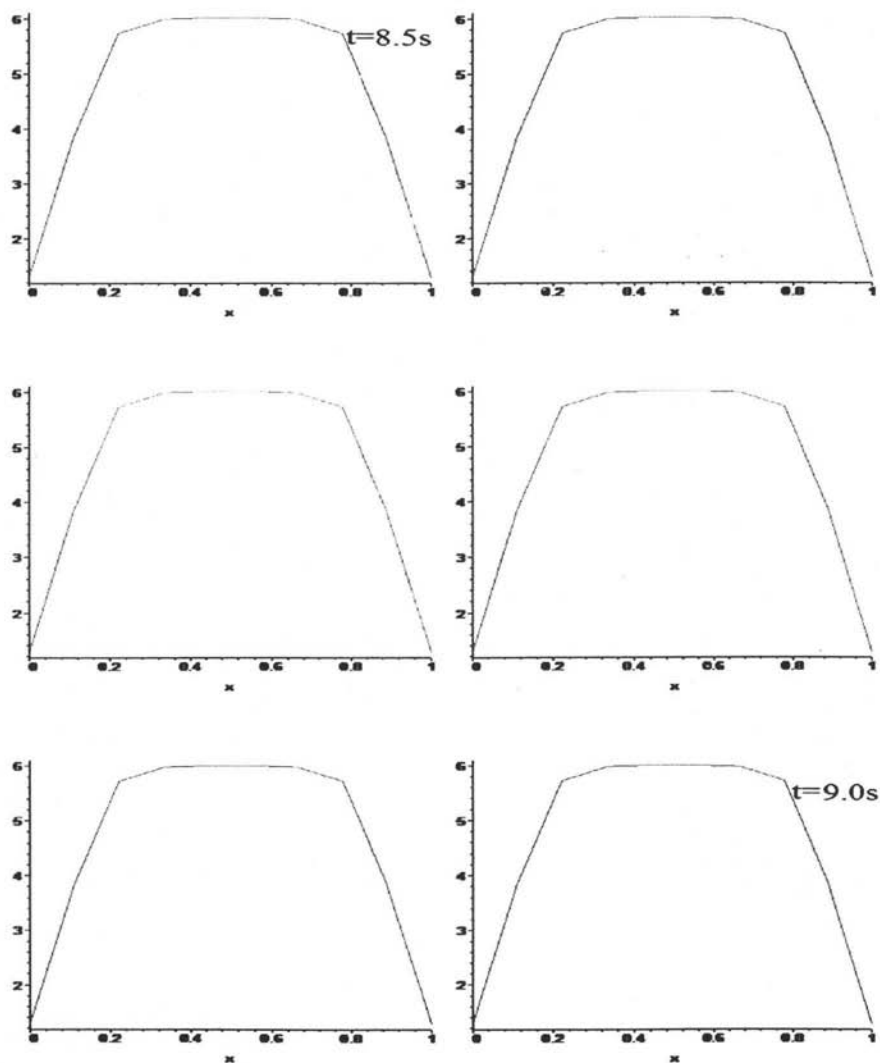


Figura 3.16: "Solución por MEF del sistema 3.3, Serie XIV".

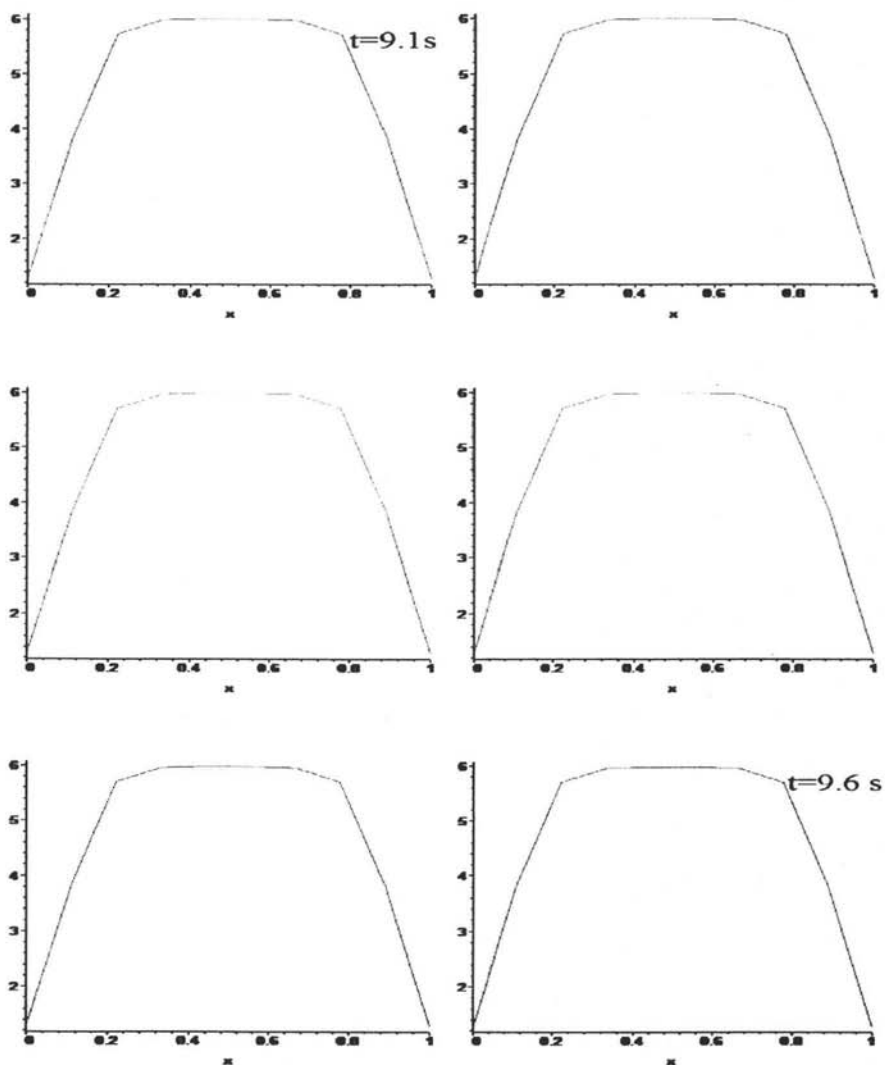


Figura 3.17: Fin de la serie "Solución por MEF del sistema 3.3."

Como se puede observar en la serie de figuras anteriores, las primeras respuestas no parecen tener sentido físico, sin embargo conforme transcurre el tiempo el sistema tiende al equilibrio y se puede considerar estable luego de un determinado lapso. Después de haber obtenido la respuesta del sistema en el tiempo, se procede a comparar la última figura de la serie contra la figura obtenida para el sistema 3.2 considerando alguna ϵ arbitraria pero fija (en este caso $\epsilon = 0.55$) y el mismo número de nodos utilizados para obtener la respuesta de 3.3, el resultado se muestra en la Figura 3.18. En dicha figura se aprecia una gran diferencia entre ambas respuestas, sin embargo no se debe olvidar que la respuesta del sistema 3.2 se encontró con una ϵ arbitraria y que tan sólo representa una solución de una familia infinita de soluciones al problema -si se considera que se puede obtener una solución para cada ϵ dada- y que lo importante de la solución del sistema 3.2 es que se obtiene de una manera mucho más simple y mucho más rápida que la correspondiente del sistema 3.3. Por lo anterior vale la pena “acercar” ambas soluciones utilizando una constante para analizar el grado de “semejanza” que existe entre ambas y para saber si sólo una constante separa a la solución aproximada del sistema 3.2 de la solución real.

Lo anterior se observa en la Figura 3.19 en donde se utilizan diferentes constantes para observar la similitud en el comportamiento de ambas soluciones.

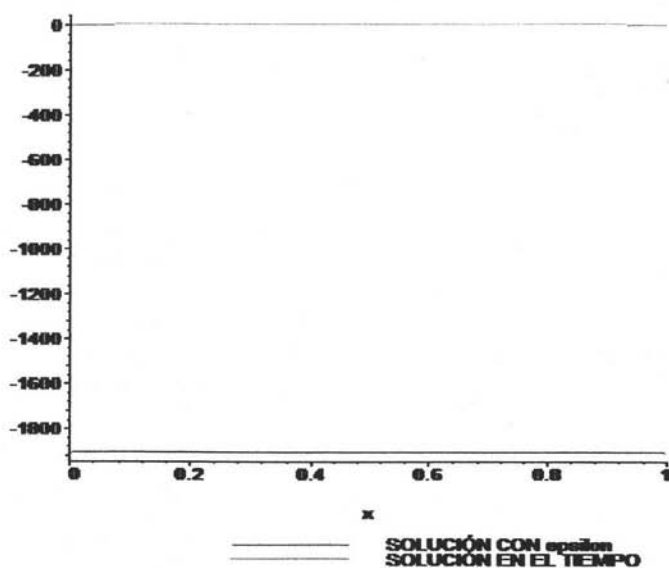


Figura 3.18: Comparación entre la solución del sistema 3.3 y la solución del sistema 3.2(soln. ϵ).

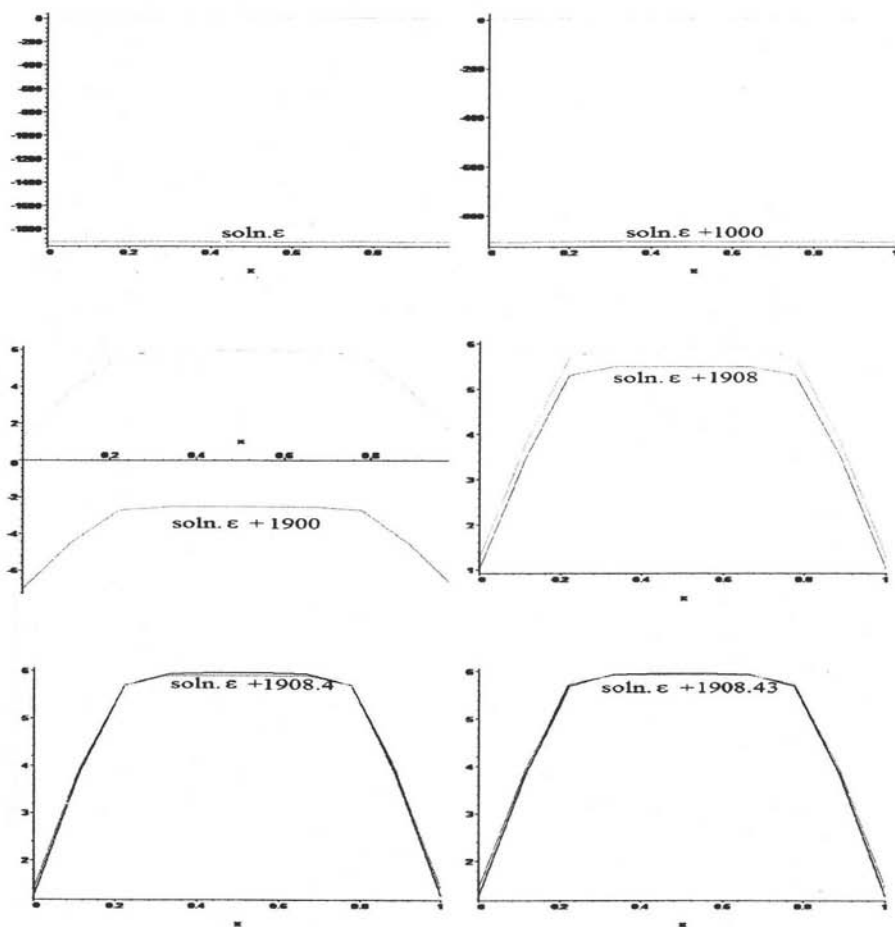


Figura 3.19: Comparación entre la solución del sistema 3.3 y la solución del sistema 3.2(soln. ϵ) más una constante.

En la Figura 3.19 se observa que la diferencia entre las soluciones de los sistemas 3.3 y 3.2 es prácticamente una constante (en este caso 1908.43), sin embargo, esta constante cambiará si la conductividad del electrolito se modifica y si la función $f(x)$ se altera bajo diferentes circunstancias⁵. A pesar de lo anterior dicha constante se utiliza sin problema alguno para cuando se modifica el número de nodos del dominio y cuando sólo se modifica la distribución de los ánodos (cuestiones, ambas de suma importancia en el tiempo de respuesta del programa) como se muestra en la Figura 3.20.

⁵Dicha constante se altera si se modifica la parte de $f(x)$ que modela la intensidad de corriente de los ánodos, el coeficiente de $f(x)$ que regula el tamaño de los ánodos y el número de ánodos del sistema, pero la constante no cambia si sólo se modifica en $f(x)$ la distribución de los ánodos. Es de gran importancia aclarar que la nueva constante depende proporcionalmente de la magnitud de la modificación hecha en los dos primeros factores mencionados en esta nota.

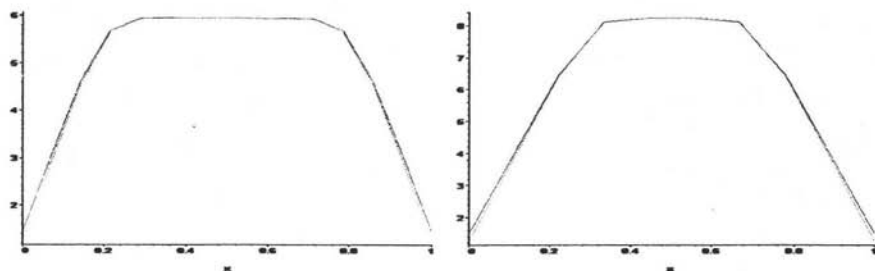


Figura 3.20: Comparación entre la solución del sistema 3.3 y la solución del sistema 3.2(soln. ϵ) utilizando 15 nodos (izq.) en el dominio y una función $f(x)$ (der.) como la mostrada en la Figura 3.21 respectivamente, adicionando la constante 1908.43 a la solución ϵ en ambos casos.

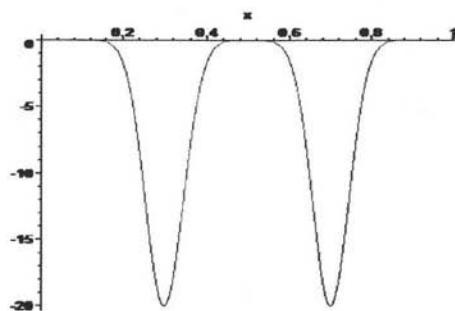


Figura 3.21: Función $f(x)$ utilizada para obtener la respuesta que se muestra en la Figura 3.20 (der.)

Con lo que respecta a la sección anterior se puede concluir que la solución encontrada al resolver el sistema 3.2 a pesar de ser una de una infinidad de posibles soluciones es de gran utilidad, ya que la constante que la separa de la respuesta física puede encontrarse de manera sencilla al resolver el sistema 3.3 con un mínimo número de nodos en el dominio -recordando que este sistema presenta la desventaja de requerir demasiado tiempo para proporcionar la solución- y de esta manera utilizar la solución de 3.2 más dicha constante como una excelente aproximación de la respuesta física del sistema.

Capítulo 4

Resultados

En esta sección se comparan los resultados obtenidos de manera numérica contra resultados experimentales que se obtuvieron en el laboratorio¹ para diferentes circunstancias físicas.

4.1 Situación física 1

Aquí se considera el problema de dos dimensiones que se generaliza en la Figura 4.1. En dicho problema se utilizan tres electrodos no consumibles de radio ϕ en una posición arbitraria y a cada uno de estos se le suministra una corriente constante utilizando una fuente externa, la frontera del dominio del sistema es metal de bajo carbón y el medio electrolítico es arena con agua salada.

Para modelar dicho sistema se consideró lo siguiente: la curva de polarización para el tanque fue $-i = \operatorname{arcsinh}(u)$, el dominio Ω fue un cuadrado,

¹Ver la sección de Metodología de los valores experimentales

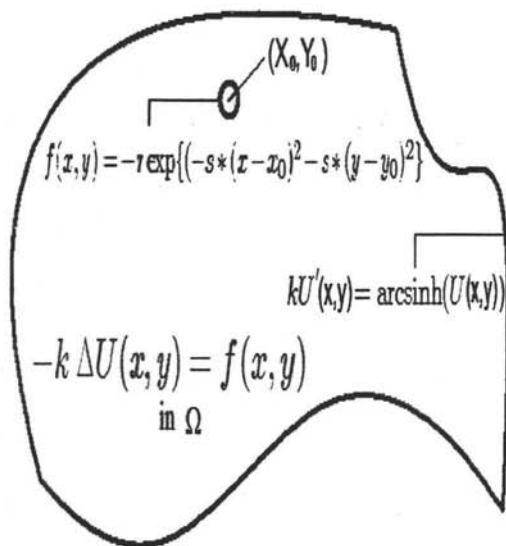


Figura 4.1: Condiciones de frontera, ecuación gobernante y la función $f(x, y)$

el cual se discretizó en 900 elementos de tamaño homogéneo. Para resolver el sistema matricial que se obtuvo al formular variacionalmente el problema de valores a la frontera correspondiente, se utilizó el método de Gauss-Seidel (B.1), la función que se utilizó para aproximar cada electrodo fue $f(x, y) = -r \exp\{-s * (x - x_0)^2 - s * (y - y_0)^2\}$, donde r es un factor que involucra el potencial o la corriente a la que se encuentra el electrodo, s es otro factor de proporcionalidad del diámetro del electrodo y x_0 y y_0 son las coordenadas del centro del electrodo. La Figura 4.2 muestra el modelo físico utilizado para obtener los potenciales eléctricos de manera experimental. En las Fig. 4.3, 4.4 y 4.5 se muestran los resultados obtenidos con el modelo físico y los resultados obtenidos con la modelación matemática en diferentes perspectivas (los valores del potencial eléctrico obtenidos en puntos específicos se muestran en la Tabla 1).

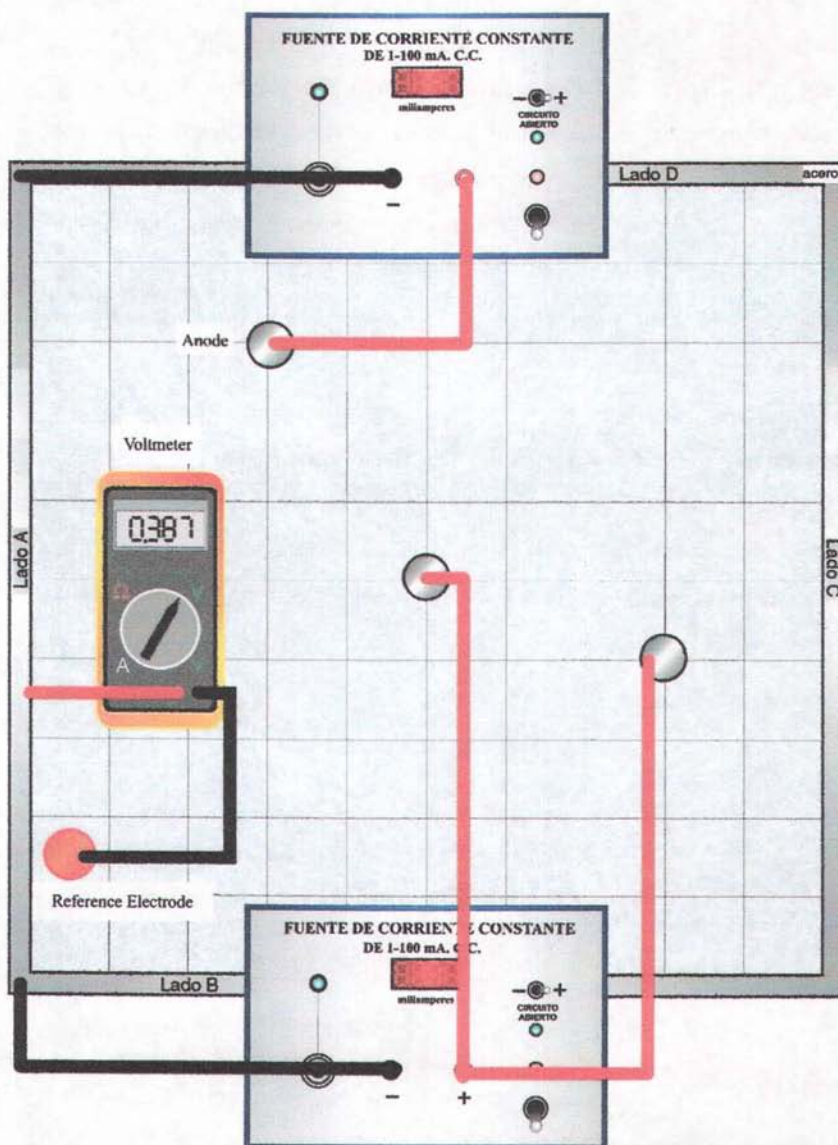


Figura 4.2: Modelo físico utilizado para corroborar los resultados numéricos.

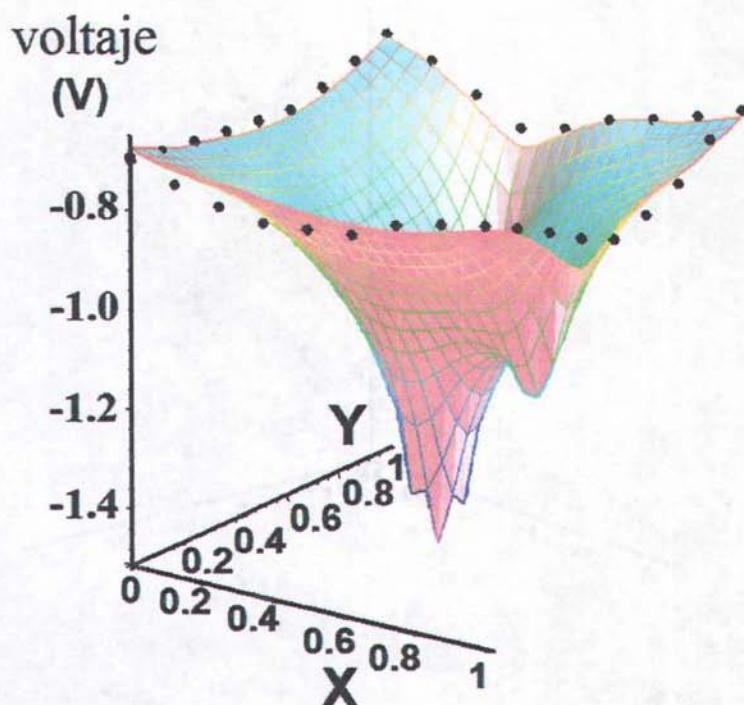


Figura 4.3: Comparación entre la solución matemática y los valores experimentales en la frontera de la situación física mostrada en la Fig. 4.2. Perspectiva I.

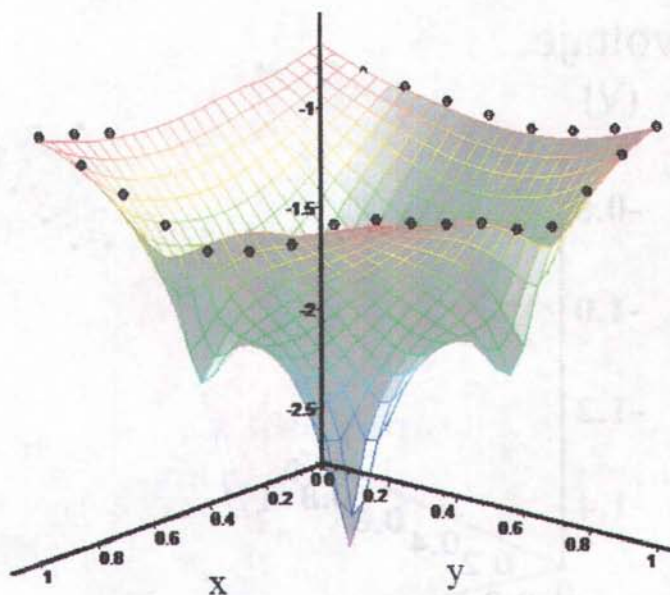


Figura 4.4: Comparación entre la solución matemática y los valores experimentales en la frontera de la situación física mostrada en la Fig. 4.2. Perspectiva II.

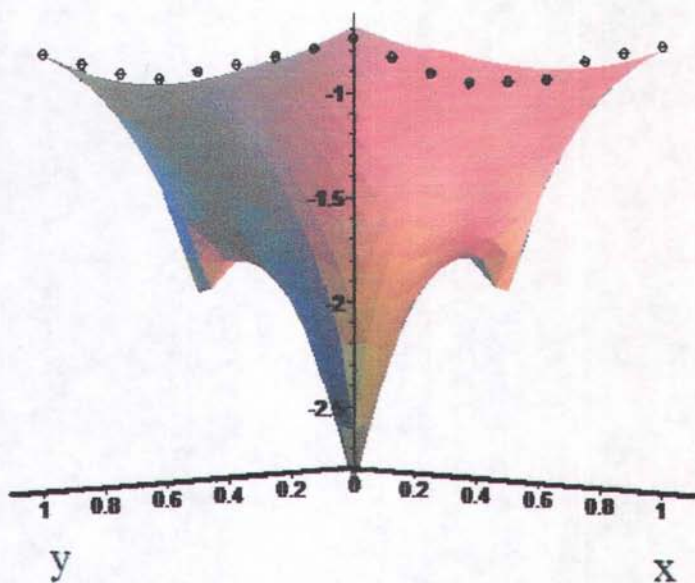


Figura 4.5: Comparación entre la solución matemática y los valores experimentales en la frontera de la situación física mostrada en la Fig. 4.2. Perspectiva III.

Tabla 1. Potenciales(V) vs. electrodo de calomel		
Medido	Calculado	Posición (según Fig.4.10)
-0.666	-0.691	1
-0.746	-0.767	2
-0.813	-0.810	3
-0.869	-0.868	4
-0.962	-0.980	5
-1.011	-0.943	6
-0.895	-0.940	7
-0.774	-0.787	8
-0.695	-0.700	9
-0.757	-0.787	10
-0.818	-0.850	11
-0.858	-0.881	12
-0.838	-0.870	13
-0.819	-0.848	14
-0.797	-0.800	15
-0.775	-0.759	16
-0.744	-0.680	17
-0.818	-0.736	18
-0.878	-0.760	19
-0.907	-0.821	20
-0.888	-0.805	21
-0.860	-0.807	22
-0.761	-0.785	23
-0.706	-0.742	24
-0.660	-0.678	25
-0.747	-0.775	26
-0.841	-0.930	27
-0.944	-1.000	28
-1.022	-0.975	29
-0.973	-0.890	30
-0.889	-0.840	31
-0.739	-0.770	32

4.2 Situación física 2

En este ejemplo se considera al mismo tanque del ejemplo anterior, pero con irregularidades de alta resistividad en el dominio. Con esto, se pretende analizar medios conductores más reales, en donde la conductividad eléctrica no sea homogénea. La condición considerada en el MEF fue que no hubiera interacción entre las $\phi_i(x, y)$ que involucran a las irregularidades y el resto de ellas.

Objetos de geometría regular e irregular con resistividad infinita fueron considerados en posiciones arbitrarias en el dominio y se procedió como en el ejemplo anterior. Los resultados se muestran en las Figuras 4.6, 4.7 y 4.8. En la Figura 4.6 se observa el efecto de diferentes irregularidades de baja conductividad (un cuadrado y una "L") en la distribución de potenciales eléctricos. La distorsión de las isolíneas es evidente cerca de la región de las irregularidades si se comparan con las isolíneas estándares de la Figura 4.7, sin embargo lejos de las irregularidades parecen desaparecer las distorsiones en las isolíneas y no se percibe un cambio drástico en la distribución de potenciales. Por ejemplo, si se considera que el tanque metálico está protegido catódicamente entre -0.85 y -1.0 V, se observa que sólo los lados "C" y "D" del tanque desde 0.2 hasta 0.6 unidades longitudinales cumplen con el requisito tanto en la Figura 4.6 como en la Figura 4.7, por lo que las irregularidades de baja conductividad que se encuentran relativamente lejos de las zonas protegidas catódicamente no afectan de manera dramática al sistema. Pero esto no se cumple cuando dichas irregularidades se encuentran relativamente cerca de zonas de interés. La Figura 4.8 muestra cuantitativamente que la zona del lado "D" con un potencial entre -0.85 y -1.00 V sólo corresponde a 0.23

unidades longitudinales (desde 0.2 hasta 0.43), es decir, por el efecto de la irregularidad se dejó de proteger desde 0.43 hasta 0.6 unidades longitudinales, casi la mitad de la zona originalmente protegida.

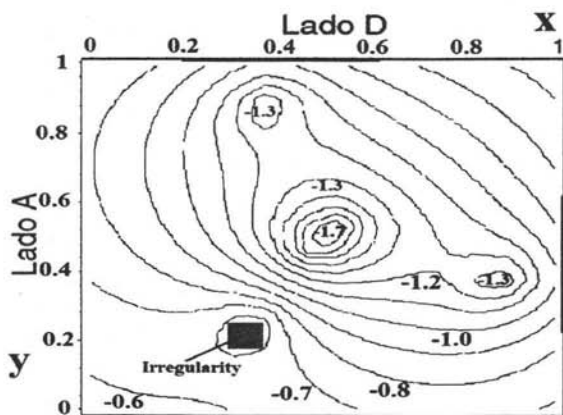
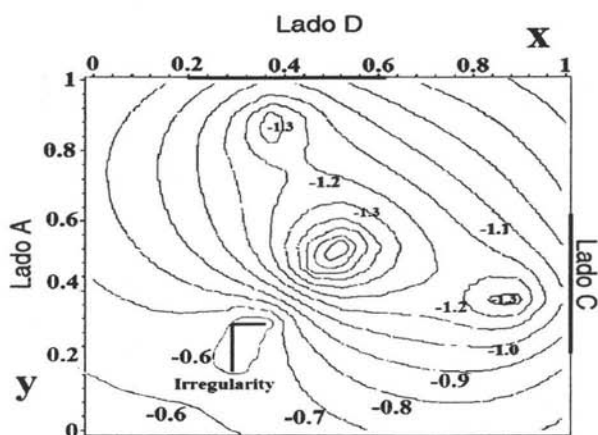


Figura 4.6: Curvas isopotenciales (V) con diferentes irregularidades. Las regiones de los lados C y D que se encuentran entre -0.85 y -1.00 V se indican con un segmento de línea gruesa.

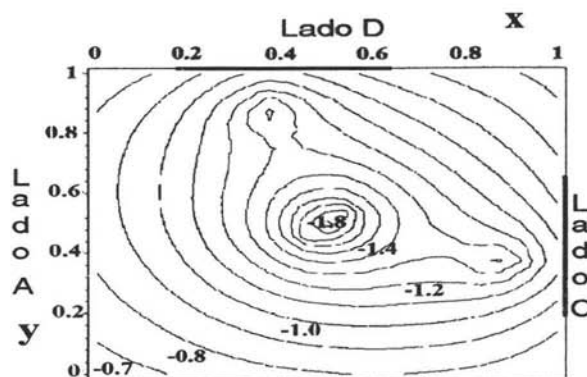


Figura 4.7: Curvas isopotenciales (V) sin irregularidades. Las regiones de los lados C y D que se encuentran entre -0.85 y -1.00 V se indican con un segmento de línea gruesa.

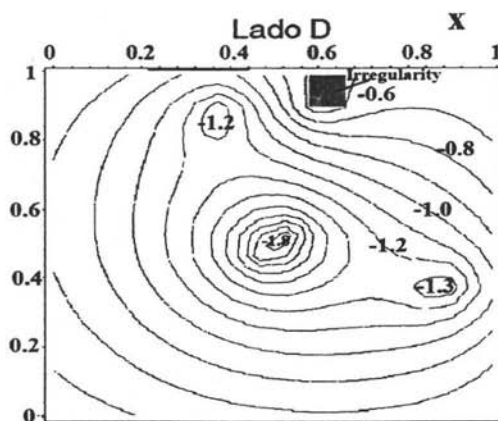


Figura 4.8: Curvas isopotenciales (V) con una irregularidad cuadrada cerca de la zona directamente afectada por un electrodo. La regione del lado D que se encuentra entre -0.85 y -1.00 V se indica con un segmento de línea gruesa.

4.3 Situación física 3

En este ejercicio se considera nuevamente al tanque original con la misma distribución de ánodos pero considerando un medio conductor no homogéneo, en realidad, un medio electrolítico que consta de tres secciones bien definidas con diferentes conductividades eléctricas entre sí como se muestra en la Figura 4.10.

La condición que se utilizó en el método del elemento finito fue modificar directamente la “ k ” que aparece en la formulación variacional del correspondiente problema según la región física (región 1, 2 ó 3), porque a pesar de que la conductividad es variable de manera global, lo es constante de manera particular en cada sección. Lo anterior evita trabajar con el tensor de conductividades que llevaría a manejar el operador divergencia-gradiente en lugar del operador laplaciano. Esto da una ventaja de flexibilidad al MEF sobre el MEFr, ya que las modificaciones se hacen directamente en el dominio del problema cosa que no se puede hacer en el MEFr porque éste opera en las fronteras del dominio.

Los resultados se muestran en la Figura 4.9. En el experimento 1, las regiones 1 y 3 de la Figura 4.10 tienen conductividades iguales pero menores a la de la región 2. En el experimento 2 las tres regiones tienen la misma conductividad eléctrica y en el experimento 3 las regiones 1 y 3 tienen las mismas conductividades pero mayores a la de la región 2.

La influencia de la conductividad en los perfiles del potencial mostrados en la Figura 4.9 enfatiza la importancia de considerar un medio electrolítico no homogéneo en la hipótesis del problema, ya que no asumir tal suposición, aun cuando la variación de la conductividad en el medio fuera relativamente

pequeña, podría causar un fatal e inaceptable error en la ingeniería de corrosión, ya que sin esta consideración se podría suponer fácilmente una zona metálica de interés no protegida catódicamente como una zona protegida, según se observa en la Figura 4.9 lado A, en donde la “banda” horizontal especifica una supuesta región de potenciales de PC, en donde se encuentran secciones de las fronteras de los experimentos uno y tres, sin embargo, en el experimento dos la sección metálica del lado considerado (lado A) está completamente fuera de dicha región de protección. Lo anterior proporciona una idea de la magnitud del problema cuando se simplifica un caso heterogéneo en un caso homogéneo.

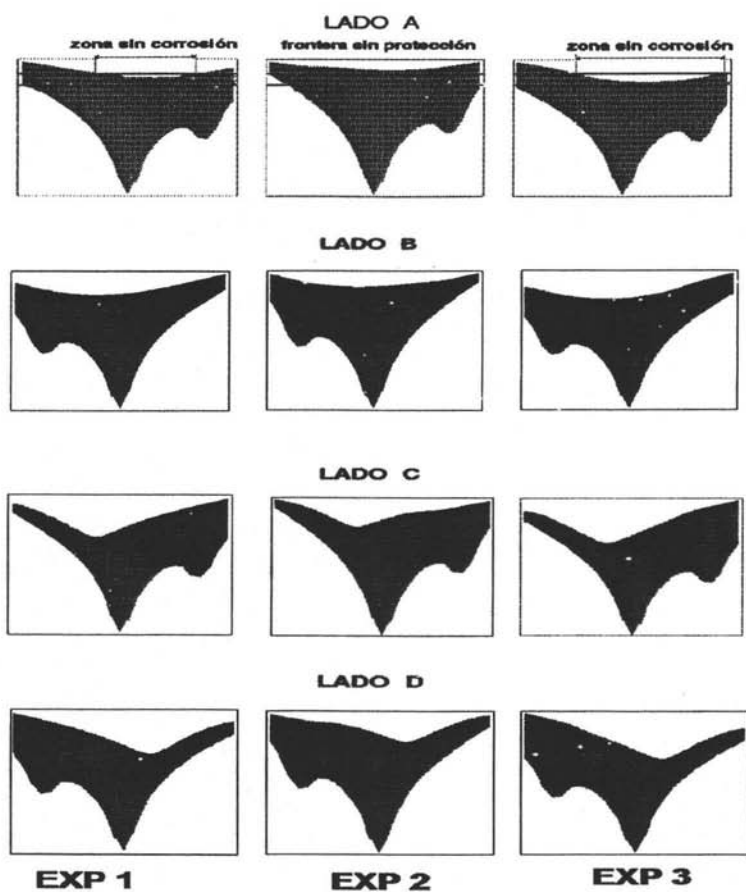


Figura 4.9: Perfiles de potenciales para los lados A,B,C y D donde se aprecia la influencia de la conductividad no constante.

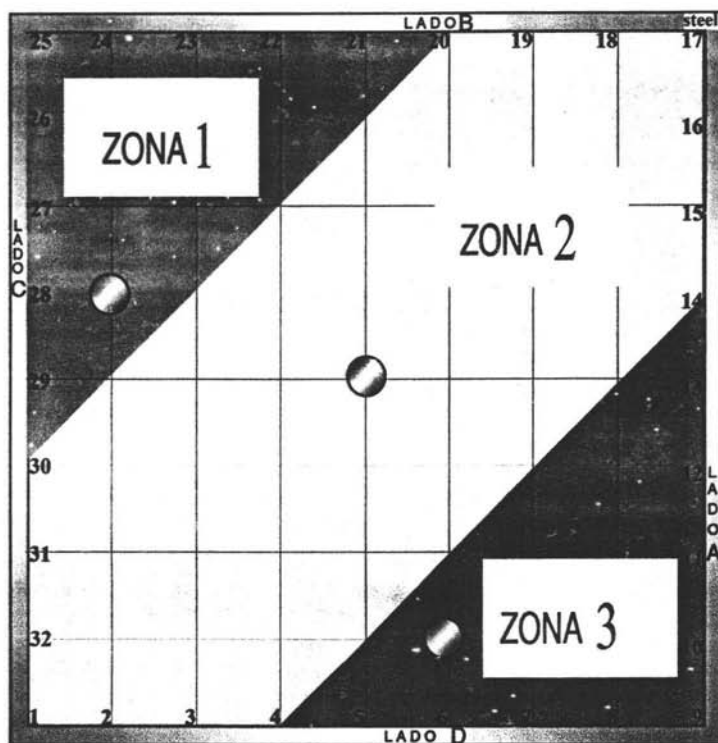


Figura 4.10: Especificación de las zonas utilizadas en la situación física 3.

4.4 Situación física 4

Aquí se trabajó básicamente con la misma idea de la situación física 1, sólo que en esta ocasión los electrodos sometidos a una corriente externa se colocaron afuera del tanque metálico y se aisló la frontera externa del dominio, es decir, se consideró nulo el flujo de corriente eléctrica hacia el exterior

del dominio del sistema. El modelo físico de esta situación se muestra en la Figura 5.3. Los resultados obtenidos se compararon con datos experimentales obtenidos en laboratorio, y ambos se muestran para diferentes perspectivas en las Figuras 4.11, 4.12, 4.13, 4.14 y 4.15 representando los valores experimentales de manera discreta. En dichas figuras se observa que la modelación efectuada es igualmente adecuada en situaciones de este tipo (electrodos externos a una estructura metálica cerrada) y que los valores predichos también son adecuados en el interior del dominio, es decir, en la situación física 1 sólo se mostraron los valores experimentales del potencial de la estructura metálica, mientras que ahora los datos experimentales se recogieron de diferentes zonas del dominio Ω mostrando gran semejanza con los valores predichos. Es importante aclarar que el cuadro interior Ω_2 no fue considerado como parte del dominio de interés, lo que se logró al anular las correspondientes partes de las funciones base que coincidían con dicha región.

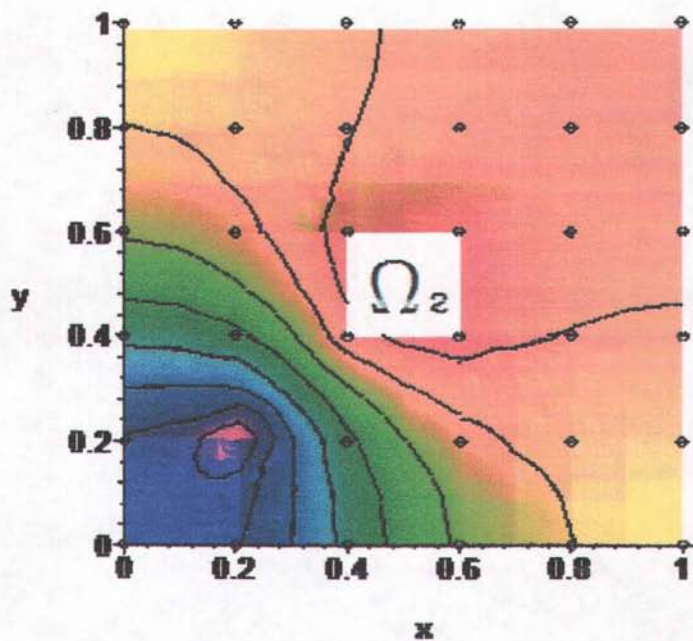


Figura 4.11: Comparación entre la solución matemática y los valores experimentales de la situación física 4, perspectiva I.

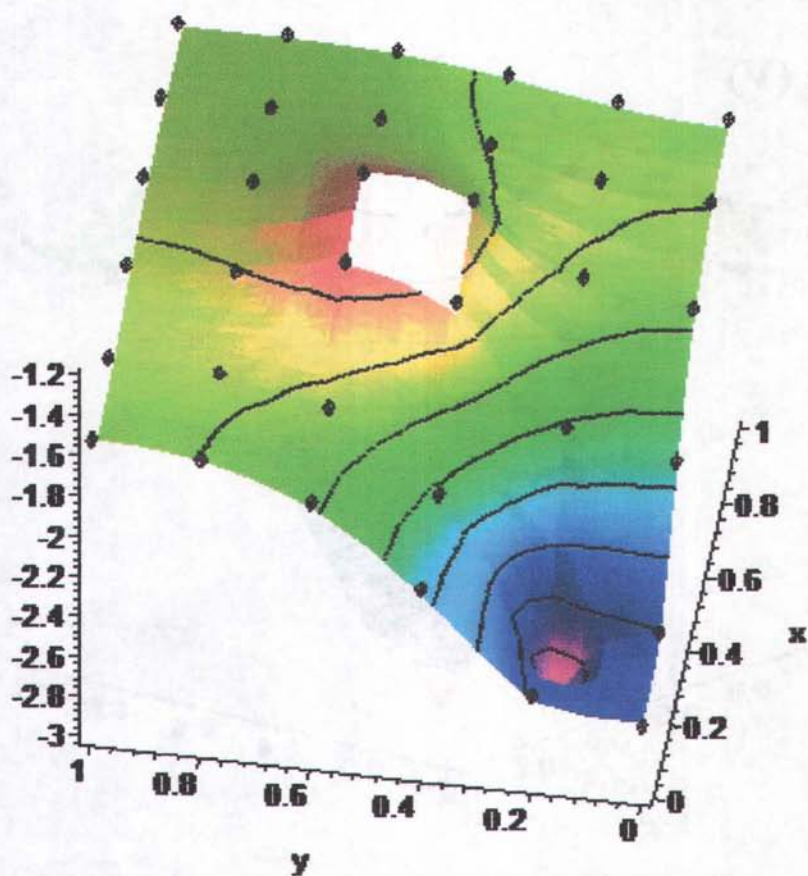


Figura 4.12: Comparación entre la solución matemática y los valores experimentales de la situación física 4, perspectiva II.

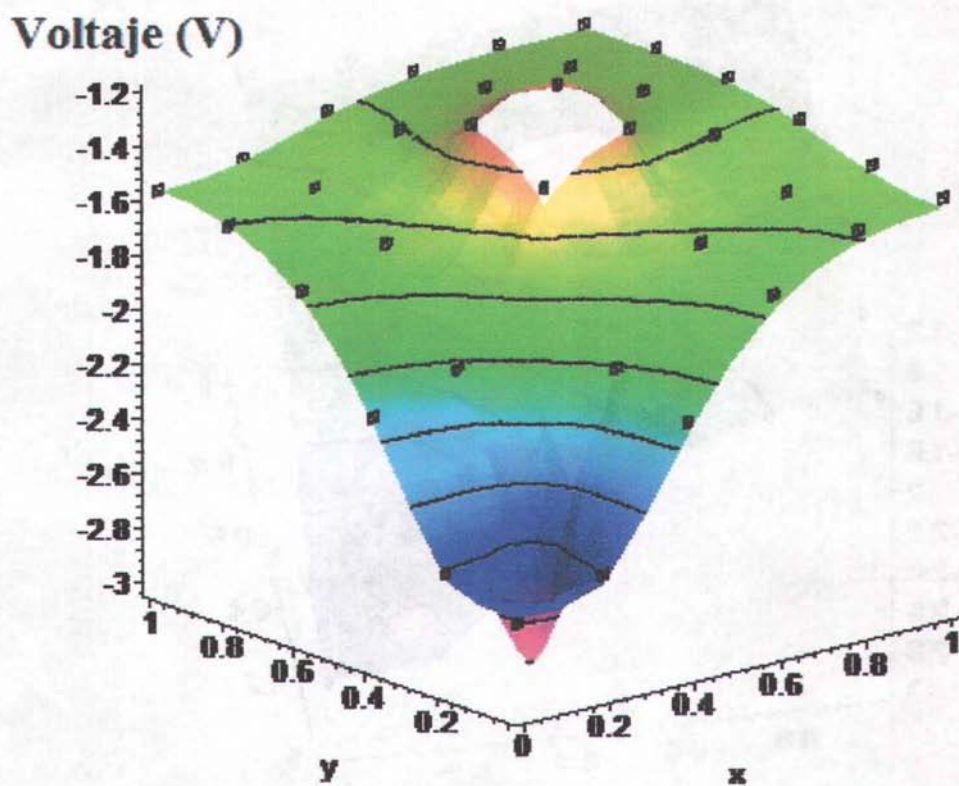


Figura 4.13: Comparación entre la solución matemática y los valores experimentales de la situación física 4, perspectiva III.

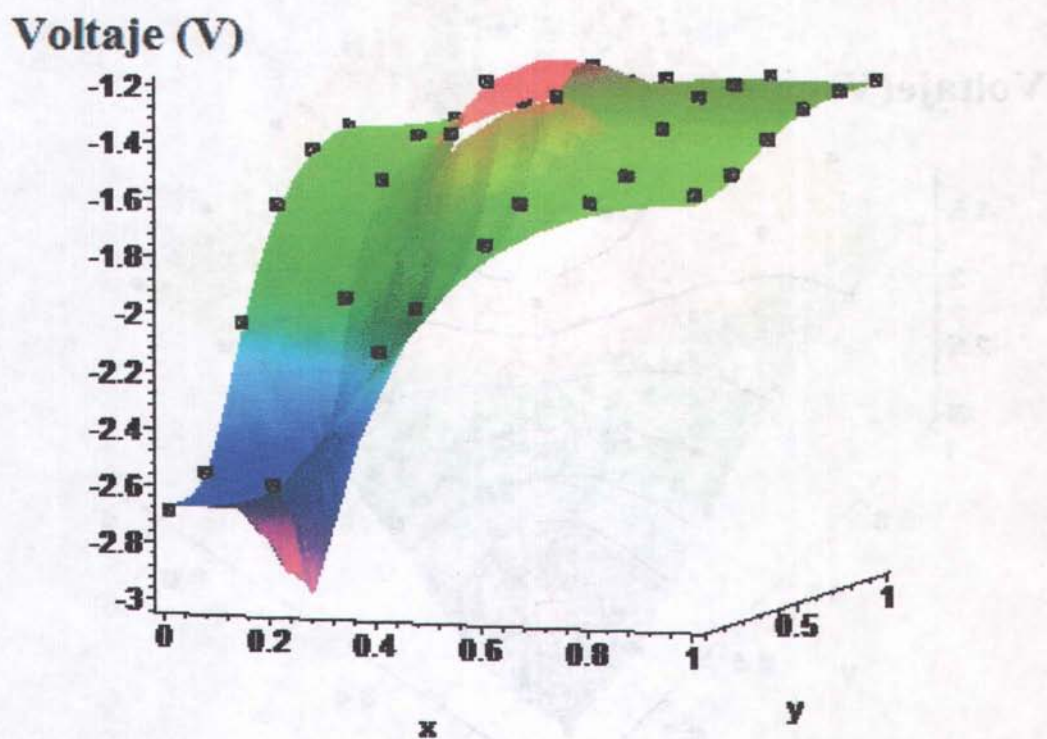


Figura 4.14: Comparación entre la solución matemática y los valores experimentales de la situación física 4, perspectiva IV.

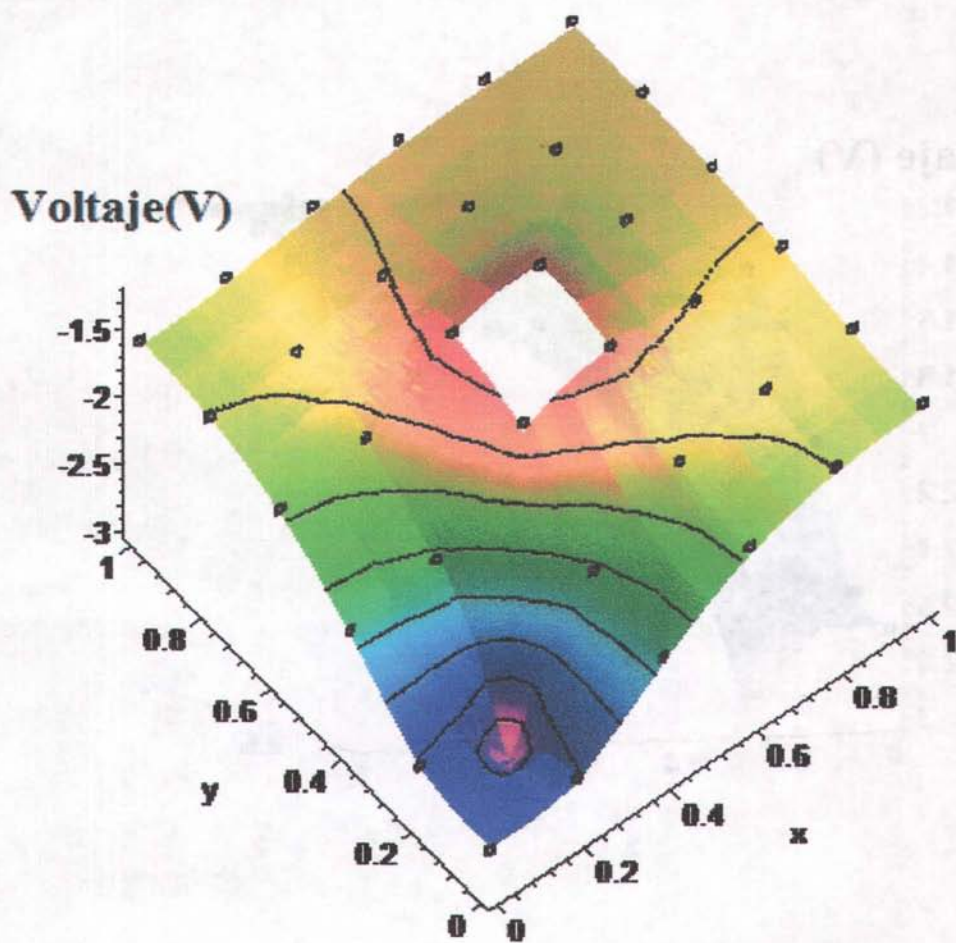


Figura 4.15: Comparación entre la solución matemática y los valores experimentales de la situación física 4, perspectiva V.

Capítulo 5

Metodología de los valores experimentales

En esta sección se especifica la manera en que se obtuvieron los resultados experimentales contra los cuales se compararon los resultados del programa. Se construyó un modelo físico dependiendo de la situación que se quiso modelar, la manera de obtener los valores experimentales del potencial se realizó de manera idéntica en todos los casos. Las situaciones físicas sólo requirieron que se consideraran cuatro aspectos

- i) el metal conductor.
- ii) el medio conductor.
- iii) el material de los ánodos inertes.
- iv) el contenedor de todo lo anterior.

Como metal conductor se seleccionó acero de bajo carbón ya que se sabe que su curva de polarización se comporta de manera muy semejante a la de la función $\operatorname{arcsinh}(x)$. El tipo de medio conductor varió con las situaciones físicas pasando por arena con agua salada, agua salada y granetina conductora¹. Como material anódico se utilizó acero inoxidable y como contenedor acrílico con madera plastificada como frontera², ver las Figuras 5.1, 5.2 y 5.3. Antes de proceder a introducir corriente eléctrica al modelo físico, se trazó una retícula que señalara la localización de los sitios en donde se determinarían los valores del potencial eléctrico. Dicha retícula se construyó con marcadores, los cuales estaban sujetos en la madera plástica que delimitaba al dominio Ω y sujetaban a la vez los hilos elásticos que atravesarían al dominio para trazar la retícula, como se ilustra en las Figuras 5.1, 5.2 y 5.3.

¹Los resultados obtenidos con este medio conductor no se muestran en este trabajo pero dicho medio sirvió para realizar algunas pruebas preliminares.

²Madera recubierta con plástico para evitar filtraciones de humedad.



Figura 5.1: Modelo físico con el cual se corroboraron los resultados numéricos (persp.I).



Figura 5.2: Modelo físico con el cual se corroboraron los resultados numéricos (persp.II).



Figura 5.3: Modelo físico utilizado en la situación física 4.

Cuando todo el modelo estuvo listo, se procedió a conectar los cables eléctricos en sus respectivos lugares, es decir, el polo negativo de la fuente de corriente constante que se utilizó se conectó a la estructura metálica a proteger, mientras que el polo positivo se conectó a los electrodos inertes de acero inoxidable. Luego de las conexiones se procedió a encender la fuente de corriente constante y a esperar un lapso para la estabilización de los potenciales, después de verificar que los potenciales se hubieran estabilizado se procedió a tomar lectura de los valores de los potenciales en cada uno de los lugares señalados por la retícula con ayuda de un electrodo de calomel y un voltmetro, como se muestra en la Figura 4.2.

Capítulo 6

Conclusiones

Este trabajo muestra un camino para modelar un sistema de PC formulando variacionalmente el correspondiente problema de valores a la frontera y resolviendo el sistema discreto resultante, utilizando el método del elemento finito. El problema original de valores a la frontera se modificó al utilizar una “perturbación” en las condiciones de frontera, esto es, al cambiar una condición de frontera tipo Neumann por una tipo Robin . Lo anterior se realizó con el fin de evitar trabajar con la condición de compatibilidad (2.3). Además se utilizó un proceso de iteración para satisfacer la condición $u' = \operatorname{arcsinh}(u)$. El problema anterior tiene una familia infinita de soluciones, las cuales dependen de la perturbación aplicada, y no se puede utilizar el hecho que entre más pequeña sea la perturbación utilizada más cercana estará la solución numérica de la respuesta física ya que el tamaño de perturbación tiene un límite, es decir, no se puede utilizar una perturbación tan pequeña como se desee ya que a partir de algún valor la convergencia del programa no se garantiza. Se encontró que estas soluciones están separadas de la solución

real por un constante.

Dicha constante se puede encontrar al resolver el problema en el tiempo, lo que beneficia en el conocimiento de la historia eléctrica del sistema, pero repercute directamente en el incremento del tiempo-máquina.

Los resultados numéricos mostraron gran semejanza con los valores determinados experimentalmente.

Los resultados corroboraron que las consecuencias pueden ser catastróficas cuando se considera a un medio conductor como homogéneo cuando en realidad no lo es .

Las desventajas encontradas en esta propuesta cuando se compara con algunos programas comerciales son el tiempo de respuesta y la representación matemática de los ánodos, ya que se encontraron severas dificultades cuando se intentó estudiar el efecto en el sistema de ánodos con geometrías complejas.

Las ventajas encontradas en esta propuesta cuando se compara con el método del elemento frontera son: la versatilidad en el uso de obstáculos y conductividades diferentes en el electrolito y el hecho de que la distribución del potencial en todo Ω se encuentra directamente sin la necesidad de cálculos suplementarios [10] .

Este trabajo sienta las bases para el posterior estudio de la distribución de corrientes eléctricas en un sistema de PC, esperando que las condiciones electroquímicas utilizadas garanticen la existencia de la solución cuando el método del elemento finito híbrido sea utilizado.

Como conclusión general se tiene que la hipótesis utilizada en este trabajo, la cual consiste en cambiar una condición tipo Neumann por una tipo Robin,

funciona de manera adecuada para predecir potenciales eléctricos en sistemas de PC.

Apéndice A

A.1 Continuidad y V -elipticidad de un operador

Un operador bilineal $a(\cdot, \cdot)$ es continuo si existe una constante $M > 0$ tal que $|a(u, v)| \leq M\|u\|_V\|v\|_V \forall u, v \in V$ y es V -elíptico si existe una constante $\alpha > 0$ tal que $a(v, v) \geq \alpha\|v\|_V^2$ para todo $v \in V$ donde V es el espacio de funciones admisibles y $\|\cdot\|_V$ la norma definida en este espacio.

Teorema 1. Sean V un espacio de Hilbert y $a(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ una forma bilineal, continua, V -elíptica sobre V . Además, sea $l : V \rightarrow \mathbb{R}$ una funcional lineal continua sobre V . Entonces

1. el problema de encontrar $u \in V$ que satisfaga

$$a(u, v) = l(v) = \langle l, v \rangle \quad \text{para toda } v \in V,$$

tiene una y sólo una solución;

2. la solución depende continuamente de los datos, en el sentido que

$$\|u\|_V \leq \frac{1}{\alpha} \|l\|_{V'},$$

donde $\|\cdot\|_{V'}$ es la norma en el espacio dual V' de V y α es la constante referida en la definición de V -elipticidad.

Demostración. La primera parte no es más que el teorema de Lax-Milgram¹. Ya que a es continuo y V -elíptico, cualquier funcional lineal acotado y en particular la funcional l puede expresarse en la forma $\langle l, v \rangle = a(u, v)$, donde u es única. La parte 2 se sigue de la definición de V -elipticidad con $v = u$ y utilizando la parte 1 del teorema, con lo que resulta

$$\alpha \|u\|_V^2 \leq a(u, u) = \langle l, u \rangle \leq \|l\|_{V'} \|u\|_V$$

aclarando que la última desigualdad se sigue del hecho que l está acotado, el resultado se obtiene al dividir entre $\|u\|$ □

La parte 2 del teorema puede expresarse en una forma alternativa si l está dada por

$$\langle l, v \rangle = \int_{\Omega} f v dx + \int_{\Gamma} g v ds$$

donde $f \in L^2(\Omega)$ y $g \in L^2(\Gamma)$; por lo que se tiene

$$\begin{aligned} \alpha \|u\|_V^2 &\leq a(u, u) = \langle l, u \rangle = (f, u)_{L^2(\Omega)} + (g, u)_{L^2(\Gamma)} \\ &\leq \|f\|_{L^2(\Omega)} \|u\|_{L^2(\Omega)} + \|g\|_{L^2(\Gamma)} \|u\|_{L^2(\Gamma)} \\ &\leq c \|u\|_{L^2(\Omega)} (\|f\|_{L^2(\Omega)} + \|g\|_{L^2(\Gamma)}) \end{aligned}$$

Que se logra al utilizar la desigualdad de Cauchy-Schwarz y el teorema de la traza en las respectivas desigualdades. Ya que V es un subespacio de un espacio de Sobolev $H^m(\Omega)$, la norma $\|\cdot\|_V$ es la H^m norma, y como $\|u\|_{L^2} \leq \|u\|_V$. Se tiene

$$\|u\|_V \leq (c/\alpha) (\|f\|_{L^2(\Omega)} + \|g\|_{L^2(\Gamma)})$$

¹La prueba a detalle de este teorema puede encontrarse en [29] y [36]

Apéndice B

B.1 Métodos iterativos para resolver sistemas lineales.

[31] En los análisis de circuitos y en la solución numérica de los problemas con valor en la frontera y de ecuaciones diferenciales parciales, como es el caso del análisis del sistema de PC, se presentan sistemas de ecuaciones lineales grandes con un alto porcentaje de elementos cero, los cuales se resuelven con métodos iterativos debido a que son eficientes tanto en almacenamiento de computadora como en el tiempo de cómputo. Los métodos iterativos rara vez se usan para resolver sistemas lineales de pequeña dimensión, ya que el tiempo necesario para conseguir una exactitud satisfactoria rebasa el que requieren los métodos directos, como el de la eliminación gaussiana. Un método iterativo con el cual se resuelve el sistema lineal $Ax = b$ comienza con una aproximación inicial $x^{(0)}$ a la solución x y genera una sucesión de vectores $\{x^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$ que converge a x . Los métodos iterativos traen consigo un proceso que convierte el sistema $Ax = b$ en otro equivalente de la forma

$x = Tx + c$ para alguna matriz fija T y un vector c .

Luego de seleccionar el vector inicial $x^{(0)}$ la sucesión de los vectores de la solución aproximada se genera calculando

$$x^{(k)} = Tx^{(k-1)} + c,$$

para cada $k = 1, 2, 3, \dots$

El método iterativo de Jacobi, como el de Gauss-Seidel, son métodos clásicos que datan de fines del siglo XVIII.

El método iterativo de Jacobi consiste en resolver la i -ésima ecuación en $Ax = b$ para x_i a fin de obtener (a condición de que $a_{ii} \neq 0$)

$$x_i = \sum_{j=1, j \neq i}^n \left(-\frac{a_{ij} x_j}{a_{ii}} \right) + \frac{b_i}{a_{ii}}, \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, n$$

y generar cada $x_i^{(k)}$ a partir de los componentes de $x^{(k-1)}$ cuando $k \geq 1$ por medio de

$$x_i^{(k)} = \frac{\sum_{j=1, j \neq i}^n \left(-a_{ij} x_j^{(k-1)} \right) + b_i}{a_{ii}}, \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, n \quad (\text{B.1})$$

El método se escribe en la forma $x^{(k)} = Tx^{(k-1)} + c$ separando A en sus partes diagonales y fuera de la diagonal. Para comprobar esto, sea D la matriz diagonal cuya diagonal es la misma que A , sea $-L$ la parte estrictamente triangular inferior de la parte A y sea $-U$ la parte estrictamente triangular superior de A . Con esta notación,

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

se divide en

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & a_{nn} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ -a_{21} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & -a_{n-1,n} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

$= D - L - U.$

Entonces transformamos la ecuación $Ax = b$, o $(D - L - U)x = b$, en

$$Dx = (L + U)x + b$$

y, si D^{-1} existe, es decir, si $a_{ii} \neq 0$ para cada i , entonces

$$x = D^{-1}(L + U)x + D^{-1}b.$$

Esto da origen a la forma matricial del método iterativo de Jacobi:

$$x^{(k)} = D^{-1}(L + U)x^{(k-1)} + D^{-1}b, \quad k = 1, 2, \dots \quad (\text{B.2})$$

Al introducir la notación $T_j = D^{-1}(L + U)$ y $c_j = D^{-1}b$, esta técnica tiene la forma

$$x^{(k)} = T_j x^{(k-1)} + c_j \quad (\text{B.3})$$

El método iterativo de Gauss-Seidel utiliza la ecuación

$$x_i^{(k)} = \frac{-\sum_{j=1}^{i-1} (a_{ij} x_j^{(k)}) - \sum_{j=i+1}^n (a_{ij} x_j^{(k-1)}) + b_i}{a_{ii}}, \quad (\text{B.4})$$

para cada $i = 1, 2, \dots, n$, en vez de la ecuación B.1 basándose en la suposición de que los valores $x_1^{(k)}, \dots, x_{i-1}^{(k)}$, que ya han sido calculados, probablemente sean mejores aproximaciones de las soluciones reales x_1, \dots, x_{i-1} que $x_1^{(k-1)}, \dots, x_{i-1}^{(k-1)}$ por lo que parece más razonable calcular $x_i^{(k)}$ por medio de los valores calculados más recientemente.

La forma matricial del método de Gauss-Seidel es

$$(D - L)x^{(k)} = Ux^{(k-1)} + b$$

o bien

$$x^{(k)} = (D - L)^{-1}Ux^{(k-1)} + (D - L)^{-1}b, \quad \text{para cada } k = 1, 2, \dots \quad (\text{B.5})$$

Si usamos $T_g = (D - L)^{-1}U$ y $c_g = (D - L)^{-1}b$ el método de Gauss-Seidel tiene la forma

$$x^{(k)} = T_g x^{(k-1)} + c_g. \quad (\text{B.6})$$

Para que la matriz triangular inferior $D - L$ sea no singular, es necesario y suficiente que $a_{ii} \neq 0$ para cada $i = 1, 2, \dots, n$.

Hay sistemas lineales donde el método de Jacobi converge y el de Gauss-Seidel no, y hay otros donde éste converge y aquél no.

A fin de estudiar la convergencia de los métodos generales de iteración, consideramos la fórmula

$$x^{(k)} = Tx^{(k-1)} + c, \quad \text{para cada } k = 1, 2, \dots,$$

donde $x^{(0)}$ es arbitrario.

Apéndice C

C.1 Código del programa en Maple

```
for j from 0 by M to (M)*(N-1) do
for i from 1 to M do
x(j+i):=(j*(deltax/(M-2))+deltax,(i-1)*deltay+deltay):
od:od:
zz:= deltax*deltay:
xx:=deltax/deltay:
yy:=deltay/deltax:
k:=Matrix(1..M*N,1..M*N):
for j from 0 by M to M*(N-3) do
for i from M+2+j to 2*M-1+j do
k[i,i]:=2*(xx+yy):
k[i,i-1]:=-xx:
k[i,i+1]:=-xx:
k[i,i+M]:=-yy:
k[i,i-M]:=-yy:
```

```

od:od:
for i from 2 to M-1 do
k[i,i]:=(yy+xx)-SSS*0/(kk*(N-1)):
k[i,i+1]:=-xx/2-SSS*0/(kk*(N-1)):
k[i,i-1]:=-xx/2-SSS*0/(kk*(N-1)):
k[i,M+i+1]:=-SSS*0/(kk*(N-1)):
k[i,M+i]:=-yy-SSS*0/(kk*(N-1)):
od:
for i from M*(N-1)+2 to M*N-1 do
k[i,i]:=(yy+xx)-SSS/(kk*(N-1)):
k[i,i+1]:=-xx/2-SSS/(kk*(N-1)):
k[i,i-1]:=-xx/2-SSS/(kk*(N-1)):
k[i,i-M]:=-yy-SSS/(kk*(N-1)):
k[i,i-M-1]:=-SSS/(kk*(N-1)):
od: for i from M+1 by M to M*N-2*M+1 do
k[i,i]:=(xx+yy)-SSS*0/(kk*(N-1)):
k[i,i+1]:=-xx-SSS*0/(kk*(N-1)):
k[i,i-M]:=-yy/2-SSS*0/(kk*(N-1)):
k[i,M+i+1]:=-SSS*0/(kk*(N-1)):
k[i,M+i]:=-yy/2-SSS*0/(kk*(N-1)):
od:
for i from 2*M by M to N*M-M do
k[i,i]:=(xx+yy)-SSS*0/(kk*(N-1)):
k[i,i+M]:=-yy/2-SSS*0/(kk*(N-1)):
k[i,i-M]:=-yy/2-SSS*0/(kk*(N-1)):

```

```

k[i,i-1]:=-xx-SSS*0/(kk*(N-1)):
k[i,i-M-1]:=-SSS*0/(kk*(N-1)):
od:
k[1,1]:=0.5*(yy+xx)-SSS*0/(kk*(N-1)):
k[1,2]:=-xx/2-SSS*0/(kk*(N-1)):
k[1,1+M]:=-yy/2-SSS*0/(kk*(N-1)):
k[1,M+2]:=-SSS*0/(kk*(N-1)):
k[M,M]:=0.5*(yy+xx)-SSS*0/(kk*(N-1)):
k[M,M-1]:=-xx/2-SSS*0/(kk*(N-1)):
k[M,2*M]:=-yy/2-SSS*0/(kk*(N-1)):
k[M,2*M-1]:=-SSS*0/(kk*(N-1)):
k[N*M,N*M]:=0.5*(yy+xx)-SSS/(kk*(N-1)):
k[N*M,N*M-1]:=-xx/2-SSS/(kk*(N-1)):
k[N*M,N*M-M]:=-yy/2-SSS/(kk*(N-1)):
k[N*M,N*M-M-1]:=-SSS/(kk*(N-1)):
k[N*M-M+1,N*M-M+1]:=0.5*(yy+xx)-SSS/(kk*(N-1)):
k[N*M-M+1,N*M-2*M+1]:=-yy/2-SSS/(kk*(N-1)):
k[N*M-M+1,N*M-M+2]:=-xx/2-SSS/(kk*(N-1)):
k[N*M-M+1,N*M-2*M+2]:=-SSS/(kk*(N-1)):
aa:=0:bb:=1:mm:=30:nn:=30:cc:=0:dd:=Vector(1..M*N):
ss:=Vector(1..M*N):
gg:=Vector(1..M*N):lll:=Vector(1..M*N):
for i from 1 to (N-2) do
for j from 1 to (M-2) do
f:=(x,y)-zz*x*(QA(deltax*(i-y),deltay*(x+j-1)));

```



```

hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:
for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm;
K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
for jj from 1 to (mm-1) do
Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):
if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:
od:
L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
if ii=0 then J1:=J1+L
elif ii=nn then J1:=J1+L
elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:
od:b[1]:=(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3):
f:=(x,y)-;zz*(1-x-y)*QA(deltax*(i+y),deltay*(-x+j));
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:
for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm;
K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
for jj from 1 to (mm-1) do
Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):
if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:

```

```

od:
L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
if ii=0 then J1:=J1+L
elif ii=nn then J1:=J1+L
elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:
od:b[2]:=(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3):
f:=(x,y)-i:zz*y*(QA(deltax*(1+i-y),deltay*(x+j)));
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:
for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm;
K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
for jj from 1 to (mm-1) do
Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):
if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:
od:
L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
if ii=0 then J1:=J1+L
elif ii=nn then J1:=J1+L
elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:
od:b[3]:=(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3):

```

```

f:=(x,y)-izz*x*QA(deltax*(i+y),deltay*(-x+j+1));
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:
for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm;
K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
for jj from 1 to (mm-1) do
Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):
if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:
od:
L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
if ii=0 then J1:=J1+L
elif ii=nn then J1:=J1+L
elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:
od:b[4]:=(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3):
f:=(x,y)-izz*(1-x-y)*QA(deltax*(i-y),deltay*(x+j));
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:
for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm;
K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
for jj from 1 to (mm-1) do
Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):

```

```

if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:
od:
L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
if ii=0 then J1:=J1+L
elif ii=nn then J1:=J1+L
elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:
od:b[5]:=(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3):
f:=(x,y)-jzz*y*QA(deltax*(-1+i+y),deltay*(-x+j));
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:
for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm;
K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
for jj from 1 to (mm-1) do
Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):
if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:
od:
L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
if ii=0 then J1:=J1+L
elif ii=nn then J1:=J1+L
elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:

```

```

od:
b[6]:=(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3):
dd[(i)*(M)+j+1]:=b[6]+b[5]+b[4]+b[3]+b[2]+b[1]:
od:od:
for oo from 1 to 8 do
for j from 1 to (M-2)
do
i:=0:
f:=(x,y)-jzz*(1-x-y)*QA(deltax*(i+y),deltay*(-x+j-i));
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:
for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm;
K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
for jj from 1 to (mm-1) do
Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):
if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:
od:
L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
if ii=0 then J1:=J1+L
elif ii=nn then J1:=J1+L
elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:
od:b[2]:=(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3):

```

```

f:=(x,y)-jzz*y*QA(deltax*(1+i-y),deltay*(x+j));
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:
for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm;
K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
for jj from 1 to (mm-1) do
Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):
if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:
od:
L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
if ii=0 then J1:=J1+L
elif ii=nn then J1:=J1+L
elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:
od:b[3]:=(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3):
f:=(x,y)-jzz*x*QA(deltax*(i+y),deltay*(-x+j+1));
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:
for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm; K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
for jj from 1 to (mm-1) do
Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):
if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:

```

```

od:
L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
if ii=0 then J1:=J1+L
elif ii=nn then J1:=J1+L
elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:
od:b[4]:=(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3):
dd[(i)*(M)+j+1]:=b[4]+b[3]+b[2]
+0*arcsinh(III[(i)*(M)+j+i])/(kk*(N-1)): od:
for j from 1 to (M-2)
do
i:=N-1:
f:=(x,y)-jzz*(1-x-y)*QA(deltax*(i-y),deltay*(x+j));
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:
for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm;
K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
for jj from 1 to (mm-1) do
Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):
if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:
od:
L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3
if ii=0 then J1:=J1+L

```

```

elif ii=nn then J1:=J1+L
elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:
od:b[5]:=(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3):
f:=(x,y)-_jzz*y*QA(deltax*(-1+i+y),deltay*(-x+j)):
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:
for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm;
K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
for jj from 1 to (mm-1) do
Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):
if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:
od:
L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
if ii=0 then J1:=J1+L
elif ii=nn then J1:=J1+L
elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:
od:
b[6]:=(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3):
f:=(x,y)-_jzz*x*QA(deltax*(i-y),deltay*(x+j-1));
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:

```



```

for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm;
K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
for jj from 1 to (mm-1) do
Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):
if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:
od:
L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
if ii=0 then J1:=J1+L
elif ii=nn then J1:=J1+L
elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:
od:b[1]:=(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3):
dd[(i)*(M)+j+1]:=b[1]+b[6]+b[5]
+arcsinh(lll[(i)*(M)+1])/(kk*(N-1)): od:
for i from 1 to (N-2) do
j:=0:
∫ f:=(x,y)-∫zz*y*QA(deltax*(1+i-y),deltay*(x+j)):
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:
for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm;
K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;

```

```

for jj from 1 to (mm-1) do
  Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):
  if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:
od:
L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
if ii=0 then J1:=J1+L
elif ii=nn then J1:=J1+L
  elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
  elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:
od:b[3]:=(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3):
f:=(x,y)-zz*x*QA(deltax*(i+y),deltay*(-x+j+1)):
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:
for ii from 0 to nn do
  X:=aa+ii*hh;
  HX:=(1-X-cc)/mm;
  K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
  for jj from 1 to (mm-1) do
    Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):
    if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:
  od:
  L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
  if ii=0 then J1:=J1+L
  elif ii=nn then J1:=J1+L
  elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L

```

```

elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:
od:b[4]:=(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3):
f:=(x,y)-i,zz*(1-x-y)*QA(deltax*(i-2*y),deltay*(x+j-1)):
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0: for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm;
K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
for jj from 1 to (mm-1) do
Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):
if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:
od:
L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
if ii=0 then J1:=J1+L
elif ii=nn then J1:=J1+L
elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:
od:b[5]:=(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3):
dd[(i)*(M)+j+1]:=b[3]+b[4]+b[5]
+0*arcsinh(lll[(i)*(M)+j+1])/(kk*(N-1)): od:
for i from 1 to (N-2) do
j:=M-1:
f:=(x,y)-i,zz*x*QA(deltax*(i-y),deltay*(x+j-1)):
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:

```

```

for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm;
K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
for jj from 1 to (mm-1) do
Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):
if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:
od:
L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
if ii=0 then J1:=J1+L
elif ii=nn then J1:=J1+L
elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:
od:b[1]:=(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3):
f:=(x,y)-i*zz*(1-x-y)*QA(deltax*(i+y),deltay*(-x+j)):
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:
for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm;
K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
for jj from 1 to (mm-1) do
Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):
if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:
od:

```

```

L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
if ii=0 then J1:=J1+L
elif ii=nn then J1:=J1+L
elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:
od:b[2]:=(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3):
f:=(x,y)-jzz*y*QA(deltax*(-1+i+y),deltay*(-x+j)):
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:
for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm;
K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
for jj from 1 to (mm-1) do
Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):
if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:
od:
L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
if ii=0 then J1:=J1+L
elif ii=nn then J1:=J1+L
elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:
od:
b[3]:=(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3):

```

```

dd[(i)*(M)+j+1]:=b[1]+b[2]+b[3]
+0*arcsinh(III[(i)*(M)+j+1])/(kk*(N-1)): od:
f:=(x,y)-jzz*(y*(QA(deltax*(1-y),deltay*deltax))
+x*(QA(deltax*y,deltay*(-x+ 1)))):
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:
for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm;
K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
for jj from 1 to (mm-1) do
Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):
if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:
od:
L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
if ii=0 then J1:=J1+L
elif ii=nn then J1:=J1+L
elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:
od:dd[1]:=
hh*(J1+2*J2+4*J3)/3)
+0*arcsinh(III[1])/(kk*(N-1)):
f:=(x,y)-jy*QA(deltax*(-1+N-1+y),deltay*(-x+M-1))+
x*(QA(deltax*(N-1-y),deltay*(x+M-1-1))):
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:

```

```

for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm;
K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
for jj from 1 to (mm-1) do
Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):
if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:
od:
L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
if ii=0 then J1:=J1+L
elif ii=nn then J1:=J1+L
elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:
od:
dd[M*N]:=zz*(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3)
+arcsinh(lll[M*N])/(kk*(N-1)):
f:=(x,y)-i(1-x-y)*(QA(deltax*y,deltay*(-x+M-1))):
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:
for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm;
K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
for jj from 1 to (mm-1) do
Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):

```

```

if type(jj,even)=true then K2:=K2+Q else K3:=K3+Q fi:
od:
L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
if ii=0 then J1:=J1+L
elif ii=nn then J1:=J1+L
elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:
od:
dd[M]:=-zz*1*(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3)
+0*arcsinh(lll[M])/(kk*(N-1)):
f:=(x,y)-i(1-x-y)*(QA(deltax*(N-1-y),deltay*x)):
hh:=(bb-aa)/nn:J1:=0:J2:=0:J3:=0:
for ii from 0 to nn do
X:=aa+ii*hh;
HX:=(1-X-cc)/mm;
K1:=f(X,cc)+f(X,1-X);K2:=0;K3:=0;
Y:=cc+jj*HX:Q:=f(X,Y):
od:
L:=(K1+2*K2+4*K3)*HX/3:
if ii=0 then J1:=J1+L
elif ii=nn then J1:=J1+L
elif type(ii,even)=true then J2:=J2+L
elif type(ii,even)=false then J3:=J3+L
fi:

```



```

od:
dd[M*(N-1)+1]:=zz*(hh*(J1+2*J2+4*J3)/3)
+arcsinh(III[M*(N-2)+1])/(kk*(N-1)):
ss:=dd*0.5:
for RR from 0 to 200 do
gg:=ss:
for j from 0 to N-3 do
for i from (M+2+j*M) to (2*M-1+j*M) do
ss[i]:=(dd[i]-k[i,i+1]*gg[i+1]-k[i,i+M]*gg[i+M]-k[i,i-M]*gg[i-M]
-k[i,i-1]*gg[i-1]-k[i,i+M+1]*gg[i+M+1]-k[i,i-1-M]*gg[i-1-M])/k[i,i]:
od:
for i from 2 to M-1 do
ss[i]:=((dd[i]-k[i,i-1]*gg[i-1]-k[i,i+1]*gg[i+1]-k[i,i+M]*gg[i+M])/k[i,i]):
od:
for i from M*(N-1)+2 to M*N-1 do
ss[i]:=(dd[i]-k[i,i-1]*gg[i-1]-k[i,i+1]*gg[i+1]-k[i,i-M]*gg[i-M]
-k[i,i-M-1]*gg[i-M-1])/k[i,i]:
od:
for i from 2*M by M to M*N-M do
ss[i]:=(dd[i]-k[i,i-1]*gg[i-1]-k[i,i+M]*gg[i+M]-k[i,i-M]*gg[i-M]
-k[i,i-M-1]*gg[i-M-1])/k[i,i]:
od: for i from M+1 by M to M*N-2*M+1 do
ss[i]:=(dd[i]-k[i,i+1]*gg[i+1]-
k[i,i+M]*gg[i+M]-k[i,i-M]*gg[i-M]-
k[i,i+M+1]*gg[i+M+1])/k[i,i]:

```

od:

od:

ss[1]:=(dd[1]-k[1,2]*gg[2]-k[1,M+1]*gg[M+1]-
k[1,M+2]*gg[M+2])/k[1,1]:

ss[M]:=(dd[M]-k[M,M-1]*gg[M-1]
-k[M,2*M]*gg[2*M])/k[M,M]:

ss[N*M-M+1]:=(dd[N*M-M+1]-
k[N*M-M+1,N*M-M+1+1]*gg[N*M-M+1+1]-
k[N*M-M+1,N*M-2*M+1]*gg[N*M-2*M+1])/k[N*M-M+1,N*M-M+1]:

s[M*N]:=(dd[M*N]-k[M*N,N*M-1]*gg[N*M-1]-
k[M*N,M*N-M]*gg[M*N-M]-
k[M*N,M*N-M-1]*gg[M*N-M-1])/k[M*N,M*N]:

print(ss[11],ss[15],RR):

od:

print(ss[11],ss[15],oo):

for i from 1 to N*M do

lll[i]:=ss[i]:od:

od:

Bibliografía

- [1] NISANCIOGLU, K. *Modelling for cathodic protection*
Ellis Horwood, Great Britain, 1993, pp.229-247.
- [2] TELLES, J. AND MANSUR, W. *Numerical simulation of a cathodically protected semisubmersible platform using the PROTCAT system.*
Corrosion, 1990, pp. 513-518.
- [3] MUNN, R. AND DEVEREUX, O. *Numerical modeling and solution of galvanic corrosion systems.*
Corrosion, Agosto 1991, pp. 612-617.
- [4] AOKI, S. ET AL *Analysis of potential and current density distributions using a boundary element method*
Corrosion, Mayo 1988, pp. 926-932.
- [5] HEIDERSBACH, R. *Cathodic protection*
Metals hand book, ASM international, Vol. 13 1987.
- [6] MORGAN, J. *Cathodic protection*

National Association of Corrosion Engineers, Houston Texas, segunda edición 1993.

- [7] DENNY, A.J. *Principles and prevention of corrosion*
Prentice Hall, USA 1996.
- [8] CRUNDWELL, R. *Sacrificial anodes-old and new*
Cathodic protection; theory and practice, Ellis Horwood Limited
1993.
- [9] NACE PUBLICATION *Corrosion Basics An Introduction*
NACE, Texas 1984.
- [10] WARNER, M, A *Application of numerical analysis techniques.*
Cathodic protection and practice, the present status, Walsgrave
Coventry 1982.
- [11] KASPER, R. AND APRIL, M *Electrogalvanic finite element analysis of partially protected marine structures.*
Corrosion, Mayo 1983, pp. 181-188.
- [12] STRØMMEN, R.D *Computer modeling of offshore Cathodic Protection Systems: Method and experience*
computer modelling in corrosion ASTM 1154, Ed., American society for testing and materials, Philadelphia 1992.

- [13] ORAZEM, M. E., ET AL *Cathodic protection: Modeling and experiment.*
NACE international, Publication, USA, 1999, Proceedings of the corrosion, Preface.
- [14] GARTLANG, P. O. ET AL *Computer modelling of offshore CP systems for 15 years: what have we learned?.*
NACE international, Publication, USA, 1999, Proceedings of the corrosion, pp. 17-21.
- [15] AOKI, S. AND KENJI, A. *Optimization of cathodic protection system by BEM.*
Elsevier, 1997, pp. 147-156.
- [16] AOKI, ET AL *Boundary Element Analysis of cathodic protection for complicated structures.*
NACE international, Publication, USA, 1999, Proceedings of the corrosion, pp. 45-65.
- [17] BRICHAU, F. AND DECONINCK, J. *A numerical model for cathodic protection of buried pipes.*
Corrosion, Enero 1994, pp. 39-49.
- [18] BRASIL, S.L.D.C. ET AL *A boundary element study of cathodic protection systems in high resistivity electrolytes.*
NACE international, Publication, USA, 1999, Proceedings of the corrosion, 1999, pp. 153-172.

- [19] CARVALHO S. ET AL *On the effect of some critical parameters in cathodic protection systems: a numerical/experiment study.*

computer modelling in corrosion ASTM 1154, Ed., American society for testing and materials, philadelphia, 1992, pp. 277-291.

- [20] ORAZEM, M. E. ET AL *Mathematical models for cathodic protection of an underground pipeline with coating holidays: Part 1- Theoretical development.*

Corrosion, Abril 1997, pp.264-272.

- [21] ORAZEM, M. E. ET AL *Mathematical models for cathodic protection of an underground pipeline with coating holidays: Part 2- Case studies of parallel anode cathodic protection systems.*

Corrosion, Junio 1997, pp.427-436.

- [22] KENNELLEY, K. ET AL *Current and potential distribution on a coated pipeline with holidays Part I-Model and experimental verification.*

Corrosion, Marzo 1993, pp.199-210.

- [23] ORAZEM, M. E. ET AL *Current and potential distribution on a coated pipeline with holidays Part II-Comparison of the effects of discrete and distributed holidays.*

Corrosion, Marzo 1993, pp.211-219.

- [24] DE GIORGI, V. G. ET AL *Numerical simulation of impressed current cathodic protection (ICPP) systems using boundary element methods.*
computer modelling in corrosion ASTM 1154, Ed., American society for testing and materials, philadelphia, 1992, pp. 277-291.
- [25] MONTOYA, R. ET AL *Mathematical simulation of a cathodic protection system by finite element method.*
Materials and corrosion, Junio 2005, pp.404-411.
- [26] MILTIADOU, P. AND WROBEL, L.C. *Analysis of potential and current density distributions using a boundary element method*
Corrosion, Noviembre 2002, pp. 912-921.
- [27] HAUSER WALTER *Introduction to the principles of electromagnetism*
Addison-Wesley Publishing company, USA, 1971.
- [28] HALLIDAY AND RESNICK *Física, Vol. II.*
Compañía editorial continental, México, 1980.
- [29] REDDY, B. D. *Introductory functional analysis*
Springer Verlag, London, 1998.
- [30] HOLSER, R. A. ET AL *Current distributions in galvanically coupled and cathodically protected tubes.*
Corrosion, Abril 1992, pp.332-340.

- [31] BOURDEN AND DOUGLAS *Análisis numérico*
Thomson and learning, México 2002.
- [32] REKTORYS, K *Variationals Methods in Mathematics, Science and Engineering*
Prentice Hall, Czechoslovakia, 1980.
- [33] BRENNER AND SCOTT *The Mathematical Theory of Finite Elements Methods*
Springer Verlag, New York, 1994.
- [34] COURANT AND JOHN *Introducción al cálculo y al análisis matemático, vol.2*
Ed. Limusa, México DF, 2000.
- [35] CIARLET P. G. AND LIONS J. L. *Handbook of Numerical Analysis, Vol. II.*
North Holland, 1993.
- [36] GLOWINSKI, R. *Numerical Methods for Non-Linear variational problems.*
Springer-Verlag, 1984.

Mathematical simulation of a cathodic protection system by finite element method

R. Montoya, O. Rendón and J. Genesca*

A computer program was developed, to solve the numerical system generated by the variational formulation obtained by the Laplace bidimensional equation in rectangular coordinates at boundary conditions, Newman's type. The finite element method (FEM) was used to solve the numerical system. Compact support functions were used to simulate inert electrodes under an external current, this support was equal to the electrodes diameter. The validation of the

model was corroborated when the results obtained by modeling were very similar to those given by experimentation. Three aspects of interest about cathodic protection were simulated;

- Electrodes distribution in the system.
- Low conductivity irregularities in the electrolyte.
- Different resistivities in the electrolyte.

1 Introduction

Cathodic protection is one of the most widely used methods of corrosion prevention. In principle, it can reduce or prevent the corrosion of any metal or alloy exposed to any aqueous electrolyte. Corrosion can be reduced to virtually zero, and a properly maintained system will provide protection indefinitely. The British were the first to use cathodic protection on copper fittings of wooden sailing vessels in the 1820s. Unfortunately, the suppression of toxic corrosion products allowed the growth of marine organisms, which impaired sailing speed. Cathodic protection was first used extensively in the 1920s for buried steel pipelines transporting petroleum products. Cathodic protection of steel-hulled ships became prevalent in the 1950s, to supplement corrosion- and fouling-resistant coatings. Cathodic protection finds its greatest use for coated carbon steels in many applications of intermediate corrosion rate. Thus, it extends the service life of thousand of miles of buried steel pipelines, oil and gas well casings, offshore oil-drilling structures, seagoing ship hulls, marine pilings, water tanks and some chemical equipment.

Cathodic protection reduces the corrosion rate by cathodic polarization of a corroding metal surface. Cathodic polarization reduces the rate of the half-cell reaction (a) with an excess of electrons.



A rectifier supplies impressed current for cathodic polarization by converting alternating current (ac) from the power lines to direct current (dc). Single or multipliers anodes distribute the cathodic currents to the protected structure. For

buried structures, the anodes are often inert graphite. For immersed seawater structures, they may be high-silicon cast iron or platinum coated titanium. A metal structure can be cathodically protected by connection to a second metal, called a sacrificial anode, which has a more active corrosion potential. The most noble structure in this galvanic couple is cathodically polarized, while the active metal is anodically dissolved. Magnesium, zinc and aluminum sacrificial anodes, welded to buried and immersed structures, provide long-term cathodic protection. These anodes must be replaced periodically as they are consumed by anodic dissolution [1].

1.1 Impressed current

A cathodic polarization curve gives an indication of the impressed current density for cathodic protection to any required level of cathodic polarization. If cathodic polarization becomes excessive, the direct reduction of water becomes thermodynamically possible (b).



The increase in current due to hydrogen evolution, even in neutral or alkaline solutions, destroys coatings and produces various forms of hydrogen damage. Also, the new reduction reaction wastefully consumes additional cathodic current. The anodes are usually arranged in ground beds, either vertically or horizontally, depending on the excavation equipment available, nature of the soil strata, and proximity of nearby structures. Selection of the best anode material must be considered as a part of system design. Low resistance to current flow, low rate of consumption, physical robustness, fabricability, and minimal cost are desirable properties of candidate anode materials. The common materials used are high-silicon cast irons, scrap steel and cast irons, graphite, lead alloys, some conductive oxides and platinum [1].

1.2 Sacrificial anodes

In a galvanic couple between dissimilar metals, the galvanic current cathodically protects the more noble metal and

* J. Genesca, O. Rendón,
Departamento de Ingeniería Metalúrgica, Facultad de Química,
Universidad Nacional Autónoma de México, UNAM,
Ciudad Universitaria, 04510 México D.F. (Mexico)
E-mail: genesca@servidor.unam.mx.

* R. Montoya,
Departamento de Matemáticas, Facultad de Química,
Universidad Nacional Autónoma de México, UNAM,
Ciudad Universitaria, 04510 México D.F. (Mexico)

preferentially dissolves the more active metal. Electrons flow from the active sacrificial anode to the noble cathodic structure. The anodic reaction at the cathode structure, is reduced by the surplus of electrons provided by the sacrificial anode. At the same time the cathodic reaction is accelerated. The cathode structure is cathodically protected, and the same electrochemical reactions are present at the cathode as when the polarization is provided by impressed current. In principle, when any two metals or alloys are galvanically coupled, the more active of them in the galvanic series becomes a sacrificial anode and cathodically protects the other. Anodic dissolution continually consumes sacrificial anodes which must be periodically replaced. Therefore, maximum anode life requires minimum current for adequate protection. Only zinc, aluminum, and magnesium alloys have proven practical for sacrificial anodes. Sacrificial anodes depend on anodic dissolution to supply electrons to the protected cathode by galvanic action. Therefore, anode consumption is required, and periodic replacement is expected for long-life systems [1].

1.3 Cathodic protection criteria

Criteria for cathodic protection recommended by the National Association of Corrosion Engineers (NACE) were recently reviewed and the conclusion was that all common criteria are deficient to some extent and therefore qualitative in practical application. Nevertheless, cathodic protection is effective, despite the uncertainties inherent in the various NACE criteria. Any level of cathodic polarization is beneficial. As a result, the use of any criterion reviewed (Potential less than -0.85 V versus Cu - Saturated CuSO_4 . Cathodic polarization more than 300 mV active to corrosion potential of structure. Cathodic polarization more than 100 mV active to corrosion potential of structure. Cathodic polarization to a potential where Tafel behavior is achieved. Net protective current flows from electrolyte into the structure surface.) will produce adequate cathodic protection only if applied judiciously by experienced personnel.

Efforts have increased in recent years to simulate or model mathematically cathodic protection systems. Modelling must include current and/or potential distributions in complex geometries as well as polarization at cathode structure and anode surfaces.

Earlier analytical estimates have been improved by numerical analysis techniques made possible by modern developments in computer hardware and programming software. Modelling has been applied primarily to cathodic protection systems in seawater of relatively high uniformity and conductivity. Buried structures have not been modelled readily, because of the added complexity of a nonuniform, low-conductivity electrolyte. However, modelling would appear to be a likely candidate for future development in impressed current cathodic protection systems in view of the large current and potentials fields that must be present and the inaccessibility of the protected surfaces in buried structures [1].

1.4 Mathematical methods

Computers have been used in the evaluation of the design of cathodic protection systems since the late seventies. This was followed by a work in electrochemical systems analysis with simple geometry, using the Finite Differences Method. The motivation and antecedents to develop these more sophisti-

cated methods for the analysis of cathodic protection is related to the increase on the activity in the exploration and production of petroleum and gas on the North Sea. Programs used for modelling cathodic protection systems are based on the Finite Differences Method (FDM), on the Finite Element Method (FEM) and on the Boundary Element Method (BEM), adapted for the calculus of the distributions of current and potentials on complex structures cathodically protected. These numerical proceeding of discretization are combined with a data base and with proceedings to work with electrochemical boundary conditions. The FDM is one of the first techniques, which, despite its very acceptable numerical efficiency, is highly inconvenient when referring to its stability in complex geometry. This problem was partially solved using the FEM, however, these methods require the discretization of a great volume of electrolyte that surrounds the structure, generating a great number of equations [2]. The BEM requires only the discretization of the anode and cathode surfaces, this way, the size of the numeric problem may be reduced in size, which permits to obtain a better resolution and a reduction in computer time when compared to other former methods, particularly for complex geometry, however, through this method the voltage distribution of the electrolyte is not directly determined, thus it was obtained through an additional calculus. The BEM has been the most used technique, at least in the programs developed to solve large problems and always considering homogeneous conductive medium. In this paper, the program developed was based on the FEM since the BEM considers an homogeneous electrolyte and even though it is very versatile with respect to the boundary, the conditions in the electrolyte can not be easily changed.

1.5 History of mathematical models in corrosion

The idea of mathematically predicting the electrolytic corrosion behavior for a physical situation had its genesis at least six decades ago. A number of very fundamental and mathematically definitive papers appeared in the literature in the early forties predicting current distributions for plane electrodes and assumed linear polarization. Various theoretical treatments on this subject were published in the 1950s addressing coplanar electrode configurations with varying degrees of polarization effects. These analyses were generally limited to one dimensional efforts in cartesian coordinate systems with simplified polarization effects. A mathematical analysis of cells with unequal polarization parameters demonstrated the treatment of slightly more complex geometry in the presence of more realistic polarization effects. In all of these mathematical treatments, the Laplace equation was the governing field equation with the additional assumption that the electrolytic medium and the electrode materials possessed constant electrical properties. The concepts of modeling continuous linear d.c. electromagnetic spaces using the finite element method was proposed in the late 1960s. The idea of expressing the multielectrode electrochemical relations for a continuum in terms of the Laplace equation had its origin in the numerous publication of Wagner and Kasper. To solve the electrochemical equations via a time independent heat transfer analysis already in existence was suggested in the mid 1970s for large scale structures focusing on macroscopic electric field effects without directly integrating the local polarization effects or surfaces. The first extensive study to include generally realistic polarization effects using finite element methods for two dimensional electrode/electrolytic

spaces was first completed in 1977 and finally released for publication in 1981. Since then, the methods with more application in cathodic protection and another areas are the (FEM) finite element method and the (BEM) boundary element method, using simplifications in the electrolyte (homogeneous medium)[3].

The work of Munn and Devereux [4] is very important in the use of FEM for numerical modeling of galvanic corrosion systems, they have used a commercially heat conduction computer program for electrochemical analysis, because of the analogy between electrical and thermal conduction, this program was modified by programming for the particular boundary conditions representing non linear electrode kinetics.

The Computational Mechanics BEASY group was the first to apply boundary element technology to corrosion applications and the first to develop commercial tools capable of modeling large-scale structures. The value of the technique was demonstrated by its application to the Conoco TCP platform in the early eighties. They developed the software Beasy CP and SeaCorr CP based on these early developments. During the development of SeaCorr CP, the transient representation of kinetics was developed with CorrOcean of Norway and the support of Conoco [5]. Dan Townley at Chevron has been engaged in CP modeling and applications since 1980. He has developed design approaches for CP of complex structures such as the risers of an offshore petroleum production spar. The unusual and restricted geometry of this system requires more detail than conventional offshore CP design. To simplify the BEM calculations, he developed a unified design equation based on a linearized polarization curve for the electrochemical reactions involved [5]. Virginia DeGiorgi at the U.S. Naval Research Laboratory conducts modeling for naval applications, including evaluation of properties and performance of smart materials, fracture fatigue of metals, and, since 1990, cathodic protection of complex structures such as the hulls of ships. Her group was the first to provide detailed comparison between boundary-element calculations for CP of ships and experimental results using scale models [5]. The group of professor Shigeru Aoki, in the Department of Mechanical and Environmental Informatics, Tokyo Institute of Technology, began research on application of BEM to CP problems in the early 1980s. They were the first to perform an experimental verification of BEM results for a complicated real-life structure. They have developed a BE optimization method for CP to minimizing the power supply under the protecting condition which is taken into account by the penalty function method. They use a multi-peaked cost function which is coped with a genetic algorithm combined with the conjugate gradient method. They were the first to apply BEM to solve inverse problems in CP [5, 6]. The computational Electrochemistry Group of the Department of Electrotechnical Engineering at the Vrije Universiteit Brussel, directed by Professor Ku-Johan Deconinck, was involved in electrochemical modeling since 1977. The models developed by this group have been used to simulate local corrosion processes of steel pipes surrounded by a concrete casing and protected by sacrificial anodes, they have coupled in their model FEM and BEM and have included nonnegligible ohmic voltage drops in the pipelines modeled [5, 7].

The Telles group at the Federal University of Rio de Janeiro was one of the first to apply boundary elements to simulate cathodic protection systems. Their contribution included the integral formulation that produces exact current balance between anode and cathode for infinite and finite domains and the simulation of cathodic protection systems with dy-

namical polarization curves. Their work is on the numeric simulation of practical engineering problems, such as coating failures in buried pipelines and semisubmersible platform [5, 8].

The group headed by John Scully at the University of Virginia has dealt with aspects of CP for 15 years. Their work is one of the first to quantify diffusible hydrogen contents during CP and the first in applying this to a prestressed concrete structures [5].

The group at the University of Florida (Orazem et al.) was the first to develop finite - element and boundary - elements calculations for cathodic protection of coated pipelines with coating holidays that expose bare steel, the group has coupled the BEM with Newton-Rapson iteration to solve the governing equation [5, 9].

2 Variational formulation of a unidimensional boundary value problem

Consider the one dimensional boundary value problem (BVP):

$$u \in C^2(\Omega) : ku''(x) = f(x), \quad \Omega = (0, 1)$$

$$B.C. \quad u(0) = 0; u'(1) = 0$$

where $f \in L^2([0,1])$ and

$$L^2([0, 1]) = \{f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R} / \int_0^1 |f(x)|^2 dx < \infty\}$$

Its associated weak formulation is as follows [1],
Find $u \in V$ such that

$$a(u, v) = l(v) \quad \forall v \in V \quad (1)$$

where $V = \{v \in H^1([0, 1]) : v(0) = 0\}$ is a closed subspace of the Sobolev space $H^1([0,1])$ formed with functions in $L^2([0,1])$ whose first order distributional derivatives also belongs to $L^2([0,1])$ and with norm

$$\|v\| = \left(\int_0^1 v(x)^2 dx + \int_0^1 v'(x)^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

and the functions $a(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{R}, l(\cdot) : V \rightarrow \mathbb{R}$ are given by

$$a(u, v) := \int_0^1 u'(x)v'(x) dx \quad (3)$$

$$l(v) := \int_0^1 \frac{1}{k} f(x)v(x) dx \quad (4)$$

As it's well known $a(\cdot, \cdot)$ is a bilinear symmetric continuous form and V -elliptic, in the sense that

$$\exists \alpha > 0, \quad \forall v \in V, \quad \alpha \|v\|^2 \leq a(v, v)$$

and $l(\cdot)$ is a linear and continuous function. Therefore the problem (1) has a unique solution u in V [10].

Next the problem above is approximated with classical finite element method.

A partition of the interval $[0,1]$ is fixed, for example:

$$0 = x_0 < x_1 < \dots < x_{N-1} < x_N = 1 \quad (5)$$

and it is considered that the subspace of dimension N C_N of V where C_N is formed by functions

$\phi: [0,1] \rightarrow \mathcal{R}$ such that,

• ϕ is continuous, in other words, $\phi \in C^0[0,1]$

• $\phi|_{[x_{i-1}, x_i]}$ is a linear polynomial for $i = 1, \dots, N$

• $\phi(0) = 0$

the nodal basis (Is a simple exercise to prove that these nodal functions are a basis of the sub-space C_N - is only must to guarantee that they are linearly independent and that they generate the mentioned sub-space). functions of C_N are defined afterwards:

$$\phi_i(x_j) = \delta_{ij} : i, j = 0, \dots, 1 \quad (6)$$

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{if } i \neq j \\ 1, & \text{if } i = j \end{cases} \quad (7)$$

Thus, the GBVP is simplified to the finite dimension problem to find $u_N \in C_N$:

$$a(u_N, v) = \frac{1}{k} (f, v) \quad \forall v \in C_N \quad (8)$$

3 Numerical solution to a discrete problem

The u_N solution is expressed as a linear combination of the basis elements of C_N , that is:

$$u_N = \sum_{i=1}^N a_i \phi_i \quad (9)$$

where the a_i coefficients are the unknown quantities to find. This way, the problem simplifies to,

$$\sum_{i=1}^N a_i \int_0^1 \phi_i'(x) v'(x) dx = \int_0^1 \frac{f(x) v(x)}{k} dx \quad (10)$$

arily if (v is replaced by the elements of the basis, it is obtained:

$$\sum_{i=1}^N a_i \int_0^1 \phi_i'(x) \phi_j'(x) dx = \int_0^1 \frac{f(x) \phi_j(x)}{k} dx; \quad j = 1, \dots, N \quad (11)$$

which is represented the following way:

$$\begin{bmatrix} \int_0^1 \phi_1 \phi_1 dx & \int_0^1 \phi_2 \phi_1 dx & \Lambda & \int_0^1 \phi_N \phi_1 dx \\ \int_0^1 \phi_1 \phi_2 dx & \int_0^1 \phi_2 \phi_2 dx & \Lambda & \int_0^1 \phi_N \phi_2 dx \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \int_0^1 \phi_1 \phi_N dx & \int_0^1 \phi_2 \phi_N dx & \Lambda & \int_0^1 \phi_N \phi_N dx \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \int_0^1 f(x) \phi_1 dx \\ \int_0^1 f(x) \phi_2 dx \\ \vdots \\ \int_0^1 f(x) \phi_N dx \end{bmatrix} \quad (12)$$

The problem finishes using a numerical method (In this work was used the Gauss-Seidel algorithm.) to solve (The problem has a solution and this one is unique due to the theory of the functional analysis, that guarantees this, whenever the operator is linear, H-elliptical, symmetricall and positive defined [11, 12].) the system of equations.

4 An electrochemical problem

Generally, finding a solution to the above problem is not complicated, however, such problem does not represent an electrochemical phenomena, just an electrical problem or a heat transference problem, where the thin end of the conducting element is isolated, while the other end is kept at zero degrees or well to a potential equals to zero for the electrical problem case. Modeling an electrochemical phenomena that represents the left end ($x = 0$) of the thin conductor medium like a metal (In order to simplify the calculations a steel with symmetry coefficients $\alpha = 0.5$ and $\beta = 0.5$ is considered in reference to the Butler-Volmer equation.) that is in contact with the electrolytic medium, which is under an external electric current $f(x)$, it is necessary to modify the original BVP the following way. A non homogeneous problem should be solved this way, so, it can be established an initial value of potential in the metal as boundary condition, after finding the solution $u(x)$ and with this data approach the current and at the same time calculate again the new potential using the Butler-Volmer equation that will be the new boundary condition. The iteration process will go on until the calculated value $u(x)$ will converge with the value used as boundary condition. However, this process has as a consequence that working in two or three dimensions, the flow approximations are rough, thereby, in no way the convergency to the problem solution is guaranteed (In fact, this is a real complication when trying to use this procedure.). It is necessary to clarify that the later can be avoided if the field as well as the flow are calculated at the same time, something that can be done using the convex analysis theory, where the finite hybrid element method is sustained (The existence of this solution and the fact that the boundary conditions governs the electrochemical phenomena would be modeled with that theory are questions investigated at the moment that will give an additional article.). The above leads that the problem can be approached in other way, if the electrochemical phenomena wants to be modeled.

Something that should be changed will be the boundary conditions, that is, instead of establishing in the boundary the potential value, the value of the flow will be set, which will result in the fact that the new interactions will only consider the obtained field in the solution with the finite element method and the Butler-Volmer equation. Considering that the two domain ends have electrochemical conditions (bare metal) the BVP is written as follows:

$$-ku''(x) = f(x)$$

$$\Omega \in (0, 1)$$

$$C.F. \begin{cases} -ku'(0) = \arcsin h(u(0)) \\ -ku'(1) = \arcsin h(u(1)) \end{cases} \quad (13)$$

Doing the same as the above problem, after integration by parts the following expression is reached

$$-u'(1)v(1) + u'(0)v(0) + \int_0^1 u'(x)v'(x) dx \quad (14)$$

$$= \int_0^1 \frac{f(x)v(x)}{k} dx \quad (14)$$

using the boundary conditions it is reduced to

$$\frac{\arcsin h(u(1))v(1)}{k} + \frac{\arcsin h(u(0))v(0)}{k} + \int_0^1 u'(x)v'(x) dx = \int_0^1 \frac{f(x)v(x)}{k} dx \quad (15)$$

when converted into a finite dimension problem, solution u_N in C_N is found, and this satisfy;

$$\frac{\arcsin h(u_N(1))v(1)}{k} + \frac{\arcsin h(u_N(0))v(0)}{k} + \int_0^1 u'_N(x)v'(x) dx = \int_0^1 \frac{f(x)v(x)}{k} dx \quad \forall v \in C_N \quad (16)$$

knowing that

$$u_N = \sum_{i=1}^N a_i \phi_i \quad (17)$$

and that ϕ_i are the nodal basis functions that generate the subspace C_N , while a_i are the parameters to determine, the system to solve is

$$\frac{\arcsin h(u_N(1))\phi_N(1)}{k} + \frac{\arcsin h(u_N(0))\phi_1(0)}{k} + \sum_{i=1}^N a_i \int_0^1 \phi'_i(x)\phi'_j(x) dx = \int_0^1 \frac{f(x)\phi_j(x)}{k} dx; \quad j = 1, \dots, N \quad (18)$$

since $u_N(0) = a_1\phi_1(0)$ and $u_N(1) = a_N\phi_N(1)$ the problem comes to

$$\frac{\arcsin h(a_1\phi_1(0))\phi_1(0)}{k} + \frac{\arcsin h(a_N\phi_N(1))\phi_N(1)}{k} + \sum_{i=1}^N a_i \int_0^1 \phi'_i(x)\phi'_j(x) dx = \int_0^1 \frac{f(x)\phi_j(x)}{k} dx; \quad j = 1, \dots, N \quad (19)$$

but $\phi_1(0) = \phi_N(1) = 1$ thus the expression simplifies even more to obtain,

$$\frac{\arcsin h(a_1)}{k} + \frac{\arcsin h(a_N)}{k} + \sum_{i=1}^N a_i \int_0^1 \phi'_i(x)\phi'_j(x) dx = \int_0^1 \frac{f(x)\phi_j(x)}{k} dx; \quad j = 1, \dots, N \quad (20)$$

that solves iterating the values a_1 and a_N beginning with chosen values (Some problems at the present do not have a solution if it does not work with perturbations [13], however the solution at which it is arrived under this procedure is not unique but is infinity and differs to each other by a constant depending on the perturbation. This problem is avoided when the problem is analyzed in the time.)

8 Numerical example 1

Let us consider the two dimensions example problem shown in Fig. 1, in which a rectangular metal tank of size XY is treated by impressed current from three electrodes of diameter ϕ .

The polarization curve of the metal was assumed to be $-I = \text{arcsinh}(u)$. The domain Ω was discretized in 900 constant elements. The Gauss-Seidel method was employed to solve the system founded. Mathematical function used to approximate each electrode was $f(x, y) = -r \exp(-s^*(x - x_0)^2 - s^*(y - y_0)^2)$, where r is a factor involved the potential or current of the electrodes, s is another proportional factor to the diameter of the electrodes and x_0 and y_0 are the coordinates of the electrodes center. Fig. 2 shows the physical model where the potentials were measured with a calomel electrode and with a simple multimeter, the electrolytic medium was sand with salt water, and the boundaries were nude steel.

Fig. 3 showed the results founded with the model and the physical values (the values of potential vs calomel electrode of the physical model and the mathematical model are shown in the Table 1).

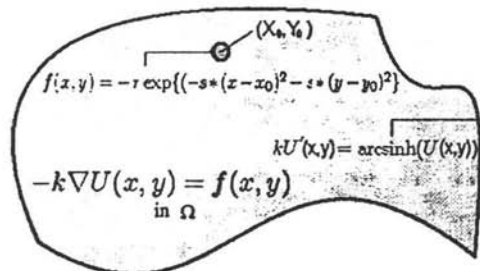


Fig. 1. Boundary conditions, governing equation and the function $f(x, y)$

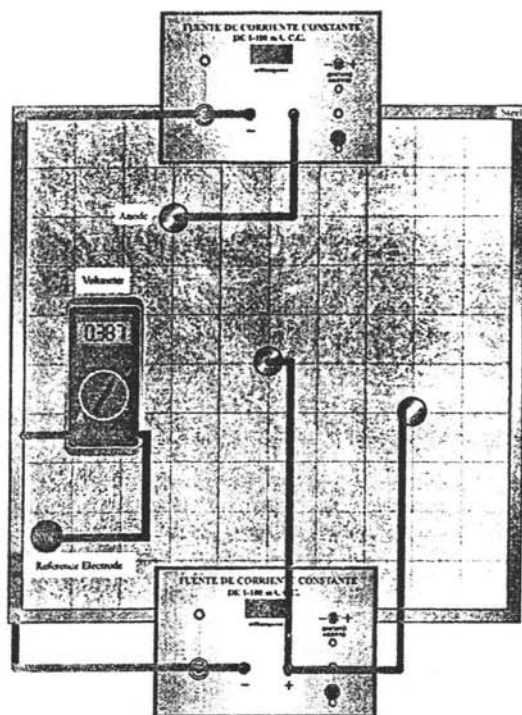


Fig. 2. Physical model used to corroborate numerical data

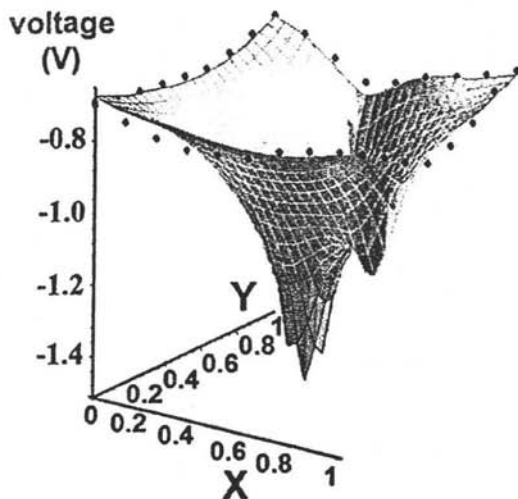


Fig. 3. Measured data in the boundary and the complete prediction by the model

Table 1. Potentials (V) vs. Saturated Calomel Electrode, SCE, corresponding to different positions in Fig. 7

Measured	Calculated	Position
-0.666	-0.691	1
-0.746	-0.767	2
-0.813	-0.810	3
-0.869	-0.868	4
-0.962	-0.980	5
-1.011	-0.943	6
-0.895	-0.940	7
-0.774	-0.787	8
-0.695	-0.700	9
-0.757	-0.787	10
-0.818	-0.850	11
-0.858	-0.881	12
-0.838	-0.870	13
-0.819	-0.848	14
-0.797	-0.800	15
-0.775	-0.759	16
-0.744	-0.680	17
-0.818	-0.736	18
-0.878	-0.760	19
-0.907	-0.821	20
-0.888	-0.805	21
-0.860	-0.807	22
-0.761	-0.785	23
-0.706	-0.742	24
-0.660	-0.678	25
-0.747	-0.775	26
-0.841	-0.930	27
-0.944	-1.000	28
-1.022	-0.975	29
-0.973	-0.890	30
-0.889	-0.840	31
-0.739	-0.770	32

6 Numerical example 2

This example uses the same tank as the above, but with irregularities of high resistivity in the domain. This experiment was carried out due to the interest that shows the fact of representing a "more real" domain that has irregularities and that it does not assume as electrically homogeneous. The condition about FEM was to consider there are no interaction between $\phi(x,y)$ that involve the irregularities and all of it. Squares and irregular objects with infinite resistivity were put in arbitrary places of domain and proceed just like in example 1.

The results are shown in Fig. 4, 5 and 6. In Fig. 4 the effect of different irregularities of low conductivity (a square and a "L") on the potentials distribution is observed, the distortion of the isolines is evident about the irregularities if compared

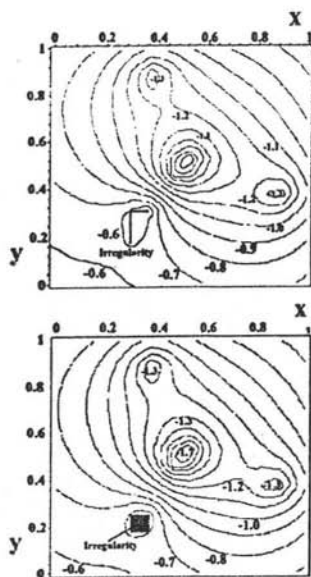


Fig. 4. Isopotential curves (V) for different irregularities

these with the standard of Fig. 5, however, away from the object the distortion seems to disappear and it does not affect the potentials distribution.

If it is considered that the metal tank (boundary dominium) is cathodically protected between -0.85 and -1.00 V, it is observed that only the "A" and "B" sides of the tank (according to Fig. 7) from 0.2 to 0.6 units "X" and "Y" respectively (0.4 units) fill the requirement in Fig. 4 and Fig. 5, therefore irregularities relatively away from the cathodically "protected" zones does not affect dramatically the system. The above does not apply when a high resistivity irregularity is relatively close to the zone of interest (the "A" and "B" sides of the tank from 0.2 to 0.6 units "X" and "Y" respectively). Fig. 6 shows quantitatively that the zone of side B with an electrochemical potential between -0.85 and -1.00 V only corresponds to 0.23 length units (from 0.2 to 0.43) that is by the effect of this irregularity it was left aside from 0.43 to 0.6 of side B (almost half distance originally protected).



Fig. 5. Isopotential curves (V) without irregularities

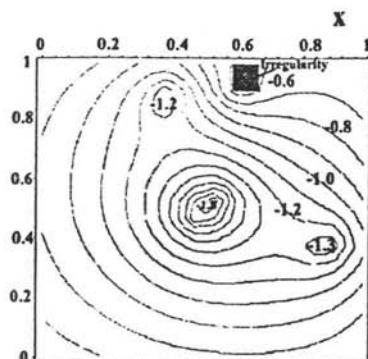


Fig. 6. Isopotential curves (V) with a square irregularity near the directly affected zone by one electrode

7 Numerical example 3

In this example, it is considered again the original tank with the same distribution of anodes but considering and non homogeneous conductor medium, in other words, an electrolyte with 3 different values of electric conductivity as is show in Fig. 7.

The condition for the finite element method is used directly on the k that appears in the variational formulation of the problem (section two) which shows a great flexibility of this method in the use of conditions and restrictions from the Omega dominium. The results are shown in Fig. 8 for the three different cases specified in Fig. 7. The influence of the conductivity on the profiles of the potential shown in Fig. 8 emphasize the importance of considering a non homogeneous electrolytic medium in the hypothesis of the problem, since not

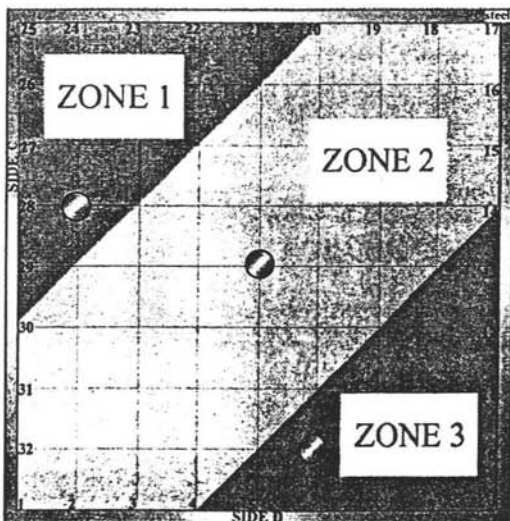


Fig. 7. In the experiment one, zones three and one have lower conductivity than zone two, in the experiment two three zones have the same conductivity and in the experiment three, zones one and three have the same conductivity which is larger than zone two

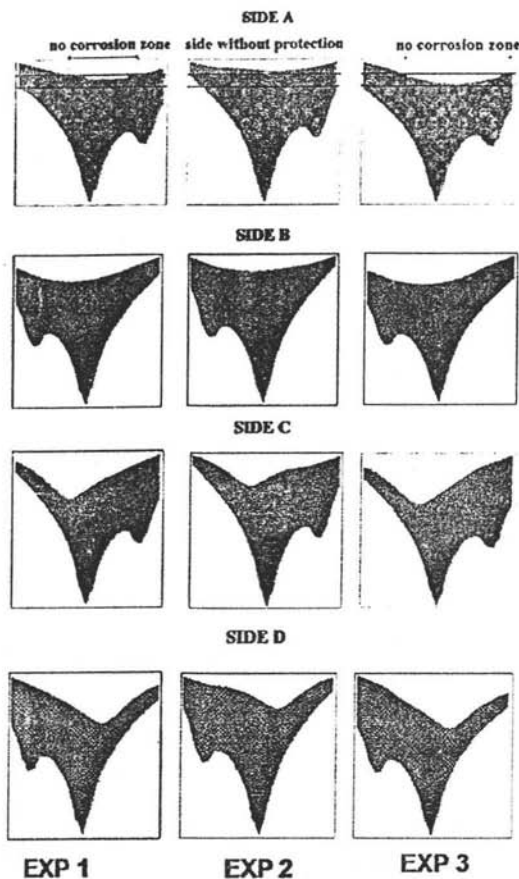


Fig. 8. Profiles of potentials for A,B,C and D sides where the influence of no constant conductivity in the electrolyt is shown

assuming such supposition, even when the variation of conductivity in the medium was relatively small, can cause a fatal and unacceptable error in the engineering of corrosion because without it, easily it is considered a region cathodically protected when in the reality it is not, as is seen by the difference on potential profiles for the three different arrangements of conductivity in the medium.

In the A side, it is clearly specified what is happening in the three experiments, the horizontal "band" specifies a supposed region of cathodic protection where the boundary sections are found in the experiments 1 and 3, however, in the experiment 2 the protected section is nil, that value in its real dimension shows the effect of simplifying an heterogeneous problem in an homogeneous problem.

Concluding remarks

This paper shows a way to model a cathodic protection system formulating variationally BVP, and solving the discrete system using the FEM. The original BVP was modified with regard to the boundary conditions by using a perturbation, because the problem does not have a solution in another

way, furthermore an iteration process was used to satisfy the boundary conditions of Newman's type ($u' = \text{arcsinh}(u)$).

The problem solved as above, has a family of solutions that depend on the applied perturbation, the use of small perturbations does not bring the solution closer to the real values. The constant that separates the numerical solution from the real solution can be found by solving the model adding the time variable, greatly increases real machine time but benefits the knowledge of the electric history of the system. Three different numerical examples were considered. The first one had a homogeneous conductor medium and an aleatory distribution of three anodes under a different electrical current, the numeric results were experimentally validated on the boundary system, the results between the real system and the model were satisfactory. In the following two examples the original problem was studied, but considering the irregularities of high resistivity in the medium in the first one and different distribution of conductivity in the second, the results corroborate that the consequences when considering a conductor medium as homogeneous when is it not, can be catastrophic. The disadvantages found in this proposal when compared with some commercial programs are the time answer and the anodes mathematical representation, since difficulties were found when trying to study the effect of complex anode geometry in the system. The advantages found when this proposal is compared with BEM are: the potential distribution in all Omega is directly found without supplementary calculus [14], the versatility in the use of obstacles and different conductivities in the medium, that is, non homogeneous conditions in the electrolyte. The general conclusion is "a cathodic protection system" can be simulated in the electric potential field using FEM. Further work is needed to found electrical current distribution, perhaps the special boundary conditions of a electrochemical case guarantee the solution existence when a hybrid finite element method was used.

9 References

- [1] A. J. Denny, *Principles and prevention of corrosion*, Prentice Hall, New York 1996, 440-449.
- [2] R. D. Strommen. In: *Computer Modeling in Corrosion* (Ed. R.S. Munn), STP 1154. ASTM, Philadelphia 1992, 229-447.
- [3] R. G. Kasper, M. G. April, *Corrosion* 1983, 39, 181.
- [4] R. S. Munn, O. F. Devereux, *Corrosion* 1991, 47, 612.
- [5] M. E. Orazem. In: *Cathodic Protection: Modeling and Experiment* (Ed. M.E. Orazem) Research Topical Symposium, Corrosion/99. NACE international, Houston 1999.
- [6] S. Aoki, A. Kenji, *Optimization of cathodic protection system by BEM*. Elsevier. Amsterdam 1997, 147-156.
- [7] F. Brichau, J. Deconinck, *Corrosion* 1994, 50, 39.
- [8] J. C. F. Telles, W. J. Mansur, L. C. Wrobel, M. G. Marinho, *Corrosion* 1990, 46, 513.
- [9] M. E. Orazem, J. M. Esteban, K. J. Kennelley, R. M. Degerstedt. *Corrosion* 1997, 53, 264.
- [10] P. G. Ciarlet, J. L. Lions. *Handbook of Numerical Analysis*, II. North Holland, 1993.
- [11] B. D. Reddy, *Introductory functional analysis*, Springer Verlag, London, 1998, 286-297.
- [12] K. Rektorys, *Variationals Methods in Mathematics, Science and Engineering*, Prentice Hall, Praga 1980, 383-398.
- [13] B. Lucquin, O. Pironneau, *Introduction to Scientific Computing*, Wiley, New York 2001, 440-449.
- [14] M. A. Warner, *Application of numerical analysis techniques. Cathodic protection and practice, the present status*, Walsgrave Coventry, 1982, 01-29.

(Received: December 13, 2004)

W 3854

Final version: February 21, 2005)