

LA VIOLACIÓN DE LA SEGUNDA LEY DE LA TERMODINÁMICA POR EL MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS

Alejandro C. Limache, Pablo S. Rojas y Marina H. Murillo

*Centro de Investigación de Métodos Computacionales en Ingeniería (CIMEC)
CONICET*

*Predio Conicet-Santa Fe, Colectora Ruta Nac 168 / Paraje El Pozo, Santa Fe (S3000GLN), Argentina
e-mail: alejandrolimache@gmail.com web page: <http://www.cimec.org.ar>*

Palabras Clave: Método de Elementos Finitos, Segunda Ley de la Termodinámica, Principio del Máximo

Resumen.

El presente artículo pretende alertar sobre un hecho grave: la Segunda Ley de la Termodinámica es violada como consecuencia de la discretización numérica resultante de la aplicación del Método de Elementos Finitos (FEM, por *Finite Element Method*). En este trabajo se estudia la consistencia termodinámica de las formulaciones FEM. El estudio está basado en el análisis de la ecuación del calor 1-Dimensional (1D) y 2-Dimensional (2D). Los resultados presentados afectan a todas las simulaciones de Elementos Finitos relacionadas a Dinámica de Fluidos y a Transferencia del Calor.

1. INTRODUCCIÓN

El objetivo de los métodos numéricos es resolver y simular de manera discreta fenómenos físicos. Sin embargo, por la misma naturaleza del esquema de discretización, puede ocurrir que ciertos principios físicos asociados a la ecuación diferencial del continuo dejen de satisfacerse en el esquema numérico. El desconocimiento de la posible violación en el discreto de dichos principios puede ser la fuente de grandes dolores de cabeza tanto para programadores como para usuarios de métodos numéricos. El objetivo de este trabajo es presentar resultados sobre la satisfacción, o no satisfacción, numérica de un principio físico fundamental: la segunda ley de la termodinámica. Aquí se demuestra, en el contexto de la ecuación del calor 1Dimensional y 2Dimensional, que las formulaciones numéricas resultantes de la aplicación del Método de Elementos Finitos violan dicha ley. La segunda ley de la termodinámica es una ley intrínseca presente en cualquier ecuación diferencial de difusión, por lo tanto, los resultados presentados tienen aplicación general afectando, entre otras, a simulaciones físicas de dinámica de fluidos y transferencia del calor. Este trabajo es el resultado derivado de contribuciones matemáticas hechas por diversos autores en el contexto de la violación numérica del Principio del Máximo (Discrete Maximum Principle). Trabajos pioneros en esta área son: Varga (1966); Fujii (1973); Brandt (2004); Rank et al. (1983). Trabajos recientes son Jüngel y Unterreiter (2005); Faragó y Horváth (2009); Faragó et al. (2012); Burman y Ern (2005); Vejchodský y Łolín (2007); Elshebli (2008); Burman y Ern (2004); Liska y Shashkov (2008). En este trabajo se usan algunos de estos resultados para demostrar la violación a nivel numérico de un principio físico más fundamental: la segunda ley de la termodinámica.

2. LA SEGUNDA LEY DE LA TERMODINÁMICA

La Termodinámica es la parte de la Física que estudia las relaciones entre el calor y las restantes formas de energía. Dicha ciencia tiene dos postulados o leyes fundamentales. La Primera Ley de la Termodinámica expresa básicamente la conservación de la energía de un sistema. La Segunda Ley expresa una cuestión evolutiva de todo proceso físico:

Segunda Ley de la Termodinámica: *En todo proceso físico dentro de un sistema aislado, el cambio de entropía ΔS solo puede ser mayor igual que zero.* Es decir:

$$\Delta S \geq 0 \quad (1)$$

Una consecuencia de esta ley es que el flujo de calor siempre ocurre de una zona de alta temperatura a una de baja temperatura.

Ley de Flujo de Calor: *En cualquier fenómeno físico de transferencia de calor el flujo de calor nunca puede ir de una zona de baja temperatura T_1 a una zona de alta temperatura T_2 . Si esto ocurriera se violaría la Segunda Ley de la Termodinámica. Por lo tanto el calor siempre fluye de la zona de alta temperatura T_2 a la de baja temperatura T_1 , produciendo un incremento de T_1 y un decremento de T_2 .*

La ley de flujo de calor puede demostrarse por el absurdo de la siguiente manera. El cambio diferencial de entropía dS de un sistema a temperatura T en un proceso termodinámico en que recibe una cantidad de calor δQ está dado por:

$$dS = \frac{\delta Q}{T} \quad (2)$$

Consideremos ahora dos sistemas: sistema S1 y sistema S2, inicialmente aislados a temperaturas T_1 y T_2 , respectivamente. Para fijar ideas supongamos que la temperatura del Sistema S2 es

mayor que la del sistema S1, es decir:

$$T_2 > T_1 \quad (3)$$

y que en un dado instante $t = 0$, entran en contacto térmico. Supongamos por un momento que la ley de flujo de calor no es cierta y que entonces el proceso es tal que fluye una cantidad de calor $\delta Q > 0$ del sistema con menor temperatura al mayor. Es decir de S1 \rightarrow S2. Usando la Ec. (2), el cambio total de entropía del sistema conjunto $dS = dS_1 + dS_2$, que está aislado del resto del universo, está dado por:

$$dS = dS_2 + dS_1 = \frac{\delta Q}{T_2} - \frac{\delta Q}{T_1} = \delta Q \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) \quad (4)$$

Es decir:

$$dS = \delta Q \frac{T_1 - T_2}{T_2 T_1} \quad (5)$$

Ahora bien, como $T_1 - T_2 < 0$ y $\delta Q > 0$, entonces resulta que si el calor fluiría de T_1 a T_2 , la entropía decrecería, $dS < 0$, con lo cual se violaría la Segunda Ley de la Termodinámica.

3. LAS ECUACIONES DIFERENCIALES DE DIFUSIÓN Y DE CONDUCCIÓN DEL CALOR

La ecuación de difusión es una de las ecuaciones diferenciales más importantes de la Física, en su forma estándar viene dada por la siguiente expresión:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \nabla \cdot (D \nabla \phi) = 0 \quad (6)$$

La Ec. (6) describe la variación de la cantidad física difundida ϕ como función del tiempo t , donde D es un coeficiente conocido como coeficiente de difusión que se asume constante. La ecuación de difusión aparece en la descripción de variados fenómenos físicos. Estos fenómenos incluyen por ejemplo la dinámica de fluidos viscosos y el transporte y conducción del calor. En el presente trabajo, usaremos como modelo la ecuación de conducción del calor, pero el lector debe tener presente que los resultados presentados en este artículo se aplican en cualquier caso donde la forma de la Ec. (6) aparezca.

Nuestro modelo de referencia es la ecuación de conducción del calor:

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (\kappa \nabla T) = 0 \quad (7)$$

Ec. (7) describe la variación de temperatura T en un dominio arbitrario Ω como función del tiempo. κ es el coeficiente de difusividad térmica. Por simplicidad se asume que es un κ es escalar y que no hay fuentes de calor dentro del dominio. Ec. (7) se completa con las condiciones de contorno existentes en la frontera Γ del dominio. Se asume que en la frontera existen condiciones tipo Dirichlet con temperaturas impuestas en la frontera:

$$T(\mathbf{x}) = \bar{T}(\mathbf{x}) \text{ for } \mathbf{x} \in \Gamma_T \quad (8)$$

o condiciones adiabáticas:

$$\nabla T(\mathbf{x}) = 0 \text{ for } \mathbf{x} \in \Gamma_q \quad (9)$$

4. CONSISTENCIA TERMODINÁMICA DE LA ECUACIÓN DEL CALOR

Obviamente para que Ec. (7) sea físicamente consistente debe satisfacer las leyes de la Termodinámica. Esto, sucede en realidad, ya que dicha ecuación es básicamente la expresión de conservación de la Energía (i.e. de la primera ley) y de la asunción de la Ley de Fourier para el flujo de calor \mathbf{q} :

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T \quad (10)$$

que lleva implícita la segunda Ley.

Así como la ecuación diferencial (7) es consistente con la segunda Ley de la Termodinámica, cualquier formulación discreta de esta ecuación debe también satisfacer dicha ley para ser físicamente consistente.

Definición 4.1 - Consistencia Termodinámica Discreta: *Una formulación discreta de la Ec. (7) es termodinámicamente consistente si satisface la segunda Ley de la Termodinámica y por lo tanto la Ley de Flujo de Calor*

En las siguientes secciones verificaremos si es cierto que, *como debiera esperarse*, el Método de Elementos Finitos aplicado a Ec. (7) es termodinámicamente consistente y satisface por lo tanto la ley de flujo de calor. Consideraremos aquí sólo el caso de funciones de forma lineales.

5. DISCRETIZACIÓN DE LA ECUACIÓN DEL CALOR POR EL MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS

5.1. Discretización Espacial

Procedemos de manera estándar a discretizar (7) con el Método de Elementos Finitos. Para este propósito definimos las funciones de forma $N_j(\mathbf{x})$ para cada nodo j de la malla. La posición del nodo j se denota con la variable \mathbf{x}_j y el correspondiente valor de la temperatura nodal con la variable \hat{T}_j . Por definición de las funciones interpolantes se tiene que:

$$T(\mathbf{x}) = \sum_j N_j(\mathbf{x}) \hat{T}_j \quad (11)$$

Aplicación del método de Galerkin en Eq. (7), conduce a la siguiente ecuación discreta para cada nodo i del dominio:

$$\mathbb{M}_i(T) + \mathbb{K}_i(T) = 0 \quad (12)$$

donde

$$\mathbb{M}_i(T) = \int_{\Omega} N_i \frac{\partial T}{\partial t} d\Omega \quad (13)$$

y

$$\mathbb{K}_i(T) = - \int_{\Omega} N_i \nabla \cdot (\kappa \nabla T) d\Omega \quad (14)$$

son los operadores discretos temporales y difusivos respectivamente.

Integrando por partes (Teorema de Gauss) el término difusivo se obtiene que:

$$\mathbb{K}_i(T) = \int_{\Omega} \nabla N_i \cdot \kappa \nabla T d\Omega - \int_{\Gamma_q} N_i \kappa \nabla T \cdot \mathbf{n} d\Gamma \quad (15)$$

De acuerdo con Ec. (9) la integral de contorno es nula y Ec. (15) se reduce a:

$$\mathbb{K}_i(T) = \int_{\Omega} \nabla N_i \cdot \kappa \nabla T d\Omega \quad (16)$$

Insertando en Ecs. (13) y (16) los valores de temperatura expresados como función de las funciones interpolantes (Ec. (11)), se obtiene la discretización espacial de la Ecuación del Calor con el Método de Elementos Finitos:

$$\mathbb{M}_{ij} \frac{\partial \hat{T}_j}{\partial t} + \mathbb{K}_{ij} \hat{T}_j = 0 \tag{17}$$

donde

$$\mathbb{M}_{ij} = \int_{\Omega} N_i N_j d\Omega \tag{18}$$

y

$$\mathbb{K}_{ij} = - \int_{\Omega} \nabla N_i \cdot \kappa \nabla N_j d\Omega \tag{19}$$

Ec. (17) puede escribirse en forma matricial como:

$$\mathbb{M} \frac{\partial \hat{\mathbf{T}}}{\partial t} = -\mathbb{K} \hat{\mathbf{T}} \tag{20}$$

o bien:

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{T}}}{\partial t} = -\mathbb{M}^{-1} \mathbb{K} \hat{\mathbf{T}} = -\mathbb{H} \hat{\mathbf{T}} \tag{21}$$

donde \mathbb{M} y \mathbb{K} son las matrices de masa y de difusión (stiffness), respectivamente, mientras que \mathbb{H} es la matriz térmica del sistema.

5.2. Ensamble Elemental

En el Método de Elementos Finitos las integrales que definen las matrices \mathbb{M} y \mathbb{K} son computadas sumando las contribuciones de cada volumen elemental Ω^e de la malla. Como consecuencia, se tiene que las mencionadas matrices, definidas en Ecs. (18) y (19) pueden escribirse como:

$$\mathbb{M}_{ij} = \sum_e \mathbb{M}_{ij}^{(e)} = \sum_e \left(\int_{\Omega^{(e)}} N_i^{(e)} N_j^{(e)} d\Omega^{(e)} \right) \tag{22}$$

$$\mathbb{K}_{ij} = \sum_e \mathbb{K}_{ij}^{(e)} = \sum_e \left(\int_{\Omega^{(e)}} \kappa \nabla N_i^{(e)} \cdot \nabla N_j^{(e)} d\Omega^{(e)} \right) \tag{23}$$

donde $N_i^{(e)}$ denota los valores de la función de forma $N_i(\mathbf{x})$ en el elemento e . Luego de Ecs. (22)-(23), se sigue que las componentes elementales $\mathbb{K}_{ij}^{(e)}$, $\mathbb{M}_{ij}^{(e)}$ del operador de difusión y de masa vienen dadas por:

$$\mathbb{M}_{ij}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} N_i^{(e)} N_j^{(e)} d\Omega^{(e)} \tag{24}$$

$$\mathbb{K}_{ij}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} \kappa \nabla N_i^{(e)} \cdot \nabla N_j^{(e)} d\Omega^{(e)} \tag{25}$$

Por simplicidad asumimos que κ es constante:

$$\mathbb{K}_{ij}^{(e)} = \kappa \int_{\Omega^{(e)}} \nabla N_i^{(e)} \cdot \nabla N_j^{(e)} d\Omega^{(e)} \tag{26}$$

5.3. Integración Temporal

Existen varios métodos para integrar las Ecs. (21). Aquí fijaremos ideas solamente con el método explícito de Euler. Dados los valores de temperatura nodal \hat{T}_i^n correspondientes al tiempo t^n , las temperaturas nodales \hat{T}^{n+1} al tiempo siguiente $t^{n+1} = t^n + dt$ se determinan mediante:

$$\hat{T}^{(n+1)} = \hat{T}^{(n)} - \Delta t \mathbb{H} \hat{T}^{(n)} \quad (27)$$

6. CONSISTENCIA TERMODINÁMICA DE OPERADORES DISCRETOS

En la Sección anterior demostramos que la aplicación del Método de Elementos Finitos a la Ecuación del Calor lleva a la siguiente expresión semi-discreta:

$$\frac{\partial \hat{T}}{\partial t} = -\mathbb{H} \hat{T} \quad (28)$$

con

$$\mathbb{H} = \mathbb{M}^{-1} \mathbb{K} \quad (29)$$

Expandiendo Eq. (28) en componentes se tiene que:

$$\frac{\partial \hat{T}_i}{\partial t} = - \sum_j \mathbb{H}_{ij} \hat{T}_j \quad (30)$$

Separando términos diagonales ($j = i$) de los no diagonales ($j \neq i$), resulta que la Ec. (30) se puede escribir como:

$$\frac{\partial \hat{T}_i}{\partial t} = -\mathbb{H}_{ii} \hat{T}_i - \sum_{j \neq i} \mathbb{H}_{ij} \hat{T}_j = (-\mathbb{H}_{ii} - \sum_{j \neq i} \mathbb{H}_{ij}) \hat{T}_i + \sum_{j \neq i} \mathbb{H}_{ij} (\hat{T}_i - \hat{T}_j) \quad (31)$$

Entonces, en general tenemos que:

$$\frac{\partial \hat{T}_i}{\partial t} = -\mathbb{h}_i \hat{T}_i + \sum_{j \neq i} \mathbb{H}_{ij} (\hat{T}_i - \hat{T}_j) \quad (32)$$

donde hemos definido el coeficiente $\mathbb{h}_i = \sum_j \mathbb{H}_{ij}$.

Ahora procedamos a analizar la consistencia termodinámica de la formulación, i.e. la compatibilidad de la Ec. (32) con la Ley de Flujo de Calor. Para esto aislemos en dicha ecuación la contribución a la variación de temperatura del nodo i producida por un nodo j arbitrario. Se tiene que:

$$\left. \frac{\partial \hat{T}_i}{\partial t} \right|_{j\text{-contribution}} = \mathbb{H}_{ij} (\hat{T}_i - \hat{T}_j) \quad (33)$$

Asumamos que en cualquier dado instante $\hat{T}_j > \hat{T}_i$, luego como la temperatura de nodo j es mayor que la temperatura en i , el calor debe fluir de nodo j hacia nodo i , produciendo un incremento positivo en la temperatura de nodo i . Expresado matemáticamente, tenemos que:

$$\text{si } (\hat{T}_i - \hat{T}_j) < 0 \quad \text{entonces} \quad \left. \frac{\partial \hat{T}_i}{\partial t} \right|_{j\text{-contribution}} \geq 0 \quad (34)$$

Aplicando condición (34) a Ec. (33), resulta que para ser termodinámicamente consistente, los coeficientes no diagonales de la matriz \mathbb{H} deben ser negativos o nulos:

$$\mathbb{H}_{ij} \leq 0 \quad \forall j \neq i \quad (35)$$

Propiedad 6.1 - Consistencia Termodinámica Global: Una formulación FEM es globalmente consistente, si produce matrices \mathbb{H} con coeficientes no diagonales no positivos.

Como las matrices \mathbb{M} , \mathbb{K} representan simplemente la suma de contribuciones al flujo de calor de cada elemento de volumen $\Omega^{(e)}$, debiera esperarse que la satisfacción del segundo principio suceda a nivel elemental, de lo contrario existirían zonas $\Omega^{(e)}$ dentro del dominio Ω generando un flujo de calor no-físico.

Propiedad 6.2 - Consistencia Termodinámica Elemental: Una formulación FEM es termodinámicamente consistente a nivel elemental, si todas las matrices de flujo elemental

$$\mathbb{H}^{(e)} = \mathbb{M}^{(e)-1} \mathbb{K}^{(e)} \quad (36)$$

cumplen que

$$\mathbb{H}_{ij}^{(e)} \leq 0 \quad \forall j \neq i \quad (37)$$

Nota 6.1 Propiedad 6.2 es equivalente a decir que la simulación de un problema de flujo térmico con una malla de 1 solo elemento debe ser termodinámicamente consistente. Si una formulación satisface Consistencia Global para toda Malla entonces debe satisfacer Consistencia Elemental

7. INCONSISTENCIA TERMODINÁMICA DEL MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS EN 1D

Esta Sección está dedicada a mostrar que la discretización con el método de Elementos Finitos de la ecuación del calor 1-Dimensional es termodinámicamente inconsistente y por lo tanto viola la segunda ley de la termodinámica.

7.1. Matrices Elementales 1D con Funciones de Forma Lineales

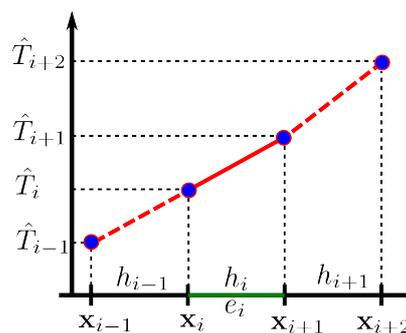


Figura 1: Discretización típica en 1D para la ecuación del calor

Esta verificación se hará usando las funciones de forma más típicas de FEM, es decir, las funciones de interpolación lineales a trozos. En el caso de la ecuación del calor 1D, el problema discreto a resolver consiste en determinar la distribución de temperaturas nodales, definidas por una malla de segmentos consecutivos, como se muestra en la Fig. 1. En este caso las funciones de forma lineales adoptan la forma presentada en la Fig. 2. Los elementos discretos que forman la malla son segmentos consecutivos, entre nodos. En la Figs. (1) y (2), se muestra en verde

el elemento e_i definido por los nodos i e $i + 1$. Usando Ecs. (24)-(25) y las funciones lineales $N_i(x)$ como las que se muestran en Figura (2), se puede calcular las matrices elementales. Estas resultan ser:

$$\mathbb{M}^{(e)} = \frac{h_i}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \quad (38)$$

$$\mathbb{K}^{(e)} = \frac{\kappa}{h_i} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (39)$$

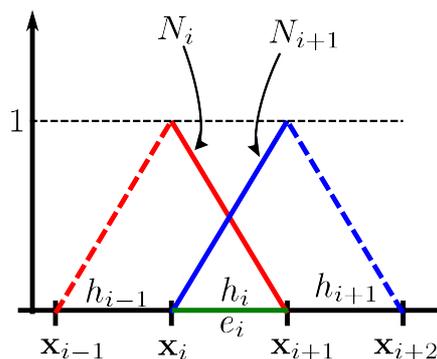


Figura 2: Discretización FEM 1D

7.2. Consistencia Termodinámica Elemental 1D

Para verificar la consistencia termodinámica elemental tenemos que determinar si es válida la Ec. (37). Usando las Ecs. (38)-(39) para computar las matrices de flujo elementales $\mathbb{H}^{(e)}$ resulta que:

$$\mathbb{H}^{(e)} = \mathbb{M}^{(e)-1} \mathbb{K}^{(e)} = \frac{k}{h_i^2} \begin{bmatrix} 6 & -6 \\ -6 & 6 \end{bmatrix} \quad (40)$$

Notese, entonces que $\mathbb{H}_{ij}^{(e)} \leq 0$ para todo $j \neq i$. Esto demuestra, como era de esperar, que la formulación FEM 1D es termodinámicamente consistente a nivel elemental.

Resultado 7.1 *La discretización elemental resultante de aplicar el Método de Elementos Finitos a la ecuación del calor 1D satisface la Propiedad 6.2. Por lo tanto, la discretización FEM es termodinámicamente consistente a nivel elemental, i.e. satisface elementalmente la segunda Ley de la Termodinámica.*

7.3. Inconsistencia Termodinámica Global 1D

Para verificar la consistencia termodinámica global tenemos que determinar si es válida la Ec. (35). Sería de esperar que la formulación de elementos finitos sea globalmente consistente debido al hecho de que la formulación es elementalmente consistente. Un simple caso probará que esto no es así.

Considérese el problema de conducción del calor en una barra unidimensional de longitud $L = 1$, aislada en sus extremos y con coeficiente térmico unitario $\kappa = 1$. Se discretiza la barra mediante una malla de 3 segmentos iguales de longitud $L/3$. Los nodos están ubicados en las posiciones $x_1 = 0$, $x_2 = 1/3L$, $x_3 = 2/3L$, $x_4 = L$. Puede verificarse usando las ecuaciones de

ensamble (22)-(23), que las matrices globales para este caso son:

$$\mathbb{H} = \begin{bmatrix} 39,6 & -50,4 & 14,4 & -3,6 \\ -25,2 & 46,8 & -28,8 & 7,2 \\ 7,2 & -28,8 & 46,8 & -25,2 \\ -3,6 & 14,4 & -50,4 & 39,6 \end{bmatrix} \quad (41)$$

Es evidente que los valores positivos de 14.4 y 7.2, implican que $\mathbb{H}_{ij} > 0$ para ciertos $j \neq i$. Por lo tanto, la discretización viola la Propiedad 6.1 de consistencia termodinámica. Se tiene por lo tanto el siguiente resultado:

Resultado 7.2 *La discretización global resultante de aplicar el Método de Elementos Finitos a la ecuación del calor 1D viola Propiedad 6.1. Por lo tanto, las formulaciones FEM resultar termodinámicamente inconsistentes, i.e. violan la segunda Ley de la Termodinámica a nivel global.*

Es posible ver fácilmente los efectos físicos que puede tener la violación de dicha ley usando una simulación estándar.

Supóngase que resolvemos el problema de la barra unidimensional mencionado precedentemente, mediante el método de Euler indicado en Ec. (27). Los valores de temperatura nodal inicial se eligen como: $\hat{T}^{(0)} = [\hat{T}_1^{(0)} \hat{T}_2^{(0)} \hat{T}_3^{(0)} \hat{T}_4^{(0)}]^T = [0 \ 0 \ 1 \ 1]^T$. En la Fig. 3 se muestra la evolución de las temperatura nodales. Puede verse allí que la violación de la segunda ley da origen a un resultado no físico en la evolución de temperaturas de nodo 4. Al estar la barra aislada y estando el nodo 4 inicialmente a la máxima temperatura $\hat{T}_4^{(0)} = 1$, el calor debería fluir de este nodo a los demás, produciendo una reducción de su temperatura. Al contrario de lo que ocurre en la realidad, la simulación numérica indica que en los instantes iniciales ocurre un aumento de la temperatura nodal (línea verde) por arriba de la temperatura máxima posible $T_{max} = 1$. Esto se debe al flujo de calor no físico resultante de la discretización. Algo parecido pero al revés ocurre con la temperatura de nodo 1.

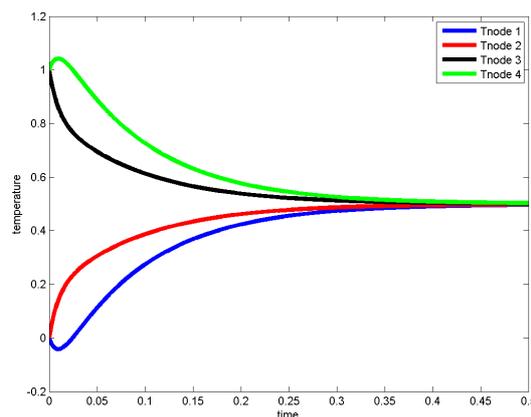


Figura 3: Evolución de temperaturas nodales de una barra discretizada mediante FEM con una malla de 4 nodos

8. INCONSISTENCIA TERMODINÁMICA DEL MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS EN 2D

En la Sección precedente hemos demostrado que el Método de Elementos Finitos para el caso 1D, satisface la segunda ley de la Termodinámica a nivel elemental pero la viola a nivel

global. En esta Sección investigamos que sucede en el caso 2Dimensional. Consideremos la ecuación del calor (7) para el caso 2D, a ser resuelta en un dominio Ω definido con una malla no estructurada de elementos triangulares. El primer paso para resolver el problema es determinar la forma de las matrices elementales $\mathbb{K}^{(e)}$ y $\mathbb{M}^{(e)}$. Esto se presenta en la siguiente subsección.

8.1. Operadores Elementales FEM para elementos triangulares con Funciones de Forma Lineales

Considérese un elemento triangular e . Los nodos que definen el elemento están denotados por $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k$. Los parámetros nodales asociados están definidos con los índices i, j, k . Por lo tanto, $N_j^{(e)}$ es la función de forma lineal asociada a nodo j y $\nabla N_j^{(e)}$ su gradiente. La cara (o segmento) opuesta a nodo j se denota con f_j , y por l_j el área o longitud de la misma. Con \mathbf{n}_j se denota al vector saliente unitario normal a la cara f_j . Con h_j se denota la altura del triángulo asociada a nodo j . El área del triángulo se denota como σ . Con α_j se denota al ángulo interno del triángulo asociado a nodo j .

Debido a la variación lineal de las funciones de forma y por simple geometría se tiene que:

$$\nabla N_j^{(e)} = -\frac{1}{h_j} \mathbf{n}_j \quad (42)$$

Luego, usando Ec. (25) se tiene que:

$$\mathbb{K}_{ij}^{(e)} = \kappa \frac{1}{h_i} \frac{1}{h_j} \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n}_j \sigma \quad (43)$$

Separando los casos $j = i$ y $j \neq i$ y denotando por ϕ_{ij} al ángulo entre los versores \mathbf{n}_i y \mathbf{n}_j se tiene que:

$$\mathbb{K}_{ij}^{(e)} = \begin{cases} \frac{\kappa \sigma}{h_i h_i} & j = i \\ \frac{\kappa \sigma}{h_i h_j} \cos(\phi_{ij}) & j \neq i \end{cases} \quad (44)$$

Por definición de las alturas de un triángulo se tiene que:

$$\sigma = \frac{1}{2} l_j h_j = \frac{1}{2} l_i h_i = \frac{1}{2} l_k h_k \quad (45)$$

Por simple trigonometría puede demostrarse que en general, $\phi_{ij} = \pi - \alpha_k$. Por lo tanto la Ec. (44) puede escribirse como (Draganescu et al., 2004):

$$\mathbb{K}_{ij}^{(e)} = \begin{cases} \frac{\kappa l_i^2}{4\sigma} & j = i \\ -\frac{\kappa}{2} \cot(\alpha_k) & j \neq i \end{cases} \quad (46)$$

Por otro lado la matriz de masa elemental es independiente de la geometría de elemento siendo únicamente proporcional al área de mismo. La expresión de $\mathbb{M}^{(e)}$ es:

$$\mathbb{M}^{(e)} = \frac{\sigma^{(e)}}{12} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \quad (47)$$

8.2. Inconsistencia Termodinámica Elemental 2D

Para comprobar la consistencia termodinámica elemental de la discretización FEM, tenemos que determinar si es válida la Ec. (37). Presentamos un contraejemplo para demostrar que en general la formulación FEM es termodinámicamente inconsistente a nivel elemental. Por simplicidad asumimos que $\kappa = 1,0$. A manera de ejemplo, computemos las matrices $\mathbb{K}^{(e)}$, $\mathbb{M}^{(e)}$ y $\mathbb{H}^{(e)}$ asociadas a un triángulo e cuyos nodos están definidos por las coordenadas:

$$\hat{\mathbf{x}}^{(e)} = \begin{bmatrix} 0,0 & 0,0 \\ 1,0 & 0,0 \\ 1,5 & 1,0 \end{bmatrix}$$

De Ecs. (46) y (47), resulta que:

$$\mathbb{K}^{(e)} = \begin{bmatrix} 0,6250 & -0,8750 & 0,2500 \\ -0,8750 & 1,6250 & -0,7500 \\ 0,2500 & -0,7500 & 0,5000 \end{bmatrix} \quad (48)$$

$$\mathbb{M}^{(e)} = \begin{bmatrix} 1/12 & 1/24 & 1/24 \\ 1/24 & 1/12 & 1/24 \\ 1/24 & 1/24 & 1/12 \end{bmatrix} \quad (49)$$

Por lo tanto la matriz térmica es:

$$\mathbb{H}^{(e)} = \mathbb{M}^{(e)-1}\mathbb{K}^{(e)} = \begin{bmatrix} 15 & -21 & 6 \\ -21 & 39 & -18 \\ 6 & -18 & 12 \end{bmatrix} \quad (50)$$

Nótese, entonces que $\mathbb{H}_{ij}^{(e)} > 0$ para ciertos $j \neq i$. Esto demuestra, contrariamente a lo que uno supondría, que la formulación de Elementos Finitos 2D es inconsistente a nivel elemental.

Resultado 8.1 *La discretización elemental resultante de aplicar el Método de Elementos Finitos a la ecuación del calor 2D en general no satisface Propiedad 6.2. Por lo tanto, la discretización FEM es termodinámicamente inconsistente a nivel elemental, i.e. no satisface la segunda Ley de la Termodinámica a nivel elemental.*

8.3. Inconsistencia Termodinámica Global 2D

Para verificar la consistencia termodinámica global tenemos que determinar si es válida la Ec. (35) en caso de mallas con 2 o más elementos. Un simple caso con dos elementos probará que en general el Método de Elementos Finitos también es inconsistente a nivel global para el caso 2D.

Considérese el problema de conducción del calor en un cuadrángulo con paredes aisladas de lados iguales de longitud $L = 1$, similar al que se muestra en Fig(4). Se asume un coeficiente térmico unitario $\kappa = 1$. Los vértices del cuadrángulo se asumen definidos por las siguientes coordenadas:

$$\hat{\mathbf{x}}^{(e)} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \mathbf{x}_3 \\ \mathbf{x}_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,0 & 0,0 \\ 1,0 & 0,0 \\ 1,5 & 1,0 \\ 0,5 & 1,0 \end{bmatrix}$$

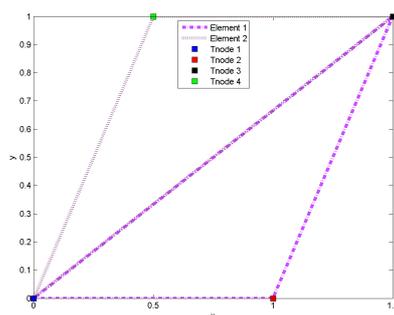


Figura 4: Dominio cuadrangular y malla de dos elementos

El cuadrángulo se discretiza mediante una malla formada por dos triángulos iguales e_1 y e_2 , definidos por los nodos [1,2,3] y [3,4,1], respectivamente. Puede verificarse usando las ecuaciones de ensamble (22)-(23), que las matrices globales para este caso son:

$$\mathbb{H} = \begin{bmatrix} 13,5 & -10,5 & 6,00 & -9,0 \\ -20,25 & 29,25 & -18,75 & 9,75 \\ 6,0 & -9,0 & 13,5 & -10,5 \\ -18,75 & 9,75 & -20,25 & 29,25 \end{bmatrix} \quad (51)$$

Es evidente que los valores positivos (6.0 y 9.75) de \mathbb{H}_{ij} para ciertos $j \neq i$ resultan en la violación de la Propiedad 6.1 de consistencia termodinámica. Se tiene por lo tanto el siguiente resultado:

Resultado 8.2 *La discretización global resultante de aplicar el Método de Elementos Finitos 2D viola Propiedad 6.1. Por lo tanto, FEM es como regla general termodinámicamente inconsistente, i.e. viola la segunda Ley de la Termodinámica a nivel global.*

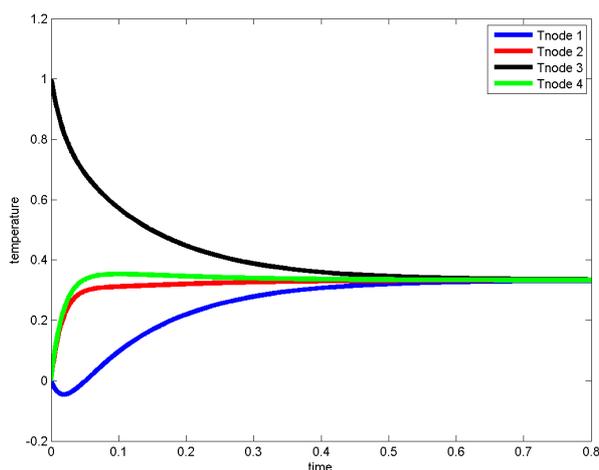


Figura 5: Evolución de temperaturas nodales obtenidas con el Método de Elementos Finitos sobre un cuadrángulo

Es posible ver con facilidad los efectos que puede tener el resultado anterior en una simulación estándar. Supóngase que resolvemos el problema de calor sobre el cuadrángulo arriba

mencionado, mediante el método de Euler indicado en Ec. (27), con la condición inicial de temperaturas dadas por: $\hat{T}^{(0)} = [\hat{T}_1^{(0)} \hat{T}_2^{(0)} \hat{T}_3^{(0)} \hat{T}_4^{(0)}]^T = [0 \ 0 \ 1 \ 0]^T$. En la Fig. 5 se muestra la evolución de temperaturas nodales. Puede verse allí que la violación de la segunda ley da origen a un resultado no físico evidente en la evolución de temperaturas de nodo 1. Al tener el cuerpo cuadrángulo paredes aisladas y estando la temperatura inicial del cuadrángulo entre 0 y 1, es físicamente imposible que una parte de este adquiera luego temperaturas menores que $T_{\min} = 0$. Sin embargo esto es lo que ocurre en la simulación numérica con las temperaturas nodales de nodo 1. El valor no físico de temperatura alcanza el valor $T_{\text{non-physical}} = -0,07$.

9. CONCLUSIONES

En el presente trabajo se describe el fenómeno de violación de la segunda Ley de la Termodinámica por parte de las formulaciones discretas derivadas del Método de Elementos Finitos tanto en el caso 1D como 2D. Se presentan ejemplos y cálculos tanto matemáticos como numéricos concluyentes. La violación de la segunda Ley de la Termodinámica, reportada aquí para el caso 1D y 2D, sucede también en problemas 3D (3-Dimensionales). Este es un tópico que se discutirá en un próximo trabajo.

REFERENCIAS

- Brandt A. Generalized local maximum principles for finite-difference operators. *Math. Comp.*, 74(249):1–23, 2004.
- Burman E. y Ern A. Discrete maximum principle for Galerkin approximations of the laplace operator on arbitrary meshes. *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I*, 338:641–646, 2004.
- Burman E. y Ern A. Stabilized Galerkin approximation of convection-diffusion-reaction equations: discrete maximum principle and convergence. *Mathematics of Computation*, 74(252):1637–1652, 2005.
- Draganescu A., Dupont T.F., y Scott L.R. Generalized local maximum principles for finite-difference operators. *Math. of Comp.*, 27(124):685–718, 2004.
- Elshebli M.A. Discrete maximum principle for the finite element solution of linear non-stationary diffusion reaction problems. *Applied Mathematical Modelling*, 32(260):1530–1541, 2008.
- Faragó I. y Horváth R. Continuous and discrete parabolic operators and their qualitative properties. *IMA J Numer Anal*, 29(3):606–631, 2009.
- Faragó I., Karátson J., y Korotov S. Discrete maximum principles for nonlinear parabolic pde systems. *IMA J Numer Anal*, -(-):avail. online, 2012.
- Fujii H. Some remarks on finite element analysis of time-dependent field problems. En Y. Yamada y R.H.G.U. of Tokyo Press, editores, *in Theory and Practice in Finite Element Analysis*, páginas 91–106. 1973.
- Jüngel A. y Unterreiter A. Discrete minimum and maximum principles for finite element approximations of non-monotone elliptic equations. *Journal Numerische Mathematik archive*, 99(3):485–508, 2005.
- Liska R. y Shashkov M. Enforcing the discretemaximum principle for linear finite element solutions of second-order elliptic problems. *Commun. Comput. Phys.*, 3(4):852–877, 2008.
- Rank E., Katz C., y Werner H. On the importance of the discrete maximum principle in transient analysis using finite element methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 19:1771–1782, 1983.
- Varga R. On a discrete maximum principle. *J. SIAM Numerical Analysis*, 3(2):355–359, 1966.

Vejchodský T. y Łolín P. Discrete maximum principle for higher-order finite elements in 1d.
Math. Comp., 76(260):1833–1846, 2007.