

Capítulo 3

Métodos alternativos de resolución numérica

Algunos autores proponen [17, 18] la validez de la utilización de cuadraturas de Gauss para la resolución numérica de ecuaciones integrales, donde la función conocida presenta discontinuidades, o lo que es equivalente, la función incógnita presenta singularidades logarítmicas.

En el presente trabajo se evaluaron distintos métodos de resolución de ecuaciones integrales, más allá del visto en la sección 2.5, que a priori, no tienen garantizada la convergencia a la solución debido a la presencia de la singularidad logarítmica. La motivación para probar estos métodos radica en que el área debajo de una curva con una singularidad de este tipo, existe y está acotada. En ese caso, el tratamiento numérico para estas integrales impropias está ampliamente documentado y se puede encontrar en prácticamente cualquier libro de análisis numérico. Se busca entonces adaptar algunos de estos métodos de integración a la resolución de una ecuación integral.

3.1 Método basado en Newton-Cotes

El primer método de resolución se buscó lo más sencillo posible, como manera de comprobar la influencia de la singularidad en el resultado obtenido. El mismo se basó en un método de integración de Newton-Cotes, comúnmente llamado regla del punto medio, el cual aproxima el área encerrada debajo de una curva como la suma de las áreas de rectángulos de igual base, cuya altura

es igual a la función en el punto medio del intervalo. La siguiente ecuación refleja este razonamiento, el cual se puede ver gráficamente en la figura 3.1.

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_1^N h f\left(\frac{\xi_i}{2}\right) \quad (3.1)$$

Donde $h = (b-a)/N$ es el ancho de cada intervalo, los “ $N+1$ ” $x_i = a+h(i-1)$ son los extremos de cada uno de los N intervalos y los $\xi_i = (x_{i+1} + x_i)/2$ son los puntos medios del intervalo, donde se evalúa la función.

Para adaptar este método al de una ecuación integral, se toman los “ $N + 1$ ” extremos de los intervalos (x_i) como puntos de colocación y los “ N ” puntos intermedios (ξ_i), como los puntos de integración en donde la función es una incógnita.

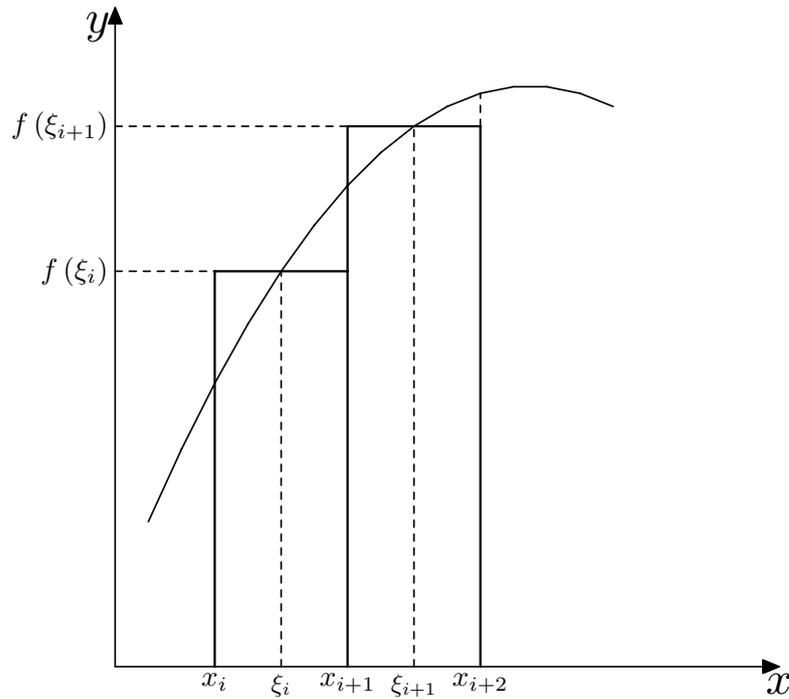


Figure 3.1: Esquema del método de integración del tipo Newton-Cotes.

3.1.1 Aplicación a un caso particular

Se presenta el caso de un sólido plano infinito, sin concentradores de tensiones, en el cual crece una grieta de longitud “ $2a$ ”, sometido a una tensión

externa de tracción “ σ_y^∞ ”. Como en la práctica siempre se buscará el máximo en la tensión de la barrera, se presenta el caso para el cual la grieta ha alcanzado la posición misma del borde de grano, es decir, no existe zona plástica. La figura 2.7, en la página 31 muestra un esquema del problema estudiado. La ecuación de equilibrio de dislocaciones para este caso particular es la ecuación 2.1, en la página 17.

Como se mencionó anteriormente, para este caso particular la solución analítica existe, por lo que se utilizará para comparar con los resultados numéricos.

La ecuación integral se transforma en $N + 1$ ecuaciones del tipo:

$$\sum_{i=1}^N h \frac{f(\xi_i)}{x_k - \xi_i} = -\frac{\sigma_y^\infty - \sigma_f(x_k)}{A} \quad (3.2)$$

$$\text{Siendo } \sigma_f = \begin{cases} 0 & \text{si } |x_k| < n \\ \sigma_3 & \text{si } |x_k| > n \end{cases}$$

$$\xi_i = \frac{x_{k+1} + x_k}{2} \quad i = 1, \dots, N \quad x_k = -1 + \frac{2 \cdot (k-1)}{N} \quad k = 1, \dots, N+1$$

Dicho sistema de ecuaciones presenta una ecuación por cada punto de colocación, x_i ($N + 1$ ecuaciones), mientras que la función evaluada en los N puntos de integración, $f(\xi_i)$, y la tensión en la barrera, σ_3 , son las $N + 1$ incógnitas del sistema.

La figura 3.2 muestra la comparación entre la función de distribución obtenida numéricamente y la teórica, calculada mediante la ecuación 2.2, para un valor de $n = 0.75$ elegido arbitrariamente, y una tensión externa aplicada unidad $\sigma_y^\infty = 1$.

La tensión en la barrera obtenida de forma teórica mediante la ecuación 2.4, σ_{3Teo} , es:

$$\sigma_{3Teo} = 2.173407904$$

Por su parte, la tabla 3.1 muestra los resultados obtenidos y el error porcentual, calculado según la ecuación 3.3, de cada uno de ellos, para distintas cantidades de ecuaciones utilizadas (N).

$$\text{Error } \% = \frac{|Valor Teorico - Valor Numerico|}{Valor Teorico} \cdot 100 \quad (3.3)$$

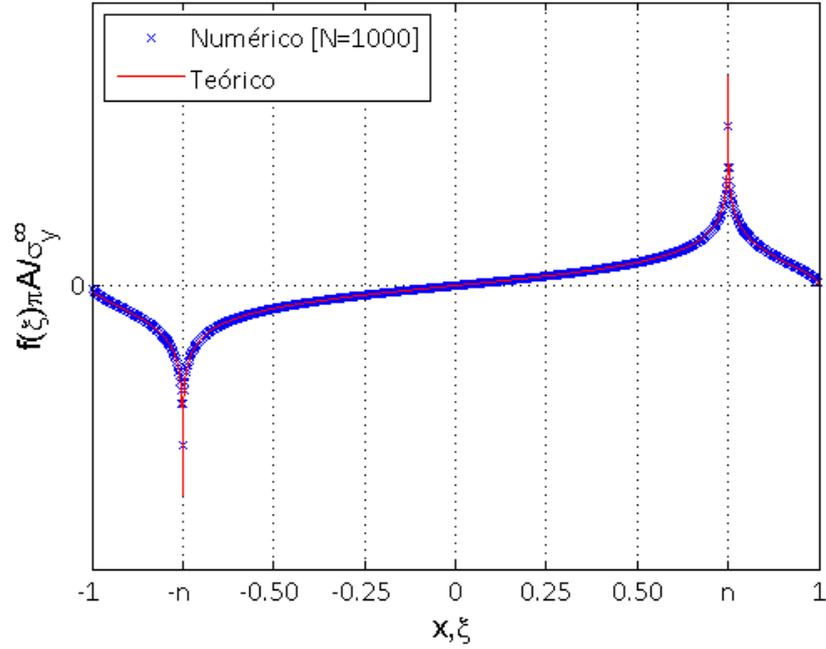


Figure 3.2: Comparación entre la función de distribución de dislocaciones numérica obtenida mediante un método basado en NC y la teórica obtenida mediante la ecuación 2.2.

Table 3.1: Valores de σ_3 obtenidos y error porcentual. Método de Newton-Cotes

N	$\sigma_{3Num}/\sigma_y^\infty$	Error Porcentual (%)
10	1.859203677	14.4568
100	2.15642895	0.7812
1000	2.176251164	0.1308
5000	2.173976281	0.0262
10000	2.173692075	0.0131
15000	2.173597348	0.0087
20000	2.173549985	0.0065
25000	2.173521568	0.0052
30000	2.173502624	0.0044
35000	2.173489092	0.0037

La figura 3.3 muestra un gráfico en escala doble logarítmica donde se aprecia

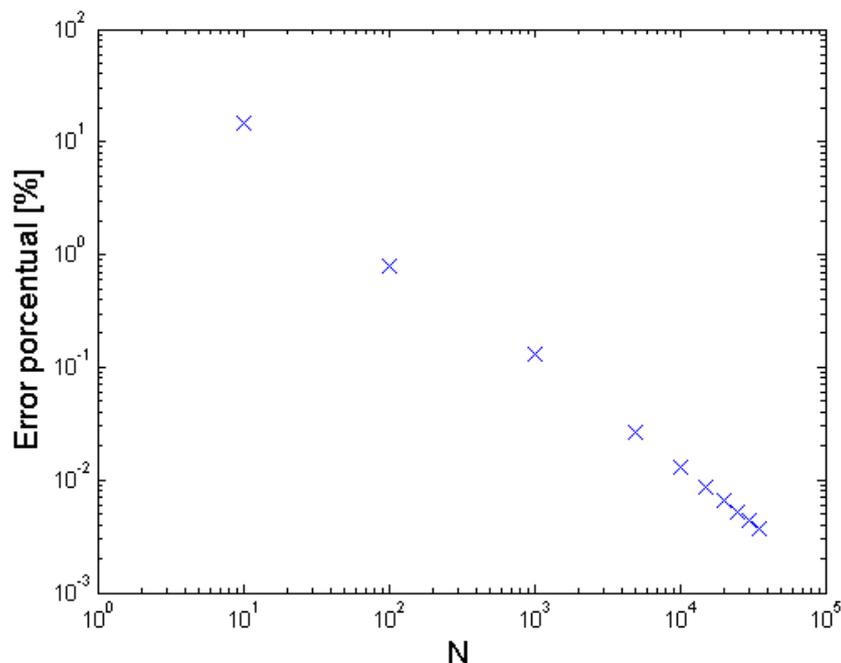


Figure 3.3: Error relativo del método basado en NC en función de N .

la tendencia del error en relación al número de ecuaciones N . Como era de esperarse por la naturaleza del método de resolución, dicho gráfico muestra una tendencia lineal.

Si bien, pese a la presencia de la singularidad logarítmica, queda comprobada la convergencia del método hacia la solución real, la relación entre el tiempo de ejecución y el error porcentual no es buena. Sumado a esto, el sistema tiene una clara tendencia a quedar mal condicionado, complicando en algunos casos más complejos su resolución. Sin embargo, este método sencillo comprueba la propuesta inicial de utilizar métodos para funciones acotadas pese a la presencia de la singularidad.

3.2 Método propuesto por Erdogan, Gupta y Cook

Con la misma lógica relacionada a la influencia de la singularidad, empleada antes de realizar el método basado en Newton-Cotes, se decidió probar otro

método de resolución, esta vez basado en cuadraturas de Gauss. Dicho método es el propuesto por Erdogan, Gupta y Cook, visto en la sección 2.5, para un sólo intervalo de integración donde la función es acotada en ambos extremos.

3.2.1 Aplicación a un caso particular

Se aplicó este método de resolución al caso presentado en la sección 3.1.1. La ecuación integral utilizada es, nuevamente, la ecuación 2.1 y el sistema de ecuaciones que deriva luego de aplicar la ecuación 2.25 de la página 32 es el siguiente:

$$-\frac{\sigma_y^\infty - \sigma_f(x_k)}{\pi \cdot A} = \sum_{i=1}^N \frac{1 - \xi_i^2}{(N + 1)(\xi_i - x_k)} f(\xi_i) \quad (3.4)$$

Los x_k y los ξ_i son las raíces de los polinomios de Chebyshev de primero y segundo orden, cuyo cálculo se vio en la sección 2.5. Por su parte, σ_f toma valor σ_3 , incógnita del problema, cuando el punto de colocación pertenece a la barrera ($|x_k| > n$) y se anula para todos los demás casos.

La figura 3.4 muestra la distribución de dislocaciones calculada de forma numérica para $N = 1000$ junto con la teórica.

La tabla 3.2 muestra la tensión σ_3 y el error porcentual asociado, calculado según la fórmula 3.3, mientras que la figura 3.5 muestra el error porcentual en función del número de ecuaciones en un gráfico con escala doble logarítmica. Al contrario del método anterior, el error no siempre disminuye con el aumento del número de ecuaciones. Esta particularidad hace muy difícil la elección de N para trabajos futuros, donde se desconocerá el valor exacto de la tensión en la barrera, no garantizando que un aumento en el número de ecuaciones lleve a un resultado más preciso.

Con el fin de solucionar este problema y sabiendo que la presencia de la singularidad podría ser responsable de este comportamiento anómalo, se calculó la distancia del punto de integración (donde se calcula la función) más cercano a la posición de la singularidad para cada N y se lo comparó con el error relativo correspondiente.

La figura 3.6 muestra al error porcentual en el cálculo de la tensión en la barrera, en función de la distancia adimensional mínima entre la singularidad y el punto de integración más cercano a ella. Se observa claramente una

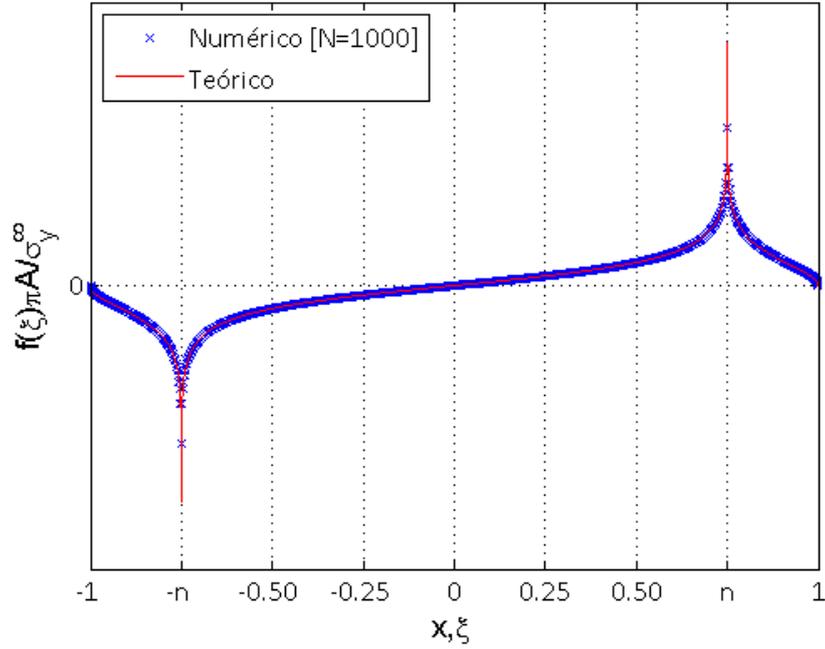


Figure 3.4: Comparación entre la función de distribución de dislocaciones numérica obtenida mediante el método de Erdogan, Gupta y Cook y la teórica.

Table 3.2: Valores de σ_3 obtenidos y error porcentual. Método de Erdogan et al.

N	$\sigma_{3Num}/\sigma_y^\infty$	Error Porcentual %	N	$\sigma_{3Num}/\sigma_y^\infty$	Error Porcentual %
5	3	38.0321	17500	2.173497268	0.0041
10	1.833	15.6471	20000	2.173549228	0.0065
100	2.195652174	1.0235	22500	2.173589645	0.0084
1000	2.176086957	0.1233	25000	2.173244089	0.0075
2500	2.174782609	0.0633	27500	2.173304884	0.0047
5000	2.174347826	0.0432	30000	2.173355549	0.0024
7500	2.172943221	0.0214	32500	2.173398422	0.0004
10000	2.173185571	0.0102	35000	2.173435171	0.0013
12500	2.173331015	0.0035	37500	2.173467022	0.0027
15000	2.173427992	0.0009			

dependencia prácticamente lineal entre las variables, siendo menor el error porcentual cometido cuando menor es la distancia entre la singularidad y

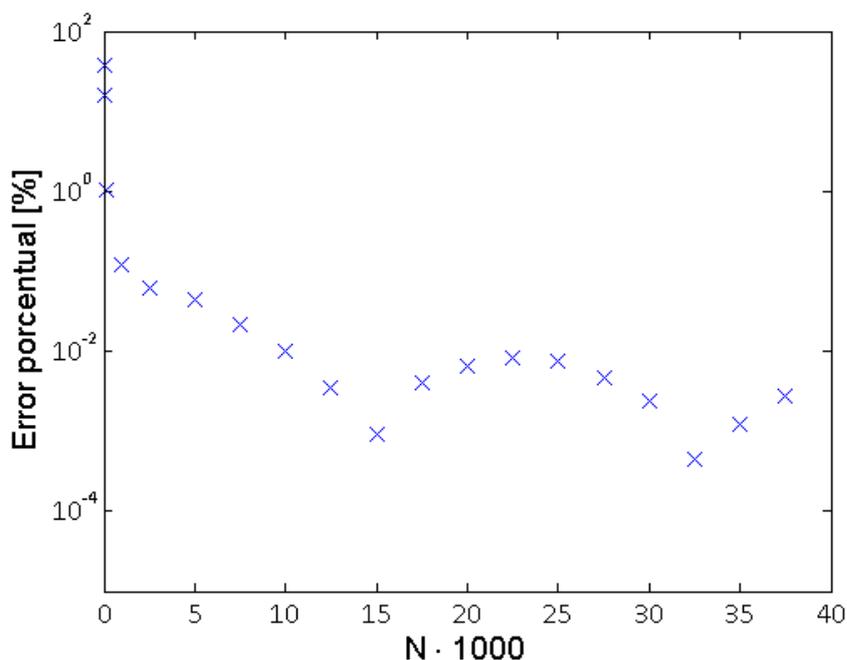


Figure 3.5: Error relativo del método de Erdogan, Gupta y Cook en función de N .

algún punto de integración.

Esto resulta lógico, ya que la tensión en la barrera depende del área encerrada por la función de distribución de dislocaciones, y este método obvia totalmente la presencia de la singularidad. Por otra parte, el área encerrada debajo de una singularidad logarítmica tiende a cero para intervalos de integración también tendientes a cero. Por ello, cuanto más cerca se coloquen los puntos de integración de la singularidad, menor será el área afectada que no se toma en cuenta y por tanto, mayor la precisión del método.

Siguiendo esta lógica, se calculó el número de ecuaciones que garantiza la mínima distancia de un punto de integración a la singularidad, es decir, se buscó el siguiente mínimo para distintos N en un intervalo $N \in [2, 1000]$:

$$\min ||\xi_i| - n|$$

El valor de N encontrado es $N = 751$.

La figura 3.7 muestra el error relativo de todos los valores antes calculados junto con este nuevo valor, para $N = 751$, en un gráfico de escala doble

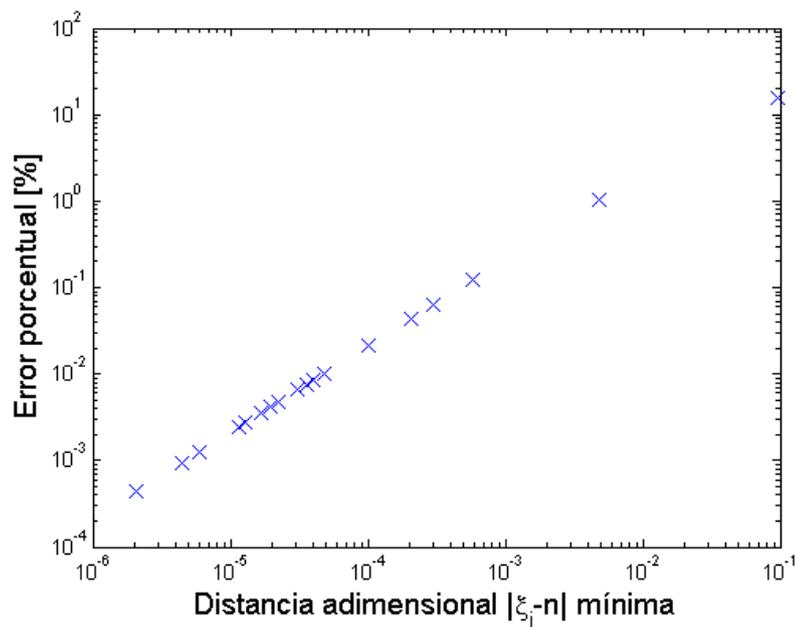


Figure 3.6: Error porcentual en función de la distancia adimensional mínima entre un punto de integración y la singularidad.

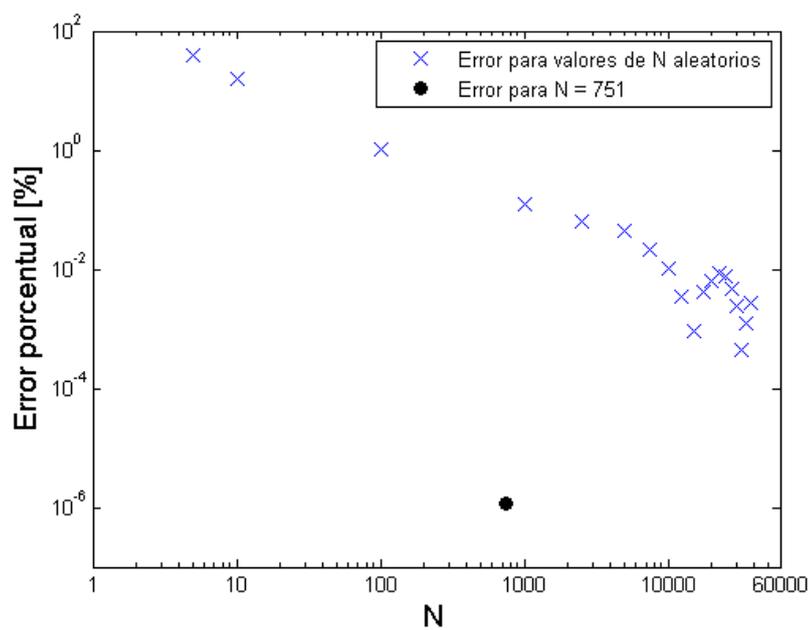


Figure 3.7: Comparación entre el error relativo del método de Erdogan, Gupta y Cook para distintos N y para $N = 751$.

logarítmica.

Se observa claramente que el error conseguido es menor que en cualquiera de los casos anteriores, los cuales incluyen valores de N prácticamente dos órdenes de magnitud mayores que el utilizado.

Finalmente, se optó por este método para la resolución numérica del modelo NR, para todos los casos, quedando pendiente como trabajo a futuro, la comprobación teórica de la convergencia del método propuesto por Erdogan, Gupta y Cook o la obtención de un nuevo método, para casos en los que la función incógnita presenta una singularidad logarítmica.