ANEXO 3: Planteo de las ecuaciones en forma matricial utilizando la técnica de las diferencias finitas.

En el presente anexo se plantean las ecuaciones correspondientes a cada nivel estructural, se modifican aplicando la técnica de las diferencias finitas y se plantean de forma matricial. Una vez planteadas se presenta el esquema de resolución iterativa.

Ecuaciones correspondientes al nivel microestructural

Balance de masa sobre un elemento micro

La microestructura se divide en K elementos, K+1 nodos y se plantea la ecuación de balance de masa de acuerdo con:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\phi_{\mathrm{m}}.S_r^{\ m}\right)-\nabla.\left(k_{\mathrm{m}}\nabla\varphi_{\mathrm{m}}\right)=0 \tag{A.1}$$

- $\phi_{\mathrm{m}}=\dfrac{\mathrm{e}_{\mathrm{m}}}{\left(1+\mathrm{e}_{\mathrm{m}}\right)}$ y $S_r^{\ m}$ son la porosidad y el grado de saturación evaluados a nivel local
- k_{m} y φ_{m} son el coeficiente de permeabilidad y el potencial de agua y $\varphi_m=\cancel{z}+\dfrac{p_{wm}}{\gamma_w}$

Derivando la expresión (A.1) se tiene

$$\frac{Sr_{mi,j}*\dot{e}_{mi,j}+\dot{S}r_{mi,j}*e_{mi,j}}{\left(1+e_{mi,j}\right)}=\frac{1}{\gamma_w}\left\{k_{mi,j}\frac{\partial^2 p_{wmi,j}}{\partial x^2}+\cancel{\frac{\partial k_{mi,j}}{\partial x}\frac{\partial p_{wmi,j}}{\partial x}}\right\} \tag{A.2}$$

donde el subíndice ***ij*** representa el elemento micro ***j*** correspondiente al elemento ***i*** macro, y asumiendo que la permeabilidad es constante en el elemento ***ij*** se tiene $\dfrac{\partial k_{mi,j}}{\partial x}=0$. A continuación y sobre la ecuación (A.2) aplicamos las modificaciones dadas por:

- Utilizando el desarrollo de segundo orden para $\frac{\partial^2 p_{wmi,j}}{\partial x^2}$

$$\frac{\partial^2 p_{wi,j}}{\partial x^2} = \frac{\left[\theta\left(p_{wj-1} - 2p_{wj} + p_{wj+1}\right)_{t+dt} + (1-\theta)\left(p_{wj-1} - 2p_{wj} + p_{wj+1}\right)_t\right]_i}{dx^2} \tag{A.3}$$

- Aplicando reglas de derivación en $\dot{S}r_{mi,j}$:

$$\dot{S}r_{mi,j} = \overbrace{\frac{\partial Sr_{mi,j}}{\partial s}}^{\substack{\text{A partir de la Cur. Ret.} \\ \text{(Van Genuchten)}}} * \underbrace{\frac{\partial s_{mi,j}}{\partial p}}_{-1} * \underbrace{\frac{\left(p_{j,t+dt} - p_{j,t}\right)_i}{dt}}_{\dot{p}} = \left[-\frac{\partial Sr_{mi,j}}{\partial s}\frac{\left(p_{j,tdt} - p_{j,t}\right)_i}{dt}\right] \tag{A.4}$$

- A partir de las relaciones de compatibilidad $\frac{\dot{e}_{mi,j}}{\left(1+e_{mi,j}\right)}$,

$$\frac{\dot{e}_{mi,j}}{\left(1+e_{mi,j}\right)} = -d\dot{\varepsilon}_{vmi,j} = \left[\frac{\left(u_{mi,j+1} - u_{mi,j}\right)}{dx}\right] \tag{A.5}$$

Sustituyendo en la ecuación de balance para la microestrutura (A.2) las expresiones (A.3), (A.4) y (A.5) nos queda una ecuación de balance micro en función de los desplazamientos “locales” $u_{mi,j}$ y las presiones de agua p_{wij} en cada elemento de la microestructura que tiene la siguiente forma:

$$\begin{gathered} Sr_{mi,j}\left[\frac{\left(u_{mi,j+1} - u_{mi,j}\right)}{dx}\right] - \left(\frac{e_{mi,j}}{\left(1+e_{mi,j}\right)}\right)\left[\frac{\partial Sr_{mi,j}}{\partial s}\left(p_{j,tdt} - p_{j,t}\right)_i\right] = \\ \frac{k_{mi,j}dt}{\gamma_w dx^2}\left[\theta\left(p_{wj-1} - 2p_{wj} + p_{wj+1}\right)_{t+dt} + (1-\theta)\left(p_{wj-1} - 2p_{wj} + p_{wj+1}\right)_t\right]_i \end{gathered} \tag{A.6}$$

Equilibrio de tensiones micro

Se plantea el equilibrio de tensiones en la microestructura. Para cada “contacto” entre elementos micro (K-1 nodos) se plantea el equilibrio dado por:

$$d\sigma_{mi,j} = d\sigma_{mi.j+1} \tag{A.7}$$

A efectos de ganar claridad en el tratamiento de las ecuaciones, se plantea elequilibrio asumiendo que el modelo se encuentra en condiciones elásticas. Las leyes correspondientes para el modelo en régimen plástico se obtienen aplicando las distintas leyes de la plasticidad. De acuerdo con las leyes constitutivas planteadas, se tiene:

$$d\varepsilon_m^{el} = -\frac{\dot{e}_m}{1+e_m} = \frac{d\hat{p}_m}{K_m} = \frac{dp}{K_m} + \frac{\chi ds_m}{K_m} \tag{A.8}$$

la condición de equilibrio entre dos elementos adyacentes **j** y **j+1** de la microestructura del elemento **i** se expresa como:

$$\left(d\varepsilon_{vm\,j} - \frac{\chi ds_{m\,j}}{K_{m\,j}}\right)K_{m\,j} = \left(d\varepsilon_{vm\,j+1} - \frac{ds_{m\,j+1}}{K_{m\,j+1}}\right)K_{m\,j+1} \tag{A.9}$$

y considerando la condición de compatibilidad entre deformación y desplazamientos (A.5) nos queda:

$$\left(\left[-\frac{\left(u_{mi,j+1} - u_{mi,j}\right)}{dx}\right] + \frac{dp_{mwi},_{j}}{K_{mi,j}}\right)K_{mi,j} = \left(\left[-\frac{\left(u_{mi,j+2} - u_{mi,j+1}\right)}{dx}\right] + \frac{dp_{wi+1}}{K_{mi,j+1}}\right)K_{mi,j+1} \tag{A.10}$$

siendo dx la dimensión de cada uno de los K elementos micro.

Ecuaciones correspondientes al nivel macroestructural

Balance de masa sobre un elemento macro

A nivel macro o global, nos encontramos con la que la muestra se divide en N elementos de dimensión $\mathrm{DX} = \phi_{\mathrm{Pellet}}/2$, siendo ϕ_{Pellet} el tamaño característico de los pellets definido a partir de la curva granulométrica. El balance de masa planteado para cada uno de los N elementos macro se escribe como:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\phi_{\mathrm{M}} . S_r^{\,M}\right) - \nabla.\left(k_{\mathrm{M}} \nabla \varphi_{\mathrm{M}}\right) = f_{M \to m}^{w} \tag{A.11}$$

donde $\phi_M = \frac{e_M}{(1+e_T)}$ es la porosidad macro, S_r^M es el grado de saturación macro, k_M es el coeficiente de permeabilidad para la macro de acuerdo a la ley de Darcy y $\varphi_M = \cancel{z} + \frac{p_{wM}}{\gamma_w}$ es el potencial del agua en la macroestructura donde se desprecia la componente gravitacional.

El término fuente o sumidero $f_{M\rightarrow m}^{w}$ representa el intercambio de agua Macro-micro de acuerdo con la convención de signos:

$f_{M\rightarrow m}^{w} < 0$ flujo saliente de la Macro hacia la micro

$f_{M\rightarrow m}^{w} > 0$ flujo desde la micro entrante en la Macro.

Realizando modificaciones en la ecuación (A.11) análogas a las realizadas para la microestructura se obtiene:

$$\frac{Sr_{Mi} * \dot{e}_{Mi} + \dot{Sr}_{Mi} * e_{Mi}}{(1+e)} - f_{M\rightarrow m}^{w} = \frac{1}{\gamma_w}\left\{ k_{Mi}\frac{\partial^2 p_{wMi}}{\partial x^2} + \cancel{\frac{\partial k_{Mi}}{\partial x}\frac{\partial p_{wMi}}{\partial x}} \right\} \tag{A.12}$$

para la permeabilidad macro se consideraron leyes de tipo $k_{wM} = k_{rl}(Sr_M) * k(e_M)$ y constantes en el elemento dado que $\frac{\partial k_{Mi}}{\partial x} = 0$. Para obtener una expresión de la ecuación de balance en función de las presiones de agua y los desplazamientos en los nodos, se sustituyen las expresiones $\frac{\partial^2 p_{wMi}}{\partial x^2}$, $\dot{Sr}_{Mi}$ y $\frac{\dot{e}_{Mi}}{(1+e)}$ utilizando las expresiones:

- Utilizando el desarrollo de segundo orden:

$$\frac{\partial^2 p_w}{\partial x^2} = \frac{\left[\theta\left(p_{wi-1} - 2p_{wi} + p_{wi+1}\right)_{t+dt} + (1-\theta)\left(p_{wi-1} - 2p_{wi} + p_{wi+1}\right)_t\right]}{DX^2} \tag{A.13}$$

- Aplicando reglas de derivación en $\dot{Sr}_{Mi}$:

$$\dot{S}r_{Mi} = \overbrace{\frac{\partial Sr_{Mi}}{\partial s}}^{\substack{\text{A partir de la Cur. Ret.}\\ \text{(Van Genuchten)}}} * \underbrace{\frac{\partial s_{Mi}}{\partial p}}_{-1} * \underbrace{\frac{\left(p_{i,t+dt} - p_{i,t}\right)}{dt}}_{\dot{p}} = \left[-\frac{\partial Sr_{Mi}}{\partial s} \frac{\left(p_{i,tdt} - p_{i,t}\right)}{dt} \right] \qquad \text{(A.14)}$$

- A partir de las relaciones de compatibilidad:

$$\frac{\dot{e}_{Mi}}{(1+e)} = -\dot{\varepsilon}_{vM} = -\left(\dot{\varepsilon}_v - \dot{\varepsilon}_{vmm}\right) = \left[\frac{\left(U_{i+1} - U_i\right)}{\left(DX_i\right)} - \frac{\left(\Delta um_i\right)}{\left(DX_i\right)} \right] \qquad \text{(A.15)}$$

Sustituyendo las expresiones anteriores en el balance de agua MACRO, obtenemos una ecuación en función de las presiones de agua y los desplazamientos nodales que tiene la siguiente forma:

$$\begin{aligned} & Sr_{M\,i} \left[\frac{\left(U_{i+1} - U_i\right)}{\left(DX_i\right)} - \frac{\left(\Delta um_i\right)}{\left(DX_i\right)} \right] - \left(\frac{e_{Mi}}{(1+e)} \right) \left[\frac{\partial Sr_{Mi}}{\partial s} \left(p_{wi,t+dt} - p_{wi,t}\right) \right] - \left(f^{w}_{M\to m}\right)_i = \\ & \frac{k_{Mi}\,dt}{\gamma_w DX_i^{\,2}} \left[\theta\left(p_{wi-1} - 2p_{wi} + p_{wi+1}\right)_{t+dt} + (1-\theta)\left(p_{wi-1} - 2p_{wi} + p_{wi+1}\right)_t \right] \end{aligned} \qquad \text{(A.16)}$$

Equilibrio de tensiones macro

La ecuación correspondiente al equilibrio de tensiones entre dos elementos adyacentes está dada por:

$$d\sigma_{M\,i} = d\sigma_{M\,i+1} \qquad \text{(A.17)}$$

Planteando la igualdad anterior para el caso de régimen elástico tenemos que los incrementos de la deformación volumétrica en la macroestructura están dados por la ecuación del modelo constitutivo:

$$d\varepsilon_{\,vM} = -\frac{\dot{e}_M}{1+e} = \frac{dp}{K_{PM}} + \frac{ds_M}{K_{SM}} \qquad \text{(A.18)}$$

por lo que nos queda una expresión dada por:

$$\left(\left[-\frac{\left(U_{i+1} - U_i\right)}{\left(DX_i\right)} + \frac{\left(\Delta um_i\right)}{\left(DX_i\right)} \right] + \frac{dp_{wi}}{K_{Ms,i}} \right) K_{Mp,i} = \left(\left[-\frac{\left(U_{i+2} - U_{i+1}\right)}{\left(DX_{i+1}\right)} + \frac{\left(\Delta um_{i+1}\right)}{\left(DX_i + 1\right)} \right] + \frac{dp_{wi+1}}{K_{Ms,i+1}} \right) K_{Mp,i+1} \qquad \text{(A.19)}$$

Equilibrio de tensiones macro-micro

Adicionalmente a las ecuaciones ya presentadas debemos imponer el equilibrio de tensiones en la superficie del pellet. Esto es, en dicho nodo, el incremento de tensiones macro y micro deben ser iguales

$$d\sigma_{mi,K} = d\sigma_{Mi} \tag{A.20}$$

y considerando ambos modelos constitutivos se tiene:

$$\left(\left[-\frac{\left(u_{mi,K+1}-u_{mi,K}\right)}{dx}\right]+\frac{\chi dp_{mwi,K}}{K_{mi,K}}\right)K_{mi,K} = \left(\left[-\frac{\left[U_{i+1}-\left(U_i+\Delta um_i\right)\right]}{DX}\right]+\frac{dp_{wMi}}{K_{SMi}}\right)K_{PMi} \tag{A.21}$$

Ecuaciones de forma matricial

A continuación se presenta como resulta el sistema de ecuaciones planteado de forma matricial. Se considera un sistema formado por las N ecuaciones de balance y N-1 ecuaciones de equilibrio correspondientes a la macroestructura. Adicionalmente, por cada uno de los N elementos macro se tiene un sistema formado por K ecuaciones de balance y K-1 ecuaciones de equilibrio correspondientes al nivel microestructural. De forma adicional tenemos N ecuaciones de equilibrio macro-micro y las condiciones de contorno.

Condiciones de contorno MACRO

Nodo X=0

Presión de agua a la entrada de la muestra: p_{w0}

Desplazamiento del nodo base $U_1 = 0$

Nodo en X=H

Presión de agua a la salida de la muestra. Se implementaron dos condiciones en función del ensayo:

- Flujo saliente nulo: $\left.\dfrac{\partial p_w}{\partial X}\right|_{X=H} = 0$

- Condición de humedad relativa controlada: $p_{w\,N+1} = Cte$

Desplazamiento:

- Ensayo a volumen constante: $U_{N+1} = 0$

- Ensayo a carga constante: $\sigma_{M\,K+1} = Cte.$

Condiciones de contorno micro

Nodo x=0 (Centro del pellet)

Flujo nulo: $\left.\dfrac{\partial p_w}{\partial x}\right|_{x=0} = 0$

Desplazamiento del nodo base $um_1 = 0$

Nodo x=$\phi_{\text{Pellet}}/2$

Presión de agua desde la macro conocida: $p_{w\ K+1} = p_{wM\ \ i}$

Tensión macro conocida: $d\sigma_{m\,i,K} = d\sigma_{M\,i}$

Aplicando las condiciones de contorno se plantean los distintos sistemas de forma matricial. A continuación se presenta la forma de los sistemas, los coeficientes de las matrices y como se acoplan.

Ecuaciones de balance en forma matricial:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{22} & & \\ & \ddots & & \\ & a_N & a_{N+1} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} U_1 \\ \vdots \\ U_{N+1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a^*_{11} & & \\ & & \\ & & a^*_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta um_1 \\ \vdots \\ \Delta um_N \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & b_N & b_{N+1} & b_{N+2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_{w0} \\ \vdots \\ p_{wN+1} \end{pmatrix}_{t+dt} + \begin{pmatrix} b^o_{11} & b^o_{12} & b^o_{13} & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & b^o_{N-1} & b^o_{N} & b^o_{N+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p^o_{w0} \\ \vdots \\ p^o_{wN+1} \end{pmatrix}_t = \begin{bmatrix} \left(f^w_{M\to m}\right)_0 \\ \vdots \\ \left(f^w_{M\to m}\right)_{N+1} \end{bmatrix}$$

$$a_{ii} = -\frac{Sr_{Mi}}{DX} \qquad a^*_{ii} = -\frac{Sr_{Mi}}{DX} \qquad b_{ii} = -\Delta_i \theta \qquad b^o_{ii} = -\Delta_i(1-\theta)$$

$$a_{ii+1} = +\frac{Sr_{Mi}}{DX} \qquad b_{ii+1} = \left[-\frac{e_{Mi}}{(1+e)}\frac{\partial Sr_{Mi}}{\partial s} + 2\Delta_i\theta\right] \qquad b^o_{ii+1} = \left[+\frac{e_{Mi}}{(1+e)}\frac{\partial Sr_{Mi}}{\partial s} + 2\Delta_i(1-\theta)\right]$$

$$b_{ii+3} = -\Delta_i\theta \qquad b^o_{ii+3} = -\Delta_i(1-\theta)$$

$$\text{donde } \Delta_i = \frac{k_{Mi}dt}{\gamma_w DX_i^2}$$

Ecuaciones de equilibrio en forma matricial:

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & c_{N-1} & c_N & c_{N+1} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} U_1 \\ \vdots \\ U_{N+1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c^*_{11} & c^*_{12} & \\ & & \\ & c^*_{N-1N} & c^*_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta um_1 \\ \vdots \\ \Delta um_N \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} d_{11} & d_{22} \\ & \ddots \\ d_{N-1} & d_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_{w1} \\ \vdots \\ p_{wN} \end{pmatrix}_{t+dt} + \begin{pmatrix} d^o_{11} & d^o_{22} \\ & \ddots \\ d^o_{N-1} & d^o_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p^o_{w1} \\ \vdots \\ p^o_{wN} \end{pmatrix}_t = 0$$

$$c_{ii} = +\frac{K_{PM,i}}{DX} \qquad c^*_{ii} = \frac{K_{PM,i}}{DX} \qquad d_{ii} = \frac{K_{PM,i}}{K_{SM,i}} \qquad d^o_{ii} = -\frac{K_{PM,i}}{K_{SM,i}}$$

$$c_{ii+1} = -\left[\frac{K_{PM,i}}{DX} + \frac{K_{PM,i+1}}{DX}\right] \qquad c^*_{ii} = -\frac{K_{PM,i+1}}{DX} \qquad d_{ii+1} = -\frac{K_{PM,i+1}}{K_{SM,i+1}} \qquad d^o_{ii+1} = +\frac{K_{PM,i+1}}{K_{SM,i+1}}$$

$$c_{ii+2} = +\frac{K_{PM,i+2}}{DX}$$

Ecuaciones de balance micro:

$$\begin{pmatrix} a^m{}_{11} & a^m{}_{22} & \\ & \ddots & \\ & a^m{}_n & a^m{}_{n+1} \end{pmatrix}_i * \begin{pmatrix} u_{m1} \\ \vdots \\ u_{mn} \end{pmatrix}_i + \begin{pmatrix} b^m{}_{11} & b^m{}_{12} & b^m{}_{13} & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & b^m{}_n & b^m{}_{n+1} & b^m{}_{n+2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_{wm0} \\ \vdots \\ p_{wmn+1} \end{pmatrix}_{t+dt} + \begin{pmatrix} b^{mo}{}_{11} & b^{mo}{}_{12} & b^{mo}{}_{13} & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & b^{mo}{}_{n-1} & b^{mo}{}_n & b^{mo}{}_{n+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p^o{}_{wm0} \\ \vdots \\ p^o{}_{wmn+1} \end{pmatrix}_t = 0$$

$$a_{jj} = -\frac{Sr_{mi,j}}{dx} \qquad b^m{}_{jj} = -\Delta_{mij}\theta \qquad b^{mo}{}_{jj} = -\Delta_{mij}\left(1-\theta\right)$$

$$a_{jj+1} = +\frac{Sr_{mi,j}}{dx} \qquad b^m{}_{jj+1} = \left[-\frac{e_{mj}}{\left(1+e_{mj}\right)}\frac{\partial Sr_{mj}}{\partial s} + 2\Delta_{mij}\theta\right]_i \qquad b^{mo}{}_{jj+1} = \left[+\frac{e_{mj}}{\left(1+e_{mj}\right)}\frac{\partial Sr_{mj}}{\partial s} + 2\Delta_{mij}\theta\right]_i$$

$$b^m{}_{ii+3} = -\Delta_{ij}\theta \qquad b^{mo}{}_{ii+3} = -\Delta_{mij}\left(1-\theta\right)$$

donde $\Delta_{mij} = \left(\frac{k_{mj}dt}{\gamma_w dx^2}\right)_i$

Ecuaciones de equilibrio micro:

$$\begin{pmatrix} c^m{}_{11} & c^m{}_{12} & c^m{}_{13} & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & c^m{}_{n-1} & c^m{}_{n} & c^m{}_{n+1} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} u_{m1} \\ \vdots \\ u_{mn} \end{pmatrix}_i + \begin{pmatrix} d^m{}_{11} & d^m{}_{22} & \\ & \ddots & \\ & d^m{}_{n-1} & d^m{}_{n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_{w1} \\ \vdots \\ p_{wn} \end{pmatrix}_{t+dt} + \begin{pmatrix} d^{mo}{}_{11} & d^{mo}{}_{22} & \\ & \ddots & \\ & d^{mo}{}_{n-1} & d^{mo}{}_{n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p^o{}_{w1} \\ \vdots \\ p^o{}_{wn} \end{pmatrix}_t = 0$$

$$c^m{}_{jj} = +\frac{K_{pmi,j}}{dx} \qquad d^m{}_{ii} = \frac{K_{pmi,j}}{K_{smi.j}} \qquad d^{mo}{}_{ii} = -\frac{K_{pmi,j}}{K_{smi.j}}$$

$$c^m{}_{jj+1} = -\left[\frac{K_{pmi,j}}{dx} + \frac{K_{pmi,j+1}}{dx}\right] \qquad d^m{}_{ii+1} = -\frac{K_{pmi,j+1}}{K_{smi,j+1}} \qquad d^{mo}{}_{ii+1} = +\frac{K_{pmi,j+1}}{K_{smi,j+1}}$$

$$c^m{}_{jj+2} = +\frac{K_{pmi,jj+1}}{dx}$$

Ecuación de equilibrio MACRO_micro:

Se agrega una fila como ecuación de equilibrio número K en las matrices de equilibrio micro de la forma:

$$\begin{array}{ccccc} \left[u_{mi,1}\right. & & u_{mi,n} & u_{mi,n+1} & \left.(U_{i+1} - U_i)\right] \\ \left(\cdots\right. & & +\frac{K_{Pmi,n}}{dx} & \left[-\frac{K_{Pmi,n}}{dx} - \frac{K_{PMi}}{DX}\right] & \left.\frac{K_{PMi}}{DX}\right) \end{array} * (\ ) + \begin{array}{ccc} & p_{wmi,n} & p_{wM\,i} \\ \left(\cdots\right. & \frac{K_{pmi,n}}{K_{smi,n}} & \left.-\frac{K_{PMi}}{K_{SMi}}\right)_{t+dt} \end{array} (\ ) + \begin{array}{ccc} & p^o{}_{wmi,n} & p^o{}_{wM\,i} \\ \left(\cdots\right. & -\frac{K_{pmi,n}}{K_{smi,n}} & \left.\frac{K_{PMi}}{K_{SMi}}\right)_{t} \end{array}$$

Ensamble de matrices y resolución iterativa

Ensamble de matrices

Si ensamblamos las matrices correspondientes a las ecuaciones de la macroestructura se tiene:

$$\begin{pmatrix} (a_M) & (b_M) \\ (c_M) & (d_M) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ \vdots \\ U_{N+1} \\ \cdots \\ p_{wM0} \\ \vdots \\ p_{wMN+1} \end{pmatrix}_{t+dt} = \begin{pmatrix} (a^*_M) & (b^o{}_M) \\ (c^*_M) & (d^o{}_M) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \begin{bmatrix} \Delta um_1 \\ \vdots \\ \Delta um_N \end{bmatrix} \\ \cdots \\ p_{wM0} \\ \vdots \\ p_{wMN+1} \end{pmatrix}_{t+dt} + \begin{pmatrix} \begin{bmatrix} fm-M_1 \\ \vdots \\ fm-M_N \end{bmatrix} \\ \cdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Aplicando condiciones de contorno:

$U_1 = 0$

$U_{N+1} = 0$ en caso de vol. constante o bien carga constante $\Delta\sigma=0 \ \forall$ i,j

p_{wM0} = Presión de agua a la entrada

p_{wMN+1} = Presión de agua a la salida. mientras $Sr_{MN} \leq 0.98$,

Condición de flujo saliente nulo $p_{wMN} = p_{wMN+1}$. En otro caso p_{wMN+1}=0

Una vez aplicadas las condiciones de contorno, obtenemos un sistema indeterminado

con 2N grados de libertad. Los correspondientes a:

$\begin{bmatrix} \Delta um_1 \\ \vdots \\ \Delta um_N \end{bmatrix} y \begin{bmatrix} fm-M_1 \\ \vdots \\ fm-M_N \end{bmatrix}$ vectores que contienen el acoplamiento MACRO_micro.

En el caso de las ecuaciones correspondientes a la microestructura se realiza el ensamblaje de las matrices y se obtiene:

$$\begin{pmatrix} (a_m) & (b_m) \\ (c_m) & (d_m) \end{pmatrix}_i \begin{pmatrix} u_{m1} \\ \vdots \\ u_{mK+1} \\ \left[(U_{i+1}-U_i)\right] \\ \cdots \\ p_{wm0} \\ \vdots \\ p_{wmK} \\ \left[p_{wmK+1}=p_{wMi}\right] \end{pmatrix}_{i,t+dt} = \begin{pmatrix} (a^o{}_m) & (b^o{}_M) \\ (c^o{}_m) & (d^o{}_M) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^o{}_{m1}=0 \\ \vdots \\ u^o{}_{mK+1}=0 \\ \cdots \\ p^o_{wm0} \\ \vdots \\ \left[p^o_{wmK+1}=p^o{}_{wMi}\right] \end{pmatrix}_{i,t}$$

(*) $u^o{}_{mj}=0 \;\; \forall j -$ pues son incrementos en dt.

$(a^o{}_m)=(c^o{}_m)=0;$

Como condiciones de contorno tenemos:

En desplazamientos: $u_{m1}=0$ y $u_{mn+1}=\Delta u_{mi}$, no hay flujo en x=0 (centro del pellet)

En presiones de agua: $p_{wm0}=p_{wm1}$ y $p_{wmn+1}=p_{wMi}$.

Resolución iterativa

El sistema correspondiente a las ecuaciones macro es un sistema indeterminad con 2*N grados de libertad correspondientes a las incógnitas $(\Delta um_{iK+1})\, y\, (f_{m-M})_i$. Para la resolución iterativa se toman como valores iniciales valores nulos para los vectores $\begin{bmatrix} \Delta um_1 \\ \vdots \\ \Delta um_N \end{bmatrix}_0 y \begin{bmatrix} fm-M_1 \\ \vdots \\ fm-M_N \end{bmatrix}_0$ y de esta forma resolvemos el sistema “macro”. Como resultado se obtienen los campos de desplazamientos U_i y p_{wMi}, para los N elementos. Con estos valores componemos cada uno de los N sistemas micro. Una vez resueltos los N sistemas, se calcula la variación de volumen de agua para cada elemento de la microestructura utilizando la expresión:

$$\sum_{j=1}^{K}\left[\frac{\partial}{\partial t}\left(\phi_{m}.S_{r}^{m}\right)\right]_{ij}=f_{M\to m\,i} \tag{A.22}$$

y los desplazamientos del nodo K+1 de cada uno de los elementos micro. Con estos valores obtenemos otros vectores $\begin{bmatrix}\Delta um_1\\ \vdots\\ \Delta um_N\end{bmatrix}_1 y \begin{bmatrix}fm-M_1\\ \vdots\\ fm-M_N\end{bmatrix}_1$ que debemos comparar con los primeros y evaluar las tolerancias. Si cumplimos las tolerancias se da por resuelto el intervalor dt planteao y se pasa al siguiente. Si no se cumplen las tolerancias repetimos la resolución pero tomando como valores de hipótesis los calculado en el sistema micro (subíndice 1) y repetimos el procedimiento hasta cumplir con: diferencia

$$\left\|\begin{matrix}\dfrac{DVm_{1t+dt}-DVm_{1t}}{DVm_{1t+dt}}\\ \vdots\\ \dfrac{DVm_{Nt+dt}-DVm_{Nt}}{DVm_{Nt+dt}}\end{matrix}\right\|\le tol1$$

y

$$\left\|\begin{matrix}\dfrac{u_{m1t+dt}-u_{m1t}}{u_{m1t+dt}}\\ \vdots\\ \dfrac{u_{mNt+dt}-u_{mNt}}{u_{mNt+dt}}\end{matrix}\right\|\le tol2\,.$$