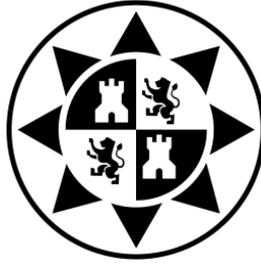


**UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE CARTAGENA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA APLICADA**

**APLICACIÓN DEL MÉTODO DE REDES A LA SOLUCIÓN DE
PROBLEMAS DE FRICCIÓN SECA: SUPERFICIES SUAVES A
ESCALA ATÓMICA Y SUPERFICIES A ESCALA
MACROSCÓPICA**

TESIS DOCTORAL

**Fulgencio Marín García
2013**



**UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE CARTAGENA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA APLICADA**

**APLICACIÓN DEL MÉTODO DE REDES A LA SOLUCIÓN DE
PROBLEMAS DE FRICCIÓN SECA: SUPERFICIES SUAVES A
ESCALA ATÓMICA Y SUPERFICIES A ESCALA
MACROSCÓPICA**

TESIS DOCTORAL

Autor: D. Fulgencio Marín García
Directores: Dr. Francisco Alhama López
Dr. José Andrés Moreno Nicolás

Cartagena, noviembre de 2013

Agradecimientos

En primer lugar quiero agradecer al Dr. Francisco Alhama y al Dr. José Andrés Moreno la oportunidad brindada y la confianza depositada en mí. Sin su esfuerzo, aliento y estricta supervisión me hubiera sido del todo imposible acabar esta memoria.

En segundo lugar, quiero agradecer a mis compañeros del Departamento de Ingeniería Eléctrica y del Grupo de Investigación “Simulación por Redes” el apoyo que me han ofrecido en todo momento.

Por último, y no por ello menos importante, quiero agradecer el ánimo y el aliento que me ha ofrecido Belén, quien además ha llevado de forma admirable gran parte del peso familiar durante estos últimos años. Sin su ánimo, tesón y comprensión no hubiese sido posible todo esto.

A mis padres, Antonia y Pedro

A mis hermanos, Carmen y Alfonso

A mi mujer, Belén

A mis hijas, Begoña y Alicia

A mis titos, Concha y Juan

RESUMEN

El estudio del fenómeno cotidiano que supone la fricción sigue manteniendo un gran nivel de dificultad a pesar de su larga historia. Las causas de esta dificultad radican en las diferentes escalas de las características del fenómeno, macroscópicas y microscópicas, y en su distinto comportamiento en condiciones estáticas y dinámicas. A lo mencionado anteriormente se añade que los sistemas sujetos a fricción son muy sensibles al valor de los parámetros que los definen, pudiendo dar lugar a comportamientos caóticos. Así, han ido apareciendo modelos muy diferentes, válidos en un ámbito reducido, y que utilizan simplificaciones importantes que impiden su generalización.

En esta tesis se presenta la aplicación del método de simulación por redes a la solución numérica al estudio de la fricción a escalas muy distintas. Por un lado, a escala microscópica se han estudiado los modelos de Frenkel-Kontorova-Tomlinson y de diferentes microscopios de fuerza atómica, relacionados con el análisis de superficies suaves a escala atómica. Por otro lado, a escala macroscópica se han estudiado los modelos relacionados con el análisis de superficies industriales, como el de un mecanismo de freno.

Tras presentar en esta memoria una revisión de las distintas formulaciones de la fuerza de fricción, de la naturaleza de las superficies que participan en el fenómeno, así como de la definición de los problemas a analizar (Capítulo 2); se revisan las herramientas relacionadas con el análisis de la estabilidad de los sistemas dinámicos (Capítulo 3). En este sentido, cabe resaltar la utilidad de los diagramas de fase y los exponentes de Lyapunov, incluyendo los algoritmos más recientes para su estimación.

El diseño de los modelos en red y la implementación de las condiciones iniciales se explica en el Capítulo 4. Se ha elaborado un programa en Matlab para la generación de modelos en red, simulación en Pspice y representación gráfica de resultados.

En el Capítulo 5 se presenta el resultado de la aplicación de los modelos en red a los problemas planteados en el Capítulo 2. Con el fin de verificar la fiabilidad de los modelos propuestos se comparan sus resultados con las soluciones obtenidas por otros métodos numéricos o resultados experimentales, uno de ellos a partir de un dispositivo desarrollado durante la elaboración de esta memoria.

ABSTRACT

The study of everyday phenomena involving friction continues to maintain a high level of difficulty despite its long history. The causes of this problem lie in the different scale of the characteristics of the phenomenon, macroscopic and microscopic, and their different behaviour in static and dynamic conditions. To the above is added to the systems subject to friction are very sensitive to the value of the parameters that define them, may lead to chaotic behaviour. Thus, very different models, valid in a narrow scope and using simplifications that prevent generalization, have been appearing.

This thesis presents the application of network simulation method to the numerical solution to the study of friction at very different scales. On the one hand, on a microscopic scale Frenkel-Kontorova-Tomlinson and different atomic force microscopes models have been studied, related to the analysis of soft surfaces at the atomic scale. Furthermore, on a macroscopic scale models related to the analysis of industrial areas, such as a brake mechanism have been studied.

After presenting herein is a review of the different formulations of the friction force, the nature of the surfaces involved in the phenomenon, as well as the definition of the problems to be analyzed (Chapter 2); reviews the tools related to stability analysis of dynamic systems (Chapter 3). In this regard, we highlight the usefulness of the phase diagrams and Lyapunov exponents, including recent algorithms for their estimation.

The design of network models and the implementation of the initial conditions is explained in Chapter 4. It has developed a program in Matlab to generate network models, Pspice simulation and graphical representation of results.

Chapter 5 presents the result of the application of network models to problems in Chapter 2. In order to verify the reliability of the proposed models, their results are compared with the solutions obtained by other numerical methods or experimental results, one from a device developed during the preparation of this report.

Índice

Capítulo	página
1. Introducción	1
1.1. Introducción	1
1.2. Objetivos	3
1.3. Desarrollos futuros.....	4
2. Fundamentos teóricos.....	5
2.1. Introducción.....	5
2.2. Procesos de fricción seca	5
2.2.1. Influencia de la rugosidad en el coeficiente de fricción seca	10
2.2.2. Efectos de la histéresis en fricción seca.....	14
2.2.3. Formulación de la fuerza de fricción	17
2.3. Modelos de fricción seca	24
2.3.1. Ecuaciones de balance, condiciones iniciales y de contorno de fricción seca entre superficies suaves a escala atómica: modelo Frenkel-Kontorova-Tomlinson.....	27
2.3.2. Ecuaciones de balance, condiciones iniciales y de contorno de fricción seca entre puntera de microscopio de fuerza atómica y superficie suave a escala atómica	30
2.3.3. Ecuaciones de balance, condiciones iniciales y de contorno de fricción seca a escala macroscópica: modelo de Kaidanovsky-Khaikin ..	32
2.3.4. Ecuaciones de balance, condiciones iniciales y de contorno de fricción seca a escala macroscópica: modelo de Burridge-Knopoff.....	34
2.3.5. Ecuaciones de balance, condiciones iniciales y de contorno de fricción seca a escala macroscópica: un mecanismo de freno.....	35
2.4. Método de simulación por redes (MESIR)	37
2.4.1. Monopuertas básicas.....	40
2.4.2. El MESIR como método numérico	44
Referencias bibliográficas.....	51
3. Análisis de estabilidad de sistemas dinámicos	61
3.1. Introducción.....	61
3.2. Sistemas dinámicos.....	61
3.2.1. Estabilidad de los conjuntos límite: multiplicadores característicos.....	65
3.2.2. Estabilidad de los conjuntos límite: exponentes de Lyapunov.....	69

3.2.3. Cálculo de los exponentes de Lyapunov.....	71
Referencias bibliográficas.....	77
4. Modelos en red.....	81
4.1. Modelos en red para simulación del modelo Frenkel-Kontorova-Tomlinson	81
4.2. Modelos en red para simulación del microscopio de fuerza atómica.....	84
4.3. Modelo en red para simulación del modelo de Kaidanovsky-Khaikin	88
4.4. Modelo en red para simulación del modelo de Burridge-Knopoff	89
4.5. Modelo en red para simulación de un mecanismo de freno	91
Referencias bibliográficas.....	95
5. Aplicaciones de los modelos de fricción	97
5.1. Simulación de fricción a escala microscópica: modelo de Frenkel-Kontorova- Tomlinson	97
5.2. Simulación de fricción a escala microscópica: modelos de microscopios de fuerza atómica	108
5.2.1. Simulación de FFM sobre una superficie de fluoruro sódico	108
5.2.2. Simulación de SFM sobre una superficie de bisulfuro de molibdeno.....	109
5.2.3. Simulación de SFM sobre una superficie de grafito pirolítico altamente orientado y de AFM sobre grafito	111
5.2.4. Simulación de AFM sobre una superficie de xenón	113
5.3. Simulación de fricción a escala macroscópica: modelo de Kaidanovsky- Khaikin.....	113
5.4. Simulación de fricción a escala macroscópica: modelo de Burridge- Knopoff.....	118
5.5. Simulación de fricción a escala macroscópica: modelo de un mecanismo de freno	122
5.5.1. Verificación experimental.....	130
Referencias bibliográficas.....	133
Contribuciones y conclusiones	135

Anexo	página
A. Planos de fase, mapas de Poincaré y mapas logísticos	141
A.1 Plano de fase: péndulo simple	141
A.2 Plano de fase: ecuación de Duffing	143
A.3 Plano de fase: ecuación de van der Pol	145
A.4 Mapa de Poincaré	148
A.5 Mapa logístico	151
A.6 Exponentes de Lyapunov	156
Referencias bibliográficas.....	158
 B. Algoritmos de solución de circuitos	 159
B.1 Introducción	159
B.2 Solución de ecuaciones lineales	162
B.3 Solución de ecuaciones no lineales.....	166
B.4 Integración numérica.....	172
Referencias bibliográficas.....	182
 C. Estabilidad del algoritmo de integración.....	 185
C.1 Número de operaciones del proceso de factorización para la resolución de sistemas de ecuaciones lineales	185
C.2 Métodos de integración polinomiales	185
C.3 Estabilidad del algoritmo de integración	188
Referencias bibliográficas.....	191

Esta página ha sido intencionalmente dejada en blanco

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

1.1 INTRODUCCIÓN

Los primeros intentos del grupo de investigación del Método de Simulación por Redes para resolver problemas de fricción datan de 2005. A pesar de no obtener resultados publicables por la dificultad de análisis de este fenómeno, se pudo verificar la capacidad del método para abordar este problema. Resultó evidente la necesidad de una revisión profunda de los problemas tratados en la literatura científica.

La propuesta para realizar este trabajo ha cumplido casi un quinquenio. La experiencia desde entonces, debo decir, ha sido muy positiva en todos los sentidos.

El método de redes ya había sido aplicado con éxito en varios campos de la ingeniería tales como transferencia de calor, reacciones electroquímicas, transporte a través de membranas, problemas inversos, transporte iónico, problemas acoplados de flujo y transporte y otros; todos estos trabajos describen procesos de transporte no lineales. Además, recientemente, ha sido aplicado a mecánica de sólidos deformables. La idea era extender el método a otra aplicación, a saber, la fricción.

Sin objetivos en principio bien definidos, la primera etapa fue la de investigar el estado del arte en esta materia. Los primeros intentos se centraron en examinar el modelo de Frenkel-Kontorova-Tomlinson. Este modelo, si bien complejo desde el punto de vista matemático, está muy bien documentado en la literatura científica disponible. El análisis de los resultados exigió una comprensión adecuada de la teoría del caos, lo que postergó sensiblemente el desarrollo de esta memoria.

El segundo modelo, fricción seca entre puntera de microscopio de fuerza atómica y superficie suave a escala atómica, objeto de estudio por equipos de investigación mayoritariamente de carácter experimental, se resolvió de manera similar, utilizando potenciales parecidos a los empleados en el modelo anterior. La dificultad ahora provenía de una descripción incompleta de los parámetros necesarios para la simulación en la documentación disponible.

El tercer modelo, de Kaidanovsky-Khaikin, presenta un sistema de ecuaciones distinto a los anteriores, ya que se trata de un modelo a escala macroscópica. La menor complejidad de este modelo, en comparación con los anteriores, permitió un análisis más detallado de los parámetros que lo gobiernan.

El cuarto modelo, de Burridge-Knopoff, en el que se pudo aprovechar la experiencia alcanzada con el modelo anterior, entraña la dificultad inherente a los sistemas con dos grados de libertad, donde incluso lo más sencillo, la forma de representar los resultados, implicó un análisis comparativo de distintas técnicas. Este modelo nos obligó a profundizar en la aplicación de técnicas de cuantificación del caos.

Por último, el modelo de un mecanismo de freno, presentó la dificultad añadida de intentar acercar los modelos teóricos macroscópicos a sistemas reales. Esto supuso la resolución de una serie de problemas prácticos tan arduos como los del modelo inicial, de índole matemática. En concreto, el ajuste del enganche de los muelles, su caracterización y la fijación de las especificaciones de la cinta supuso un reto importante.

El conjunto de modelos recogidos en la memoria, y desarrollado en este trabajo, abarca las principales formulaciones de problemas de fricción: desde la escala microscópica a la macroscópica. Los resultados establecen una base firme para la aplicación del método de redes a otros problemas de fricción.

El trabajo ha sido, además de profundo y exhaustivo, agotador; si bien, las sucesivas metas parciales, bien definidas, nos han permitido cubrir uno a uno los objetivos propuestos y los planteados tras la consecución de algunas de estas metas. Se ha intentado publicar, paulatinamente, cada resultado o conjunto de resultados de este trabajo. Al final, como resultados parciales de éste hemos presentado una comunicación a un congreso internacional relacionado con la Mecánica Computacional, ya celebrado, y elaborado dos artículos publicados en revistas especializadas. Los modelos propuestos se han verificado con resultados de otras publicaciones y con un ensayo experimental.

La presente memoria está organizada en 6 capítulos y 3 anexos. En el capítulo 1, tras esta introducción, se enumeran los objetivos propuestos. En el capítulo 2 se presentan los fundamentos teóricos de la fricción y del método de simulación por redes, base para el diseño de modelos. En el capítulo 3 se revisa la clasificación de los sistemas

dinámicos desde el punto de vista de la fricción. Los modelos diseñados para las diferentes formulaciones se explican en el capítulo 4. El capítulo 5, núcleo de la memoria, muestra aplicaciones del método a la resolución de los problemas más representativos de fricción. Por fin, las contribuciones y conclusiones se describen en el último capítulo de la memoria. Por lo que respecta a los anexos, cabe mencionar que en el anexo A se presentan las distintas formas de representar los resultados. Los algoritmos de solución de circuitos se explican en el anexo B, y la estabilidad del algoritmo de integración en el anexo C.

1.2 OBJETIVOS

Se han planteado los siguientes objetivos generales:

- i) Definición del estado del arte, en particular el estudio de la fricción a escala microscópica: modelo de Frenkel-Kontorova-Tomlinson y modelos de microscopio de fuerza atómica (AFM, FFM y SFM) especialmente, dada la dificultad para conocer el valor de algunos parámetros necesarios para la simulación,
- ii) Elección de las formulaciones más adecuadas para la aplicación del método de redes: definiciones del coeficiente de fricción dependiente de la velocidad y de la condición de apalancamiento-deslizamiento, stick-slip.

Los objetivos de carácter más específico pueden desglosarse en los siguientes apartados:

- i) Desarrollo de modelos en red para el análisis de fricción,
- ii) Análisis de los resultados para identificar el carácter caótico del movimiento,
- iii) Comprensión del fenómeno de fricción seca en dispositivos que trabajan con superficies suaves a nivel atómico, analizando esta fricción desde un punto de vista de investigación básica,
- iv) Comprensión del fenómeno de fricción seca en dispositivos que trabajan con superficies habituales en aplicaciones industriales, que permiten analizar esta fricción desde un punto de vista de investigación aplicada.

1.3 DESARROLLOS FUTUROS

En primer lugar, elaboración de un programa, TRIBONET_14, para la generación y simulación de modelos, cuyos módulos de cálculo y post-proceso son el objeto de esta tesis, quedando pendiente el desarrollo de la interfaz con el usuario. El programa deberá crear el modelo mediante una interfaz gráfica, arrancar el núcleo de cálculo numérico, y simular y post-procesar los resultados de la simulación de forma eficiente y completa. Relacionada con la propuesta anterior, es necesario mencionar el interés de la inclusión de la simulación de otros mecanismos relacionados con la fricción, como embragues. Este objetivo no ha sido incluido en la memoria por falta de financiación.

Como posibles líneas de trabajo podemos mencionar: i) análisis con otros modelos de coeficientes de fricción y velocidades del elemento que arrastra, ii) incorporación de más grados de libertad, iii) planteamiento de problemas inversos en sus diferentes vertientes para este proceso merced a la experiencia del método en otros campos, iv) estudios de modelización de las superficies en contacto: rugosidad, presencia de lubricante,...

CAPÍTULO 2

FUNDAMENTOS TEÓRICOS

2.1 INTRODUCCIÓN

Como es habitual en las memorias de tesis, los fundamentos teóricos de esta investigación se recogen en un capítulo inicial, permitiendo así hacer referencia al mismo en cualquier parte del texto. En este capítulo se presentan las ecuaciones que definen el modelo matemático de los procesos de fricción seca. La solución numérica de estos problemas mediante el método de simulación por redes es uno de los objetivos principales de esta memoria.

Para desarrollar los modelos matemáticos comenzamos con un análisis de los procesos de fricción seca más interesantes, revisando las ecuaciones básicas que constituyen el punto de partida para el diseño de los modelos en red. Dada la alta sensibilidad de estos sistemas a algunos valores de sus parámetros, los procedimientos de análisis de estabilidad del sistema se revisan en el capítulo siguiente.

En el Anexo A se analizan los sistemas de representación de las soluciones de los sistemas de ecuaciones que constituyen los modelos, estas representaciones son esenciales para la comprensión del comportamiento de los sistemas. Lamentablemente la bibliografía que trata estas herramientas es muy dispersa o sólo muestra casos que no permiten una fácil generalización, bien por ser planteamientos puramente matemáticos o, cuando son prácticos, por ser incompletos. Por esta razón se ha considerado necesario adaptar la información disponible a nuestras necesidades, el estudio de los procesos de fricción. Esta adaptación, el Anexo A, se cita en aquellos apartados que requieren una aclaración adicional.

2.2 PROCESOS DE FRICCIÓN SECA

La fricción seca es uno de los campos de trabajo fundamentales de la ingeniería mecánica, habiéndose desarrollado numerosos estudios relacionados con este fenómeno. A pesar de lo cotidiano y la larga historia de este campo de estudio, su análisis ha mostrado una gran dificultad. En primer lugar, cualquier estudio de la fricción seca, un

fenómeno aparentemente macroscópico, debe ser también realizado a escala microscópica. En segundo lugar, el proceso muestra un comportamiento radicalmente distinto en condiciones estáticas y dinámicas, siendo completamente diferentes los parámetros utilizados para representar el resultado de estos análisis. Así, en condiciones estáticas, el objetivo principal es conocer la fuerza requerida para el inicio del movimiento, mientras que en condiciones dinámicas el interés principal reside en conocer la velocidad a la que la fuerza de fricción se estabiliza y alcanza su valor mínimo. Por si estas dificultades no fuesen suficientes, la solución de los problemas estático y dinámico es muy sensible al rango de parámetros que definen el sistema. En consecuencia, los tipos de movimiento obtenidos presentan diferencias cualitativas y la fuerza de fricción global registra un amplio rango de valores.

Históricamente, se atribuye a Tomlinson el primer intento para explicar las leyes de Coulomb a nivel atómico (Tomlinson 1929). Este autor supuso que los átomos de una superficie actuaban como osciladores desacoplados enganchados a átomos de la otra superficie, como los dedos sobre las cuerdas de una guitarra al hacerla sonar. Tras el enganche, los átomos saltan abruptamente entre dos posiciones de equilibrio. Posteriormente, el modelo Frenkel-Kontorova consideró el acoplamiento entre átomos (Frenkel and Kontorova 1938): un modelo unidimensional con una cadena de átomos adsorbidos, linealmente acoplados mediante interacciones entre átomos sucesivos, y sujetos a un potencial, espacialmente periódico, originado por la superficie fija.

La combinación de los modelos anteriores da lugar al modelo Frenkel-Kontorova-Tomlinson (modelo FKT), Figura 2.1. Este modelo (Weiss y Elmer 1996; Weiss y Elmer 1997; Alhama, Marín y col. 2011) tiene en cuenta el acoplamiento entre átomos de la superficie del bloque deslizante, no considerado por Tomlinson, y entre cada uno de estos átomos y el interior del bloque deslizante, no considerado por Frenkel y Kontorova.

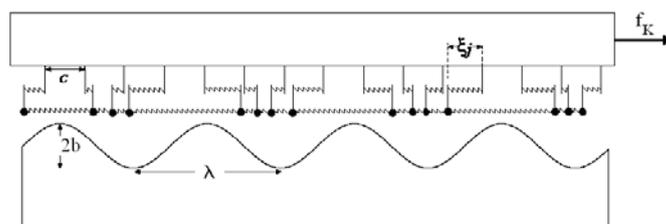


Figura 2.1 Representación física del modelo FKT

A pesar de la aparente sencillez de los modelos mencionados, la fricción seca muestra a veces comportamientos sorprendentes, que pueden impedir el funcionamiento correcto de un dispositivo o, por el contrario, resultar potencialmente útiles en diseños mecánicos. Siendo más concretos, para fricción estática Aubry mostró que una fuerza casi infinitesimal puede producir desplazamientos si la amplitud del potencial periódico está por debajo de un valor crítico, punto de ruptura de la analiticidad, y la relación entre las constantes de las redes cristalinas de la capa adsorbida y la superficie del sustrato es un número irracional (Aubry 1979).

Cuando se produce el deslizamiento, los sistemas pueden mostrar comportamientos que van desde estacionarios hasta caóticos.

Otras variantes del modelo FKT han sido aplicadas para simular microscopios que emplean una puntera de dimensiones nanométricas sobre una superficie suave a nivel atómico (Schwarz y Hölscher 2001). Estos microscopios son fundamentales para una comprensión más completa de la naturaleza de la fricción seca (Schwarz y Hölscher 2001).

El microscopio de fuerza de barrido (Scanning Force Microscope, SFM) permite estudiar la fricción con alta resolución espacial en función de la geometría de contacto, la carga aplicada, el área de contacto efectiva, la velocidad de deslizamiento y la estructura de la superficie ensayada. A partir del uso de esta herramienta, se ha encontrado que algunos fenómenos a escala nanométrica poseen un comportamiento similar a los que suceden a escala macroscópica, mientras que otros muestran un comportamiento muy diferente. Además, la fricción a escala nanométrica es proporcional al área de contacto, a diferencia del caso macroscópico. También es notable la independencia entre la presión media de contacto y el esfuerzo cortante.

La siguiente cuestión, qué factores determinan si un contacto dado tiene una fricción alta o baja, resulta más difícil de resolver. Muchos ensayos han demostrado la sensibilidad de la fricción a pequeños cambios en la estructura de la superficie. Además, estos muestran su dependencia con el ángulo de la dirección de deslizamiento en el sistema de referencia de la red cristalina. Esta característica se ha utilizado con frecuencia para identificar áreas químicamente diferentes en una muestra o dominios individuales, originados por efectos estructurales, pero aún no ha permitido explicar que algunas superficies tengan mayor fricción que otras.

Los modelos teóricos de estos microscopios han demostrado un movimiento típico de stick-slip de los átomos de la puntera sobre la superficie de la muestra, saltando desde un mínimo de potencial de interacción puntera-muestra a los siguientes. Sus caminos a menudo se asemejan a una curva en zigzag que tratan de evitar el paso sobre la posición de un átomo de la muestra asociado al máximo del potencial de interacción. Debido a este comportamiento específico, las imágenes del microscopio de fuerza de contacto representan únicamente la periodicidad de los mínimos del potencial de interacción, que por lo general no coincide con la estructura atómica de una muestra de estructura cristalina no trivial.

A partir de los resultados de los diferentes ensayos realizados parece posible derivar las leyes de la fricción de Amontons y Coulomb a partir de efectos nanoscópicos. Greenwood (Greenwood y Williamson 1966; Greenwood 1992) mostró que el área de contacto eficaz entre cuerpos macroscópicamente planos, que sin embargo presentan una rugosidad estadística a nivel microscópico, se incrementa linealmente con la carga, lo que elimina cualquier contradicción entre las correspondiente leyes de fricción macroscópicas y nanoscópicas. Por otra parte, la relativa independencia entre la fuerza de fricción y la velocidad de deslizamiento tanto a escala macroscópica como nanoscópica podría explicarse con el movimiento tipo stick-slip de los átomos en el potencial de interacción puntera-muestra. Mientras la velocidad relativa de los dos cuerpos sea mucho menor que la velocidad de deslizamiento intrínseca de los átomos, la energía disipada será independiente de las variaciones en la velocidad de deslizamiento.

A pesar de todos estos avances, las preguntas pendientes superan a las respuestas encontradas. Por ejemplo, aún es imposible predecir las propiedades de fricción de un contacto específico, aunque la optimización de estas propiedades en superficies de uso específico va cobrando importancia con la miniaturización de los sistemas mecánicos.

A nivel práctico, las superficies utilizadas en ingeniería distan mucho de ser suaves a nivel atómico, por lo que también se requiere estudios a nivel macroscópico (Awrejcewicz y Olejnik 2005).

Otra herramienta para analizar el fenómeno de fricción es el modelo clásico de Burridge-Knopoff (Burridge y Knopoff 1967). Éste consiste en un sistema de ecuaciones diferenciales utilizado para la simulación de terremotos discretizando el sistema en n bloques, cada uno de masa m . Estas masas interactúan mutuamente a través

de muelles, están sometidas a una fuerza de fricción que depende de la velocidad, $F_f(v_i)$, e interactúan a su vez elásticamente con el sustrato, Figura 2.2 (Cartwright, Hernández-García y col. 1997). La ecuación de movimiento es:

$$m \cdot \ddot{x}_i = k_c \cdot (x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}) - k_p \cdot (x_i - v \cdot t) - F_f(\dot{x}_i) \quad (2.1)$$

Donde k_c es la constante elástica del muelle que representa la interacción de las masas, k_p es la constante elástica del muelle que representa la interacción masa-sustrato y x_i es la desviación de la posición del bloque i respecto a su posición de equilibrio.

Carlson y Langer consideran que la fuerza de fricción disminuye asintóticamente con la velocidad, v , y los bloques realizan un movimiento de stick-slip (Carlson y Langer 1989), Figura 2.2.

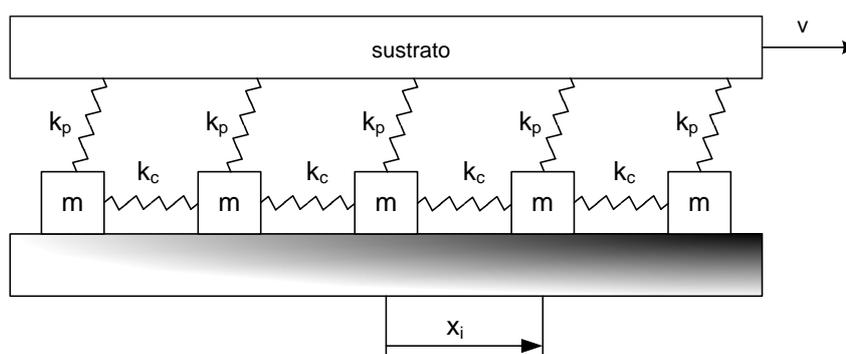


Figura 2.2 Representación física del modelo Burridge-Knopoff

El mismo fenómeno de stick-slip asociado a la fricción, descrito en el modelo de Burridge-Knopoff, se presenta en los trabajos de Awrejcewicz y col. (Galvanetto y Bishop 1995; van de Vrande, van Campen y col. 1999; Galvanetto 2001; Galvanetto 2002; Awrejcewicz y Olejnik 2003 (3)). Cuando se simplifica el sistema mencionado, usando sólo dos masas, Figura 2.3, es factible ensayar el deslizamiento de los bloques.

La introducción en los modelos de la dependencia entre la fuerza de fricción y la velocidad permite la observación de bifurcaciones en la solución.

Otro campo interesante relacionado con la fricción se encuentra en los sistemas de frenado de vehículos. Los sistemas de frenado con mecanismos antibloqueo (ABS) evitan que las ruedas se bloqueen durante un accionamiento brusco de los frenos, lo que mejora la estabilidad direccional y acorta la distancia de frenado. Un sistema dinámico

bidimensional no lineal con control de conmutación es uno de los dispositivos de freno antibloqueo más sencillos. La no linealidad del sistema se manifiesta en la relación entre el deslizamiento y el coeficiente de fricción dinámica.

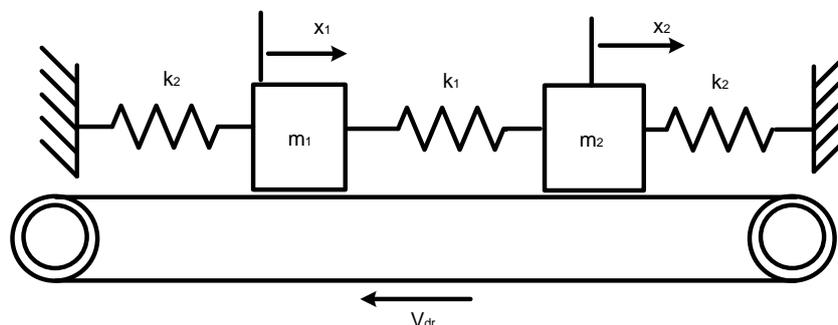


Figura 2.3 Modelo de Burridge-Knopoff con dos masas

Awrejcewicz utiliza un modelo físico de un sistema de frenos para una rueda, que incluye coeficientes no lineales (Fling y Fenton 1981; Choi y Lou 1991; Perko 1991; Yeh y Day 1992; Fu, Fang y col. 2001; Awrejcewicz y Olejnik 2005). En concreto, el freno ‘duo-servo’ Girling (Girling 2013), Figura 2.4, que puede simplificarse mediante el sistema de dos cuerpos y dos grados de libertad de la Figura 2.5, (Awrejcewicz y Olejnik 2003 (2); Awrejcewicz y Olejnik 2003 (3); Awrejcewicz y Olejnik 2005; Awrejcewicz y Olejnik 2007). Éste incluye un bloque que desliza y un brazo acodado articulado en su vértice. El bloque deslizante está conectado al bastidor mediante un resorte lineal, cuya constante elástica es k_1 . Este bloque también está conectado al codo articulado mediante dos resortes, el horizontal con una constante elástica k_2 y el vertical con una constante elástica k_3 .

El comportamiento de los dos últimos modelos es muy sensible a la función que define la fuerza de fricción, por lo que se va a tratar con más detalle en el siguiente apartado. Básicamente, hay que considerar la rugosidad y la histéresis en el coeficiente de fricción. Por otro lado, dada la discontinuidad existente en este fenómeno, es necesario hacer algunas consideraciones sobre la formulación de la fricción.

2.2.1 INFLUENCIA DE LA RUGOSIDAD EN EL COEFICIENTE DE FRICCIÓN SECA

La rugosidad superficial es un factor importante en el comportamiento de contactos secos y altamente cargados (Mihailidis, Bakolas y col. 2001), siendo la caracterización de las superficies rugosas un problema reconocido en ciencia y tecnología (Thomas 1999). El enfoque general para esta caracterización está basado en un conjunto de

parámetros estadísticos obtenidos a partir del perfil superficial o mapa superficial 3D. Así, algunas normas nacionales utilizan generalmente R_a , R_z , S y S_m para la caracterización bidimensional; pero estos parámetros son demasiado generales para una caracterización 3D, pudiéndose perder la información más valiosa, la organización espacial de la superficie (Myshkin, Grigoriev y col. 2003).

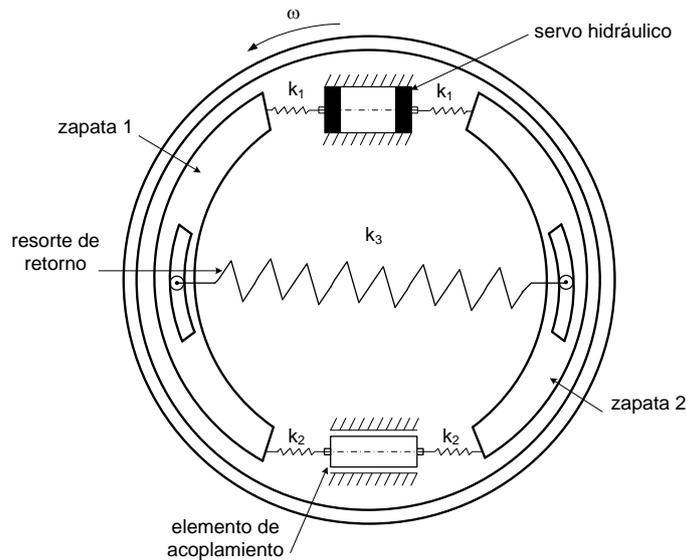


Figura 2.4 Esquema de freno 'duo-servo' Girling

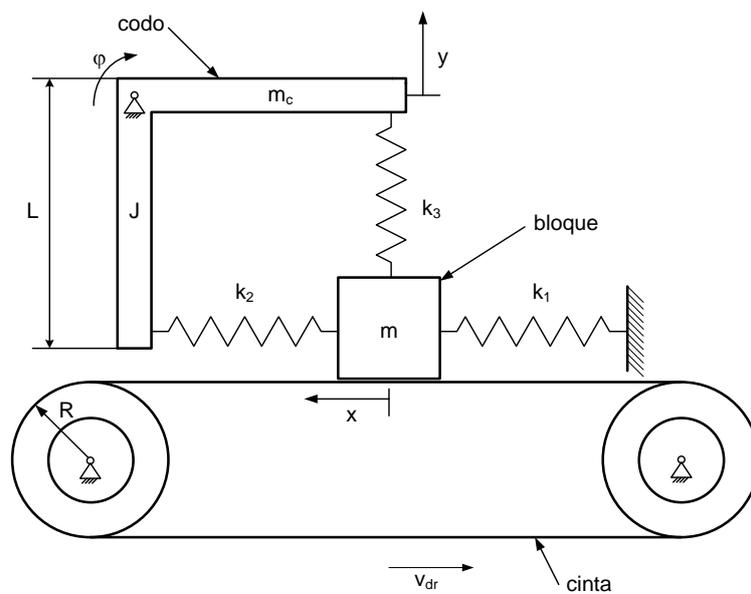


Figura 2.5 El modelo teórico de un mecanismo de freno

La mejora en la exactitud de las técnicas tradicionales de contacto (perfilómetro), así como las de no contacto, han permitido medir la rugosidad a escala nanométrica, Figura 2.6, (Myshkin, Grigoriev y col. 2003). En esta figura se comparan las características de los siguientes instrumentos:

- microscopio electrónico de barrido (SEM)
- microscopio de fuerza atómica (AFM)
- microscopio de efecto túnel (STM)

A pesar del amplio uso del microscopio de sonda de barrido en el estudio de superficies, la medida de parámetros promedio a escala nanométrica requiere una mayor investigación. Con este problema pendiente es difícil comparar superficies, identificar cómo actúa la rugosidad de superficies suaves durante la fricción seca y modelar matemáticamente el contacto (Myshkin, Grigoriev y col. 2003).

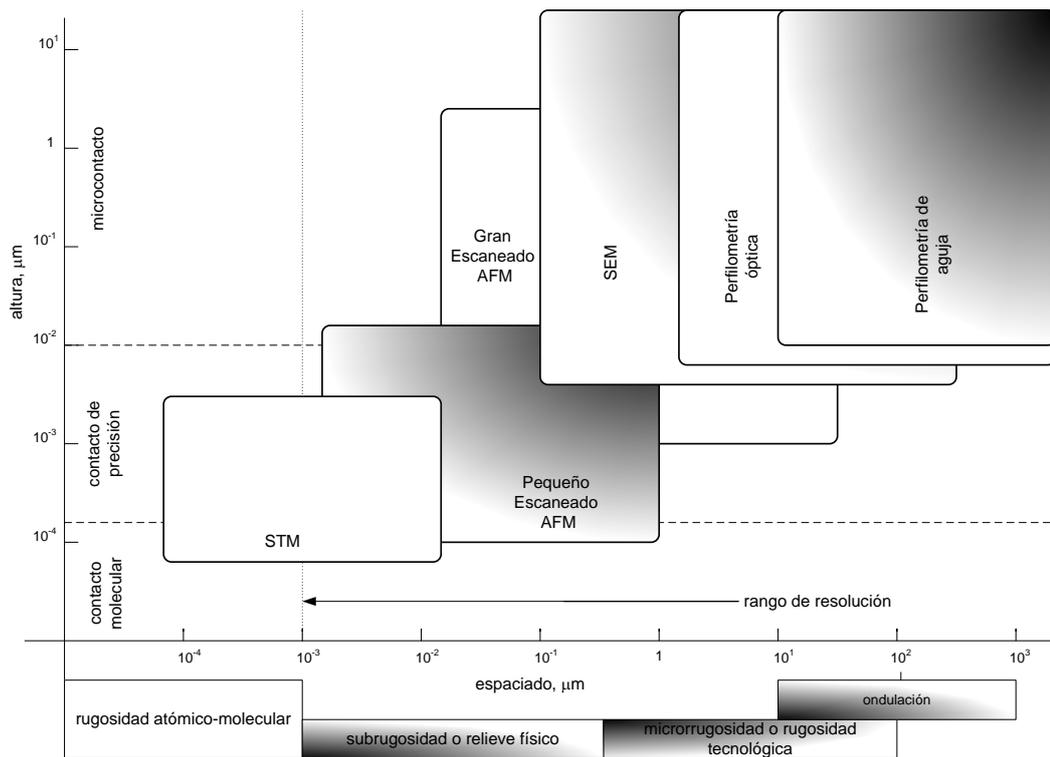


Figura 2.6 Diagrama de los parámetros de espaciado y altura de asperezas y rango de resolución vertical-lateral para diferentes métodos de medida de rugosidad (Myshkin, Grigoriev y col. 2003)

Al margen de las dificultades instrumentales, la formulación de la estructura de la rugosidad con métodos de medida avanzados exige considerar tres propiedades fundamentales: i) la distribución aleatoria de asperezas y de sus parámetros, ii) el carácter multiescala de la rugosidad, y iii) la no-homogeneidad, que se manifiesta como una dependencia entre los parámetros de rugosidad a la escala de medida. Entre los parámetros de distribución aleatoria de las asperezas están la altura, la pendiente y la curvatura en la punta. El carácter multiescala de la rugosidad es debido a que el tamaño significativo de las asperezas puede variar desde la longitud de la muestra hasta la escala atómica. Las propiedades mencionadas no son independientes, jugando un papel trascendental la topografía multiescala (Myshkin, Grigoriev y col. 2003).

Podría resultar conveniente considerar cinco niveles topográficos principales según la escala de la longitud: errores de forma, ondulación, microrrugosidad o rugosidad tecnológica, subrugosidad o relieve físico, y rugosidad atómico-molecular. Sin embargo, en la práctica las superficies contienen al menos dos niveles de asperezas, ondulación más rugosidad o rugosidad más subrugosidad. Archard fue el primero en establecer la gran influencia de esta propiedad en la tribología, proponiendo el conocido modelo multinivel (Archard 1957).

Sayles y Thomas identifican la no-homogeneidad de la topografía superficial como fuente de dificultades en la investigación (Sayles y Thomas 1978). En ese sentido, Myshkin, Grigoriev y col. proponen un método para dividir la topografía medida por AFM en dos niveles: rugosidad y subrugosidad. Este método cumple al menos una de las dos condiciones para la homogeneidad, esto es, tener un valor promedio nulo. Para eliminar la componente de gran longitud de onda, rugosidad, usan un proceso de filtrado de imagen de promediado repetido. Los parámetros del relieve a escala inferior a la micra, subrugosidad, se determinan mediante imágenes de $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$ con 128×128 puntos.

En los problemas de fricción seca, la descripción matemática de la superficie rugosa permite la inclusión de las características principales encontradas en las medidas. Esta inclusión da lugar a modelos de simulación numérica que van desde los más sencillos, deterministas, que describen la superficie rugosa como un conjunto regular de cuerpos geométricos sencillos, hasta modelos complejos, basados en la teoría de probabilidades y geometría fractal (Patir 1978; Hu y Tonder 1992).

Así, el contacto real es un conjunto de contactos puntuales, cuya área total se denomina área de contacto físico o área de contacto real. Este área está formada por asperezas que contactan a escala nanométrica, subrugosidad. El área de la superficie de contacto físico es menor que el de la superficie de apoyo, área de contacto aparente, en uno o dos órdenes de magnitud. La información anterior está corroborada por la relación entre el área de contacto físico, que soporta una carga, y la intensidad de corriente eléctrica transmitida por dicho contacto. Una línea de investigación bien definida trata el análisis del efecto de esta rugosidad en los coeficientes de fricción.

El coeficiente de fricción clásico puede ser útil en estos casos siempre que se modifique convenientemente para cumplir con el comportamiento encontrado experimentalmente. Por tanto, este coeficiente sólo puede ser utilizado para materiales concretos y un rango de cargas limitado.

A pesar de las limitaciones mencionadas, resulta interesante utilizar modelos basados en este coeficiente para estudiar dispositivos sometidos a determinadas cargas y velocidades de arrastre, ya que muestran transiciones interesantes entre velocidades de deslizamiento estacionarias, periódicas y caóticas. El conocimiento de los valores de los parámetros que determinan cada uno de estos estados es fundamental para un correcto diseño y operación de estos dispositivos.

Los modelos presentados anteriormente han sido tratados numéricamente por diferentes métodos como el de diferencias finitas y el de dinámica molecular (Hölscher, Schwarz y col. 1996).

2.2.2 EFECTOS DE LA HISTÉRESIS EN FRICCIÓN SECA

La modelización de la fricción seca se ha investigado desde la hipótesis de Coulomb (Coulomb 1785). En primer lugar, es preciso resaltar la existencia de una amplia variedad de modelos cuya efectividad depende de las características del problema modelado. En concreto, si se considera la dinámica de un sistema en el que la velocidad de deslizamiento permanece prácticamente constante, no hay necesidad de un modelo sofisticado; incluso el más simple, descrito únicamente por la ley de Coulomb, sería suficiente. Para sistemas con comportamientos dinámicos más complejos, con respuestas caóticas (Den Hartog 1931; Tolstoi 1967; Shaw 1986; Popp y Stelter 1990;

Wojewoda, Barron y col. 1992; Feeny y Moon 1994; Wiercigroch 1994; Oestreich 1998; Bogacz y Ryczek 2003), el modelo elegido debe tener en cuenta la transición entre fricción estática y dinámica, precisando además la definición del comportamiento del sistema cuando la velocidad relativa es nula. Este modelo tiene que incorporar: i) la histéresis, que explica el predeslizamiento o fase de stick, ii) el retardo de la fricción o la irreversibilidad de la fuerza de fricción, y iii) otros fenómenos característicos de la fricción como el efecto Stribeck o la fuerza de fricción estática variable.

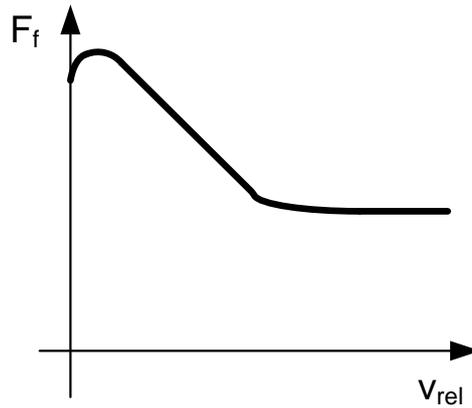
Sin embargo, no resulta sencillo integrar todos los efectos de fricción en un único modelo. En concreto, es difícil definir un mecanismo que gobierne la transición entre la fase de stick y el deslizamiento o fase de slip. En las dos últimas décadas han surgido varios modelos de fricción que incluyen las propiedades mencionadas (Armstrong-Hélouvry 1991; Powell y Wiercigroch 1992; Armstrong-Hélouvry, Dupont y col. 1994; de Wit, Olsson y col. 1995; McMillan 1997; Liang y Feeny 1998; Al-Bender, Lampaert y col. 2004), con la desventaja de ser demasiado sofisticados para ser aplicados a dispositivos mecánicos por la dificultad para determinar de manera fiable los parámetros que utilizan.

Si se define la fuerza de fricción como la reacción en la dirección tangente a dos superficies en el punto de contacto, ésta viene definida, al margen de la fuerza normal a dichas superficies, por varios factores: las propiedades físicas de los materiales que constituyen las superficies, sus geometrías y topologías, la velocidad relativa y el desplazamiento de los cuerpos en contacto. En 1785, Coulomb (Coulomb 1785), en la primera descripción, no consideraba el efecto de la velocidad relativa. Desde el inicio del siglo XX, los ensayos ya mostraron la dependencia no lineal de la fuerza de fricción con la velocidad relativa (Stribeck 1902 (1); Stribeck 1902 (2); Rabinowicz 1951). Estos ensayos se realizaron frecuentemente en condiciones estacionarias. En concreto, el trabajo de Stribeck (Stribeck 1902 (1); Stribeck 1902 (2)) muestra la transición no lineal de la fase de stick a la fase de slip. Especialmente interesante es el efecto Stribeck (Stribeck 1902 (1); Stribeck 1902 (2)), consistente en el descenso de la fuerza para valores casi nulos de velocidad relativa, Figura 2.7-a. Rabinowicz (Rabinowicz 1951) se centró en la medida del valor máximo de la fuerza de fricción que aparece en la transición stick-slip, la fuerza requerida para romper el enclavamiento e iniciar el movimiento. Los estudios de estos valores conducen a que su magnitud depende de la rapidez con la que aumenta la fuerza de fricción durante la fase de stick (Johannes,

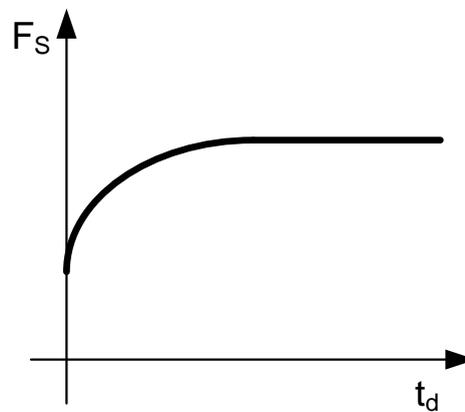
Green y col. 1973). Así, cuanto más rápido es el incremento, menor es el valor máximo de dicha fuerza. Los niveles máximos variables de la fuerza de fricción están también relacionados con el tiempo de permanencia a velocidad relativa nula, Figura 2.7-b.

El siguiente grupo de características de fricción a considerar es el relacionado con los efectos de histéresis. Uno de ellos puede aparecer durante el enclavamiento y durante la transición stick-slip, y es causado por un comportamiento similar al de un muelle. El fenómeno de movimiento microscópico, fase de stick, está asociado a la rigidez tangencial del contacto (Courtney-Pratt y Eisner 1956; Harnoy, Friedland y col. 1994; Liang y Feeny 1998). El movimiento en la fase de stick está representado por la reducida anchura del ciclo de histéresis que aparece en torno a la velocidad relativa nula, Figura 2.8.

Otro efecto de histéresis aparece cuando el desplazamiento de uno de los cuerpos oscila durante la fase de slip. Estos desplazamientos relativos son de un orden mucho mayor que en la fase de stick. Este fenómeno fue documentado por primera vez para una velocidad relativa fluctuante por Hess y Soom (Hess y Soom 1990), Figura 2.9-a. La superficie de histéresis aumenta conforme son más rápidas las variaciones de velocidad relativa (Olsson, Astrom y col. 1998). La fuerza de fricción cuando la velocidad relativa disminuye es menor que cuando dicha velocidad aumenta. Por tanto, el comportamiento dinámico se explica por la existencia de una memoria de fricción causada por la permanencia de la fuerza de fricción. Características de histéresis similares pueden observarse con variaciones alternantes de la velocidad relativa, Figura 2.9-b. Algunos estudios teóricos y experimentales confirman la existencia de pendientes diferentes de la fuerza de fricción durante la aceleración y la deceleración (Den Hartog 1931; Bell y Burdekin 1970). Esta característica es conocida como irreversibilidad de la fuerza de fricción (Powell y Wiercigroch 1992; Wiercigroch 1993; Wiercigroch, Sin y col. 1999).



a)



b)

Figura 2.7 Curva de Stribeck, a) fuerza de fricción versus velocidad relativa y b) fuerza máxima de fricción versus tiempo de permanencia a velocidad relativa nula

2.2.3 FORMULACIÓN DE LA FUERZA DE FRICCIÓN

Los modelos estáticos de fricción no incluyen el fenómeno de histéresis, representado por una irreversibilidad o un retardo de la fricción. Por lo general, estos tienen una forma de dependencia directa entre la fuerza de fricción y la velocidad relativa. Los modelos dinámicos de fricción, que incluyen la histéresis, introducen las variables de estado que caracterizan la fricción y una ecuación diferencial que representa la evolución temporal de estas variables (Wojewoda, Stefanski y col. 2008).

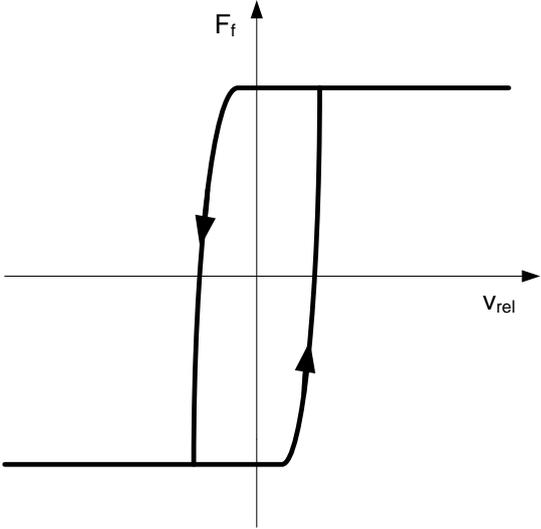
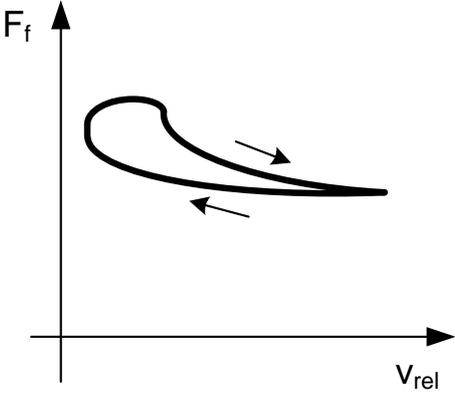
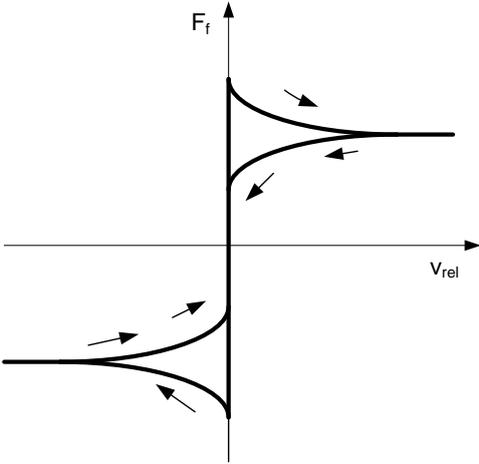


Figura 2.8 Histéresis durante la fase de stick



a)



b)

Figura 2.9 Histéresis durante la fase de slip, a) fuerza fluctuante y b) fuerza alternante

Un enfoque propio de ingeniería, debido a Coulomb, simplifica la fuerza de fricción, F_f , representándola como un valor constante y de signo opuesto al de la velocidad relativa, v_{rel} , de los cuerpos en contacto; esto es, en la forma

$$F_f = -N \cdot \mu_C \cdot \text{sgn}(v_{rel}) \quad (2.2)$$

donde N es la carga normal y μ_C el coeficiente de fricción de Coulomb, Figura 2.10. Este modelo clásico, el más sencillo, no explica en la práctica el comportamiento dinámico observado en sistemas mecánicos con fricción. Concretamente, el modelo matemático de vibraciones auto-excitadas, inducidas por la fricción seca, requiere una pendiente no nula de la fuerza de fricción con el fin de iniciar este tipo de oscilaciones (Babakov 1968). Otra desventaja de la fuerza de fricción propuesta por Coulomb es la falta de interpretación física de su respuesta en la zona de velocidad relativa nula. Esto justifica la necesidad de corregir dicho modelo, programando un valor nulo en los cambios de signo de dicha fuerza cuando la velocidad relativa sea nula.

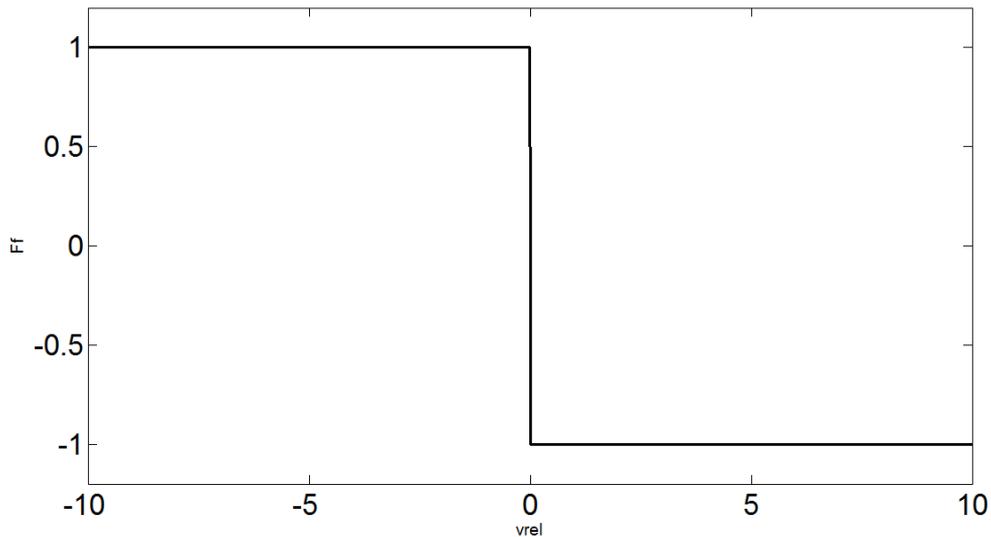


Figura 2.10 Gráfica representativa de la ley de Coulomb, fuerza de fricción versus velocidad relativa

Una versión más evolucionada de la expresión anterior incluye una distinción entre las fases de stick y de slip:

$$\begin{cases} |F_f| \leq \mu_S \cdot F_N = F_S; \text{ si } v_{rel} = 0 \\ F_f = -\text{sgn}(v_{rel}) \cdot \mu \cdot F_N; \text{ si } v_{rel} \neq 0 \end{cases} \quad (2.3)$$

donde μ_s es el coeficiente de fricción estática, F_N la fuerza normal, μ el coeficiente de fricción dinámica y F_f la fuerza de fricción. El coeficiente de fricción dinámica se puede definir en función de la velocidad relativa mediante la siguiente expresión:

$$\mu = \frac{\mu_s}{1 + \delta \cdot |v_{rel}|} \quad (2.4)$$

El parámetro δ de la Ecuación (2.4) permite incorporar la característica de Stribeck a la expresión de la fuerza de fricción, Figura 2.11.

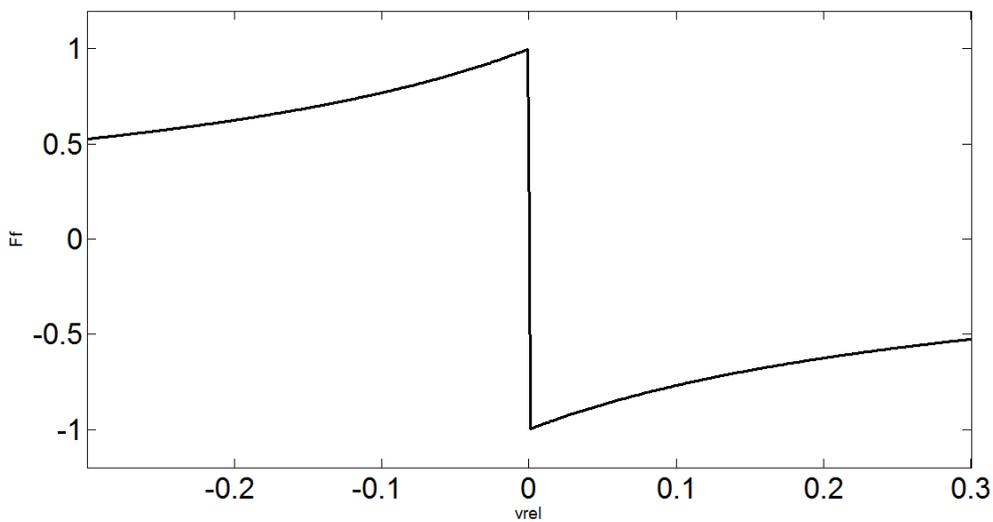


Figura 2.11 Característica de Stribeck incorporada a la fuerza de fricción ($\delta=3$)

En la Figura 2.11 puede observarse el cambio brusco de la fuerza de fricción cuando se produce un cambio de dirección de la velocidad relativa. Una forma de suavizar esta transición es sustituir la función ‘sgn(z)’ por $(2/\pi) \cdot \arctan(\varepsilon \cdot z)$ (Andrianov, Awrejcewicz y col. 2005), donde ε es el parámetro de precisión, que controla la suavidad de la transición y z es el argumento de la función. La Figura 2.12 muestra esta función para diferentes valores de ε .

La discontinuidad sigue siendo fuerte a pesar de este cambio y resulta difícil asegurar la convergencia de las soluciones numéricas. La última modificación es introducir un valor cero para la fuerza de fricción en el instante en que la velocidad relativa cambia de signo.

Otros modelos con características no lineales de fricción, pueden formularse mediante la expresión:

$$F_f = -N \cdot \mu_c \cdot \left(1 + \frac{\mu_s - \mu_c}{\mu_c} g(v_{rel})\right) \cdot \text{sgn}(v_{rel}) \quad (2.5)$$

donde μ_s es el coeficiente de fricción estática y $g(v_{rel})$ una función no lineal que describe la curva característica de Stribeck.

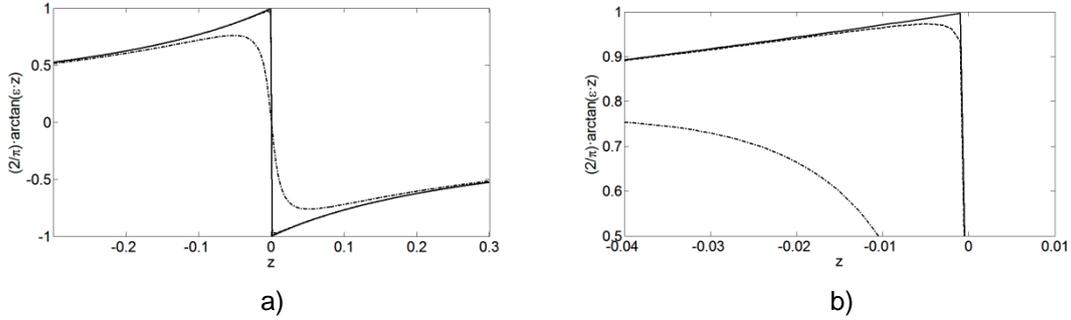


Figura 2.12 Aproximaciones de la función $\text{sgn}(z)$. Para $\varepsilon=1e2$ (línea de trazo y punto), $\varepsilon=1e4$ (línea de trazo), y $\varepsilon=1e6$ (línea continua). a) Representación completa y b) ampliación de la esquina superior

Las formulaciones más corrientes de la relación fuerza de fricción frente a velocidad relativa son las siguientes:

i) exponencial (Tustin 1947):

$$\exp(-|v_{rel}|/v_s) \quad (2.6)$$

ii) exponencial generalizada (Bo y Pavelescu 1982):

$$\exp(-\alpha \cdot |v_{rel}|^\delta) \quad (2.7)$$

iii) de Gauss (Armstrong-Hélouvry 1991):

$$\exp\left(-\left(\frac{v_{rel}}{v_s}\right)^2\right) \quad (2.8)$$

iv) de Laurentz (Hess y Soom 1990):

$$\frac{1}{1 + \left(\frac{v_{rel}}{v_s}\right)^2} \quad (2.9)$$

v) de Popp-Stelter (Popp y Stelter 1990):

$$\frac{1}{1 + \eta_1 \cdot |v_{rel}|} + \frac{\eta_2 \cdot v_{rel}^2}{\mu_s - \mu_c} \quad (2.10)$$

donde α , δ , η_1 y η_2 son constantes y v_s es la velocidad de Stribeck, valor límite de la velocidad relativa entre la fase de stick y la de slip.

Los modelos que incluyen la aceleración también incluyen información del cambio de velocidad asociada al tiempo de retardo relacionado con la histéresis. Este efecto se denomina memoria de fricción.

Los efectos de histéresis junto con la elasticidad del contacto, o memoria de fricción, requieren modelos de fricción aún más sofisticados. Powell, Wiercigroch y col. (Powell y Wiercigroch 1992; Wiercigroch, Sin y col. 1999) propusieron un enfoque sencillo de la modelización del comportamiento de histéresis durante la fase de slip, basado en la irreversibilidad de la fricción. Los casos simétricos de fricción irreversible, Figura 2.9, se pueden modelar utilizando la Ecuación (2.5), mediante una función no lineal que incluye el signo de la aceleración relativa \dot{v}_{rel} :

$$g(v_{rel}) = \exp(-\alpha \cdot |v_{rel}|) \cdot \text{sgn}(v_{rel} \cdot \dot{v}_{rel}) \quad (2.11)$$

Otro enfoque es el del modelo de siete parámetros, que se puede describir como un modelo estático del comportamiento de histéresis (Armstrong-Hélouvy 1991; Armstrong-Hélouvy, Dupont y col. 1994). Éste es aún más complejo que el que incluye la irreversibilidad de la fricción, porque se compone de dos modelos distintos: uno para fase de stick y el otro para la fase de slip.

Cuando el sistema está en fase de stick, la fricción se describe mediante el modelo de resorte lineal:

$$F_f(x) = k_s \cdot x \quad (2.12)$$

donde k_s es la rigidez de contacto relacionada con el desplazamiento previo a la fase de slip. Durante la fase de slip, la fricción se modela mediante una fuerza de Coulomb, F_C , un amortiguamiento viscoso, d_v , el efecto Stribeck y la memoria de fricción:

$$F_f(v_{rel}, t) = \left[F_C + d_v \cdot |v_{rel}| + F_S(\gamma, t_d) \cdot \frac{1}{1+(v_{rel}(t-\tau)/v_s)^2} \right] \cdot \text{sgn}(v_{rel}) \quad (2.13)$$

donde $F_S(\gamma, t_d)$ indica el valor de la fricción estática, que depende de un parámetro empírico γ y del tiempo de permanencia t_d , y τ es el tiempo de retardo introducido para considerar el efecto de histéresis de la memoria de fricción.

La implementación numérica de estos modelos estáticos presenta el problema de la conmutación entre las Ecuaciones (2.12) y (2.13) en las transiciones stick-slip.

En sentido clásico, los modelos estáticos utilizan relaciones estáticas entre fuerza de fricción y velocidad, y también con la aceleración. Hunt, Torbe y col. (Hunt, Torbe y col. 1965) proponen por primera vez esta relación. Otro ejemplo de un enfoque similar fue propuesto por McMillan (McMillan 1997) y Stefanski, Wojewoda y col. (Stefanski, Wojewoda y col. 2003). Este último modelo fue elaborado sobre la base de la irreversibilidad de la fricción, Ecuaciones (2.5) y (2.11), usando la función

$$g(v_{rel}) = \exp\left(-\frac{a_1 \cdot |v_{rel}|}{|\dot{v}_{rel}| + a_2}\right) \cdot \text{sgn}(v_{rel} \cdot \dot{v}_{rel}) \quad (2.14)$$

donde a_1 y a_2 son constantes.

El primer modelo dinámico, propuesto por Dahl (Dahl 1968), emplea la curva tensión-deformación de Ramberg y Osgood (Ramberg y Osgood 1943)

$$\frac{dF_f}{dx} = k_S \cdot \left(1 - \frac{F_f}{F_C} \cdot \text{sgn}(v_{rel})\right)^\alpha \quad (2.15)$$

donde k_S es el coeficiente de rigidez y α determina la forma de la curva tensión-deformación. Considerando $F_f = k_S \cdot z$ y $\alpha=1$, la Ecuación (2.15) puede ser reescrita como:

$$k_S \cdot \frac{dz}{dx} = k_S \cdot \left(1 - \frac{k_S \cdot z}{F_C} \cdot \text{sgn}(v_{rel})\right) \quad (2.16)$$

Multiplicando los términos de la ecuación anterior por dx/dt y simplificando, se obtiene

$$\frac{dz}{dt} = v_{rel} - \frac{k_S \cdot z}{F_C} \cdot v_{rel} \cdot \text{sgn}(v_{rel}) = v_{rel} - \frac{k_S \cdot |v_{rel}|}{F_C} \cdot z \quad (2.17)$$

donde z es la variable de estado. La Ecuación (2.15) es una generalización dinámica de la fricción de Coulomb clásica. Sin embargo, este enfoque no incluye ni el efecto Stribeck ni la fricción estática.

Otros modelos dinámicos son los de Haessig y Friedland (Haessig y Friedland 1991), Bliman y Sorine (Bliman y Sorine 1995) y de Wit, Olsson y col. (de Wit, Olsson y col.

1995). El propuesto por Bliman y Sorine, modelo LuGre, está relacionado con el comportamiento de las asperezas durante la fricción según las ecuaciones

$$\begin{cases} \frac{dz}{dt} = v_{rel} - k_S \cdot \frac{|v_{rel}|}{g(v_{rel})} \cdot z \\ F_f = k_S \cdot z + c_S \cdot \frac{dz}{dt} + c \cdot v_{rel} \end{cases} \quad (2.18)$$

donde z denota ahora la desviación promedio de las asperezas; los coeficientes k_S y c_S definen la rigidez de las asperezas y la amortiguación de las mismas, respectivamente; $c \cdot v_{rel}$ es la fricción viscosa; y, finalmente, $g(v_{rel})$ es una función que modela el efecto Stribeck según la Ecuación (2.8).

Una ventaja del modelo LuGre es su buen comportamiento dinámico, que ofrece posibilidades para simular transiciones stick-slip, fuerzas de fricción estática variables, memorias de fricción con efecto de histéresis, y la curva de Stribeck. El modelo de Al-Bender, Lampaert y col. (Al-Bender, Lampaert y col. 2004) se puede calificar como una actualización del modelo LuGre.

Hinrichs, Oestreich y col. introducen un componente estocástico para simular la influencia de algunos factores aleatorios, las variaciones de la fuerza normal a la superficie, y la no homogeneidad de las asperezas, (Hinrichs, Oestreich y col. 1998).

Tras esta revisión de los modelos de fricción, se puede afirmar que la mayor parte de los modelos estáticos, Ecuaciones (2.2), (2.3) y (2.6-2.11), suelen ser sólo una primera aproximación. En particular, no describen con precisión las transiciones de la fase de stick a la de slip y viceversa. Sin embargo, su ventaja radica en la sencillez y la aplicabilidad en simulaciones numéricas. Los modelos dinámicos, Ecuaciones (2.15-2.18), y algunos modelos estáticos más avanzados, Ecuaciones (2.12) y (2.13), permiten modelar con mayor precisión la mayor parte de los fenómenos observados, aunque son generalmente más complejos y difíciles de implementar numéricamente.

2.3 MODELOS DE FRICCIÓN SECA

Una vez revisada la influencia de la rugosidad sobre el coeficiente de fricción, los efectos de histéresis y las expresiones que representan la fuerza de fricción, se puede hacer una selección de los procesos que incorporen estos fenómenos. Este estudio va a

analizarlos mediante modelos implementados con el método de redes. Así, en función de la escala de la superficie implicada, estos son:

- Fricción entre superficies suaves a escala atómica: modelo FKT
- Fricción entre puntera de microscopio y superficie suave a escala atómica
- Fricción seca a escala macroscópica: modelo Kaidanovsky-Khaikin
- Fricción seca a escala macroscópica: modelo Burridge-Knopoff
- Fricción seca a escala macroscópica: mecanismo de freno

El modelo Frenkel-Kontorova-Tomlinson (FKT), Figura 2.1, está compuesto por un gran número de ecuaciones diferenciales acopladas, no lineales, que reproducen la fricción que tiene lugar en sistemas mecánicos en los que las superficies atómicas lisas de los dos cuerpos se deslizan una contra otra.

Como se ha comentado, la solución de los problemas estático y dinámico es muy sensible a los parámetros que intervienen en el problema: (i) la amplitud de la fuerza de interacción entre los átomos del cuerpo deslizante y los del cuerpo que permanece en reposo, (ii) la rigidez entre los átomos de la superficie móvil y entre éstos y la superficie fija, y (iii) la velocidad del bloque. Esta solución puede representar tipos de movimiento cualitativamente diferentes, así como a una amplia gama de posibilidades en la fuerza de fricción total (Alhama, Marín y col. 2011). Las soluciones van desde armónicas estables hasta caóticas.

El microscopio de fuerza de fricción (FFM), evolución del microscopio de escaneado de fuerza (SFM), aumenta la capacidad de investigación de fenómenos a escala atómica, cuestión clave para la comprensión del origen y la naturaleza de las leyes fundamentales de la fricción. El análisis del comportamiento de dichos contactos puntuales se hace mediante un modelo bidimensional de fricción a escala atómica. La respuesta de la puntera es del tipo stick-slip (Schwarz y Hölscher 2001).

Tras una revisión detallada de la literatura se han seleccionado una serie de técnicas y materiales para realizar su análisis. En cada uno de los casos abordados en este trabajo se ha optado por una muestra de un determinado material y por un microscopio que contiene una puntera que recorre la citada superficie. Los casos son los siguientes:

- NaF (001): se trata de una superficie con simetría de traslación. En este caso se emplea el FFM (Hölscher, Schwarz y col. 1996)
- MoS₂ (101): se trata de una superficie con simetría de traslación. En este caso se emplea el SFM o el microscopio de fuerza lateral (LFM) (Hölscher, Schwarz y col. 1997)
- Grafito Pirogénico de Alto Ordenamiento (HOPG): se trata de estructuras de láminas bien definidas, a menudo químicamente estables. En este caso se emplea un SFM y un LFM (Hölscher, Schwarz y col. 1998)
- Grafito: se emplea el AFM (Sasaki, Kobayashi y col. 1996)
- Xenón: se emplea el AFM (Hölscher, Allers y col. 2001)

El modelo de stick-slip se compone de ecuaciones diferenciales no lineales y acopladas que reproducen la fricción que ocurre en los sistemas mecánicos en los que dos cuerpos deslizan uno contra el otro. El análisis del problema muestra la sensibilidad del sistema a los parámetros, variando la respuesta desde simples soluciones armónicas estables a soluciones caóticas. Este modelo, con menor número de parámetros, es más adecuado para el análisis de la influencia de estos.

Las cadenas de bloques sujetos a fuerzas de fricción y elásticas representan el prototipo más natural de un oscilador stick-slip múltiple (Galvanetto y Bishop 1998). Por ello, desde un punto de vista teórico, su estudio está completamente justificado. Además, este modelo se usa con frecuencia en mecánica aplicada en el campo de sismología (Burridge y Knopoff 1967). En el campo de la ingeniería mecánica, Popp y Stelzer (Popp y Stelzer 1990), y Oestreich, Hinrichs y col. (Oestreich, Hinrichs y col. 1996; Hinrichs, Oestreich y col. 1997) han desarrollado trabajos sobre la dinámica de cadenas de bloques excitados por fuerzas externas armónicas. Finalmente, en el campo de la dinámica no lineal se han publicado algunos trabajos cuyo propósito es entender la dinámica compleja de los sistemas no suaves (Galvanetto, Bishop y col. 1995; Galvanetto 1997).

Algunas características de la fricción se utilizan en sistemas mecánicos reales: en embragues, sistemas accionados por correas, así como el sistema de frenos de un vehículo. El mecanismo de freno más ampliamente usado es el montado en las ruedas de los vehículos. Por esta razón se va a seleccionar un freno de tambor y zapata

(Awrejcewicz y Olejnik 2003 (1); Awrejcewicz y Olejnik 2003 (2); Awrejcewicz and Olejnik 2007(3)).

2.3.1 ECUACIONES DE BALANCE, CONDICIONES INICIALES Y DE CONTORNO DE FRICCIÓN SECA ENTRE SUPERFICIES SUAVES A ESCALA ATÓMICA: MODELO FRENKEL-KONTOROVA-TOMLINSON (FKT)

En la Figura 2.1 se mostró el esquema físico del modelo FKT. Éste contiene dos cuerpos rígidos deslizantes. Los átomos de la capa superficial del cuerpo deslizante superior se modelan como partículas sometidas a interacciones, representadas por dos clases de resortes. Uno de estos implementa la interacción entre átomos vecinos y el otro la interacción con el núcleo del bloque. Las hipótesis asumidas en el modelo FKT son: i) los cuerpos deslizantes son rígidos y uno de ellos está en reposo, ii) los átomos que están en la superficie del cuerpo que se mueve interactúan de forma lineal con los átomos vecinos más próximos, iii) el potencial de interacción entre los átomos de la superficie del cuerpo en reposo y los átomos de la superficie del cuerpo móvil se puede modelar mediante una función armónica, iv) los movimientos de los átomos, partiendo de la posición de equilibrio, son mínimos, y v) la velocidad del cuerpo móvil es constante.

Sobre cada átomo de la superficie del cuerpo superior actúan un conjunto de fuerzas: las inerciales representadas por $m \cdot (d^2\xi_j/dt^2)$, donde ξ_j es el desplazamiento relativo del átomo j de masa m ; las de amortiguamiento viscoso asociadas al movimiento absoluto del átomo j de la superficie móvil, representada por los términos $\beta \cdot v_j = \beta \cdot (d\xi_j/dt)$ y $\gamma \cdot (v_B + v_j) = \gamma \cdot (v_B + d\xi_j/dt)$, respectivamente; las de interacción elásticas entre los átomos vecinos, representadas mediante dos términos separados $\kappa_1 \cdot (\xi_j - \xi_{j-1})$ y $\kappa_1 \cdot (\xi_j - \xi_{j+1})$, y finalmente, las de interacción entre los átomos superficiales del cuerpo superior y el interior de la superficie, representadas por el término $\kappa_2 \cdot \xi_j$. Los coeficientes de las expresiones anteriores son constantes.

La fuerza de interacción entre los dos cuerpos se implementa mediante una función matemática sinusoidal, parabólica, potencial o de otro tipo, $V(v_B, \xi_j, t)$. Como resultante del balance de fuerzas en un átomo de la superficie móvil, se puede escribir la siguiente ecuación de momento:

$$\frac{d^2\xi_j}{dt^2} + \frac{\beta+\gamma}{m} \cdot \frac{d\xi_j}{dt} + \frac{2\kappa_1+\kappa_2}{m} \cdot \xi_j - \frac{b}{m} \cdot \text{sen}[2\pi(v_B \cdot t + c \cdot j + \xi_j)] + \frac{\gamma}{m} \cdot v_B - \frac{\kappa_1}{m} \cdot (\xi_{j-1} + \xi_{j+1}) = 0 \quad (2.19)$$

La función potencial se elige de tipo sinusoidal:

$$V(v_B, \xi_j, t) = \frac{b}{m} \cdot \text{sen}[2\pi(v_B \cdot t + c \cdot j + \xi_j)] \quad (2.20)$$

En las superficies en contacto, algunos átomos de la superficie móvil, separados por una distancia determinada, pueden permanecer enfrentados a átomos de la superficie estática. Así, si esto ocurre, $c \cdot P = Q \cdot \lambda$, donde P y Q son números enteros, mientras que c y λ son las constantes de red de la superficie móvil y la superficie fija, respectivamente. Como consecuencia, se tiene que establecer una condición de contorno para el desplazamiento del primer y último átomo de la cadena, es decir, los átomos 1 y P+1 deben tener el mismo desplazamiento relativo respecto a sus posiciones de equilibrio:

$$\xi_{j+P} = \xi_j \quad (2.21)$$

El número de átomos en cada superficie, P y Q, se elige de tal forma que su cociente, $Q/P=c/\lambda$, es el número áureo, $(5^{1/2} - 1)/2$, el caso inconmensurable que asegura que la rigidez crítica, referida a las transiciones de Aubry (Aubry 1979), toma el valor mínimo posible. Una rigidez mayor que la del valor crítico produce saltos abruptos de los átomos de la cadena. Este número es aproximado por un término de la serie de Fibonacci, en concreto 144/233. Así, el número de átomos de la superficie móvil, P, es 233.

El modelo matemático no lineal y unidimensional está integrado por el conjunto de Ecuaciones (2.19-2.21); P ecuaciones diferenciales ordinarias, una por cada átomo, además de la condición de contorno. Todas las variables y todos los parámetros son adimensionales; la unidad de la longitud es λ y la unidad del ratio rigidez/masa es κ_1/m . El resto de unidades se pueden expresar en función de estas unidades básicas. La solución numérica debe proporcionar tanto el desplazamiento relativo (ξ_j) como su derivada ($d\xi_j/dt$), la velocidad relativa de cada átomo. A partir de estos resultados, la fuerza de fricción total no estacionaria entre las partículas y el cuerpo superior, necesaria para mantener el cuerpo deslizante a velocidad constante, v_B , y su valor medio temporal vienen dados por las Ecuaciones (2.22 y 2.23), respectivamente.

$$f(t) = -\kappa_2 \cdot \sum_{j=1}^P \xi_j(t) \quad (2.22)$$

$$f_K(v) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \cdot \int_0^t f(t) \cdot dt = - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\kappa_2}{t} \cdot \int_0^t \sum_{j=1}^P \xi_j(t) \cdot dt \quad (2.23)$$

Si $v_B=0$, problema estático, la Ecuación (2.19) se transforma en:

$$\frac{d^2 \xi_j}{dt^2} + \frac{\beta + \gamma}{m} \cdot \frac{d \xi_j}{dt} + \frac{2\kappa_1 + \kappa_2}{m} \cdot \xi_j - \frac{b}{m} \cdot \text{sen}[2\pi(x_B + c \cdot j + \xi_j)] - \frac{\kappa_1}{m} \cdot (\xi_{j-1} + \xi_{j+1}) = 0 \quad (2.24)$$

En esta situación el bloque se mueve una distancia y entonces se mantiene parado. La ecuación para cada átomo

$$\frac{2\kappa_1 + \kappa_2}{m} \cdot \xi_j - \frac{b}{m} \cdot \text{sen}[2\pi(x_B + c \cdot j + \xi_j)] - \frac{\kappa_1}{m} \cdot (\xi_{j-1} + \xi_{j+1}) = 0 \quad (2.25)$$

se puede escribir como una sucesión, donde es posible obtener un nuevo valor, indicado por el segundo subíndice:

$$\xi_{j,i+1} = \frac{b}{2\kappa_1 + \kappa_2} \cdot \text{sen}[2\pi(x_B + c \cdot j + \xi_{j,i})] + \frac{\kappa_1}{2\kappa_1 + \kappa_2} \cdot (\xi_{j-1,i} + \xi_{j+1,i}) \quad (2.26)$$

Ahora, es posible emplear un método iterativo para obtener el valor de cada ξ_j en los casos en que la sucesión converge. Esta condición se verifica cuando las siguientes derivadas son menores que 1.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \xi_{j,i+1}}{\partial \xi_{j,i}} = \frac{b}{2\kappa_1 + \kappa_2} \cdot 2\pi \cdot \cos[2\pi(x_B + c \cdot j + \xi_{j,i})] \leq \frac{2\pi \cdot b}{2\kappa_1 + \kappa_2} \\ \frac{\partial \xi_{j,i+1}}{\partial \xi_{j-1,i}} = \frac{\kappa_1}{2\kappa_1 + \kappa_2} \\ \frac{\partial \xi_{j,i+1}}{\partial \xi_{j+1,i}} = \frac{\kappa_1}{2\kappa_1 + \kappa_2} \end{array} \right. \quad (2.27)$$

En los casos en los que la convergencia está asegurada, es posible implementar un programa sencillo utilizando un software comercial para resolver el problema, pero cuando la amplitud de la fuerza de interacción sobrepasa ciertos valores es imposible emplear el método iterativo.

Las condiciones iniciales de desplazamiento de los átomos son 0 en todos los casos.

2.3.2 ECUACIONES DE BALANCE, CONDICIONES INICIALES Y DE CONTORNO DE FRICCIÓN SECA ENTRE PUNTERA DE MICROSCOPIO DE FUERZA ATÓMICA Y SUPERFICIE SUAVE A ESCALA ATÓMICA

El esquema físico del modelo de una puntera de FFM, AFM o SFM aplicada sobre una superficie de muestra, Figura 2.13, tiene en cuenta un cuerpo rígido deslizante y un resorte por cada dirección espacial. Cada resorte muestra la interacción elástica entre las dos superficies durante la fricción seca (Hölscher, Schwarz y col. 1996; Sasaki, Kobayashi y col. 1996; Hölscher, Schwarz y col. 1997; Hölscher, Schwarz y col. 1998; Hölscher, Allers y col. 2001).

Las hipótesis que se tienen en consideración actualmente en los modelos de FFM, AFM y SFM son: (i) el soporte del microscopio es rígido y se mueve a velocidad constante, v_s , (ii) el voladizo y la puntera tienen un comportamiento elástico, y (iii) la fuerza de interacción entre la puntera y la superficie de muestra es una función de las distancias relativas entre la puntera y los átomos integrados en la superficie de muestra.

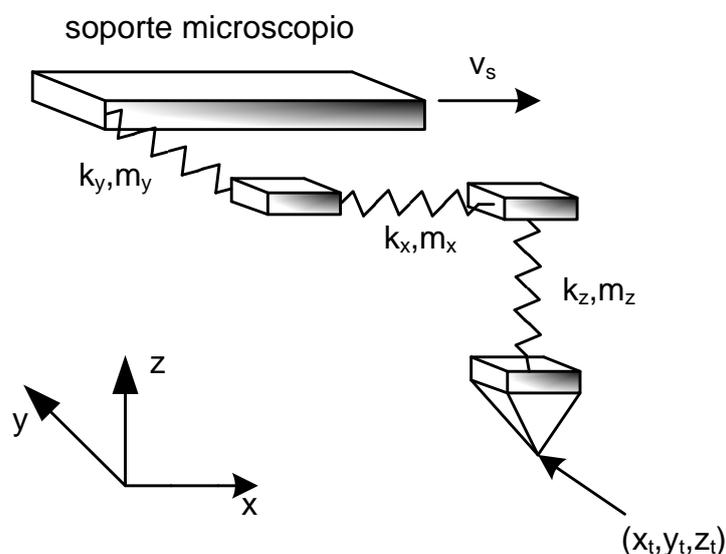


Figura 2.13 Modelo de puntera AFM, FFM y SFM (Hölscher, Schwarz y col. 1996; Sasaki, Kobayashi y col. 1996; Hölscher, Schwarz y col. 1997; Hölscher, Schwarz y col. 1998; Hölscher, Allers y col. 2001)

Sobre la puntera actúan varias fuerzas en la dirección x : la fuerza de inercia representada por el término ' $m \cdot (d^2x_t/dt^2)$ ', donde x_t es el desplazamiento absoluto de la puntera de masa m ; la fuerza elástica del resorte, representada por ' $k_x \cdot (x_M - x_t)$ ', y la fuerza de amortiguamiento del resorte, representada por ' $c_x \cdot (dx_t/dt)$ '. Los coeficientes

de estas fuerzas son constantes. Las fuerzas en otras direcciones son similares. Además, la fuerza de interacción entre la puntera y la superficie de la muestra se obtiene mediante el potencial de la superficie (Hölscher, Schwarz y col. 1996; Hölscher, Schwarz y col. 1997; Hölscher, Schwarz y col. 1998). El potencial de la superficie de NaF con una puntera FFM utilizado por Hölscher y col. (Hölscher, Schwarz y col. 1996) es:

$$V(x_t, y_t) = V_0 \cdot \cos\left(\frac{2\pi}{a_x} \cdot x_t\right) \cdot \cos\left(\frac{2\pi}{a_y} \cdot y_t\right) \quad (2.28)$$

donde la amplitud de potencial, V_0 , es 1 eV y las distancias interatómicas, a_x y a_y , son 4,62 Å en ambos casos.

La misma expresión del potencial de superficie es utilizada por Hölscher, Schwarz y col. (Hölscher, Schwarz y col. 1997) para el MoS₂ con una puntera SFM, siendo $V_0=1\text{eV}$ y las distancias interatómicas, a_x y a_y , 3,16 Å y 5,48 Å, respectivamente.

El potencial de la superficie en el HOPG con una puntera SFM empleado por Hölscher, Schwarz y col. (Hölscher, Schwarz y col. 1998) es:

$$V_{HOPG}(x_t, y_t) = -V_0 \cdot \left[2 \cdot \cos\left(\frac{2\pi}{a} \cdot x_t\right) \cdot \cos\left(\frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \cdot y_t\right) + \cos\left(\frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \cdot y_t\right) \right] \quad (2.29)$$

donde V_0 es 0,5 eV y la constante de red, a , es 2,46 Å.

El potencial de la superficie en el grafito con una puntera AFM empleado por Sasaki, Kobayashi y col. (Sasaki, Kobayashi y col. 1996), potencial de Lennard-Jones (Atkins y de Paula 2006), es:

$$V_{TS} = \sum_i 4\varepsilon \cdot \left[\left(\frac{\sigma}{r_{oi}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{oi}}\right)^6 \right] \quad (2.30)$$

donde la amplitud del potencial, ε , es $0.87381 \cdot 10^{-2}$ eV, y el valor de la distancia entre la puntera y el átomo de superficie para la que el potencial es cero, σ , es 2,4945 Å. La distancia entre la puntera y el átomo i -ésimo de la superficie, r_{oi} , se calcula a partir de la posición del átomo i -ésimo dentro de la red. Esta posición se define mediante la constante de red, 2,46 Å, y la distancia más cercana entre 2 átomos de carbono, 1,42 Å. Hölscher, Allers y col. utilizan el mismo potencial con la misma superficie de muestra y microscopio (Hölscher, Allers y col. 2000). En este trabajo σ es igual a 3,4 Å.

El potencial de la superficie del Xe con una puntera de AFM, utilizado por Hölscher, Allers y col. (Hölscher, Allers y col. 2001), es el mismo que el del grafito. El valor de σ es igual a 3,3 Å.

Como resultado del equilibrio de las fuerzas en la puntera, se pueden escribir las siguientes expresiones:

$$\begin{cases} m \cdot \ddot{x}_t = k_x \cdot (x_M - x_t) - \frac{\partial V}{\partial x_t} - c_x \cdot \dot{x}_t \\ m \cdot \ddot{y}_t = k_y \cdot (y_M - y_t) - \frac{\partial V}{\partial y_t} - c_y \cdot \dot{y}_t \\ m \cdot \ddot{z}_t = k_z \cdot (z_M - z_t) - \frac{\partial V}{\partial z_t} - c_z \cdot \dot{z}_t \end{cases} \quad (2.31)$$

La condición inicial de desplazamiento relativo de la puntera es 0 en la coordenada x para cada pasada horizontal, igual que para la coordenada y. La velocidad relativa inicial de la puntera al inicio de cada pasada horizontal es, asimismo, 0.

2.3.3 ECUACIONES DE BALANCE, CONDICIONES INICIALES Y DE CONTORNO DE FRICCIÓN SECA A ESCALA MACROSCÓPICA: MODELO DE K Aidanovsky-KHAIKIN

El esquema físico del modelo del bloque sobre la correa, Figura 2.14, contiene un cuerpo rígido deslizante y un resorte. El cuerpo deslizante superior posee masa. El resorte representa la interacción elástica entre las dos superficies durante la fricción en seco. Las hipótesis actualmente asumidas en el modelo de bloque sobre correa son: (i) los cuerpos deslizantes son rígidos y uno de ellos se mueve a velocidad constante, v_{dr} , (ii) las superficies tienen un comportamiento elástico, y (iii) la fuerza de interacción entre las superficies deslizantes es una función de la velocidad relativa.

Varias fuerzas actúan sobre el cuerpo superior: la fuerza de inercia, representada por ' $m \cdot (d^2x/dt^2)$ ', donde x es el desplazamiento absoluto del cuerpo superior de masa m, y la fuerza elástica del resorte, representada por el término ' $k \cdot x$ '. Los coeficientes de estas fuerzas son constantes. Además, la fuerza de interacción entre los dos cuerpos se implementa mediante la Ecuación (2.3) (Elmer 1997; van de Vrande, van Campen y col. 1999). En ésta se puede distinguir dos fases o tipos de movimiento: la de stick y la de slip.

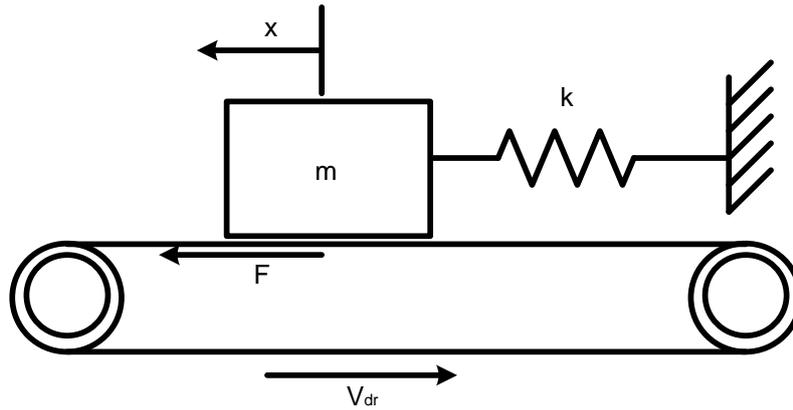


Figura 2.14 El modelo de 1 grado de libertad de un sistema mecánico con fricción seca

La fase de stick se controla mediante la ecuación:

$$\dot{x} = v_{dr} \quad (2.32)$$

mientras que la fase de slip se controla mediante una ecuación mucho más compleja. Así, como resultado del balance de fuerzas en el cuerpo deslizante, se puede escribir la siguiente ecuación:

$$m \cdot \frac{d^2x}{dt^2} + k \cdot x - F_k = 0 \quad (2.33)$$

La forma adimensional de esta ecuación viene dada por:

$$\frac{m}{F_s} \cdot \frac{d^2x}{dt^2} + \frac{k}{F_s} \cdot x - \frac{F_k}{F_s} = 0 \quad (2.34)$$

donde ' $k \cdot x / F_s$ ', es la fuerza elástica adimensional, llamada X, y ' F_k / F_s ' es la fuerza de fricción adimensional, llamada F_f . Para transformar el primer término es necesario definir el tiempo adimensional, $\tau = t\sqrt{k/m}$. Así, la Ecuación (2.34) se puede escribir en la forma

$$\frac{d^2X}{d\tau^2} + X - F_f = 0 \quad (2.35)$$

Dado que se utilizan dos ecuaciones de gobierno, una para la fase de slip y otra para la de stick, es necesario definir la condición que selecciona la fase adecuada. La fase de slip se determina mediante las siguientes condiciones:

- el valor absoluto de la fuerza elástica es mayor que la fuerza de fricción estática,

- la velocidad del bloque es distinta a la velocidad de la cinta,
- la aceleración del bloque es distinta de cero.

Al principio, el cuerpo deslizante se mueve a la misma velocidad que la cinta. Se considera que el origen de referencia es la posición del cuerpo deslizante en el momento inicial. Así, las condiciones iniciales son:

$$x = 0; \frac{dx}{dt} = v_{dr} \quad (2.36)$$

Las Ecuaciones (2.32), (2.35) y (2.36) constituyen el modelo unidimensional no lineal. Todas las variables y parámetros son adimensionales.

2.3.4 ECUACIONES DE BALANCE, CONDICIONES INICIALES Y DE CONTORNO DE FRICCIÓN SECA A ESCALA MACROSCÓPICA: MODELO DE BURRIDGE-KNOPOFF

El modelo de stick-slip anterior permite entender la transición entre las fases de stick y de slip. Sin embargo, los sistemas reales muestran un comportamiento más complejo y necesitan un modelo más sofisticado. Para completar el conocimiento del proceso de stick-slip, se consideran dos bloques conectados por un resorte lineal con una constante elástica, k_1 . Como en el modelo anterior, otros resortes, k_2 , representan la interacción elástica entre cada bloque y la superficie de la cinta durante la fricción seca. El esquema físico del sistema de dos bloques sobre una cinta se muestra en la Figura 2.3.

De la misma forma que para el modelo de un grado de libertad, la fase de stick viene gobernada en cada cuerpo por la siguiente ecuación:

$$\dot{x}_i = v_{dr} \quad (2.37)$$

Para la fase de slip, como resultado del balance de las fuerzas sobre cada uno de los bloques, se tiene las siguientes ecuaciones:

$$\begin{cases} m \cdot \ddot{x}_1 + k_2 \cdot x_1 + k_1 \cdot (x_1 - x_2) = F_k(v_{rel,1}) \\ m \cdot \ddot{x}_2 + k_2 \cdot x_2 + k_1 \cdot (x_2 - x_1) = F_k(v_{rel,2}) \end{cases} \quad (2.38)$$

Las ecuaciones adimensionales del movimiento vienen dadas por:

$$\begin{cases} \frac{m}{F_{s1}} \cdot \ddot{x}_1 + \frac{k_2}{F_{s1}} \cdot x_1 + \frac{k_1}{k_2} \cdot \frac{k_2}{F_{s1}} \cdot (x_1 - x_2) - \frac{F_k(v_{rel,1})}{F_{s1}} = 0 \\ \frac{m}{F_{s1}} \cdot \ddot{x}_2 + \frac{k_2}{F_{s1}} \cdot x_2 + \frac{k_1}{k_2} \cdot \frac{k_2}{F_{s1}} \cdot (x_2 - x_1) - \frac{F_{s2}}{F_{s1}} \cdot \frac{F_k(v_{rel,2})}{F_{s2}} = 0 \end{cases} \quad (2.39)$$

donde ' $k_2 \cdot x_i / F_{s1}$ ' es la fuerza elástica adimensional, llamada X_i ; k_1/k_2 es el parámetro adimensional α ; ' $F_k(v_{rel,i})/F_{si}$ ' es la fuerza de fricción adimensional, llamada F_{fi} , y F_{s2}/F_{s1} es el parámetro adimensional β . El valor nulo de α significa que las masas se desacoplan y el modelo matemático estará formado por dos sistemas independientes de un grado de libertad. Un elevado valor de α implica que las masas pueden considerarse como un mismo bloque.

Para transformar el primer término, es necesario definir el tiempo adimensional, $\tau = t\sqrt{k_2/m}$. Entonces, la Ecuación (2.39) se puede escribir como:

$$\begin{cases} \ddot{X}_1 + X_1 + \alpha \cdot (X_1 - X_2) = F_{f1} \\ \ddot{X}_2 + X_2 + \alpha \cdot (X_2 - X_1) = \beta \cdot F_{f2} \end{cases} \quad (2.40)$$

La fase de slip se determina mediante las mismas condiciones que con el modelo de un grado de libertad. Los desplazamientos iniciales de los bloques 1 y 2 son 0 y 0,0602, respectivamente. Ambos bloques tienen velocidades iniciales coincidentes con la velocidad de la cinta. Durante la fase de stick el movimiento de las masas es uniforme. El lugar geométrico de los puntos donde las fuerzas elásticas son iguales a la fuerza de fricción estática se puede obtener de la Ecuación (2.40):

$$\begin{cases} X_1 + \alpha \cdot (X_1 - X_2) = \pm 1 \\ X_2 + \alpha \cdot (X_2 - X_1) = \pm \beta \end{cases} \quad (2.41)$$

Esta ecuación corresponde a un rombo. Como durante el movimiento de stick el valor de la variable escalar $d=X_2-X_1$ es constante, el lugar geométrico de los puntos (X_1, X_2) es una línea recta con pendiente unidad, una diagonal del romboide.

2.3.5. ECUACIONES DE BALANCE, CONDICIONES INICIALES Y DE CONTORNO DE FRICCIÓN SECA A ESCALA MACROSCÓPICA: UN MECANISMO DE FRENO

En este apartado se analizan las ecuaciones que gobiernan al mecanismo de la Figura 2.5. De la misma forma que para el modelo de dos grados de libertad tratado en el

apartado anterior, la fase de stick del bloque deslizante viene gobernada por la siguiente ecuación

$$\dot{x} = v_{dr} \quad (2.42)$$

Para la fase de slip, como resultado del balance de las fuerzas sobre cada uno de los bloques, se tienen las siguientes ecuaciones:

$$\begin{cases} m \cdot \ddot{x} + k_1 \cdot x + k_2 \cdot (x - y) = F_k(v_{rel}) \\ J \cdot \frac{\ddot{y}}{L} + k_3 \cdot y \cdot L - k_2 \cdot (x - y) \cdot L = 0 \end{cases} \quad (2.43)$$

donde m es la masa del bloque, k_1 , k_2 , k_3 las rigideces de los resortes, J el momento de inercia del codo, m_c la masa del codo y L la longitud de cada una de las ramas del codo, Figura 2.5. Con objeto de comparar nuestros resultados con los de otros autores, en la Ecuación (2.43) se toma $k_2=k_1$. La fuerza de fricción viene definida por las Ecuaciones (2.2) y (2.3).

La Ecuación (2.43) parametrizada se escribe de la forma

$$\begin{cases} \frac{m}{k_1} \cdot \frac{d^2x}{dt^2} + 2x - y = -\mu \cdot \left(-\frac{k_3}{k_1} \cdot y + \frac{m}{k_1} \cdot g + \frac{m_c}{k_1} \cdot g \right) \cdot \frac{2}{\pi} \cdot \frac{\arctan(\varepsilon \cdot v_{rel})}{1 + \delta \cdot |v_{rel}|} \\ \frac{J}{k_1 \cdot L^2} \cdot \frac{d^2y}{dt^2} - x + \frac{k_1 + k_3}{k_1} \cdot y = 0 \end{cases} \quad (2.44)$$

En la Ecuación (2.44), $\varepsilon \cdot v_{rel}$ es una magnitud adimensional, por tanto, ε tiene dimensión s/m, a diferencia de la forma adimensional habitual en la bibliografía (van de Vrande, van Campen y col. 1999).

Para transformar el primer término, es necesario definir el tiempo adimensional, $\tau = t \sqrt{k_1/m}$. Entonces, la Ecuación (2.44) se convierte en

$$\begin{cases} \frac{d^2x}{d\tau^2} + 2x - y = -\mu \cdot \left(-\frac{k_3}{k_1} \cdot y + g' \right) \cdot \frac{2}{\pi} \cdot \frac{\arctan(\varepsilon' \cdot v'_{rel})}{1 + \delta' \cdot |v'_{rel}|} \\ \frac{J}{m \cdot L^2} \cdot \frac{d^2y}{d\tau^2} - x + \frac{k_1 + k_3}{k_1} \cdot y = 0 \end{cases} \quad (2.45)$$

donde ' $J/m \cdot L^2$ ' es el parámetro ξ , y ' k_1+k_3/k_1 ' es el parámetro adimensional κ . Con estos parámetros, la Ecuación (2.45) se transforma en

$$\begin{cases} \frac{d^2x}{d\tau^2} + 2x - y = -\mu \cdot \left((1 - \kappa) \cdot y + g' \right) \cdot \frac{2}{\pi} \cdot \frac{\arctan(\varepsilon' \cdot v'_{rel})}{1 + \delta' \cdot |v'_{rel}|} \\ \xi \cdot \frac{d^2y}{d\tau^2} - x + \kappa \cdot y = 0 \end{cases} \quad (2.46)$$

El desplazamiento horizontal inicial del bloque es 0, al igual que el desplazamiento vertical del extremo del brazo horizontal del codo. La componente horizontal de la velocidad inicial del bloque es la velocidad de la cinta y la componente vertical de la velocidad inicial del extremo del brazo horizontal del codo es 0.

2.4 MÉTODO DE SIMULACIÓN POR REDES (MESIR)

En el texto de González-Fernández (González-Fernández 2001) puede encontrarse una descripción detallada de los fundamentos del método y las primeras aplicaciones en distintos campos de la ciencia e ingeniería: procesos electroquímicos, transporte a través de membranas, transmisión de calor, etc. Con posterioridad a esta fecha, el Método de Simulación por Redes (MESIR), en inglés Network Simulation Method (NSM), se ha aplicado a nuevos problemas desarrollando modelos no recogidos en un texto específico nuevo, por lo que el interesado debe remitirse a las publicaciones científicas específicas o a las tesis doctorales leídas en el grupo de investigación Simulación por Redes de la UPCT, o en los grupos de investigación que trabajan con este método en las Universidades de Granada, Jaén y Murcia, Alarcón (Alarcón 2001), Zueco (Zueco 2003), Castro (Castro 2005), Soto (Soto 2007), del Cerro (del Cerro 2009) y Luna (Luna 2010). En este sentido se deben mencionar las aplicaciones, ya citadas en el Capítulo 1 de esta memoria, en los campos de flujo de fluidos con transporte (de masa o de calor), problema inverso en transmisión de calor, flujos magneto-hidrodinámicos, vibraciones mecánicas, tribología, fricción, transporte en membranas, elasticidad, desarrollo de programas específicos de cálculo numérico, etc.

El método de redes ya había sido aplicado con éxito en varios campos de la ingeniería, tales como transferencia de calor (Alhama, López-Sánchez y col. 1997; González-Fernández, Alhama y col. 1998; Alarcón, Alhama y col. 2002; del Cerro, Gómez-Lopera y col. 2008; Luna 2010), reacciones electroquímicas (Horno, Garcia-Hernández y col. 1993; Moya 2011), transporte a través de membranas (Horno, González-Caballero y col. 1990), problemas inversos (Zueco, Alhama y col. 2005; Zueco, Alhama y col. 2006; Alhama y Zueco 2007; Zueco y Alhama 2007), transporte iónico (Horno, González-Fernández y col. 1995), magneto-hidrodinámica (Beg, Zueco y col. 2009), problemas acoplados de flujo y transporte (Soto, Alhama y col. 2007; Soto, Alhama y col. 2007; Alhama, Soto y col. 2011; Alhama, Soto y col. 2012; Alhama, Soto y col.

2012), y otros (Alcaraz, Alhama y col. 2005; Moreno, Gómez y col. 2007; Benavent, Castro y col. 2010; Marín, Alhama y col. 2012); todos estos trabajos describen procesos de transporte no lineales. Además, recientemente, ha sido aplicado a mecánica de sólidos deformables (Morales, Moreno y col. 2012; Morales, Moreno y col. 2012). En esta memoria se extiende el método a otra aplicación, a saber, la fricción.

Por otro lado, se han registrado diferentes programas que hacen uso del MESIR como herramienta de cálculo numérico: PRODASIM (Gómez-Lopera, Alhama y col. 2005) para el diseño de aletas simples, PROCCA-09 (Alhama y del Cerro 2009) para diseño y optimización de problemas térmicos, FATSIM-A (Alhama, Soto y col. 2010) para simulación de problemas de flujo de fluidos con transporte de soluto, FAHET (Alhama, Soto y col. 2010) para simulación de problemas de flujo de fluidos con transmisión de calor, EPSNET_10 (Morales, Moreno y col. 2010) para simulación de problemas de elasticidad y OXIPSIS_12 (Sánchez, Moreno y col. 2013) para simulación de problemas de corrosión.

No obstante, consideramos obligado presentar una síntesis de los fundamentos del método, particularmente los pasos para el diseño de modelos, y del programa de cálculo numérico con el que se realizan las simulaciones, PSpice (Microsim 1994). En su concepción, el MESIR es una técnica para el estudio y simulación de muchos procesos físicos que pueden definirse mediante un modelo matemático o conjunto completo de ecuaciones de un problema o proceso físico. Partiendo de este modelo, el procedimiento consiste en dos etapas bien diferenciadas: en primer lugar, elaborar un modelo en red o circuito eléctrico equivalente al proceso, y en segundo lugar, simular dicho modelo mediante un programa adecuado de resolución de circuitos eléctricos.

La equivalencia formal entre el modelo en red y el proceso físico reside en que ambos se rigen por las mismas ecuaciones diferenciales en diferencias finitas en el espacio, referidas tanto al volumen elemental o celda como a las condiciones de contorno. El tiempo permanece como variable continua en el diseño del modelo.

La técnica para elaborar el modelo en red consiste en reticular el espacio en elementos de volumen o celdas elementales. Al aplicar las ecuaciones diferenciales a éstas se obtienen un conjunto de ecuaciones en diferencias finitas que constituyen el punto de partida para la obtención del modelo en red correspondiente a las mismas. Una vez

establecida la correspondencia entre variables dependientes del problema y variables eléctricas (desplazamientos y voltajes), los resultados de la simulación se pueden interpretar en términos del proceso que se modela. La asociación de celdas, de acuerdo con la geometría del problema, configura el modelo en red correspondiente a todo el medio finito, más preciso cuanto mayor sea el número de éstas. Las condiciones de contorno e iniciales se incorporan al modelo de manera simple utilizando los componentes eléctricos adecuados.

En los procesos de transporte se establece una correspondencia entre variables flujo por un lado (densidad de corriente eléctrica con flujo de calor, flujo de masa,...) y variables tipo potencial por otro (potencial eléctrico con temperatura, concentración,...), aunque es posible establecer otras analogías. Con carácter general, asociaremos una magnitud derivada de un gradiente a la variable ‘corriente eléctrica’ y su potencial asociado, el escalar al que se aplica el operador, a la variable eléctrica ‘diferencia de potencial’, implementando en el modelo tantos circuitos diferentes como ecuaciones contenga el modelo matemático.

El planteamiento formal que sirve de base para el desarrollo de los problemas es la ‘teoría de redes’ de Peusner (Peusner 1987), en la que se apoya su ‘termodinámica de redes’; dicha teoría, a su vez, se sustenta en la teoría de circuitos a partir de una generalización de sus variables conjugadas, corriente eléctrica y diferencia de potencial. Los modelos en red son para Peusner una representación exacta de las características matemáticas de los procesos que describen. Así, las variables velocidad y desplazamiento, características de los problemas, deben satisfacer las leyes de Kirchhoff y sus relaciones determinarán los elementos de circuito correspondientes. Ahora bien, en cada proceso concreto y una vez elegidas las variables conjugadas, la información de qué elementos de circuito intervienen en el modelo en red y cómo se conectan entre sí, se obtiene del modelo matemático y no de consideraciones de tipo físico acerca del papel que juegan estas variables.

En síntesis, en la teoría de redes, la viabilidad de un modelo en red supone:

- La existencia de una red independiente del tiempo
- La existencia de una magnitud conservativa llamada flujo, asociada a cada rama, que conecta los nudos y obedece las leyes de Kirchhoff para corrientes (LCK)

- La existencia de una magnitud que satisface criterios de unicidad asociada a cada nudo, y que obedece la ley de voltajes de Kirchhoff (LVK)

Las relaciones entre velocidad y desplazamiento, que pueden incluir variaciones temporales de estas variables, definen los elementos concretos del circuito equivalente. La relación causa-efecto entre las variaciones temporales de las variables conjugadas puede ser arbitraria con tal que sea consistente con las dos últimas condiciones mencionadas en el párrafo anterior.

2.4.1 MONOPUERTAS BÁSICAS

La red lleva asociada un conjunto de flujos que obedecen a una ley de balance local y un conjunto de fuerzas que satisfacen la condición de unicidad. Tales requisitos dan cuenta de la topología del proceso y su red asociada. Las propiedades topológicas dependen únicamente de la asignación de conexiones entre los diferentes puntos o de las posibles combinaciones de trayectorias que unen un nudo dado con otros nudos. Son independientes de los valores de las variables y, desde un punto de vista topológico, dos grafos son iguales o isomorfos si las asignaciones de vértices y ramas son las mismas. Las leyes o teoremas de Kirchhoff establecen relaciones entre velocidades y desplazamientos por separado, pero no expresan ningún tipo de relación entre velocidades y desplazamientos entre sí.

Las relaciones entre el par conjugado velocidad-desplazamiento se conocen como ecuaciones constitutivas o fenomenológicas y definen los elementos de circuito que expresan características específicas de cada proceso. Estas relaciones se pueden establecer entre las variables de un par velocidad-desplazamiento, en cuyo caso se habla de monopuerta. Una primera clasificación de éstas está relacionada con lo que en electricidad se conoce como elementos pasivos y activos. Los primeros no generan potencia, bien la disipan, bien tienen la capacidad de almacenarla y/o entregarla a la red. Las fuentes de tensión y corriente son elementos activos, por lo que generan potencia de acuerdo a una ley determinada.

Se consideran primero las monopuertas pasivas. Éstas tienen nombres específicos en función de la relación expresa existente entre las variables LCK y LVK. Éstos son:

- Monopuerta resistiva
- Monopuerta capacitiva

- Monopuerta inercial o inductiva

La monopuerta resistiva es un elemento de circuito asociado a una relación entre las derivadas temporales de las variables flujo y fuerza de una misma rama mediante una función independiente del tiempo que llamaremos resistencia, R . Ésta puede depender del flujo o de la fuerza: $dX(t)/dt = R \cdot dJ(t)/dt$. Por tanto, $R = dX(t)/dJ(t)$. A partir de esta expresión es posible relacionar las variables en forma finita y escribir: $X(t) = F_R(J)$, o bien $J(t) = F_R^{-1}(X)$.

Una monopuerta resistiva es lineal cuando la relación entre las variables $X(t)$ y $J(t)$ lo es, es decir $X(t) = R \cdot J(t)$. Su acción es instantánea, no importa cuál sea su estado anterior, en este sentido carecen de memoria. Considerando su analogía física, representan efectos disipativos, fricciones, efectos viscosos, etc. Desde el punto de vista termodinámico son elementos generadores de entropía.

Las monopuertas resistivas no lineales se definen a través de las funciones que las caracterizan, $J(t) = F_R^{-1}(X)$ o $X(t) = F_R(J)$. En definitiva, constituyen fuentes controladas de corriente o tensión, respectivamente.

La representación simbólica de una monopuerta resistiva se muestra en la Figura 2.15: una resistencia eléctrica de valor R ohmios para el caso lineal o una fuente controlada de corriente o tensión para el caso no lineal.

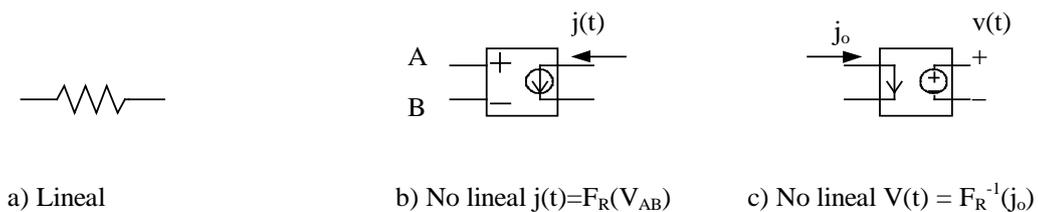


Figura 2.15 Representación simbólica de monopuertas resistivas

La monopuerta capacitiva es un elemento de circuito asociado a una relación entre la variable flujo y la derivada temporal de la variable fuerza, de una misma rama, mediante una función no dependiente del tiempo que designaremos como capacidad, C , $J(t) = C \cdot dX(t)/dt$.

En estas monopuertas se produce algún tipo de almacenamiento, sin pérdidas, y su estado, que no cambia instantáneamente, tiene en cuenta todas las operaciones llevadas

a cabo en el pasado (tiene memoria). La relación constitutiva anterior puede expresarse en términos de la capacidad, $C=dq/dX=dF_C(X)/dX$, que es constante cuando la dependencia $q=F_C(X)$ es lineal, $C=q/X$.

La representación simbólica de la monopuerta capacitiva lineal se muestra en la Figura 2.16: un condensador eléctrico de valor C faradios.



Figura 2.16 Representación simbólica de una monopuerta capacitiva lineal

La monopuerta inercial o inductiva es el elemento de circuito asociado a una relación entre la variable fuerza y la derivada temporal de la variable flujo, de una misma rama, mediante una función no dependiente del tiempo, que designaremos como *inductancia*, L . Así, $X(t) = L dJ(t)/dt$, que equivale a la relación, no dependiente del tiempo, entre las variables flujo y fuerza, $p = F_L(J)$.

Al igual que en el condensador, se produce un almacenamiento de energía sin pérdidas y su estado tiene memoria. Considerando su analogía física, representa un proceso en donde tiene lugar algún efecto de inercia, como la masa en los sistemas mecánicos. La relación constitutiva anterior puede expresarse en términos de la inductancia, $\gamma = dp/dJ = dF_L(J)/dJ$, que es constante cuando la dependencia $p = F_L(J)$ es lineal, $L = p/J$. La representación simbólica de la monopuerta inductiva lineal se muestra en la Figura 2.17: una inductancia eléctrica o bobina de valor L henrios.



Figura 2.17 Representación simbólica de una monopuerta inductiva lineal

Los procesos de almacenamiento y disipación de energía, bajo la hipótesis de continuidad del medio, se originan en todos los puntos del sistema. Los elementos R , C y L se identifican, sin embargo, con regiones pequeñas pero finitas del medio, y sus conexiones con las otras puertas se realizan con enlaces ideales de energía, es decir, con conductores de resistencia nula.

Se consideran ahora las monpuertas activas. En éstas se produce una aportación o extracción de energía al sistema. Cabe distinguir:

- Fuentes constantes
- Fuentes dependientes del tiempo
- Fuentes controladas

Las fuentes constantes son monpuertas definidas de acuerdo con las expresiones $F_J(J) = 0$ y $F_X(X) = 0$, según se trate de fuentes de flujo o de fuerza respectivamente. Tienen asignado un sentido, o signo, que indica la dirección en que fluye la energía. La representación simbólica es la de la Figura 2.18-a y eléctricamente, se corresponden a pilas o generadores de corriente constante.

La relación constitutiva entre las variables, en las fuentes dependientes del tiempo, tiene la misma forma que las fuentes constantes. Además, $X = X(t)$ y $J = J(t)$ según se trate de fuentes de fuerza o de flujo. La Figura 2.18-b muestra ejemplos de representación simbólica.

Las fuentes controladas, Figura 2.18-c, son monpuertas especiales asociadas a relaciones constitutivas entre variables, conjugadas o no, expresadas mediante cualquier función que no contiene explícitamente el tiempo. Se trata de elementos con entradas múltiples y una única salida. Ésta corresponde a un flujo o una fuerza que depende funcionalmente de otros flujos o fuerzas de distintas ramas y nudos del mismo o diferente circuito. Estas fuentes permiten especificar acoplamientos energéticos de distinto tipo. Existen cuatro tipos de fuentes controladas por una sola variable:

- fuentes de tensión controladas por tensión, $X = F_X(X_c)$
- fuentes de tensión controladas por corriente, $X = F_J(J_c)$
- fuentes de corriente controladas por corriente, $J = F_J(J_c)$
- fuentes de corriente controladas por tensión, $J = F_X(X_c)$

siendo F una función arbitraria de la variable de control.

La acción de control puede ser ejercida por más de una variable y las funciones de control pueden ser complejas, Figura 2.18-d. Aunque la monpuerta puede especificarse arbitrariamente, su implementación como elemento de circuito puede no ser posible en tanto que no esté contenida en las librerías del software elegido. La teoría de circuitos

permite, mediante circuitos auxiliares, resolver prácticamente todos los casos de diseño de red eléctrica que se necesiten para cualquier tipo complejo de fuente controlada.

En términos de componentes eléctricos el software elegido en esta memoria para la simulación, PSpice (Microsim 1994), contiene un extenso catálogo de componentes y es capaz de distinguir entre elementos lineales y no lineales. Entre los elementos lineales, dispone de:

- Resistencias
- Condensadores
- Inductancias o bobinas
- Fuentes constantes de tensión y corriente
- Fuentes de tensión y corriente dependientes del tiempo
- Fuentes controladas por tensión y corriente

y entre los elementos no lineales contenidos en el programa y usados en esta memoria cabe citar los siguientes:

- Fuentes no lineales controladas por tensión y corriente
- Interruptores accionados por tensión o corriente

2.4.2 EL MESIR COMO MÉTODO NUMÉRICO

El punto de partida de MESIR es siempre el modelo matemático de un cierto proceso, un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales (EDP) espacio-temporales que lo definen. La discretización de la variable espacial, única manipulación directa que se hace de las ecuaciones, es la base para establecer el modelo en red o red eléctrica equivalente.

El modelo en red es el formato que se da al modelo matemático para que pueda ser utilizado como entrada en PSpice, (Nagel 1975; Nagel 1977; Kielkowski 1994; Vladimirescu 1994).

En definitiva, puesto que la simulación del modelo en red mediante ordenador implica la resolución numérica de sus ecuaciones, el método de simulación por redes es, de hecho, un método numérico. A continuación exponemos las diferencias más notables con las estrategias de otros métodos numéricos.

Cuando en una ecuación en derivadas parciales se hace una doble reticulación, espacial y temporal, se remplazan las derivadas parciales por aproximaciones algebraicas. Esto conduce a un conjunto de ecuaciones algebraicas que aproximan las EDP. Para su solución numérica se utiliza un software matemático adecuado. Este procedimiento es la base de los conocidos métodos numéricos de diferencias finitas y volúmenes finitos, Knabner y Angermann (Knabner y Angermann 2003).

Como se ha comentado, la elaboración del modelo en red pasa por la reticulación espacial, pero no temporal. Se parte, pues, de un sistema de ecuaciones en derivadas parciales cuya reticulación espacial lo convierte en uno de ecuaciones diferenciales ordinarias en el tiempo, que corresponden con las de una celda elemental del circuito. Posteriormente, el propio software realiza la reticulación temporal.

Así, tras la definición de la variable flujo, $j(q,t)=\partial\varphi(q,t)/\partial q$, las EDP toman la forma, $f_i[\varphi, \partial\varphi/\partial t, \partial^2\varphi/\partial t^2, j, \partial j/\partial q, \partial j/\partial t, q, t]=0$. Éstas, con la discretización espacial, se convierten en $F_i[\varphi, d\varphi/dt, d^2\varphi/dt^2, j, dj/dt, t]=0$, que son las ecuaciones del circuito, manteniéndose la conexión entre $j(q,t)$ y $\varphi(q,t)$.

Si $j(q,t)=\partial\varphi(q,t)/\partial q_i$ no es una condición del proceso modelizado, sino una relación física entre variables definidas independientemente, la red puede considerarse como una descripción alternativa del sistema. Si, además, j corresponde a un flujo de transporte de una cierta magnitud, los elementos del circuito y ciertos parámetros del conjunto de la red, como la impedancia, pueden dotarse de un significado físico equivalente al que tienen en el transporte de la carga eléctrica. En estos casos es evidente que MESIR proporciona más información que la estricta respuesta numérica del sistema.

Una vez obtenido el modelo en red se procede a su análisis en PSpice (Microsim 1994). Las dificultades estarán, inicialmente, en el aprendizaje de un lenguaje de programación, que puede ser de texto o gráfico. Sin embargo, se trata de dificultades fáciles de salvar dado que son pocas las reglas de programación que se requieren, pues los modelos están constituidos por muy pocos dispositivos. PSpice ha sido utilizado por otros autores para resolver problemas de otras disciplinas. Baker y Shortt (Baker y Shortt 1990) estudian el comportamiento de componentes integrados para diferentes rangos de temperatura, Bello (Bello 1991) lo aplica a la resolución de problemas

mecánicos, Herbert (Herbert 1992) lo aplica a la resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias y Hamill (Hamill 1993) a problemas estadísticos y relacionados con el caos.

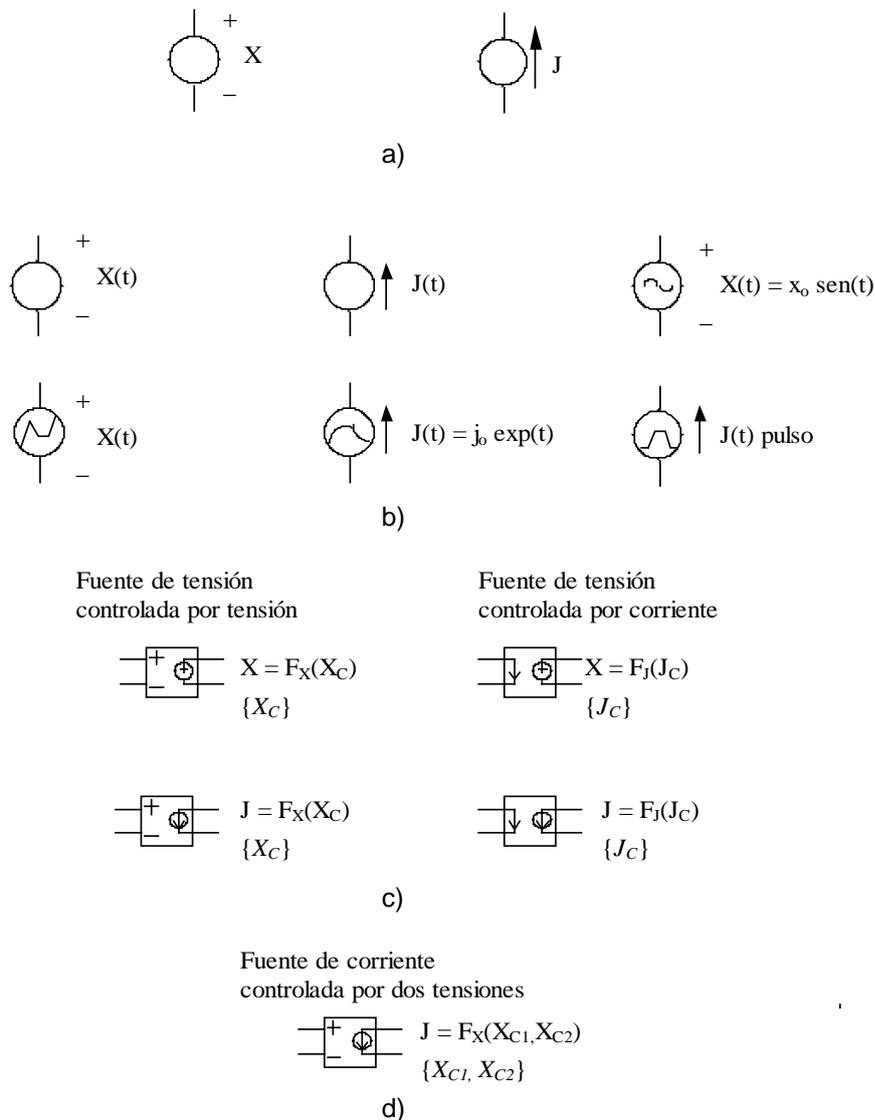


Figura 2.18 Representación simbólica de monopuertas activas: a) fuentes constantes, b) fuentes dependientes del tiempo, c) fuentes controladas por una variable, d) ejemplo de fuente controlada por varias variables

El circuito se presenta al ordenador, en el proceso de simulación, como un conjunto de ecuaciones matemáticas. Éste proporciona, mediante procedimientos de análisis numérico, toda la información solicitada por el investigador para cada tipo de análisis. De esta forma se obtienen datos equivalentes a medidas típicas de laboratorio, con un margen de error despreciable. Más aún, pueden alterarse las condiciones iniciales, de contorno, y las características del medio mediante sencillos cambios en el programa, y

el análisis puede aportar datos sobre el comportamiento del circuito más allá de los límites reproducibles en laboratorio con costes muy asumibles.

La simulación está estructurada en cinco subprogramas principales que interaccionan a través de una estructura de datos almacenada en un área común del programa. Estos subprogramas son: entrada, organización, análisis, salida y utilidades, Figura 2.19.

El subprograma de entrada lee el archivo de entrada, construye una estructura de datos y chequea el circuito. El de organización, una vez que el programa de entrada se ha ejecutado con éxito, construye estructuras adicionales que serán requeridas en el programa de análisis, parte esencial de la simulación. El subprograma de salida genera y organiza, en la memoria central o en discos, los resultados solicitados por el usuario en forma tabular o gráfica. Las utilidades son aspectos secundarios no relacionados directamente con la simulación. Éstas permiten, por ejemplo, almacenar componentes, o partes de modelos, para ser compartidos por otras aplicaciones.

El subprograma de análisis es la parte más importante del programa de simulación. Ejecuta los análisis indicados en el archivo de entrada. La información resultante se almacena en la memoria central o en discos para su posterior procesamiento en los archivos de salida. Mientras que la facilidad de uso del programa reside en los subprogramas de entrada y salida, la eficiencia de la simulación depende del programa de análisis, que contiene algoritmos más complejos y consume la mayor fracción de tiempo de computación.

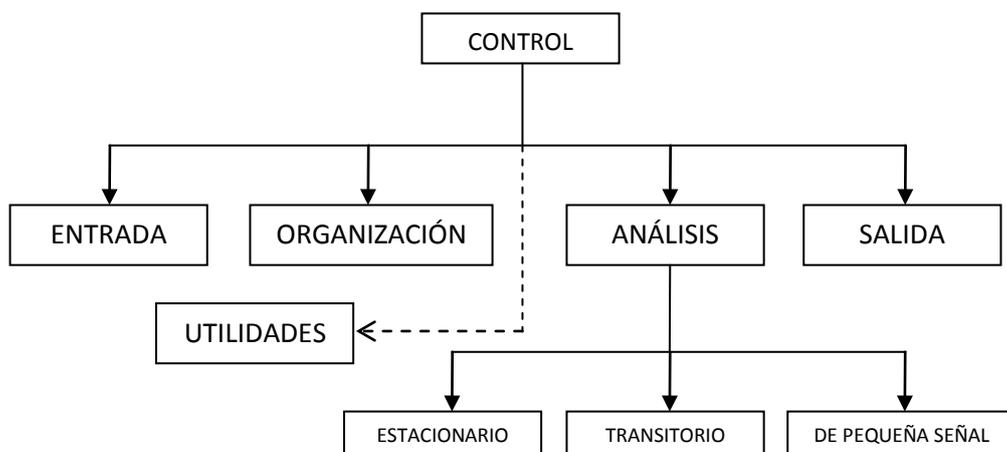


Figura 2.19 Diagrama bloques del programa de simulación de circuitos PSpice

En el proceso de simulación se obtiene la solución numérica de la representación matemática del modelo en red. Ésta contiene: las ecuaciones matemáticas de los diferentes tipos de monpuertas, las ecuaciones correspondientes a las restricciones impuestas por las leyes de Kirchhoff, que han de satisfacerse entre las ramas y nudos del circuito, y la información particular sobre la interconexión de los diferentes componentes eléctricos de cada modelo. Toda esta información compone un extenso sistema de ecuaciones algebraico-diferenciales del tipo $F(\varphi, j, d\varphi/dt, dj/dt, t) = 0$, donde $\varphi = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n)$ y $j = (j_1, j_2, \dots, j_m)$ son vectores formados por las variables dependientes del circuito, corrientes y tensiones, y F , en general, es un operador no lineal.

El conjunto de tareas que componen el proceso de simulación puede ser agrupado en los siguientes tópicos o algoritmos de computación: formulación de las ecuaciones, solución de ecuaciones lineales, solución de ecuaciones no lineales e integración numérica.

PSpice es miembro de la familia de programas de simulación de circuitos SPICE2, (Nagel 1975). Mucho más potente y rápido que sus predecesores, fue desarrollado en la Universidad de California en los años setenta y utiliza algoritmos numéricos más refinados con formatos de entrada-salida idénticos. El uso extendido de PSpice ilustra su capacidad para el tratamiento de una extensa variedad de problemas en simulación de circuitos, obteniendo la respuesta en régimen estacionario, la respuesta en régimen transitorio, la transformada de Fourier, y análisis de pequeña señal en corriente alterna.

Los algoritmos utilizados en PSpice, que se documentan en la tesis de Nagel y que han sido perfeccionados en sucesivas ediciones, son el resultado de implementaciones, modificaciones y comparaciones cuidadosas de los métodos numéricos existentes en el contexto especial de la simulación de circuitos.

De entrada, la sintaxis no requiere disposiciones especialmente ordenadas de datos. Su estilo puede catalogarse más bien como libre, y dispone de una razonable fuente de datos, que se adjudican por omisión a los componentes cuando éstos no se especifican en detalle. También realiza un buen número de chequeos para asegurar que el circuito ha sido introducido correctamente y el resto de las sentencias de programa están bien escritas, advirtiendo al programador de posibles errores mediante mensajes previos a la

ejecución. En definitiva, un usuario poco experimentado necesita especificar un número mínimo de parámetros y controles de simulación para extraer unos resultados de simulación aceptables.

Finalmente, el programa se estructura como un listado que contiene todos los componentes eléctricos del circuito, con resistencias, condensadores, fuentes, interruptores, etc. Éstos se introducen uno por uno, indicando el nombre, valor, nudos de conexión y otros parámetros característicos. También existe la posibilidad de organizar el programa mediante subcircuitos con un considerable ahorro de tiempo en el diseño del modelo.

La necesidad de realizar numerosas simulaciones de los modelos objeto de esta tesis nos obligó a elaborar rutinas en MATLAB para automatizar la generación de modelos en red cuya aplicación requiere la instalación de los siguientes componentes:

- MATLAB 2009, de MathWorks Inc.
- PSpice Release 6.0., 1994, de Microsim Corporation

La instalación completa de MATLAB permite acceder directamente a los archivos de datos de simulación y manipularlos con toda su potencia gráfica y numérica.

Para acceder al entorno PSpice y editar el archivo de texto del modelo, con el explorador de archivos de Windows, se accede a la carpeta TEMPORAL 'temp'. Allí se encuentran los archivos de modelos, con extensión '.CIR' y los archivos de salida de datos, con extensión '.OUT'. Cada problema genera dos archivos con los datos del modelo, uno con extensión '.CIR', con el nombre del modelo, y otro denominado 'temporal.cir'. La simulación del modelo siempre se realiza sobre el 'temporal.cir' por lo que los resultados de la simulación siempre se graban en el archivo 'temporal.out'. De esta manera siempre quedan guardados los archivos de datos de los modelos originales. Todos los archivos '.CIR' se pueden manipular directamente en el entorno PSpice, lo que permite generar nuevos archivos 'temporal.out' de versiones modificadas del modelo, en el entorno PSpice.

El uso del entorno gráfico PSpice requiere añadir al archivo de texto del modelo, de extensión '.CIR', una nueva línea '.PROBE' para guardar los datos de la simulación en un nuevo archivo de extensión '.DAT'.

Por último, mencionar que PSpice contiene un potente entorno gráfico que permite representar tensiones eléctricas, corrientes y cualquier tipo de función u operación entre estas magnitudes durante el proceso de simulación.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Al-Bender, F., V. Lampaert, y col. (2004). "A novel generic model at asperity level for dry friction force dynamics." *Tribology Letters* 16(1-2): 81-93.
- Alarcón, M. (2001). Transporte de calor en sistemas con aletas. Coeficientes de rendimiento y red de transferencia. Física Aplicada. Universidad Politécnica de Cartagena.
- Alarcón, M., F. Alhama, y col. (2002). "Transient conduction in a fin-wall assembly with harmonic excitation -network thermal admittance." *Heat Transfer Engineering* 23(2): 31-43.
- Alcaraz, D., F. Alhama, y col. (2005). "Influence of fiber distribution in the thermal continuity of composites with titanium and magnesium alloys matrix (in spanish)." *Revista Española de Metalurgia Extr.*: 293-303.
- Alhama, F. y F. Del Cerro (2009). PROCCA. Programa de conducción de calor. N. 08/2005/544. Universidad Politécnica de Cartagena.
- Alhama, F., J. F. López-Sánchez, y col. (1997). "Heat conduction through a multilayered wall with variable boundary conditions." *Energy* 22(8): 797-803.
- Alhama, F., F. Marín, y col. (2011). "An efficient and reliable model to simulate microscopic mechanical friction in the Frenkel-Kontorova-Tomlinson model." *Computer Physics Communications* 182(11): 2314-2325.
- Alhama, F. y J. Zueco (2007). "Application of a lumped model to solids with linearly temperature-dependent thermal conductivity." *Applied Mathematical Modelling* 31(2): 302-310.
- Alhama, I., A. Soto, y col. (2011). "FATSIM-A: An educational tool based on electrical analogy and the code pspice to simulate fluid flow and solute transport processes." *Computer Applications in Engineering Education* 16: 72-84.
- Alhama, I., A. Soto, y col. (2012). "Simulation of flow and solute coupled 2-D problems with velocity-dependent dispersion coefficient based on the network method." *Hydrological Processes* 26(24): 3725-3735.
- Alhama, I., A. Soto, y col. (2010). FAHET. Flow and heat transport simulator. N. 08/2011/419. Cartagena, Universidad Politécnica de Cartagena.
- Alhama, I., A. Soto, y col. (2010). FATSIM-A. Fluid flow and solute transport simulator N. D. Mu-1093-2010). Universidad Politécnica de Cartagena.

- Alhama, I., A. Soto, y col. (2012). "Mathematical characterization of scenarios of fluid flow and solute transport in porous media by discriminated nondimensionalization." *International Journal of Engineering Science* 50(1): 1-9.
- Andrianov, I. V., J. Awrejcewicz, y col. (2005). "Iterative processes and Padé approximants." *Facta Universitatis, Series: Mechanics, Automatic Control and Robotics* 4(17): 279-285.
- Archard, J. F. (1957). "Elastic deformation and the laws of friction." *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 243(1233): 190-205.
- Armstrong-Hélouvry, B. (1991). *Control of machines with friction*. Kluwer Academic Press, Hingham, USA.
- Armstrong-Hélouvry, B., P. Dupont, y col. (1994). "A survey of models, analysis tools and compensation methods for the control of machines with friction" *Automatica* 30(7): 1083-1138.
- Atkins, P. W. y J. De Paula (2006). *Physical chemistry for the life sciences*. Oxford University Press, Oxford, Reino Unido.
- Aubry, S. (1979). *Solitons and condensed matter physics*. Bishop, A.R. y Schneider, T. (Eds.). Springer-Verlag, Berlín, Alemania: 264.
- Awrejcewicz, J. Y P. Olejnik (2003) (1). "Improvement of the Lyapunov exponents computations by extension of time series." 11th World Congress In Mechanism And Machine Science, Tianjin, China.
- Awrejcewicz, J. Y P. Olejnik (2003) (2). "Numerical and experimental investigations of simple non-linear system modelling a girling duo-servo brake mechanism." DETC 2003 Chicago, ASME.
- Awrejcewicz, J. Y P. Olejnik (2003) (3). "Stick-slip dynamics of a two-degree-of-freedom system." *International Journal of Bifurcation and Chaos* 13(4): 843-861.
- Awrejcewicz, J. Y P. Olejnik (2005). "Analysis of dynamic systems with various friction laws." *Applied Mechanics Reviews* 58(6): 389-411.
- Awrejcewicz, J. Y P. Olejnik (2007). "Occurrence of stick-slip phenomenon." *Journal of Theoretical and Applied Mechanics* 45(1): 33-40.
- Babakov, I. M. (1968). *Theory of vibrations*. Nauka, Moscú.
- Baker, W. E. y D. J. Shortt (1990). *Integrated electrical/thermal component modeling*. Washington, USA.

- Beg, O. A., J. Zueco, y col. (2009). "Transient nonlinear optically-thick radiative-convective double-diffusive boundary layers in a darcian porous medium adjacent to an impulsively started surface: network simulation solutions." *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* 14(11): 3856-3866.
- Bell, R. y M. Burdekin (1970). "A study of the stick-slip motion of machine tool feed drives." *Proc. Inst. Mech. Sngrs.* 184(1): 543-557.
- Bello, V. G. (1991). Electrical models of mechanicals units widen simulator's scope.
- Benavent, A., E. Castro, y col. (2010). "Evaluation of low-cycle fatigue damage in RC exterior beam-column subassemblages by acoustic emission." *Construction and Building Materials* 24: 1830-1842.
- Bliman, P. A. y M. Sorine (1995). Easy-to-use realistic dry friction models for automatic control. 3rd. European Control Conference, Roma, Italia.
- Bo, L. C. y D. Pavelescu (1982). "The friction-speed relation and its influence on the critical velocity of stick-slip motion." *Wear* 82(3): 277-289.
- Bogacz, R. y B. Ryzek (2003). "Frictional phenomena in dynamical system with two-frequency excitation." *Meccanica* 38(6): 711-717.
- Burridge, R. y L. Knopoff (1967). "Model and theoretical seismicity." *Bulletin of The Seismological Society of America* 57(3): 341-&.
- Carlson, J. M. y J. S. Langer (1989). "Properties of earthquakes generated by fault dynamics." *Physical Review Letters* 62(22): 2632-2635.
- Cartwright, J. H. E., E. Hernández-García, y col. (1997). "Burridge-Knopoff models as elastic excitable media." *Physical Review Letters* 79(3): 527-530.
- Castro, E. (2005). Simulación de ondas elásticas en vigas mediante el método de redes y detección de daño mediante la transformada wavelet. Física, Universidad de Jaén.
- Coulomb, C. A. (1785). *Mémoires de Mathématique et de Physique de l'Academie des Sciences* 10.
- Courtney-Pratt, J. S. y E. Eisner (1956). "The effect of a tangential force on the contact of metallic bodies." *Proc. Royal Society A* 238: 529-550.
- Choi, H. S. y J. Y. K. Lou (1991). "Nonlinear behavior and chaotic motions of an sdf system with piecewise-non-linear stiffness." *International Journal of Non-Linear Mechanics* 26(5): 461-473.
- Dahl, P. L. (1968). A Solid Friction Model. Tor-0158(3107-18)-1. Aerospace Corp., El Segundo, California, USA.

- de Wit, C. C., H. Olsson, y col. (1995). "A new model for control of systems with friction." *IEEE Transactions on Automatic Control* 40(3): 419-425.
- del Cerro, F. (2009). Desarrollo de un programa de conducción de calor, usando analogía eléctrica, mediante el lenguaje C# y el módulo de cálculo Pspice. Aplicaciones lineales y no lineales en diferentes geometrías. Universidad de Murcia.
- del Cerro, F., S. A. Gómez-Lopera, y col. (2008). "A powerful and versatile educational software to simulate transient heat transfer processes in simple fins." *Computer Applications in Engineering Education* 16(1): 72-82.
- Den Hartog, J. P. (1931). "Forced vibrations with combined Coulomb and viscous friction." *Transactions of the ASME APM* 53(9): 107-115.
- Elmer, F. J. (1997). "Nonlinear dynamics of dry friction." *Journal of Physics A-Mathematical and General* 30(17): 6057-6063.
- Feeny, B. y F. C. Moon (1994). "Chaos in a forced dry-friction oscillator -experiments and numerical modeling." *Journal of Sound and Vibration* 170(3): 303-323.
- Fling, R. T. y R. E. Fenton (1981). "A describing-function approach to antiskid design." *IEEE Transactions on Vehicular Technology* 30(3): 134-144.
- Frenkel, Y. I. y T. Kontorova (1938). *Zh. Eksper. Teoret. Fiz.* 8.
- Fu, W. P., Z. D. Fang, y col. (2001). "Periodic solutions and harmonic analysis of an anti-lock brake system with piecewise-nonlinearity." *Journal of Sound and Vibration* 246(3): 543-550.
- Galvanetto, U. (1997). "Bifurcations and chaos in a four-dimensional mechanical system with dry friction." *Journal of Sound and Vibration* 204(4): 690-695.
- Galvanetto, U. (2001). "Some discontinuous bifurcations in a two-block stick-slip system." *Journal of Sound and Vibration* 248(4): 653-669.
- Galvanetto, U. (2002). "Some remarks on the two-block symmetric Burridge-Knopoff model." *Physics Letters A* 293(5-6): 251-259.
- Galvanetto, U. y S. R. Bishop (1995). "Characterization of the dynamics of a 4-dimensional stick-slip system by a scalar variable." *Chaos Solitons & Fractals* 5(11): 2171-2179.
- Galvanetto, U. y S. R. Bishop (1998). "Computational techniques for nonlinear dynamics in multiple friction oscillators." *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 163(1-4): 373-382.

- Galvanetto, U., S. R. Bishop, y col. (1995). "Mechanical stick-slip vibrations." *International Journal of Bifurcation and Chaos* 5(3): 637-651.
- Girling (2013). "<http://www.girlingauto.com>."
- Gómez-Lopera, S., F. Alhama, y col. (2005). PRODASIM. Programa de diseño de aletas simples. N. 08/2005/544, Universidad Politécnica de Cartagena.
- González-Fernández, C. F. (2001). Heat transfer and the network simulation method. J. Horno (Ed.). *Research Signpost, Trivandrum, India*: p. 30.
- González-Fernández, C. F., F. Alhama, y col. (1998). "Application of the network method to heat conduction processes with polynomial and potential-exponentially varying thermal properties." *Numerical Heat Transfer Part A-Applications* 33(5): 549-559.
- Greenwood, J. A. (1992). Contact of rough surfaces. *Fundamentals of friction: macroscopic and microscopic processes*. Singer, I. y Pollock, H. (Eds.). Kluwer, Dordrecht, Holanda: p. 37.
- Greenwood, J. A. y J. B. P. Williamson (1966). "Contact of nominally flat surfaces." *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 295(1442): 300-319.
- Haessig, D. A. y B. Friedland (1991). "On the modeling and simulation of friction." *Journal of Dynamic Systems Measurement and Control-Transactions of the ASME* 113(3): 354-362.
- Hamill, D. C. (1993). "Learning about chaotic circuits with Spice." *IEEE Transactions on Education* 36(1): 28-35.
- Harnoy, A., B. Friedland, y col. (1994). "Modeling and simulation of elastic and friction forces in lubricated bearings for precise motion control." *Wear* 172(2): 155-165.
- Herbert, D. B. (1992). "Simulation and modeling." *IEEE Circuits and Devices Magazine* 8(1): 11-14.
- Hess, D. P. y A. Soom (1990). "Friction at a lubricated line contact operating at oscillating sliding velocities." *Journal of Tribology-Transactions of the ASME* 112(1): 147-152.
- Hinrichs, N., M. Oestreich, y col. (1997). "Dynamics of oscillators with impact and friction." *Chaos Solitons & Fractals* 8(4): 535-558.
- Hinrichs, N., M. Oestreich, y col. (1998). "On the modelling of friction oscillators." *Journal of Sound and Vibration* 216(3): 435-459.

- Hölscher, H., W. Allers, y col. (2000). "Interpretation of "true atomic resolution" images of graphite (0001) in noncontact atomic force microscopy." *Physical Review B* 62(11): 6967-6970.
- Hölscher, H., W. Allers, y col. (2001). "Simulation of NC-AFM images of xenon(111)." *Applied Physics A-Materials Science & Processing* 72: S35-S38.
- Hölscher, H., U. D. Schwarz, y col. (1996). "Simulation of a scanned tip on a NaF(001) surface in friction force microscopy." *Europhysics Letters* 36(1): 19-24.
- Hölscher, H., U. D. Schwarz, y col. (1997). "Modelling of the scan process in lateral force microscopy." *Surface Science* 375(2-3): 395-402.
- Hölscher, H., U. D. Schwarz, y col. (1998). "Consequences of the stick-slip movement for the scanning force microscopy imaging of graphite." *Physical Review B* 57(4): 2477-2481.
- Horno, J., M. T. Garcia-Hernández, y col. (1993). "Digital-simulation of electrochemical processes by the network approach." *Journal of Electroanalytical Chemistry* 352(1-2): 83-97.
- Horno, J., F. González-Caballero, y col. (1990). "The effect of previous convective flux on the nonstationary diffusion through membranes - network simulation." *Journal of Membrane Science* 48(1): 67-77.
- Horno, J., C. F. González-Fernández, y col. (1995). "The Network Method for solutions of oscillating reaction-diffusion systems." *Journal of Computational Physics* 118(2): 310-319.
- Hu, Y. Z. y K. Tonder (1992). "Simulation of 3-D random rough-surface by 2-D digital-filter and Fourier-analysis." *International Journal of Machine Tools & Manufacture* 32(1-2): 83-90.
- Hunt, J. B., I. Torbe, y col. (1965). "The phase-plane analysis of sliding motion." *Wear* 8(6): 455-465.
- Johannes, V. I., M. A. Green, y col. (1973). "Role of rate of application of tangential force in determining static friction coefficient." *Wear* 24(3): 381-385.
- Kielkowski, R. (1994). *Inside Spice*. McGraw-Hill, New York, USA.
- Knabner, P. y L. Angermann (2003). *Numerical methods for elliptic and parabolic partial differential equations*, Springer.
- Liang, J. W. y B. F. Feeny (1998). "A comparison between direct and indirect friction measurements in a forced oscillator." *Journal of Applied Mechanics-Transactions of the ASME* 65(3): 783-786.

- Luna, J. P. (2010). Caracterización, optimización y diseño de algunos tipos de aletas a través del concepto de admitancia térmica inversa relativa. Física Aplicada. Universidad Politécnica de Cartagena.
- Marín, F., F. Alhama, y col. (2012). "Modelling of stick-slip behaviour with different hypotheses on friction forces." *International Journal of Engineering Science* 60: 13-24.
- McMillan, A. J. (1997). "A non-linear friction model for self-excited vibrations." *Journal Of Sound And Vibration* 205(3): 323-335.
- Microsim (1994). Pspice V 6.0. Irvine, California, USA.
- Mihailidis, A., V. Bakolas, y col. (2001). "Subsurface stress field of a dry line contact." *Wear* 249(7): 546-556.
- Morales, J. L., J. A. Moreno, y col. (2010). EPSNET_10. Elasticity problems simulation network. N. 08/2011/418. Universidad Politécnica de Cartagena.
- Morales, J. L., J. A. Moreno, y col. (2012). "Application of the network method to simulate elastostatic problems defined by potential functions. Applications to axisymmetrical hollow bodies." *International Journal of Computer Mathematics* 89(13-14): 1781-1793.
- Morales, J. L., J. A. Moreno, y col. (2012). "New additional conditions for the numerical uniqueness of the boussinesq and timpe solutions of elasticity problems." *International Journal of Computer Mathematics* 89(13-14): 1794-1807.
- Moreno, J. A., F. C. Gómez, y col. (2007). "Solution of temperature fields in hydrodynamics bearings by the numerical network method." *Tribology International* 40(1): 139-145.
- Moya, A. A. (2011). "Influence of DC electric current on the electrochemical impedance of ion-exchange membrane systems." *Electrochimica Acta* 56(8): 3015-3022.
- Myshkin, N. K., A. Y. Grigoriev, y col. (2003). "Surface roughness and texture analysis in microscale." *Wear* 254(10): 1001-1009.
- Nagel, L. W. (1975). Spice2: A computer program to simulate semiconductor circuits. Electronic Research Laboratory. Universidad de California -Berkeley-, USA.
- Nagel, L. W. (1977). Spice (Simulation program with integrated circuit emphasis). Universidad de California -Berkeley-, USA.
- Oestreich, M. (1998). Untersuchung von schwingern mit nichtglatten kennlinien (Fortschritt.-Berichte VDI). VDI-Verlag, Düsseldorf, Alemania.

- Oestreich, M., N. Hinrichs, y col. (1996). "Bifurcation and stability analysis for a non-smooth friction oscillator." *Archive of Applied Mechanics* 66(5): 301-314.
- Olsson, H., K. J. Astrom, y col. (1998). "Friction models and friction compensation." *European Journal of Control* 4(3): 176-195.
- Patir, N. (1978). "Numerical procedure for random generation of rough surfaces." *Wear* 47(2): 263-277.
- Perko, L. (1991). *Differential equations and dynamical systems*. Springer-Verlag, New York, USA.
- Peusner, L. (1987). *The principles of network thermodynamics: theory and biophysical applications*. Entropy, Lincoln, USA.
- Popp, K. y P. Stelter (1990). *Nonlinear oscillations of structures induced by dry friction*. *Nonlinear Dynamics in Engineering Systems* W. S. (Ed.). Springer, Berlín, Alemania: p. 233.
- Powell, J. A. y M. Wiercigroch (1992). "Influence of non-reversible Coulomb characteristics on the response of a harmonically excited linear oscillator." *Machine Vibration* 1(2): 94-104.
- Rabinowicz, E. (1951). "The nature of the static and kinetic coefficients of friction." *Journal of Applied Physics* 22(11): 1373-1379.
- Ramberg, W. y W. R. Osgood (1943). *Description of stress-strain curves by three parameters*. T. N. 902. National Advisory Committee For Aeronautics, Washington, USA.
- Sánchez, J. F., J. A. Moreno, y col. (2013). OXIPSIS_12. N. Mu-751-2013. Universidad Politécnica De Cartagena.
- Sasaki, N., K. Kobayashi, y col. (1996). "Atomic-scale friction image of graphite in atomic-force microscopy." *Physical Review B* 54(3): 2138-2149.
- Sayles, R. S. y T. R. Thomas (1978). "Surface-topography as a nonstationary random process." *Nature* 271(5644): 431-434.
- Schwarz, U. D. y H. Hölscher (2001). *Atomic scale friction studies using scanning force microscopy*. *Modern Tribology Handbook*. B. Bhushan (Ed.). CRC Press, Boca Raton, Florida, USA: p. 593.
- Shaw, S. W. (1986). "On the dynamic-response of a system with dry friction." *Journal of Sound and Vibration* 108(2): 305-325.

- Soto, A. (2007). Simulación numérica de procesos de intrusión salina en acuíferos mediante el método de simulación por redes. Física Aplicada. Universidad Politécnica de Cartagena.
- Soto, A., F. Alhama, y col. (2007). "Density-Driven flow and solute transport problems. A 2-D numerical model based on the network simulation method." *Computer Physics Communications* 177(9): 720-728.
- Soto, A., F. Alhama, y col. (2007). "An efficient model for solving density driven groundwater flow problems based on the network simulation method." *Journal Of Hydrology* 339(1-2): 39-53.
- Stefanski, A., J. Wojewoda, y col. (2003). "Chaos caused by non-reversible dry friction." *Chaos Solitons & Fractals* 16(5): 661-664.
- Stribeck, R. (1902) (1). "The basic properties of plain -and roller bearing." *Zeitschrift des Vereines Deutscher Ingenieure* 46: 1432-1438.
- Stribeck, R. (1902) (2). "Fundamental characteristics of the friction bearing and the roller bearing." *Zeitschrift des Vereines Deutscher Ingenieure* 46: 1341-1348.
- Thomas, T. R. (1999). *Rough Surfaces*, Imperial College Press, Londres, Reino Unido.
- Tolstoi, D. M. (1967). "Significance of normal degree of freedom and natural normal vibrations in contact friction." *Wear* 10(3): 199-&.
- Tomlinson, G. A. (1929). "A molecular theory of friction." *Philosophical Magazine* 7(46): 905-939.
- Tustin, A. (1947). "The effects of backlash and of speed- dependent friction on the stability of closed-cycle control systems." *Journal of the Institution of Electrical Engineers* 94: 143-151.
- van de Vrande, B. L., D. H. van Campen, Y col. (1999). "An approximate analysis of dry-friction-induced stick-slip vibrations by a smoothing procedure." *Nonlinear Dynamics* 19(2): 157-169.
- Vladimirescu, A. (1994). *The Spice Book*. John Wiley And Sons, New York, USA.
- Weiss, M. y F. J. Elmer (1996). "Dry friction in the Frenkel-Kontorova-Tomlinson model: static properties." *Physical Review B* 53(11): 7539-7549.
- Weiss, M. y F. J. Elmer (1997). "Dry friction in the Frenkel-Kontorova-Tomlinson model: dynamical properties." *Zeitschrift fur Physik B-Condensed Matter* 104(1): 55-69.

- Wiercigroch, M. (1993). "Comments on the study of a harmonically excited linear-oscillator with a coulomb damper." *Journal of Sound and Vibration* 167(3): 560-563.
- Wiercigroch, M. (1994). "A note on the switch function for the stick-slip phenomenon." *Journal of Sound and Vibration* 175(5): 700-704.
- Wiercigroch, M., V. W. T. Sin, y col. (1999). "Non-reversible dry friction oscillator: design and measurements." *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers Part C-Journal of Mechanical Engineering Science* 213(5): 527-534.
- Wojewoda, J., R. Barron, y col. (1992). "Chaotic behavior of friction force." *International Journal of Bifurcation and Chaos* 2(1): 205-209.
- Wojewoda, J., A. Stefanski, y col. (2008). "Hysteretic effects of dry friction: modelling and experimental studies." *Philosophical Transactions of the Royal Society A-Mathematical Physical and Engineering Sciences* 366(1866): 747-765.
- Yeh, E. C. y G. C. Day (1992). "Parametric study of antiskid brake systems using Poincaré map concept." *International Journal of Vehicle Design* 13: 210-232.
- Zueco, J. (2003). *Solución de problemas inversos en conducción de calor mediante el método de simulación por redes. Física Aplicada. Universidad Politécnica de Cartagena.*
- Zueco, J. y F. Alhama (2007). "Simultaneous inverse determination of temperature-dependent thermophysical properties in fluids using the network simulation method." *International Journal of Heat and Mass Transfer* 50(15-16): 3234-3243.
- Zueco, J., F. Alhama, y col. (2005). "Inverse problem of estimating time-dependent heat transfer coefficient with the network simulation method." *Communications in Numerical Methods in Engineering* 21(1): 39-48.
- Zueco, J., F. Alhama, y col. (2006). "Inverse determination of heat generation sources in two-dimensional homogeneous solids: application to orthotropic medium." *International Communications in Heat and Mass Transfer* 33(1): 49-55.

CAPÍTULO 3

ANÁLISIS DE ESTABILIDAD DE SISTEMAS DINÁMICOS

3.1 INTRODUCCIÓN

La alta sensibilidad de los sistemas estudiados en esta tesis a algunos valores de sus parámetros, justifica el análisis detallado de los procedimientos de cálculo.

En este capítulo se va a revisar la clasificación de los sistemas dinámicos desde el punto de vista de la fricción, identificando aquellas herramientas de representación que permitan un análisis eficiente de los resultados obtenidos. Los exponentes de Lyapunov y sus dificultades de aplicación práctica merecen una mención especial.

La ventaja de PSpice frente a otras alternativas existentes es una cuestión recurrente en los foros donde se han presentado los resultados de este método de trabajo. En el Anexo B se analizan los algoritmos numéricos que permiten entender la idoneidad de su aplicación en fenómenos tan inestables como los procesos de fricción.

3.2 SISTEMAS DINÁMICOS

Tras analizar la fricción y formular los sistemas de ecuaciones que representan a los sistemas dinámicos, se pueden obtener los modelos.

Un criterio de clasificación de los sistemas dinámicos puede ser la forma de la respuesta temporal. Así, en los sistemas aleatorios, el comportamiento futuro es independiente del estado inicial y sólo puede caracterizarse en términos de probabilidad, en cambio, los sistemas periódicos vuelven regularmente a la misma posición. Aparentemente, los sistemas caóticos se encuentran en una categoría intermedia, aunque son tan dependientes de la situación inicial como los sistemas periódicos (Nicholls y Tagarev 1994).

Los sistemas caóticos se caracterizan por el hecho de que su comportamiento futuro es extremadamente sensible a las condiciones iniciales, difíciles de reproducir. Esto

implica la imposibilidad de predecir su evolución ante la imposibilidad de la fijación de las condiciones iniciales.

La Figura 3.1 muestra la ecuación no lineal $x_{i+1}=4 \cdot x_i - 4 \cdot x_i^2$, para un valor inicial de la variable independiente, $x_1=0,7$ y $x_1=0,70001$ (Nicholls y Tagarev 1994). Al principio ambos resultados no se pueden distinguir, pero posteriormente las diferencias se van marcando hasta llegar a un comportamiento totalmente distinto. Las predicciones a corto plazo son posibles dado que el efecto de la pequeña variación de las condiciones iniciales no ha tenido tiempo de crecer. La teoría del caos proporciona patrones de comportamiento del sistema, cuando esto es posible, o define las condiciones para las que el comportamiento es impredecible.

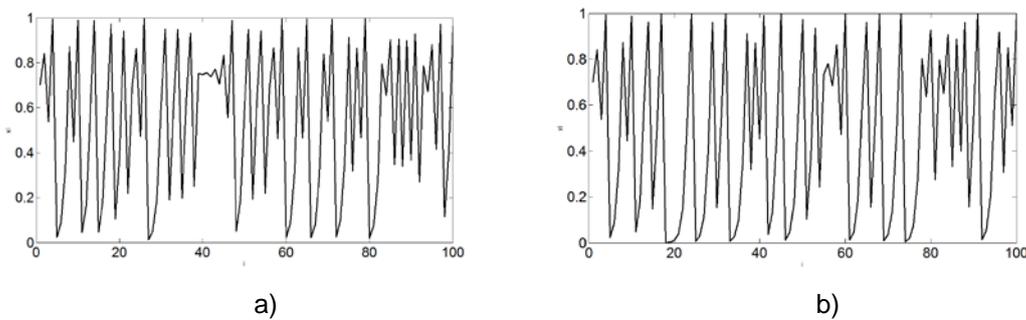


Figura 3.1 Divergencia de un sistema caótico para distintas condiciones iniciales:
a) $x_1=0,7$ y b) $x_1=0,70001$

Una primera clasificación de estos sistemas está asociada a la dependencia funcional. Así, los sistemas dinámicos, se clasifican en: autónomos y no autónomos (Parker y Chua 1987). Un sistema autónomo de orden n está definido por la ecuación de estado:

$$\dot{x} = f(x); x(t_0) = x_0 \quad (3.1)$$

Dado que dx/dt no depende del tiempo, se puede fijar $t_0=0$.

Un sistema dinámico no autónomo de orden n está definido por la ecuación de estado:

$$\dot{x} = f(x, t); x(t_0) = x_0 \quad (3.2)$$

Otro concepto interesante es el de trayectoria, $\phi_t(x_0)$, definida como la solución de la Ecuación (3.1) para un valor concreto de x_0 .

El comportamiento de un sistema puede conducir a soluciones de varios tipos: puntos de equilibrio, soluciones periódicas, soluciones cuasi-periódicas y caos. Esta clasificación está relacionada con la representación de las soluciones en el espacio de fases (Anexo A). Así, se puede resaltar el paralelismo entre las características de un sistema autónomo y las propiedades de un campo vectorial (Banerjee 2005):

- el vector en cualquier punto del espacio de estado es único
- las líneas de campo no pueden intersectarse, excepto en los puntos donde la magnitud del vector dx/dt se anula, puntos de equilibrio
- el término de la derecha de cada ecuación del sistema de ecuaciones de estado es una función suave (diferenciable en todo el dominio)

Si se realiza una aproximación lineal del sistema de ecuaciones en los puntos de equilibrio, los autovectores obtenidos (Anexo A) definen el comienzo de las líneas de campo y, por tanto, la evolución de estado.

Cuando se estudian los sistemas de ecuaciones de estado fuera del punto de equilibrio, las aproximaciones lineales dejan de ser válidas conforme nos alejamos de dicho punto. Como consecuencia, las líneas que arrancan con un autovector en el entorno de un punto de equilibrio no permanecerán rectas, Figura 3.2. Estas líneas curvas se llaman variedades invariantes, con la propiedad de que si una condición inicial está situada en la variedad, los valores futuros de las variables de estado se mantienen en la variedad. Los autovectores estable e inestable en el punto de equilibrio son tangentes a estas variedades en ese punto (Banerjee 2005).

Hay una diferencia fundamental entre el comportamiento periódico de los sistemas lineales con autovalores imaginarios y las trayectorias periódicas de los sistemas no lineales, ciclos límite (Anexo A). En caso de un sistema no lineal con ciclo límite las trayectorias empiezan desde diferentes condiciones iniciales convergiendo al mismo comportamiento periódico, ciclo límite. Éste también se denomina atractor periódico (Anexo A).

En los sistemas dinámicos no lineales con varios períodos puede ocurrir que éstos sean conmensurables, un número racional. En este caso la trayectoria es periódica. Si los períodos son inconmensurables el estado no se repite nunca y la trayectoria es cuasiperiódica (Anexo A).

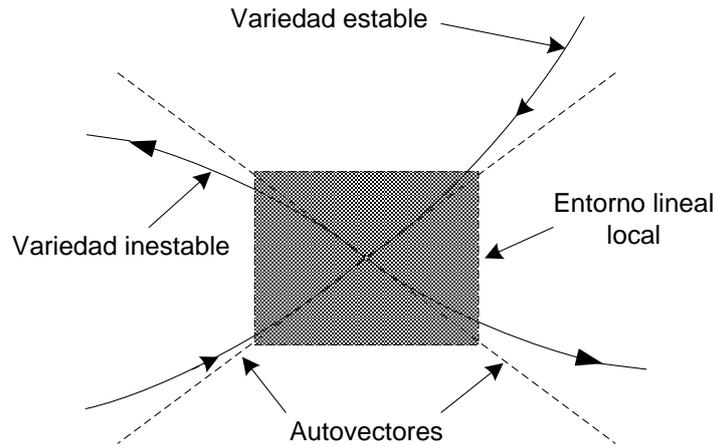


Figura 3.2 Variedades estable e inestable en un punto de equilibrio de silla

En los sistemas de orden 3 o superior, las trayectorias permanecen confinadas dentro de un volumen finito en el espacio de fases, pero nunca se repiten. Esta situación se denomina caos, y el atractor resultante se denomina atractor extraño (Anexo A). La diferencia básica entre sistemas cuasiperiódicos y sistemas caóticos es la sensibilidad de éstos a las condiciones iniciales.

La construcción del gráfico de espacio de fases, mencionado anteriormente, permite una mejor comprensión del comportamiento caótico. Cuanto más caótico es el sistema, mayor es el número de trayectorias y más desordenado parece el atractor representado en el espacio de fases. En estos casos, es posible simplificar la representación del atractor mediante una sección bidimensional, mapa de Poincaré (Anexo A).

Antes de definir el mapa de Poincaré, es necesario considerar la relación entre sistemas no autónomos y autónomos. Un sistema no autónomo de orden n con período T , se puede transformar en un sistema autónomo de dimensión $n+1$, habitualmente un espacio de estado cilíndrico $\mathbb{R}^n \times S$. Este espacio puede ser seccionado por un hiperplano n -dimensional:

$$\Sigma = \{(x, \theta) \in \mathbb{R}^n \times S / \theta = \theta_0\} \quad (3.3)$$

Así, para el caso de $n=1$, cada T segundos la trayectoria interseca a Σ , como puede verse en la Figura 3.3. Las intersecciones $P(x)$, aplicación de Poincaré, constituyen el mapa de Poincaré. Por otro lado, para un sistema autónomo de orden n y ciclo límite Γ , con

período mínimo T , se puede actuar de forma análoga. Considerando un hiperplano Σ de dimensión $n-1$, la trayectoria interseca a éste cada T segundos. Los puntos de intersección, x^* , constituyen el mapa de Poincaré. En la Figura 3.4 se ve un sistema autónomo de orden 3 y su sección de Poincaré.

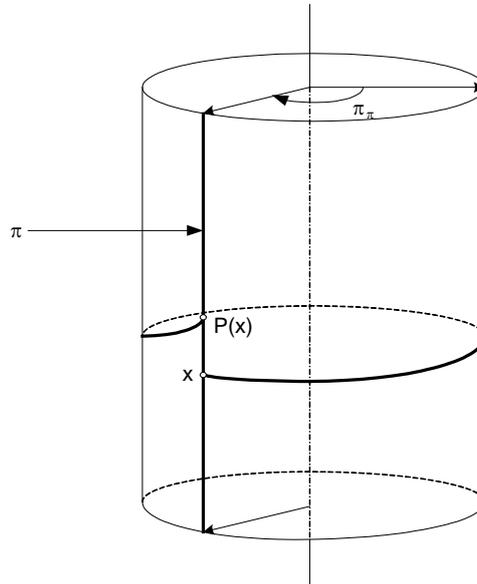


Figura 3.3 Mapa de Poincaré de un sistema no autónomo de primer orden (Parker y Chua 1987)

Existe una correspondencia unívoca entre el comportamiento del sistema y el comportamiento de P , intersección de la trayectoria con Σ , esto es, el mapa de Poincaré (Anexo A). Los puntos fijos, órbitas periódicas, ciclos límite y atractores son tipos de conjuntos límite.

3.2.1 ESTABILIDAD DE LOS CONJUNTOS LÍMITE: MULTIPLICADORES CARACTERÍSTICOS

Uno de los objetivos fundamentales del estudio de sistemas dinámicos consiste en determinar la estabilidad de cualquier tipo de comportamiento estacionario, incluyendo sistemas cuasiperiódicos y caóticos. Para desarrollar las herramientas necesarias en este estudio es preciso un análisis más detallado de las ecuaciones.

A partir de la ecuación de un sistema autónomo de orden n , Ecuación (3.1), la solución cerca del punto de equilibrio, x_{eq} , se obtiene mediante la siguiente linealización:

$$\delta \dot{x} = Df(x_{eq}) \cdot \delta x \quad (3.4)$$

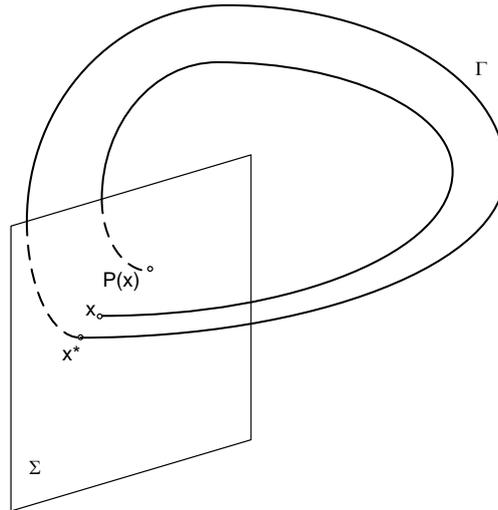


Figura 3.4 Mapa de Poincaré de un sistema autónomo de orden 3 (Parker y Chua 1987)

La trayectoria obtenida a partir de la condición inicial $x_{eq} + \delta x_0$ es:

$$\phi_t(x_{eq} + \delta x_0) = x_{eq} + \delta x(t) = x_{eq} + c_1 \cdot \eta_1 \cdot e^{\lambda_1 t} + \dots + c_n \cdot \eta_n \cdot e^{\lambda_n t} \quad (3.5)$$

Donde λ_i y η_i son los autovalores y autovectores de $Df(x_{eq})$ respectivamente, y c_i es una constante escalar obtenida a partir de la condición inicial. La parte real de λ_i indica la tasa de expansión de la trayectoria cuando es mayor que cero, o de contracción cuando es menor que cero, en el entorno del punto de equilibrio, x_{eq} , y en la dirección de η_i .

Si $\text{Re}(\lambda_i) < 0$ para cualquier valor de i , cualquier perturbación suficientemente pequeña tiende a cero, y el sistema es asintóticamente estable. Si $\text{Re}(\lambda_i) > 0$ para algún valor de i , x_{eq} no es estable. En este último caso existen dos posibilidades: inestable, si $\text{Re}(\lambda_i) > 0$ para todo valor de i , y no-estable, si $\text{Re}(\lambda_i) < 0$ para algún valor de i . Si $\text{Re}(\lambda_i) = 0$ para algún valor de i , la estabilidad no se puede determinar únicamente por los autovalores.

Los puntos de equilibrio en los que todos los autovalores tienen parte real nula se denominan hiperbólicos. Estos puntos tienen la propiedad de que otros puntos cercanos al de equilibrio, punto de equilibrio más pequeñas perturbaciones, tienen la misma estabilidad. Esta propiedad se denomina estabilidad estructural.

Para sistemas periódicos, la estabilidad de la solución está determinada por la estabilidad del único punto que forma el mapa de Poincaré, punto fijo (Anexo A).

Análogamente a lo mencionado para el punto de equilibrio de un sistema, la estabilidad de un punto del mapa de Poincaré, x^* , está determinada por la linealización de la aplicación de Poincaré, $P(x)$, en x^* :

$$\delta x_{k+1} = DP(x^*) \cdot \delta x_k \quad (3.6)$$

La aplicación de Poincaré asociada a una trayectoria con valor inicial $x_0 + \delta x_0$ es:

$$x_k = x^* + \delta x_k = x^* + c_1 \cdot \eta_1 \cdot m_1^k + \dots + c_p \cdot \eta_p \cdot m_p^k \quad (3.7)$$

Donde m_i^k y η_i son los autovalores y autovectores de $DP(x^*)$ respectivamente, p es la dimensión de $DP(x^*)$ y c_i es una constante escalar obtenida a partir de la condición inicial. El valor del parámetro p es n , para sistemas no autónomos, y $n-1$ para sistemas autónomos.

Los autovalores son los multiplicadores característicos del punto fijo, también denominados de Floquet. Éstos determinan la contracción si $|m_i| < 1$, o la expansión si $|m_i| > 1$, cerca de x^* en la dirección η_i para una iteración del mapa de Poincaré.

Análogamente a lo mencionado para el punto de equilibrio de un sistema, si todos los m_i están dentro de un círculo de radio unidad, la solución periódica es asintóticamente estable. Si todos los $|m_i|$ son mayores que uno, la solución periódica es inestable. Si uno de los multiplicadores característicos está sobre la circunferencia de radio unidad, la estabilidad de la solución no puede ser determinada únicamente por éstos. Las soluciones periódicas con todos los multiplicadores característicos sobre la circunferencia de radio unidad se denominan hiperbólicas, y son estructuralmente estables.

Los sistemas periódicos autónomos no tienen expresión explícita de P , por lo que es imposible obtener $DP(x^*)$. Sin embargo, en los sistemas autónomos al menos un autovalor de $DP(x^*)$ es igual a 1, dependiendo la estabilidad de los conjuntos límite de los $n-1$ autovalores restantes.

Si se define la solución de la Ecuación (3.1) en x_0 como $\phi_t(x_0)$, los autovalores pueden encontrarse mediante la ecuación variacional obtenida derivando dicha ecuación respecto de x :

$$D_{x_0}\dot{\phi}_t(x_0) = D_x f(\phi_t(x_0)) \cdot D_{x_0}\phi_t(x_0) \quad (3.8)$$

donde $D_{x_0}\phi_t(x_0)=I$.

Si se define $D_{x_0}\dot{\phi}_t$ como $\dot{\Phi}_t$ la Ecuación (3.8) se transforma en

$$\dot{\Phi}_t(x_0) = D_x f(\phi_t(x_0)) \cdot \Phi_t(x_0) \quad (3.9)$$

En el caso de sistemas periódicos no autónomos, la Ecuación (3.2), cuya solución en (x_0, t_0) es $\phi_t(x_0, t_0)$, se puede escribir:

$$\dot{\phi}_t(x_0, t_0) = f(\phi_t(x_0, t_0), t) \quad (3.10)$$

Y la derivada con respecto a x_0 :

$$D_{x_0}\dot{\phi}_t(x_0, t_0) = D_x f(\phi_t(x_0, t_0), t) \cdot D_{x_0}\phi_t(x_0, t_0) \quad (3.11)$$

donde $D_{x_0}\phi_{t_0}(x_0, t_0)=I$.

Usando una notación similar a la de la Ecuación (3.9), la Ecuación (3.11) se reescribe como

$$\dot{\Phi}_t(x_0, t_0) = D_x f(\phi_t(x_0, t_0), t) \cdot \Phi_t(x_0, t_0) \quad (3.12)$$

Con respecto a la Ecuación (3.12) se puede comentar:

- $D_x f(\phi_t(x_0, t_0), t)$ es una matriz que varía con el tiempo, por tanto, la ecuación variacional es un sistema lineal respecto del tiempo de orden n^2
- $\Phi_t(x_0, t_0)$ es la matriz de transición de estado del sistema:

$$\delta\dot{x} = D_x f(\phi_t(x_0, t_0), t) \cdot \delta x \quad (3.13)$$

donde $\delta x(t_0)=\delta x_0$ y $\delta x(t)=\Phi_t(x_0, t_0) \cdot \delta x_0$ es la respuesta del sistema a una pequeña perturbación, δx_0 . Siendo evidente que $\Phi_t(x_0, t_0)$ gobierna la trayectoria para una pequeña perturbación del valor inicial

- La ecuación variacional es la linealización de dx/dt sobre la trayectoria $\phi_t(x_0, t_0)$

Si se define la aplicación de Poincaré como $\phi_T(x_0, t_0)$, sus autovalores dados por:

$$D_{x_0}\phi_T(x^*, t_0) = \Phi_T(x^*, t_0) \quad (3.14)$$

son los multiplicadores característicos de una solución periódica del sistema.

La forma más sencilla de relacionar los multiplicadores característicos y los autovalores de $Df(x_0)$ es considerar su punto de equilibrio, x_{eq} . Este punto puede ser tratado como ciclo límite de período T:

$$\phi_t(x_{eq}) = x_{eq} \quad (3.15)$$

A partir de la Ecuación (3.9) y considerando $x_0=x_{eq}$, se obtiene:

$$\Phi_t(x_{eq}) = e^{Df(x_{eq}) \cdot t} \quad (3.16)$$

Esto permite relacionar los autovalores de $Df(x_{eq})$, λ_i , con los autovalores de $\Phi_t(x_0)$, multiplicadores característicos, mediante la siguiente función:

$$m_i = e^{\lambda_i \cdot T} \quad (3.17)$$

Dado que $|m_i| < 1$ cuando $\text{Re}[\lambda_i] < 0$, m_i y λ_i proporcionan la misma información de estabilidad del sistema.

3.2.2 ESTABILIDAD DE LOS CONJUNTOS LÍMITE: EXPONENTES DE LYAPUNOV

Los exponentes de Lyapunov son una generalización de los autovalores en un punto de equilibrio y sus multiplicadores característicos. Se usan para determinar la estabilidad de cualquier tipo de comportamiento estacionario, incluyendo sistemas cuasiperiódicos y caóticos, y se definen en términos de la solución de la ecuación variacional:

$$\lambda_{Li} = \lim_{t \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{t} \cdot \ln |m_i(t)| \right) \quad (3.18)$$

Si λ_i y η_i son un autovalor y un autovector de $Df(x_{eq})$ se tiene:

$$\lambda_{Li} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln |e^{\lambda_i \cdot t}| = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \text{Re}[\lambda_i] \cdot t = \text{Re}[\lambda_i] \quad (3.19)$$

En este caso especial, la parte real de los autovalores en el punto de equilibrio coincide con el exponente de Lyapunov. Así, si λ_{Li} es negativo, indica la tasa de contracción cerca del punto de equilibrio. Si λ_{Li} es positivo no nulo indica la de expansión. Si x_0 pertenece a una cuenca de atracción de x_{eq} , esto es, $\phi_t(x_0)$ tiende a x_{eq} , cualquier

transitorio finito se puede despreciar y los exponentes de Lyapunov de x_0 y x_{eq} coinciden. En general, todo punto en la cuenca de atracción tiene el mismo exponente de Lyapunov.

En caso de ciclos límite la relación entre los multiplicadores característicos y los exponentes de Lyapunov es más directa:

$$\lambda_{Li} = \frac{1}{T} \cdot \ln|m_i| \quad (3.20)$$

donde λ_{Ln} es nulo por ser el autovalor de $\Phi_T(x^*)=1$, en caso de un sistema autónomo.

A continuación se va a analizar si es necesario calcular todos los exponentes de Lyapunov. Si los autovalores de un sistema con un punto de equilibrio en el origen son reales, estos coinciden con el exponente de Lyapunov, Ecuación (3.18). Si se ordena de mayor a menor los exponentes de Lyapunov, hay n subespacios lineales $W_1 \supset \dots \supset W_n$, con dimensiones $n, n-1, \dots, 1$ respectivamente, definidos como $W_i = \text{span}\{\eta_i, \eta_{i+1}, \dots, \eta_n\}$. Así para $W_n = \text{span}\{\eta_n\}$, cualquier condición inicial $x_0 \in W_n$ evoluciona como:

$$x_0 \cdot e^{\lambda_{Ln} \cdot t} \quad (3.21)$$

Para $W_1 = \text{span}\{\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n\} = \mathbb{R}^n$, cualquier $x_0 \in W_1 \setminus W_2 = \{x \in W_1 \mid x \notin W_2\}$ evoluciona como:

$$c_1 \cdot \eta_1 \cdot e^{\lambda_{L1} \cdot t} + c_2 \cdot \eta_2 \cdot e^{\lambda_{L2} \cdot t} + \dots + c_n \cdot \eta_n \cdot e^{\lambda_{Ln} \cdot t} \quad (3.22)$$

Dado que $\lambda_{L1} > \lambda_{L2} > \dots > \lambda_{Ln}$ los exponentes de Lyapunov con subíndices mayores que 1 se pueden despreciar al cabo de un tiempo y la condición inicial x_0 evoluciona como:

$$x_0 \cdot e^{\lambda_{L1} \cdot t} \quad (3.23)$$

Una vez presentada la herramienta, el exponente de Lyapunov, se puede usar para clasificar el comportamiento estacionario, Tabla 3.1. Para puntos de equilibrio estable, los exponentes de Lyapunov siempre son negativos. Para ciclos límite, $\lambda_{L1}=0$ y el resto de exponentes son negativos. Para toros estables, $\lambda_{L1}=\lambda_{L2}=0$ y el resto de exponentes son negativos. Para un atractor, la contracción debe sobrepasar la expansión:

$$\sum_{i=0}^n \lambda_{Li} < 0 \quad (3.24)$$

Tabla 3.1 Clasificación de los sistemas (Parker y Chua 1987)

Estado estacionario	Flujo	Mapas de Poincaré	Exponentes de Lyapunov	Dimensión
Punto de equilibrio	Punto		$0 > \lambda_{L1} \geq \lambda_{L2} \geq \dots \geq \lambda_{Ln}$	0
Periódico	Curvas próximas entre sí	Punto	$\lambda_{L1}=0$ $0 > \lambda_{L2} \geq \dots \geq \lambda_{Ln}$	1
Subarmónico	Curvas próximas entre sí	Órbitas próximas entre sí	$\lambda_{L1}=0$ $0 > \lambda_{L2} \geq \dots \geq \lambda_{Ln}$	1
Doble periódico	Toro	Curvas próximas entre sí	$\lambda_{L1}=\lambda_{L2}=0$ $0 > \lambda_{L3} \geq \dots \geq \lambda_{Ln}$	2
K-periódico	K-toro	(K-1)-toro	$\lambda_{L1}=\dots=\lambda_{LK}=0$ $0 > \lambda_{L,K+1} \geq \dots \geq \lambda_{Ln}$	K
Caótico	Cuasi-Cantor	Cuasi-Cantor	$\lambda_{L1} > 0$ $\sum_i \lambda_{Li} < 0$	no entero

Un atractor extraño tiene al menos un exponente de Lyapunov positivo, aunque no puede definirse únicamente mediante los exponentes de Lyapunov. Algunos investigadores han propuesto usar la intersección transversal de ciertas variedades del mapa de Poincaré para definirlo (Anexo A) (Parker y Chua 1987).

3.2.3 CÁLCULO DE LOS EXPONENTES DE LYAPUNOV

Los diferentes métodos para programar los exponentes de Lyapunov a partir de series temporales son: los basados en el Jacobiano y los directos.

Los métodos basados en el Jacobiano usan las matrices jacobianas de las ecuaciones del modelo para calcular los exponentes de Lyapunov mediante algoritmos estándar que han sido desarrollados para el caso de conocer las ecuaciones del sistema dinámico (Shimada y Nagashima 1979; Benettin, Galgani y col. 1980; Eckmann y Ruelle 1985; Geist, Parlitz y col. 1990). Normalmente se emplean aproximaciones lineales (Sano y

Sawada 1985; Eckmann, Kamphorst y col. 1986; Stoop y Meier 1988; Holzfuss y Lauterborn 1989; Stoop y Parisi 1991; Zeng, Eykholt y col. 1991; Zeng, Pielke y col. 1992; Krueel, Eiswirth y col. 1993; Parlitz 1993). Las modificaciones y mejoras del algoritmo básico incluyen:

- Usar intervalos vecinos en lugar de bolas con el fin de reducir la influencia del ruido (Eckmann, Kamphorst y col. 1986; Zeng, Eykholt y col. 1991; Zeng, Pielke y col. 1992; Krueel, Eiswirth y col. 1993)
- Usar aproximaciones no lineales de la trayectoria mediante polinomios (Briggs 1990; Bryant, Brown y col. 1990; Abarbanel, Brown y col. 1991; Brown, Bryant y col. 1991), redes de base radial (Holzfuss y Parlitz 1991; Parlitz 1992; Kadtko, Brush y col. 1993) o redes neuronales (Gencay y Dechert 1992)
- Usar proyecciones sobre subespacios lineales basados en las coordenadas locales de Broomhead-King (Stoop y Parisi 1991)
- Usar la dimensión de encaje, d , para seleccionar los puntos próximos y una dimensión local menor, d_L , para realizar el ajuste y el cálculo de los exponentes de Lyapunov resultantes de d_L (Eckmann, Kamphorst y col. 1986; Bryant, Brown y col. 1990; Brown, Bryant y col. 1991)

Las dos últimas variantes tratan de evitar los denominados falsos exponentes de Lyapunov, que se dan cuando la dimensión d del espacio de estado reconstruido es mayor que la dimensión m del espacio de estado original. Estas variantes no dependen de la dinámica sino del esquema de aproximación, del ruido contenido en los datos y en determinados casos de la curvatura local del atractor. En principio, se puede tomar cualquier conjunto de valores. El ancho del atractor a lo largo de las direcciones asociadas con los diferentes exponentes de Lyapunov (Bryant, Brown y col. 1990; Brown, Bryant y col. 1991) y la comparación de los exponentes obtenidos a partir de la serie temporal con los calculados para la misma serie temporal con inversión de tiempo (Parlitz 1992; Parlitz 1993) permiten identificar falsos exponentes de Lyapunov. Esto se debe a que los exponentes falsos se corresponden con direcciones donde el atractor comprime su sección y a que no cambian sus signos al invertir el tiempo. La última variante mencionada se emplea únicamente con datos de alta precisión, que permiten una estimación correcta de exponentes de Lyapunov negativos. Eckmann y Ruelle (Eckmann y Ruelle 1992) analizaron los requisitos que deben cumplir los datos utilizados en los métodos basados en el Jacobiano.

Dada la importancia de la reconstrucción del espacio de fase, aplicada por primera vez a series temporales por Packard, Crutchfield y col. (Packard, Crutchfield y col. 1980), en el cálculo de los exponentes de Lyapunov, se va a tratar ésta con detalle a continuación. Takens (Takens 1980) justifica matemáticamente este enfoque, probando que es posible construir un espacio de fase nuevo a partir de la serie temporal escalar. Este espacio de fase es difeomórficamente equivalente al espacio de fase original del sistema medido. Basado en estos espacios reconstruidos se puede analizar la dinámica no lineal del sistema.

Básicamente existen dos métodos de reconstrucción de espacios de fase a partir de series temporales escalares: coordenadas con retardo y coordenadas derivadas. Dado que las derivadas son sensibles al ruido, no se utilizan habitualmente con datos procedentes de medidas. La medida de la serie temporal escalar, $s(t)$, es una función:

$$s(t) = h(\vec{x}(t)); \quad h: M \rightarrow \mathbb{R} \quad (3.25)$$

M es una variedad m -dimensional en la que se representa la evolución de los estados, ϕ_t .

El mapa de coordenadas con retardo t_l y dimensión de encaje, d , se obtiene de

$$\vec{y} = F(\vec{x}) = (s(t), s(t - t_l), \dots, s(t - (d - 1)t_l)) ; \quad F: M \rightarrow \mathbb{R}^d \quad (3.26)$$

La Figura 3.5 representa la reconstrucción del espacio de fases a partir de una serie temporal escalar. Los métodos directos estiman el movimiento divergente de los estados reconstruidos. El método más ampliamente conocido y empleado es el que fue introducido por Wolf, Swift y col. (Wolf, Swift y col. 1985). Así, se considera una trayectoria de referencia $\{y^n\}$ y una trayectoria vecina $\{z^n\}$ que empiezan en los puntos más próximos de ambas curvas, z^0 e y^0 , Figura 3.6. Después de un transitorio el vector diferencia $u^k = z^{n+k} - y^{n+k}$ apunta en la dirección (dependiente del tiempo) correspondiente al mayor de los exponentes de Lyapunov, λ_{L1} . Por tanto $\|u_k\|$ crece, en promedio, con $\exp(\lambda_{L1} \cdot t_s \cdot k)$ hasta que excede el rango donde se mantiene una aproximación lineal de $\{y^n\}$. Ahora la trayectoria vecina $\{z^n\}$ tiene que ser reemplazada por otra trayectoria vecina que esté más cercana a la trayectoria de referencia y cuyo valor inicial se encuentra sobre o cerca de la línea que hay entre el estado de referencia actual y el último punto de la trayectoria vecina previa, Figura 3.6, con el fin de preservar la dirección correspondiente al mayor exponente de Lyapunov. Los criterios utilizados

para el umbral de sustitución y otros detalles del algoritmo se pueden encontrar en Wolf, Swift y col. (Wolf, Swift y col. 1985).

En principio, es posible emplear esta estrategia para obtener el segundo mayor exponente de Lyapunov (Wolf, Swift y col. 1985), pero se convierte en algo muy difícil. Por otro lado, es suficiente en muchos casos establecer la existencia de al menos un exponente de Lyapunov positivo. El algoritmo de Wolf, por su robustez, a menudo se emplea para el análisis de datos experimentales (Fell, Roschke y col. 1993; Fell y Beckmann 1994).

Otro método directo, que es incluso más sencillo en términos del número de parámetros libres, fue propuesto por Sato, Sano y col. (Sato, Sano y col. 1987), y Kurths y Herzl (Kurths y Herzl 1987). Muy similar al algoritmo de Wolf, el crecimiento exponencial medio de la distancia entre órbitas vecinas se estudia en una escala logarítmica, esta vez mediante el error de predicción:

$$p(k) = \frac{1}{N \cdot t_s} \cdot \sum_{n=1}^N \log_2 \left(\frac{\|y^{n+k} - y^{nn+k}\|}{\|y^n - y^{nn}\|} \right) \quad (3.27)$$

donde $\{y^{nn}\}$ es la trayectoria vecina más cercana de $\{y^n\}$.

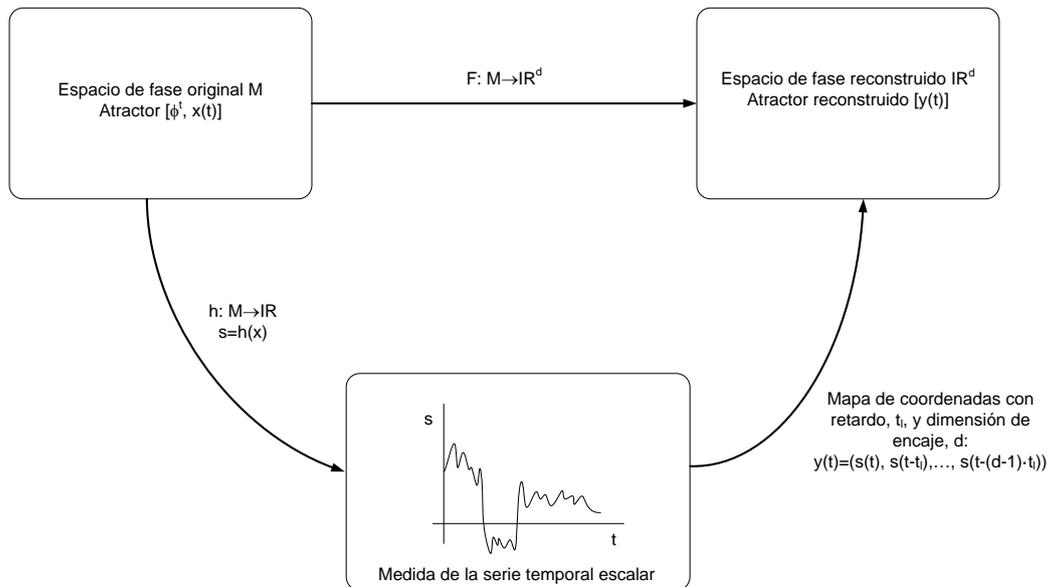


Figura 3.5 Reconstrucción del espacio de fases a partir de la serie temporal escalar

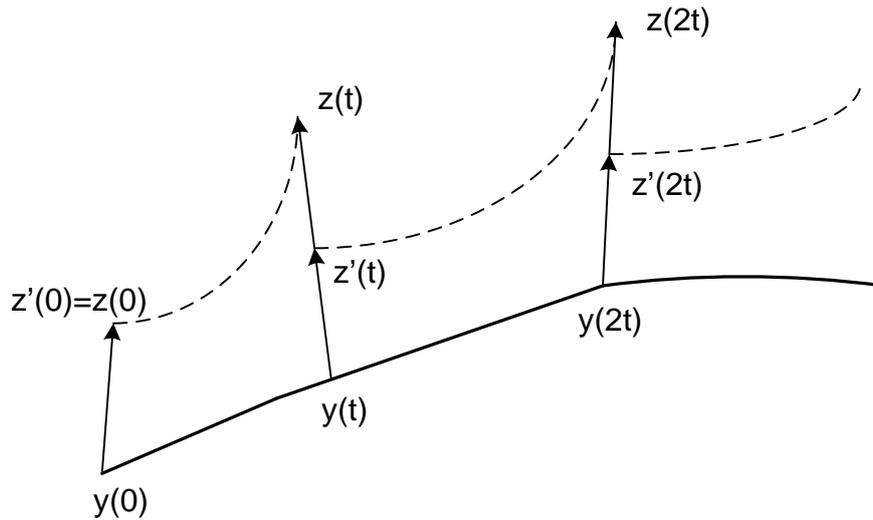


Figura 3.6 Esquema de selección de trayectorias según el procedimiento de Wolf

La dependencia del error de predicción $p(k)$ sobre el número de pasos de tiempo k se puede dividir en tres fases. La fase 1 es el transitorio donde la órbita vecina converge en la dirección correspondiente al mayor de los exponentes de Lyapunov. Durante la fase 2 la distancia crece con $\exp(\lambda_{L1} \cdot t_s \cdot k)$ hasta que exceda el rango de validez de la aproximación lineal de la trayectoria alrededor de la órbita de referencia $\{y^{n+k}\}$. Así la fase 3 empieza donde la distancia crece más despacio que exponencialmente hasta que decrece de nuevo debido a plegamientos en el espacio de estados. Si la fase 2 es lo suficientemente larga, un segmento lineal con pendiente λ_{L1} aparece en la gráfica $p(k)$ frente a k , incremento temporal. Esto no solamente permite una estimación del mayor de los exponentes de Lyapunov, λ_{L1} , sino que también proporciona una verificación directa del crecimiento exponencial de distancias, propio del caos determinista, a diferencia de los procesos estocásticos, con gráficas no lineales (Dammig y Mitschke 1993).

Una propiedad interesante de la función del error de predicción es la relación de su pendiente con el exponente máximo de Lyapunov (Wichard, Parlitz y col. 1998). La aplicación del método directo obliga a utilizar unos procedimientos de selección del retardo y la dimensión de encaje (Wichard, Parlitz y col. 1998; Merkwirth, Parlitz y col. 2009). Los teoremas de encaje (Takens 1980; Sauer, Yorke y col. 1991) acotan el retardo pero no lo fijan. Una subestimación de este tiempo conduce a estados reconstruidos que no difieren mucho y cuyos puntos se dispersan alrededor de una línea recta. Por otro lado, una sobrestimación conduce a atractores caóticos que se pliegan,

con autointeracciones y una pérdida de correspondencia entre estados originales y reconstruidos. Otro aspecto a considerar es la duración del registro de la serie temporal, que es crucial para cara caracterizar la dimensión de encaje.

Se han propuesto muchos métodos para seleccionar el retardo (Rosenstein, Collins y col. 1994), los más conocidos consisten en minimizar la redundancia de las coordenadas con retardo de los estados reconstruidos, Ecuación (3.26), mediante las funciones de autocorrelación lineal o conceptos de teoría de la información como la información mutua (Frazer 1989). Así, una buena estimación del retardo se obtiene a partir del primer mínimo de la información mutua. A partir de este valor y utilizando el método propuesto por Cao (Cao 1997) se puede estimar la dimensión de encaje con la que obtener la reconstrucción del espacio de fase.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Abarbanel, H. D. I., R. Brown, y col. (1991). "Lyapunov exponents in chaotic systems - their importance and their evaluation using observed data." *International Journal of Modern Physics B* 5(9): 1347-1375.
- Banerjee, S. (2005). *Dynamics For Engineers*. John Wiley and Sons, Chichester, Reino Unido.
- Benettin, G., L. Galgani, y col. (1980). "Lyapunov characteristic exponents for smooth dynamical systems and for hamiltonian systems; a method for computing all of them, part. 2: numerical applications." *Meccanica* 15: 21-30.
- Briggs, K. (1990). "An improved method for estimating Lyapunov exponents of chaotic time-series." *Physics Letters A* 151(1-2): 27-32.
- Brown, R., P. Bryant, y col. (1991). "Computing the Lyapunov spectrum of a dynamic system from an observed time-series." *Physical Review A* 43(6): 2787-2806.
- Bryant, P., R. Brown, y col. (1990). "Lyapunov exponents from observed time-series." *Physical Review Letters* 65(13): 1523-1526.
- Cao, L. Y. (1997). "Practical method for determining the minimum embedding dimension of a scalar time series." *Physica D* 110(1-2): 43-50.
- Dammig, M. y F. Mitschke (1993). "Estimation of Lyapunov exponents from time-series - the stochastic case." *Physics Letters A* 178(5-6): 385-394.
- Eckmann, J. P., S. O. Kamphorst, y col. (1986). "Lyapunov exponents from time-series." *Physical Review A* 34(6): 4971-4979.
- Eckmann, J. P. y D. Ruelle (1985). "Ergodic-theory of chaos and strange attractors." *Reviews of Modern Physics* 57(3): 617-656.
- Eckmann, J. P. y D. Ruelle (1992). "Fundamental limitations for estimating dimensions and Lyapunov exponents in dynamic-systems." *Physica D* 56(2-3): 185-187.
- Fell, J. y P. E. Beckmann (1994). "Resonance-like phenomena in Lyapunov calculations from data reconstructed by the time-delay method." *Physics Letters A* 190(2): 172-176.
- Fell, J., J. Roschke, y col. (1993). "Deterministic chaos and the 1st positive Lyapunov exponent - a nonlinear-analysis of the human electroencephalogram during sleep." *Biological Cybernetics* 69(2): 139-146.
- Frazer, A. M. (1989). "Information and entropy in strange attractors." *IEEE Transactions on Information Theory* 35: 245-262.

- Geist, K., U. Parlitz, y col. (1990). "Comparison of different methods for computing Lyapunov exponents." *Progress of Theoretical Physics* 83(5): 875-893.
- Gencay, R. y W. D. Dechert (1992). "An algorithm for the N-Lyapunov exponents of an n-dimensional unknown dynamic system." *Physica D* 59(1-3): 142-157.
- Holzfuß, J. y W. Lauterborn (1989). "Lyapunov exponents from a time-series of acoustic chaos." *Physical Review A* 39(4): 2146-2152.
- Holzfuß, J. y U. Parlitz (1991). Lyapunov exponents from time-series. Lyapunov Exponents. L. Arnold, H. Crauel and J. P. Eckmann (Eds.). Springer-Verlag, Berlín, Alemania. 1486: 263-270.
- Kadtke, J. B., J. Brush, y col. (1993). "Global dynamical equations and Lyapunov exponents from noisy chaotic time series." *International Journal of Bifurcation and Chaos* 3: 607-616.
- Krueel, T. M., M. Eiswirth, y col. (1993). "Computation of Lyapunov spectra - effect of interactive noise and application to a chemical oscillator." *Physica D* 63(1-2): 117-137.
- Kurths, J. y H. Herzel (1987). "An attractor in a solar time-series." *Physica D* 25(1-3): 165-172.
- Merkwirth, C., U. Parlitz, y col. (2009). *OpenTStool User Manual, Versión 1.2*, Universidad de Göttingen, Alemania.
- Nicholls, D. y M. T. Tagarev (1994). "What does chaos theory mean for warfare?" *Airpower Journal* 8(3): 48-57.
- Packard, N. H., J. P. Crutchfield, y col. (1980). "Geometry from a time-series." *Physical Review Letters* 45(9): 712-716.
- Parker, T. S. y L. O. Chua (1987). "Chaos - A tutorial for engineers." *Proceedings of the IEEE* 75(8): 982-1008.
- Parlitz, U. (1992). "Identification of true and spurious Lyapunov exponents from time series." *International Journal of Bifurcation and Chaos* 2(1): 155-165.
- Parlitz, U. (1993). "Lyapunov exponents from Chua's circuit." *J. Circuits, Systems and Computers* 3(2): 507-523.
- Rosenstein, M. T., J. J. Collins, y col. (1994). "Reconstruction expansion as a geometry-based framework for choosing proper delay times." *Physica D-Nonlinear Phenomena* 73(1-2): 82-98.
- Sano, M. y Y. Sawada (1985). "Measurement of the Lyapunov spectrum from a chaotic time-series." *Physical Review Letters* 55(10): 1082-1085.

- Sato, S., M. Sano, y col. (1987). "Practical methods of measuring the generalized dimension and the largest Lyapunov exponent in high dimensional chaotic systems." *Progress of Theoretical Physics* 77(1): 1-5.
- Sauer, T., J. A. Yorke, y col. (1991). "Embedology." *Journal of Statistical Physics* 65(3-4): 579-616.
- Shimada, I. y T. Nagashima (1979). "Numerical approach to ergodic problem of dissipative dynamical-systems." *Progress of Theoretical Physics* 61(6): 1605-1616.
- Stoop, R. y P. F. Meier (1988). "Evaluation of Lyapunov exponents and scaling functions from time-series." *Journal of the Optical Society of America B-Optical Physics* 5(5): 1037-1045.
- Stoop, R. y J. Parisi (1991). "Calculation of Lyapunov exponents avoiding spurious elements." *Physica D* 50(1): 89-94.
- Takens, F. (1980). *Detecting Strange Attractors In Turbulence. Dynamical Systems And Turbulence.* L. S. Young (Ed.). Springer-Verlag, Berlín, Alemania.
- Wichard, J. D., U. Parlitz, y col. (1998). Applications of nearest neighbour statistics 1998 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (Nolta'98). Crans-Montana, Suiza: 1245-1248
- Wolf, A., J. B. Swift, y col. (1985). "Determining Lyapunov exponents from a time-series." *Physica D* 16(3): 285-317.
- Zeng, X., R. Eykholt, y col. (1991). "Estimating the Lyapunov-exponent spectrum from short-time series of low precision." *Physical Review Letters* 66(25): 3229-3232.
- Zeng, X., R. A. Pielke, y col. (1992). "Extracting Lyapunov exponents from short time series of low precision." *Modern Phys. Lett. B* 6: 55-75.

CAPÍTULO 4

MODELOS EN RED

La solución de los problemas mencionados en el Capítulo 2 implica resolver las ecuaciones desarrolladas considerando además las condiciones de contorno e iniciales para cada caso. En los siguientes apartados se deduce el modelo en red correspondiente a la ecuación de gobierno para cada uno de los problemas mencionados.

4.1 MODELOS EN RED PARA SIMULACIÓN DEL MODELO FRENKEL-KONTOROVA-TOMLINSON

Los detalles de las reglas del método de simulación por redes (MESIR) pueden encontrarse en González-Fernández (González-Fernández 2001). Se describe a continuación una síntesis de la aplicación de estas reglas para el diseño del modelo en red.

Se empieza por describir el modelo en red del proceso de fricción seca. El diseño de un modelo en red fiable requiere una equivalencia formal entre las ecuaciones del modelo y las del proceso, incluyendo las condiciones de contorno y las condiciones iniciales. Dado que la Ecuación (2.19) se refiere a cada átomo, el modelo básico de la red tiene que ver con esta ecuación y el modelo completo está formado por 233 redes o ecuaciones básicas acopladas. A estas ecuaciones se les añade las condiciones de contorno y las condiciones iniciales.

El primer paso es elegir la equivalencia entre las variables mecánicas y eléctricas. Se establece la siguiente: ξ_j (desplazamiento relativo de cada átomo) \equiv q (carga eléctrica en la red de cada átomo), o $d\xi_j/dt$ (velocidad relativa de cada átomo) \equiv $dq/dt = i$ (corriente eléctrica en la red asociada a cada átomo). Ahora, cada término de la Ecuación (2.19) se considera como una tensión en un componente eléctrico cuya ecuación característica se define por la expresión matemática de este término. Por lo tanto, la ecuación se puede considerar como un balance de las tensiones de una red o lazo que contiene tantos componentes eléctricos conectados en serie como términos tiene la ecuación.

Los tres términos lineales de la Ecuación (2.19) se implementan como sigue: el término ' $(d^2\xi_j/dt^2)$ ' está asociado a una bobina ya que la ecuación característica de este

componente es $V_{L,j}=L_j \cdot (di_j/dt)=L_j \cdot (d^2q_j/dt^2)$, con $L_j=1H$; el término $'(1/m) \cdot (\beta+\gamma) \cdot (d\xi_j/dt)'$ está asociado a una resistencia ya que su ecuación característica es $V_{R,j}=R_{1,j} \cdot i = R_{1,j} \cdot (dq_j/dt)$, con $R_{1,j} = (\beta+\gamma)/m$; y el término $'(1/m) \cdot \gamma \cdot v'$ se implementa mediante una fuente de tensión simple de valor constante $V_{1,j}=\gamma \cdot v$. Teniendo en cuenta la polaridad de la fuente, los tres elementos se muestran en el modelo en red de un átomo, Figura 4.1-a.

Los términos no lineales, que incluyen los términos acoplados entre las ecuaciones de cada átomo, no se pueden implementar directamente, y requieren el uso de fuentes de tensión controladas por tensión, fuentes de corriente controladas por intensidad, o bien de circuitos auxiliares. En el primer caso se tienen dispositivos cuya salida se define como una función continua de las tensiones existentes en otros puntos del modelo. Su argumento puede contener tensiones en cualquier nodo de la red o corrientes en cualquier componente. Esta capacidad, que está más allá del alcance de la analogía eléctrica clásica que aparece en muchos libros, hace que el método de redes sea una herramienta interesante y eficiente en el campo de la computación.

Para implementar los términos $'(1/m) \cdot (2\kappa_1+\kappa_2) \cdot \xi_j'$ y $'(1/m) \cdot \kappa_1 \cdot (\xi_{j-1} + \xi_{j+1})'$, los valores de ξ_j se deben determinar mediante la integración de la corriente en el modelo de red de un átomo, v_j . Para este propósito, se implementa un circuito auxiliar, Figura 4.1-b. F_j es una fuente de corriente controlada cuya salida es la corriente, $d\xi_j/dt$, que atraviesa la fuente de tensión $V_{2,j}$. La tensión de esta fuente, que actúa de amperímetro, es nula con el fin de no perturbar el modelo en red de la Ecuación (2.19). La corriente de F_j se integra usando un condensador de capacidad $C_j=1F$; de esta manera la tensión en bornes de este condensador, $V_{C,j}=C_j^{-1} \cdot \int (d\xi_j/dt)dt$, es simplemente la variable ξ_j . La resistencia de valor muy elevado, R_{INF} , es un requisito de continuidad eléctrica impuesto por el código de simulación. Una vez que la tensión se ha determinado en el condensador para cada átomo, se utilizan dos fuentes de tensión controladas para implementar los términos $'(1/m) \cdot (2\kappa_1+\kappa_2) \cdot \xi_j'$ y $'(1/m) \cdot \kappa_1 \cdot (\xi_{j-1}+\xi_{j+1})'$, $E_{1,j}$ y $E_{2,j}$, respectivamente. El último término, $'(1/m) \cdot b \cdot \sin(2\pi(v_B \cdot t+c \cdot j+\xi_j))'$, se implementa también mediante una fuente de tensión controlada, $E_{3,j}$, y requiere las variables ξ_j y tiempo, t . La primera variable se obtiene del circuito auxiliar, Figura 4.1-b, mientras que la variable tiempo se obtienen de un nuevo circuito auxiliar, Figura 4.1-c. Una fuente de tensión simple, cuya salida aumenta linealmente con el tiempo, proporciona la variable tiempo, t , como la

tensión en los extremos de la resistencia R_2 . De este modo, los circuitos de las Figuras 4.1-a y 4.1-b constituyen el modelo en red para cada átomo; un total de P circuitos como estos más el circuito variable de tiempo completan la red del modelo de FKT.

Otro circuito auxiliar proporciona la fuerza de fricción total, Figura 4.1-d. Para ello se conectan en serie un total de P fuentes de tensión controladas, $E_{4,j}$, proporcionando cada una de ellas el valor $m \cdot (\kappa_2/m) \cdot \xi_j$, y una resistencia, R_{UNI} . Así, $f_K(t)$ es la tensión en los terminales de R_{UNI} .

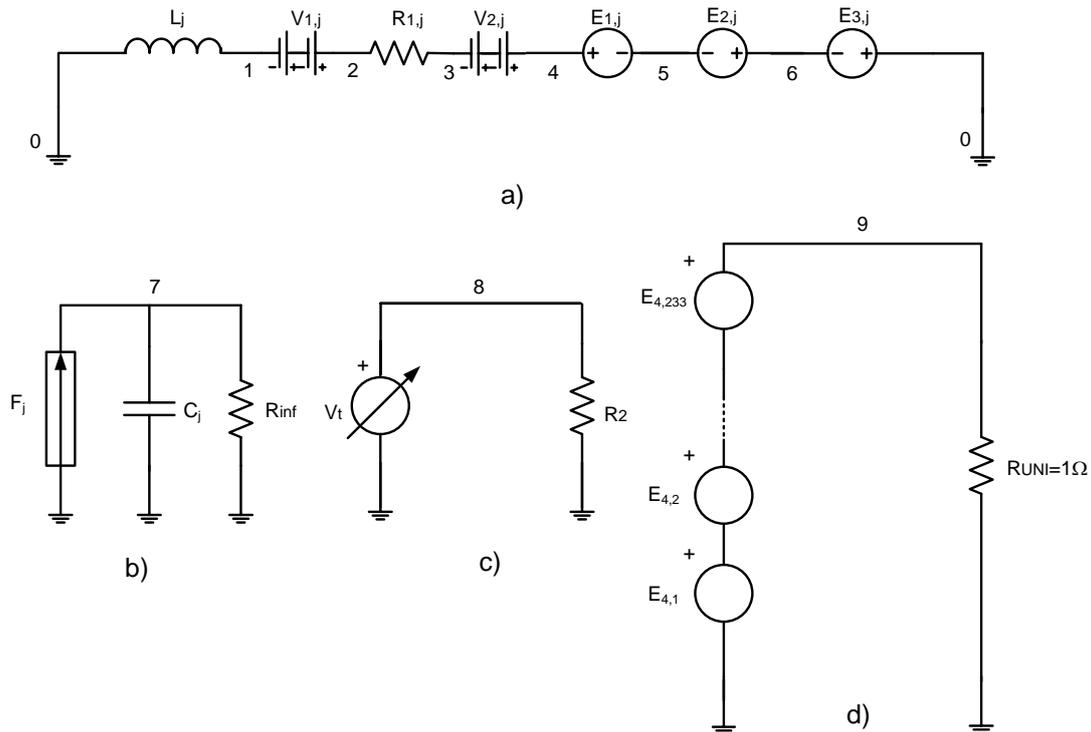


Figura 4.1 Modelo en red de un átomo. a) Circuito principal, b) circuito auxiliar para obtener ξ_j , c) circuito auxiliar para obtener el tiempo, y d) circuito para obtener la fuerza de fricción instantánea

Las ecuaciones $\xi_{1-1}=\xi_P$ y $\xi_{P+1}=\xi_1$ se introducen en la especificación de las fuentes de tensión controladas $E_{4,1}$ y $E_{4,P}$ para implementar las condiciones de contorno. El modelo en red completo se ejecuta ahora en un ordenador personal cuyo microprocesador es el Core (TM) 2 Duo de Intel, utilizando el código PSpice (Nagel 1975; Kielkowski 1994; Vladimirescu 1994). Hay dos maneras de construir el modelo en red en PSpice: como un archivo de texto o, directamente, como una red simbólica mediante la opción esquemática. En ambos casos, son necesarias muy pocas reglas ya que el modelo contiene muy pocos dispositivos eléctricos diferentes.

4.2 MODELOS EN RED PARA SIMULACIÓN DEL MICROSCOPIO DE FUERZA ATÓMICA

El modelo en red básico está relacionado con el Sistema de Ecuaciones (2.31) a la que hay que añadir las condiciones iniciales. Para el problema considerado, se establece la siguiente equivalencia: x_t (desplazamiento de la puntera en la dirección x) \equiv q (carga eléctrica en la red) o dx_t/dt (velocidad de la puntera en la dirección x) \equiv $dq/dt = i$ (corriente eléctrica en la red). En las otras direcciones se aplican equivalencias similares. Ahora, cada término de la primera ecuación del Sistema de Ecuaciones (2.31) se considera como una tensión en un componente eléctrico cuya ecuación característica o constitutiva se define mediante una expresión matemática. El término lineal de la primera ecuación del Sistema de Ecuaciones (2.31) ' (d^2x_t/dt^2) ' está asociado a una bobina con $L=1H$. El mismo tipo de elemento eléctrico se utiliza para las otras dos direcciones. Los términos no lineales no pueden implementarse directamente, y se requiere el uso de fuentes de tensión controladas por tensión, fuentes de corriente controladas por intensidad, o bien circuitos auxiliares.

El término ' x_t ' se determina mediante la integración de la corriente en el modelo en red, dx_t/dt . Para este propósito se implementa un circuito auxiliar, Figura 4.2-b en los modelos de FFM actuando sobre una muestra de NaF y de SFM sobre MoS₂; Figura 4.3-c en el modelo de AFM sobre grafito; y Figura 4.4-c en el de AFM sobre xenón. Los términos y_t y z_t se implementan en modelos en red similares. F_{1x} es una fuente de corriente controlada por la corriente que atraviesa la fuente de tensión V_x , dx_t/dt , y cuya salida es esta misma corriente. La corriente de F_{1x} se integra usando un condensador con $C_{x1}=C_x=1F$, de esta manera la tensión a través de este condensador, $V_{Cx1}=C_{x1}^{-1} \cdot \int (dx_t/dt)dt$, es simplemente la variable x_t . La resistencia de valor muy alto, R_{INF} , es un requisito de continuidad eléctrica impuesto por el software de simulación. Una vez que esta variable ha sido determinada, se utiliza una fuente de tensión controlada para implementar el término del modelo ' $k_x \cdot (x_M - x_t)$ ', es decir, E_2 en los modelos de FFM sobre NaF y SFM sobre MoS₂, y E_{Tx1} en los de AFM sobre muestras de grafito y de xenón. La variable x_M se determina mediante el producto de la velocidad del microscopio por el tiempo, que a su vez se implementa mediante un circuito auxiliar, Figura 4.2-c.

El término $\partial V/\partial x_t$ también se implementa mediante una pareja de fuentes de tensión controlada, E_1 y E_{1a} , tanto para el modelo de FFM sobre NaF como para el de SFM sobre MoS_2 . En el modelo de AFM sobre grafito o xenón, la fuente de tensión controlada es E_{Tx2} .

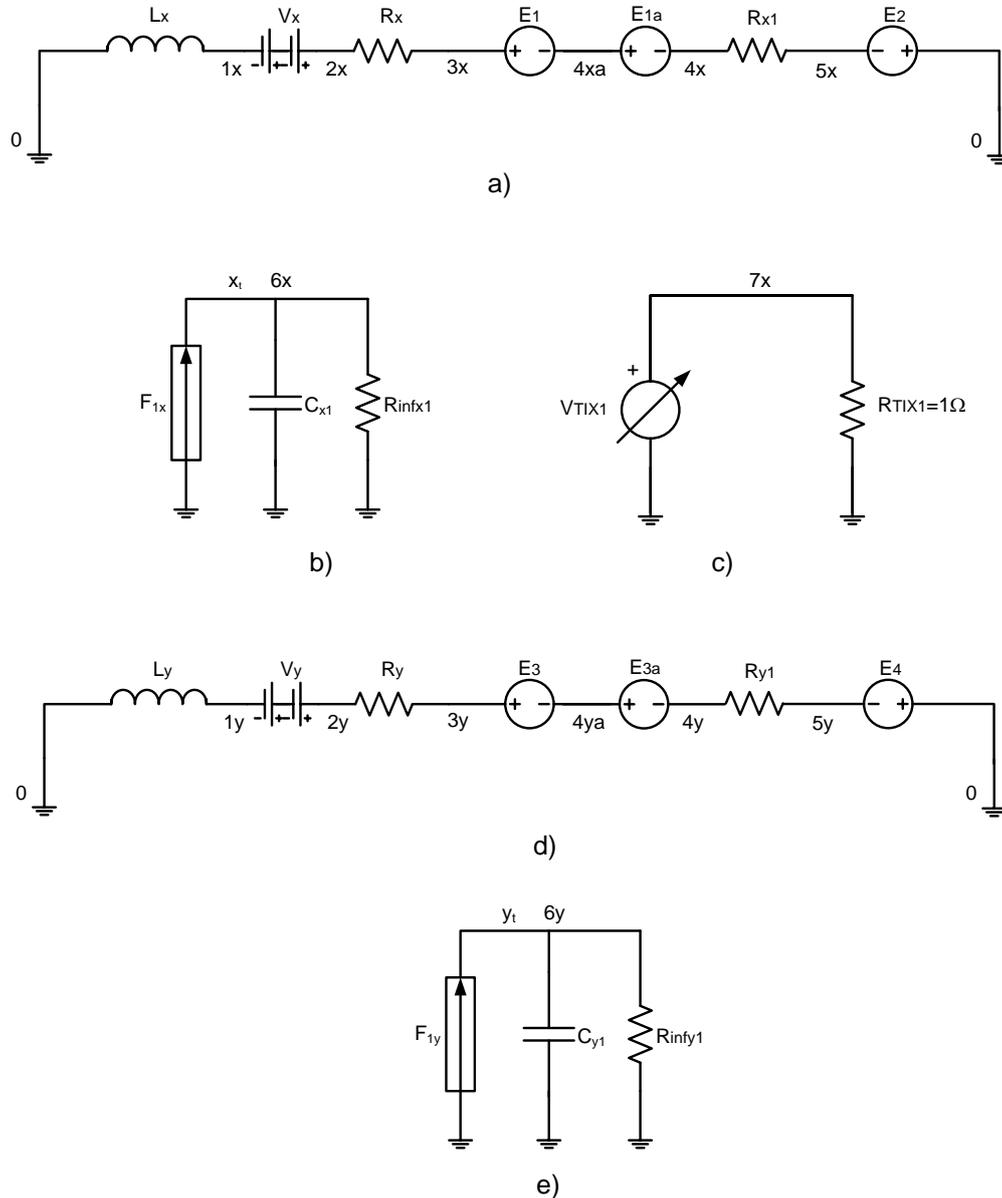


Figura 4.2 Modelo en red para las direcciones x e y de un FFM sobre NaF, de un SFM sobre MoS_2 y de un SFM sobre grafito pirolítico altamente orientado. a) y d) Circuitos principales, b) y e) circuitos auxiliares integradores para la obtención de x_t e y_t , y c) circuito auxiliar para la obtención del tiempo

Cuando se usa el potencial de Lennard-Jones, se hace necesario un circuito auxiliar, Figura 4.3-b, para el modelo de AFM sobre grafito; y otro similar, Figura 4.4.-b, del mismo microscopio sobre xenón. Los términos $\partial V/\partial y_t$ y $\partial V/\partial z_t$ se implementan de

forma similar. El último término de la primera ecuación del Sistema de Ecuaciones (2.31) se implementa mediante una resistencia de valor c_x en los modelos de FFM sobre NaF y de SFM sobre MoS_2 . El último término de la segunda y la tercera ecuación del Sistema de Ecuaciones (2.31) se implementa de forma similar.

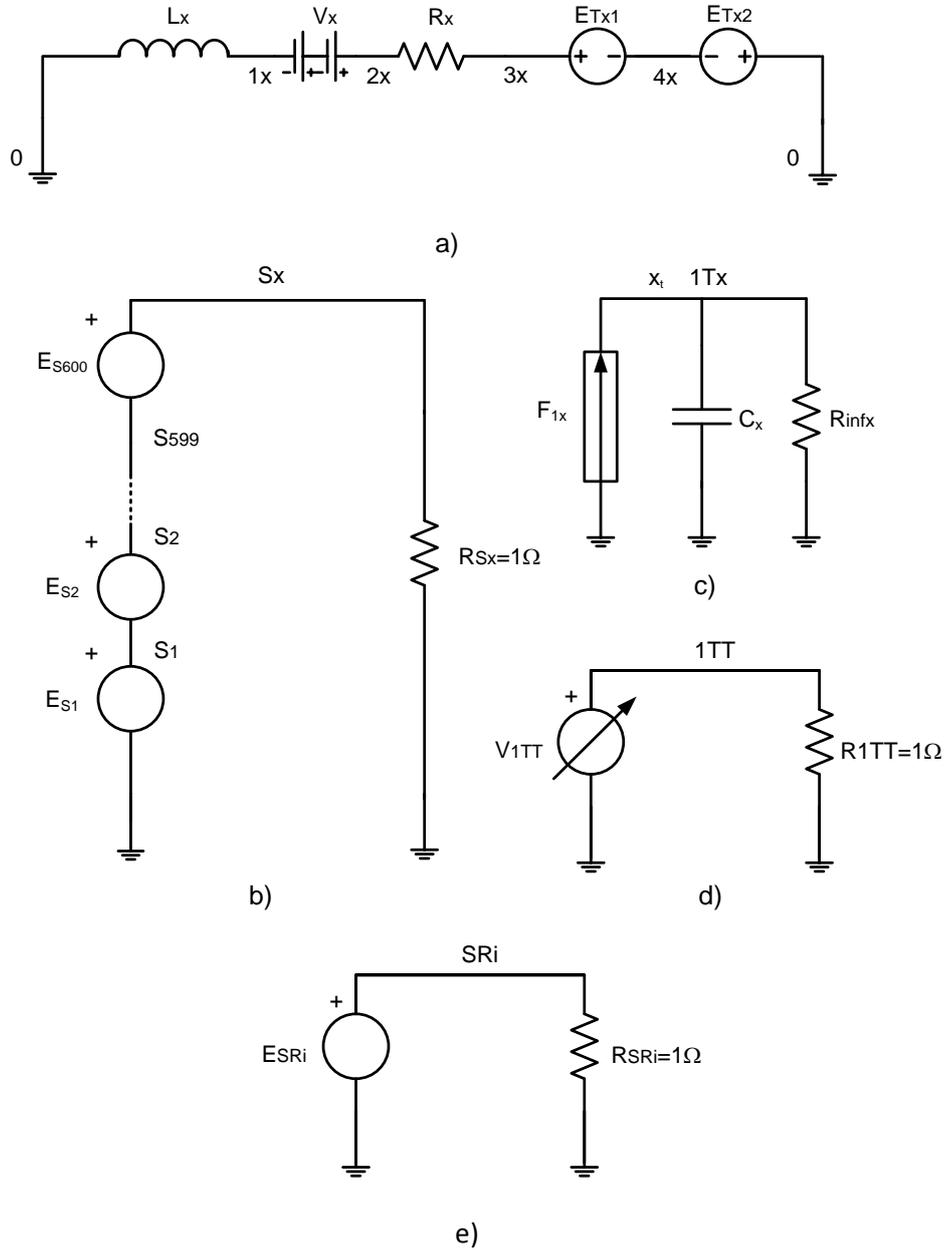


Figura 4.3 Modelo en red para la dirección x de un AFM sobre grafito. a) Circuito principal, b) circuito auxiliar para la obtención de la fuerza procedente del potencial de Lennard-Jones, c) circuito auxiliar integrador para la obtención de x_t , d) circuito auxiliar para la obtención del tiempo, y e) circuito auxiliar para la obtención del cuadrado de la distancia entre la puntera del AFM y el átomo de carbono

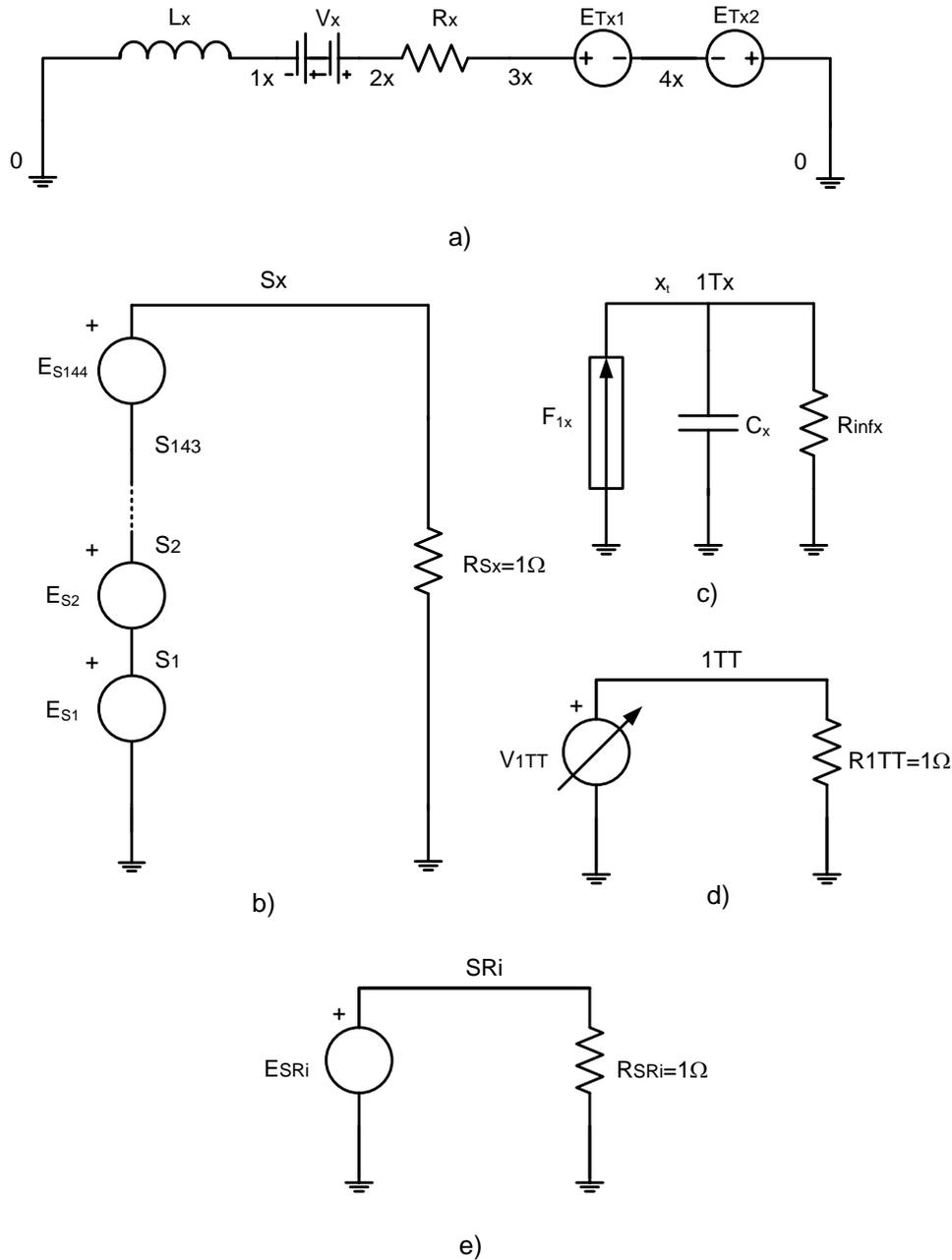


Figura 4.4 Modelo en red para la dirección x de un AFM sobre xenón. a) Circuito principal, b) circuito auxiliar que obtiene la fuerza procedente del potencial de Lennard-Jones, c) circuito auxiliar integrador para la obtención de x_t , d) circuito auxiliar para la obtención del tiempo y e) circuito auxiliar para la obtención del cuadrado de la distancia entre la puntera del AFM y el átomo de xenón

Las ecuaciones $x_t=z_t=0$, $y_t=y(\text{coordenada})$ al inicio de la línea de escaneo, y $dx_t/dt=dy_t/dt=dz_t/dt=0$ se introducen como condiciones iniciales del condensador y de la bobina respectivamente. El modelo en red completo se ejecuta en un procesador Duo Core, empleando el código propio de PSpice.

4.3 MODELO EN RED PARA SIMULACIÓN DEL MODELO DE K Aidanovsky-Khaikin

El modelo en red básico está relacionado con la Ecuación (2.35) a la que hay que añadir las condiciones iniciales. Para este problema, se establece la siguiente equivalencia: X (desplazamiento del bloque) $\equiv q$ (carga eléctrica en la red) o $dX/d\tau$ (velocidad del bloque) $\equiv dq/dt = i$ (corriente eléctrica en la red). Ahora, cada término de la Ecuación (2.35) se considera como una tensión en un componente eléctrico cuya ecuación característica se define mediante la expresión matemática de este término.

El término lineal de la Ecuación (2.35) ' $(d^2X/d\tau^2)$ ' está asociado a una bobina con $L=1H$.

Los términos no lineales no pueden implementarse directamente y requieren el uso de fuentes de tensión controladas por tensión, fuentes de corriente controladas por corriente, o bien circuitos auxiliares.

El término ' X ' se determina mediante la integración de la corriente en el modelo en red, $dX/d\tau$. Para este propósito se implementa un circuito auxiliar, Figura 4.5-b. F es una fuente de corriente controlada por la corriente que atraviesa la fuente de tensión V_1 , $dX/d\tau$, y cuya salida es esta misma corriente. La corriente de F se integra usando un condensador con $C=1F$, de esta manera, la tensión en bornes de este condensador, $V_C=C^{-1}\int(dX/d\tau)d\tau$, es simplemente la variable X . La resistencia de valor muy alto, R_{INF} , es un requisito de continuidad eléctrica. Una vez que esta variable ha sido determinada, se utiliza una fuente de tensión, E_1 , para implementar el penúltimo término; ésta está controlada por la tensión en bornes del condensador, $V(5,0)$, que implementa el término ' X '. El último término se implementa mediante una fuente de tensión, E_2 , controlada por la fuerza de rozamiento que, a su vez, es implementada por una fuente de tensión, E_{21} , controlada por la corriente que circula por la bobina, L_1 . Esta corriente, $dX/d\tau$, que atraviesa la fuente de tensión, V_1 , del circuito principal, se mide en dicho elemento.

Las condiciones complementarias de las fases de stick y slip se implementan mediante dos interruptores, S_1 y S_2 , controlados por tensión. S_1 se cierra durante la fase de slip. Por el contrario, si S_1 se abre, S_2 obligatoriamente se cierra, y se pasa a la fase de stick. La tensión que controla los interruptores procede de un circuito, Figura 4.5-c, que

transforma la fase del modelo en una tensión. De este modo, los circuitos de la Figura 4.5 forman el modelo en red.

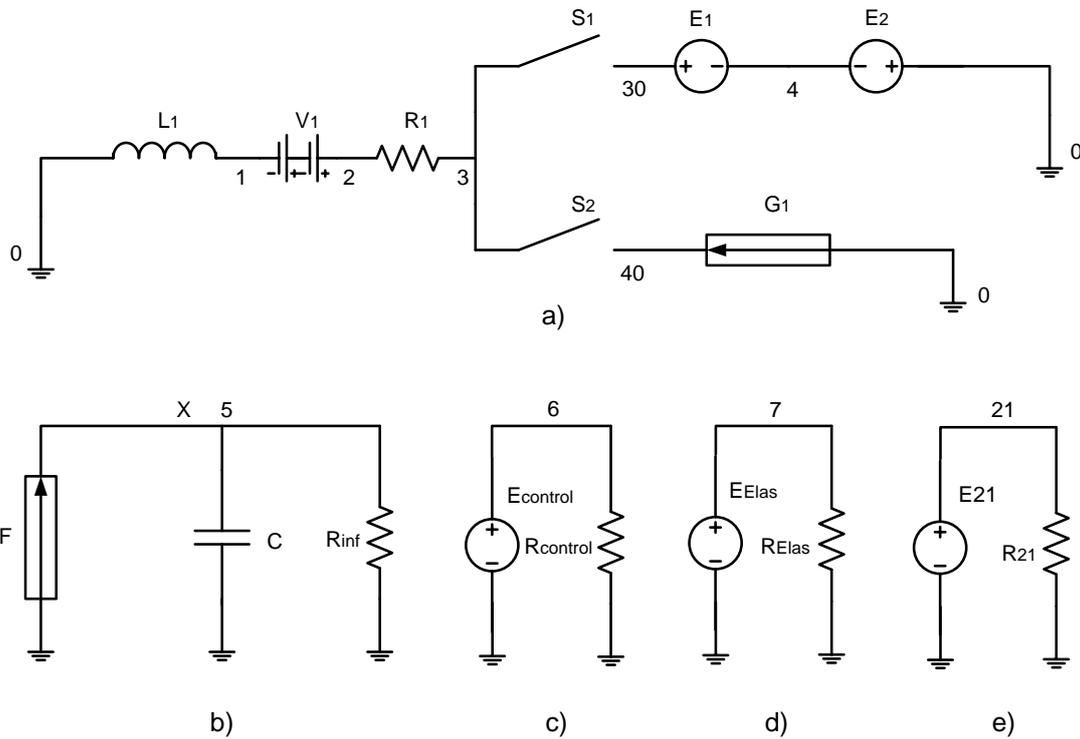


Figura 4.5 Modelo en red para la dirección X en el modelo de Kaidanovsky-Khaikin. a) Circuito principal, b) circuito auxiliar integrador que obtiene X, c) circuito auxiliar para controlar los interruptores, y d) circuito auxiliar para controlar la transición entre las fases de stick y slip

La Ecuación (2.36) se implementa mediante las condiciones iniciales del condensador y la bobina. El modelo en red completo se ejecuta en un procesador Duo Core, empleando el código propio de PSpice.

4.4 MODELO EN RED PARA SIMULACIÓN DEL MODELO DE BURRIDGE-KNOPOFF

El modelo en red básico está relacionado con la Ecuación (2.40) a la que hay que añadir las condiciones iniciales. De forma análoga a los casos anteriores, se establece la siguiente equivalencia: X_1 (desplazamiento del bloque 1) $\equiv q_1$ (carga eléctrica en la red) y X_2 (desplazamiento del bloque 2) $\equiv q_2$ (carga eléctrica en la red) o dX_1/dt (velocidad del bloque 1) $\equiv dq_1/dt = i_1$ (corriente eléctrica en la red) y dX_2/dt (velocidad del bloque 2) $\equiv dq_2/dt = i_2$ (corriente eléctrica en la red). Ahora, cada término de la Ecuación (2.40) se considera como una tensión en un componente eléctrico cuya ecuación constitutiva se define mediante la expresión matemática de este término.

Los términos lineales de la Ecuación (2.40) ' $(d^2X_1/d\tau^2)$ ' y ' $(d^2X_2/d\tau^2)$ ' están asociados a bobinas con inductancia unidad. Los términos no lineales, como en los casos anteriores, no pueden implementarse directamente, y se requiere el uso de fuentes de tensión controladas por tensión, fuentes de corriente controladas por corriente, o bien de circuitos auxiliares.

Los términos ' X_1 ' y ' X_2 ' se determinan mediante la integración de las corrientes en el modelo en red, $dX_1/d\tau$ y $dX_2/d\tau$. Para este propósito se implementan dos circuitos auxiliares, Figuras 4.6-b y 4.6-g. F_1 y F_{1A} son unas fuentes de corriente controladas por las corrientes $dX_1/d\tau$ y $dX_2/d\tau$, que atraviesan las fuentes de tensión V_1 y V_{1A} y cuyas salidas son estas mismas corrientes, respectivamente. Las corrientes generadas por F_1 y F_{1A} se integran usando condensadores con $C_1=C_{1A}=1F$, de esta manera, las tensiones en bornes de estos condensadores, $V_{C1}=C_1^{-1}\int(dX_1/d\tau)d\tau$ y $V_{C1A}=C_{1A}^{-1}\int(dX_2/d\tau)d\tau$, son simplemente las variables X_1 y X_2 respectivamente. Las resistencias de valor muy alto, R_{INF1} y R_{INF1A} , son un requisito de continuidad eléctrica. Una vez que estas variables han sido determinadas, se utiliza un par de fuentes de tensión, E_1 y E_{1A} , para implementar los penúltimos términos. Estas fuentes están controladas por las tensiones en bornes de los condensadores, $V(5,0)$ y $V(5A,0)$, que implementan los términos ' X_1 ' y ' X_2 '. Los dos últimos términos se implementan mediante dos fuentes de tensión, E_2 y E_{2A} , controladas por las fuerzas de rozamiento. Estas fuerzas se implementan, a su vez, por un par de fuentes de tensión, E_{21} y E_{21A} , controladas por las corrientes que circulan por las dos bobinas, L_1 y L_{1A} . Estas corrientes, $dX_1/d\tau$ y $dX_2/d\tau$, que atraviesan las fuentes de tensión V_1 y V_{1A} de los circuitos principales, se miden en dichos elementos.

Las condiciones complementarias de las fases de stick y slip se implementan mediante sendas parejas de interruptores, S_1 y S_2 para el bloque 1 y S_{1A} y S_{2A} para el bloque 2, controlados por tensión. S_1 , para el bloque 1, o S_{1A} , para el bloque 2, se cierran durante la fase de stick. Por el contrario, si S_1 y/o S_{1A} se abren, S_2 y/o S_{2A} obligatoriamente se cierran, pasándose a la fase de slip. Las tensiones que controlan los interruptores proceden de dos circuitos, Figuras 4.6-c y 4.6-h, que asocian las fases del modelo a tensiones concretas. De este modo, los circuitos de la Figura 4.6 forman el modelo en red.

La Ecuación (2.40) se implementa mediante las condiciones iniciales del condensador y la bobina. El modelo en red completo se ejecuta en un procesador Duo Core, empleando el código propio de PSpice.

4.5 MODELO EN RED PARA SIMULACIÓN DE UN MECANISMO DE FRENO

El modelo en red básico está relacionado con el Sistema de Ecuaciones (2.46) a la que hay que añadir las condiciones iniciales. Para este problema se establece la siguiente equivalencia: x (desplazamiento horizontal del bloque) $\equiv q_1$ (carga eléctrica en la red), y (desplazamiento vertical del bloque) $\equiv q_2$ (carga eléctrica en la red), o $dx/d\tau$ (velocidad horizontal del bloque) $\equiv dq_1/dt = i_1$ (corriente eléctrica en la red) y $dy/d\tau$ (velocidad vertical del bloque) $\equiv dq_2/dt = i_2$ (corriente eléctrica en la red). Ahora, cada término del Sistema de Ecuaciones (2.46) se asocia a la tensión de un componente eléctrico cuya ecuación característica se define mediante la expresión matemática correspondiente.

Los términos lineales del Sistema de Ecuaciones (2.46) ' $d^2x/d\tau^2$ ' y ' $d^2y/d\tau^2$ ' están asociados a bobinas con $L_1=1H$ y $L_{1A}=\xi=J/mL^2$. Los términos no lineales no pueden implementarse directamente, y requieren el uso de fuentes de tensión controladas por tensión, fuentes de corriente controladas por corriente, o bien circuitos auxiliares.

Los términos ' x ' e ' y ' se determinan mediante la integración de las corrientes en el modelo en red, $dx/d\tau$ y $dy/d\tau$. Para este propósito se implementan dos circuitos auxiliares, Figuras 4.7-b y 4.7-h. F_1 y F_{1A} son fuentes de corriente controladas por las corrientes, $dx/d\tau$ y $dy/d\tau$, que atraviesan, a su vez, las fuentes de tensión V_1 y V_{1A} respectivamente, y cuyas salidas son estas mismas corrientes.

Las corrientes generadas por F_1 y F_{1A} se integran usando condensadores de capacidad unidad; de esta manera, las tensiones en los mismos, $V_{C1}=C_1^{-1}\int(dx/d\tau)d\tau$ y $V_{C1A}=C_{1A}^{-1}\int(dy/d\tau)d\tau$, son simplemente las variables x e y respectivamente.

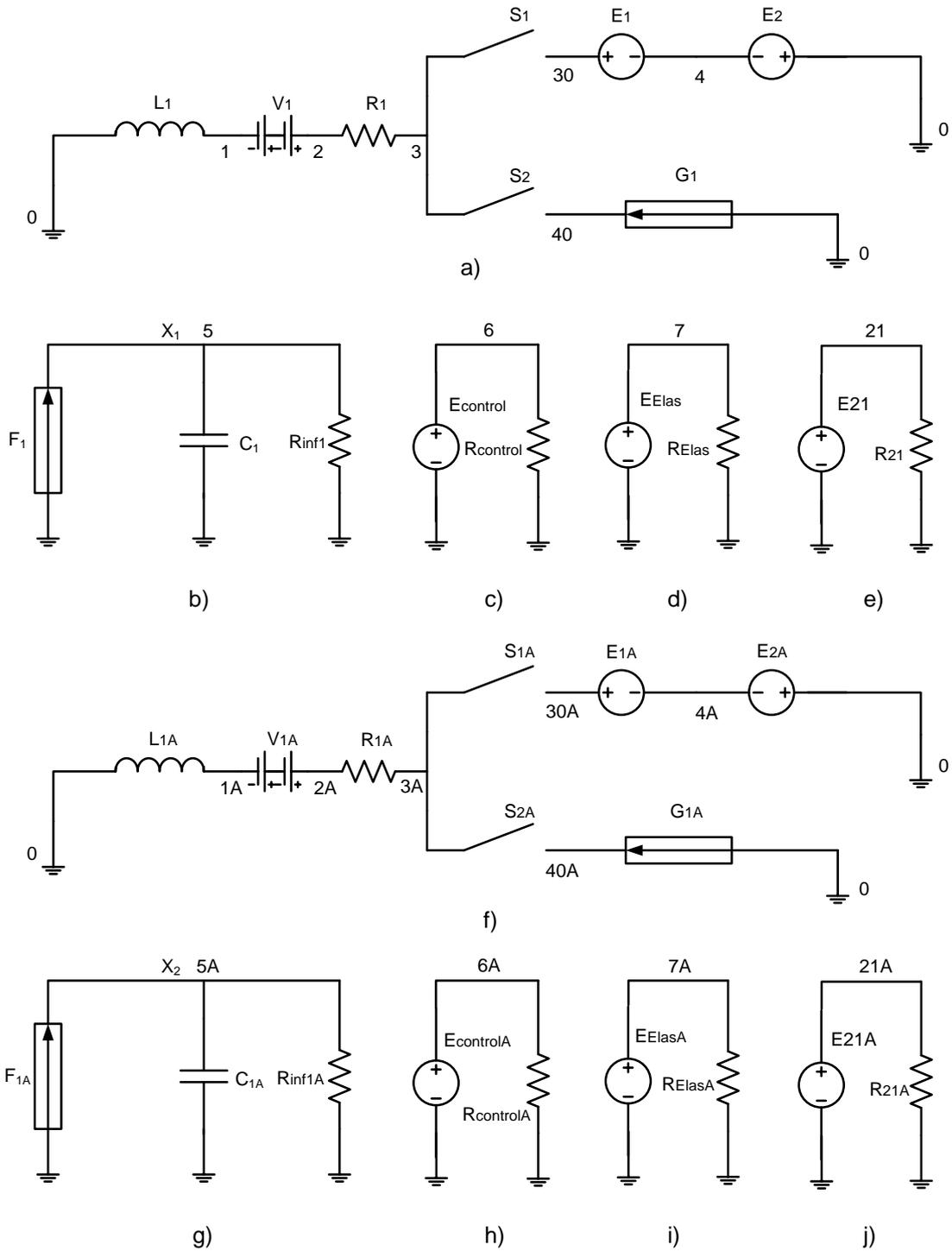


Figura 4.6 Modelo en red para las direcciones X_1 y X_2 en el modelo de Burridge-Knopoff . a) y f) Circuitos principales, b) y g) circuitos auxiliares integradores que obtienen X_1 y X_2 , c) y h) circuitos auxiliares para controlar los interruptores, d) e i) circuitos auxiliares para controlar la transición entre la fase de stick y la de slip; y e) y j) circuitos auxiliares para implementar E_2 y E_{2A} respectivamente

Una vez que estas variables han sido obtenidas, se utiliza un par de fuentes de tensión, E_1 y E_{1A} , para implementar el penúltimo término de la primera ecuación del Sistema de Ecuaciones (2.46) y el último término de la segunda ecuación del mismo sistema. Estas

fuentes están controladas por las tensiones en bornes de los condensadores, $V(5,0)$ y $V(5A,0)$, que implementan los términos 'x' e 'y'. El último término de la segunda ecuación del sistema se implementa mediante E_2 , controlada por la fuerza de rozamiento. Esta fuerza se implementa por una fuente de tensión, E_{FR} , controlada por la corriente que circula por la bobina, L_1 , y por la tensión en el condensador C_{1A} , $V(5A,0)$. La corriente en la bobina L_1 , dx/dt , que atraviesa la fuente de tensión V_1 del circuito principal, se mide en dicho elemento.

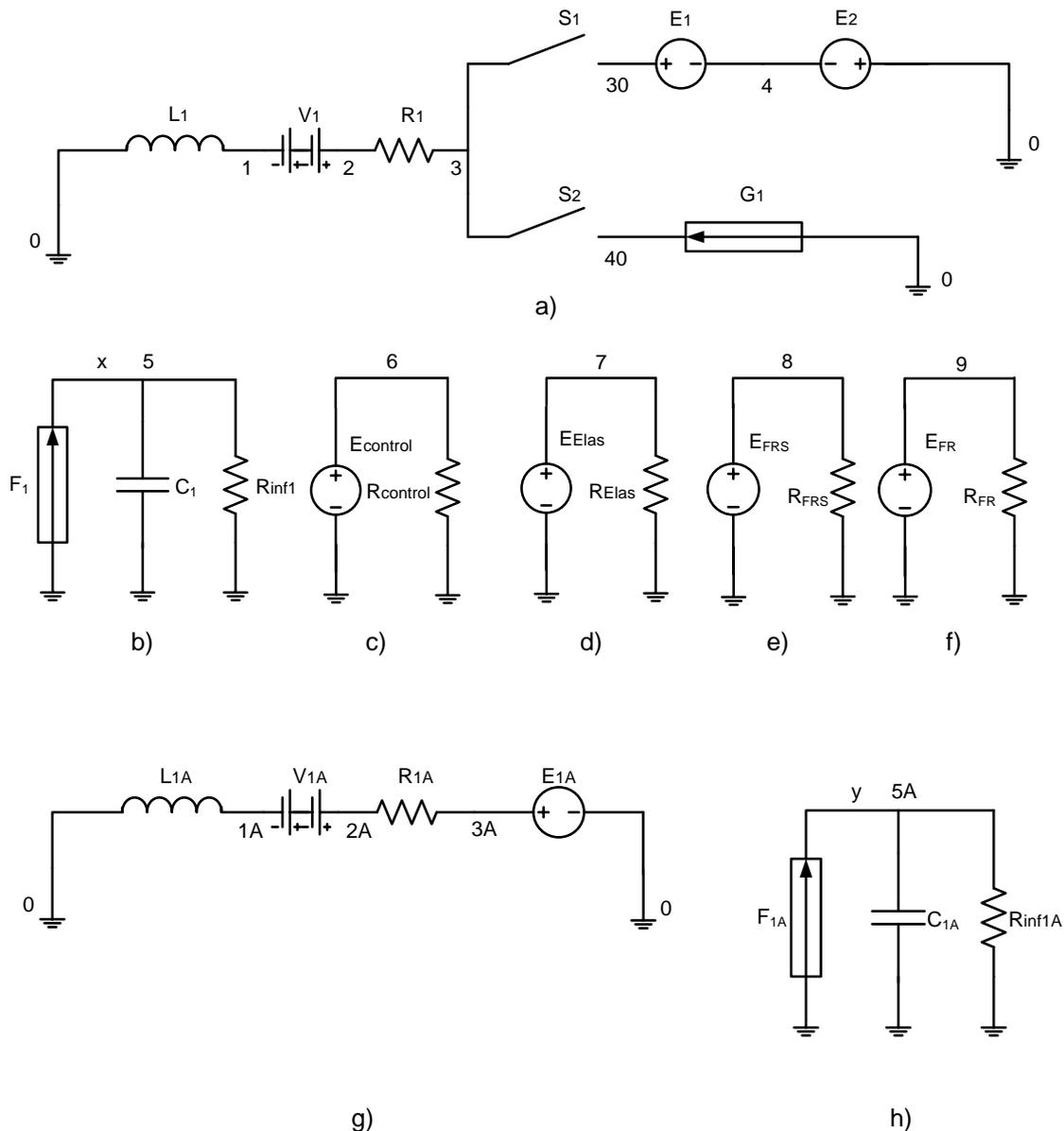


Figura 4.7 Modelo en red para las direcciones x e y en un mecanismo de freno. a) y g) Circuitos principales, b) y h) circuitos auxiliares integradores que obtienen x e y, c) circuitos auxiliares para controlar los interruptores, d) circuito auxiliar para controlar la transición entre la fase de stick y la de slip, y e) y f) circuitos auxiliares para conseguir E_2

Las condiciones complementarias de las fases de stick y slip se implementan mediante dos interruptores, S_1 y S_2 , controlados por tensión. S_1 se cierra durante la fase de slip. Por el contrario, si S_1 se abre, S_2 obligatoriamente se cierra, y se tiene la fase de stick. La tensión que controla los interruptores procede de un circuito, Figura 4.7-c, que asocia tensiones concretas a cada fase del modelo. Con todo, el modelo en red está constituido por los circuitos de la Figura 4.7.

El Sistema de Ecuaciones (2.46) se implementa mediante las condiciones iniciales del condensador y la bobina. El modelo en red completo se ejecuta en un procesador Duo Core, empleando el código propio de PSpice.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- González-Fernández, C. F. (2001). Heat transfer and the network simulation method. J. Horno (Ed.), Research Signpost, Trivandrum, India, p. 30.
- Kielkowski, R. (1994). Inside SPICE. McGraw-Hill, New York, USA.
- Nagel, L. W. (1975). SPICE2: A computer program to simulate semiconductor circuits. Electronic Research Laboratory. Universidad de California, Berkeley, USA.
- Vladimirescu, A. (1994). The SPICE Book. John Wiley and Sons, New York, USA.

CAPÍTULO 5

APLICACIONES DE LOS MODELOS DE FRICCIÓN

Se presentan cinco aplicaciones del MESIR a los procesos de fricción recogidos en el apartado 2.4. Para estos procesos se dispone de resultados parciales obtenidos por otros autores y resultados experimentales propios con los que es posible verificar los del método de redes. Además, se analizará el efecto de los parámetros en el comportamiento de los sistemas propuestos.

5.1 SIMULACIÓN DE FRICCIÓN A ESCALA MICROSCÓPICA: MODELO FRENKEL-KONTOROVA-TOMLINSON

Todos los parámetros se expresan en forma adimensional. La unidad de longitud es λ (m) y la unidad de tiempo es $\sqrt{m/k_1}$ (s). El resto de unidades se puede expresar en términos de estas unidades básicas.

El problema estático viene caracterizado por la fuerza máxima de fricción, relacionada con la amplitud de la fuerza de interacción, b , y la rigidez entre átomos de la superficie y del sustrato, κ_2 . Estos parámetros determinan: i) el punto de ruptura de la analiticidad, y ii) la fuerza de fricción estática nula. Con objeto de verificar el modelo con los resultados de Weiss y Elmer (Weiss y Elmer 1996) se van a utilizar los mismos valores de los parámetros: $\kappa_2/m=1$, $\beta/m=0,1$ y $\gamma/m=0$.

Para valores de la fuerza de interacción que no permiten utilizar un método iterativo, se propone, en esta memoria un método alternativo consistente en dejar vibrar los átomos un tiempo hasta que alcanzan el equilibrio. Esta hipótesis está representada por la Ecuación (2.24). La solución de esta ecuación conduce a un término transitorio y un término constante. Este último coincide con la solución del problema estático de fricción, Figura 5.1.

El método iterativo propuesto se puede aplicar para valores de b/m inferiores a 0,34, Figura 5.2-a. Para valores mayores que 0,34 se usa un modelo basado en el método de simulación por redes ejecutado en PSpice.

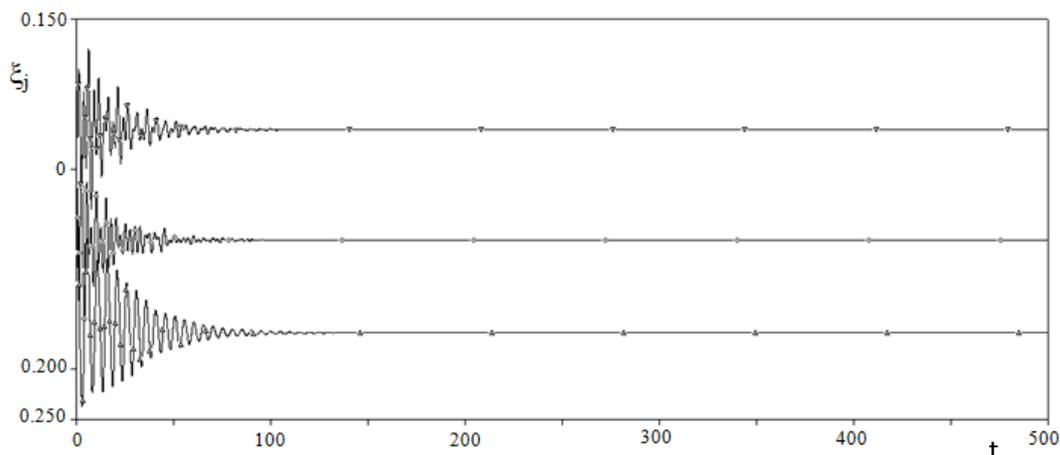


Figura 5.1 Desplazamiento relativo para el 1º(\diamond), 2º(∇) y 3º(Δ) átomo ($b/m=0,5$ y $x_B=0$)

Las Figuras 5.2-b y 5.2-c muestran que en los desplazamientos relativos para valores de b/m inferiores a 0,413, la curva no presenta discontinuidades fuertes, ruptura de analiticidad. Sin embargo, para $b/m=0,5$ la discontinuidad es clara, Figura 5.3.

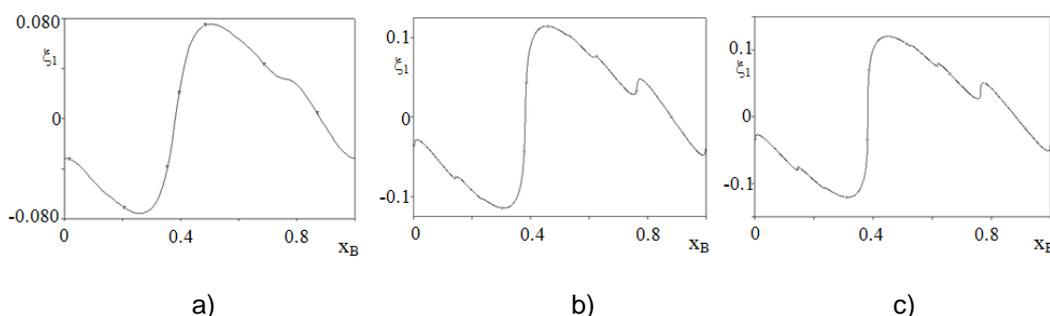


Figura 5.2 Desplazamiento relativo del átomo 1 en función del desplazamiento del cuerpo, a) $b/m=0,3$; b) $b/m=0,4$ y c) $b/m=0,413$

La Figura 5.4 muestra nuestros resultados de fuerza de fricción frente al desplazamiento del bloque para valores de b/m comprendidos entre 0,4 y 0,5. Éstos coinciden con los obtenidos por Weiss y Elmer (Weiss y Elmer 1996), aproximando la solución mediante una función envolvente.

Cuando b/m es menor que 0,413 se observa un período de 0,0043, aproximadamente $1/233$, que es la distancia entre dos átomos vecinos del bloque en movimiento. De esta manera, los desplazamientos relativos de los átomos con respecto a sus posiciones de equilibrio son los mismos para intervalos de desplazamiento del cuerpo de $1/233$; sin embargo, los átomos vecinos tienen una posición relativa diferente, aspecto que se justifica por la distinta posición de cada uno en el bloque.

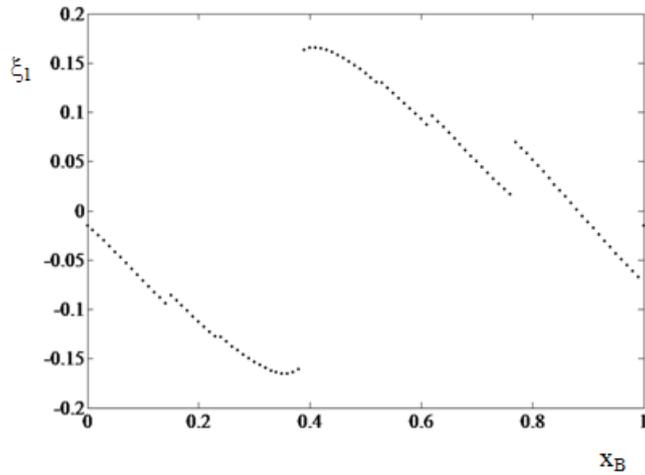


Figura 5.3 Desplazamiento relativo del átomo 1 en función del desplazamiento del cuerpo ($b/m=0,5$)

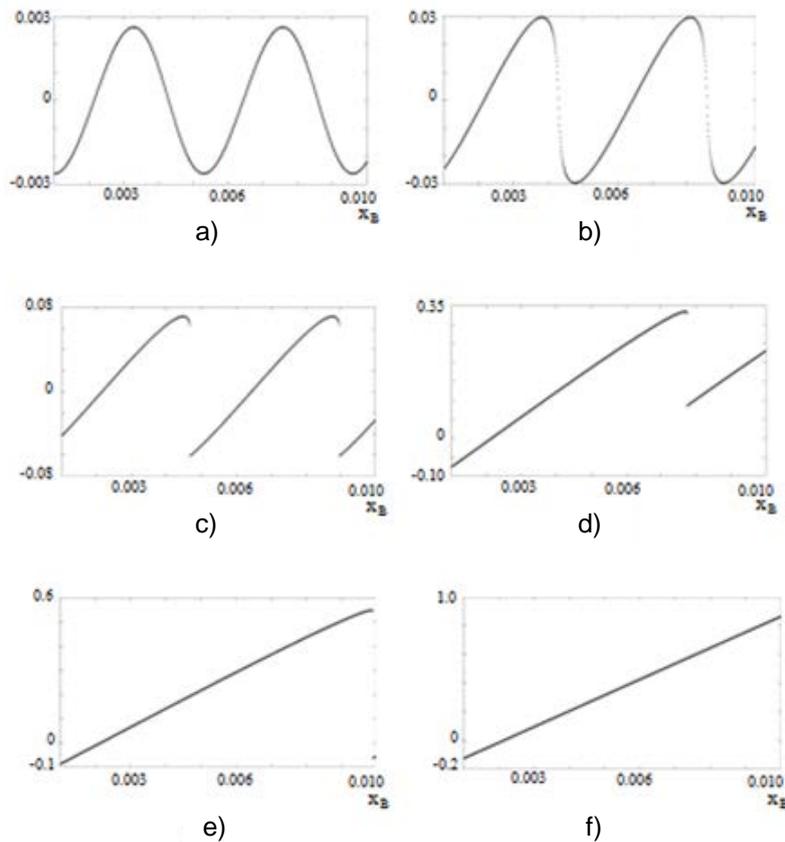


Figura 5.4 Fuerza de fricción estática frente a desplazamiento del cuerpo
a) $b/m=0,4$; b) $b/m=0,413$; c) $b/m=0,42$; d) $b/m=0,44$; e) $b/m=0,45$ y f) $b/m=0,5$

Los valores de la fuerza estática obtenida por el presente método son aproximadamente la mitad de los obtenidos por Weiss y Elmer (Weiss y Elmer 1996), relación más fácilmente verificable para b/m próximo a 0,5, Figura 5.5. Esto se debe a que estos autores han aproximado la fuerza de fricción para un valor de la constante de red igual al número áureo a partir del contorno de las curvas de la fuerza fricción para otros

valores de esta constante. Además, para valores de b/m inferiores a 0,4 el valor de la fuerza de fricción estática es despreciable, resultado que también coincide con el obtenido por Weiss y Elmer (Weiss y Elmer 1996).

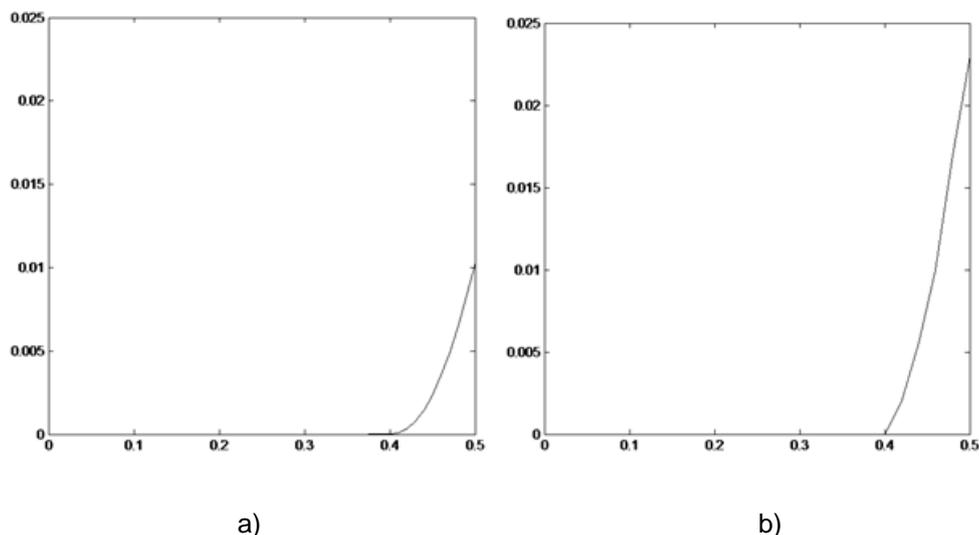


Figura 5.5 Fuerza de fricción estática frente a la amplitud de la fuerza de interacción: a) Método de simulación en red; b) Weiss y Elmer (calculado como una envolvente)

La Figura 5.6 muestra los resultados numéricos del valor crítico de amplitud de la fuerza de interacción, b_c^S , en función de la rigidez entre átomos de la superficie y el sustrato, κ_2 . Como se muestra, estos valores son muy próximos a los presentados por Weiss y Elmer (Weiss y Elmer 1996).

El problema dinámico se resuelve considerando los mismos parámetros que en el problema estático, añadiéndoles el valor de la velocidad del cuerpo. Estos parámetros determinan: i) el punto de ruptura de la analiticidad y ii) la fuerza de fricción. El modelo resuelve un sistema de ecuaciones constituido por la Ecuación (2.19) aplicada a cada átomo.

Con objeto de verificar nuestros resultados con los obtenidos por Weiss y Elmer (Weiss y Elmer 1997), se van a utilizar los mismos valores de los parámetros: $b/m=0,159$, $\kappa_2/m=1$, $\beta/m=0,1$ y $\gamma/m=0$. El valor de la velocidad que produce una fuerza de fricción apreciable es $v_B=0,5$. Tras un análisis preliminar, se observa que las transiciones se producen en el rango de valores de b/m comprendido entre 0,1 y 0,2, y en el rango de valores de κ_2/m comprendido entre 1,5 y 1,52. Las soluciones se pueden clasificar en cuatro categorías (Elmer 1998): i) soluciones estacionarias, que son simples soluciones estáticas ($v_B=0$), ii) soluciones periódicas representadas por una curva cerrada de uno o

más bucles en los diagramas de fase del átomo (estas soluciones están formadas por una o más frecuencias conmensurables), iii) soluciones cuasiperiódicas compuestas por al menos dos frecuencias inconmensurables, y iv) soluciones caóticas. Las transiciones entre estos tipos de solución no son bruscas sino que constituyen una mezcla de las categorías anteriores.

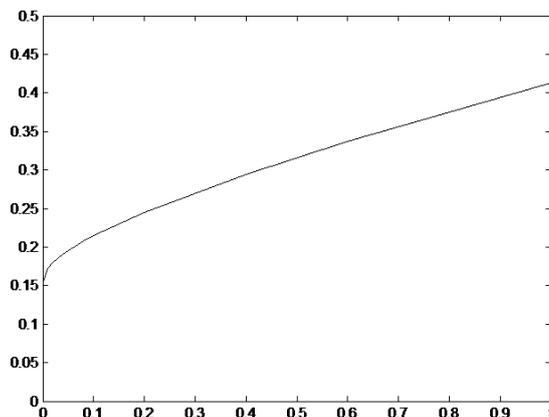


Figura 5.6 Valor crítico de la amplitud de la fuerza de interacción (b_c^S/m) frente a la rigidez entre los átomos de la superficie y el sustrato (κ_2/m)

La Figura 5.7 muestra la fuerza de fricción resultante en función de la velocidad del cuerpo obtenida por el método de simulación por redes. Estos resultados coinciden con los de Weiss y Elmer (Weiss y Elmer 1997), en particular en las posiciones de los picos de resonancia principal y paramétrica, a pesar de la suposición lineal de la función potencial asumida por Elmer, hipótesis que quedaría justificado asumir. La Tabla 5.1 es una comparación detallada para algunas velocidades específicas.

Las FFTs del desplazamiento relativo de los átomos, las FFTs de la fuerza de fricción y los diagramas de fase permiten caracterizar el tipo de movimiento. Estos resultados pueden ser proporcionados directamente por PSpice (Nagel 1975; Kielkowski 1994; Vladimirescu 1994), tras la simulación, sin necesidad de tratamiento adicional de datos.

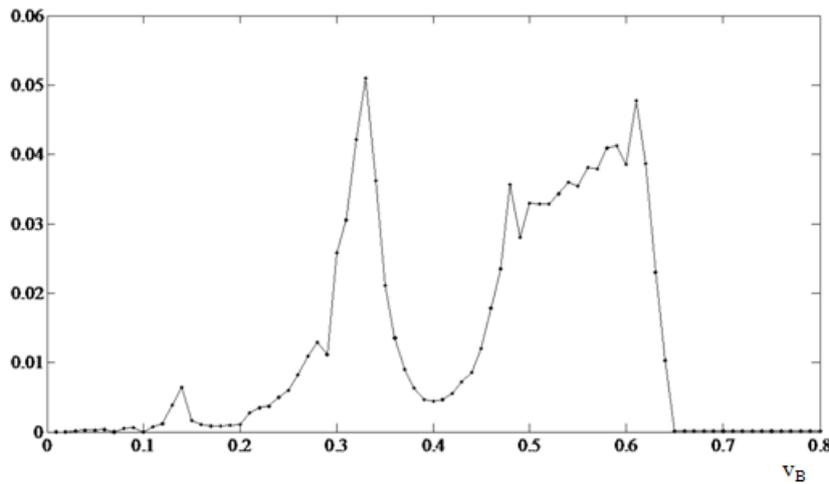


Figura 5.7 El valor medio de la fuerza de fricción en función de la velocidad del cuerpo mediante el método de simulación por redes

Tabla 5.1 Comparación del valor medio de la fuerza de fricción obtenido por diferentes métodos

Velocidad del cuerpo (v_B)	Fuerza de fricción (Weiss y Elmer, 1997)	Fuerza de fricción (NSM)
0,25	0,011	0,006
0,33	0,070	0,051
0,5	0,035	0,033
0,6	0,040	0,039
0,7	0	6,6e-5

Para $b/m=0,1$, la columna de la izquierda de la Figura 5.8 muestra las FFTs del desplazamiento relativo de un átomo para diferentes valores decrecientes de la rigidez, κ_2/m . Las soluciones son muy sensibles a pequeñas variaciones de este parámetro, particularmente cerca de los valores 1,518 y 1,515. Estos valores separan regiones con tipos diferentes de solución. La columna de la derecha de la figura muestra el diagrama de fase.

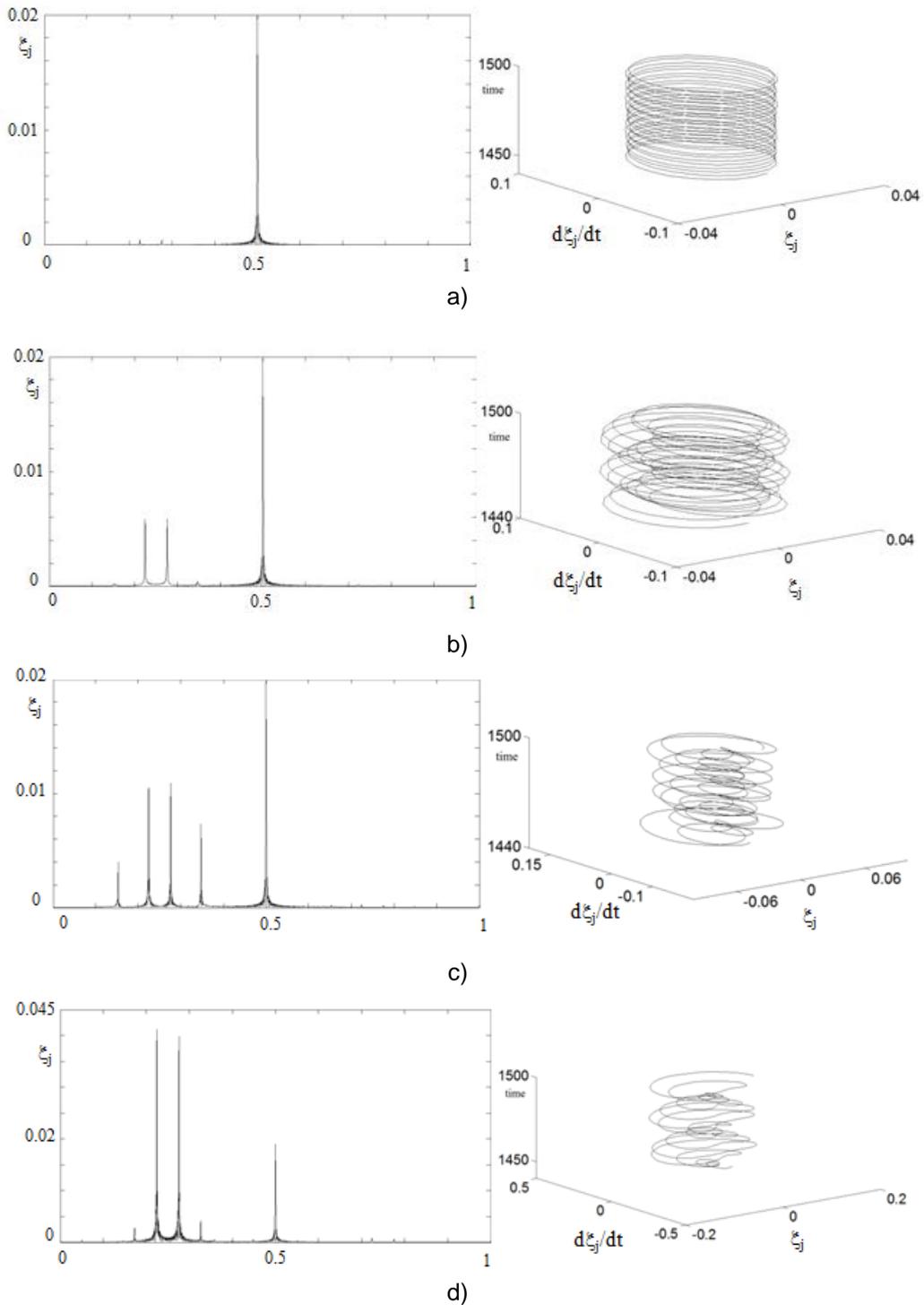


Figura 5.8 FFTs y diagrama de fase del desplazamiento relativo de un átomo.
 $v_B=0,5$, $b/m=0,1$ y a) $\kappa_2/m=1,518$; b) $1,515$; c) $1,513$ y d) $1,500$

El espectro frecuencial tiene un pico a una frecuencia fundamental relacionada con la velocidad del cuerpo, $v_B=0,5$, cuya amplitud permanece constante para el rango completo del parámetro κ_2/m . Para valores bajos de este parámetro aparece una banda de ruido con una amplitud del mismo orden que la de la frecuencia fundamental. Esta banda de ruido va desapareciendo conforme aumenta el valor del parámetro estudiado.

Como consecuencia, el diagrama de fase es una solución periódica para los valores de rigidez más elevados, pasa a ser una solución cuasiperiódica para valores intermedios del parámetro estudiado, y termina con soluciones caóticas para los valores más bajos del parámetro.

La Figura 5.9 muestra las FFTs de la fuerza de fricción para diferentes valores del parámetro κ_2/m , magnitud importante en el diseño mecánico. En el espectro de la fuerza de fricción promedio aparece una amplitud a 0,5 Hz, relacionada con la velocidad absoluta del bloque, esta línea espectral también aparece en el del desplazamiento relativo de cada átomo. El espectro contiene, asimismo, una banda estrecha similar a la del desplazamiento relativo, que se comporta de forma análoga frente a variaciones en la rigidez. Esta banda está amplificada en el espectro de la fuerza de fricción. Fuera de la región de los ciclos límite, para $\kappa_2/m > 1,518$, Figura 5.10, el valor medio de la fuerza de fricción disminuye linealmente con la rigidez. En la región de ciclos límite este valor medio es independiente de la rigidez, aspecto relevante dentro del campo de actuación de la tecnología de superficies.

La Figura 5.11 muestra las FFTs, columna de la izquierda, y los diagramas de fase, columna de la derecha, para valores crecientes de la amplitud de la fuerza de interacción, b/m , y a una rigidez constante. El valor $b/m \approx 0,100$ separa la región de ciclo límite, con $b/m < 0,1$, de la región de órbitas cuasiperiódicas, con $b/m > 0,1$. Las soluciones son muy sensibles al parámetro b/m cuando éste es mayor que 0,1. Los comentarios mencionados en el análisis del efecto del parámetro anterior, Figuras 5.8 y 5.9, son válidos para las Figuras 5.11 y 5.12. Sin embargo, los espectros con ruido de ambos parámetros difieren ligeramente. El intervalo de frecuencias con amplitudes significativas aumenta con el valor del parámetro b/m .

Finalmente, en la región caótica, el valor medio de la fuerza de fricción aumenta linealmente con la amplitud de la fuerza de interacción, Figura 5.13. Fuera de esta región, esta fuerza es independiente del parámetro considerado.

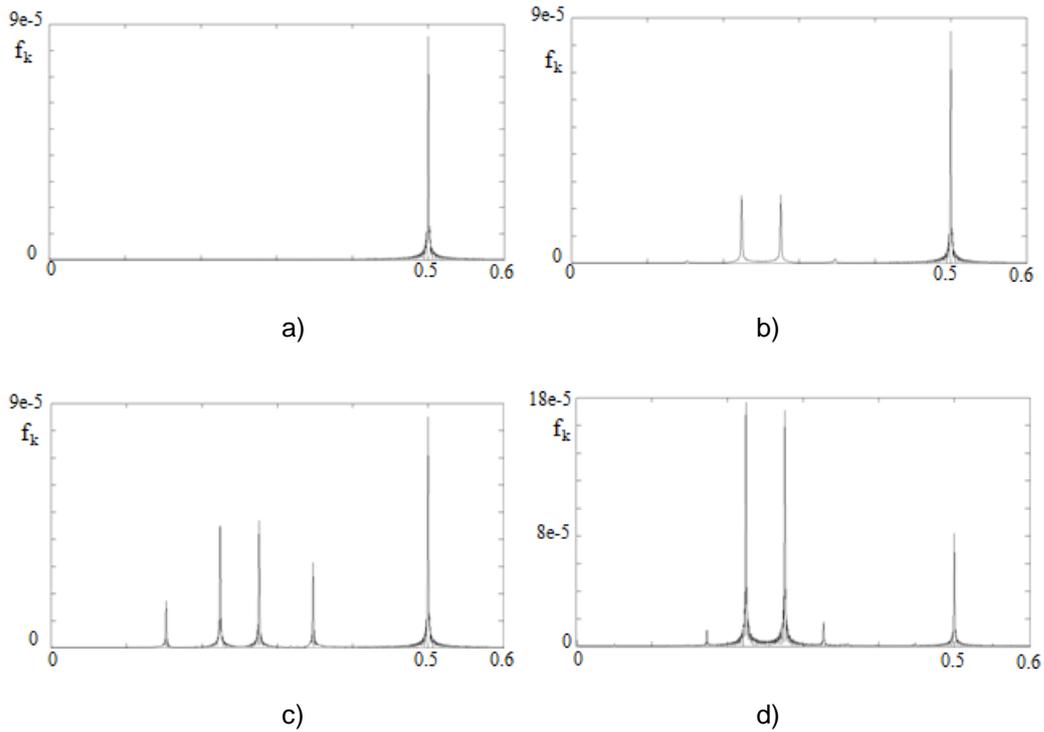


Figura 5.9 FFTs de la fuerza de fricción. $v_B=0.5$, $b/m=0,1$.
 a) $\kappa_2/m=1,520$; b) 1,515; c) 1,513 y d) 1,500

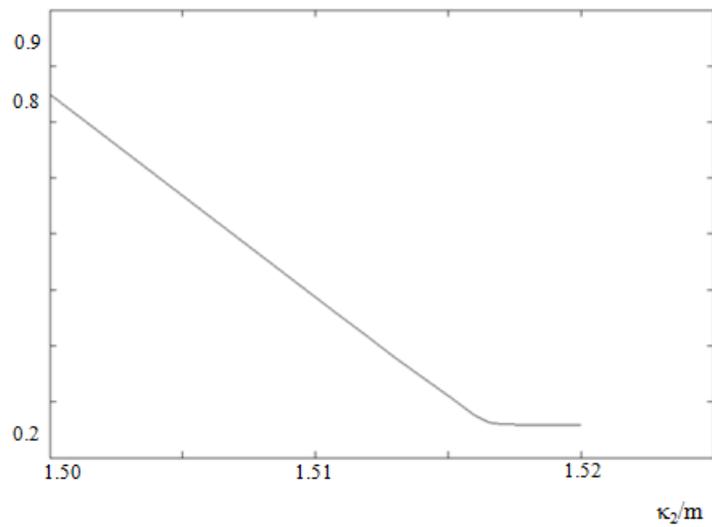


Figura 5.10 Valor medio de la fuerza de fricción en función de la rigidez. $b/m= 0,1$

Por tanto, existe una clara relación entre el movimiento ordenado de los átomos y el valor mínimo de la fuerza de fricción, así como una dependencia entre el ordenamiento del movimiento de los átomos y el valor de los parámetros b/m y κ_2/m .

Capítulo 5 Aplicaciones de los modelos de fricción

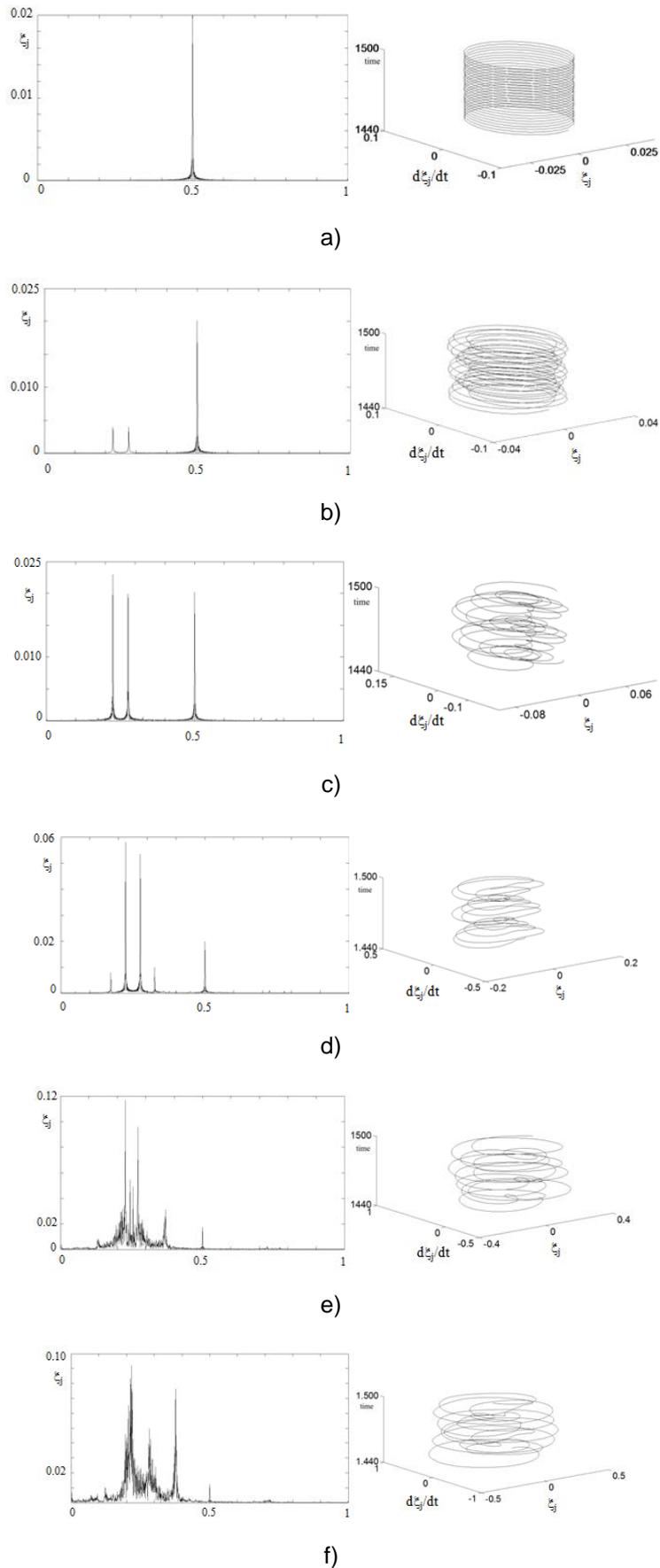


Figura 5.11 FFTs y diagrama de fase del desplazamiento de un átomo. $v_B=0,5$, $\kappa_2/m= 1,52$.
a) $b/m=0,100$; b) $0,101$; c) $0,103$; d) $0,107$; e) $0,150$ y f) $0,2$

Capítulo 5 Aplicaciones de los modelos de fricción

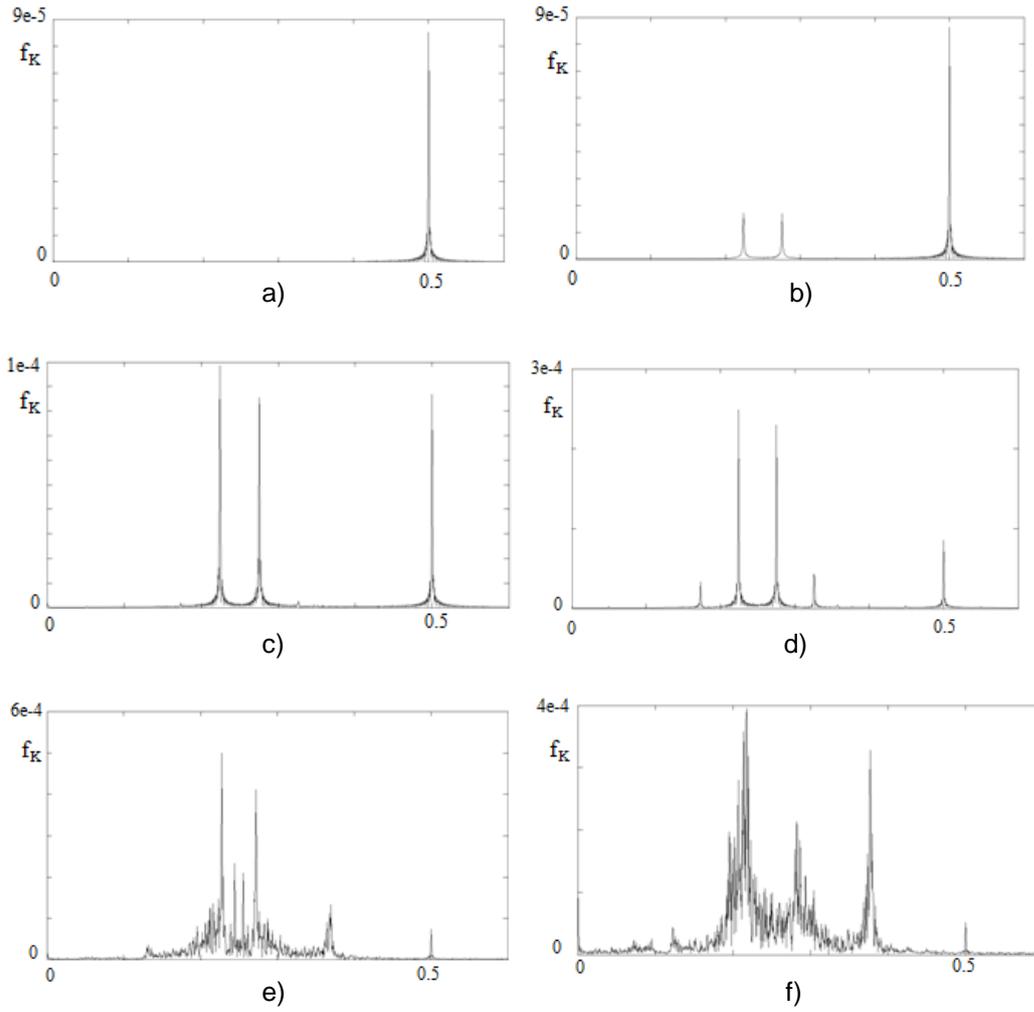


Figura 5.12 FFTs de la fuerza de fricción. $v_B=0,5$, $\kappa_2/m= 1,52$.
a) $b/m=0,100$; b) $0,101$; c) $0,103$; d) $0,107$; e) $0,150$ y f) $0,200$

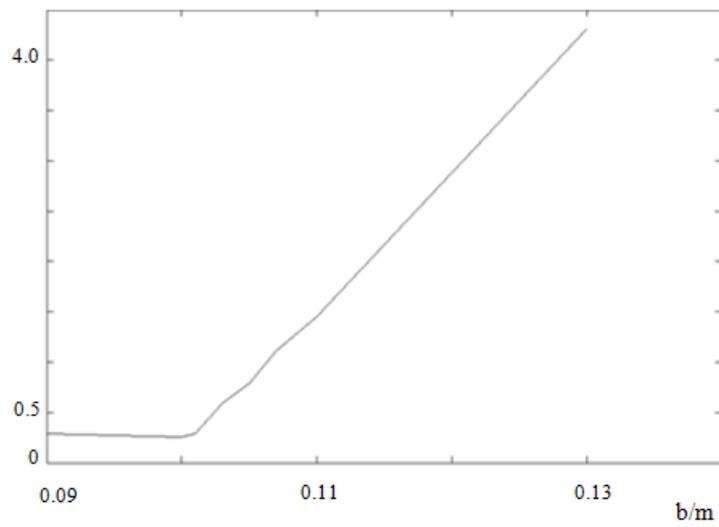


Figura 5.13 El valor medio de la fuerza de fricción en función de la amplitud de la fuerza de interacción. $\kappa_2/m=1,52$

El análisis de los resultados de esta simulación se ha publicado como:

Alhama, F., F. Marín, y col. (2011). "An Efficient and Reliable Model to Simulate Microscopic Mechanical Friction in the Frenkel-Kontorova-Tomlinson Model", *Computer Physics Communications* 182 (11): 2314-2325.

5.2 SIMULACIÓN DE FRICCIÓN A ESCALA MICROSCÓPICA: MODELOS DE MICROSCOPIOS DE FUERZA ATÓMICA

Se aplicará el método de simulación por redes a los siguientes binomios superficie-puntera de microscopio: NaF con FFM (Hölscher, Schwarz y col. 1996), MoS₂ con SFM (Hölscher, Schwarz y col. 1997), HOPG con SFM (Hölscher, Schwarz y col. 1998), grafito con AFM (Sasaki, Kobayashi y col. 1996), y Xe con AFM (Hölscher, Allers y col. 2001).

5.2.1 SIMULACIÓN DE FFM SOBRE UNA SUPERFICIE DE FLUORURO SÓDICO

La puntera del FFM recorre una muestra de NaF caracterizada por los siguientes parámetros: $m_x=m_y=10^{-8}$ kg, $c_x=c_y=10^{-3}$ N·s/m y $k_x=k_y=10$ N/m. El soporte del microscopio se mueve a una velocidad constante de 400 Å/s. Para comparar los resultados del modelo en red con los obtenidos por Hölscher, Schwarz y col. (Hölscher, Schwarz y col. 1996), éstos se representan en una superficie de 20x20 Å y con un ángulo de escaneado de 0°. El modelo propuesto resuelve el Sistema de Ecuaciones (2.31) con el potencial definido por la Ecuación (2.28).

La Figura 5.14-b representa las componentes de la fuerza elástica en la puntera, F_x y F_y , para cada posición de la superficie estudiada. La Figura 5.14-a facilita la identificación de la posición de los átomos de dicha superficie. A partir de ambas figuras se aprecia la correspondencia entre la estructura cristalográfica considerada y la fuerza elástica en la puntera del microscopio. El modelo desarrollado proporciona la imagen correspondiente a una estructura cristalográfica ideal que puede servir como referencia para el análisis de la imagen de la estructura cristalográfica real obtenida por el microscopio, e incluso para evaluar la configuración del mismo.

El resultado de la simulación coincide con el obtenido por Hölscher, Schwarz y col. (Hölscher, Schwarz y col. 1996).

5.2.2 SIMULACIÓN DE SFM SOBRE UNA SUPERFICIE DE BISULFURO DE MOLIBDENO

La puntera del SFM recorre una muestra de MoS₂ caracterizada por los siguientes parámetros: $m_x=m_y=10^{-8}$ kg, $c_x=c_y=10^{-3}$ N·s/m y $k_x=k_y=10$ N/m. El soporte del microscopio se mueve a una velocidad constante de 400 Å/s. Para comparar los resultados del modelo en red con los obtenidos por Hölscher, Schwarz y col. (Hölscher, Schwarz y col. 1997), éstos se representan en una superficie de 25x25 Å y con un ángulo de escaneado de 0°. El modelo propuesto resuelve el Sistema de Ecuaciones (2.31) con el potencial definido por la Ecuación (2.28).

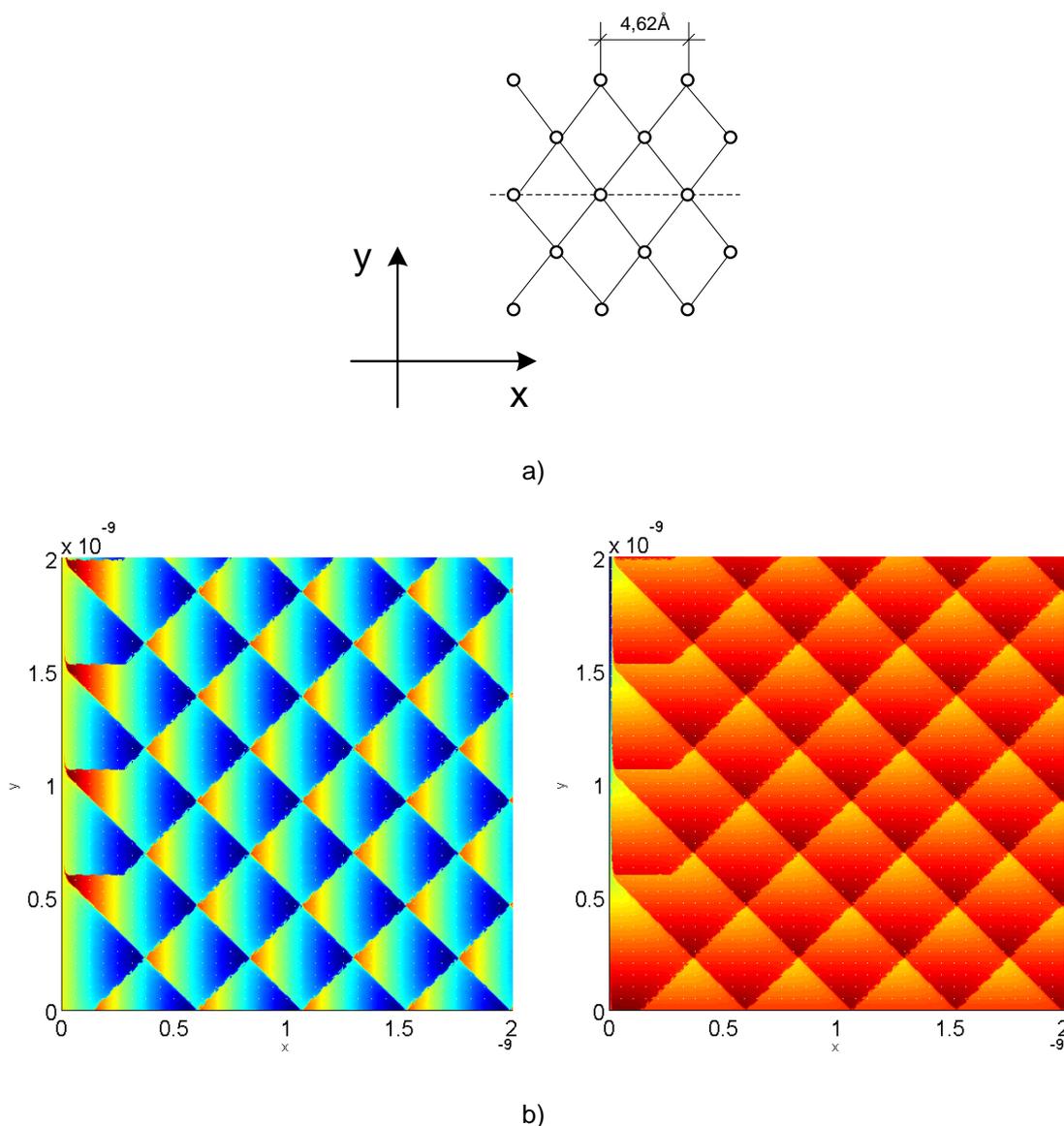
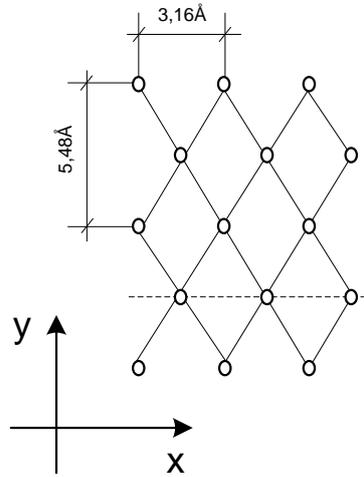
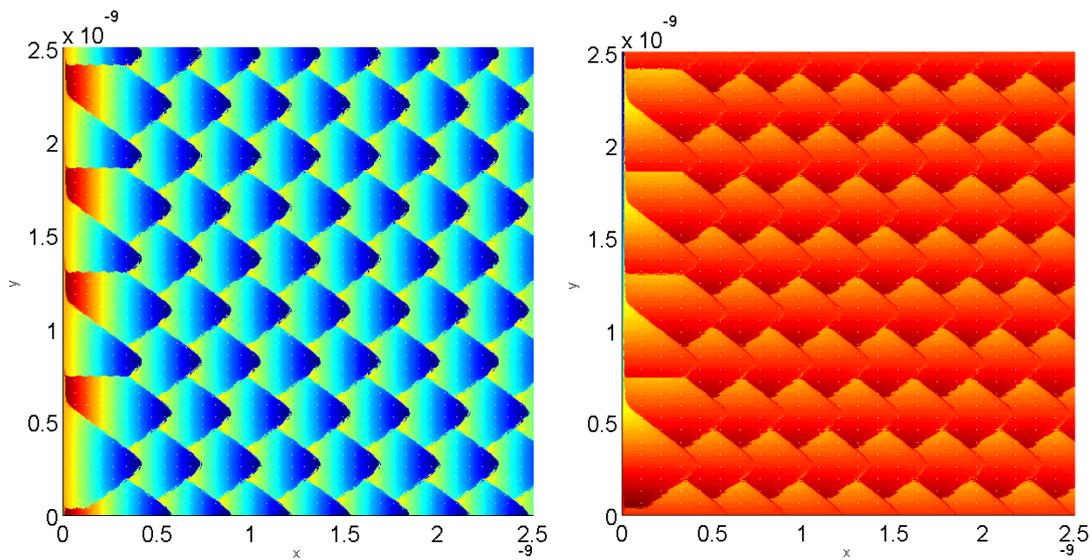


Figura 5.14 a) Posición de los átomos en la red cristalina del NaF, b) Fuerza elástica en la puntera: F_x a la izquierda y F_y a la derecha

La Figura 5.15-b representa las componentes de la fuerza elástica en la puntera, F_x y F_y , para cada posición de la superficie estudiada. La Figura 5.15-a facilita la identificación de la posición de los átomos de dicha superficie.



a)



b)

Figura 5.15 a) Posición de los átomos en la red cristalina del MoS_2 ,
 b) Fuerza elástica en la puntera: F_x a la izquierda y F_y a la derecha

El resultado de la simulación coincide con el obtenido por Hölscher, Schwarz y col. (Hölscher, Schwarz y col. 1997).

5.2.3 SIMULACIÓN DE SFM SOBRE UNA SUPERFICIE DE GRAFITO PIROLÍTICO ALTAMENTE ORIENTADO Y DE AFM SOBRE GRAFITO

La superficie monocapa de grafito estudiada consta de 271 hexágonos con átomos de carbono en sus vértices, en total 600. La constante de red es de 1,421 Å. La superficie de grafito se supone rígida.

La puntera del SFM recorre la muestra de HOPG caracterizada por los siguientes parámetros: $m_x=m_y=10^{-8}$ kg, $c_x=c_y=10^{-3}$ N·s/m y $k_x=k_y=25$ N/m. El soporte del microscopio se mueve a una velocidad constante de 400 Å/s. Para comparar los resultados del modelo en red con los obtenidos por Hölscher, Schwarz y col. (Hölscher, Schwarz y col. 1998), éstos se representan en una superficie de 20x20 Å y con un ángulo de escaneado de 7°. El modelo propuesto resuelve el Sistema de Ecuaciones (2.31) con el potencial definido por la Ecuación (2.29).

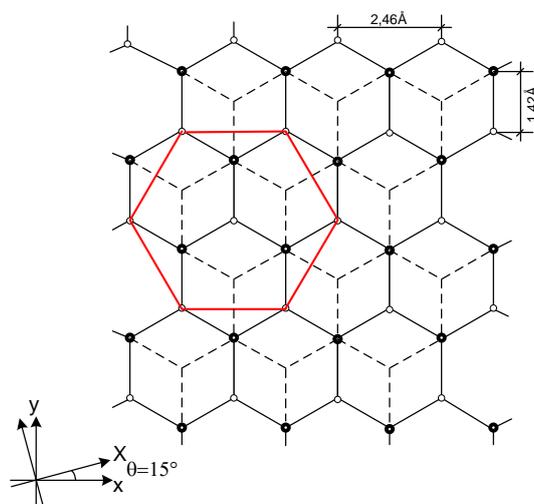
La Figura 5.16-b representa las componentes de la fuerza elástica en la puntera, F_x y F_y , para cada posición de la superficie estudiada. La Figura 5.16-a facilita la identificación de la posición de los átomos de dicha superficie. El resultado de la simulación coincide con el obtenido por Hölscher, Schwarz y col. (Hölscher, Schwarz y col. 1998).

La puntera del AFM va a recorrer una muestra de grafito cuyos parámetros característicos son los siguientes: $m_x=m_y=10^{-6}$ kg, $c_x=c_y=0$ N·s/m, $k_x=k_y=0,25-2,5$ N/m y $k_z=0,25$ N/m. El soporte del microscopio se mueve con una velocidad constante de 10 Å/s y un desplazamiento vertical de -6 Å. Para comparar los resultados del modelo en red con los obtenidos por Sasaki, Kobayashi y col. (Sasaki, Kobayashi y col. 1996), éstos se representan en una superficie de 9,85x9,85 Å y con un ángulo de escaneado de 15°.

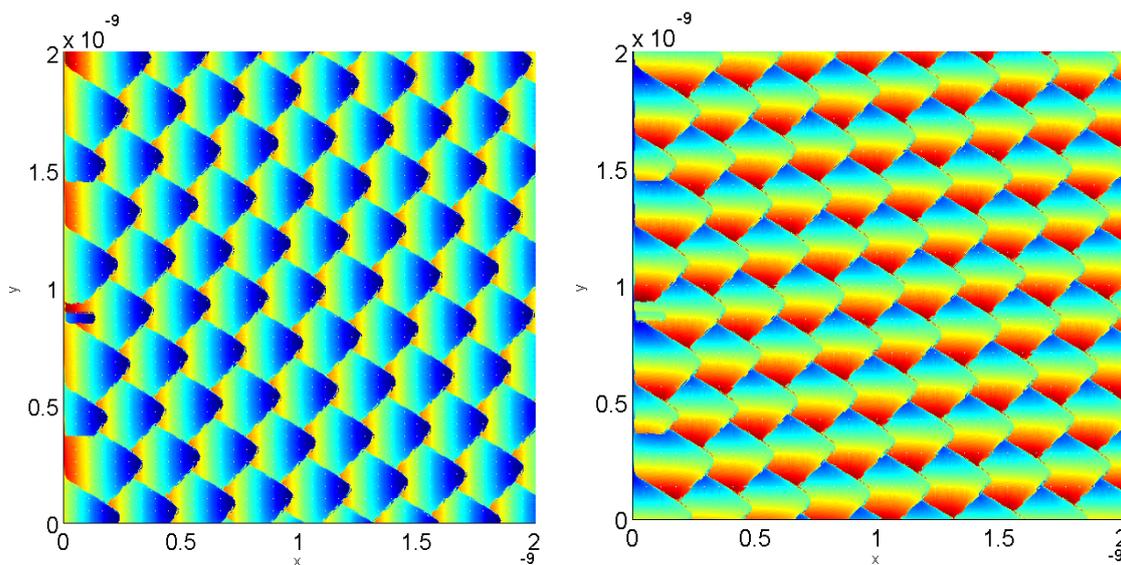
Sasaki, Kobayashi y col. (Sasaki, Kobayashi y col. 1996) no mencionan explícitamente la masa de la puntera ni su velocidad, parámetros considerados por otros autores en sus análisis, por tanto ha sido necesario deducir sus valores a partir de las imágenes proporcionadas por Sasaki y col., ya que son indispensables para implementar el modelo. Éste resuelve el Sistema de Ecuaciones (2.31) con el potencial definido por la Ecuación (2.30). La determinación de los valores de estos parámetros es una nueva constatación de la eficacia del modelo propuesto en este trabajo.

La Figura 5.17-b representa la fuerza elástica en la puntera, F_x , para cada posición de la superficie estudiada. La Figura 5.17-a facilita la identificación de la posición de los átomos de dicha superficie.

Lógicamente el resultado de la simulación coincide con el obtenido por Sasaki, Kobayashi y col. (Sasaki, Kobayashi y col. 1996). La masa de la puntera es 100 veces mayor que en el microscopio SFM y la velocidad es 40 veces menor. También es destacable el uso de un amortiguamiento nulo de la puntera por parte de Sasaki, Kobayashi y col.



a)



b)

Figura 5.16 a) Posición de los átomos en la red cristalina del HOPG, b) Fuerza elástica en la puntera: F_x a la izquierda y F_y a la derecha

5.2.4 SIMULACIÓN DE AFM SOBRE UNA SUPERFICIE DE XENÓN

Finalmente se va a estudiar el caso en el que la puntera de AFM recorre una muestra de Xe caracterizada por los siguientes parámetros: $m_x=m_y=10^{-6}$ kg, $c_x=c_y=0$ N·s/m y $k_x=k_y=k_z=40$ N/m. El soporte del microscopio se mueve a una velocidad constante de 10 \AA/s y tiene un desplazamiento vertical de -6 \AA . Para comparar los resultados del modelo en red con los obtenidos por Hölscher, Allers y col. (Hölscher, Allers y col. 2001), éstos se representan en una superficie de $36 \times 36 \text{ \AA}$ y con un ángulo de escaneado de 15° . Estos autores no mencionan explícitamente la masa de la puntera ni su velocidad, parámetros considerados por otros autores en sus análisis, por tanto ha sido necesario deducir sus valores a partir de las imágenes proporcionadas por Hölscher, Allers y col., ya que de nuevo son indispensables para implementar el modelo. Éste resuelve el Sistema de Ecuaciones (2.31) con el potencial definido por la Ecuación (2.30).

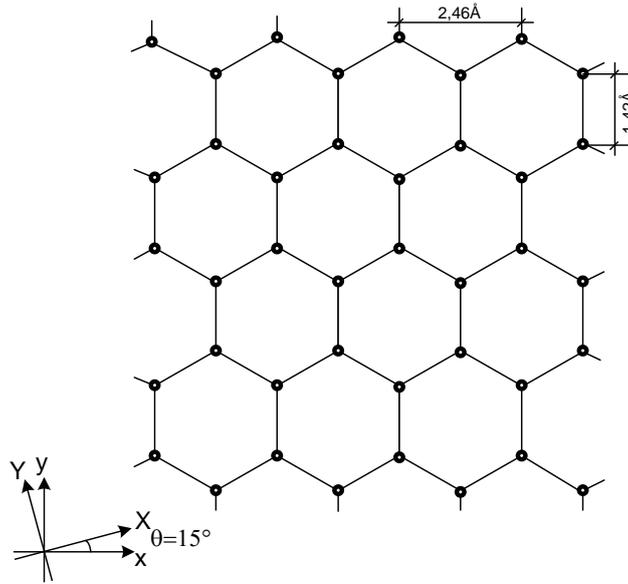
La Figura 5.18-b representa la fuerza elástica en la puntera, F_x , para cada posición de la superficie estudiada. La Figura 5.18-a facilita la identificación de la posición de los átomos de dicha superficie. El resultado de la simulación coincide con el obtenido por Hölscher, Allers y col. (Holscher, Allers y col. 2001). La masa de la puntera es 100 veces mayor que en el microscopio SFM y la velocidad es 40 veces menor. También es destacable el uso de un amortiguamiento nulo de la puntera por parte de Hölscher, Allers y col.

El análisis de los resultados de esta simulación está pendiente de publicación como: Marín, F., F. Alhama, y col. “Modelling of Nanoscale Friction Using Network Simulation Method”.

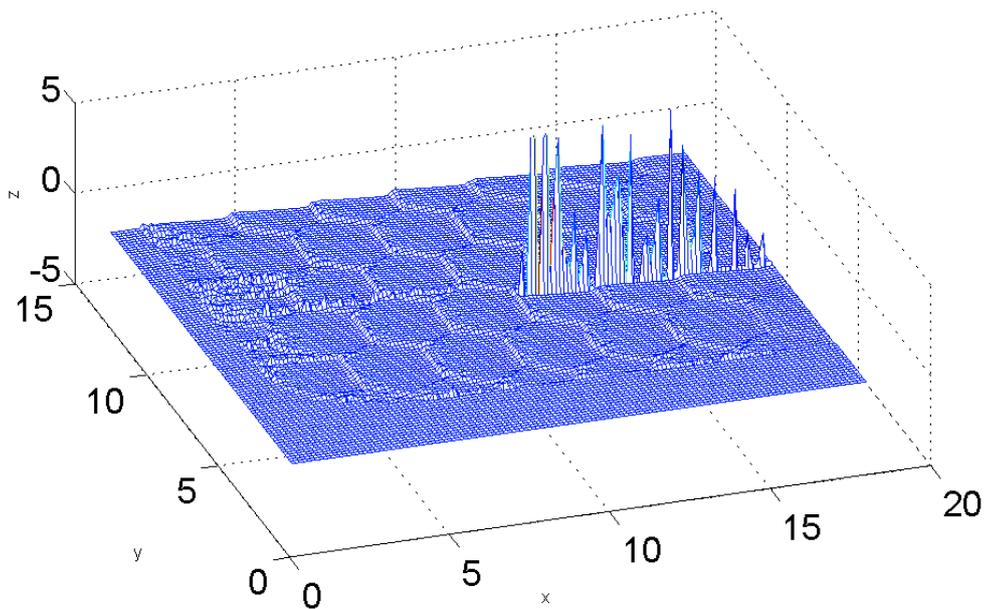
5.3 SIMULACIÓN DE FRICCIÓN A ESCALA MACROSCÓPICA: MODELO DE K AidANOVSKY-KHAIKIN

En este apartado se aplicará el método de simulación por redes a un modelo de fricción a escala macroscópica, el de Kaidanovsky-Khaikin. Todos los parámetros se expresan en forma adimensional. La unidad de la fuerza es F_s (N) y la unidad de tiempo es $\sqrt{m/k}$ (s). El resto de las unidades se pueden expresar en términos de estas unidades básicas. El problema se resuelve para los parámetros principales: velocidad adimensional de la cinta, V_{dr} , parámetro adimensional del coeficiente de fricción

dinámica, γ , y parámetro de precisión, ε . Éstos determinan: i) la relación entre el desplazamiento del bloque y el parámetro de precisión para una velocidad de la cinta, ii) la relación entre el fenómeno stick-slip y el parámetro de precisión, y iii) la relación entre la forma del diagrama de fase y el parámetro adimensional del coeficiente de fricción dinámica.



a)

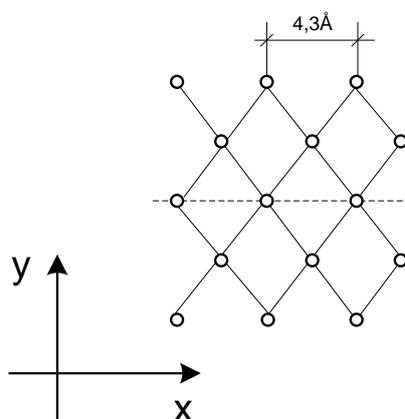


b)

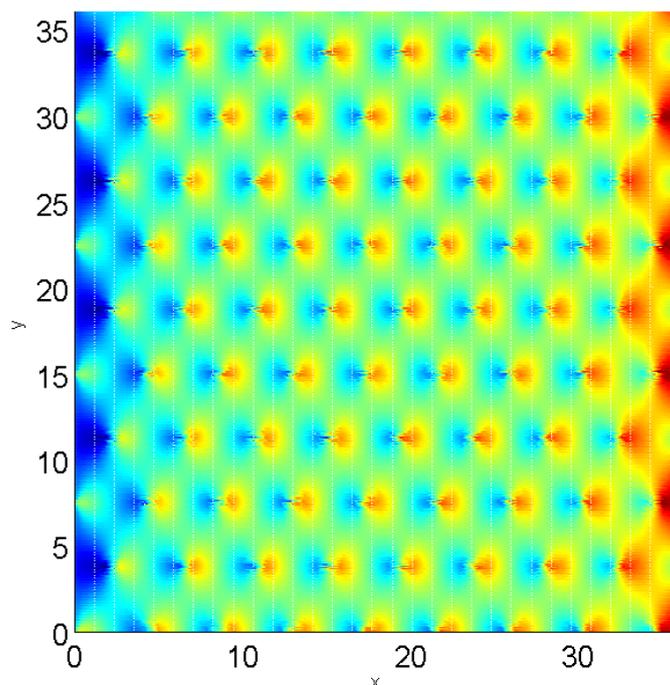
Figura 5.17 a) Posición de los átomos en la red cristalina del grafito,

b) Fuerza elástica en la puntera, F_x

El modelo propuesto resuelve las Ecuaciones (2.35) y (2.36) con la fuerza de fricción definida por la Ecuación (2.3). La Figura 5.19 muestra el desplazamiento del bloque en función del tiempo para valores crecientes del parámetro de precisión. Para comparar los resultados del modelo en red con los obtenidos por Galvanetto y col. (Galvanetto y Bishop 1995; Galvanetto, Bishop y col. 1995; Galvanetto y Knudsen 1997; Galvanetto 2004; Galvanetto 2005) y van de Vrande, van Campen y col. (van de Vrande, van Campen y col. 1999), se utilizan los siguientes valores: 3 para γ y 0,01 para V_{dr} .



a)



b)

Figura 5.18 a) Posición de los átomos en la red cristalina del xenón,

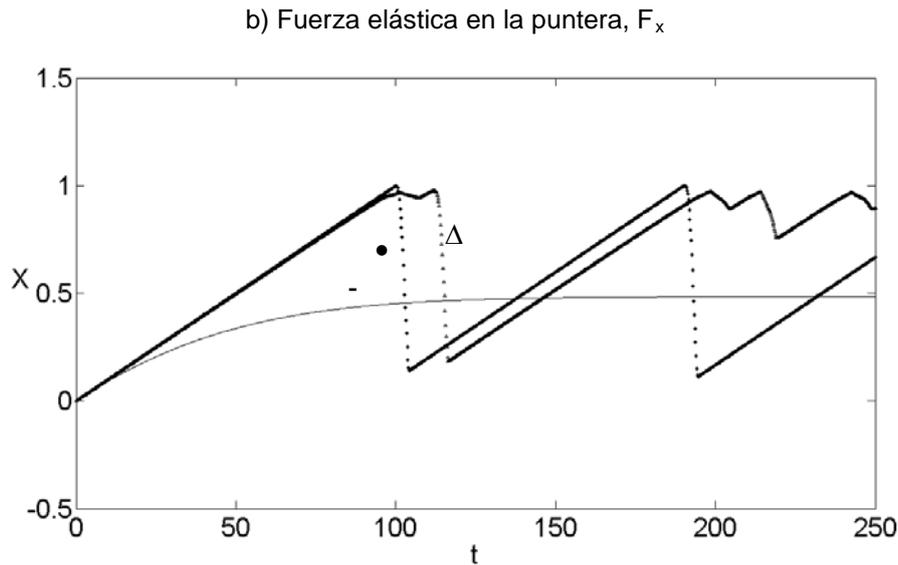


Figura 5.19 Evolución del desplazamiento del bloque. Para $V_{dr}=0,01$ y $\varepsilon=1e2(-)$, $\varepsilon=1e4(\Delta)$, and $\varepsilon=1e6(\bullet)$

La curva de la Figura 5.19, con $\varepsilon=1e2$, muestra una etapa inicial de stick seguida por una etapa de slip continuo. La curva con $\varepsilon=1e6$ muestra un comportamiento stick-slip típico, con un desplazamiento mayor que en el caso anterior y, por lo tanto, una fuerza de fricción superior. Para $\varepsilon=1e4$, la curva resultante muestra una forma más compleja, especialmente en los picos. La Figura 5.20 muestra la transición entre los diferentes estados.

Como se vio en la Figura 2.12, el valor de $\varepsilon=1e2$ supone una transición más suave del coeficiente de fricción en la zona de velocidad de deslizamiento nula, que queda reflejada por el comportamiento de slip estacionario mostrado en la Figura 5.19. Sin embargo, para $\varepsilon=1e6$ la transición es abrupta como queda reflejado en la misma figura. La línea recta identifica la velocidad de la cinta, por tanto la fase de stick.

En los análisis siguientes se va a utilizar $\varepsilon=1e6$, valor que aproxima mejor el fenómeno de fricción real. La Figura 5.21 muestra el plano de fase y el espacio de fase para valores crecientes de velocidad adimensional de la cinta.

Todas las curvas de la Figura 5.21, excepto la Figura 5.21-d, muestran stick-slip, con un atractor cuya dimensión aumenta con la velocidad adimensional de la cinta.

Los resultados de la Figura 5.21-b coinciden con los obtenidos por van de Vrande, van Campen y col. (van de Vrande, van Campen y col. 1999). El plano de fase de la Figura 5.21-c muestra velocidades superiores a la velocidad de la cinta. En la Figura 5.21-d

aparece una fase de slip con una reducción progresiva del desplazamiento. En general, la amplitud del deslizamiento aumenta con la velocidad de la cinta.

Por último, la Figura 5.22 muestra el plano de fase para valores crecientes del parámetro adimensional del coeficiente de fricción dinámica. Para comparar los resultados del modelo en red con los obtenidos por Galvanetto y col. (Galvanetto y Bishop 1995; Galvanetto, Bishop y col. 1995; Galvanetto y Knudsen 1997; Galvanetto 2004; Galvanetto 2005) y van de Vrande, van Campen y col. (van de Vrande, van Campen y col. 1999), el valor empleado para V_{dr} es 0,2.

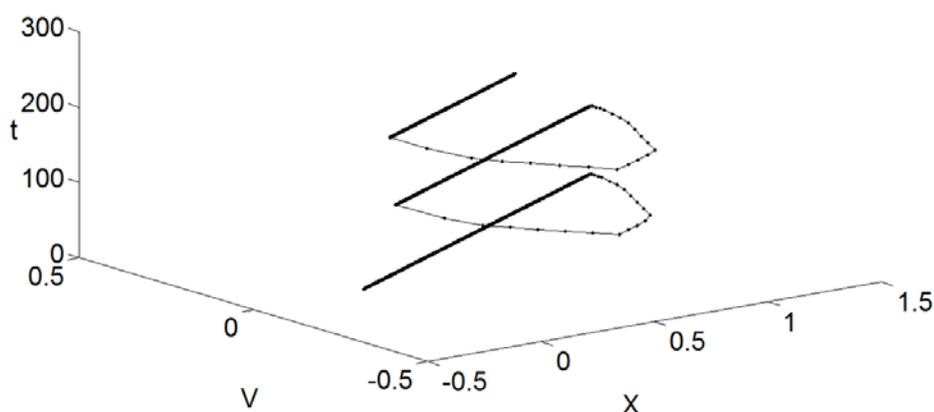


Figura 5.20 Espacio de fase del bloque para $V_{dr}=0,01$ y $\varepsilon=1e6$

Todas las curvas de la Figura 5.22, excepto la Figura 5.22-a, muestran stick-slip, con un atractor cuya dimensión aumenta con el parámetro adimensional del coeficiente de fricción dinámica. En la Figura 5.22-a aparece una fase de slip con una reducción progresiva del desplazamiento. El apuntamiento del coeficiente de fricción en la zona de velocidad de deslizamiento nula, Figura 2.12, lógicamente aumenta la amplitud del deslizamiento. Así mismo, la Figura 5.22-d coincide con la obtenida por van de Vrande, van Campen y col.

El análisis de los resultados de esta simulación se ha publicado en la primera parte del siguiente artículo:

Marín, F., F. Alhama, y col. (2012). "Modelling of Stick-Slip Behaviour with Different Hypotheses on Friction Forces." *International Journal of Engineering Science* 60: 13-24.

5.4 SIMULACIÓN DE FRICCIÓN A ESCALA MACROSCÓPICA: MODELO DE BURRIDGE-KNOPOFF

De la misma forma que para el modelo de 1-grado de libertad, todos los parámetros se usan en forma adimensional. La unidad de la fuerza de fricción es F_{s1} (N) y la unidad de tiempo $\sqrt{m/k_2}$ (s). El resto de unidades se puede expresar en términos de estas unidades básicas.

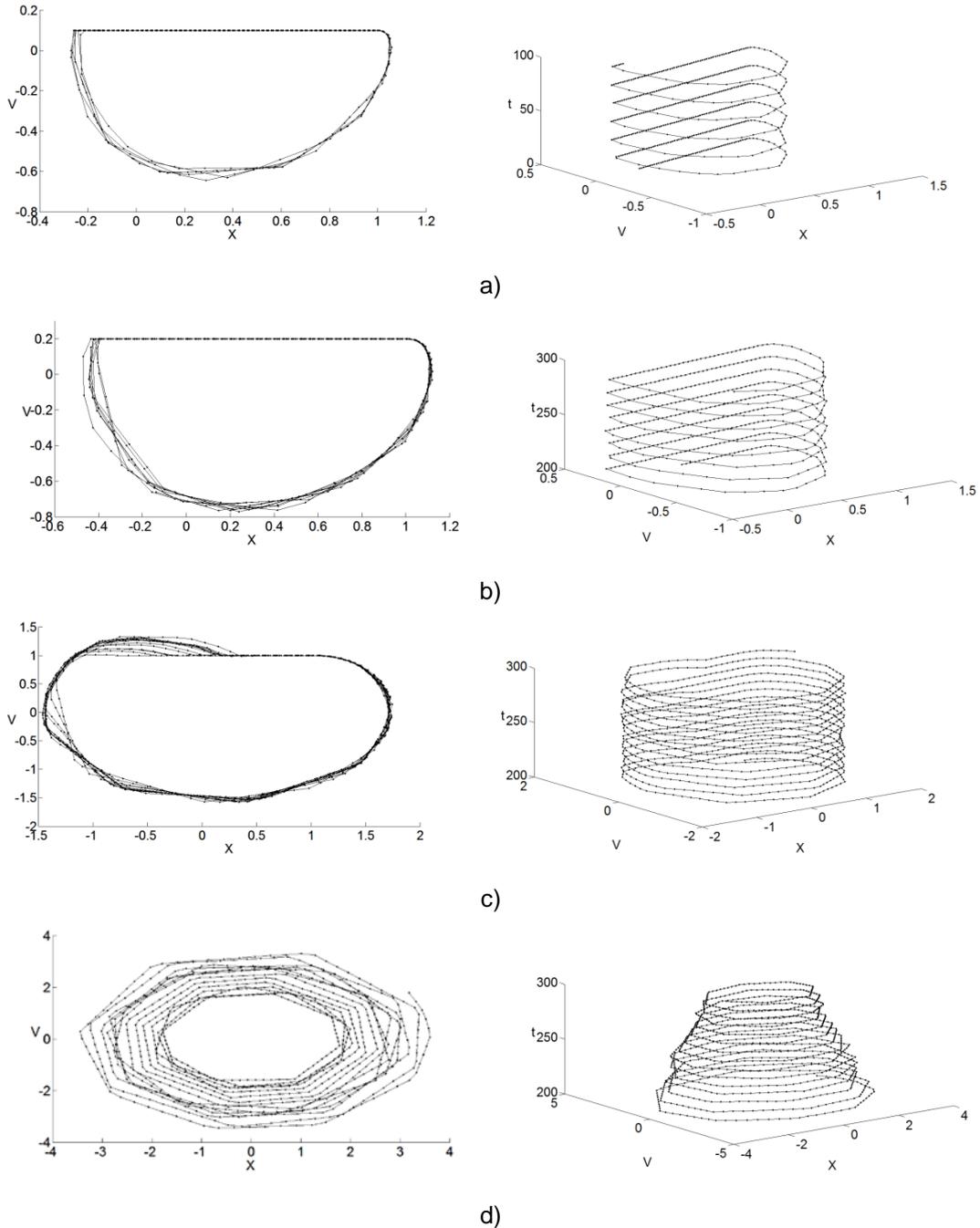


Figura 5.21 Planos de fase (izquierda) y espacios de fase (derecha).

a) $V_{dr}=0,1$; b) $V_{dr}=0,2$; c) $V_{dr}=1,0$ y d) $V_{dr}=10$

Dado que el efecto del parámetro γ se estudió en la sección anterior, en ésta nos centramos en el estudio del efecto de la velocidad adimensional de la cinta, V_{dr} . Se van a analizar los eventos y los atractores. Con el propósito de comparar con las referencias actuales (Galvanetto y Bishop 1995; Galvanetto, Bishop y col. 1995; Galvanetto y Knudsen 1997; Galvanetto 2004; Galvanetto 2005), sólo se utilizan los parámetros de fricción $\gamma=3$, $\varepsilon=1e6$ y $\alpha=1,2$.

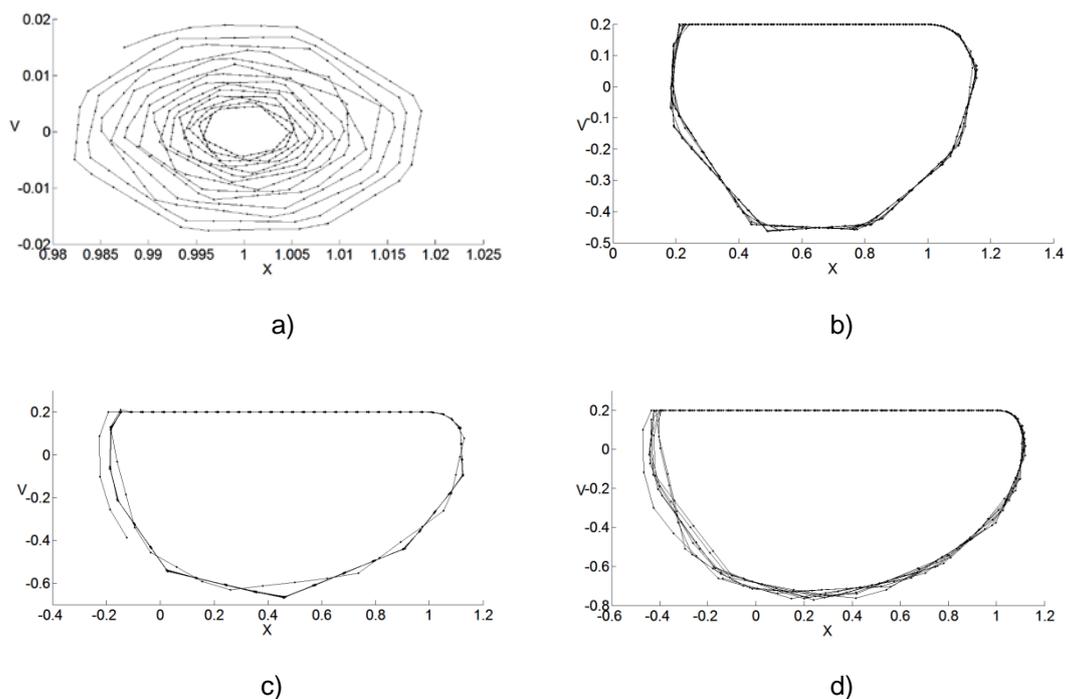


Figura 5.22 Planos de fase para $V_{dr}=0,2$; a) $\gamma=0$; b) $\gamma=1$; c) $\gamma=2$ y d) $\gamma=3$

El modelo propuesto resuelve el Sistema de Ecuaciones (2.40) con la fuerza de fricción definida por la Ecuación (2.3). El estudio de la dinámica del sistema durante un ciclo completo, con condiciones iniciales de reposo y tras un régimen transitorio, representa el movimiento del sistema. Los diferentes eventos observados se pueden clasificar en los siguientes tipos: un evento de un solo bloque, un evento de dos bloques y un evento múltiple. En un evento de un solo bloque, el caso más sencillo, uno de los dos bloques desliza y luego se detiene, mientras que el otro permanece en reposo relativo en la cinta en movimiento. En el caso del evento de dos bloques, durante el período de deslizamiento de uno de los dos bloques, el otro inicia el deslizamiento y luego se detiene. Un evento múltiple es un evento de dos bloques con más de un inicio y parada en cada uno de los dos bloques (Nussbaum y Ruina 1987).

La Figura 5.23-a muestra la evolución de los desplazamientos de las masas, X_1 y X_2 durante un evento de dos bloques mientras que la Figura 5.23-b muestra el plano de desplazamientos. Los resultados representados en la Figura 5.23 son similares a los obtenidos por Galvanetto (Galvanetto 2005). La Figura 5.23-b muestra que el plano de desplazamientos es una técnica útil para la identificación de los diferentes tipos de eventos, pero no para la identificación de un atractor. La identificación previa del tipo de evento permite estudiar mejor el efecto de los parámetros.

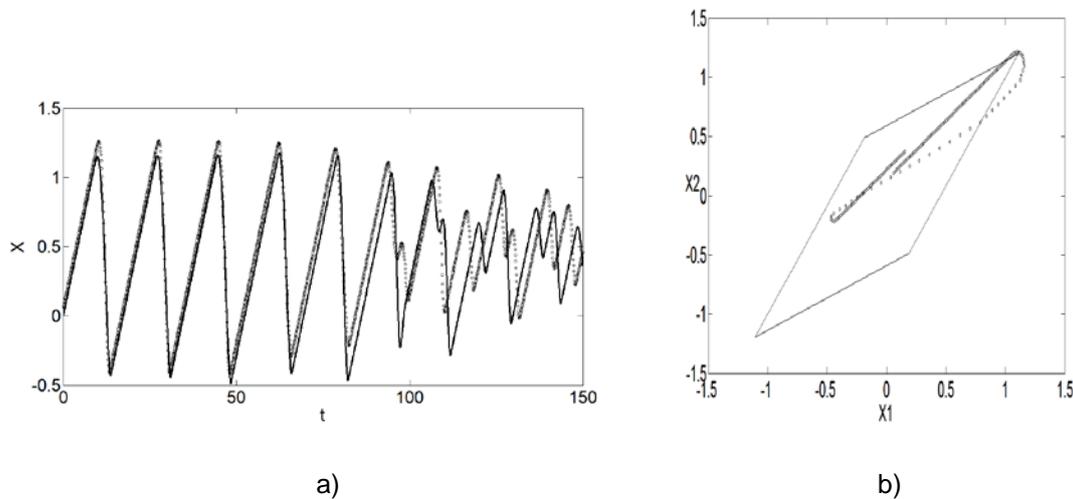


Figura 5.23 Evolución de los desplazamientos: $\alpha=1,2$; $\beta=1,3$; $\gamma=3,0$; $\varepsilon=1e6$; $V_{dr}=0,12$; $d=0,0602$.
 a) Cronograma de X_1 (-) y X_2 (o) y b) Plano de desplazamientos

De nuevo, la Figura 5.24-a muestra la evolución de los desplazamientos de las masas durante un evento múltiple mientras que la Figura 5.24-b muestra el plano de desplazamientos. De forma análoga, la Figura 5.25-a muestra la evolución de los desplazamientos de las masas durante un evento de un bloque, y la Figura 5.25-b muestra el plano de desplazamientos de éstos.

La Figura 5.26 muestra los planos de fase del bloque 1 y del bloque 2 para $V_{dr}=0,15$. Esta figura contiene dos atractores. En la Figura 5.26-a aparecen velocidades superiores a la velocidad de la cinta. Para analizar la influencia de la velocidad de la cinta sobre el atractor sólo vamos a representar el bloque 2.

Las Figuras 5.27-5.29 muestran la relación que hay entre la forma del atractor del bloque 2 y la velocidad de la cinta, V_{dr} . Las Figuras 5.27-5.28 muestran la transición entre el caos, Figura 5.27-a, un atractor, Figura 5.28-b, y un atractor cuádruple, Figura 5.28-a. La forma del atractor depende de la velocidad de la cinta: para valores altos la

forma es simple y para valores reducidos las formas son más complejas. El atractor es más simple para el valor de $V_{dr}=0,20$.

Por último, las Figuras 5.30-5.31 muestran los mapas logísticos para varias velocidades de la cinta. La Figura 5.30-a muestra bucles divergentes, y la Figura 5.30-b y la Figura 5.31 representan atractores. No se aprecia una ventaja clara entre estas representaciones y las correspondientes a los planos de fase.

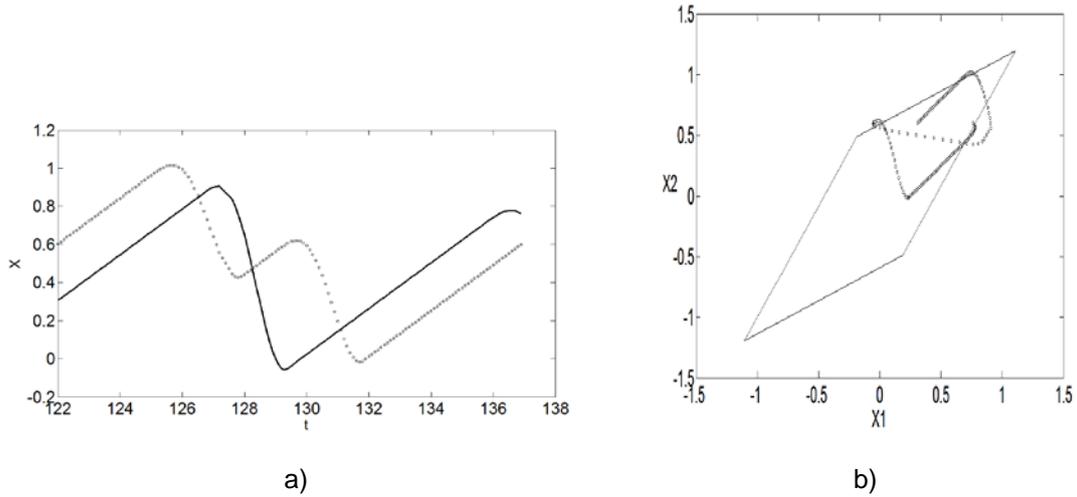


Figura 5.24 Evolución de los desplazamientos: $\alpha=1,2$; $\beta=1,3$; $\gamma=3,0$; $\varepsilon=1e6$; $V_{dr}=0,12$; $d=0,0602$. Cronograma de X_1 (-) y X_2 (o) y (b) Plano de desplazamientos

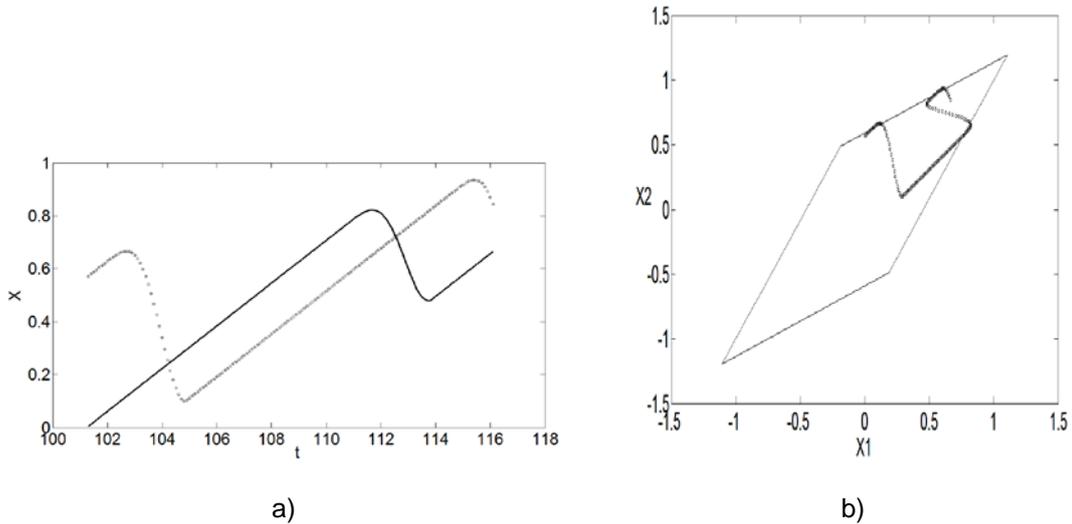


Figura 5.25 Evolución de los desplazamientos: $\alpha=1,2$; $\beta=1,3$; $\gamma=3,0$; $\varepsilon=1e6$; $V_{dr}=0,0808$; $d=0,0602$. a) Cronograma de X_1 (-) y X_2 (o) y b) Plano de desplazamientos

El análisis de los resultados de esta simulación se ha publicado en la segunda parte del siguiente artículo:

Marín, F., F. Alhama, y col. (2012). "Modelling of Stick-Slip Behaviour with Different Hypotheses on Friction Forces." International Journal of Engineering Science 60: 13-24.

5.5 SIMULACIÓN DE FRICCIÓN A ESCALA MACROSCÓPICA: MODELO DE UN MECANISMO DE FRENO

En este apartado se aplicará el método de simulación por redes al mecanismo de freno mostrado en la Figura 5.32. Sus dimensiones son:

- longitud del codo, L , de 0,105 m
- masa del codo, m_c , de 0,215 kg
- radio del tambor, R , de 0,11 m

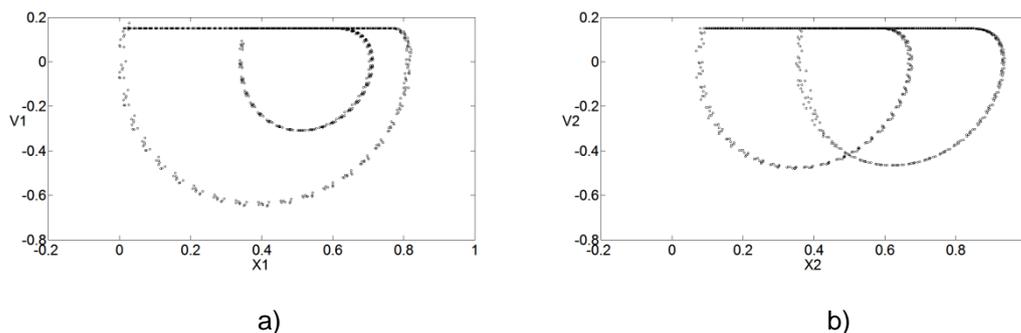


Figura 5.26 Planos de fase para $V_{dr}=0,15$. a) bloque 1 y b) bloque 2

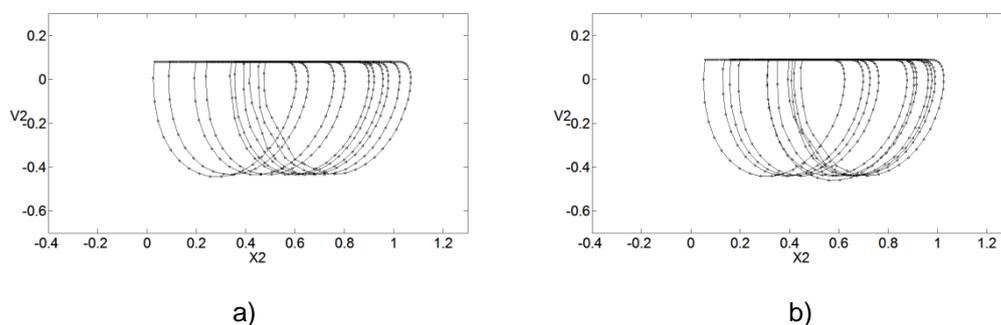


Figura 5.27 Planos de fases del bloque 2. a) $V_{dr}=0,08$ y b) $V_{dr}=0,09$

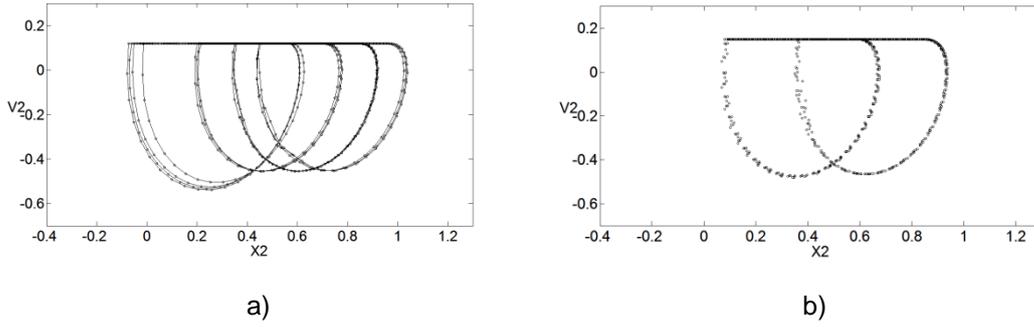


Figura 5.28 Planos de fases del bloque 2. a) $V_{dr}=0,12$ y b) $V_{dr}=0,15$

El momento de inercia del codo, J , se aproxima mediante $m_c \cdot L^2/3$. Las magnitudes físicas de los elementos del dispositivo y las propiedades de los materiales son:

- masa del bloque, m , de 174 g
- rigidez de los resortes, k_1 y k_2 , de 214,62 N/m, y k_3 de 107,31 N/m
- parámetro adimensionalizado de precisión, ε' , $3,5121e7$
- parámetro adimensionalizado asociado a la característica de Stribeck, δ' , 3,5121

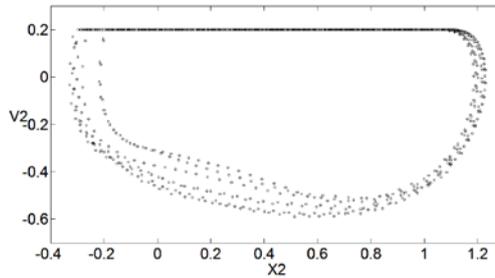


Figura 5.29 Plano de fases del bloque 2 para $V_{dr}=0,20$

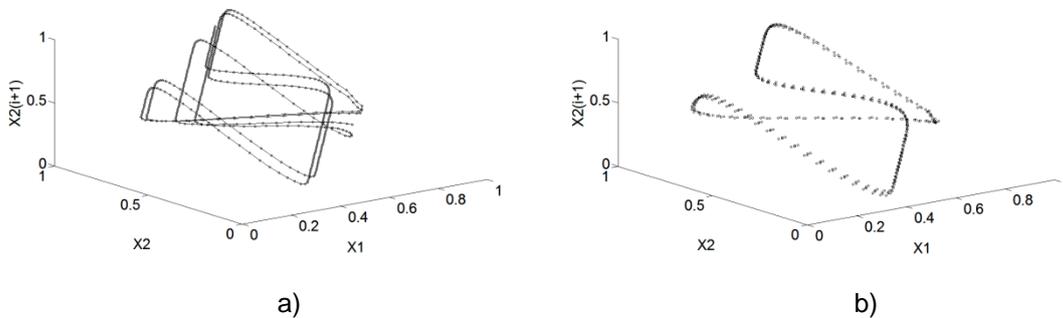


Figura 5.30 Mapas logísticos del bloque 2 para: a) $V_{dr}=0,09$ y b) $V_{dr}=0,15$

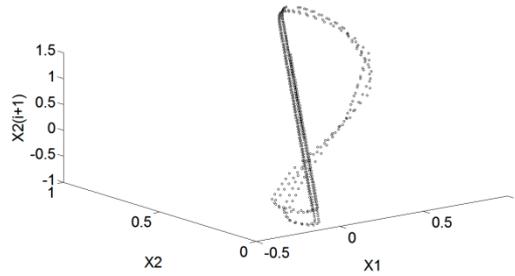


Figura 5.31 Mapa logístico del bloque 2 para $V_{dr}=0,20$

Los parámetros adimensionales, a partir de los datos anteriores, son $\xi=1/3 \cdot m_c/m=0,412$ y $\kappa=1,5$. El valor modificado de la aceleración de la gravedad, g' , viene dado por $g \cdot m/k_1=0,01778$ m.

El coeficiente de rozamiento estático, μ_s , se calcula a partir de una medida de fuerza de rozamiento del bloque con una masa adicional sobre la cinta. Para una masa total de 277 g se obtiene una fuerza de rozamiento de 1,6 N, lo que proporciona un valor de μ_s de 0,59. El problema se resuelve para la velocidad de la cinta $v'_{dr}=-0,002788$ m.

El modelo propuesto resuelve el Sistema de Ecuaciones (2.46). Las condiciones iniciales son las mencionadas en el Capítulo 2. La Figura 5.33 muestra el plano de fase para la velocidad de cinta mencionada.



Figura 5.32 Banco de ensayos

En la Figura 5.33 se puede apreciar la fase de stick, caracterizada por una línea horizontal de ordenada $-0,002788$ m mientras que la Figura 5.34 muestra el espacio de fase. La Figura 5.35 muestra el espectro del tramo de señal X_1 entre 0 y 1.000 s. Aparece una banda de frecuencias centrada en 0,143433 Hz.

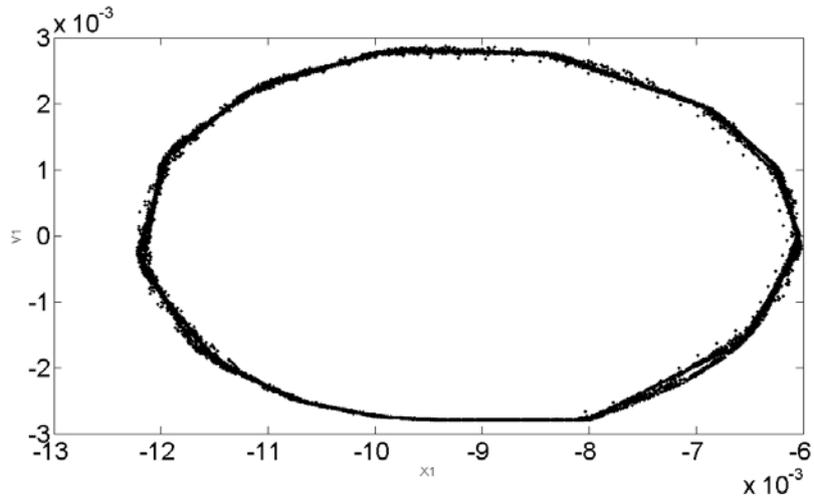


Figura 5.33 Plano de fase: $v'_{dr}=-0,002788$ m; $\xi=0,412$; $\kappa=1,5$; $t=100-1000$ s y $RELTOL=1e-4$

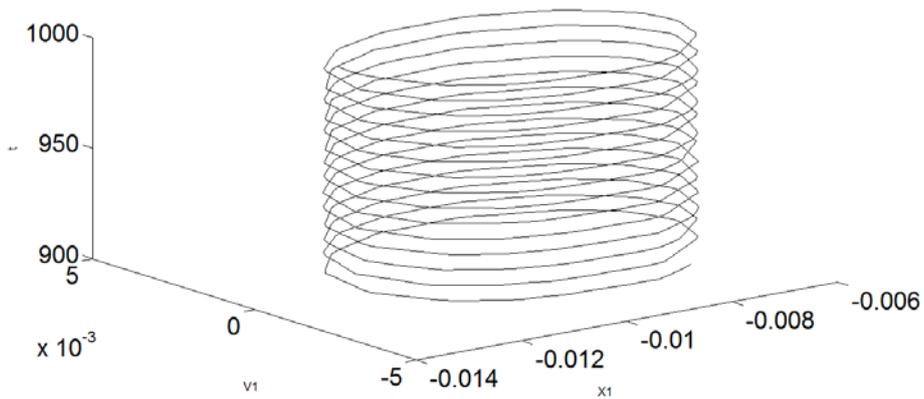


Figura 5.34 Espacio de fase: $v'_{dr}=-0,002788$ m; $\xi=0,412$; $\kappa=1,5$; $t=900-1000$ s y $RELTOL=1e-4$

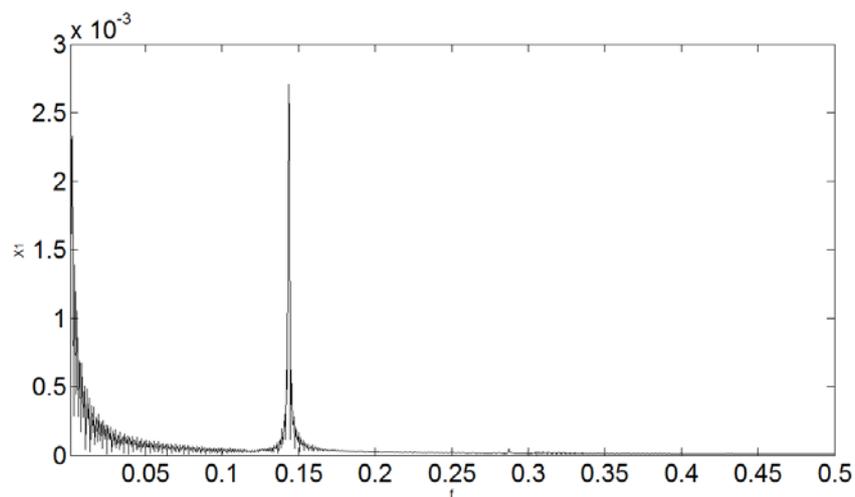


Figura 5.35 Espectro frecuencial de X_1 : $v'_{dr}=-0,002788$ m; $\xi=0,412$; $\kappa=1,5$; $t=100-1000$ s y $RELTOL=1e-4$

El mapa de Poincaré del sistema considerando un período $T=1/0,143433$ s, se muestra en la Figura 5.36. El sistema se comporta de forma caótica como pone de manifiesto este mapa.

Para poder cuantificar el caos se van a calcular los exponentes de Lyapunov de un tramo de señal, mediante la utilización de la herramienta OpenTSTool, de la Universidad de Göttingen. Para verificar la validez de esta herramienta se va a calcular los exponentes de Lyapunov de la ecuación de Duffing mediante el método basado en el Jacobiano para los parámetros:

- $\omega=1$, $\gamma=0,3$ y $\delta=0,15$, que posee un exponente máximo de Lyapunov de 0
- $\omega=1$, $\gamma=0,3$ y $\delta=0,25$, que posee un exponente máximo de Lyapunov de 0,117

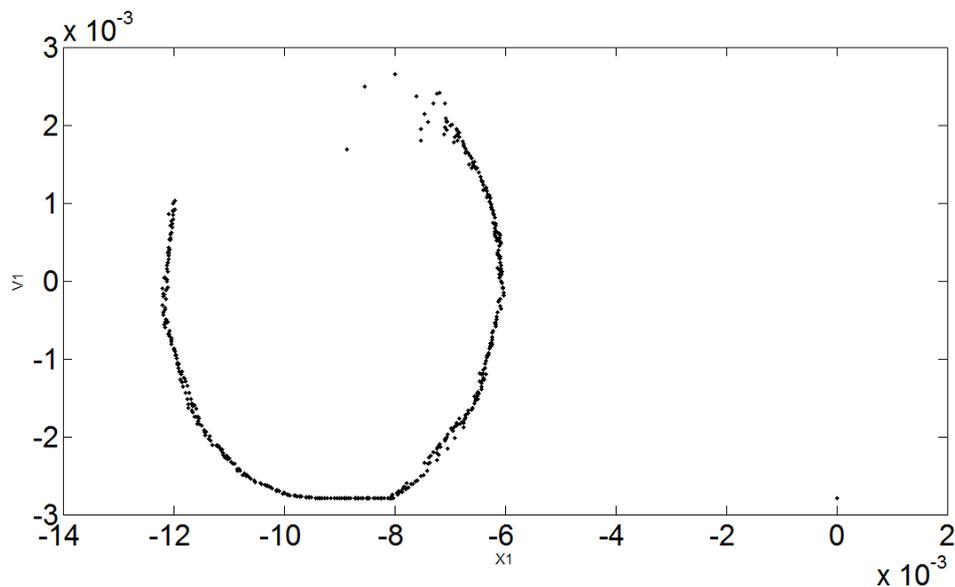


Figura 5.36 Mapa de Poincaré: $v'_{dr}=-0,002788$ m; $\xi=0,412$; $\kappa=1,5$; $t=0-3200$ s y $RELTOL=1e-4$

Para calcular los exponentes de Lyapunov se han generado dos series temporales: una recogida en el fichero “duforden.mat”, correspondiente al parámetro $\delta=0,15$, y otra en el fichero “dufcaos.mat”, correspondiente a $\delta=0,25$. En relación con el análisis de la serie temporal recogida en el fichero “duforden.mat”, el primer mínimo de la gráfica de información mutua, 4, es una buena estimación del intervalo de tiempo de retardo. Aplicando el procedimiento de Cao (Cao 1997) se puede estimar el valor mínimo de la dimensión de encaje, 2. Con estos parámetros se puede reconstruir el plano de fase de la señal, Figura 5.37. A partir de los datos de este plano de fase se puede obtener el error de predicción, Figura 5.38.

La pendiente nula de la curva representada en la Figura 5.38 coincide con la predicción de exponente máximo de Lyapunov obtenido mediante el método basado en el Jacobiano.

En cuanto al análisis de la serie temporal recogida en el fichero “dufcaos.mat”, el mínimo de la gráfica de información mutua, 1, corresponde a la estimación del intervalo de tiempo de retardo. Aplicando el procedimiento de Cao se puede estimar el valor mínimo de la dimensión de encaje, 3. Con estos parámetros se puede reconstruir el plano de fase de la señal, Figura 5.39. A partir de este plano de fase se puede obtener el error de predicción, Figura 5.40.

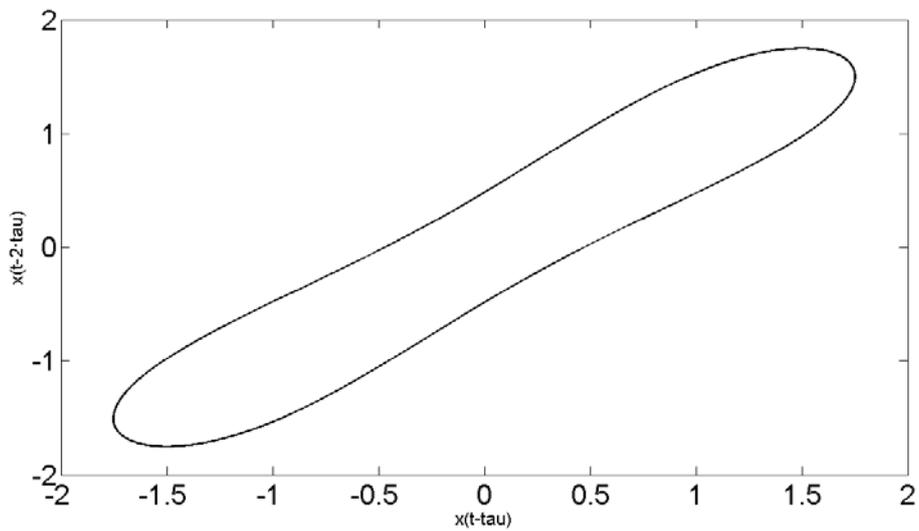


Figura 5.37 Reconstrucción del plano de fase del sistema con $\delta=0,15$

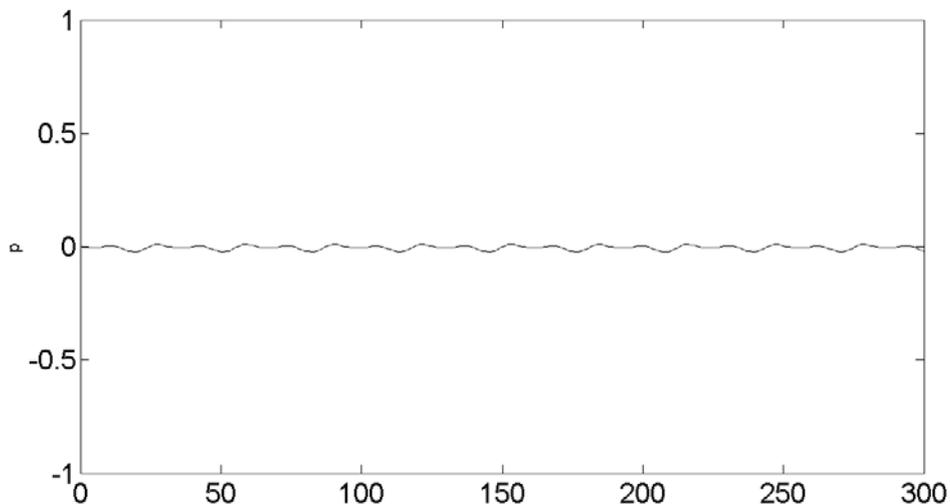


Figura 5.38 Error de predicción

La pendiente de la curva representada en la Figura 5.40, entre las abscisas 10 y 20, es 0,121, valor que corresponde al exponente máximo de Lyapunov. Si se compara esta estimación con el valor proporcionado por el método basado en el Jacobiano se obtiene un error relativo de 3,4%.

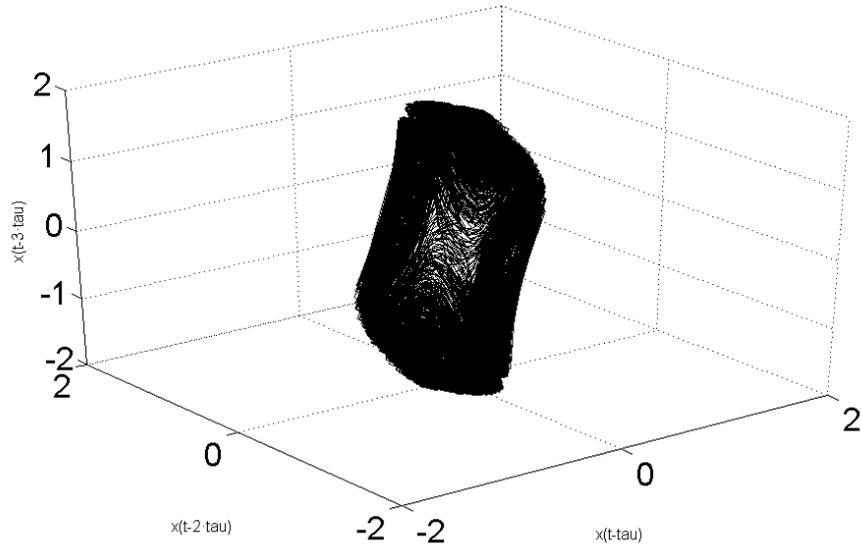


Figura 5.39 Reconstrucción del diagrama de fase del sistema con $\delta=0,25$

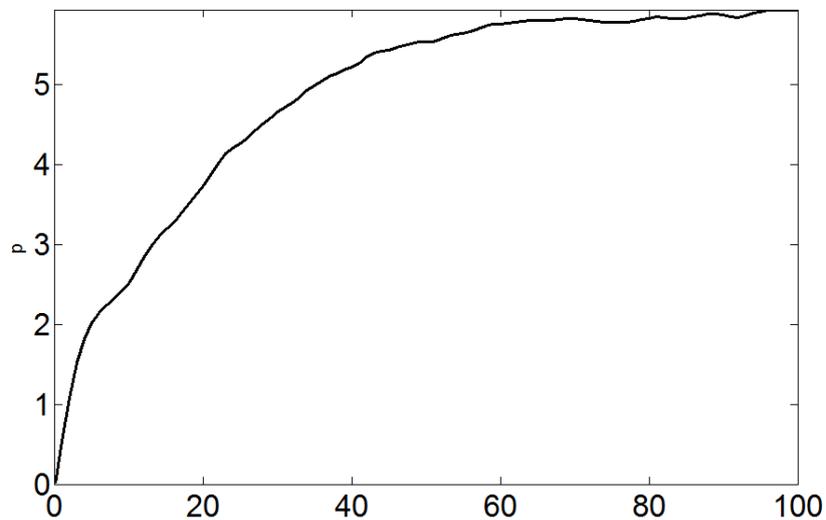


Figura 5.40 Error de predicción

Una vez verificada la herramienta OpenTSTool, se va a proceder a estimar el exponente máximo de Lyapunov de una serie temporal recogida en el fichero “freno.mat”, obtenida mediante el modelo en red del freno estudiado. El mínimo de la gráfica de información mutua, 16, corresponde a la estimación del intervalo de tiempo de retardo. Aplicando el procedimiento de Cao se puede estimar el valor mínimo de la dimensión

de encaje, 3. Con estos parámetros se puede reconstruir el plano de fase de la señal, Figura 5.41, y mediante los datos de este plano de fase, obtener el error de predicción, Figura 5.42.

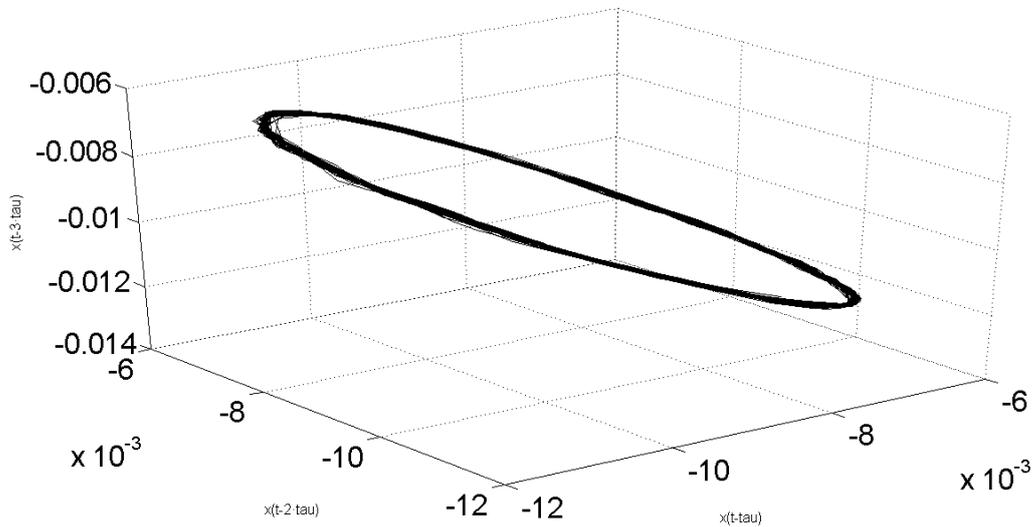


Figura 5.41 Reconstrucción del plano de fase del freno

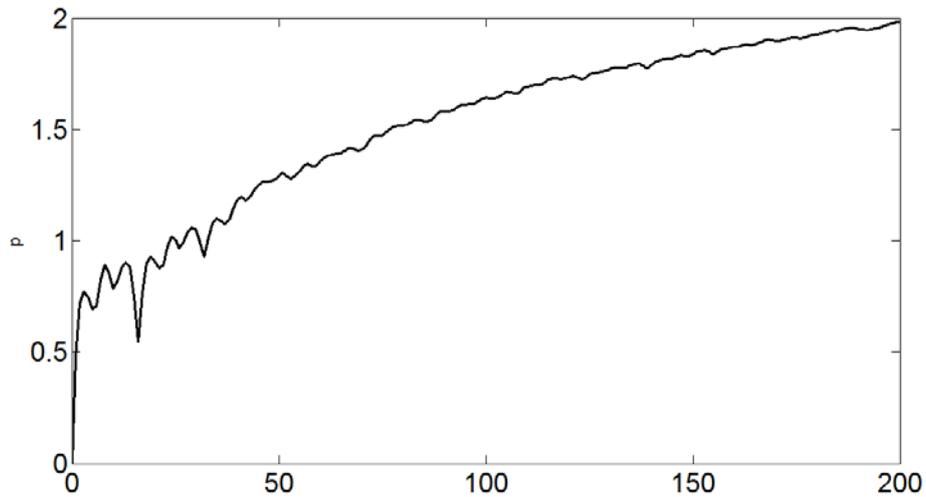


Figura 5.42 Error de predicción

La Figura 5.41 es la versión reconstruida del espacio de fase representado en la Figura 5.33, observándose claramente la correspondencia existente.

La pendiente de la curva representada en la Figura 5.42, entre las abscisas 60 y 160, es 0,00514, valor que hay que dividir por el tiempo de muestreo (t_s), 0,1s, (Parlitz 1998), lo que proporciona 0,0514, estimación del exponente máximo de Lyapunov. Este valor indica un comportamiento caótico del sistema.

5.5.1. VERIFICACIÓN EXPERIMENTAL

Para verificar los resultados anteriores se van a realizar unas medidas en el dispositivo experimental mostrado en la Figura 5.32. Los componentes del sistema de medida, Figura 5.43, son:

- Sensor láser de desplazamiento Omron Z4M-W40
- Amplificador de señal Z4M-W40
- Fuente de alimentación de 24 V_{DC}
- Tarjeta de adquisición NI modelo 9233

El sensor tiene una sensibilidad de 0,4 V/mm. El amplificador de señal se conecta mediante un cable BNC al canal 0 de una tarjeta de adquisición de señal conectada al ordenador mediante un puerto USB. La tarjeta de adquisición digitaliza la señal eléctrica analógica del acondicionador de señal.

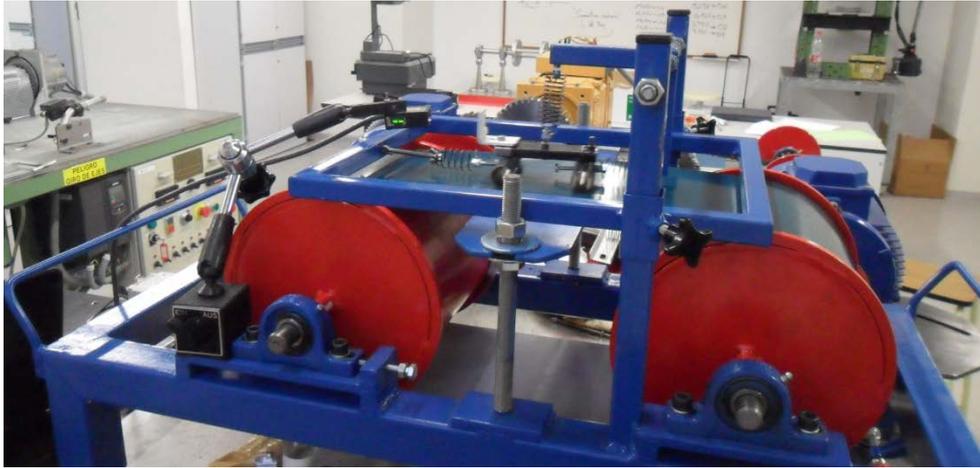
Las especificaciones técnicas de la tarjeta de adquisición son:

- 4 canales
- Frecuencia máxima de muestreo: 50 kS/s por canal
- Conversión analógico/digital de 24 bits

Se utiliza un ordenador con procesador Intel Core 2 Quad y el programa Signal Express de la aplicación informática Labview, versión 3, para el manejo de la tarjeta de adquisición, procesamiento y almacenamiento de las señales.

La Figura 5.44 muestra la medida del desplazamiento del bloque respecto del tiempo, y la Figura 5.45 el resultado del cálculo para el desplazamiento del bloque respecto del tiempo. Las amplitudes medida y calculada, así como las frecuencias, están suficientemente próximas, avalando la eficacia del modelo propuesto.

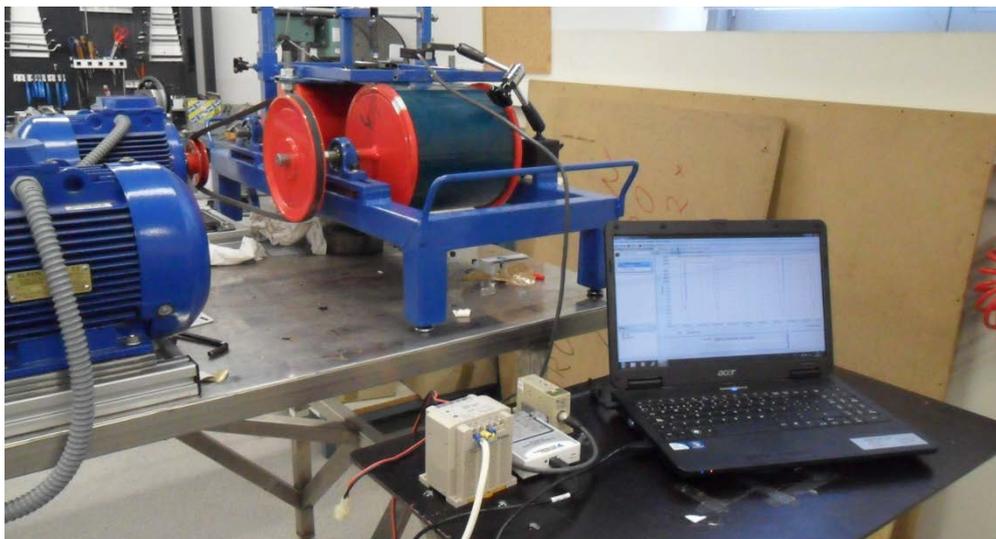
Capítulo 5 Aplicaciones de los modelos de fricción



a)



b)



c)

Figura 5.43 Sistema de medida: a) sensor, b) amplificador de señal y c) Tarjeta de adquisición y fuente de alimentación

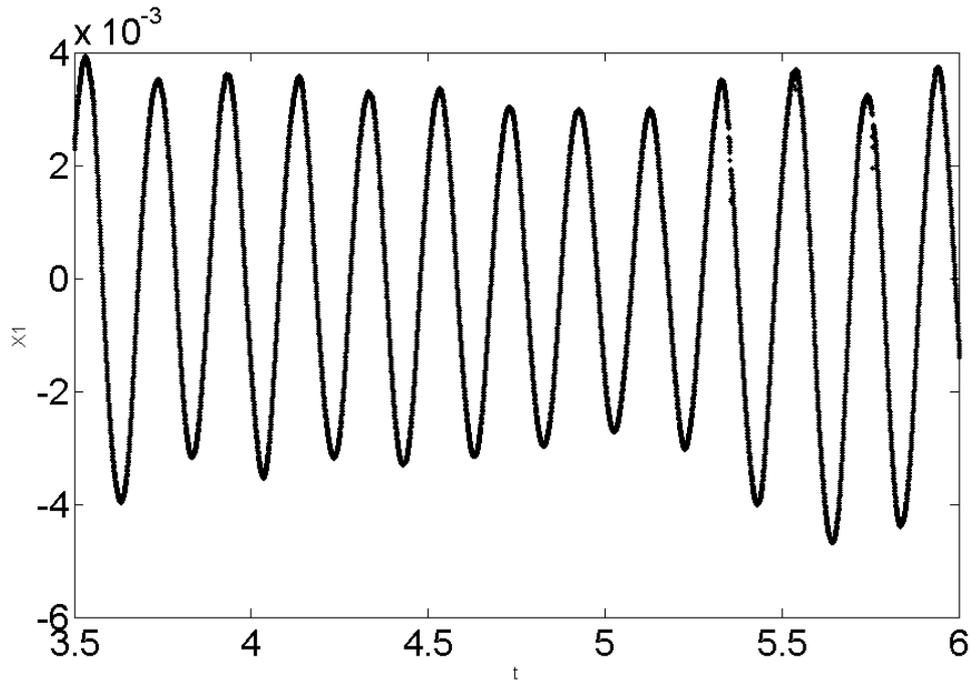


Figura 5.44 Medida de desplazamiento del bloque

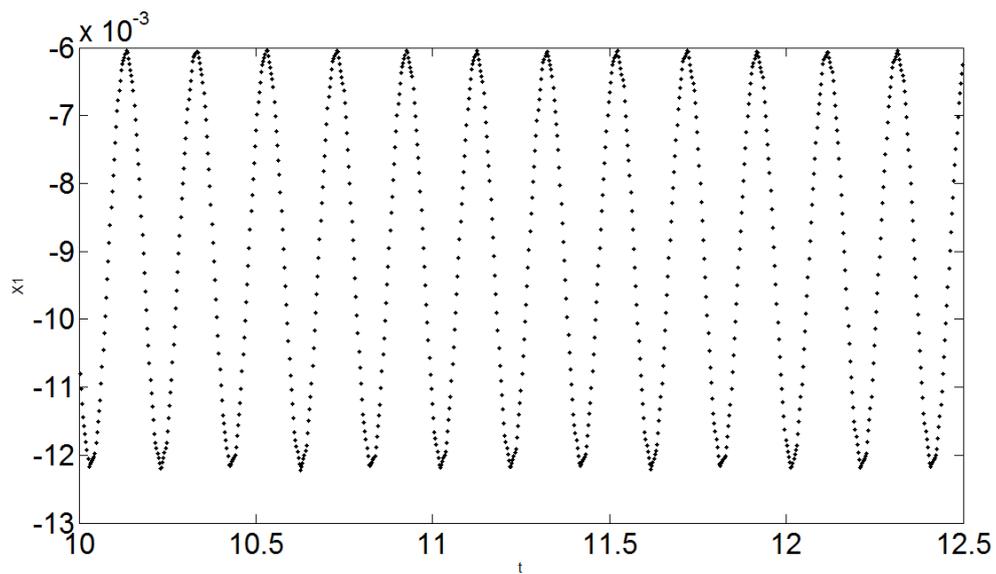


Figura 5.45 Desplazamiento calculado del bloque

El análisis de los resultados de esta simulación está pendiente de publicación como: Marín, F., F. Alhama, y col. “Modelling of Stick-slip Behaviour in a Girling Brake Using Network Simulation Method”.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Cao, L. Y. (1997). "Practical method for determining the minimum embedding dimension of a scalar time series." *Physica D* 110(1-2): 43-50.
- Elmer, F. J. (1998). *Lecture Room: Stability and Bifurcation*. University of Basilea.
- Galvanetto, U. (2004). "Sliding bifurcations in the dynamics of mechanical systems with dry friction-remarks for engineers and applied scientists." *Journal of Sound and Vibration* 276(1-2): 121-139.
- Galvanetto, U. (2005). "Unusual chaotic attractors in nonsmooth dynamic systems." *International Journal of Bifurcation and Chaos* 15(12): 4081-4086.
- Galvanetto, U. y S. R. Bishop (1995). "Characterization of the dynamics of a 4-dimensional stick-slip system by a scalar variable." *Chaos Solitons & Fractals* 5(11): 2171-2179.
- Galvanetto, U., S. R. Bishop, y col. (1995). "Mechanical stick-slip vibrations." *International Journal of Bifurcation and Chaos* 5(3): 637-651.
- Galvanetto, U. y C. Knudsen (1997). "Event maps in a stick-slip system." *Nonlinear Dynamics* 13(2): 99-115.
- Hölscher, H., W. Allers, y col. (2001). "Simulation of NC-AFM images of xenon(111)." *Applied Physics A-Materials Science & Processing* 72: S35-S38.
- Hölscher, H., U. D. Schwarz, y col. (1996). "Simulation of a scanned tip on a NaF(001) surface in friction force microscopy." *Europhysics Letters* 36(1): 19-24.
- Hölscher, H., U. D. Schwarz, y col. (1997). "Modelling of the scan process in lateral force microscopy." *Surface Science* 375(2-3): 395-402.
- Hölscher, H., U. D. Schwarz, y col. (1998). "Consequences of the stick-slip movement for the scanning force microscopy imaging of graphite." *Physical Review B* 57(4): 2477-2481.
- Kielkowski, R. (1994). *Inside Spice*. McGraw-Hill, New York, USA.
- Nagel, L. W. (1975). *Spice2: A Computer Program To Simulate Semiconductor Circuits*. Electronic Research Laboratory. Universidad de California, Berkeley, USA.
- Nussbaum, J. y A. Ruina (1987). "A 2 degree-of-freedom earthquake model with static dynamic friction." *Pure and Applied Geophysics* 125(4): 629-656.
- Parlitz, U. (1998). *Nonlinear time-series analysis, . Nonlinear Modeling - Advanced Black-Box Techniques*. J. A. K. Suykens y J. Vandewalle (Eds.). Kluwer Academic Publishers, Boston: 209-239.

- Sasaki, N., K. Kobayashi, y col. (1996). "Atomic-scale friction image of graphite in atomic-force microscopy." *Physical Review B* 54(3): 2138-2149.
- van de Vrande, B. L., D. H. van Campen, y col. (1999). "An approximate analysis of dry-friction-induced stick-slip vibrations by a smoothing procedure." *Nonlinear Dynamics* 19(2): 157-169.
- Vladimirescu, A. (1994). *The Spice Book*. John Wiley And Sons, New York, USA.
- Weiss, M. y F. J. Elmer (1996). "Dry friction in the Frenkel-Kontorova-Tomlinson model: static properties." *Physical Review B* 53(11): 7539-7549.
- Weiss, M. y F. J. Elmer (1997). "Dry friction in the Frenkel-Kontorova-Tomlinson model: dynamical properties." *Zeitschrift fur Physik B-Condensed Matter* 104(1): 55-69.

CONTRIBUCIONES Y CONCLUSIONES

Las contribuciones y conclusiones de esta memoria se pueden sintetizar en los siguientes puntos:

1. En relación con la estructura de las ecuaciones de gobierno en los procesos de fricción

Tras una revisión exhaustiva del estado del arte, se ha sistematizado la formulación de los procesos de fricción, dado que en la documentación accesible se abordan solamente modelos de casos particulares de fricción, con parámetros variables. Existen dos grandes bloques bajo los que se encuadra el estudio de la fricción mediante modelos: a escala microscópica y escala macroscópica. Se han resaltado las semejanzas entre los sistemas estudiados concretándose, posteriormente, las ecuaciones de gobierno de cada caso. Así, en el modelo de Frenkel-Kontorova-Tomlinson se han abordado unas ecuaciones equivalentes a las ecuaciones utilizadas por Weiss y Elmer (Weiss y Elmer 1996; Weiss y Elmer 1997); en el modelo de fricción en microscopio de fuerza atómica, ecuaciones equivalentes a las utilizadas por Hölscher y col. (Holscher, Schwarz y col. 1996; Holscher, Allers y col. 2001), y por Sasaki, Kobayashi y col. (Sasaki, Kobayashi y col. 1996); en el modelo de Kaidanovsky-Khaikin, ecuaciones equivalentes a las utilizadas por Galvanetto (Galvanetto 1997) y por van de Vrande, van Campen y col. (van de Vrande, van Campen y col. 1999); en el modelo de Burrige-Knopoff, ecuaciones equivalentes a las utilizadas por Galvanetto (Galvanetto 1997) y por Nussbaum y Ruina (Nussbaum y Ruina 1987) y, finalmente, en el modelo de un mecanismo de freno, las ecuaciones equivalentes a las utilizadas por Awrejcewicz y Olejnik (Awrejcewicz y Olejnik 2007).

A diferencia de la mayoría de los trabajos de otros autores, en esta memoria no se han adoptado simplificaciones en el modelo matemático a la hora de resolver las ecuaciones propuestas. Así, en el modelo de Frenkel-Kontorova-Tomlinson, en contraste con los métodos numéricos empleados por otros autores, entre ellos el de Weiss y Elmer, el modelo en red no necesita consideraciones como la linealización de la función del potencial de interacción ni el uso a priori de funciones tipo, por ejemplo la función envolvente, que representan la solución del problema. Las soluciones transitoria y estacionaria se comparan satisfactoriamente con los resultados de Weiss y Elmer para el

rango de valores de los dos parámetros principales que estos autores emplean, en especial, aquellos asociados a la aparición de distintos tipos de movimientos.

En el modelo de fricción en microscopio de fuerza atómica, a diferencia de lo propuesto por otros autores, como Sasaki, Kobayashi y col. con muestra de grafito y Hölscher, Allers y col. con xenón, el modelo aportado ha asumido una puntera de masa no despreciable y la velocidad no nula del soporte del microscopio, ambos parámetros estimados a partir de los resultados obtenidos por estos autores. Para el segundo caso el modelo ha considerado el desplazamiento vertical y el ángulo de escaneado, algo que Hölscher, Allers y col. no mencionan en sus publicaciones.

En el modelo de Kaidanovsky-Khaikin, en comparación con el propuesto por van de Vrande, van Campen y col., la flexibilidad de nuestro modelo es suficiente para implementar todos los parámetros que afectan al sistema sin necesidad de cambios importantes. Además, el modelo es capaz de proporcionar un estudio sistemático de los movimientos del bloque mediante planos de fase; asimismo, reproduce los desplazamientos del bloque para un rango amplio del parámetro de la función que aproxima el coeficiente de fricción, un aspecto fundamental del comportamiento del sistema que otros autores, centrados en el estudio del efecto de la velocidad de deslizamiento sobre la estabilidad del mismo, no han investigado. Igualmente, el modelo estudia la influencia que tiene la velocidad de la cinta sobre el comportamiento del sistema. Este parámetro, investigado por otros autores en el rango en el que aparece stick-slip, se ha extendido, en el modelo propuesto, a valores para los que este fenómeno va desapareciendo gradualmente. Finalmente, en cuanto al parámetro del coeficiente de fricción dinámica, se puede decir que tiene una ligera influencia en las transiciones de movimientos.

En el modelo de Burridge-Knopoff, el modelo en red proporciona resultados similares a los obtenidos en el modelo anterior, y además es capaz de simular el efecto del conjunto completo de parámetros que caracterizan el sistema. Se ha verificado que los planos de fase de ambos bloques, diferentes entre sí, manifiestan los atractores para determinados valores de la velocidad de la cinta.

Finalmente, en el modelo del mecanismo de un freno, y a diferencia de lo propuesto por otros autores como Awrejcewicz y Olejnik, no se ha considerado amortiguamiento

horizontal y vertical, para aumentar la inestabilidad del sistema. El modelo aportado sí que ha tenido en cuenta que la rigidez de los dos resortes horizontales es idéntica, algo que Awrejcewicz y Olejnik no mencionan en sus publicaciones.

2. En relación con el diseño de modelos y su verificación

Los modelos en red diseñados y contrastados para las condiciones de contorno se ha extendido a los siguientes problemas:

- i) Formulación de fricción seca a escala microscópica: modelo Frenkel-Kontorova-Tomlinson,
- ii) Formulación de fricción seca a escala microscópica: modelo de puntera de microscopio de fuerza atómica y superficie suave a escala atómica,
- iii) Formulación de fricción seca a escala macroscópica: modelo de Kaidanovsky-Khaikin,
- iv) Formulación de fricción seca a escala macroscópica: modelo de Burridge-Knopoff,
- v) Formulación de fricción seca a escala macroscópica: modelo de un mecanismo de freno

En general, cada modelo presenta un reto particular en su planteamiento, resolución y representación de los resultados, por lo que se debe comentar cada uno por separado:

- i) En el modelo de Frenkel-Kontorova-Tomlinson, ha sido necesario desarrollar un procedimiento para la solución del caso estático,
- ii) En el modelo de fricción en microscopio de fuerza atómica, documentado de forma incompleta, hubo que estimar las rigideces y masas de la puntera por analogía con un tipo de microscopio distinto al empleado en el ensayo,
- iii) En el modelo de Kaidanovsky-Khaikin hubo que reproducir y representar los desplazamientos del bloque para un rango amplio del coeficiente de fricción. También hubo que reproducir y representar la influencia de la velocidad de la cinta en el comportamiento del sistema, incluso para valores para los que este fenómeno desaparece gradualmente.
- iv) En el modelo de Burridge-Knopoff hubo que reproducir y representar los desplazamientos de los dos bloques para un rango amplio del coeficiente de fricción. También hubo que reproducir y representar la influencia de la velocidad

de la cinta en el comportamiento del sistema, incluso para valores para los que este fenómeno va desapareciendo gradualmente. Y además hubo que verificar que los planos de fase de ambos bloques, diferentes entre sí, reproducen los atractores para una velocidad determinada.

- v) En el modelo de un mecanismo de freno, parametrizado de formas diferentes en la documentación disponible, hubo que re-parametrizarlo de la forma que parece más apropiada para reducir los tiempos de computación

Los modelos diseñados han sido aplicados en cada caso, con éxito, reproduciéndose los resultados obtenidos por otros autores, mediante otros métodos, cuando existen, o bien mediante resultados experimentales.

3. En relación con el ensayo experimental

Se ha diseñado un dispositivo para verificar la validez del método aplicado en el caso del modelo del freno. El mecanismo permite ensayar diferentes valores de los parámetros de funcionamiento: velocidad de la cinta, masa del bloque, rigidez de los resortes, momento de inercia del brazo acodado y coeficiente de fricción, dependiente del material utilizado en la superficie del bloque.

Como conclusión general cabe decir que la aplicación del método de redes a problemas dinámicos y fuertemente no lineales asociados a la fricción seca, en sus diferentes tipos, ha proporcionado modelos eficientes y precisos capaces de reproducir soluciones de simulaciones numéricas y resultados experimentales, con tiempos de computación adecuados sin necesidad de asumir las hipótesis simplificadoras en las ecuaciones de gobierno que aparecen en la literatura científica relacionada con el tema. Por otro lado, la elaboración de un software específico para la simulación numérica directa de los problemas, sin necesidad de entrar en el núcleo de cálculo, dota a la comunidad científica de una herramienta potente de cálculo y predicción en problemas de índole similar.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Awrejcewicz, J. y P. Olejnik (2007). "Occurrence of stick-slip phenomenon." *Journal of Theoretical and Applied Mechanics* 45(1): 33-40.
- Galvanetto, U. (1997). "Bifurcations and Chaos in a four-dimensional mechanical system with dry friction." *Journal of Sound and Vibration* 204(4): 690-695.
- Hölscher, H., W. Allers, y col. (2001). "Simulation of NC-AFM images of xenon(111)." *Applied Physics A-Materials Science & Processing* 72: S35-S38.
- Hölscher, H., U. D. Schwarz, y col. (1996). "Simulation of a scanned tip on a NaF(001) surface in friction force microscopy." *Europhysics Letters* 36(1): 19-24.
- Nussbaum, J. y A. Ruina (1987). "A 2 degree-of-freedom earthquake model with static dynamic friction." *Pure and Applied Geophysics* 125(4): 629-656.
- Sasaki, N., K. Kobayashi, y col. (1996). "Atomic-scale friction image of graphite in atomic-force microscopy." *Physical Review B* 54(3): 2138-2149.
- van de Vrande, B. L., D. H. van Campen, y col. (1999). "An approximate analysis of dry-friction-induced stick-slip vibrations by a smoothing procedure." *Nonlinear Dynamics* 19(2): 157-169.
- Weiss, M. y F. J. Elmer (1996). "dry friction in the Frenkel-Kontorova-Tomlinson model: static properties." *Physical Review B* 53(11): 7539-7549.
- Weiss, M. y F. J. Elmer (1997). "Dry friction in the Frenkel-Kontorova-Tomlinson model: dynamical properties." *Zeitschrift Fur Physik B-Condensed Matter* 104(1): 55-69.

ANEXO A

PLANOS DE FASE, MAPAS DE POINCARÉ Y MAPAS LOGÍSTICOS

A.1 PLANO DE FASE: PÉNDULO SIMPLE

La ecuación del péndulo simple es (Banerjee 2005)

$$l \cdot \ddot{x} + g \cdot \text{sen}x = 0 \quad (\text{A.1})$$

Para una longitud del péndulo $l=g$, las ecuaciones de estado son

$$\begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = -\text{sen}x \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Los puntos de equilibrio de este sistema, valores nulos de dx/dt y dy/dt , son los siguientes: $(0,0)$, $(-2\pi,0)$, $(2\pi,0), \dots$ El sistema linealizado en torno al punto (x_0, y_0) se escribe en la forma

$$\begin{bmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{bmatrix} = A \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} ; A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\cos x_0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.3})$$

Los autovalores se obtienen de la ecuación

$$\det[A - \lambda \cdot I] = 0 \quad (\text{A.4})$$

Para el punto de equilibrio $(0,0)$ la Ecuación (A.4) se transforma en:

$$\lambda^2 + 1 = 0 \quad (\text{A.5})$$

Los autovalores son $\pm j$ y el punto de equilibrio estable es el centro de un campo vectorial, Figura A.1-a. Para el punto de equilibrio $(\pi,0)$ la Ecuación (A.4) se transforma en

$$\lambda^2 - 1 = 0 \quad (\text{A.6})$$

Los autovalores son ± 1 y el punto de equilibrio es un punto de silla, Figura A.1-b. Para el autovalor $\lambda_1=1$, el autovector corresponde a la dirección $y=x$. Análogamente, el autovector correspondiente al autovalor $\lambda_2=-1$ es $y=-x$, punto de equilibrio inestable.

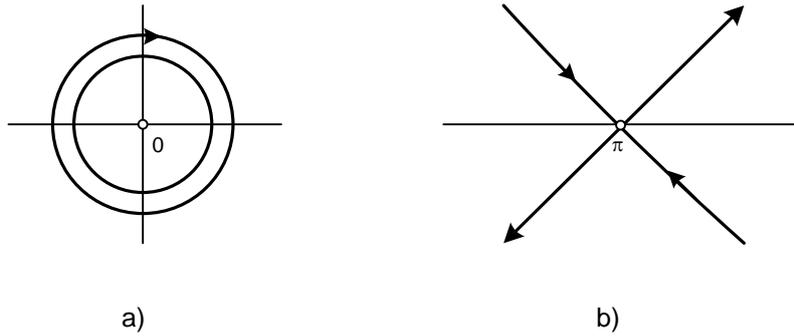


Figura A.1 Comportamiento de un péndulo simple en torno a algunos puntos de equilibrio

La Figura A.2 muestra el plano de fase de un péndulo simple, donde los puntos de equilibrio tipo silla separan las variedades invariantes.

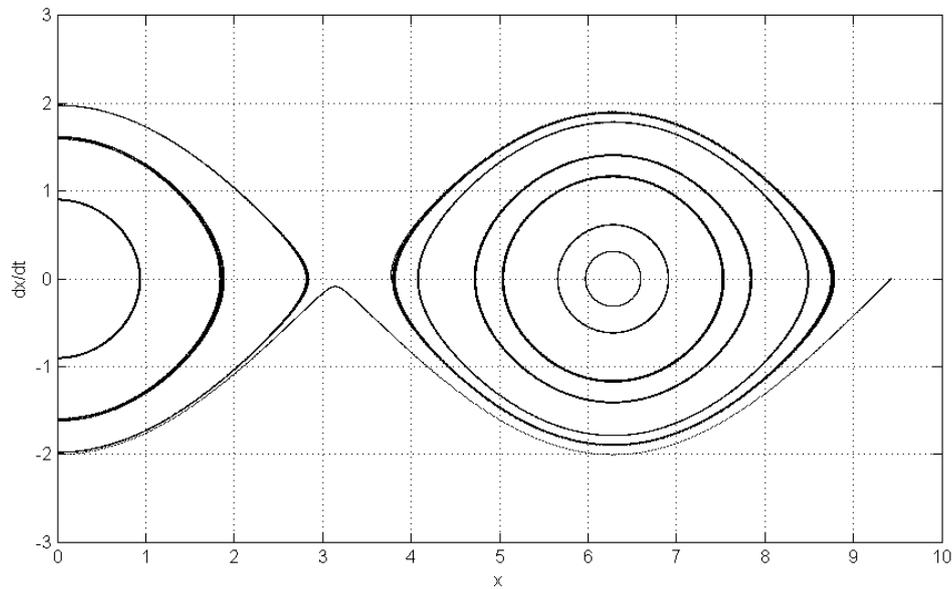


Figura A.2 El plano de fase de un péndulo simple

Si se considera el amortiguamiento, el punto de equilibrio (0,0) ya no será un centro con sólo autovalores imaginarios. Así para el péndulo amortiguado definido por las ecuaciones

$$\begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = -\omega^2 \cdot \text{sen}(x) - c \cdot y \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

Los autovalores complejos conjugados originan órbitas espirales, perdiéndose la separación entre las variedades invariantes, Figura A.3.

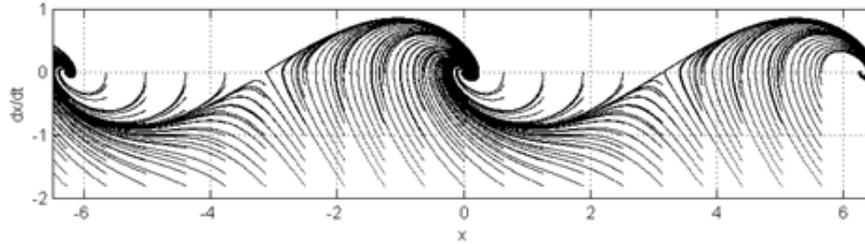


Figura A.3 El plano de fase de un péndulo amortiguado para $\omega=1$ y $c=1$

A.2 PLANO DE FASE: ECUACIÓN DE DUFFING

En la ecuación de Duffing (Parker y Chua 1987)

$$\begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = x - x^3 - \delta \cdot y + \gamma \cdot \cos(\omega \cdot t) \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

para $\gamma=0$, los puntos de equilibrio son (Feng, Chen y col. 2006): $(-1,0)$, $(0,0)$ y $(1,0)$. El sistema linealizado en torno al punto (x_0, y_0) se escribe en la forma

$$\begin{bmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{bmatrix} = A \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} ; \quad A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 - 3 \cdot x_0^2 & -\delta \end{bmatrix} \quad (\text{A.9})$$

Los autovalores para el punto de equilibrio $(0,0)$ son

$$\lambda_{1,2} = -\frac{\delta}{2} \pm \frac{\sqrt{\delta^2 + 4}}{2} \quad (\text{A.10})$$

por lo que se trata de un punto de silla porque $\lambda_{1,2} \in \mathbb{R}$. Los autovalores para los otros dos puntos de equilibrio son:

$$\lambda_{1,2} = -\frac{\delta}{2} \pm \frac{\sqrt{\delta^2 - 8}}{2} \quad (\text{A.11})$$

Si $0 < \delta < \sqrt{8}$, la trayectoria es una espiral hacia dentro, Figura A.4. Si $\delta < 0$, la trayectoria es una espiral hacia fuera, Figura A.5. Si $\delta \geq \sqrt{8}$, la trayectoria es parecida al caso anterior.

Si $\gamma=0,3$ y $\omega=1$, se obtienen trayectorias con varias frecuencias. Así, para $\delta=0,15$ la trayectoria es periódica, Figura A.6-a, y el plano de fase muestra un ciclo límite, Figura A.6-b. Para $\delta=0,22$ la trayectoria tiene tres picos, Figura A.7-a, y el plano de fase muestra un ciclo límite, Figura A.7-b.

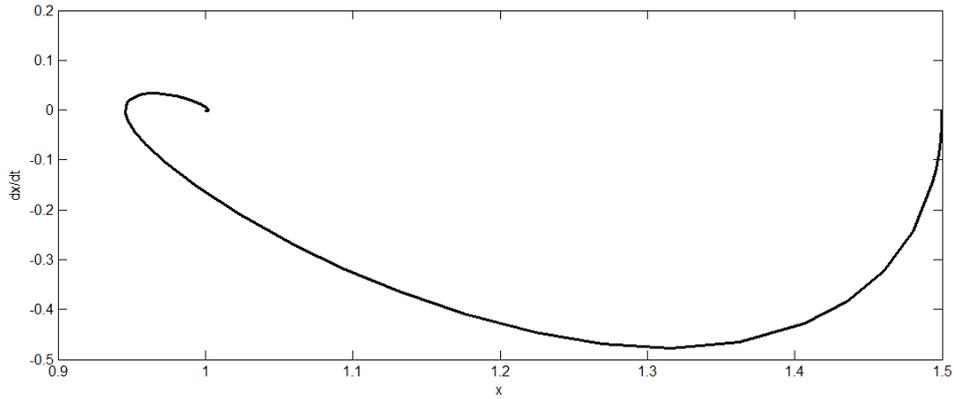


Figura A.4 Plano de fase de la ecuación de Duffing, para los siguientes parámetros y condiciones iniciales: $\gamma=0$, $\omega=1$, $\delta=2$ y $[1,5 \ 0]$

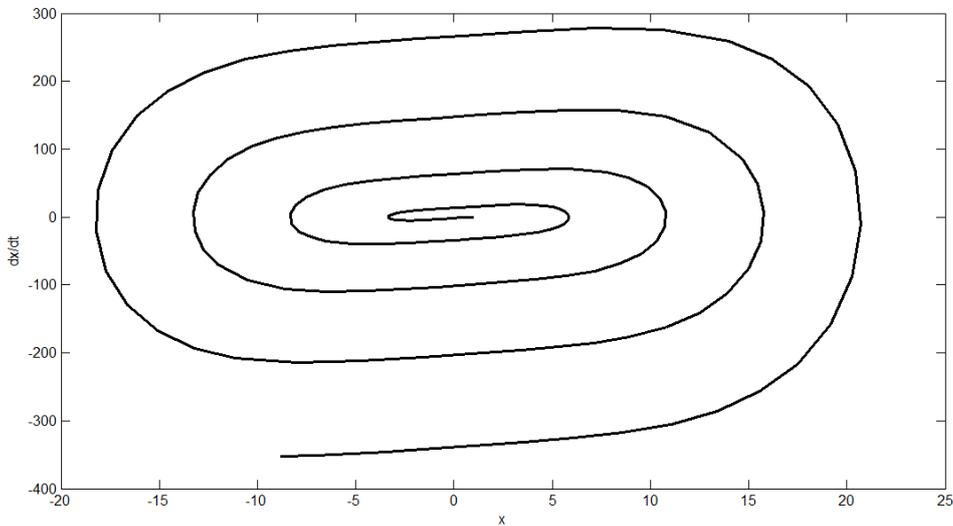


Figura A.5 Plano de fase de la ecuación de Duffing, para los siguientes parámetros y condiciones iniciales: $\gamma=0$, $\omega=1$, $\delta=-2$ y $[1,01 \ 0]$

La Figura A.6-c muestra una frecuencia fundamental, con armónicos de valor despreciable. Lógicamente la frecuencia fundamental coincide con el valor $\omega/2 \cdot \pi$. Sin embargo, en la Figura A.7-c se puede observar la existencia de los armónicos impares 3 y 5.

Para $\delta=0,25$ la trayectoria es aperiódica, Figura A.8-a, y el plano de fase muestra un conjunto límite, Figura A.8-b. La Figura A.8-c muestra una multiplicidad de frecuencias más propias de una señal con ruido, característica del caos.

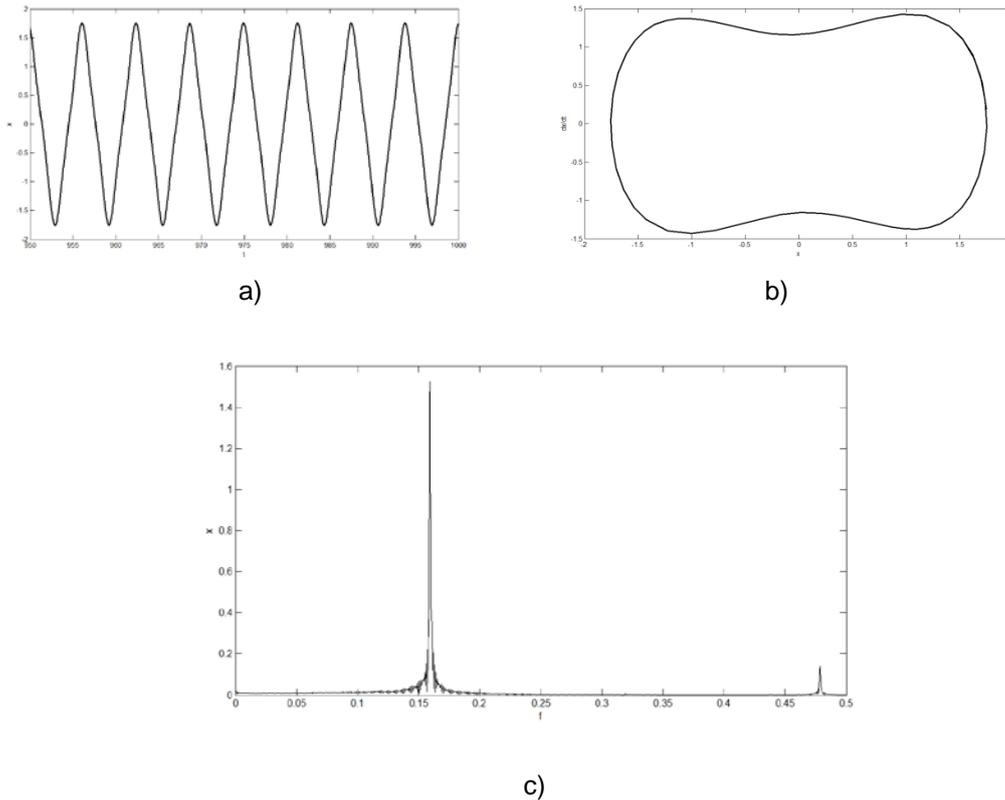


Figura A.6 a) Cronograma, b) plano de fase y c) espectro frecuencial de la ecuación de Duffing, para los siguientes parámetros y condiciones iniciales: $\gamma=0,3$, $\omega=1$, $\delta=0,15$ y $[1,7 \ 0]$

A.3 PLANO DE FASE: ECUACIÓN DE VAN DER POL

La ecuación de van der Pol (Banerjee 2005)

$$\ddot{x} - \mu(1 - x^2)\dot{x} + x = 0 \quad (\text{A.12})$$

puede reescribirse en forma de ecuaciones de estado

$$\begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = \mu(1 - x^2)y - x \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

Sólo hay un punto de equilibrio, $(0,0)$. El sistema linealizado en torno al punto (x_0, y_0) es

$$\begin{bmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{bmatrix} = A \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} ; A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -2\mu \cdot x_0 \cdot y_0 - 1 & \mu - \mu \cdot x_0^2 \end{bmatrix} \quad (\text{A.14})$$

Para el punto de equilibrio $(0,0)$ la ecuación para calcular los autovalores es

$$\lambda^2 - \mu \cdot \lambda + 1 = 0 \quad (\text{A.15})$$

Anexo A Planos de fase, mapas de Poincaré y mapas logísticos

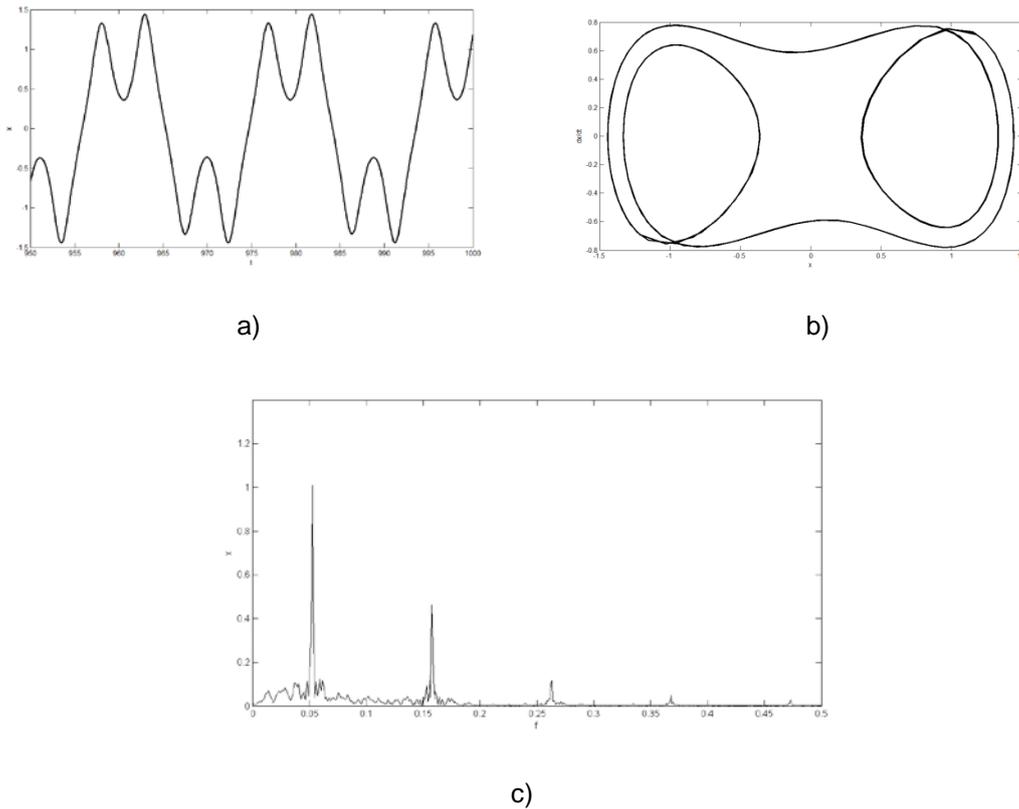


Figura A.7 a) Cronograma, b) plano de fase y c) espectro frecuencial de la ecuación de Duffing, para los siguientes parámetros y condiciones iniciales: $\gamma=0,3$, $\omega=1$, $\delta=0,22$ y $[1,7 \ 0]$

y los autovalores son

$$\lambda_{1,2} = -\frac{\mu}{2} \pm \frac{\sqrt{\mu^2 - 4}}{2} \quad (\text{A.16})$$

Para $|\mu| < 2$, los autovalores son números complejos conjugados. La Figura A.9 representa los planos de fase de la ecuación de van der Pol.

Si $\mu < 0$, la solución, trayectoria, es una espiral hacia adentro. La espiral acaba cuando se alcanza el punto de equilibrio $(0,0)$. Si $\mu > 0$, y la condición inicial está dentro del ciclo límite la espiral es hacia afuera, mientras que si la condición inicial está fuera del ciclo límite la espiral es hacia dentro y conduce al ciclo límite. Si se representa la variable de estado frente al tiempo cuando alcanza el ciclo límite, se observa la periodicidad de la señal con un período claro.

Si a la Ecuación (A.12) se le añade una función cosenoidal y se hace $\mu=1$ (Parker y Chua 1987), se obtiene el sistema

$$\begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = (1 - x^2) \cdot y - x + A \cdot \cos(\omega \cdot t) \end{cases} \quad (\text{A.17})$$

donde $\omega/2 \cdot \pi$ es la frecuencia de la función cosenoidal. Si $A=0,5$ y $\omega=1,1$, se obtienen un plano de fase sin ciclo límite, Figura A.10-a. Analizando el espectro frecuencial, Figura A.10-b, se observa que las dos frecuencias de mayor amplitud son inconmensurables. Este sistema es cuasi-periódico.

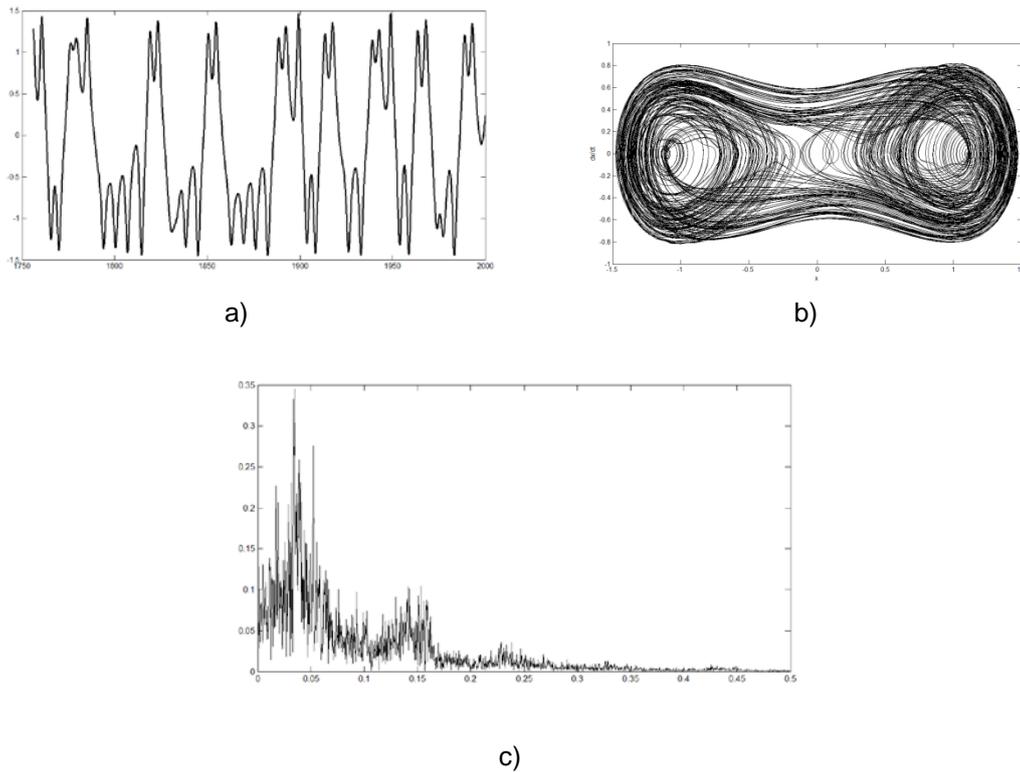


Figura A.8 a) Cronograma, b) plano de fase y c) espectro frecuencial de la ecuación de Duffing, para los siguientes parámetros y condiciones iniciales: $\gamma=0,3$, $\omega=1$, $\delta=0,25$ y $[1,7 \ 0]$

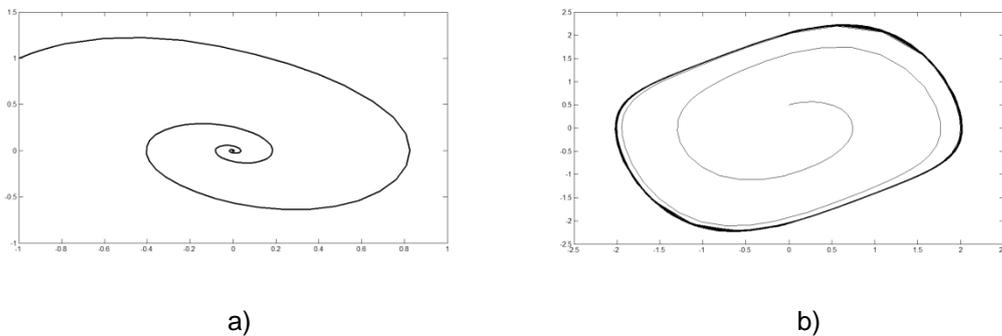


Figura A.9 Planos de fase del sistema representado por la ecuación de van der Pol a) $\mu < 0$ y b) $\mu > 0$. La línea gruesa muestra el ciclo límite

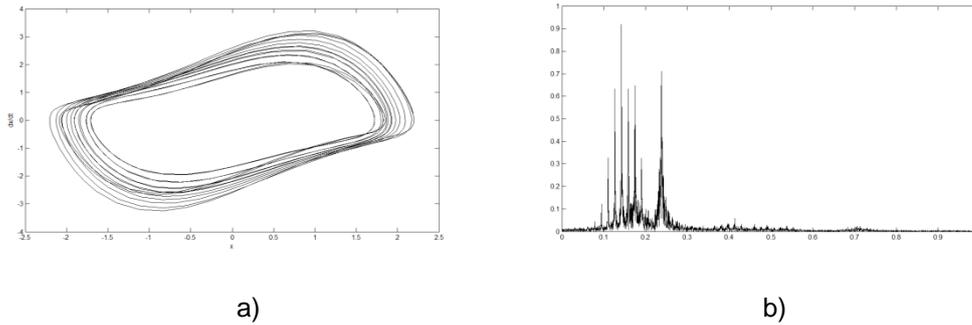


Figura A.10 Sistema representado por la ecuación de van der Pol con los parámetros $\mu=1$, $A=0,5$ y $\omega=1,1$. a) Plano de fase y b) espectro frecuencial

A.4 MAPA DE POINCARÉ

Se define el mapa de Poincaré como la intersección entre la trayectoria y un plano en el espacio de fases, Figura A.11. Lógicamente la trayectoria atraviesa el plano primero en una dirección y posteriormente en la contraria. El mapa de Poincaré únicamente considera las intersecciones en una sola dirección.

La Figura A.12-a muestra una primera intersección y un salto al punto que representa la siguiente intersección. Si la trayectoria es la de un ciclo límite de un sistema periódico, el mapa de Poincaré es un punto (punto fijo), Figura A.12-b. Si la trayectoria es la de un sistema de período múltiple, Figura A.7, el mapa de Poincaré contiene múltiples puntos. Para trayectorias cuasiperiódicas, Figura A.10, el mapa de Poincaré es un lazo cerrado. Finalmente, para sistemas aperiódicos el mapa de Poincaré contiene infinitos puntos confinados en una región y con una estructura compleja, Figura A.8.

Hay una correspondencia unívoca entre la representación temporal continua del sistema y la representación discreta del mapa de Poincaré, por lo que el comportamiento del sistema en la proximidad de un punto fijo puede evaluarse mediante aproximaciones lineales del mapa. Generalmente es conveniente elegir un plano paralelo a uno de los ejes. El mapa de Poincaré del sistema periódico representado en la Figura A.6 es un punto fijo, Figura A.13.

La Figura A.14 muestra el mapa de Poincaré del sistema representado por la ecuación de Duffing de la Figura A.7-b. La Figura A.15 muestra el mapa de Poincaré del sistema representado por la ecuación de van der Pol de la Figura A.10-a.

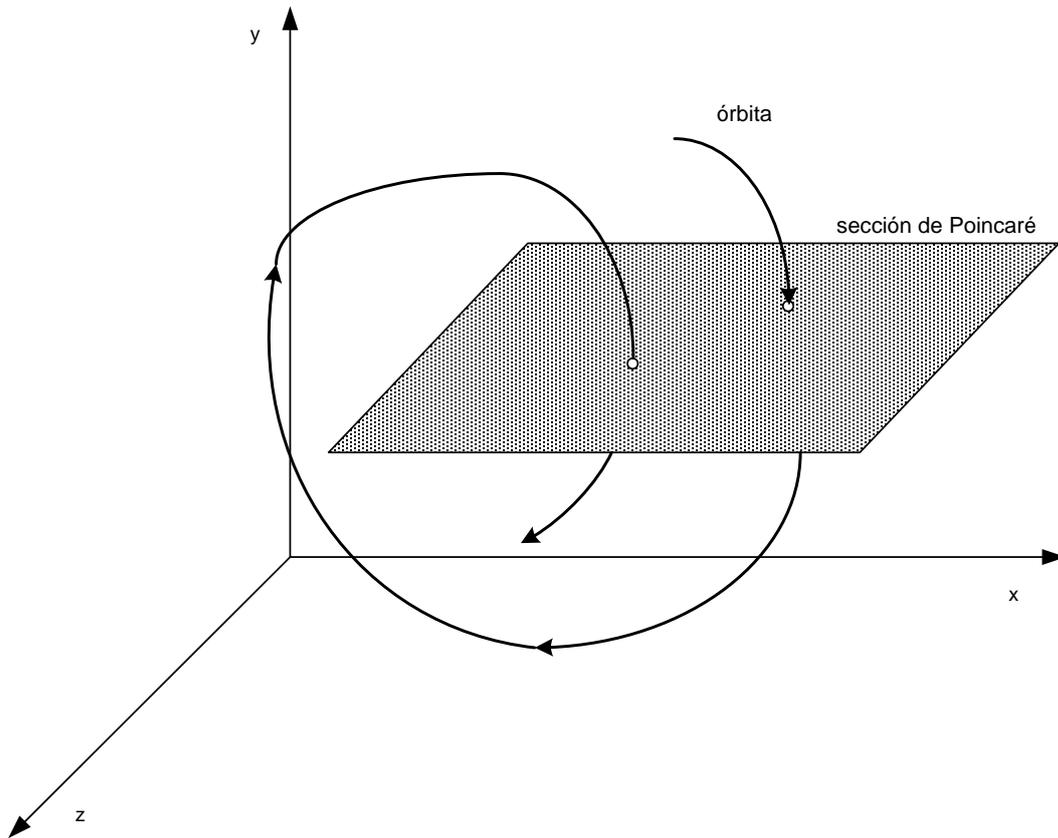


Figura A.11 Intersección entre la trayectoria y la sección de Poincaré

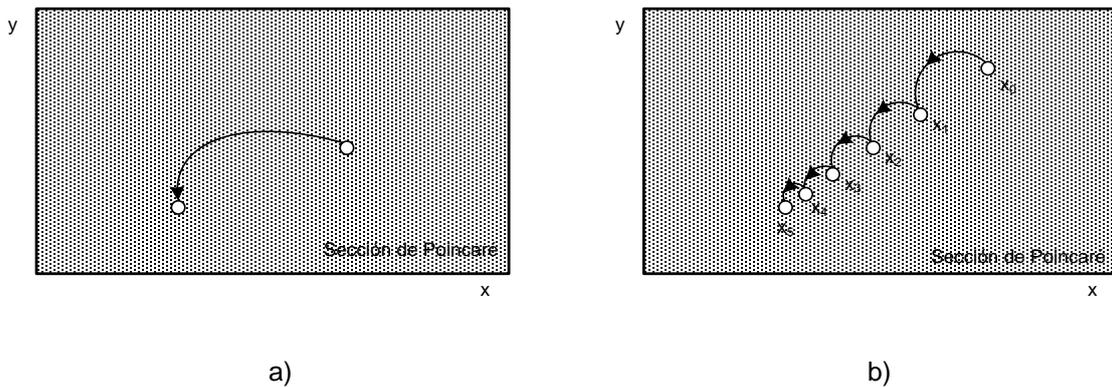


Figura A.12 Mapa de Poincaré

Para sistemas caóticos, los mapas de Poincaré no se basan en geometrías simples, como las de los mapas de Poincaré de sistemas periódicos y cuasiperiódicos. El mapa de Poincaré tiene una estructura fina, de tal manera que cuando se amplifica muestra capas dentro de capas. La Figura A.16 muestra el mapa de Poincaré del sistema representado por la ecuación de van der Pol de la Figura A.8-b.

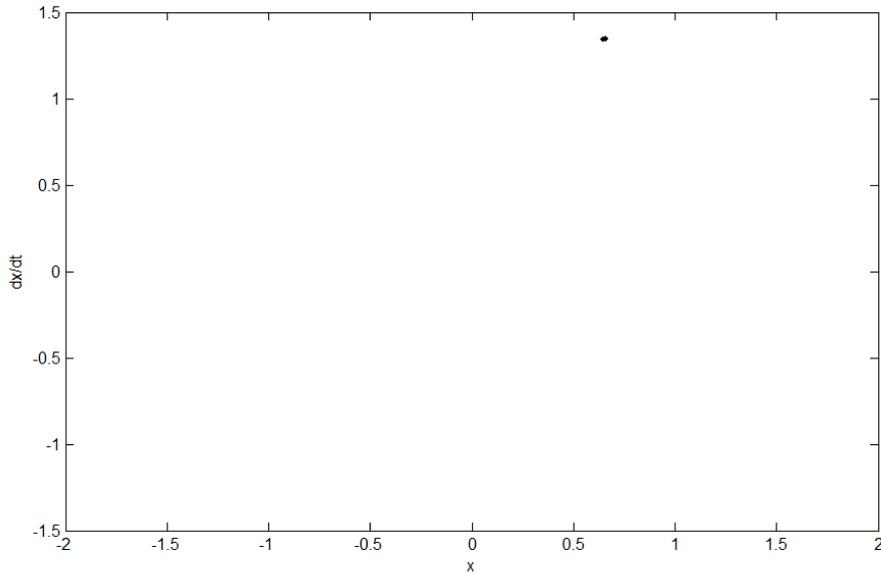


Figura A.13 Mapa de Poincaré del sistema dado por la ecuación de Duffing mostrada en la Figura A.6

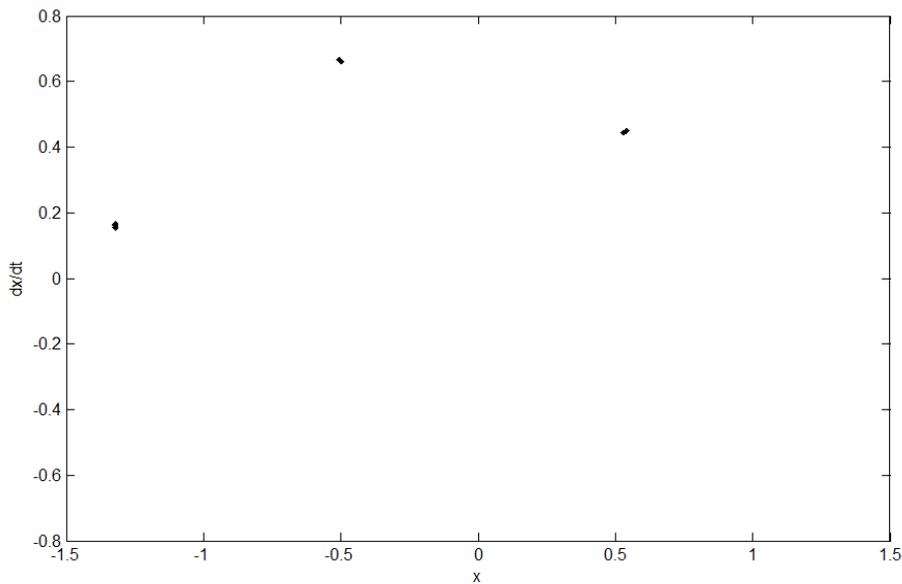


Figura A.14 Mapa de Poincaré del sistema dado por la ecuación de Duffing mostrada en la Figura A.7-b

En un caso más general, donde x^* es un punto fijo no estable de un mapa de Poincaré bidimensional, definido por los puntos x_k , y punto de silla con multiplicadores característicos $|m_1| > 1$, $|m_2| < 1$ y autovectores η_1 y η_2 , Figura A.17, se pueden distinguir dos curvas, $W^s(x^*)$ y $W^u(x^*)$, siendo la primera una variedad estable tangente a η_2 , autovector estable, y la segunda una variedad inestable tangente a η_1 , autovector inestable.

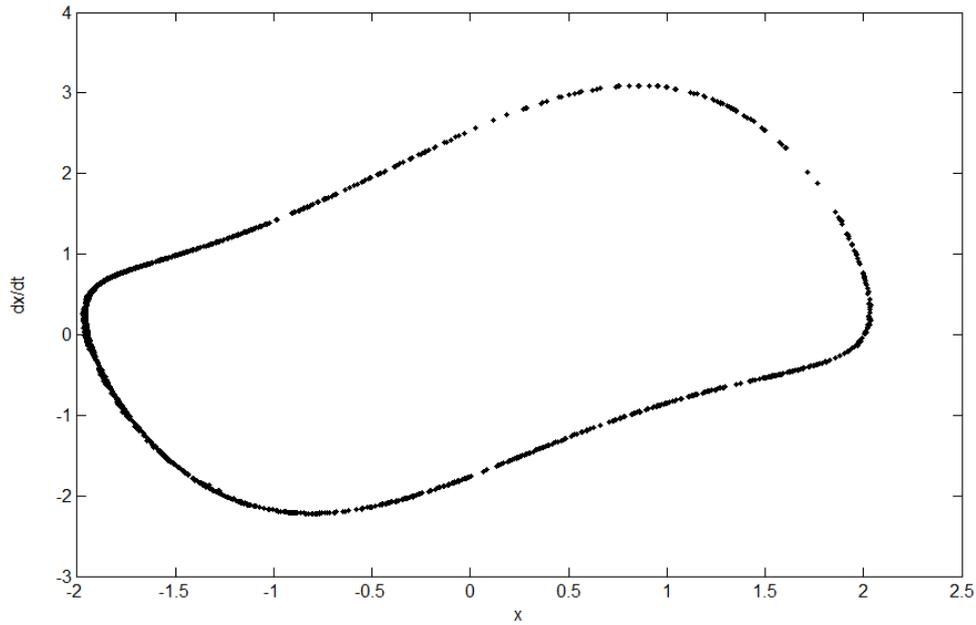


Figura A.15 Mapa de Poincaré del sistema dado por la ecuación de van der Pol mostrada en la Figura A.12

Los casos extremos de intersección entre variedades estable e inestable son: la conexión homoclínica, Figura A.18-a, donde $W^u(x^*)=W^s(x^*)$, y la intersección transversal, Figura A.18-b. Este último caso es el más interesante dado que el número infinito de intersecciones implica un patrón muy complejo de estiramiento y plegado de la variedad cerca de x^* . El estiramiento y el plegado están asociados con la sensibilidad del sistema a las condiciones iniciales; por tanto, las intersecciones transversales entre $W^u(x^*)$ y $W^s(x^*)$ son un buen indicador del comportamiento caótico.

A.5 MAPA LOGÍSTICO

El diagrama de la Figura A.19 representa las intersecciones de la trayectoria de un sistema con la sección de Poincaré, definidas por la ecuación logística

$$x_{n+1} = \mu \cdot x_n \cdot (1 - x_n) \tag{A.18}$$

Este diagrama se denomina mapa logístico.

Anexo A Planos de fase, mapas de Poincaré y mapas logísticos

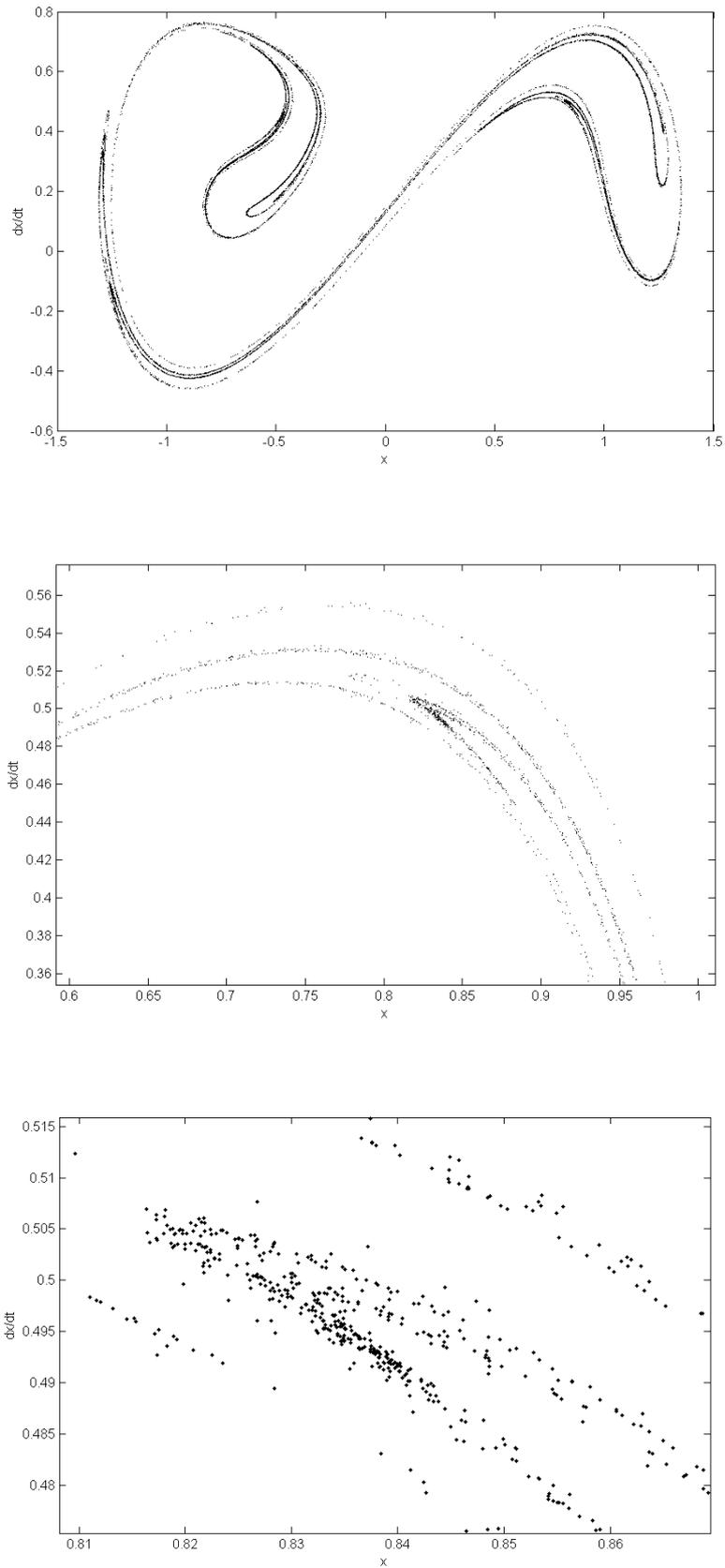


Figura A.16 Mapa de Poincaré del sistema dado por la ecuación de Duffing mostrada en la Figura A.8

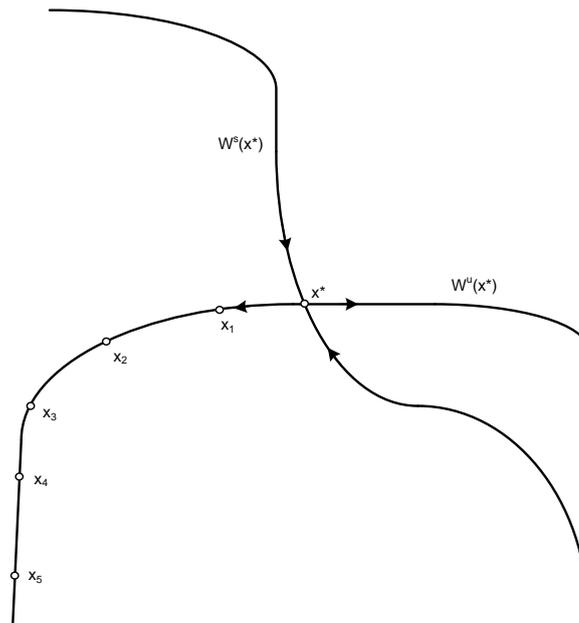


Figura A.17 Variedades estable e inestable asociadas a un punto fijo no estable (Parker y Chua 1987)

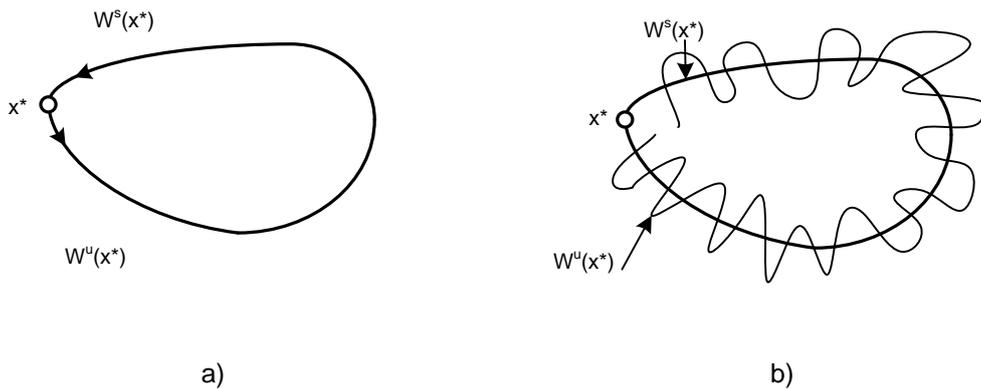


Figura A.18 Variedades que se intersecan: a) conexión homoclínica y b) intersección transversal (Parker y Chua 1987)

Cuando $x_{n+1}=x_n$ se tiene la condición de punto fijo, evidentemente las sucesivas intersecciones coinciden. En la Figura A.19 esta condición equivale a una recta con pendiente de 45° . Si el punto fijo es estable, las sucesivas intersecciones para una condición inicial separada de dicho punto se acercarán a éste, Figura A.14-a.

En los mapas logísticos con pendiente en el punto fijo menor que la unidad, $\Delta x_{n+1} < \Delta x_n = x_n - x_{n-1}$, Figura A.20-a. Por tanto, las intersecciones se aproximan al punto fijo y la trayectoria es más estable.

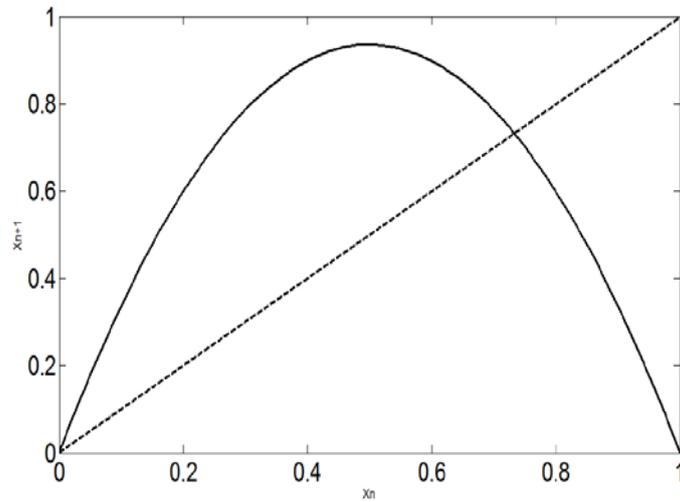


Figura A.19 Mapa logístico asociado al mapa de Poincaré,
 $x_{n+1} = \mu \cdot x_n \cdot (1 - x_n)$, $\mu = 3,745$

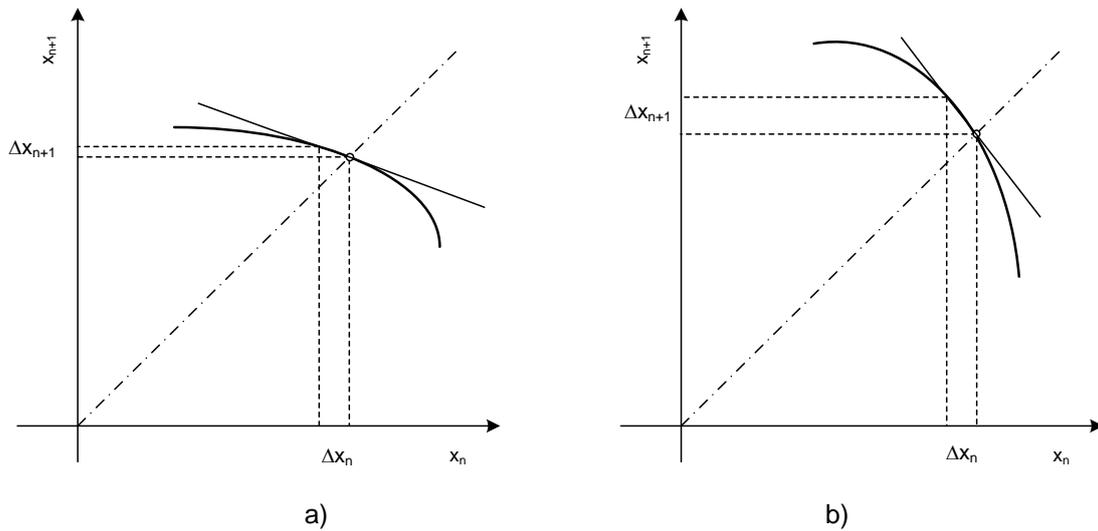


Figura A.20 Mapas logísticos con puntos fijos: a) estable y b) inestable

Así, una condición de estabilidad del punto fijo es

$$\left| \frac{dx_{n+1}}{dx_n} \right|_{\text{en el punto fijo}} < 1 \quad (\text{A.19})$$

La derivada que aparece en la Ecuación (A.19) define la pérdida de estabilidad de una trayectoria periódica. Estos cambios se pueden clasificar en:

- bifurcación de punto de silla, cuando la derivada es mayor que 1
- bifurcación de doble período, cuando la derivada es menor que -1

Por otro lado, si se cambia el valor de un parámetro se produce un cambio en la trayectoria. En algunos casos, ligeras variaciones en el parámetro corresponden a cambios importantes en el comportamiento estacionario del sistema. Estos cambios, en los que el sistema se muestra muy sensible al parámetro analizado, se denominan bifurcaciones, y están relacionados con pérdidas de estabilidad de las trayectorias.

La Figura A.21 representa el valor de x_{100} y los 8 anteriores para distintos valores del parámetro a de la Ecuación (A.18). Para $a < 2,95$, los 9 valores obtenidos coinciden en un punto. Para $2,95 < a < 3,44$ los 9 valores oscilan entre dos puntos, originándose una bifurcación.

Para un mapa de Poincaré con un mapa logístico definido por la ecuación de Henón con $b=0$

$$x_{n+1} = a - x_n^2 \quad (\text{A.20})$$

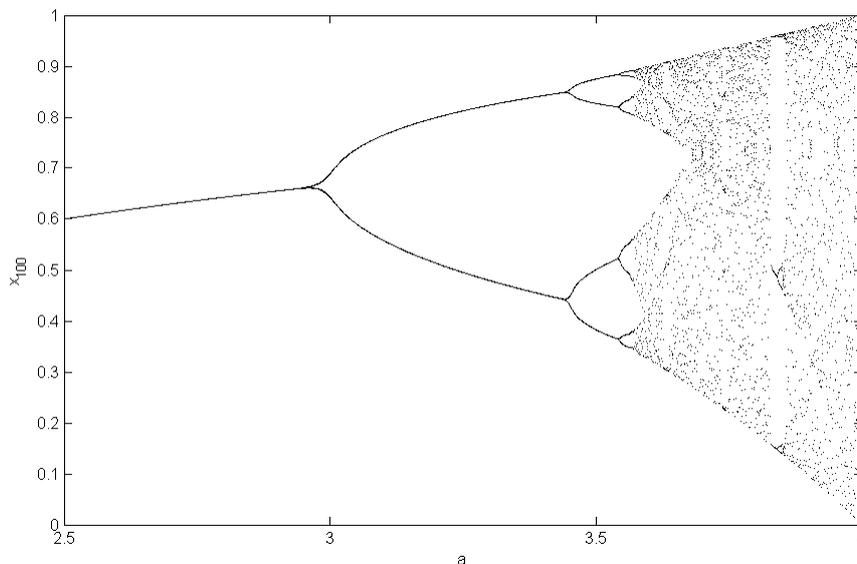


Figura A.21 Diagrama de bifurcación para el mapa de Poincaré de la ecuación logística

los puntos fijos, x^* , vienen dados

$$x^{*2} + x^* - a = 0 \quad (\text{A.21})$$

y sus soluciones son

$$x_1^* = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1 + 4a}; \quad x_2^* = -\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{1 + 4a} \quad (\text{A.22})$$

Si $a = -0,25$ hay un único punto fijo, $x_n = -0,5$. La pendiente en este punto es 1. Si $a > -0,25$ aparecen dos puntos fijos, uno estable y otro inestable. Este evento es una bifurcación de punto de silla. Cuando $a = 0,75$, el punto fijo es $x_1^* = 0,5$. La pendiente en este punto fijo es menor que la unidad y el punto es estable. Cuando $a > 0,75$ la pendiente es mayor que la unidad y el punto fijo es inestable.

Otra forma de representar las intersecciones de un sistema con la sección de Poincaré es

$$x_{n+2} = f(x_n) \quad (\text{A.23})$$

Este diagrama se denomina mapa de segunda iteración. Para el sistema que se está analizando la Ecuación (A.23) adopta la forma

$$x_{n+2} = -x_n^4 + 2a \cdot x_n^2 - a^2 + a \quad (\text{A.24})$$

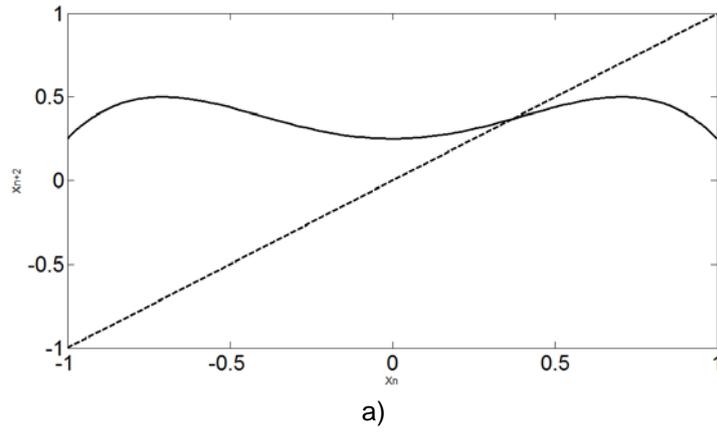
La Figura A.22 muestra el mapa de segunda iteración para el mapa de Poincaré dado por la Ecuación (A.24).

Cuando $a = 0,75$ el punto fijo es inestable. Cuando $a > 0,75$, aparecen dos nuevos puntos fijos en el mapa de segunda iteración y la pendiente en estos puntos es menor que la unidad, son estables. Evidentemente se produce una transición entre órbita periódica y órbita de doble período. Este evento se denomina de doble período.

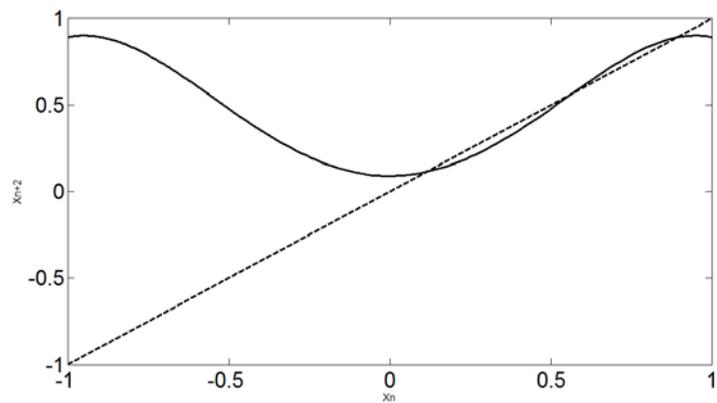
A.6 EXPONENTES DE LYAPUNOV

La Figura A.23 representa el proceso de convergencia del cálculo de los exponentes de Lyapunov para el sistema dado por la ecuación de Duffing, representado en la Figura A.6-b. Los valores de los exponentes de Lyapunov para este sistema son: 0, -0,07064 y -0,07936. Para el sistema dado por la misma ecuación, representado en la Figura A.7-b, los valores de los exponentes de Lyapunov son: 0, -0,05482 y -0,1652. Por último, para el sistema dado por la misma ecuación y representado en la Figura A.8-b, los valores de los exponentes de Lyapunov son: 0,117, 0 y -0,367.

Anexo A Planos de fase, mapas de Poincaré y mapas logísticos



a)



b)

Figura A.22 Mapa de segunda iteración del mapa de Poincaré para la Ecuación (A.24): a) $a < 0,75$ y b) $a > 0,75$

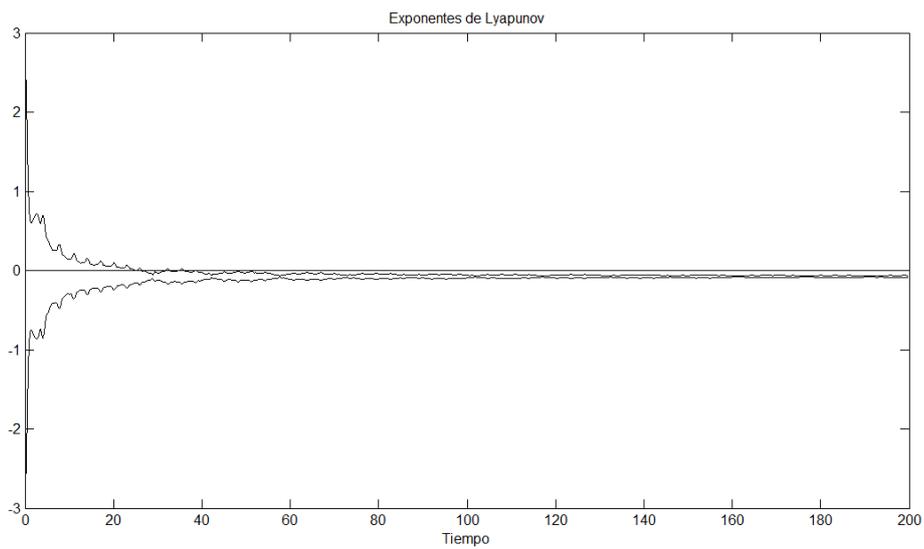


Figura A.23 Cálculo de los exponentes de Lyapunov de la ecuación de Duffing, representada en la Figura A.6-b

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Banerjee, S. (2005). Dynamics For Engineers. John Wiley and Sons, Chichester, Reino Unido.
- Feng, Z. S., G. Chen, y col. (2006). "A qualitative study of the damped duffing equation and applications." *Discrete and Continuous Dynamical Systems-Series B* 6(5): 1097-1112.
- Parker, T. S. y L. O. Chua (1987). "Chaos - A tutorial for engineers." *Proceedings of the IEEE* 75(8): 982-1008.

ALGORITMOS DE SOLUCIÓN DE CIRCUITOS

B.1 INTRODUCCIÓN

Dado que el método de simulación por redes utiliza un software de solución de circuitos, se van a tratar los aspectos básicos de sus algoritmos antes de detallar el método.

Los algoritmos de solución de circuitos pueden ser clasificados en tres grandes bloques: algoritmos para sistemas de ecuaciones lineales, algoritmos para sistemas de ecuaciones no lineales y algoritmos de integración.

La solución de sistemas de ecuaciones lineales constituye una fase importante en la simulación de circuitos eléctricos, normalmente mediante un método de eliminación directa con factorización LU. Además, dado que el sistema de ecuaciones del circuito es disperso, se utilizan variantes adaptadas del método, que permiten reducir el tiempo de ejecución y el requerimiento de memoria (Nagel 1975). Estas variantes pueden ver reducida su efectividad durante el proceso de descomposición factorial por el fenómeno de fill-in, eliminación de ceros de la matriz dispersa.

La implementación más simple del algoritmo de solución de ecuaciones lineales consiste en usar subrutinas FORTRAN. Dado que éstas son cortas y directas, se pueden sustituir fácilmente por otras implementadas en lenguaje ensamblador, con un mejor uso de registros y reducción de lecturas y almacenamientos redundantes de datos. Finalmente, se consigue una mejora de eficiencia usando instrucciones en código máquina, con cierto incremento en consumo de memoria, resultando un programa a medida que no contiene bucles ni indexaciones.

Cada iteración de Newton en el análisis de continua o en el régimen transitorio está constituida por una lectura de la matriz, seguida de una solución de las ecuaciones. Para estos análisis, una rutina FORTRAN consume un 45% del tiempo de ejecución de una iteración de Newton. Esta proporción se reduce al 26% cuando se usa código ensamblador y a sólo un 19% con código máquina.

Para el análisis de alterna, donde cada frecuencia nueva requiere una lectura y una solución de ecuación, la fracción de tiempo total del proceso de solución es mayor que la del proceso de lectura. Con rutinas FORTRAN, la solución de la ecuación supone el 74% del tiempo total, en código ensamblador el 63% y en código máquina el 59%.

Usando diez circuitos de referencia, se comprobó que las rutinas en lenguaje ensamblador son un 56% más rápidas que las de FORTRAN para análisis de continua y régimen transitorio. En cambio, las rutinas en código máquina son un 72% más rápidas que las de FORTRAN, para análisis de continua, y un 34% en régimen transitorio, requiriendo una memoria un 60% mayor. En análisis de alterna, las rutinas en lenguaje ensamblador son un 39% más rápidas que las de FORTRAN, sin requerir memoria adicional. En cambio, las rutinas en código máquina son un 50% más rápidas que FORTRAN, requiriendo un 125% adicional de memoria.

PSpice utiliza el código máquina únicamente para análisis en régimen estacionario y transitorio, y una rutina en lenguaje ensamblador para análisis de alterna.

El rango dinámico usado con los algoritmos es (Kukal 2003):

- 10^{10} voltios o amperios
- 10^{14} para las derivadas

Los cálculos se realizan con doble precisión, que corresponde a una precisión de 15 dígitos.

Para solucionar sistemas de ecuaciones no lineales se utiliza el método de Newton-Raphson. Éste no se puede aplicar directamente a los sistemas de ecuaciones de circuitos no lineales debido a la naturaleza exponencial del fenómeno, que originan rebosamiento numérico (overflow). La mayoría de programas de análisis nodal utilizan una tolerancia en tensión para controlar el proceso de iteración.

PSpice utiliza el método de limitación simple de Colon porque resulta el más fiable. Cuando falla se emplea el método de escalonamiento de fuente. Para el caso de análisis multipunto se emplean refinamientos del método de solución: algoritmo de predicción de primer orden y algoritmo de “by pass”. Los fallos comunes en análisis transitorio se deben a discontinuidades en el modelo, circuitos técnicamente irrealizables, fuentes no implementables y modelación de corrientes parásitas en un circuito. En general, los

problemas de convergencia se pueden resolver mediante tres parámetros de opción de PSpice: GMIN, RSHUNT y RELTOL.

GMIN es la conductancia mínima a través de todas las uniones. La conductancia se usa para mantener bien condicionada la matriz del sistema, con valor por defecto de 10^{-12} s. Muchos problemas de convergencia se resuelven si se fija GMIN entre 10^{-9} y 10^{-8} s. Valores de GMIN por encima de 10^{-8} s pueden no ser adecuados.

RSHUNT es una resistencia entre cada nudo del circuito y tierra. Valores de RSHUNT entre 10^8 y $10^9 \Omega$ ayudan a la convergencia del circuito, mientras que un valor de $10^5 \Omega$ perjudica a ésta.

Valores de tolerancia, parámetro de opción RELTOL, mayores que 1,01 también perjudican a la convergencia (Hymowitz y Meares 1988; Müller 1990; Kielkowski 1994; Vladimirescu 1994; Kundert 1995).

Dado que muchos circuitos electrónicos equivalen a sistemas rígidos de ecuaciones, la técnica de integración numérica usada debe ser rígidamente estable. Esta condición excluye a la mayoría de los métodos de integración explícitos. Además, en análisis transitorio los métodos implícitos son más ventajosos.

Los métodos de integración numérica utilizados en la simulación de circuitos son: algoritmo de regla trapezoidal (Nagel y Pederson 1973), métodos Gear de intervalo de tiempo fijo (Gear 1967; Gear 1968), el método Gear-2 y el método de Runge-Kutta. La eficacia de estos métodos se evalúa mediante el valor del error de truncamiento local (LTE) y la estabilidad.

El análisis transitorio requiere una variación dinámica del incremento de tiempo, que generalmente depende del número de iteraciones requeridas. Para asegurar un análisis transitorio preciso se debe controlar que el incremento de tiempo produce una cantidad aceptable del LTE en cada instante.

Los algoritmos Gear tienen, en teoría, la ventaja de producir un menor LTE para un incremento de tiempo dado. La ventaja de los métodos Gear de mayor orden es eclipsada por dos problemas: la inexactitud computacional de la estimación del LTE y un sobreesfuerzo computacional, relacionados con la variación del orden de integración.

Incluso con tolerancias pequeñas, el algoritmo Gear de orden variable no consigue mejorar el método trapezoidal.

El método de integración trapezoidal con control de LTE mediante incremento de tiempo produce mayor exactitud. Además, produce menor esfuerzo computacional, razón por la cual se emplea, por defecto, en PSpice.

Cuando se pretende utilizar uno de los métodos de integración Gear es necesario indicarlo en las opciones de método.

PSpice sobrepasa a la mayoría de programas utilizados comúnmente para ciertas clases de sistemas dinámicos de orden alto con una rigidez relativamente alta, entre ellos Matlab/Simulink (Hewlett y Wilamowski 2011). Por ejemplo, PSpice ha sido usado con éxito para simular una bomba de varilla (Wilamowski y Kaynak 2000), con un tiempo de simulación 100 veces menor que Matlab. Un análisis de cojinetes magnéticos, usando PSpice y Simulink, mostró que los resultados de Simulink no eran fiables con algunos valores de los parámetros del sistema (Wilson y Hung 2010).

Un análisis de un sistema de 3 osciladores mecánicos acoplados, resuelto mediante PSpice y Matlab (Matlab 2013), mostró que Matlab consigue el mismo resultado, utilizando la rutina de solución ODE-45, aunque esta rutina requiere dos ficheros separados: el fichero principal que inicia la rutina de solución y el fichero que describe el sistema. Sin embargo, PSpice sólo precisa un fichero. Como consecuencia, Matlab necesita 7,5 segundos y PSpice 0,116 segundos.

Otro área en el que PSpice sobrepasa a Matlab es en la simulación de sistemas dinámicos rígidos, como los circuitos electrónicos. Estos sistemas también aparecen en los problemas de cinética química (Enright, Hull y col. 1975). Debido a la lentitud de estos fenómenos, una de las simulaciones incluyó un intervalo de tiempo de 10 millones de segundos, 115 días. La simulación con PSpice requirió 2 minutos y 12 segundos, mientras que con Matlab requeriría 5 años.

B.2 SOLUCIÓN DE ECUACIONES LINEALES

Los sistemas de ecuaciones lineales tienen la forma siguiente:

$$[A] \cdot x = b \quad (\text{B.1})$$

donde $[A]$ es la matriz de coeficientes, x es el vector de incógnitas del circuito y b es el vector de excitación. El procedimiento más evidente de solución del sistema propuesto en la Ecuación (B.1) consistiría en:

$$x = [A]^{-1} \cdot b \quad (\text{B.2})$$

Dado que la inversión de la matriz requiere tres veces más esfuerzo computacional que los métodos de eliminación directa (Ralston 1965), el método de inversión directa se utiliza raramente en programas de simulación. Por tanto, la solución de la ecuación se realiza mediante métodos de eliminación directa de tipo iterativo. Estos métodos pueden utilizar varios algoritmos de reordenamiento que preservan la dispersión de la matriz de coeficientes.

Hay dos métodos equivalentes de eliminación directa que no requieren inversión de $[A]$: la eliminación gaussiana y la factorización LU. Ambos requieren el mismo esfuerzo computacional (McCalla y Pederson 1971). PSpice utiliza el método de Doolittle, uno de los equivalentes de factorización LU (Ralston 1965). El proceso de factorización requiere un número de operaciones del orden de N^3 (Anexo C), y las etapas de sustitución hacia adelante y hacia atrás requieren un número de operaciones del orden de N^2 .

Otra cuestión a tener en cuenta en la solución de ecuaciones lineales es el error de redondeo. Este error es una fracción pequeña del error total en ordenadores que tienen un tamaño de palabra grande o precisión extendida, usados normalmente en la mayor parte de los programas de simulación. Sin embargo, para ecuaciones mal condicionadas, muy sensibles a cambios en la variable independiente, puede ser necesario utilizar algoritmos especiales para minimizar el error de redondeo (Ralston 1965; Isaacson y Keller 1966).

El error de redondeo en la factorización LU es mínimo si, en cada paso, el coeficiente de la diagonal es mayor en valor absoluto que cualquier coeficiente de fuera de la misma. Esta condición se puede satisfacer parcialmente, mediante una pivotación parcial con intercambios de las filas o las columnas en cada paso del procedimiento de descomposición, o completamente, mediante intercambio de filas y columnas.

La búsqueda de un pivote óptimo y del registro adicional de las filas y columnas intercambiadas complica el proceso. Además, el concepto de pivotación no es compatible con una solución de matriz dispersa, dado que cuando el orden de pivotación es alterado, el conjunto completo de direccionamientos de memoria de la matriz dispersa debe ser reconstruido. Incluso con un sistema de ecuaciones bien condicionado, el error de redondeo puede suponer una reducción del número de cifras significativas en un factor $1+2\cdot\log_{10}N$ (Nagel 1975). Así para la simulación de un circuito, lo cual requiere una exactitud de 3 a 6 cifras significativas, el tamaño de palabra requiere de 10 a 13 cifras significativas. Esto equivale a una aritmética de doble precisión para la mayoría de ordenadores.

El procedimiento de trabajo con matrices dispersas utiliza un conjunto de direccionamientos de memoria mediante números enteros con el fin de asignar una ubicación única a cada elemento no nulo de la matriz de coeficientes, donde los términos no nulos de la diagonal no necesitan referencia de direccionamiento. El vector de excitación puede ser almacenado de forma no dispersa si sus elementos son no nulos. En PSpice el orden de almacenamiento es: términos por encima de la diagonal principal por filas, y términos por debajo por columnas. El tamaño reducido de los direccionamientos supone una ventaja de este método con respecto a trabajar con la matriz llena de ceros. Así, tras verificar el circuito y chequear los posibles errores, se buscan los elementos del circuito para establecer qué términos de la matriz son nulos. Se reordenan las filas y columnas de la matriz para minimizar los términos fill-in adicionales que aparecen en el paso de descomposición y los añadidos por los direccionamientos.

Si no se consideran los errores de redondeo, las diferentes formas de factorización, producen los mismos resultados, aunque con un número de operaciones y un fill-in radicalmente diferentes.

Los algoritmos de reordenación seleccionan, por tanto, el orden de factorización siguiendo criterios de minimización del número de operaciones. El algoritmo de reordenación más simple es el de Markowitz (Markowitz 1957). El número máximo de términos fill-in que pueden generarse es el producto del número de elementos en filas por encima de la diagonal principal por el número de elementos en columnas por debajo de ésta. Los términos fila que están en columnas que ya han sido factorizadas, y los

términos columna que están en filas que también lo han sido, son excluidos del producto, dado que no pueden generar fill-in. El algoritmo de Markowitz elige el siguiente pivote del par fila-columna que tiene el mínimo producto fila-columna y, por tanto, el par que puede producir el número mínimo de términos fill-in. En caso de varias opciones equivalentes, se elige el par fila-columna con el menor número de elementos columna. Si aún así existen opciones equivalentes, se elige el primer par fila-columna encontrado. Antes de elegir el siguiente pivote todos los términos fill-in generados se añaden a los direccionamientos.

El algoritmo de reorganización de Berry (Berry 1971) calcula la cantidad de fill-in que se genera en cada par fila-columna. El par que genera la cantidad mínima de fill-in se elige como pivote próximo. En caso de varias opciones equivalentes, este algoritmo propone que el par con el máximo número de elementos fila y columna sea elegido. Si aún así existen opciones equivalentes, este algoritmo responde como el de Markowitz. Una implementación posterior del algoritmo de reorganización de Berry, realizada por Nakhla y col. (Nakhla, Singhal y col. 1974), propone que en caso de tener opciones equivalentes del par fila-columna se debería elegir el par con el mínimo número de elementos en las filas y columnas.

Los algoritmos de reorganización mencionados se testaron en diez circuitos de referencia. Los de Berry y Nakhla obtuvieron idénticos resultados, mientras que el de Markowitz tuvo una diferencia en cuanto al número de operaciones del 5% para uno de los circuitos. Sin embargo, el de Berry requiere un tiempo de procesamiento doble que el de Markowitz.

Tras este análisis se realizó un estudio estadístico. En el primer ensayo, se utilizaron matrices simétricas con un número de elementos no nulos fuera de la diagonal principal según una distribución dada. Este análisis dio como resultado que el algoritmo de Nakhla es ligeramente mejor. En el segundo ensayo, usando los algoritmos de Markowitz y Nakhla, se probó con otra distribución del número de elementos no nulos, más representativa de las matrices de red. Las conclusiones son que el de Markowitz requiere un esfuerzo computacional considerablemente menor.

Finalmente Hsieh y Ghausi (Hsieh y Ghausi 1972) propusieron un algoritmo similar al de Berry, en el que se elige como pivote próximo el par fila-columna que produzca

menor fill-in. Este algoritmo es más eficiente que el de Markowitz pero menos que el de Nakhla. Su esfuerzo computacional es mayor que el de Markowitz y menor que el de Nakhla.

B.3 SOLUCIÓN DE ECUACIONES NO LINEALES

Los sistemas de ecuaciones no lineales tienen la forma siguiente

$$G(x) = 0 \quad (\text{B.3})$$

donde x es el vector de incógnitas del circuito.

Para análisis en continua, la Ecuación (B.3) representa el comportamiento de los circuitos. Para análisis en régimen transitorio, el algoritmo de integración numérica reduce el sistema de ecuaciones diferenciales del circuito a un sistema de ecuaciones algebraicas para cada instante.

Los algoritmos de solución no lineales se basan en una secuencia iterativa de soluciones de ecuaciones linealizadas. Estos algoritmos se aplican en simulación de circuitos a dos problemas radicalmente diferentes: determinación del punto de operación del circuito en continua y determinación de puntos múltiples en análisis en régimen transitorio y en continua.

En el primero de los problemas mencionados la secuencia de iteraciones empieza con una estimación inicial, por lo que el algoritmo debe priorizar las características de convergencia sobre el número de iteraciones. En el segundo de los problemas, la solución del punto previo es una buena estimación para la búsqueda de la solución del siguiente punto.

En análisis transitorio, si una solución en un instante no converge, el intervalo de tiempo considerado se reduce hasta conseguirlo. Así, cada solución requiere sólo pocas iteraciones, aunque hay que calcular muchos puntos. En estos casos el número de iteraciones es un factor importante.

La mayoría de programas de simulación de circuitos usan una modificación del algoritmo de Newton-Raphson. Si x_k es la solución en la iteración k , y δx_k es el error entre el valor de x_k y la solución, entonces x_{k+1} es elegido tal que

$$x_{k+1} = x_k + \delta x_k \quad (\text{B.4})$$

Si el error, δx_k , es pequeño, la Ecuación (B.4) para la iteración $k+1$ puede conducir a

$$G(x_{k+1}) = G(x_k + \delta x_k) \approx G(x_k) + J(x_k) \cdot \delta x_k \quad (\text{B.5})$$

o, de otra forma al sistema de ecuaciones linealizado

$$J(x_k) \cdot x_{k+1} = -G(x_k) + J(x_k) \cdot x_k \quad (\text{B.6})$$

Este método tiene una velocidad de convergencia cuadrática, es decir, el error en cada iteración es proporcional al cuadrado del error en la iteración anterior.

Un procedimiento más eficiente computacionalmente que el anterior consiste en linealizar cada rama del circuito de forma individual (Calahan 1968; Chua y Lin 1975). Cada relación por ramas del circuito es linealizada mediante las mismas series de Taylor mencionadas anteriormente. Para las ramas definidas por corriente, la relación es de la forma:

$$I = f(x) \quad (\text{B.7})$$

Si la relación de la rama es definida mediante corriente y depende sólo del voltaje en su propia rama, el procedimiento de linealización es equivalente a reemplazar la rama no lineal, en cada iteración, por una conductancia lineal en paralelo con una fuente de corriente. El elemento no lineal es reemplazado, conceptualmente, por la conductancia G_{eq} y la fuente de corriente I_{eq} .

Para el caso dual de una rama definida en voltaje, la relación es de la forma

$$V = f(x) \quad (\text{B.8})$$

Si la relación de la rama definida en voltaje depende sólo de la corriente en su rama, el procedimiento es equivalente a reemplazar la rama no lineal, en cada iteración, por una resistencia lineal en serie con una fuente de voltaje independiente.

El método de la secante es similar al de Newton-Raphson, diferenciándose en que el primero aproxima las derivadas en la matriz Jacobiana mediante diferencias finitas y el segundo evalúa directamente las derivadas. Esta diferencia explica que la velocidad de convergencia del método de la secante es de 1,62 (Ralston 1965) frente a 2 del método

de Newton-Raphson. Sin embargo, dado que la obtención de la matriz Jacobiana de la mayoría de los sistemas de ecuaciones de los circuitos sólo exige un pequeño esfuerzo adicional una vez evaluada la función $G(x)$, la ventaja computacional del método de la secante no tiene mayor peso que su velocidad menor de convergencia.

Se han propuesto varias versiones del método de la secante (Rohrer 1970) para mejorar la velocidad de convergencia. Sin embargo, estos métodos tienen los mismos problemas de convergencia que el método de Newton-Raphson.

Es necesario un criterio para determinar si converge la secuencia de iteraciones. Una elección lógica para este criterio es que la diferencia entre el vector de variables del circuito, x_{k+1} , y la solución previa, x_k , esté dentro de una tolerancia especificada. Este criterio requiere que cada componente del vector desconocido, $x_k(n)$, satisfaga la ecuación

$$|x_{k+1}(n) - x_k(n)| < \varepsilon_a + \varepsilon_r \cdot \min\{|x_k(n)|, |x_{k+1}(n)|\} \quad (\text{B.9})$$

donde ε_a es la tolerancia absoluta y ε_r es la relativa.

Si se usa la formulación de análisis nodal, este criterio requiere que la diferencia entre cada voltaje nodal y el valor en la iteración previa sea menor que la tolerancia especificada. Un valor de ε_r de 0.001, y de 50 μV para ε_a , produce resultados aceptables en la mayoría de los casos. Los criterios de convergencia de la Ecuación (B.9) conducen algunas veces a falsas convergencias.

Los ensayos de convergencia no deberían depender de qué variables del circuito son elegidas como desconocidas en el algoritmo de formulación de la ecuación, sino basarse en la exactitud de la linealización de las relaciones de la rama. Por tanto, un criterio de convergencia más lógico es

$$|I - I^i| < \varepsilon_a + \varepsilon_r \cdot \min\{|I|, |I^i|\} \quad (\text{B.10})$$

Donde I^i es la corriente en la rama linealizada que corresponde a una tensión de la rama, V_1 , mientras que I es el valor actual de la corriente que corresponde a V_2 . Este criterio de convergencia se aplica en el programa SPICE 2.

Para comparar los dos criterios, se aplicó un análisis transitorio a los diez circuitos de referencia mencionados. El primer criterio aplicó un valor de ε_r de 0,001, y de 50 μV para ε_a . El segundo criterio aplicó un ε_a diferente, de $1\text{e-}12$ A. Con ambos criterios se utilizó un intervalo de tiempo de 100 puntos. Así, el segundo criterio, más conservador, requiere de un 10 a un 50 % más de iteraciones del método de Newton-Raphson que el primero.

El algoritmo de Newton-Raphson tiene gran dificultad para trabajar con los sistemas de ecuaciones correspondientes a circuitos electrónicos típicos, especialmente cuando la solución de la iteración no está próxima a la solución correcta. Así, el primer problema es el overflow. Otro problema, menor, aparece cuando el circuito contiene sólo una no linealidad, dando lugar a una oscilación en la solución asociada a la no monotonicidad de la no linealidad. También pueden aparecer una oscilación en la solución en circuitos con varias no linealidades monótonas.

Se han propuesto varias modificaciones del método de Newton-Raphson que evitan el problema del overflow y que mejoran las propiedades de convergencia del algoritmo. Estas se dividen en tres categorías (Kao 1972):

- Algoritmos de limitación simple
- Algoritmos de reducción del error
- Algoritmos de escalonamiento de la fuente

Los del primer grupo son los más fáciles de implementar, requieren menor número de iteraciones, pero tienen más problemas de convergencia. Estos algoritmos limitan, de alguna forma, los voltajes en las ramas no lineales para evitar el overflow y mejorar la convergencia (Nagel y Rohrer 1971). El método de solución iterativa evalúa la siguiente solución de la iteración en términos del voltaje de la rama para ramas definidas en corriente, o en términos de corriente para ramas definidas en voltaje. Una variante de este proceso, propuesta por Colon, fue implementada por Kao (Kao 1972).

Estos métodos fueron ensayados en ochenta circuitos, resultando más fiable el método de Colon. Además, este método usó el menor número de iteraciones en todos los circuitos excepto en uno, en el que se usó sólo una iteración más.

Los algoritmos de reducción de error limitan en cada iteración los términos no lineales, de forma que se reduzca el error. Esto se consigue eligiendo una solución, \mathbf{x}_{k+1} , de acuerdo con la ecuación

$$x_{k+1} = x_k + \gamma_k \cdot \delta x_k \quad (\text{B.11})$$

donde γ_k es el tamaño del salto.

Si γ_k es la unidad, la Ecuación (B.11) es equivalente a la Ecuación (B.4). El error en la iteración k-esima viene definido por

$$\varepsilon_k = G(x_k)^T \cdot G(x_k) \quad (\text{B.12})$$

El objetivo del algoritmo es elegir un γ_k , que haga ε_k mínimo (Branin, Hogsett y col. 1971). Para encontrar una relación entre γ_k y ε_k , se expande la Ecuación (B.3) en series de Taylor

$$G(x_{k+1}) = G(x_k + \gamma_k \cdot \delta x_k) \approx G(x_k) + \gamma_k \cdot J(x_k) \cdot \delta x_k \quad (\text{B.13})$$

o, de otra forma

$$G(x_{k+1}) = (1 + \gamma_k) \cdot G(x_k) \quad (\text{B.14})$$

Combinando las Ecuaciones (B.12) y (B.14), se tiene

$$\frac{\varepsilon_k(\gamma_k)}{\varepsilon_k(0)} = 1 - 2 \cdot \gamma_k + \gamma_k^2 = (1 - \gamma_k)^2 \quad (\text{B.15})$$

Esta relación parabólica suele distorsionarse según la severidad de las no linealidades del circuito.

La estrategia propuesta de selección de γ_k consiste en evaluar ε_k para $\gamma_k=0$, $\varepsilon_k(0)$, y para $\gamma_k=1$, $\varepsilon_k(1)$. Se determina entonces γ_k ajustando la parábola a los dos valores de error, $\varepsilon_k(0)$ y $\varepsilon_k(1)$, y a una pendiente inicial de -2. Si $\varepsilon_k(\gamma_k)$ es menor que $\varepsilon_k(0)$ y $\varepsilon_k(1)$, se toma el valor de γ_k . Si $\varepsilon_k(1)$ es el menor valor, se toma $\gamma_k=1$. Si $\varepsilon_k(0)$ es el menor valor, se divide por dos γ_k hasta que su error sea menor que el producido por un $\gamma_k=0$. Tras ensayar estos métodos con los circuitos mencionados, se comprobó que no aseguraban la convergencia y que aumentaban bastante el número de iteraciones del

método de Newton en comparación con el requerido para determinar el punto de operación en continua.

Por último, el algoritmo de escalonamiento de fuente, introducido por Davidenko (Davidenko 1953), es equivalente a determinar el punto de operación en continua, con una curva de transferencia en continua. El vector de valores de la fuente independiente, E , viene dado por

$$E = \alpha \cdot S \quad (\text{B.16})$$

donde S es el valor actual de los distintos valores de la fuente y α es un escalar cuyo valor va aumentando de forma gradual entre 0 y 1, conforme se alcanza la convergencia. Aunque el método parece bastante seguro, no siempre converge.

Kao (Kao 1972) ha demostrado que el algoritmo de escalonamiento de fuente de Broyden (Broyden 1969) requiere el doble de iteraciones que el método ECAP2 (Branin, Hogsett y col. 1971), que a su vez requiere el cuádruple de operaciones que el método de limitación simple de Colon.

El método ASTAP (Weeks, Jimenez y col. 1973), una variante del algoritmo de reducción del error, utiliza la formulación de cuadro modificado, que produce ecuaciones mal condicionadas numéricamente para análisis en continua, por lo que no se usa directamente. En su lugar, la solución en continua se obtiene mediante un análisis en régimen transitorio. Esto se lleva a cabo introduciendo “pseudo-reactancias” en el circuito para el análisis en continua. Así, se inserta una pseudo-bobina en serie con cada fuente de tensión independiente y cada rama no lineal definida en tensión. Para cada fuente de intensidad y cada rama no lineal definida en intensidad se inserta un pseudo-condensador en paralelo. Las condiciones iniciales para estas pseudo-reactancias utilizadas en el análisis en régimen transitorio son nulas. El error de truncamiento se puede ignorar si el algoritmo de integración es estable. Por esta razón el incremento de tiempo usado no está determinado por los requerimientos de exactitud, eligiéndose el máximo posible. Es el método empleado por PSpice.

El análisis en régimen transitorio, del circuito con pseudo-bobinas y pseudo-condensadores, emplea el método de integración de Euler hacia atrás. El algoritmo de incremento de tiempo usado consiste en dividir por 8 este incremento si el número de

iteraciones de Newton en un instante es mayor que 10, y en duplicarlo si el número de iteraciones es menor que 5. El análisis acaba cuando la tensión de la bobina es menor que 10^{-9} y la intensidad en el condensador es menor que 10^{-12} .

El algoritmo de Newton-Raphson no modificado y el método de limitación simple de Colon han sido ensayados en los diez circuitos mencionados. El método de limitación simple requiere menos iteraciones en muchos casos. Si se compara el método de limitación simple y el análisis con pseudo-reactancias, se comprueba que el primero requiere 19 veces más iteraciones que el segundo.

En el análisis de puntos múltiples, la solución en el punto anterior es normalmente una buena estimación de la solución del punto siguiente

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h_{n+1}}{h_n}(x_n - x_{n-1}) \quad (\text{B.17})$$

Según este procedimiento x_n es utilizado para obtener x_{n+1} . Por otro lado, los métodos de predicción, usan el vector x_{n+1} como estimación. La Ecuación (B.17) caracteriza un método de predicción de primer orden. Los métodos de predicción de segundo orden usan los valores temporales: x_n , x_{n-1} y x_{n-2} .

Estos algoritmos han sido ensayados en los diez circuitos mencionados y en otros cinco más, con el control de iteraciones de incremento de tiempo mencionado anteriormente. El algoritmo de predicción condujo a una disminución del número de iteraciones de Newton para el análisis de todos los circuitos excepto en dos de ellos.

Otra mejora para el análisis de puntos múltiples es el algoritmo “by pass”. Éste consiste en evaluar una rama no lineal y sus derivadas, sólo si las derivadas en esta rama cambian de forma significativa. Este algoritmo obtiene una ligera reducción en el tiempo CPU.

B.4 INTEGRACIÓN NUMÉRICA

Los sistemas de ecuaciones diferencial-algebraicos que representan al circuito tienen la forma siguiente

$$F(x, dx/dt, t) = 0 \quad (\text{B.18})$$

donde x es el vector de incógnitas del circuito.

El análisis en régimen transitorio del circuito divide el intervalo $(0,T)$ en un conjunto de valores discretos $(0,t_1,t_2,\dots,T)$ y determina la solución de la Ecuación (B.18) en cada instante. Así, un algoritmo de integración numérica determina la solución x_{n+1} en el instante t_{n+1} , para las soluciones previamente calculadas (x_n, x_{n-1}, \dots) .

El valor de LTE del método es el error en la solución x_{n+1} , suponiendo que las soluciones anteriores son exactas. Este error es proporcional al intervalo de tiempo, $h_n=t_{n+1}-t_n$. El error total en x_{n+1} está determinado por el valor de LTE en el instante t_{n+1} y el valor de LTE de las soluciones anteriores. Las características de estabilidad del algoritmo de integración numérica determinan el efecto del valor de LTE en un instante anterior sobre el error total de la solución x_{n+1} (Dahlquist 1963; Gear 1971; Blöstein 1973).

El valor de LTE para métodos de integración polinomiales (Anexo C) (Gear 1971; Chua y Lin 1975) es

$$\varepsilon_{n+1} = C \cdot h_n^{k+1} \cdot \frac{d^{k+1}x}{dt^{k+1}}(\xi) \quad (\text{B.19})$$

donde C es una constante que depende del método de integración específico.

En la Ecuación (B.19), el valor de LTE en el instante t_{n+1} , ε_{n+1} , disminuye cuando se incrementa el orden, k . Por otro lado, la estabilidad de los métodos polinomiales se deteriora cuando aumenta el orden (Dahlquist 1963).

El método predictor-corrector (Anexo C) implica una limitación severa en la selección del salto de tiempo. El método con el corrector de la Ecuación (C.10) convergerá (Chua y Lin 1975) sólo si

$$h_n < \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^{-1} \quad (\text{B.20})$$

Shichman (Shichman 1970) demostró que el método predictor-corrector requiere para ejecutar un análisis en régimen transitorio 13 veces más tiempo de computación que los métodos Gear-2 y Newton-Raphson.

El error absoluto total, E_T , proporciona una condición de selección de salto de tiempo

$$|\varepsilon_x(t_{n+1})| \leq \frac{h_n}{T} \cdot E_T \quad (\text{B.21})$$

o, de otra forma

$$h_n \leq \frac{2 \cdot E_T}{T \cdot \left| \frac{d^2 x}{dt^2}(\xi) \right|} \quad (\text{B.22})$$

Otra condición para seleccionar el salto de tiempo surge cuando se considera el valor absoluto del error permitido en cada instante, E_D . Así, si $\varepsilon_{dx/dt}$ es la estimación de LTE en términos de dx_{n+1}/dt , la restricción en el valor de LTE viene dada por

$$|\varepsilon_{\dot{x}}| \leq E_D \quad (\text{B.23})$$

que lleva a la siguiente restricción en el salto de tiempo

$$h_n \leq \frac{2 \cdot E_D}{\left| \frac{d^2 x}{dt^2}(\xi) \right|} \quad (\text{B.24})$$

Si $E_D = E_T/T$, ambas condiciones, Ecuaciones (B.22) Y (B.24), son equivalentes. Estas ecuaciones también son equivalentes para el método de Euler hacia atrás ya que

$$\varepsilon_{\dot{x}} = \beta_0 \cdot \varepsilon_x, \beta_0 = h_n \quad (\text{B.25})$$

Para la mayoría de los métodos polinomiales se tiene

$$\varepsilon_{\dot{x}} = \beta_0 \cdot \varepsilon_x, \beta_0 < h_n \quad (\text{B.26})$$

lo que supone que el salto de tiempo dado por la Ecuación (B.24) es menor que el dado por la Ecuación (B.22).

La relación entre la Ecuación (B.22) y las tolerancias relativas es

$$h_n \leq \frac{2 \cdot (\varepsilon_r \cdot |\dot{x}_{n+1}| + \varepsilon_a)}{\left| \frac{d^2 x}{dt^2}(\xi) \right|} \quad (\text{B.27})$$

Cualquier control sobre la selección del salto de tiempo usando el valor de LTE requiere una estimación del valor de LTE en cada instante. Así, el método de Euler hacia atrás usa la siguiente expresión

$$x(t) = a_0 + a_1 \cdot (t_{n+1} - t_n) + a_2 \cdot (t_{n+1} - t)^2 \quad (\text{B.28})$$

La derivada segunda, teniendo en cuenta la Ecuación (C.6) (Anexo C) vale

$$\frac{d^2x(\varepsilon)}{dt^2} = 2a_2 = 2 \cdot \frac{\frac{x_{n+1}-x_n}{h_n} - \frac{x_n-x_{n-1}}{h_{n-1}}}{h_n+h_{n-1}} = 2 \cdot DD_2 \quad (\text{B.29})$$

Igualmente, la derivada k-ésima es

$$\frac{d^kx(\varepsilon)}{dt^k} = k! \cdot \frac{DD_{k-1}(t_{n+1}) - DD_{k-1}(t_n)}{\sum_{i=1}^k h_{n+1-i}} = k! \cdot DD_k \quad (\text{B.30})$$

El valor de LTE en cada instante se determina para cada rama del circuito que almacena energía. Para estimar el LTE en un algoritmo de integración de orden k se debe almacenar k+1 valores. El esfuerzo computacional requerido para estimar el valor de LTE en cada instante depende del método que se usa para almacenar la información de los instantes anteriores. Sin embargo, el esfuerzo computacional para estimar el valor de LTE es una fracción pequeña del tiempo necesario para obtener la solución.

Los métodos Runge-Kutta explícitos tienen una desventaja adicional: el LTE es proporcional a la matriz jacobiana $\partial f/\partial x$. La estimación del LTE de estos métodos es más difícil que con los métodos polinomiales, y los algoritmos con ajuste de intervalo de tiempo dinámico tienden a usar un menor valor de éste para una exactitud dada.

Miller (Miller 1973) desarrolló otra variante implícita y A-estable del método clásico de Runge-Kutta de segundo y tercer orden. Para el segundo orden es

$$x_{n+1} = -\frac{5}{4} \cdot x_n + \frac{9}{4} \cdot x_{n+\frac{1}{3}}^* + \frac{h}{4} \cdot \dot{x}_{n+1} - \frac{h^3}{24} \cdot \frac{d^3x}{dt^3}(\xi) \quad (\text{B.31})$$

que requiere un valor en un instante intermedio

$$x_{n+\frac{1}{3}}^* = x_n + \frac{h}{3} \cdot \dot{x}_{n+\frac{1}{3}}^* \quad (\text{B.32})$$

El término con derivada tercera de la Ecuación (B.31) es el LTE del algoritmo de Miller de segundo orden. Éste es cinco veces menor que el del método Gear de segundo orden, y dos veces menor que el del método trapezoidal. Sin embargo, la necesidad del valor intermedio en el método de Miller de segundo orden implica un esfuerzo computacional doble que en métodos polinomiales.

El criterio de valoración de métodos de integración más relevante es el número de valores instantáneos requeridos para determinar la respuesta transitoria con una tolerancia LTE dada. Desafortunadamente, este valor sólo se puede obtener aplicando los algoritmos para casos concretos, como el sistema representado por la Ecuación (C.1) con solución conocida, Ecuación (C.2).

Dado que las derivadas son monótonamente decrecientes, su valor en el instante t_n conduce a un valor consistente de LTE en el instante t_{n+1} . Combinando la Ecuación (C.2) con las estimaciones de error para el algoritmo de Euler hacia atrás, resulta

$$\frac{\varepsilon_x(t_{n+1})}{x_n} = \frac{(h_n \cdot \lambda)^2}{2} \quad (\text{B.33})$$

$$\frac{\varepsilon_{\dot{x}}(t_{n+1})}{\dot{x}_n} = \frac{h_n \cdot \lambda}{2} \quad (\text{B.34})$$

A partir de la información anterior se puede comprobar que los algoritmos Gear de orden alto usan intervalos de tiempo mucho mayores que el método trapezoidal. Los intervalos de tiempo usados por los métodos de orden alto aumentan significativamente con el error relativo.

El método trapezoidal es el método polinomial A-estable más exacto. Su aplicación en programas de simulación de circuitos incluye una variación dinámica del intervalo de tiempo de integración. Este ajuste deja el control del LTE en manos del usuario.

Los problemas de convergencia durante el análisis transitorio se evitan mediante una reducción del intervalo de tiempo. Si el número de iteraciones para obtener un valor instantáneo es menor que un valor preestablecido, se aumenta el intervalo de tiempo hasta el límite fijado por el usuario. El control del intervalo de tiempo consiste en reducirlo en un factor de 8, si las iteraciones son mayores de 10, e incrementarlo en un factor de 2 si éstas son menores de 5.

El error de la solución en régimen transitorio es lógicamente mayor en los tramos en los que se producen transiciones bruscas. Éstas se corresponden con cambios bruscos en las entradas de las fuentes, fijadas por los datos de entrada. Para reducir el error en la zona de transición de las fuentes, hay que reducir el intervalo de tiempo. Si el intervalo de tiempo usado en la solución en el instante t_n determina una solución en el instante t_{n+1}

que excede el valor del punto de ruptura de la fuente, entonces dicho intervalo se reduce hasta que la solución coincide con el valor del punto de ruptura. En este último caso, tras la solución obtenida usando el valor del punto de ruptura, se reduce el intervalo de tiempo definido por el usuario en un factor de 10, salvo que el algoritmo de control de intervalo de tiempo ya lo haya reducido.

Se analizaron 15 circuitos en régimen transitorio utilizando control de intervalo de tiempo y reconocimiento del punto de ruptura. Los problemas de convergencia de algunos análisis se eliminaron con la incorporación del control de intervalo de tiempo, aunque el número de valores instantáneos y el número de iteraciones requeridos son mayores. Concretamente, el número de valores instantáneos aumenta entre un 5 y un 30%, y el número de iteraciones entre un 3 y un 30%. Para la mayoría de estos análisis el incremento de esfuerzo computacional se debe únicamente al reconocimiento del punto de ruptura de la fuente.

Para mejorar la eficiencia computacional en el análisis en régimen transitorio se utilizan dos mejoras: predicción y by-pass. El algoritmo de predicción conduce a mejores estimaciones iniciales en la secuencia de iteraciones, y el algoritmo de by-pass evita recalcular las funciones no lineales que no han cambiado de forma apreciable desde la iteración anterior.

En el análisis de los 15 circuitos anteriores, estas mejoras redujeron el número de iteraciones entre un 2 y un 20%, y el tiempo de ejecución entre un 3 y un 25%.

Los métodos trapezoidal y Gear-2 presentan pequeñas diferencias cuando se usa control de salto de tiempo mediante el número de iteraciones, produciendo errores por encima de los límites razonables en el análisis de los mismos 15 circuitos. El control de intervalo de tiempo no asegura que el valor del LTE esté acotado, ya que éste depende del método de integración y del intervalo de tiempo definido por el usuario. Para que el control de intervalo de tiempo considere el LTE debe incluir una etapa que estime el valor de éste en cada instante, y ajuste este intervalo para obtener valores razonables del mismo.

Usando el valor de $\varepsilon_{dx/dt}/(dx/dt)$, definido en la Ecuación (B.27), y DD_3 , definido en la Ecuación (B.30), se puede estimar

$$h_{n+1} = \sqrt{\frac{\varepsilon_r \cdot |\dot{x}_{n+1}| + \varepsilon_a}{DD_3(t_{n+1})}} \quad (\text{B.35})$$

Tras obtener la solución en el instante t_{n+1} se calcula h_{n+1} mediante la Ecuación (B.35). Si $h_{n+1} \leq 0,9 \cdot h_n$ entonces el LTE para la solución en este instante es satisfactorio, y el h_{n+1} se usa para calcular la solución en el instante t_{n+2} . En caso contrario, el LTE es demasiado grande y la solución para este instante se calcula usando h_n . En una aplicación se comprobó que el algoritmo requería demasiados valores instantáneos e iteraciones para un LTE dado.

Para compensar los valores altos de DD_3 respecto a LTE, véanse las Figuras C.1 y C.2 (Anexo C), se añade otro control de error, ε_{T^*} . La estimación de la derivada que se obtiene mediante diferencias finitas es dividida por ε_T antes de valorar h_{n+1} , Ecuación (B.35). Dado que el valor $10 \cdot \varepsilon_T$ conduce a resultados satisfactorios, se concluyó que la expresión en diferencias finitas es un orden de magnitud menor que el último valor de LTE, si se usa una ecuación sencilla.

En circuitos no lineales, este procedimiento conduce a usar el valor mínimo de salto de tiempo, fijado previamente. Este problema de estancamiento en el valor mínimo de salto de tiempo se debe a un error iterativo durante el proceso de solución.

Por otro lado, la exactitud de la carga de cada condensador o el flujo de inducción de cada bobina está limitada por los criterios de convergencia, ε_r y ε_a . En el caso del condensador, la carga del mismo, Q_n , puede diferir tanto como imponen los criterios de convergencia, independientemente del salto de tiempo utilizado, h_n . Sin embargo, la exactitud de la intensidad del condensador se limita por el error de iteración

$$\delta_i = \frac{\varepsilon_r \cdot Q_{n+1}}{h_n} \quad (\text{B.36})$$

Teóricamente el valor de Q_{n+1} convergerá a Q_n cuando el salto de tiempo es lo bastante pequeño, pero esta relación no tiene en cuenta el error del proceso iterativo usado para resolver el valor instantáneo. A menos que se considere este error iterativo en el algoritmo de selección de salto de tiempo, éste tiende al mínimo.

Este error puede ser considerado mediante un cambio sencillo en el algoritmo. El criterio revisado de error será

$$|\varepsilon_{\dot{x}}| \leq \max \left\{ \varepsilon_r \cdot |\dot{x}_{n+1}| + \varepsilon_a \frac{\varepsilon_r \cdot |x_{n+1}|}{h_n} \right\} \quad (\text{B.37})$$

La Ecuación (B.37) supone que el LTE en el instante t_{n+1} es menor que el producto de la tolerancia relativa y el valor absoluto de dx_{n+1}/dt , valor absoluto del error de iteración. Sin embargo, el error en el cálculo del valor instantáneo no debe ser menor que el valor del LTE, para la tolerancia de convergencia dada.

La adopción de la Ecuación (B.37) conduce a la siguiente estrategia para el control del salto de tiempo. Primero se calcula el error instantáneo permitido, E_D

$$E_D = \max \left\{ \varepsilon_r \cdot |\dot{x}_{n+1}| + \varepsilon_a \frac{\varepsilon_r \cdot |x_{n+1}|}{h_n} \right\} \quad (\text{B.38})$$

El salto de tiempo h_{n+1} es

$$h_{n+1} = \sqrt{\frac{\varepsilon_T \cdot E_D}{|DD_3(t_{n+1})|}} \quad (\text{B.39})$$

La Ecuación (B.39) elimina el problema del estancamiento asociado a la Ecuación (B.35), pero conduce a menudo a valores de salto de tiempo demasiado grandes. Además, si se utiliza h_{n+1} para calcular el valor en el instante t_{n+2} es muy probable que el valor sea rechazado al aplicar los criterios de tolerancia. Los mejores resultados se obtuvieron usando $h_{n+1} < 2 \cdot h_n$.

Si se usa un control de salto de tiempo con truncamiento de error, la eficiencia del análisis en régimen transitorio requiere una elección razonable de la tolerancia de error. La experiencia dice que si la tolerancia de error se reduce en un orden de magnitud, el esfuerzo computacional aumenta al menos en uno o dos órdenes. Este control de salto de tiempo supone un importante ahorro de esfuerzo computacional para algunos circuitos, aunque para otros supone lo contrario.

El uso de métodos de orden alto supone valores menores del LTE para un instante dado, lo que supone un análisis en régimen transitorio con pocos valores instantáneos.

Los coeficientes del método Gear, Ecuación (C.12), dependen del salto de tiempo actual, h_n , y de los $k-1$ saltos anteriores. Si los saltos de tiempo varían en cada instante, los $k+1$ coeficientes α_i son redefinidos como

$$\begin{bmatrix} 1 & \dots & \dots & 1 \\ h_n & h_n + h_{n-1} & \dots & \sum_{i=1}^k h_{n+1-i} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ h_n^k & (h_n + h_{n-1})^k & \dots & (\sum_{i=1}^k h_{n+1-i})^k \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.40})$$

Aunque esta ecuación se resuelve en cada instante, el esfuerzo computacional para generarla y resolverla es una fracción pequeña del esfuerzo total.

El control del salto de tiempo en los algoritmos Gear es similar al usado en el método trapezoidal, la Ecuación (B.37) no cambia y la Ecuación (B.39) se sustituye por

$$h_{n+1} = \left(\frac{\varepsilon_T \cdot E_D}{i! \cdot |DD_i|} \right)^{\frac{1}{i}} \quad (\text{B.41})$$

donde i es el orden del algoritmo.

Para tolerancias de error relativamente grandes ninguno de los resultados de los métodos Gear es sustancialmente mejor que los del método trapezoidal. Con tolerancias de error reducidas los resultados de los métodos Gear de orden alto son sustancialmente mejores que los del método trapezoidal.

Las inexactitudes inherentes a la estimación del error de truncamiento en los métodos Gear de orden alto son la base de la explicación más utilizada del insuficiente número de iteraciones utilizadas por estos métodos. Conforme aumenta el orden, deben ser estimadas las derivadas de mayor orden, y el error en la estimación del LTE debe aumentar. Aparentemente, este incremento del error en la estimación del LTE resta importancia a la disminución teórica del LTE actual. En consecuencia, la selección del mejor orden implica un compromiso entre el menor valor teórico del LTE y el incremento del error inherente a la estimación del LTE. Los resultados indican que los métodos Gear de orden mayor que 4 no disminuyen apreciablemente el número de iteraciones y el tiempo de ejecución (Nagel 1975). El orden óptimo de integración según el número de iteraciones será diferente en cada sistema de ecuaciones simulado.

La selección del orden usada por PSpice fue propuesta por Gear (Gear 1967; Gear 1968) y modificada por Brayton, Hachtel y col. (Brayton, Hachtel y col. 1972). Si el orden actual es k , tras calcular k valores instantáneos, se calcula h_{n+1} usando la ecuación de orden $k-1$, k y $k+1$. Después, se selecciona el orden que genera un valor mayor de h_{n+1} .

Sin embargo, sólo se cambia el orden si h_{n+1} es mayor que el del orden actual en un factor R_0 que está entre 1,05 y 1,5.

La experiencia con esta estrategia de selección de orden muestra que se obtiene el menor número de iteraciones si la selección de orden se realiza en cada valor instantáneo en lugar de cada k valores instantáneos. La observación más interesante es que no importa cuál sea el límite superior de orden seleccionado, el algoritmo permanece usualmente en orden 2. En los ensayos realizados, sólo se utilizó el método de orden 3 en el caso del circuito estable, con un 12% más de iteraciones (Nagel 1975). Finalmente, el análisis de este circuito requiere más de 5.000 iteraciones, independientemente del límite superior del orden seleccionado del algoritmo Gear, lejos de las 3.387 del método trapezoidal.

El sistema de variación de orden disminuye de forma considerable la ventaja de emplear algoritmos de orden alto. Para tolerancias de error nominal, los algoritmos Gear-2 de orden fijo y el método trapezoidal requieren un esfuerzo computacional menor que los métodos Gear de orden variable. Si los requerimientos de exactitud son altos, el número de iteraciones de los algoritmos Gear de orden alto son menores, entre un 10 y un 20%, a los del método trapezoidal.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Berry, R. D. (1971). "Optimal ordering of electronic circuit equations for a sparse matrix solution." *IEEE Transactions on Circuit Theory* CT18(1): 40-&.
- Blostein, M. L. (1973). *The transient analysis of nonlinear electronic networks*. C. IEEE Short Course Notes.
- Branin, F. H., G. R. Hogsett, y col. (1971). "ECAP II - New electronic circuit analysis program." *IEEE Journal of Solid-State Circuits* SC 6(4): 146-&.
- Brayton, R. K., G. D. Hachtel, y col. (1972). "New efficient algorithm for solving differential-algebraic systems using implicit backward differentiation formulas." *Proceedings of the Institute of Electrical and Electronics Engineers* 60(1): 98-&.
- Broyden, C. G. (1969). "A new method of solving nonlinear simultaneous equations." *Computer Journal* 12(1): 94-&.
- Calahan, D. A. (1968). *Computer-Aided Network Design*. McGraw-Hill, New York, USA.
- Chua, L. O. y P. M. Lin (1975). *Computer-Aided Analysis of Electronic Circuits: Algorithms and Computational Techniques*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, USA.
- Dahlquist, C. G. (1963). "A special stability problem for linear multistep methods " *BIT* 3: 27-43.
- Davidenko, D. F. (1953). "On a new method of numerical solution of systems of nonlinear equations." *Dokl Akad Nauk SSSR* 88: 601-602.
- Enright, W. H., T. E. Hull, y col. (1975). "Comparing numerical methods for stiff systems of ODEs." *BIT* 15: 10-48.
- Gear, C. W. (1967). *Numerical integration of stiff ordinary equations*. Report 221. Universidad de Illinois en Urbana-Champaign, USA.
- Gear, C. W. (1968). *The control of parameters in the automatic integration of ordinary differential equations*. File No. 757. Universidad de Illinois en Urbana-Champaign, USA.
- Gear, C. W. (1971). *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, USA.
- Hewlett, J. D. y B. M. Wilamowski (2011). "Spice as a fast and stable tool for simulating a wide range of dynamic systems." *International Journal of Engineering Education* 27(2): 217-224.

- Hsieh, H. Y. y M. S. Ghausi (1972). "Probabilistic approach to optimal pivoting and prediction of fill-in for random sparse matrices." *IEEE Transactions on Circuit Theory* CT19(4): 329-&.
- Hymowitz, C. E. y L. E. Meares (1988). *Simulating with Spice*. Intusoft, San Pedro, California, USA.
- Isaacson, E. y H. B. Keller (1966). *Analysis of Numerical Methods*. Wiley, New York, USA.
- Kao, W. H. (1972). *Comparison of quasi-newton methods for the DC analysis of electronic circuits*, Universidad de Illinois en Urbana-Champaign, USA.
- Kielkowski, R. (1994). *Inside Spice*. McGraw-Hill, New York, USA.
- Kukal, T. S. (2003). *Application Note Cadence*, S. Sharma (Ed.).
- Kundert, K. S. (1995). *The Designer's Guide to Spice and Spectre*. Kluwer Academic Publishers, Norwell, Massachusetts, USA.
- Markowitz, H. M. (1957). "The elimination form of the inverse and its application to linear-programming." *Management Science* 3(3): 255-269.
- Matlab. (2013). "<http://www.mathworks.com/help/tech/techdoc/ref/ode23.html>."
- McCalla, W. J. y D. O. Pederson (1971). "Elements of computer-aided circuit analysis." *IEEE Transactions on Circuit Theory* CT18(1): 14-&.
- Miller, K. (1973). *Math 228a Notes*. D. O. Mathematics. Universidad de California, Berkeley, USA.
- Müller, K. H. (1990). *A Spice Cookbook*. Intusoft, San Pedro, California, USA.
- Nagel, L. y R. Rohrer (1971). "Computer analysis of nonlinear circuits, excluding radiation (CANCER)." *IEEE Journal of Solid-State Circuits* SC 6(4): 166-&.
- Nagel, L. W. (1975). *Spice2: A computer program to simulate semiconductor circuits*. Electronic Research Laboratory. Universidad de California, Berkeley, USA.
- Nagel, L. W. y D. O. Pederson (1973). *Simulation program with integrated circuit emphasis*. 16th Midwest Symposium On Circuit Theory, Waterloo (Canadá), Universidad de California, Berkeley, USA.
- Nakhla, M., K. Singhal, y col. (1974). "Optimal pivoting order for solution of sparse systems of equations." *IEEE Transactions on Circuits and Systems* AS21(2): 222-225.
- Ralston, A. (1965). *A First Course in Numerical Analysis*. McGraw-Hill, New York, USA.

- Rohrer (1970). "Successive secants in the solution of nonlinear equations " AMS: 103-112.
- Shichman, H. (1970). "Integration system of a nonlinear network-analysis program." IEEE Transactions on Circuit Theory CT17(3): 378-&.
- Vladimirescu, A. (1994). The Spice Book. John Wiley and Sons, New York, USA.
- Weeks, W. T., A. J. Jimenez, y col. (1973). "Algorithms for ASTAP - Network analysis program." IEEE Transactions on Circuit Theory CT20(6): 628-634.
- Wilamowski, B. M. y O. Kaynak (2000). "Oil well diagnosis by sensing terminal characteristics of the induction motor." IEEE Transactions on Industrial Electronics 47(5): 1100-1107.
- Wilson, C. G. y J. Y. Hung (2010). A system simulation technique combining Spice and Simulink tools. IECON 2010 - 36th Annual Conference on IEEE Industrial Electronics Society.

ANEXO C

ESTABILIDAD DEL ALGORITMO DE INTEGRACIÓN

C.1 NÚMERO DE OPERACIONES DEL PROCESO DE FACTORIZACIÓN PARA LA RESOLUCIÓN DE SISTEMAS DE ECUACIONES LINEALES

Los algoritmos de sustitución hacia adelante y hacia atrás utilizados en el proceso de factorización son

$$\begin{cases} y = [U] \cdot x = [L]^{-1} \cdot b \\ x = [U]^{-1} \cdot y = [U]^{-1} \cdot [L]^{-1} \cdot b \end{cases} \quad (C.1)$$

Para estimar el esfuerzo computacional se supondrá que las operaciones matriciales sólo pueden adoptar las formas: $A \cdot B \cdot C$ y A/B . Además, se considerará que los dos tipos de operaciones matriciales requieren el mismo tiempo de computación.

Si se denomina r_i al número de coeficientes en la fila i -ésima de la matriz U y c_i al número de coeficientes en la columna i -ésima de la matriz L , entonces el número de operaciones del procedimiento de sustitución para la fila y columna i -ésimas durante el proceso de factorización es $c_i + c_i \cdot r_i$; c_i operaciones hacia adelante, en la fila i -ésima, y $r_i + 1$ hacia atrás, en la misma fila. Por lo tanto el número total de operaciones es

$$\sum_{i=1}^N [(c_i + c_i \cdot r_i) + c_i + (r_i + 1)] \quad (C.2)$$

Para técnicas no dispersivas, $c_i = r_i = i - 1$. Así la Ecuación (C.2) se reduce a

$$\left(\frac{N^3 - N}{3}\right) + \left(\frac{N^2 - N}{2}\right) + \left(\frac{N^2 + N}{2}\right) \quad (C.3)$$

C.2 MÉTODOS DE INTEGRACIÓN POLINOMIALES

El valor de la incógnita x_{n+1} en el instante t_{n+1} , a partir de un desarrollo en serie de Taylor, es

$$x_{n+1} = x_n + h_n \cdot \dot{x}_n + \frac{h_n^2}{2} \cdot \frac{d^2x}{dt^2}(\xi) \quad (\text{C.4})$$

donde $\xi \in [t_n, t_{n+1}]$.

Si se deriva la ecuación anterior y se desprecia el último sumando, se obtiene

$$\dot{x}_{n+1} = \dot{x}_n + h_n \cdot \frac{d^2x}{dt^2}(\xi) \quad (\text{C.5})$$

Si se sustituye la expresión anterior en la Ecuación (C.4), se obtiene

$$x_{n+1} = x_n + h_n \cdot \dot{x}_{n+1} - \frac{h_n^2}{2} \cdot \frac{d^2x}{dt^2}(\xi) \quad (\text{C.6})$$

A partir de esta ecuación, excluyendo el último término, y la formulación de variables de estado

$$\dot{x} = f(x, t) \quad (\text{C.7})$$

se obtiene la ecuación utilizada en el algoritmo de Euler implícito hacia atrás

$$x_{n+1} = x_n + h_n \cdot f(x_{n+1}, t_{n+1}) \quad (\text{C.8})$$

El sistema simplificado de ecuaciones algebraicas en el instante t_{n+1} se soluciona por métodos iterativos. Por tanto, el algoritmo de integración convierte el análisis en régimen transitorio en N instantes en un problema más sencillo consistente en N cuasi-análisis en continua.

El procedimiento clásico para resolver la Ecuación (C.8) emplea iteraciones funcionales (Chua y Lin 1975)]. Este procedimiento utiliza un predictor explícito

$$x_{n+1}^{(0)} = x_n + h_n \cdot \dot{x}_n \quad (\text{C.9})$$

y luego lo corrige de forma iterativa con un corrector implícito

$$x_{n+1}^{(k)} = x_n + h_n \cdot f(x_{n+1}^{(k-1)}, t_{n+1}) \quad (\text{C.10})$$

El algoritmo del método trapezoidal utiliza la expresión

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h_n}{2} \cdot (\dot{x}_{n+1} + \dot{x}_n) - \frac{h_n^3}{12} \cdot \frac{d^3x}{dt^3}(\xi) \quad (\text{C.11})$$

El algoritmo propuesto por Gear (Gear 1967; Gear 1968) utiliza la expresión

$$\dot{x}_{n+1} = \sum_{i=0}^k \alpha_i \cdot x_{n+1-i} \quad (\text{C.12})$$

donde α_i se determina mediante métodos de interpolación.

A diferencia de los métodos de Euler hacia atrás y trapezoidal, los métodos Gear obtienen la solución de x_{n+1} en términos de dx_{n+1}/dt , x_n y $k-1$ soluciones hacia atrás ($x_{n-1}, \dots, x_{n-k+1}$). Estos algoritmos multipaso implican contabilidad y almacenamiento adicionales debido a que los valores en los instantes anteriores deben ser procesados y almacenados.

Otra dificultad adicional es que el método de orden k no puede usarse hasta que $k-1$ valores en instantes anteriores hayan sido calculados. Gear propuso usar un método de primer orden para obtener el valor en el primer instante, después es posible usar un método de segundo orden para obtener el valor en el segundo instante, y así sucesivamente.

El algoritmo Gear de segundo orden para salto de tiempo variable es (Shichman 1970):

$$\dot{x}_{n+1} = \frac{2h_n+h_{n-1}}{h_n \cdot (h_n+h_{n-1})} \cdot x_{n+1} + \frac{h_n+h_{n-1}}{h_n \cdot h_{n-1}} \cdot x_n + \frac{h_n}{h_{n-1} \cdot (h_n+h_{n-1})} \cdot x_{n-1} \quad (\text{C.13})$$

El método Runge-Kutta clásico de cuarto orden (Ralston 1965; Chua y Lin 1975) lleva a la solución explícita:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{1}{6}y_1 + \frac{1}{3}y_2 + \frac{1}{3}y_3 + \frac{1}{6}y_4 \quad (\text{C.14})$$

en términos de soluciones intermedias:

$$\begin{cases} y_1 = f(x_n, t_n) \\ y_2 = f\left(x_n + \frac{h_n}{2} \cdot y_1, t_n + \frac{h_n}{2}\right) \\ y_3 = f\left(x_n + \frac{h_n}{2} \cdot y_2, t_n + \frac{h_n}{2}\right) \\ y_4 = f(x_n + h_n \cdot y_3, t_n + h_n) \end{cases} \quad (\text{C.15})$$

Los métodos de Runge-Kutta deben usarse con formulación de variables de estado, dado que las ecuaciones de los circuitos deben formularse según la Ecuación (C.7).

El algoritmo de Euler puede generalizarse utilizando p soluciones hacia atrás ($x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n-p+1}$):

$$x_{n+1} = \sum_{i=1}^p \alpha_i \cdot x_{n-i+1} + \sum_{i=0}^p \beta_i \cdot \dot{x}_{n-i+1} \quad (\text{C.16})$$

Esta ecuación representa a los métodos de tipo polinomial, comprobándose que el método de Euler hacia atrás es un método polinomial de segundo orden. El método Gear de primer orden coincide con el método de Euler hacia atrás.

C.3 ESTABILIDAD DEL ALGORITMO DE INTEGRACIÓN

Para definir las regiones de estabilidad se va a seleccionar una ecuación diferencial (Nagel 1975)

$$\dot{x} = \lambda \cdot x \quad (\text{C.17})$$

que tiene como solución analítica

$$x = x_0 \cdot e^{\lambda t} \quad (\text{C.18})$$

La solución aproximada mediante el método de Euler hacia atrás y un intervalo de tiempo fijo, $h_n=h$, es:

$$x_n = x_0 \cdot \left(\frac{1}{1-h\lambda}\right)^n \quad (\text{C.19})$$

La región estable para esta función es:

$$|1 - h\lambda| \geq 1 \quad (\text{C.20})$$

Un algoritmo de integración es A-estable (Dahlquist 1963) cuando la región de estabilidad del mismo incluye el semiplano izquierdo del plano $h \cdot \lambda$, condición cumplida por el método de Euler hacia atrás y $h_n=h$. Un método A-estable produce una solución estable si la solución exacta es estable, independientemente del valor del salto de tiempo utilizado.

Un algoritmo de integración es rígidamente estable si es estable cuando el salto de tiempo tiende a infinito. A partir de esta definición se puede afirmar que cualquier método A-estable es también rígidamente estable. Si el método de integración no es

rígidamente estable, las condiciones de estabilidad imponen un límite superior al salto de tiempo: éste debe ser inversamente proporcional al menor autovalor de la ecuación del circuito. Esto es una desventaja cuando se analizan circuitos, ya que la mayoría se representan mediante sistemas rígidos de ecuaciones, donde la relación entre los autovalores máximo y mínimo puede ser mayor o igual que 1.000.

El análisis de la Ecuación (C.17) muestra la relación entre las dificultades de convergencia del algoritmo trapezoidal y la inexactitud de la estimación del error polinomial, DD₃, Ecuación (B.30). Concretamente para $\lambda=-3$, un valor inicial de la variable analizada igual a 1 y un intervalo de tiempo de 0,1 se obtienen las curvas representadas en las Figuras C.1 y C.2. La Figura C.1 permite comparar el resultado de la integración trapezoidal con la solución analítica, y la Figura C.2 muestra la relación entre el LTE y el DD₃.

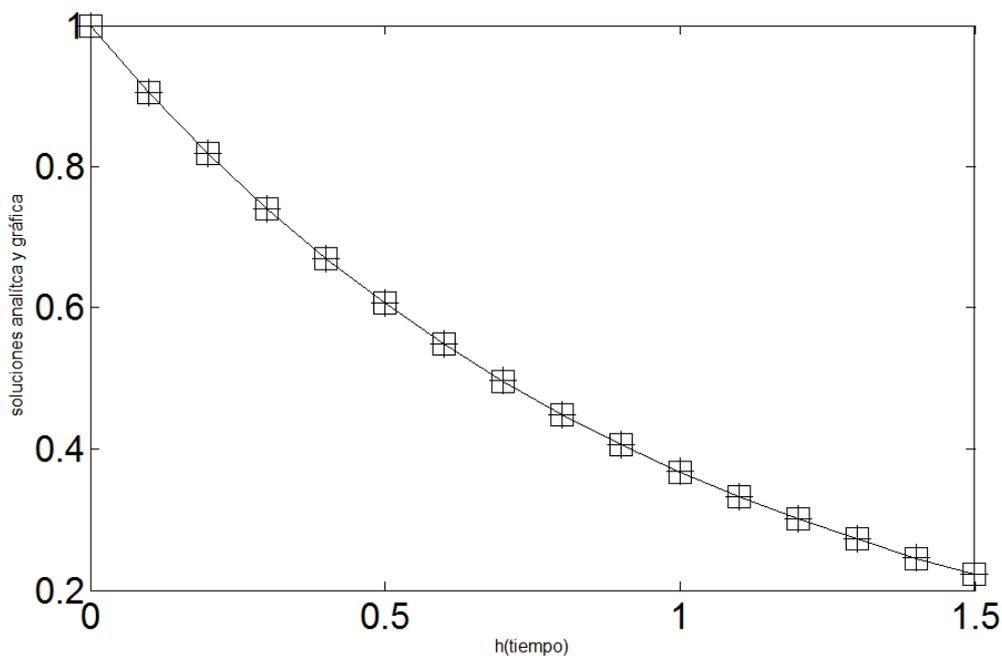


Figura C.1 Comparación entre la solución analítica (+) y solución la obtenida mediante integración trapezoidal (□)

Así, el método trapezoidal para un salto de tiempo fijo, $h_n=h$, aplicado a la Ecuación (C.17), equivale a adoptar la expresión

$$x_n = x_0 \left(\frac{1 + \frac{h\lambda}{2}}{1 - \frac{h\lambda}{2}} \right)^n \tag{C.21}$$

Si la parte real de λ es negativa el método trapezoidal es A-estable. Por tanto, el algoritmo trapezoidal es estable si la solución es estable. Si $|h \cdot \lambda| > 2$, la solución oscilará en torno a la solución correcta. Esta oscilación es poco importante si el valor de LTE se mantiene por debajo de un nivel adecuado.

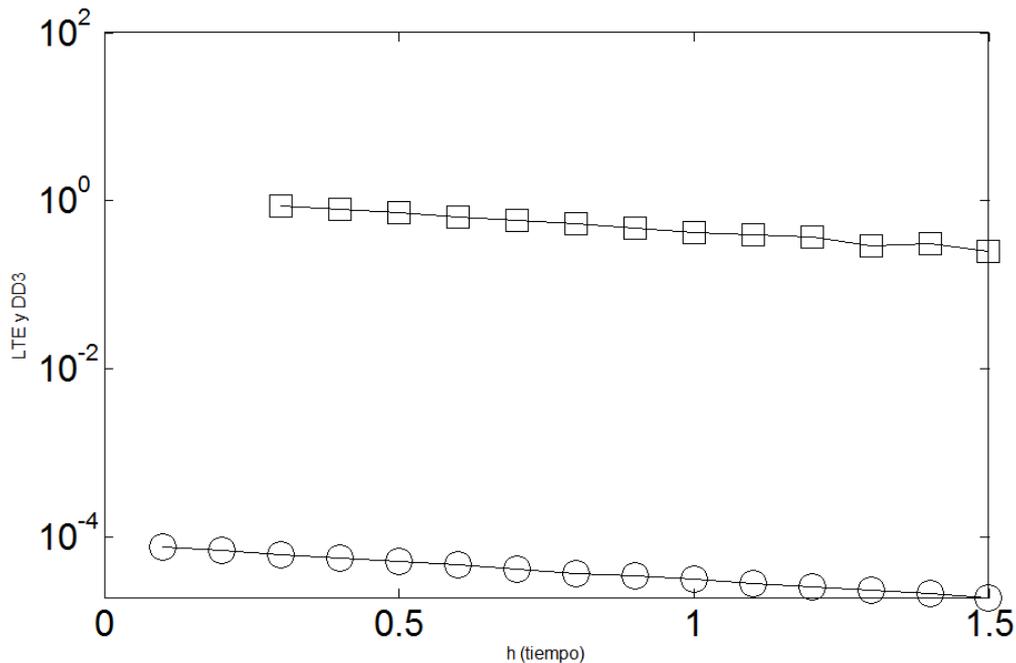


Figura C.2 Valores de LTE (o) y DD₃ (□)

Las regiones de estabilidad de los métodos Gear correspondientes a los primeros 6 órdenes fueron obtenidas por Gear (Gear 1967). Sólo los métodos Gear de primer y segundo orden son A-estables, aunque todos son rígidamente estables. Es posible que el algoritmo de Gear de segundo orden para salto de tiempo variable no sea estable para algunas combinaciones de h_n y h_{n-1} . Sin embargo, la práctica indica que este método es estable en problemas de simulación de circuitos de gran tamaño.

El método de Runge-Kutta no es rígidamente estable y es bastante ineficaz con sistemas de ecuaciones rígidos. Sin embargo, Rosenbrock (Rosenbrock 1963) propuso una extensión de este método que es A-estable. Allen (Allen 1969) empleó esta extensión para desarrollar métodos de Runge-Kutta A-estables de tercer y cuarto orden.

La Figura C.2 muestra que DD₃ es 14.000 veces más grande que el valor exacto de LTE.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Allen, R. H. (1969). Numerically stable explicit integration techniques using a linearized runge kutta extension. Information Sciences Laboratory. R. N. 39, Boeing Scientific Research Labs.
- Chua, L. O. y P. M. Lin (1975). Computer-Aided Analysis of Electronic Circuits: Algorithms and Computational Techniques. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, USA.
- Dahlquist, C. G. (1963). "A special stability problem for linear multistep methods" BIT 3: 27-43.
- Gear, C. W. (1967). Numerical integration of stiff ordinary equations. Report 221. Universidad de Illinois en Urbana-Champaign, USA.
- Gear, C. W. (1968). The control of parameters in the automatic integration of ordinary differential equations. File No. 757. Universidad de Illinois en Urbana-Champaign, USA.
- Nagel, L. W. (1975). Spice2: A computer program to simulate semiconductor circuits. Electronic Research Laboratory. Universidad de California, Berkeley, USA.
- Ralston, A. (1965). A First Course in Numerical Analysis. McGraw-Hill, New York, USA.
- Rosenbrock, H. H. (1963). "Some general implicit processes for numerical-solution of differential-equations." Computer Journal 6(4): 329-&.
- Shichman, H. (1970). "Integration system of a nonlinear network-analysis program." IEEE Transactions on Circuit Theory CT17(3): 378-&.