

2020-06

MODELO COMPUTACIONAL PARA SIMULAR LA DISPERSION DE ONDASELECTROMAGNETICAS EN SENSORES DE TENSION EN POLIMEROS, UTILIZANDO APROXIMACIONES POTENCIALES

VELASQUEZ CARCAMO, RENE EDUARDO

<https://hdl.handle.net/11673/49969>

Repositorio Digital USM, UNIVERSIDAD TECNICA FEDERICO SANTA MARIA

UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA

VALPARAÍSO - CHILE



**MODELO COMPUTACIONAL PARA SIMULAR LA
DISPERSIÓN DE ONDASELECTROMAGNÉTICAS EN
SENSORES DE TENSIÓN EN POLÍMEROS, UTILIZANDO
APROXIMACIONES POTENCIALES.**

RENÉ EDUARDO VELÁSQUEZ CÁRCAMO

**MEMORIA DE TITULACIÓN PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO
CIVIL MECÁNICO MENCIÓN ENERGÍA**

PROFESOR GUÍA: Ph. D. Ing. CHRISTOPHER COOPER VILLAGRÁN

PROFESOR CORREFERENTE: Ph. D. Ing. ALEJANDRO PACHECO SANJUAN

JUNIO - 2020

Agradecimientos

Al culminar la etapa universitaria con la entrega de este trabajo es inevitable detenerse a agradecer a cada una de las personas que me acompañó durante el trayecto, durante cada parte de él. En primer lugar a mi familia, en especial a Monica, Claudio y Catalina por darme su apoyo en las decisiones tomadas. A mis amigos y compañeros, con quienes compartí momentos inolvidables durante la época universitaria. A mi pareja, Amanda, por siempre darme animos para seguir adelante. No puedo dejar afuera a la gente que me ayudó a sacar este trabajo adelante, al profesor Christopher Cooper, a mi compañero Milán Ungerer y a Alexandra Elbakyan, a quienes pude recurrir en momentos de profunda duda. A todos, muchas gracias.

Resumen

El método de elementos de borde es un método de resolución de ecuaciones diferenciales que tiene relativamente pocas aplicaciones computacionales comparando con las que utilizan el método de elementos finitos para resolver distintas problemáticas.

Sin embargo, el método de elementos de borde tiene bastantes ventajas comparativas respecto del método de elementos finitos dependiendo del problema que se quiera resolver. Es muy útil para resolver problemas térmicos o electromagnéticos, en donde los elementos internos de una geometría estudiada no inciden en demasía en el resultado final. Es en estos casos en donde el método de elementos de borde o BEM, por sus siglas en inglés *Boundary Element Method* no utiliza demasiada capacidad computacional debido a que no considera los elementos internos de las geometrías.

No obstante, el método no ha sido explotado computacionalmente y existe un amplio campo para investigar al respecto.

En el presente trabajo se intentará resolver un problema que puede parecer simple: una onda electromagnética incidente sobre una nanoesfera. La hipótesis postulada en el presente trabajo consiste en que dadas las condiciones cuasiestáticas del problema planteado es correcto reducir las ecuaciones de Maxwell que rigen las situaciones presentadas, pudiendo simular el comportamiento del campo magnético dispersado dentro de los cuerpos, resolviendolos a través de BEM utilizando Laplace como función de Green, en lugar de Helmholtz, lo que haría que la resolución sea más simple y rápida.

Posteriormente, para entregarle un poco de contexto práctico al presente trabajo, se estudiará el comportamiento de una situación similar: una onda electromagnética incidente sobre una matriz con microhilos ferromagnéticos insertos en ella.

Palabras claves: Método de Elementos de Borde, BEM, BEM++, Micro-hilos, Sensor, Dispersión Múltiple, Electroestática, Laplace.

Abstract

The boundary element method is a method of solving differential equations that has relatively few computational applications compared to those that use the finite element method to solve different problems.

However, the boundary element method or *BEM* has quite a few comparative advantages over the finite element method depending on the problem to be solved. It is very useful to solve thermal or electromagnetic problems, where the internal elements of a studied geometry do not have too much influence on the final result. It is in these cases where the *BEM*, does not use as much computational capacity because it does not consider the internal elements of the geometries.

However, the method has not been exploited computationally and there is a wide field to investigate it.

In this paper we will try to solve a problem that may seem simple: an incident electromagnetic wave on a nanosphere. The hypothesis postulated in the present work is that given the quasistatic conditions of the problem posed, it is correct to reduce the Maxwell equations that govern the situations presented, being able to simulate the behavior of the magnetic field dispersed within the bodies by solving them through BEM using Laplace as Green function, instead of Helmholtz, which would make the resolution simpler and faster.

Later, to give a little practical context to the present work, the behavior of a similar situation will be studied: an incident electromagnetic wave on a matrix with ferromagnetic micro-wires inserted in it.

Keywords: Boundary Element Method, BEM, BEM++, Micro-wires, Sensor, Multiple Scattering, Electrostatic, Laplace.

Contenido

1	Introducción.	1
2	Fundamentos teóricos eléctricos.	3
2.1	Campo eléctrico y campo magnético.	3
2.1.1	Campo eléctrico.	3
2.1.2	Campo magnético.	4
2.1.3	Leyes de Maxwell.	5
3	Método de elementos de borde.	8
4	Biblioteca bempp.	14
4.1	Estructura.	14
4.2	Algoritmo y explicación.	15
5	Aproximación cuasiestática de dispersión electromagnética.	19
5.1	Formulación matemática del problema.	19
6	Desarrollo del problema.	25
6.1	Creación de mallas.	25
6.2	Utilización de la librería bempp.	26
7	Resultados y análisis.	29
7.1	Caso 1: Problema de verificación.	29
7.1.1	Planteamiento matemático del problema.	29
7.1.2	Condiciones de diseño del problema.	30
7.1.3	Resultados	31
7.2	Caso 2: microhilo inserto en una matriz.	36
7.2.1	Planteamiento matemático del problema.	36
7.2.2	Condiciones de diseño del problema.	36
7.2.3	Resultados.	37
7.3	Caso 3: 2 microhilos insertos en una matriz.	41
7.3.1	Planteamiento matemático del problema.	41
7.3.2	Condiciones de diseño del problema.	41
7.3.3	Resultados.	42
8	Conclusiones.	43

Anexo A Fundamentos teóricos matemáticos.	46
A.1 Cálculo vectorial.	46
A.2 Cálculo integral.	49
A.3 Ecuaciones Diferenciales.	49
A.3.1 Ecuación de Laplace.	49
A.3.2 Ecuación de Helmholtz.	50
Anexo B Código Python Caso Verificación.	51
Anexo C Código Python Caso 2 superficies.	68
Anexo D Código Python Caso 3 superficies.	82

Índice de figuras

2.1	Líneas de campo eléctrico. (Fuente: [13])	3
2.2	Campo magnético producido por una carga puntual. (Fuente: [13])	4
2.3	Campo magnético producido por una corriente eléctrica. (Fuente: [13])	5
2.4	Líneas de campo magnético. (Fuente: [13])	6
2.5	Líneas de campo magnético. (Fuente: [13])	7
2.6	Propagación de onda electromagnética. (Fuente: [13])	7
3.1	Diferencias en la discretización en BEM y FEM en 3D (Fuente: [8]).	8
3.2	Puntos de frontera para los casos 2D y 3D (Fuente:[5])	9
3.3	Diferentes tipos de elementos de frontera. (Fuente:[5])	10
3.4	Diferencias en la discretización en BEM y FEM en 2D (Fuente:[5]).	12
3.5	Elementos de borde y puntos internos para el estudio	13
4.1	Modulos de bempp (Fuente:[14])	15
4.2	Algoritmo resolución <i>bempp</i>	16
4.3	Intersección de elementos lineales continuos (Fuente:[5])	17
5.1	Problema de estudio	19
5.2	Onda incidente perturbada.	20
5.3	Micro-hilo no tiene efecto sobre la onda.	21
6.1	Geometrías en ANSYS	25
6.2	Malla en programa Meshlab	26
6.3	Malla en programa Gmsh	26
7.1	Representación esquemática del caso 1.	29
7.2	Malla de 5,120 elementos, utilizada en Caso 1.	31
7.3	Convergencia de malla. Caso de verificación	31
7.4	Error relativo de la 'Extinction Cross Section'. Caso de verificación	32
7.5	Error relativo de la 'Extinction Cross Section' en escala logarítmica. Caso de verificación	33
7.6	Parte real de potencial eléctrico medido en antena. Caso de verificación	34
7.7	Parte imaginaria de campo eléctrico medido en antena. Caso de verificación	34
7.8	Variación de la parte real de campo eléctrico medido en antena. Caso de verificación	35
7.9	Variación de la parte imaginaria de campo eléctrico medido en antena. Caso de verificación	35
7.10	Representación esquemática del caso 2.	36
7.11	Mallas utilizadas en caso 2.	37
7.12	Parte real del potencial eléctrico medido en las antenas modificando la permitividad eléctrica del microhilo.	37

7.13	Parte imaginaria del potencial eléctrico medido en las antenas modificando la permitividad eléctrica del microhilo.	38
7.14	Variación de la parte real del potencial eléctrico medido en las antenas modificando la permitividad eléctrica del microhilo.	38
7.15	Variación de la parte real del potencial eléctrico medido en las antenas modificando la permitividad eléctrica del microhilo.	39
7.16	Variación de la parte imaginaria del potencial eléctrico medido en las antenas modificando la permitividad eléctrica del microhilo.	39
7.17	Variación de la parte imaginaria del potencial eléctrico medido en las antenas modificando la permitividad eléctrica del microhilo.	40
7.18	Representación esquemática del caso 3.	41
7.19	Geometría y malla utilizada en caso 3.	42
A.1	Representación y suma de vectores	46
A.2	Campo vectorial. (Fuente: [4])	47
A.3	Campo vectorial. (Fuente: [1])	48

Indice de tablas

7.1	Parámetros de campo eléctrico.	30
7.2	Constantes dieléctricas para caso de verificación.	30
7.3	Error relativo.	32
7.4	Potencial eléctrico calculado en antenas.	33
7.5	Permitividades eléctricas utilizadas.	36
7.6	Medición de potencial eléctrico en antenas, Caso 3.	42

Capítulo 1

Introducción.

Durante los últimos años el desarrollo de nuevos métodos de resolución de ecuaciones diferenciales ha llamado la atención de la comunidad científica, siendo el método de elementos finitos el más conocido, utilizado y estudiado; este método realiza una discretización volumétrica completa del cuerpo de estudio, por lo que es muy útil para geometrías complejas. Sin embargo, este método no es el más eficiente en todos los casos.

Dentro de la gama de métodos con los que es posible resolver ecuaciones diferenciales parciales, el método de elementos de borde (conocido también como método de elementos de contorno o de frontera), *BEM* por sus siglas en inglés, es un método particularmente eficiente cuando el cuerpo de estudio posee homogeneidad dentro de su cuerpo, esto usualmente sucede en problemas térmicos, de acústica, electromagnetismo y en algunos problemas de mecánica de fluidos.

Si comparamos ambos métodos vemos una considerable cantidad de software que utiliza el método de elementos finitos para la resolución de problemas, sin embargo, *BEM* aún se encuentra en etapa de desarrollo, por lo que los avances en la implementación del método, mejoras en la velocidad de resolución, mayor precisión a menor costo computacional, entre otros factores, son objetivos a lograr dentro del corto y mediano plazo.

En este trabajo intentaremos demostrar una hipótesis que nos permitiría resolver problemas de electromagnetismo, que cumplan ciertas condiciones, en poco tiempo y con una baja cantidad de iteraciones.

En el capítulo 2 se verán los fundamentos eléctricos necesarios para comprender a los razonamientos técnicos detrás del trabajo. No se hará una descripción en detalle pero se dejan referencias para poder revisar en caso de necesitar un estudio con mayor profundidad. En el capítulo 3 se explica y desarrolla el método de elementos de borde, exponiendo sus fundamentos y desarrollando matemáticamente el funcionamiento del método.

El capítulo 4 se centra en la librería de python utilizada para resolver los problemas con la metodología BEM, esta librería es llamada *bempp*, se expone su estructura y los comandos utilizados para resolver el problema propuesto.

En el capítulo 5 se presenta la formulación matemática del problema. En el capítulo 6 se muestra el desarrollo realizado, mostrando las propiedades electromagnéticas utilizadas, propiedades de la malla generada y softwares utilizados. En el capítulo siguiente se exponen los resultados y análisis para cada caso estudiado.

El último capítulo corresponde a las conclusiones del trabajo. Posteriormente se anexan los códigos utilizados para resolver los casos.

Dentro de los objetivos específicos del presente documento se encuentran encontrar expresiones basadas en la ecuación de Laplace que modelen correctamente el campo electromagnético en el

límite de longitud de onda infinita; generar un software que resuelva la ecuación de Laplace descrita anteriormente, utilizando el método de elementos de frontera; comparar simulaciones con resultados disponibles en la literatura [14] y realizar simulaciones de la dispersión de microhilos insertos en polímeros de caucho.

Capítulo 2

Fundamentos teóricos eléctricos.

2.1 Campo eléctrico y campo magnético.

2.1.1 Campo eléctrico.

Por definición, el campo eléctrico es un 'Campo físico que describe la interacción entre 2 cuerpos o sistemas con propiedades de naturaleza eléctrica'. Se representa por la letra E y su unidad de medida es $[V/m]$ o $[N/C]$. También se podría definir como la fuerza eléctrica F_e por unidad de carga q o bien:

$$E = \frac{F}{q}$$

El campo eléctrico estático puede representarse esquemáticamente a través de líneas, conocidas como **líneas de campo**.

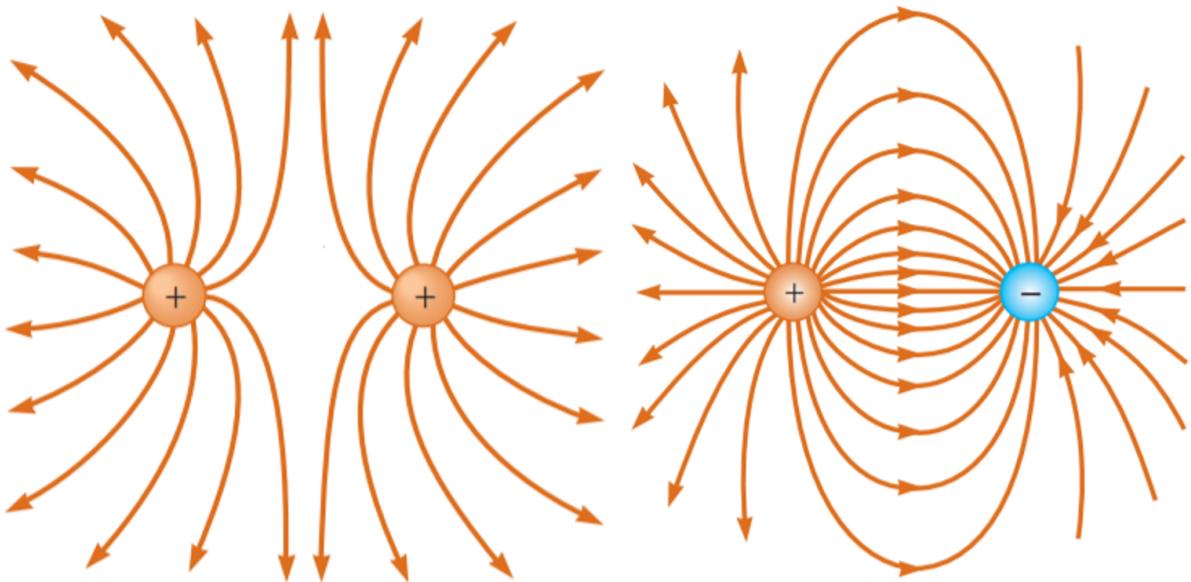


Figura 2.1: Líneas de campo eléctrico. (Fuente: [13])

Las líneas de campo eléctrico poseen las siguientes características:

- El vector de campo eléctrico en cualquier punto es tangente a la línea que pasa por dicho punto.
- Las líneas de campo no se cruzan.
- El número de líneas que salen de una carga positiva o entran en una carga negativa es proporcional a dicha carga.
- Las líneas de campo no pueden cortarse. De lo contrario en el punto de corte existirían dos vectores campo eléctrico distintos.
- A grandes distancias de un sistema de cargas, las líneas están igualmente espaciadas y son radiales, comportándose el sistema como una carga puntual.

2.1.2 Campo magnético.

El campo magnético, al igual que el campo eléctrico, es una magnitud vectorial. Este campo es generado por cargas en movimiento, estas pueden ser cargas puntuales o un conjunto de cargas o, en otras palabras, una corriente eléctrica. Su unidad de medida es el tesla [T].

El movimiento de una carga puntual produce un campo magnético de la forma:

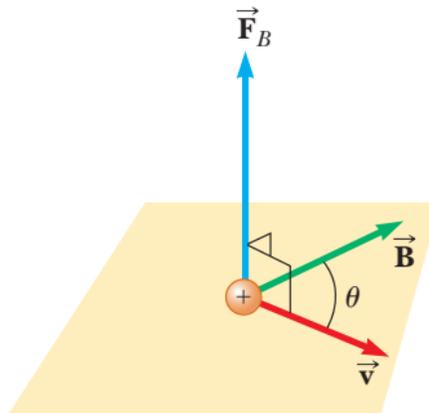


Figura 2.2: Campo magnético producido por una carga puntual. (Fuente: [13])

El campo magnético viene dado por:

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{q \vec{v} \times \vec{u}_r}{r^2}$$

Donde q es la carga puntual que crea el campo, v es la velocidad de q , r es la distancia desde q hasta P , P es el punto en donde estamos calculando el campo magnético, u_r es un vector unitario que va desde q hasta P , μ_0 es una constante denominada permeabilidad del espacio libre, cuyo valor en el sistema internacional (SI) es $\mu_0 = 4\pi 10^{-7} [Tm/A]$.

Por otro lado, una corriente eléctrica también genera un campo magnético, ya que son muchas cargas puntuales moviéndose en conjunto. En este caso el cálculo del campo será con elementos infinitesimales:

$$d\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{I d\vec{l} \times \vec{u}_r}{r^2}$$

En donde I es la intensidad de la corriente, dada por la fórmula $I = q n v_d A$, con n siendo la cantidad de cargas, A la sección del hilo y v_d la velocidad del desplazamiento.

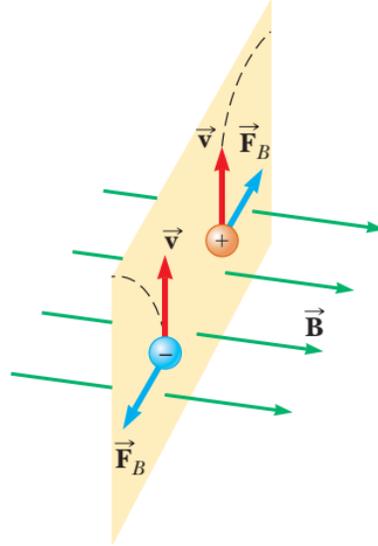


Figura 2.3: Campo magnético producido por una corriente eléctrica. (Fuente: [13])

2.1.3 Leyes de Maxwell.

Existen campos eléctricos y campos magnéticos, el conjunto de ambos campos se conoce como campo electromagnético.

A través de este campo electromagnético, los elementos que interactúan entre sí por medio de la electricidad o el magnetismo y se comportan siguiendo ciertas reglas de como los elementos perturban al campo, o como el campo se perturba a sí mismo. Estas reglas son conocidas como las ecuaciones o leyes de Maxwell.

En un principio eran 8 que luego se condensaron en 4 y se pueden escribir como:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (2.1)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.2)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.3)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (2.4)$$

La ecuación (2.1) también conocida como la **Ley de Gauss** indica básicamente que las cargas positivas serán fuentes y que las cargas negativas serán sumideros, tal cual como se ve en la imagen 2.1, en otras palabras, cargas del mismo signo repelen y cargas opuestas se atraen, notar que ρ es la densidad de carga y ϵ_0 es la permitividad eléctrica en el vacío. Esta ley también indica que el campo eléctrico decae con la distancia, lo hace a razón de $1/r^2$.

La ecuación (2.2), algo así como la Ley de Gauss del magnetismo, indica que no hay fuentes o sumideros de campo magnético, lo que no impide que hayan elementos que generen campos

magnéticos, como se vio anteriormente. ¿Por qué es importante esto? Porque nos indica que el campo magnético siempre debe cerrarse sobre sí mismo. De forma práctica esto se ve al cortar un imán por la mitad: si bien en un inicio solo existe un polo sur y otro norte, al cortar en 2, cada trozo tiene su polo sur y norte respectivamente. Es decir, los monopolos no existen.

La ecuación (2.3), también conocida como la **Ley de Faraday**, indica que si un campo magnético cambia en el tiempo este 'activa' el campo eléctrico, por lo tanto no solo las cargas e imanes influyen en los campos sino que estos influyen entre sí.

La ecuación (2.4) o la **Ley de Ampère-Maxwell**, que indica que si existe un campo eléctrico que cambia en el tiempo o existen cargas moviéndose, es decir, hay una corriente eléctrica (denotada en la ecuación como \vec{J}), esto generará un campo magnético. Las constantes utilizadas en las ecuaciones son:

- Permitividad eléctrica en el vacío

$$\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \left[\frac{C^2}{N \cdot m^2} \right]$$

- Permeabilidad magnética en el vacío

$$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \left[\frac{N}{A^2} \right]$$

Combinando estas 4 leyes es válido decir que todos los fenómenos electromagnéticos que percibimos se pueden explicar.

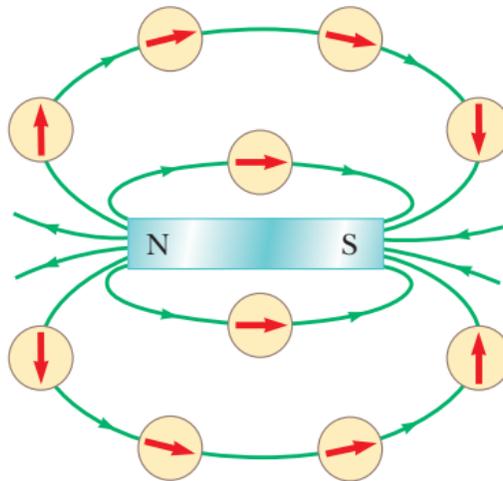


Figura 2.4: Líneas de campo magnético. (Fuente: [13])

Las ecuaciones descritas con anterioridad son dadas para el medio vacío. Para el caso en que los elementos se encuentren en un medio es necesario adaptar las propiedades del mismo. Se puede encontrar una nueva relación para E y B a través de dos parámetros ya conocidos, como permitividad eléctrica y permeabilidad magnética. La relación es de la forma:

$$\vec{E} = \frac{\vec{D}}{\epsilon}$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H}$$

En donde D se define como la densidad el flujo eléctrico y H como la intensidad del campo magnético. Se dice que si la relación entre E/D y B/H es constante, estamos en presencia de un medio lineal. Esto permite que ε y μ se representen de forma matricial. Si esta matriz se puede diagonalizar, es decir que que solo existan elemento en la diagonal, se habla de un medio isótropico y si además los elementos no son iguales se habla de un medio anisótropo. Un elemento isótropico es un elemento en el que sus cualidades físicas no dependen de la dirección en la que son examinadas, por el contrario en el anisótropo su dirección varía sus propiedades físicas.

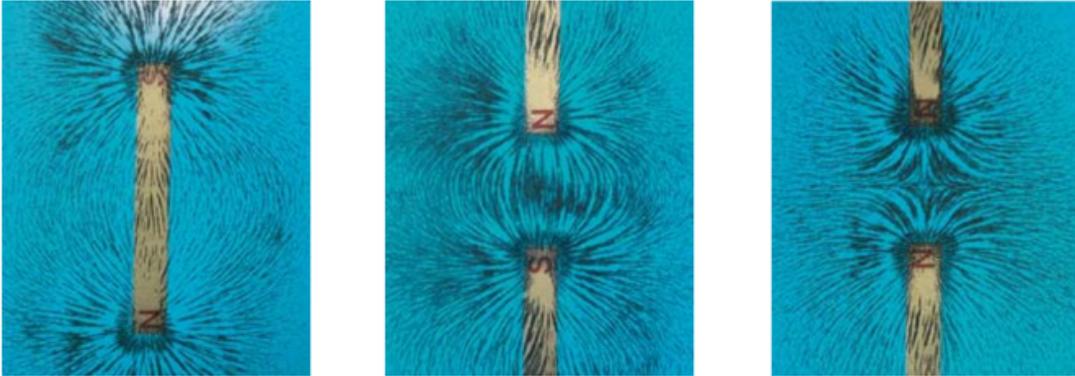


Figura 2.5: Líneas de campo magnético. (Fuente: [13])

Es importante señalar que la onda electromagnética propaga un campo electromagnético, el cual se compone de un campo eléctrico y un campo magnético. La dirección de propagación de la onda (en el caso de la figura 2.6 sería en la dirección x) es perpendicular a la onda del campo eléctrico y a la del campo magnético, las cuales a su vez son perpendiculares entre sí (volviendo a la figura, serían en la dirección y y z respectivamente).

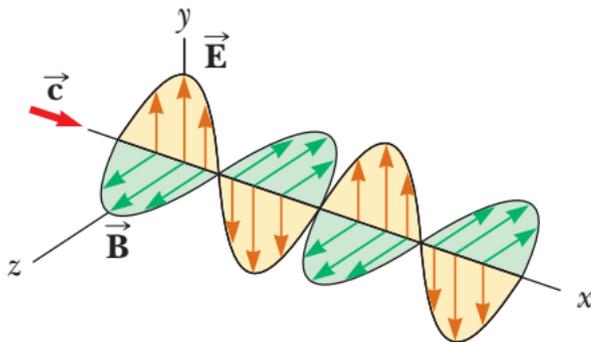


Figura 2.6: Propagación de onda electromagnética. (Fuente: [13])

Capítulo 3

Método de elementos de borde.

El método de elementos de borde o *BEM*, por sus siglas en inglés *Boundary Element Method*, es un método numérico de resolución de ecuaciones diferenciales, muy utilizado en mecánica de fluidos, acústica, electromagnética, entre otras áreas. Si bien el método clásico de resolución de ED es el método de elementos finitos o *FEM*, ambos presentan diferencias en su formulación.

Se sabe que las ecuaciones diferenciales rigen una gran cantidad de fenómenos físicos. Para resolver estas ecuaciones diferenciales se realiza un proceso llamado discretización, el cual nos entrega resultados aproximados y consiste en dividir el elemento en estudio en elementos infinitesimales y basándose en las expansiones de Taylor, poder encontrar el resultado buscado. La primera gran diferencia entre ambos métodos se observa en la siguiente imagen:

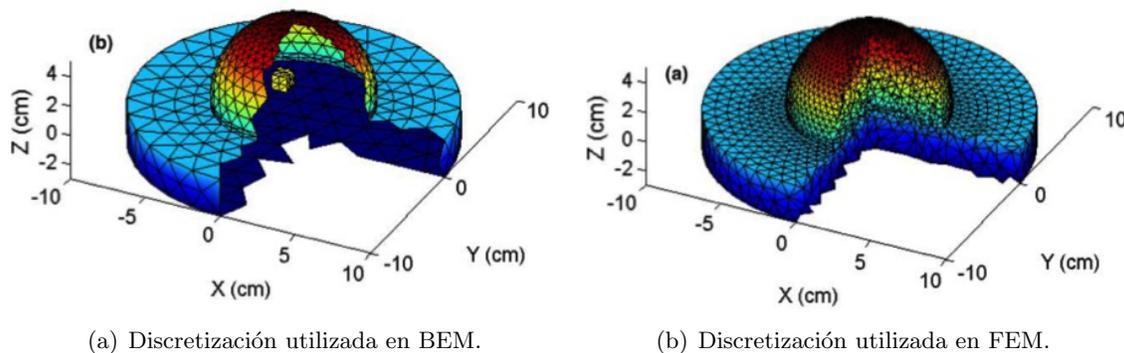


Figura 3.1: Diferencias en la discretización en BEM y FEM en 3D (Fuente: [8]).

Como se observa en la imagen ??, el elemento infinitesimal de estudio en *FEM* es un pequeño elemento de 3 dimensiones, puede ser un cubo, una piramide, por otro lado, en *BEM*, el elemento es bidimensional, es decir, cuadrados o triángulos. Cabe destacar que mientras más elementos se utilicen para dividir el objeto de estudio, más preciso será el cálculo.

El *BEM* utiliza condiciones de borde o de frontera para ajustar los valores de borde a las ecuaciones diferenciales. Estas condiciones suelen ser:

$$\begin{aligned} \text{Condiciones 'esenciales' del tipo } u &= \bar{u} \text{ en } \Gamma_1 \\ \text{Condiciones 'naturales' del tipo } q &= \bar{q} \text{ en } \Gamma_2 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Las condiciones 'esenciales' usualmente son conocidas como condiciones de Dirichlet, mientras que las condiciones 'naturales' son conocidas como condiciones de Neumann. Pueden existir condiciones

de frontera más complejas tal como la combinación de las dos anteriores. La ecuación integral que se usa como punto de inicio para el método es:

$$\nabla^2 u = 0 \quad (3.2)$$

Si a esta ecuación se le aplica una integral por el volumen Ω y además se multiplica por una función w conveniente:

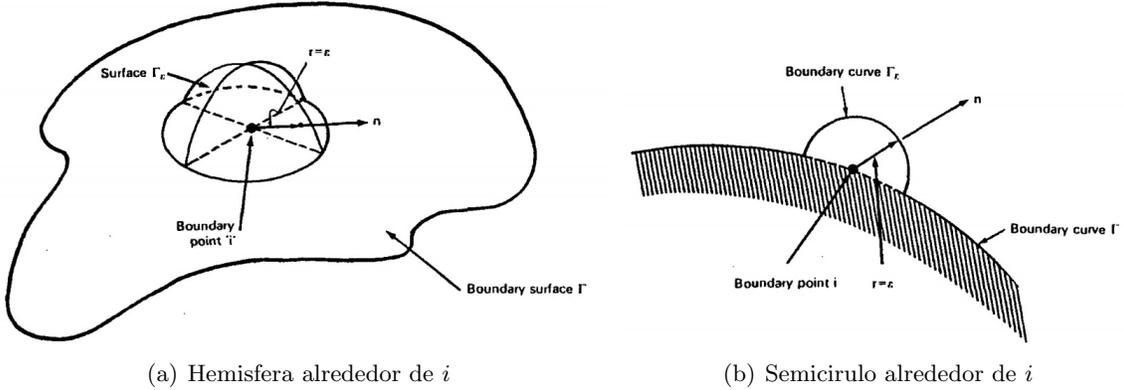
$$\int_{\Omega} \nabla^2 u(r') w(r - r') d\Omega(r') = 0 \quad (3.3)$$

Notar que se está integrando sobre r' y r no está restringido. Utilizando la identidad mostrada en la ecuación (A.2) se puede descomponer de la forma :

$$\int_{\Omega} w(r - r') \nabla \cdot (\nabla u(r')) d\Omega(r') = \int_{\Omega} \nabla \cdot u(r') (\nabla w(r - r')) d\Omega(r') - \int_{\Omega} \nabla u(r') \nabla w(r - r') d\Omega(r') \quad (3.4)$$

En el primer término del lado derecho de la ecuación (3.4) se puede utilizar el teorema de Gauss, indicado en la ecuación (A.3), mientras que en el segundo término volvemos a utilizar la identidad (A.2), lo que entrega¹:

$$\int_{\Omega} \nabla^2 u w d\Omega = \int_{\Gamma} n \cdot u \nabla w d\Gamma - \int_{\Omega} \nabla \cdot (w \nabla u) d\Omega - \int_{\Omega} v \nabla \cdot \nabla u d\Omega \quad (3.5)$$



(a) Hemisfera alrededor de i

(b) Semicirulo alrededor de i

Figura 3.2: Puntos de frontera para los casos 2D y 3D (Fuente:[5])

Nuevamente se puede utilizar el teorema de Gauss con el segundo término del lado derecho de la ecuación. Además, se iguala la ecuación a cero tal como en (3.2):

$$0 = \int_{\Gamma} n \cdot u \nabla w d\Gamma - \int_{\Gamma} n \cdot w \nabla u d\Gamma - \int_{\Omega} u \nabla^2 w d\Omega \quad (3.6)$$

Ahora en adelante, llamaremos a la función w convenientemente la solución fundamental de la ecuación, la cual tiene por segunda derivada la función *Delta Dirac*, la que si se encuentra bajo el dominio de la solución de la función tiene por valor 1, como este es el caso se puede afirmar que el tercer término de la ecuación tiene por valor $u(r)$. Sin embargo también hay que recordar que la función w está evaluada en $(r - r')$ por lo que hay una singularidad que ocurre cuando $r \rightarrow r'$ que

¹Para facilidad de notación solo se utilizará u y w

se debe estudiar. Esta singularidad, que está ilustrada en la figura 3.2, genera un término libre de valor $-1/2 u(r)$. Finalmente se puede escribir la ecuación como:

$$0 = \int_{\Gamma} n \cdot u \nabla w \, d\Gamma - \int_{\Gamma} n \cdot w \nabla u \, d\Gamma + \frac{1}{2}u \quad (3.7)$$

Tomando como nueva notación a $w = u^*$. Notar que las divergencias están multiplicadas por un vector normal, por lo que el término afectado por el operador ∇ se transforma en la derivada en la dirección normal. Reescribiendo se llega a:

$$\frac{1}{2}u^i + \int_{\Gamma} uq^* \, d\Gamma = \int_{\Gamma} qu^* \, d\Gamma \quad (3.8)$$

En donde u es una función potencial, q es su derivada con respecto a la normal. u^* y q^* son las soluciones fundamentales de ambas funciones. El superíndice i indica el punto de 'anclaje' o centro del círculo o hemiesfera de interés. Estos puntos i serán considerados como 'nodos'. Al momento de discretizar la ecuación (3.8), queda de la siguiente forma:

$$\frac{1}{2}u^i + \sum_{j=1}^N \left(\int_{\Gamma_j} q^* \, d\Gamma \right) u^j = \sum_{j=1}^N \left(\int_{\Gamma_j} u^* \, d\Gamma \right) q^j \quad (3.9)$$

Para simplificar, se renombrarán las integrales mostradas como sigue:

$$\hat{H}^{ij} = \int_{\Gamma_j} q^* \, d\Gamma \quad \text{y} \quad G^{ij} = \int_{\Gamma_j} u^* \, d\Gamma \quad (3.10)$$

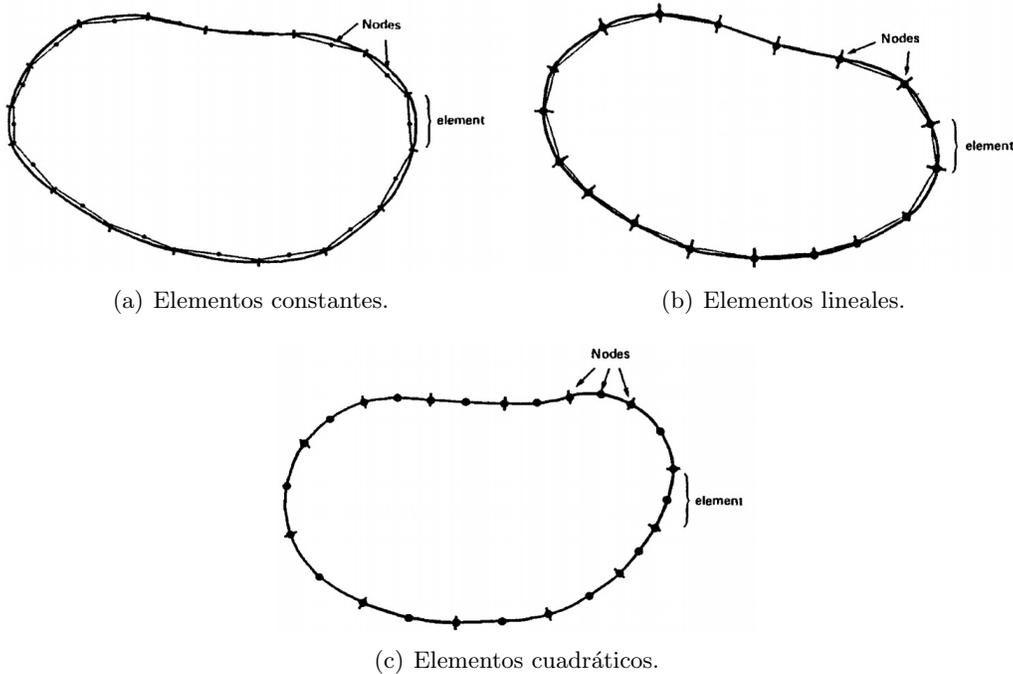


Figura 3.3: Diferentes tipos de elementos de frontera. (Fuente:[5])

$$\left. \begin{array}{l} \text{Si } i \neq j \text{ entonces } \hat{H}^{ij} \\ \text{Si } i = j \text{ entonces } \hat{H}^{ij} + \frac{1}{2} \end{array} \right\} = H^{ij}$$

Entonces la ecuación (3.9) puede ser escrita como:

$$\sum_{j=1}^N H^{ij} u^j = \sum_{j=1}^N G^{ij} q^j \quad (3.11)$$

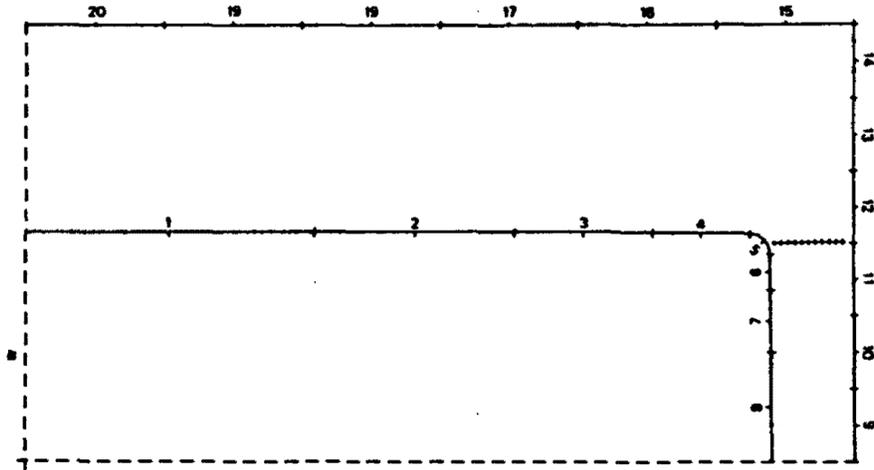
Esta serie de ecuaciones puede ser expresada en forma de matriz como:

$$HU = GQ \quad (3.12)$$

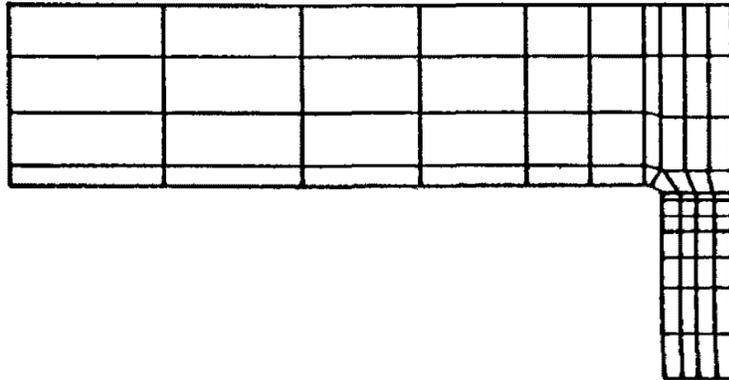
Se puede llevar todos los términos conocidos al lado izquierdo y los valores iniciales conocidos (como los ejemplificados en la ecuación (3.1)), reescribiendola como:

$$AX = F \quad (3.13)$$

Entonces, si las condiciones iniciales son solo de Dirichlet, el vector X estaría compuesto solo por 'valores desconocidos' de q y viceversa. Si fuera una mezcla de ambas condiciones, el vector X sería una mezcla de u 's y q 's, evidentemente luego deberían reordenarse los valores y dejar un solo vector de u 's y otro distinto para q 's. Esto es consecuencia de la formulación mixta de elementos de frontera y entrega una importante ventaja respecto a elementos finitos.



(a) Discretización utilizada en BEM.



(b) Discretización utilizada en FEM.

Figura 3.4: Diferencias en la discretización en BEM y FEM en 2D (Fuente:[5]).

Las integrales mostradas en la ecuación (3.10) son resueltas mediante una cuadratura de Gauss, la cual es una aproximación de la integral.

Es importante indicar que *BEM* es aplicable a problemas que puedan ser modelados por una función de Green, ya sea Laplace, Helmholtz o Helmholtz modificado. Es necesario hacer notar que las funciones de Green son principalmente utilizadas para modelar ecuaciones diferenciales con condiciones de contorno dadas, que es justamente como se han definido los problemas de *BEM*.

El comportamiento en el interior del cuerpo es homogéneo, por lo tanto es posible hacer una buena aproximación o predicción de como se comportará la función potencial estudiada en el cuerpo en los puntos interiores. En la siguiente imagen, se observan graficamente los puntos interiores:

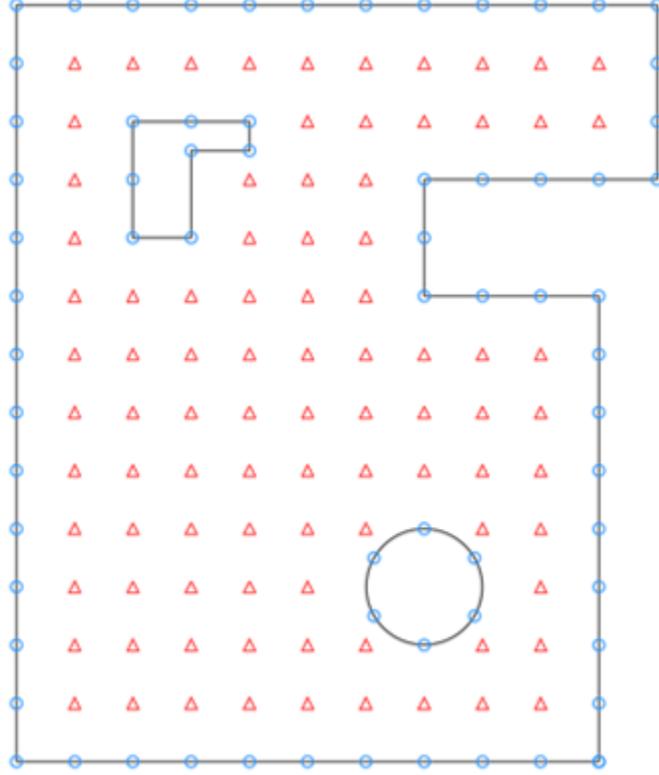


Figura 3.5: Elementos de borde y puntos interiores para el estudio

Para calcular el potencial es necesario utilizar la ecuación que se muestra a continuación. Es necesario hacer notar que los coeficientes H^{ij} y G^{ij} son recalculados para cada punto interno.

$$u^i = \sum_{j=1}^N G^{ij} q^j - \sum_{j=1}^N \hat{H}^{ij} u^j \quad (3.14)$$

El cálculo para la derivada en ambas direcciones en los puntos internos también se puede realizar, pero su formulación es como sigue:

$$\begin{aligned} (q_{x_1})^i &= \left(\frac{\partial u}{\partial x_1} \right)^i = \sum_{j=1}^N \left(\int_{\Gamma} \frac{\partial u^*}{\partial x_1} d\Gamma \right) q^j - \sum_{j=1}^N \left(\int_{\Gamma} \frac{\partial q^*}{\partial x_1} d\Gamma \right) u^j \\ (q_{x_2})^i &= \left(\frac{\partial u}{\partial x_2} \right)^i = \sum_{j=1}^N \left(\int_{\Gamma} \frac{\partial u^*}{\partial x_2} d\Gamma \right) q^j - \sum_{j=1}^N \left(\int_{\Gamma} \frac{\partial q^*}{\partial x_2} d\Gamma \right) u^j \end{aligned} \quad (3.15)$$

Capítulo 4

Biblioteca bempp.

Bempp es una plataforma computacional gratuita de elementos de frontera se puede utilizar para resolver problemas de acústica o electroestática, entre otros. Utiliza una interfaz de python de fácil uso, en el presente trabajo se utiliza *Docker Images*¹ para poder resolver nuestro problema. Como se vio en la sección anterior, para resolver problemas con *BEM* es necesario resolver sistemas compuestos por matrices de gran tamaño, las cuales a su vez contienen elementos que son necesarios aproximar, es por esto que la existencia de esta librería abierta facilita la tarea.

4.1 Estructura.

La librería *bempp* tiene una estructura basada en la imagen 4.1, la cual tiene 5 grandes ejes y es explicado con mayor detalle en [14]:

- **Grid**: Responsable del manejo de la malla, apoyado en la librería 'Dune-FoamGrid'.
- **Fiber (Fast Integration Boundary Element Routine)**: Es un elemento vital dentro de la librería. Encargado de evaluaciones las integrales de elementos de borde en cada elemento, sin importar su conectividad. Además de realizar la integración como tal. Este modulo es independiente del resto por lo que podría ser utilizado de manera particular en otros códigos de BEM.
- **Space**: Responsable del espacio de funciones y sus derivadas. También actúa como administrador de grados de libertad, usando los conocimientos de la conectividad entre elementos y las propiedades de continuidad del espacio de funciones.

¹Software que crea contenedores virtuales para que puedan ejecutarse bajo cualquier máquina, independiente del sistema operativo que tenga.

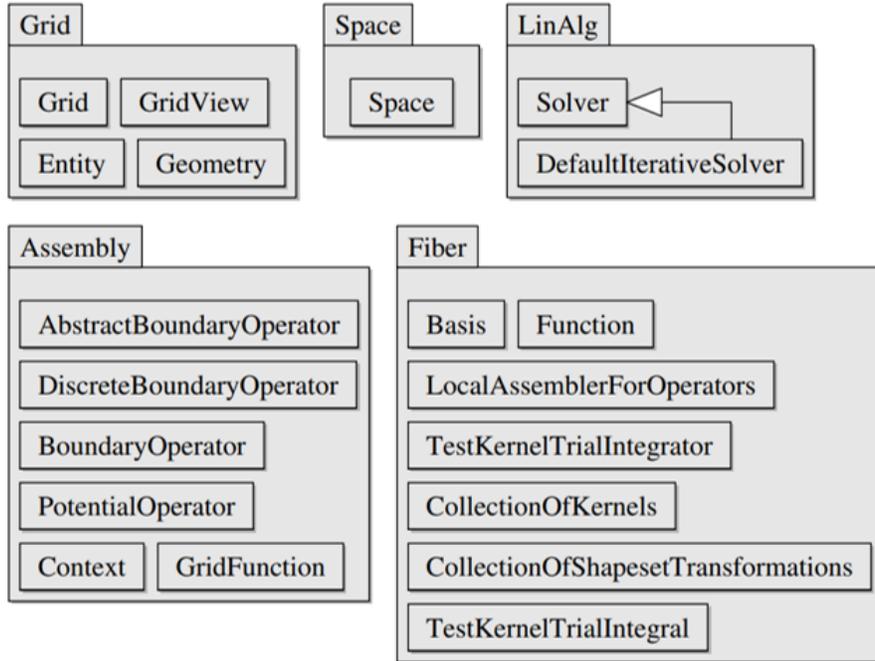


Figura 4.1: Módulos de bempp (Fuente:[14])

- Assembly: Es el módulo más grande de la librería. Define los operadores integrales y los espacios de funciones en la malla. También almacena las matrices de las integrales discretizadas que son formadas en el módulo Fiber.
- LinAlg: Módulo que almacena distintos tipos de *solver's* lineales.

4.2 Algoritmo y explicación.

El algoritmo para la resolución de problemas a través de *bempp* es más bien simple pero es necesario tener los conceptos claros o no se podrá ejecutar de forma correcta. La forma de resolución es la que se muestra en la figura 4.2. Esta resolución calculará los parametros de borde, para resolver los elementos internos simplemente se debe realizar una nueva malla con puntos internos y utilizar el resultado obtenido, tal como se indica en 3.15.

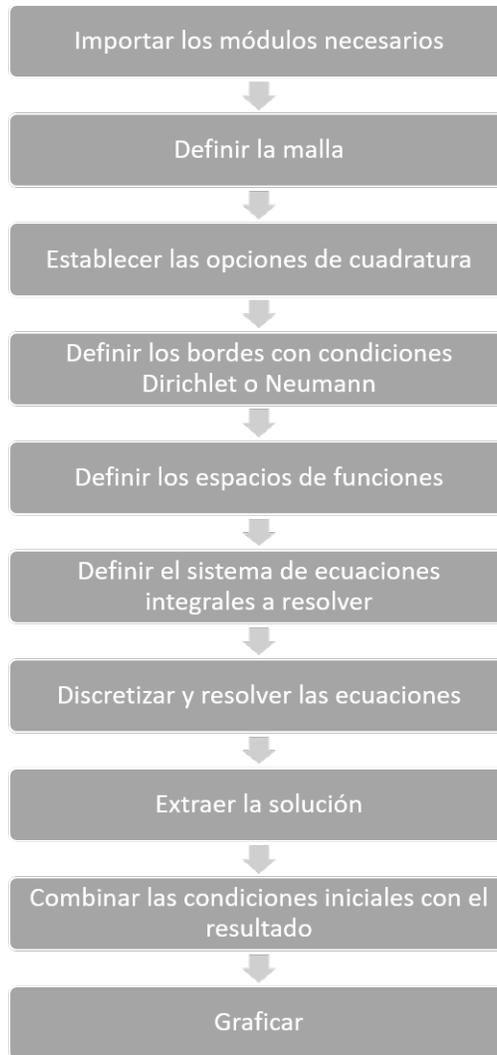


Figura 4.2: Algoritmo resolución *bempp*

Al observar el esquema se hace evidente definir los conceptos y además mostrar como se ejecuta lo descrito en el código:

1. **Importar los módulos necesarios.**

Módulos: También conocidas como bibliotecas o librerías, añaden funciones adicionales a nuestro lenguaje de programación de uso: Python. Para resolver el problema se utilizaron 3: *numpy*, *scipy* (para resolver sistemas lineales) y por supuesto, *bempp*.

2. **Definir la malla.**

Malla - Grid: El mallado en esta plataforma puede realizarse de manera bastante simple, siempre y cuando la figura sea corriente (esferas, cubos, etc...). Estas también pueden ser importadas desde el formato *.msh*.

3. **Establecer las opciones de cuadratura.**

Cuadratura - Quadrature: Como se vio en la sección anterior, es necesario utilizar una cuadratura Gaussiana para resolver las ecuaciones integrales, en este punto se precisa de

cuantos puntos se hará esa cuadratura. Para asimilar esta forma de resolución lo más posible a la anterior, se utilizarán nuevamente 4 puntos.

4. Definir los espacios de funciones.

Conocido como espacio de función o *Function spaces*. Se sabe que los nodos podían ser tomados para medios constantes, lineales o polinomiales, dependiendo del medio en que queramos definir los nodos, los espacios de función deben ser definidos en el orden deseado, en la plataforma *bempp* es importante definir esto correctamente. Como se señala en el algoritmo es necesario haber generado con anterioridad la malla, ya que esto es un input necesario. Los tipos de '*Function spaces*' que interesan son escalares y son utilizados para resolver problemas de Laplace y Helmholtz:

- **Continuos Polynomial "P"**: Se refiere a que el '*espacio*' entre nodos debe tener continuidad, a modo de ejemplo se tiene la figura 4.3 la cual muestra una intersección de elementos lineales continuos. Este espacio no puede utilizarse con elementos constantes ya que todos deberían ser la misma constante lo cual carece de sentido, es por esto que el orden de este espacio va desde 1 (lineal) hasta 10.
- **Discontinuos Polynomial "DP"**: Caso contrario al anterior, en donde la intersección de los elementos no necesariamente debe tener una continuidad, es por esto que cuando se desea tener elementos constantes es necesario utilizar este tipo de espacio. El rango del orden va desde 0 (constante) hasta 10.

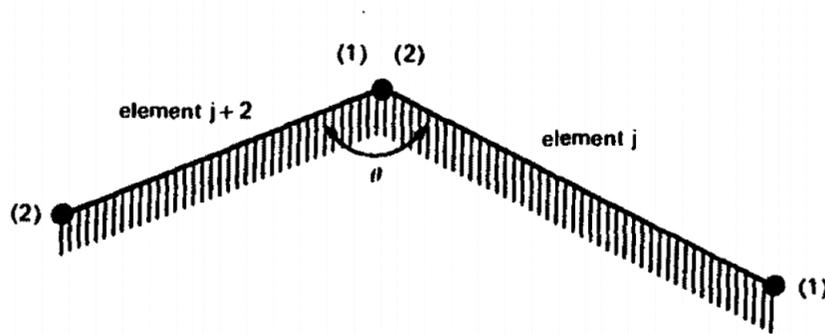


Figura 4.3: Intersección de elementos lineales continuos (Fuente:[5])

5. Definir el sistema de ecuaciones integrales a resolver.

Operadores - Operators: Lo que en la ecuación (3.10) se describen como matrices H y G , en esta plataforma son conocidos como operadores ('Single Layer Operator' y 'Double Layer Operator' respectivamente) y no son los únicos que están disponibles. Se definen de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 V &= \int_{\Gamma} G(x, y) d\Gamma && \text{Single Layer Operator} \\
 K &= \int_{\Gamma} \frac{\delta G(x, y)}{\delta y} d\Gamma && \text{Double Layer Operator} \\
 K' &= \int_{\Gamma} \frac{\delta G(x, y)}{\delta x} d\Gamma && \text{Adjoint Double Layer Operator} \\
 H &= -\frac{\delta}{\delta x} \int_{\Gamma} \frac{\delta G(x, y)}{\delta y} d\Gamma && \text{Hypersingular Boundary Operator}
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Es importante destacar que es necesario precisar el modulo en el que serán ocupados: Laplace, Helmholtz o Helmholtz modificado. Existen otros operadores importantes como el operador de matriz identidad. La función $g(x, y)$ es la función de Green, la cual se ha definido anteriormente como u .

Funciones de malla - Grid function: Se trata de la función dominante, la función potencial en la frontera del elemento de estudio. También se utiliza para definir la condiciones de frontera del problema. En el problema que se analizará en el presente trabajo, las *Grid Function* utilizadas fueron las condiciones de Neumann y Dirichlet indicadas en el problema. Generación y resolución del sistema lineal: Una vez que se tiene definido todo lo anterior se procede a definir el lado izquierdo y derecho de la ecuación del problema, el cual posteriormente será resuelto usando *gmres*.

6. Discretizar y resolver las ecuaciones.

Una vez que ya se calcula el potencial y su derivada en los bordes, se puede calcular el comportamiento en su interior. Para eso se hará una matriz de vectores y se 'anclará' en un punto en el eje z para poder mostrar los resultados en un gráfico 2D al igual que en el algoritmo presentado de Brebbia y Dominguez [5] facilitando así la comparación de resultados.

Capítulo 5

Aproximación cuasiestática de dispersión electromagnética.

5.1 Formulación matemática del problema.

El problema a evaluar corresponde a una onda electromagnética que incide sobre un nanoesfera, el cual será detallado en los capítulo 6 y 7. La longitud de onda de la onda incidente es de un orden de magnitud mayor que las dimensiones del cuerpo de estudio. Esta onda tiene un campo magnético incidente B_i y un campo eléctrico incidente E_i . Se denomina al volumen interno de la esfera como Ω_1 y al volumen externo como Ω_2 tal como se muestra en la siguiente figura:

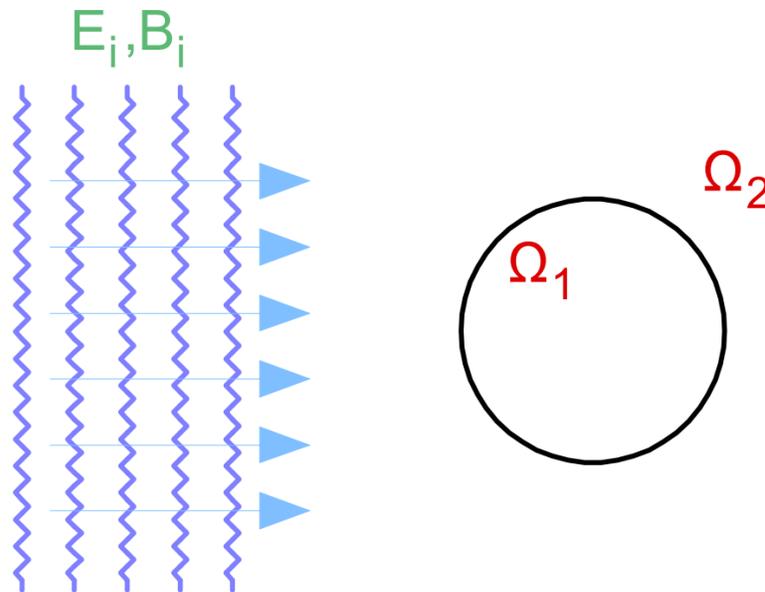


Figura 5.1: Problema de estudio

Las ecuaciones de Maxwell de la situación expuesta en la figura 5.1 son:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{D} = \rho & \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 & \quad \nabla \times \mathbf{H} = J_f + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \end{aligned} \quad (5.1)$$

Como se estudiará el comportamiento del campo eléctrico, se reescribe la ecuación (5.1) en función solo de E y H :

$$\begin{aligned} \varepsilon \nabla \cdot \mathbf{E} = \rho & \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \\ \mu \nabla \cdot \mathbf{H} = 0 & \quad \nabla \times \mathbf{H} = J_f + \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \end{aligned} \quad (5.2)$$

Se puede suponer que una onda incidente en un entorno con propiedades electromagnéticas μ_2 y ε_2 sufrirá de una perturbación si se encuentra con algún objeto con propiedades diferentes, tal como se plantea en el problema analizado.

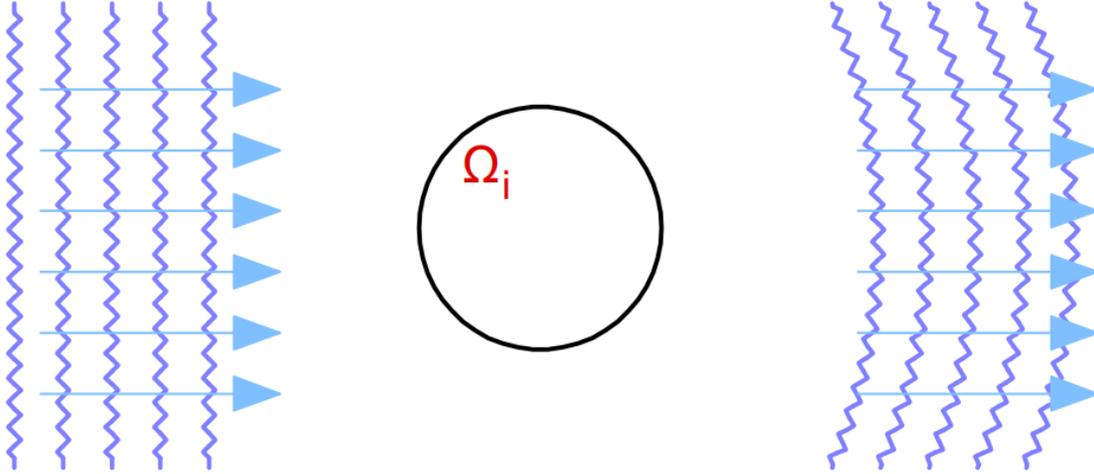


Figura 5.2: Onda incidente perturbada.

Si ahora se aplican las ecuaciones de Maxwell a la situación ilustrada en la figura 5.2, se obtiene:

$$\begin{aligned} \left. \begin{aligned} \varepsilon_1 \nabla \cdot E_1 = \rho_1 & \quad \nabla \times E_1 = -\mu_1 \frac{\partial H_1}{\partial t} \\ \mu_1 \nabla \cdot H_1 = 0 & \quad \nabla \times H_1 = J_{f1} + \varepsilon_1 \frac{\partial E_1}{\partial t} \end{aligned} \right\} \text{En } \Omega_1 \\ \left. \begin{aligned} \varepsilon_2 \nabla \cdot E_2 = \rho_2 & \quad \nabla \times E_2 = -\mu_2 \frac{\partial H_2}{\partial t} \\ \mu_2 \nabla \cdot H_2 = 0 & \quad \nabla \times H_2 = J_{f2} + \varepsilon_2 \frac{\partial E_2}{\partial t} \end{aligned} \right\} \text{En } \Omega_2 \\ \varepsilon_1 E_1 \cdot n = \varepsilon_2 E_2 \cdot n \quad H_1 \cdot n = H_2 \cdot n \quad \text{En la frontera } \Gamma \end{aligned} \quad (5.3)$$

Se debe tener en cuenta que las propiedades de la nanoesfera tendrán un efecto sobre el campo incidente. En caso de que las propiedades del volumen Ω_1 sean iguales a los de Ω_2 , esto es $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$

y $\mu_1 = \mu_2$ ¹. La situación descrita se puede ilustrar como en la imagen 5.3 y se puede representar en las ecuaciones de Maxwell de la forma:

$$\begin{aligned}
 & \left. \begin{aligned} \varepsilon_2 \nabla \cdot E_i = \rho_1 & \quad \nabla \times E_1 = -\mu_2 \frac{\partial H_i}{\partial t} \\ \mu_2 \nabla \cdot H_i = 0 & \quad \nabla \times H_i = J_{f1} + \varepsilon_2 \frac{\partial E_i}{\partial t} \end{aligned} \right\} \text{En } \Omega_1 \\
 & \left. \begin{aligned} \varepsilon_2 \nabla \cdot E_i = \rho_2 & \quad \nabla \times E_i = -\mu_2 \frac{\partial H_i}{\partial t} \\ \nabla \cdot H_i = 0 & \quad \nabla \times H_i = J_{f2} + \varepsilon_2 \frac{\partial E_i}{\partial t} \end{aligned} \right\} \text{En } \Omega_2 \\
 & \left. \begin{aligned} \varepsilon_2 E_i \cdot n = \varepsilon_2 E_i \cdot n & \quad H_i \cdot n = H_i \cdot n \end{aligned} \right\} \text{En la frontera } \Gamma
 \end{aligned} \tag{5.4}$$

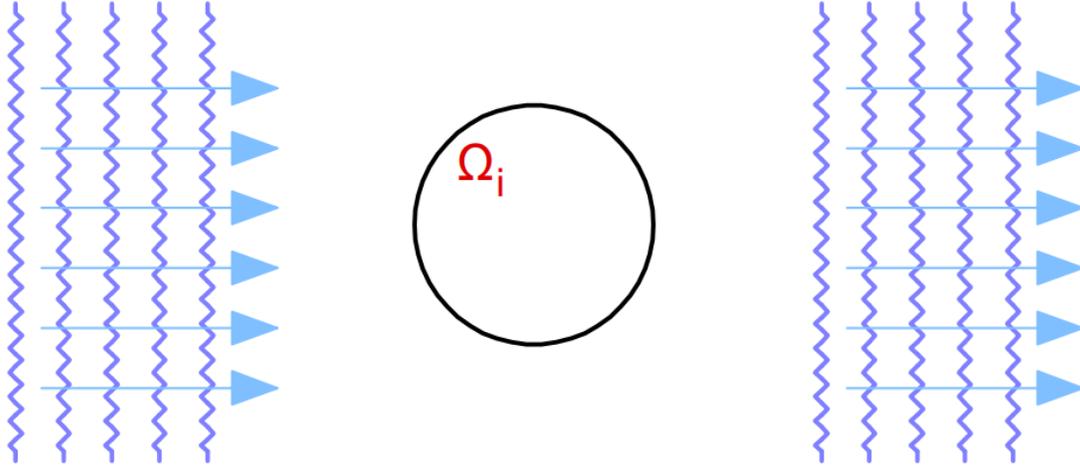


Figura 5.3: Micro-hilo no tiene efecto sobre la onda.

El campo resultante, expuesto en las ecuaciones, se puede descomponer como el campo incidente más el campo dispersado producto del encuentro de la onda con la esfera, por lo tanto E y H pueden ser representados como:

$$\begin{aligned}
 E &= E_i + E_d \\
 H &= H_i + H_d
 \end{aligned} \tag{5.5}$$

Donde E_i es el campo eléctrico incidente y H_i es la intensidad del campo magnético inducido. Es correcto asumir que en nuestro sistema no hay corrientes electricas ni densidad de corriente por lo tanto los terminos de ρ y \vec{J} pueden ser eliminados. Por lo tanto podemos reescribir la ecuación

¹Por conveniencia matemática se deja en términos del campo Ω_2

(5.3) como:

$$\begin{aligned}
& \left. \begin{aligned} \varepsilon_1 \nabla \cdot E_{1d} = 0 & & \nabla \times E_{1d} = -\mu_1 \frac{\partial H_{1d}}{\partial t} \\ \mu_1 \nabla \cdot H_{1d} = 0 & & \nabla \times H_1 = \varepsilon_1 \frac{\partial E_{1d}}{\partial t} + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \frac{\partial E_{1d}}{\partial t} \end{aligned} \right\} \text{En } \Omega_1 \\
& \left. \begin{aligned} \varepsilon_2 \nabla \cdot E_{2d} = 0 & & \nabla \times E_{2d} = -\mu_2 \frac{\partial H_{2d}}{\partial t} \\ \mu_2 \nabla \cdot H_{2d} = 0 & & \nabla \times H_{2d} = +\varepsilon_2 \frac{\partial E_{2d}}{\partial t} \end{aligned} \right\} \text{En } \Omega_2 \\
& (\varepsilon_1 E_{1d} - \varepsilon_2 E_{2d}) \cdot n = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) E_i \cdot n \quad H_{1d} \cdot n = H_{2d} \cdot n \quad \text{En la frontera } \Gamma
\end{aligned} \tag{5.6}$$

Se puede asumir una onda armónica con frecuencia ω para representar el desplazamiento eléctrico y el campo magnético:

$$E(x, t) = E(x) e^{i\omega t}$$

La ecuación (5.6) queda:

$$\begin{aligned}
& \left. \begin{aligned} \nabla \cdot E_{1d} = 0 & & \nabla \times D_{1d} = -\mu_1 i\omega_d H_{1d} \\ \nabla \cdot H_{1d} = 0 & & \nabla \times H_{1d} = J_{f1} + \varepsilon_1 i\omega_d E_{1d} + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) i\omega_i E_i \end{aligned} \right\} \text{En } \Omega_1 \\
& \left. \begin{aligned} \nabla \cdot E_{2d} = 0 & & \nabla \times E_{2d} = -\mu_2 i\omega_d H_{2d} \\ \mu_2 \nabla \cdot H_{2d} = 0 & & \nabla \times H_{2d} = \varepsilon_2 i\omega_d E_{2d} \end{aligned} \right\} \text{En } \Omega_2 \\
& (\varepsilon_1 E_{1d} - \varepsilon_2 E_{2d}) \cdot n = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) E_i \cdot n \quad H_1 \cdot n = H_2 \cdot n \quad \text{En la frontera } \Gamma
\end{aligned} \tag{5.7}$$

Al ser la onda incidente de una longitud de onda muy grande con respecto a la esfera es correcto asumir que $\lambda_i \rightarrow \infty$. Se sabe que por definición $w = v/\lambda$, por lo tanto $w_i \rightarrow 0$. Se pueden escribir las cantidades auxiliares:

$$\begin{aligned}
h_s &= \sqrt{\mu_2} H_s \\
e_s &= \sqrt{\varepsilon_2} E_s \\
x' &= \frac{x}{d_x}
\end{aligned} \tag{5.8}$$

A partir de esto se puede reescribir la ecuación (5.7) utilizando las nuevas cantidades auxiliares:

$$\begin{aligned}
& \left. \begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{e}_{1d} = 0 & & \nabla \times \mathbf{e}_{1d} = \frac{\mu_1}{\mu_2} i\beta \mathbf{h}_{1d} \\ \nabla \cdot \mathbf{h}_{1d} = 0 & & \nabla \times \mathbf{h}_{1d} = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_2} i\beta \mathbf{e}_i + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} i\beta \mathbf{e}_{1d} \end{aligned} \right\} \text{En } \Omega_1 \\
& \left. \begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{e}_{2d} = 0 & & \nabla \times \mathbf{e}_{2d} = -i\beta \mathbf{h}_{2d} \\ \nabla \cdot \mathbf{h}_{2d} = 0 & & \nabla \times \mathbf{h}_{2d} = i\beta \mathbf{e}_{2d} \end{aligned} \right\} \text{En } \Omega_2 \\
& (\varepsilon_1 e_{1d} - \varepsilon_2 e_{2d}) \cdot n = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) e_i \cdot n \quad (h_{1d} - h_{2d}) \cdot n = 0 \quad \text{En } \Gamma
\end{aligned} \tag{5.9}$$

Con $\beta = wd\sqrt{\varepsilon_2\mu_2}$. Se puede expandir e y h , en terminos de β como:

$$\begin{aligned}
e &= e_d^{(0)} + \beta e_d^{(1)} + \beta^2 e_d^{(2)} \dots \\
h &= h_d^{(0)} + \beta h_d^{(1)} + \beta^2 h_d^{(2)} \dots
\end{aligned} \tag{5.10}$$

Y ahora considerando los términos de orden cero de la ecuación (5.9), se reescriben solo los términos del campo eléctrico:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{e}_{1d}^{(0)} &= 0 & \nabla \times \mathbf{e}_{1d}^{(0)} &= 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{e}_{2d}^{(0)} &= 0 & \nabla \times \mathbf{e}_{2d}^{(0)} &= 0 \\ (\varepsilon_1 e_{1d} - \varepsilon_2 e_{2d}) \cdot \mathbf{n} &= (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) e_i \cdot \mathbf{n}\end{aligned}\tag{5.11}$$

Aplicando el operador ∇ a las ecuaciones en Ω se puede concluir que:

- Por la identidad de la divergencia de un rotor:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (\nabla \times E_{1d}^{(0)}) &= 0 \\ \nabla \cdot (\nabla \times E_{2d}^{(0)}) &= 0\end{aligned}$$

Se puede determinar que los campos E_{1d} y E_{2d} son conservativos con base en que el rotor en ambos casos es cero, esto quiere decir que hay una función potencial que puede describir el comportamiento del campo.

- Se denominará como ψ a la función escalar potencial que describirá nuestros campos:

$$\nabla \cdot \varphi = E_d$$

- Nuevamente se aplica el operador ∇ pero esta vez en los gradientes del campo y utilizando la nueva notación con φ , notar que estas ecuaciones se cumplen para el campo en Ω_1 y Ω_2 respectivamente:

$$\begin{aligned}\nabla^2 \cdot \varphi_{1d} &= 0 \\ \nabla^2 \cdot \varphi_{2d} &= 0\end{aligned}$$

- Se reescriben las ecuaciones en el borde Γ y se añade una más:

$$\begin{aligned}\left(\frac{1}{\mu_1} \frac{\partial \varphi_{1d}}{\partial n} - \frac{1}{\mu_2} \frac{\partial \varphi_{2d}}{\partial n} \right) &= \left(\frac{1}{\mu_2} - \frac{1}{\mu_1} \right) \frac{\partial \varphi_i}{\partial n} \\ \varphi_{1d} &= \varphi_{2d} \quad \text{En la frontera } \Gamma\end{aligned}$$

Finalmente, se obtiene una ecuación diferencial con condiciones de borde, justamente lo necesario para resolver este problema utilizando el método de elementos de borde.

$$\boxed{\begin{aligned}\nabla^2 \cdot \varphi_{1d} &= 0, & \nabla^2 \cdot \varphi_{2d} &= 0 & \text{En } \Omega_1, \Omega_2 \\ \left(\varepsilon_1 \frac{\partial \varphi_{1d}}{\partial n} - \varepsilon_2 \frac{\partial \varphi_{2d}}{\partial n} \right) &= (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \frac{\partial \varphi_i}{\partial n} & \varphi_{1d} &= \varphi_{2d} & \text{En la frontera } \Gamma\end{aligned}}\tag{5.12}$$

De acuerdo a lo señalado en la sección 3 la ecuación (5.12) puede representarse por una formulación de elementos de borde como:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2} \varphi_{1d} + K \cdot \varphi_{1d} - V \left(\frac{\partial}{\partial n} \varphi_{1d} \right) &= 0 \\ \frac{1}{2} \varphi_{1d} - K \cdot \varphi_{1d} + V \left(\frac{\partial}{\partial n} \varphi_{2d} \right) &= 0 \\ \text{En la frontera } \Gamma\end{aligned}\tag{5.13}$$

La primera ecuación presente en el conjunto mostrado en (5.13) es del mismo desarrollo que el mostrado en la sección 3. Sin embargo la segunda ecuación tiene los signos invertidos debido a que las normales apuntan en sentido contrario, *ergo*, los signos de los términos en donde las normales tienen incidencia deben tener distinto signo para que ambas tengan la misma convención de signos. Si además a lo anterior se aplican las condiciones de borde de (5.12):

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\varphi_{1d} + K \cdot \varphi_{1d} - V \left(\frac{\partial}{\partial n} \varphi_{1d} \right) &= 0 \\ \frac{1}{2}\varphi_{2d} - K \cdot \varphi_{1d} + \varepsilon_1 V \left(\frac{1}{\varepsilon_2} \frac{\partial}{\partial n} \varphi_{1d} - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \frac{\partial}{\partial n} \varphi_i \right) &= 0 \end{aligned} \quad (5.14)$$

En la frontera Γ

La forma matricial de la ecuación (5.14) es:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2}I + K & -V \\ \frac{1}{2}I - K & \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2}V \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_{1d} \\ \frac{\partial}{\partial n} \varphi_{1d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_2} \frac{\partial \varphi_i}{\partial n} \end{bmatrix} \quad (5.15)$$

Donde I sería la matriz identidad. Cabe mencionar que en [10] se realiza una derivación similar.

Capítulo 6

Desarrollo del problema.

6.1 Creación de mallas.

Como se mencionó en la sección 4 es necesario crear una malla superficial para realizar el estudio, además, esta malla debe estar en el formato utilizado por la librería *bempp*, el cual corresponde a ".*msh*". La creación de la malla se hace realizando los siguientes pasos:

1. Primero, se crea la geometría deseada en el Software *ANSYS* [3]. Se realiza el mallado de la geometría creada y luego exporta el archivo en formato *STL*, utilizando el módulo *FEM*, *Finite Element Modeler*:

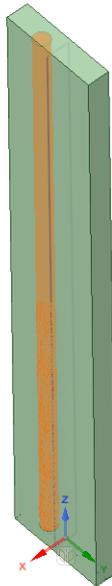


Figura 6.1: Geometrías en ANSYS

2. Luego, el archivo en formato *STL* se abre en el software Meshlab [6], en donde se inspecciona la malla verificando que no hayan elementos o caras duplicadas, que la geometría esté bien ubicada o que los vectores normales estén en la dirección deseada, entre otros. Se exporta un archivo nuevamente en formato *.STL*.

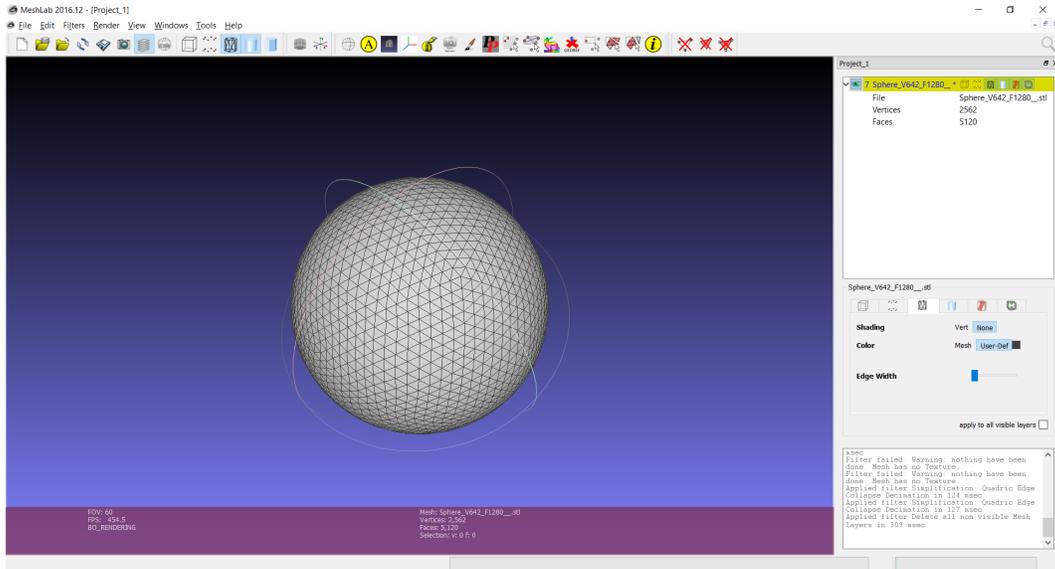


Figura 6.2: Malla en programa Meshlab

3. Por último, este archivo en formato *STL* se abre en el software *Gmsh* [9], el cual permitirá exportar el archivo en el formato *.msh* deseado.

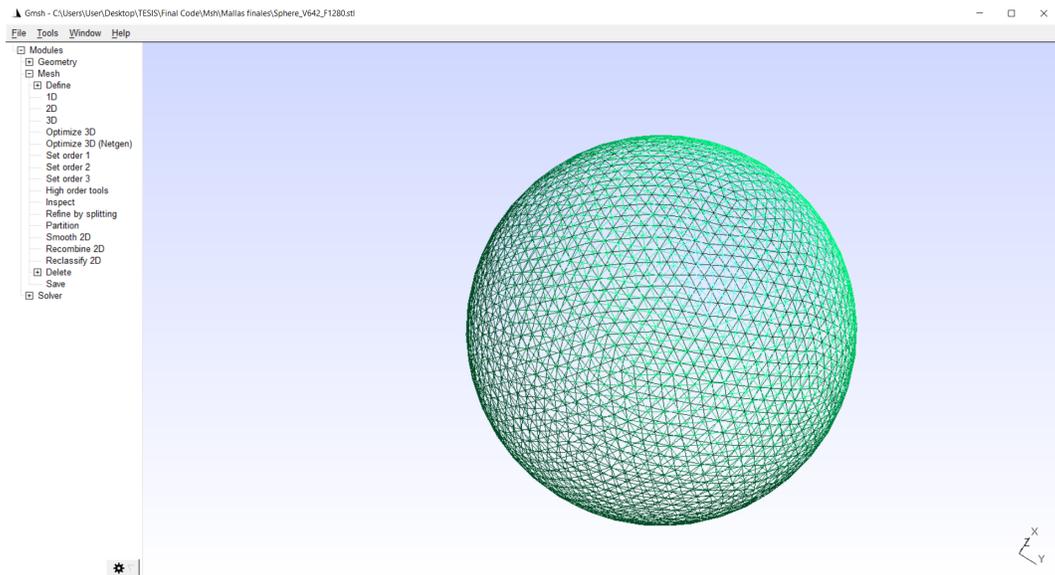


Figura 6.3: Malla en programa Gmsh

6.2 Utilización de la librería bemp.

En esta sección se explicará de manera general algunos de las herramientas utilizadas de la librería *bempp*.

Lo primero que se debe realizar es importar la librería:

```
import bempp.api
```

Se define la malla, la cual es importada y creada como se explica en la subsección 6.1. Se imprime la cantidad de elementos de la malla, lo que nos permitirá saber el tamaño de la matriz que resolveremos. Se grafica la malla utilizando el comando *plot*, el cual grafica en *plotly*, librería de gráficas de python.

```
# Define grid
grid = bempp.api.import_grid("name_file.msh")

# Print out the number of elements
number_of_elements = grid.leaf_view.entity_count(0)
print("The grid has {0} elements.".format(number_of_elements))

# Plot the grid
grid.plot()
```

Previo a crear *single layer operator* y *double layer operator* se debe definir los *function spaces* dominio, recorrido y dual de ambos operadores.

```
# Create function spaces
neumann_space = bempp.api.function_space(grid, "DP", order_neumann)
dirichlet_space = bempp.api.function_space(grid, "DP", order_dirichlet)
#Operators
slp = bempp.api.operators.boundary.laplace.single_layer(NS,DS,DS)
dlp = bempp.api.operators.boundary.laplace.double_layer(DS,DS,DS)
id = bempp.api.operators.boundary.sparse.identity(DS,DS,DS)
```

Se deben generar los operadores que están presentes en el lado izquierdo de la ecuación (5.15), esto es posible a través del comando *blocked*, el cual genera una matriz capaz de almacenar operadores y que como se mencionó, será el lado izquierdo de la ecuación a resolver.

```
#Formation of the left hand side matrix
blocked = bempp.api.BlockedOperator(2, 2)
```

El lado derecho de la ecuación (5.15) se puede representar concatenando una función definida con la proyección de coeficientes *cero* en el espacio definido para esa zona.

```

#Definition of functions
def funcion(x, n, domain_index, result):
    result[:] = ((1 - er) / 1) * (Amp * n[0])

#Functions in the function space
funcion_fun = bempp.api.GridFunction(Function_space, fun=funcion)
funcion_fun = slp * funcion_fun

# The rhs from the zeros
rhs_fem = np.zeros(n)
# The rhs from the function
rhs_bem = funcion_fun.projections(Function_space)
# The combined rhs
rhs = np.concatenate([rhs_fem, rhs_bem])

```

Para resolver el sistema de ecuaciones se utilizará el método iterativo *GMRES*.

```

#Solving the matrix system
soln,info = gmres(blocked, rhs, tol=1e-5,
                  callback = iteration_counter, maxiter = 5000, restart = 5000)

```

Capítulo 7

Resultados y análisis.

7.1 Caso 1: Problema de verificación.

7.1.1 Planteamiento matemático del problema.

Primeramente, validaremos el caso de estudio utilizando como referencia el caso resuelto en [7], el cual consiste en una nanoesfera de 10 [nm] en un campo eléctrico constante, existe una solución analítica que nos permitirá comparar numéricamente los resultados de la *Extinction Cross Section*, además de permitir hacer un análisis de la malla utilizada. La situación descrita se observa en la siguiente figura:

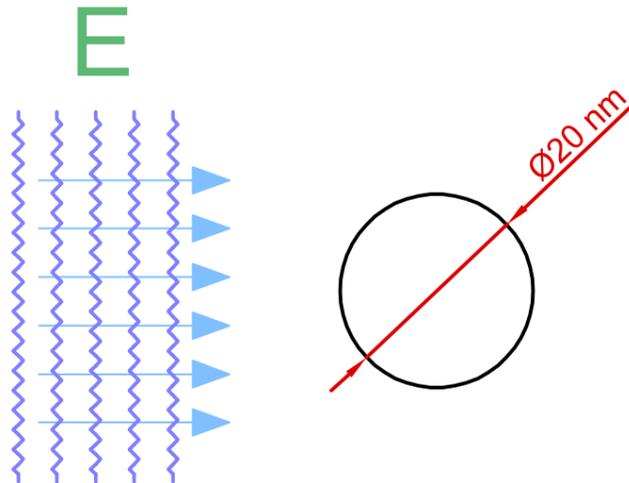


Figura 7.1: Representación esquemática del caso 1.

La forma matricial de la ecuación que representa el problema representado en la figura 7.1 es:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2}I + K & -V \\ \frac{1}{2}I - K & \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}V \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_{1d} \\ \frac{\partial}{\partial n} \varphi_{1d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_2} \frac{\partial \varphi_i}{\partial n} \end{bmatrix} \quad (7.1)$$

Donde I sería la matriz identidad.

7.1.2 Condiciones de diseño del problema.

Los parámetros de campo eléctrico utilizados para este caso se presentan en la siguiente tabla:

Table 7.1: Parámetros de campo eléctrico.

Parámetro	Símbolo	Valor	Unidad
Longitud de onda	λ	380	nm
Intensidad	E	$-0.0037\epsilon/(\text{\AA}^2\epsilon_0)$	V/m

La nanoesfera tiene una materialidad de plata y se encuentra sumergida bajo agua, en las condiciones descritas, ambos materiales poseen las siguientes constantes dieléctricas:

Table 7.2: Constantes dieléctricas para caso de verificación.

Material	Constante dieléctrica [-]
Plata	$-3.3877 + 0.1922i$
Agua	$1.7972 + 8.5048^{-09}i$

El problema modelado tiene una solución analítica, que nos permitirá comparar con cálculos numéricos el parámetro 'Extinction Cross-Section' (C_{ext}) obtenido con *bempp*, con el fin de verificar el código y estudiar la convergencia de la malla. Concretamente, compararemos lo siguiente:

1. Fórmula de Mischenko [12] Forma analítica del cálculo del parámetro C_{ext}

$$C_{ext} = \frac{4\pi a^3}{k} \text{Im} \left[k^2 \frac{\epsilon_{in}/\epsilon_{out} - 1}{\epsilon_{in}/\epsilon_{out} + 2} \right] \quad (7.2)$$

2. Cálculo con *bempp*: Resultado obtenido a través de la resolución del sistema de ecuaciones presentado en 5.15. Primero se debe calcular el momento dipolar de cada elemento:

$$p_i = \epsilon_2 \sum_{i=0}^n \left[r_i \frac{\partial}{\partial n_j} \phi_{2s} d\Gamma - n_i \phi d\Gamma \right] \quad (7.3)$$

La fórmula de C_{ext} es:

$$C_{ext} = \frac{4\pi}{k} \text{Im} \left[\frac{\hat{e}_i}{|E_i|} F(k = k_0, k_0) \right] \quad (7.4)$$

A la cual se puede llegar gracias a las siguientes relaciones:

$$E_i = \frac{1}{4\pi\epsilon_2} k^2 \frac{e^{ikr}}{r} (\hat{r} \times p) \times \hat{r}$$

$$E_i(r)_{r \rightarrow \infty} = \frac{e^{ikr}}{r} F(k, k_0)$$

En el caso estudiado se tiene que $C_{ext} = 3622[nm^2]$. Las mallas utilizadas en este caso tienen 80, 320, 1280 y 5,120 elementos.

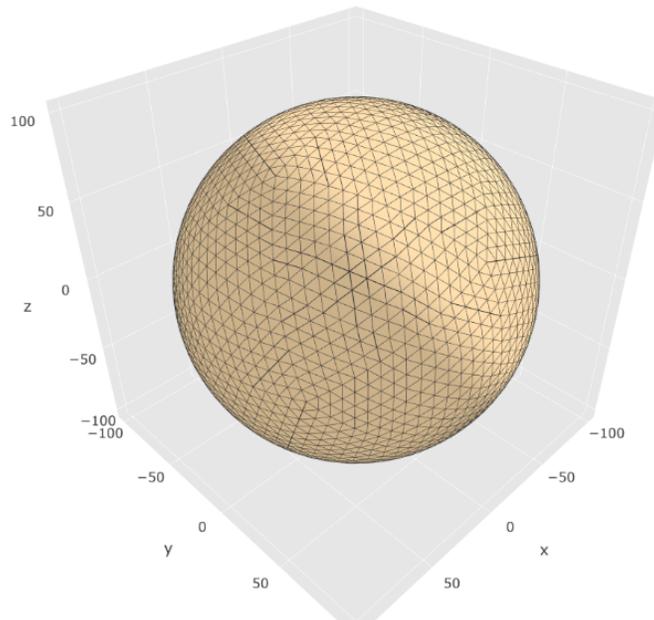


Figura 7.2: Malla de 5,120 elementos, utilizada en Caso 1.

7.1.3 Resultados

Convergencia de malla.

La convergencia de la malla se obtiene a través de una comparación del parámetro 'Extinction Cross Section'. Se utilizaron mallas de 80, 320, 1280, 5,120 y 7,968 elementos:

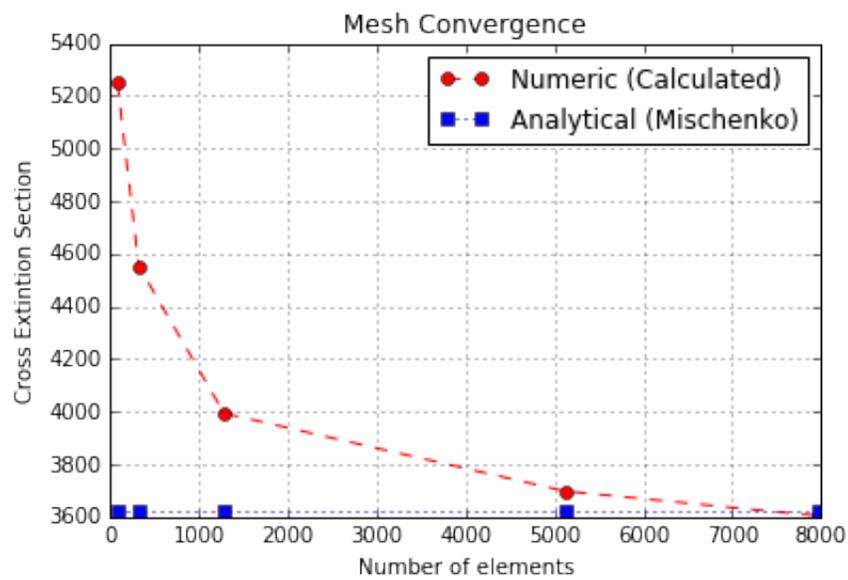


Figura 7.3: Convergencia de malla. Caso de verificación

En la figura se observa como la solución analítica calculada con *bempp* converge y tiende a

acercarse a la solución analítica de Mischenko. Además, se verificará que el error relativo sea bajo.

Error relativo.

El error relativo, se calcula de la siguiente manera:

$$Error_{rel} = \frac{Valor_{real} - Valor_{aproximado}}{Valor_{real}} \tag{7.5}$$

Los resultados obtenidos se presentan en la siguiente tabla:

Table 7.3: Error relativo.

Número de elementos	Error relativo
80	44.96%
320	25.72%
1,280	10.27%
5,120	2.09%
7,968	0.5%

Además, según el siguiente gráfico podemos observar como el valor del error disminuye cuando se aumenta la cantidad de elementos como es de esperarse:

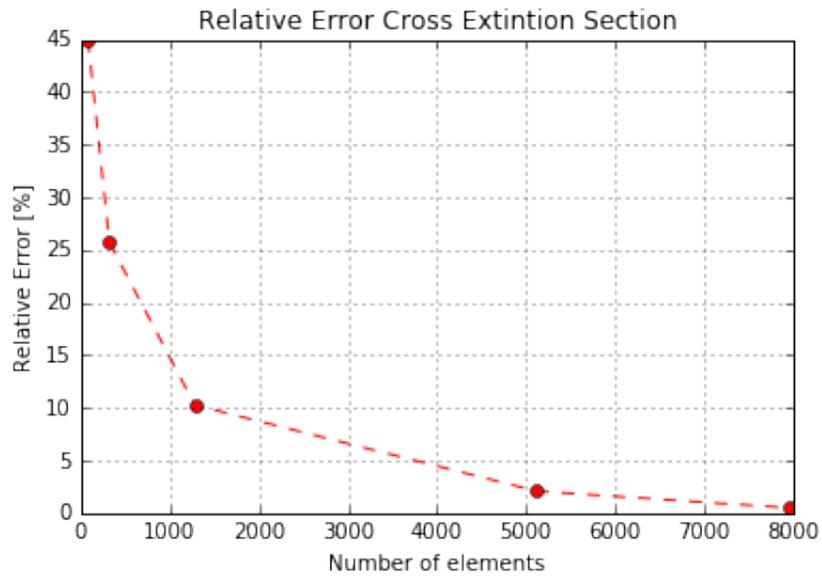


Figura 7.4: Error relativo de la 'Extinction Cross Section'. Caso de verificación

Además, se muestra la siguiente figura con el error relativo en escala logarítmica:

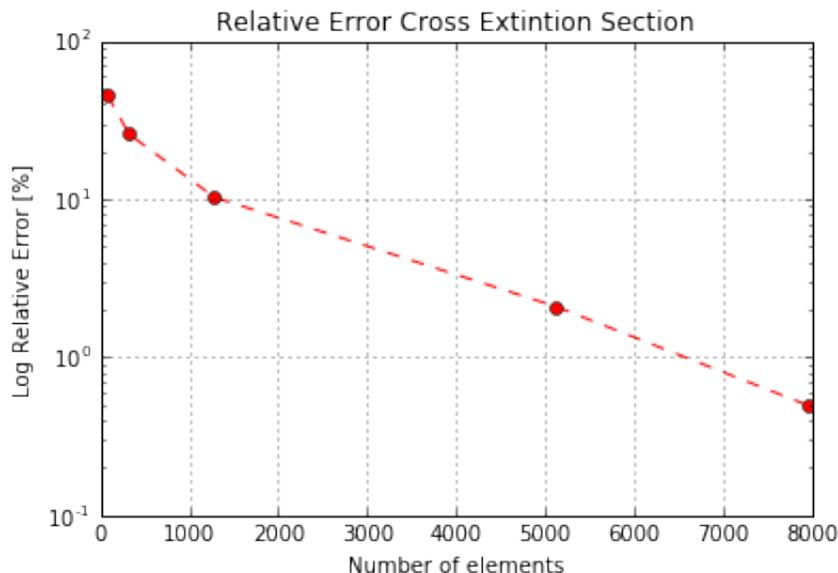


Figura 7.5: Error relativo de la 'Extinction Cross Section' en escala logarítmica. Caso de verificación

De lo observado en esta sección es correcto concluir que el problema de verificación converge a su solución analítica tal como se observa en la figura 7.3. Adicionalmente se analiza el error relativo, con el cual los resultados quedan validados debido al bajo error relativo obtenido (0.5%, en su caso más bajo).

De lo anteriormente señalado, se puede concluir que el planteamiento del problema es correcto y además permite realizar otros análisis con distintas configuraciones de geometría (en lugar de una esfera pueden ser cilindros, emulando microhilo) o de cantidad de objetos (podría simularse más de un objeto receptor de ondas EM).

Potencial eléctrico en antena.

El siguiente estudio consiste en verificar la variabilidad del potencial eléctrico medido en 3 antenas ubicadas en distintas posiciones, variando el número de elementos. Las antenas son 3 y están ubicadas en el eje x a 1 [mm], 5[mm] y 10 [mm] del origen. Los resultados se presentan en la siguiente tabla:

Table 7.4: Potencial eléctrico calculado en antenas.

n	Potencial eléctrico en antena [V]		
	Antena 1	Antena 2	Antena 3
80	(3.311e-05+1.404e-06j)	(6.674e-06+2.830e-07j)	(3.341e-06+1.417e-07j)
320	(3.392e-05+1.376e-06j)	(6.836e-06+2.773e-07j)	(3.421e-06+1.388e-07j)
1,280	(3.398e-05+1.365e-06j)	(6.846e-06+2.749e-07j)	(3.426e-06+1.376e-07j)
5,120	(3.484e-05+1.396e-06j)	(7.0183e-06+2.812e-07j)	(3.512e-06+1.407e-07j)
7,968	(3.418e-05+1.369e-06j)	(6.89e-06+2.76e-07j)	(3.44e-06+1.38e-07j)

Gráficamente se separa la parte real de la imaginaria y se observa de la siguiente manera:

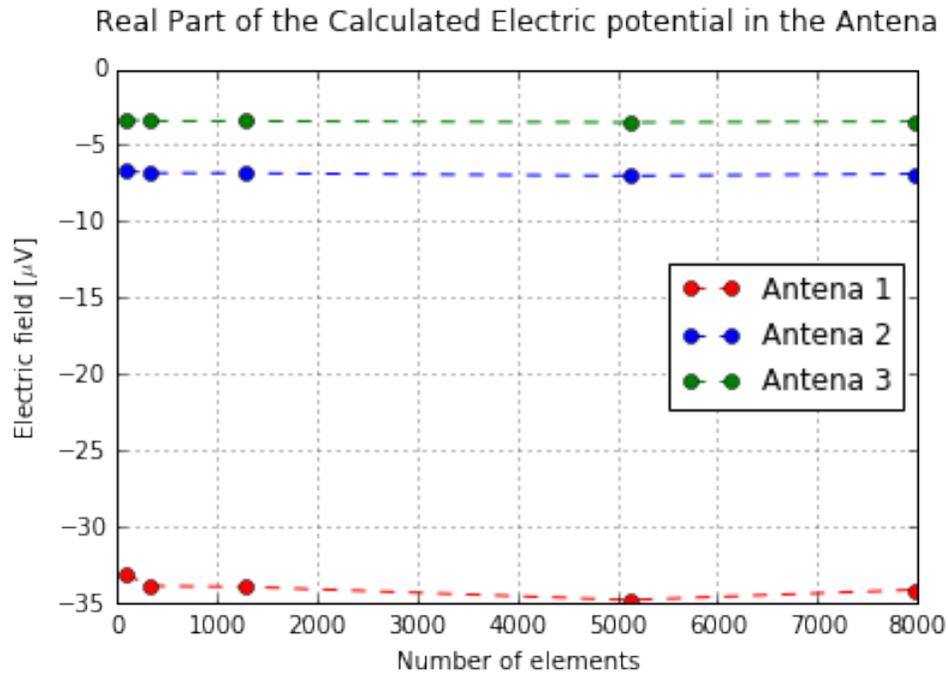


Figura 7.6: Parte real de potencial eléctrico medido en antena. Caso de verificación

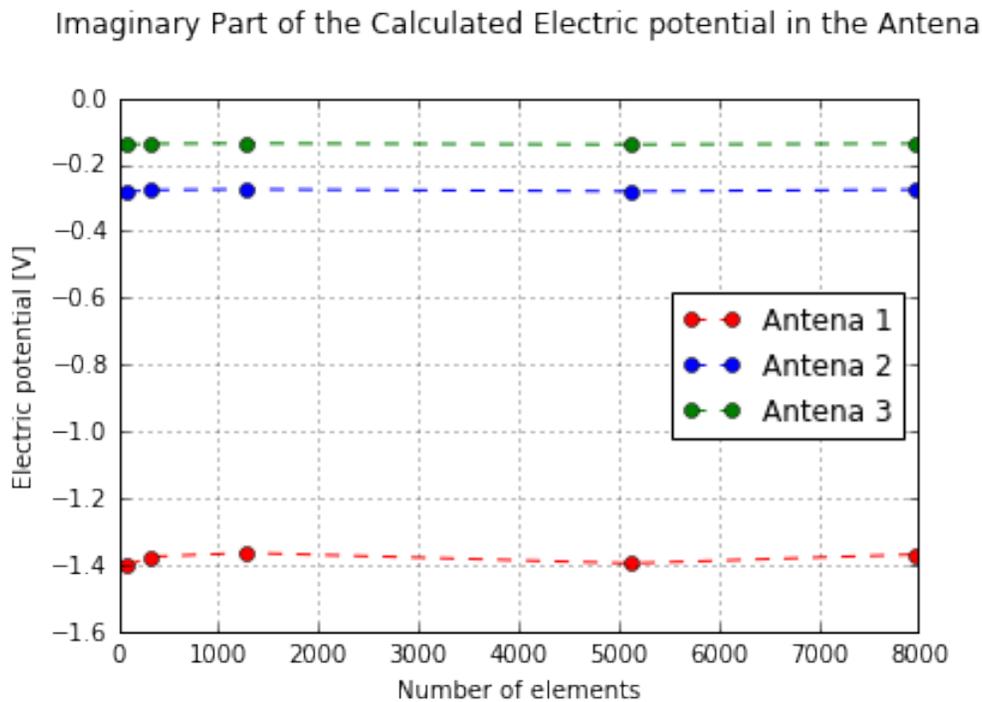


Figura 7.7: Parte imaginaria de campo eléctrico medido en antena. Caso de verificación

Posteriormente, se grafican las variaciones de las mediciones en las antenas, también separando parte imaginaria y real:

Relative Variation of the real part of the Electric potential in the Antena

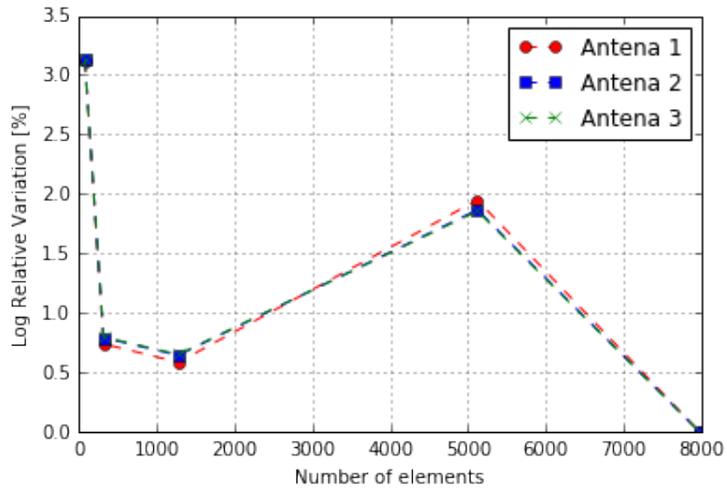


Figura 7.8: Variación de la parte real de campo eléctrico medido en antena. Caso de verificación

Relative Variation of the imaginary part of the Electric potential in the Antena

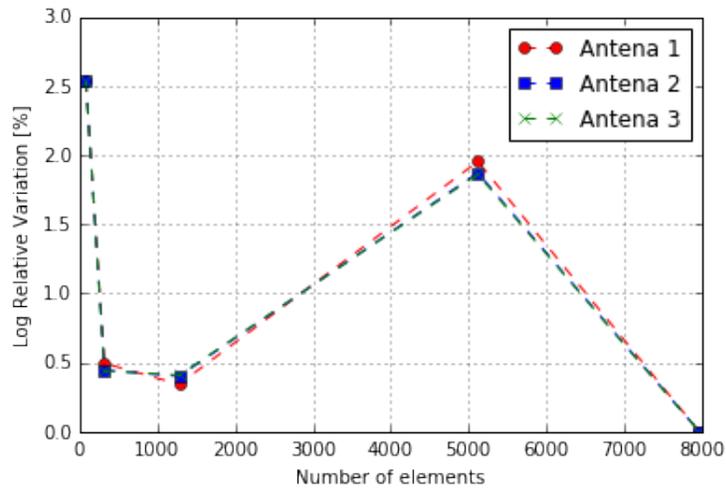


Figura 7.9: Variación de la parte imaginaria de campo eléctrico medido en antena. Caso de verificación

De los gráficos obtenidos se puede verificar que la variabilidad obtenida, tanto para la parte real como para la parte imaginaria del potencial eléctrico, es bastante baja y no supera un 3.1% para la parte real y un 2.5% para la parte imaginaria.

Lo anterior, permite indicar que los análisis se pueden realizar con mallas con una cantidad de elementos no tan elevada y aún así obtener un buen resultado, sin la necesidad de recargar la capacidad computacional disponible.

7.2 Caso 2: microhilo inserto en una matriz.

7.2.1 Planteamiento matemático del problema.

El segundo caso simulado se trata de un microhilo inserto en una matriz polimérica con propiedades electromagnéticas distintas.

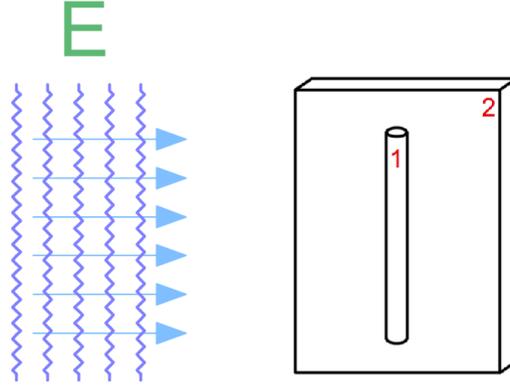


Figura 7.10: Representación esquemática del caso 2.

En este experimento, se mide la intensidad del campo eléctrico en una antena ubicada en una posición determinada. Se evaluará como cambia la medición del potencial eléctrico en la antena disminuyendo y aumentando un 10% la permitividad eléctrica del microhilo. De acuerdo a lo señalado en [2] la formulación matricial del problema con dos superficies es como se describe en 7.6:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2}I + K_{1-1} & -V_{1-1} & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}I - K_{1-1} & \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2}V_{1-1} & K_{1-2} & -V_{1-2} \\ -K_{2-1} & \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2}V_{2-1} & \frac{1}{2}I + K_{2-2} & -V_{2-2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2}I - K_{2-2} & \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_3}V_{2-2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_{1d} \\ \frac{\partial}{\partial n}\varphi_{1d} \\ \varphi_{2d} \\ \frac{\partial}{\partial n}\varphi_{2d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_1} \frac{\partial \varphi_{i1}}{\partial n} + \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_3}{\varepsilon_1} \frac{\partial \varphi_{i2}}{\partial n} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (7.6)$$

7.2.2 Condiciones de diseño del problema.

En el segundo caso se utilizarán un microhilo de 5 [nm] de radio y 3 [mm] de largo y una matriz de 0.5 x 3.1 x 1 mm. Las propiedades utilizadas son las indicadas en [11]. Las propiedades eléctricas de los microhilos son detallados en la siguiente tabla:

Table 7.5: Permitividades eléctricas utilizadas.

Geometría	Permitividad	Unidad
Microhilo	$(82629.2677 - 200138.2211i) \cdot \varepsilon_0$	F/m
Matriz polimérica	$16 \cdot \varepsilon_0$	F/m

A continuación, se presentan las mallas utilizadas para el cálculo:

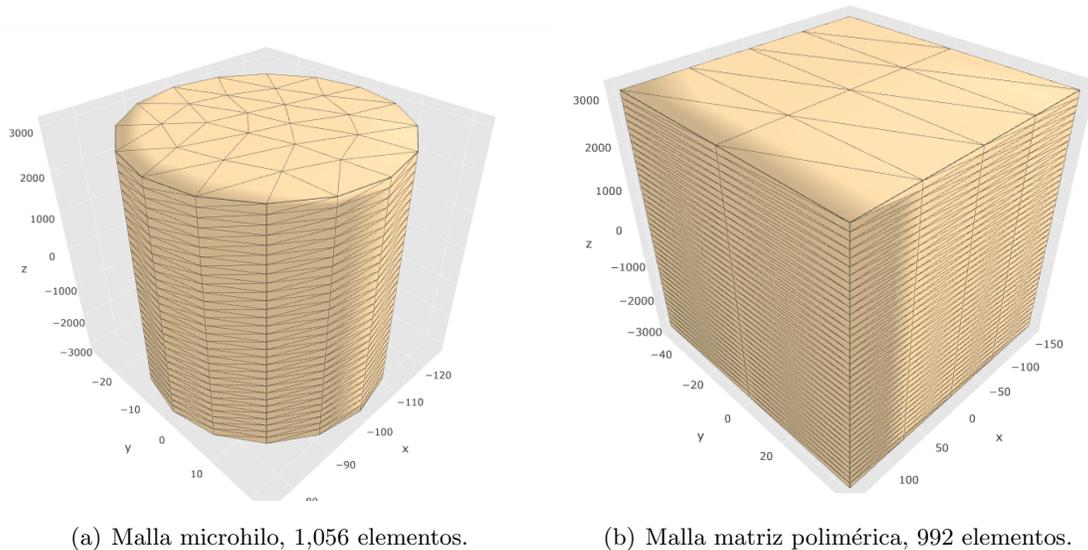


Figura 7.11: Mallas utilizadas en caso 2.

7.2.3 Resultados.

A continuación, se presentan los resultados para el caso explicado en 7.2. Las mallas utilizadas para el desarrollo del cálculo tienen 1,056 elementos en el hilo y 992 elementos en la matriz. Al igual que en la sección anterior, se separará el campo en parte real y parte imaginaria:

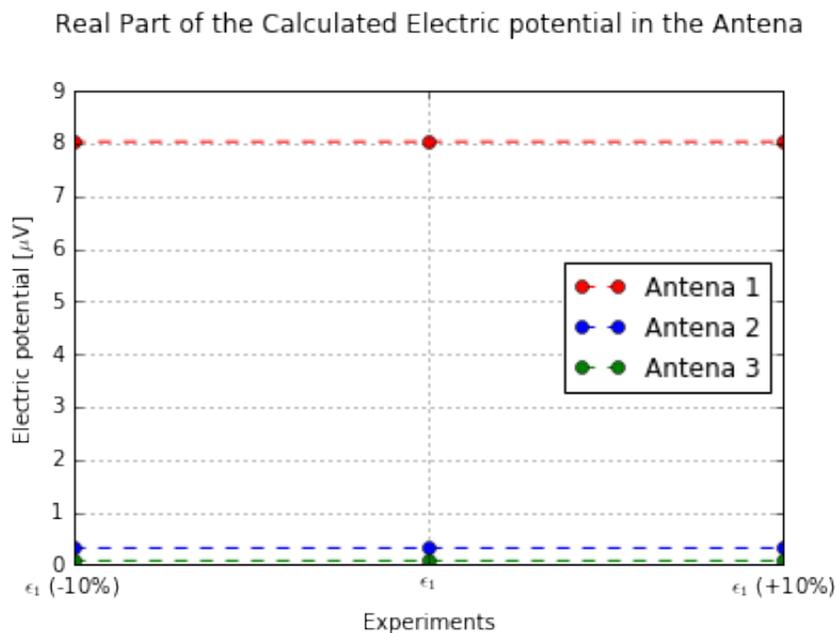


Figura 7.12: Parte real del potencial eléctrico medido en las antenas modificando la permitividad eléctrica del microhilo.

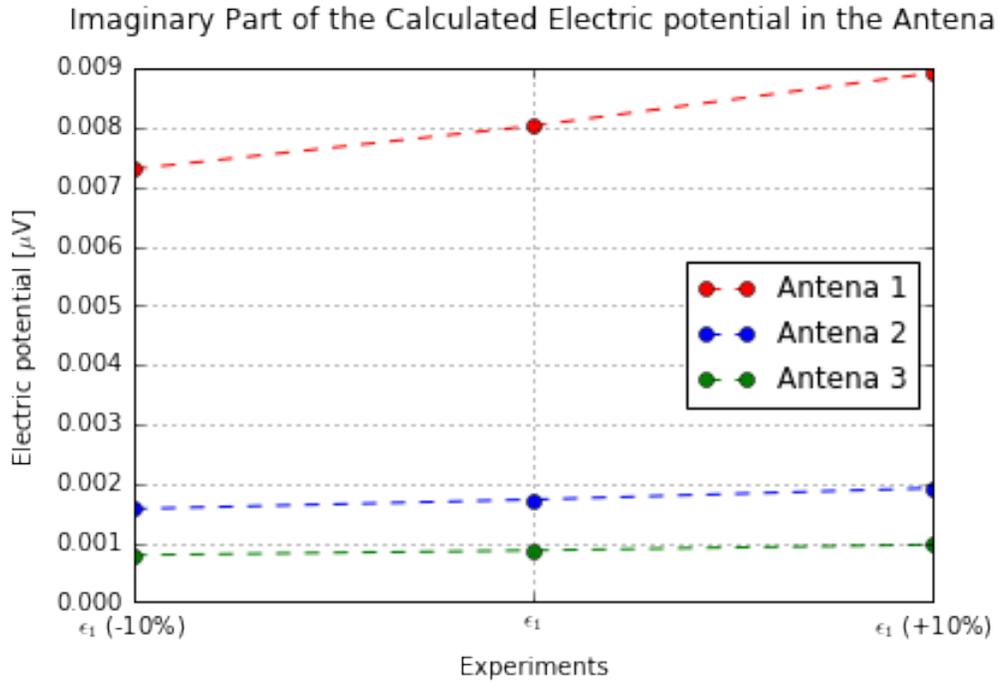


Figura 7.13: Parte imaginaria del potencial eléctrico medido en las antenas modificando la permitividad eléctrica del microhilo.

Se observa a simple vista que en la parte real del potencial eléctrico medido no existen grandes cambios. Por otro lado, en la parte imaginaria si se observa un cambio notorio. La variación observada en ambos casos se muestra en los siguientes gráficos:

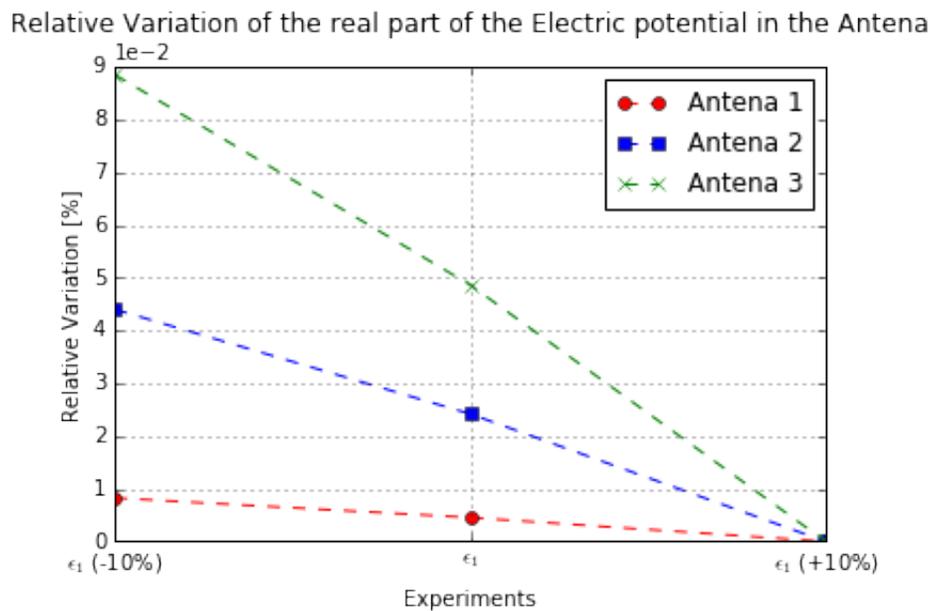


Figura 7.14: Variación de la parte real del potencial eléctrico medido en las antenas modificando la permitividad eléctrica del microhilo.

Relative Variation of the real part of the Electric potential in the Antena

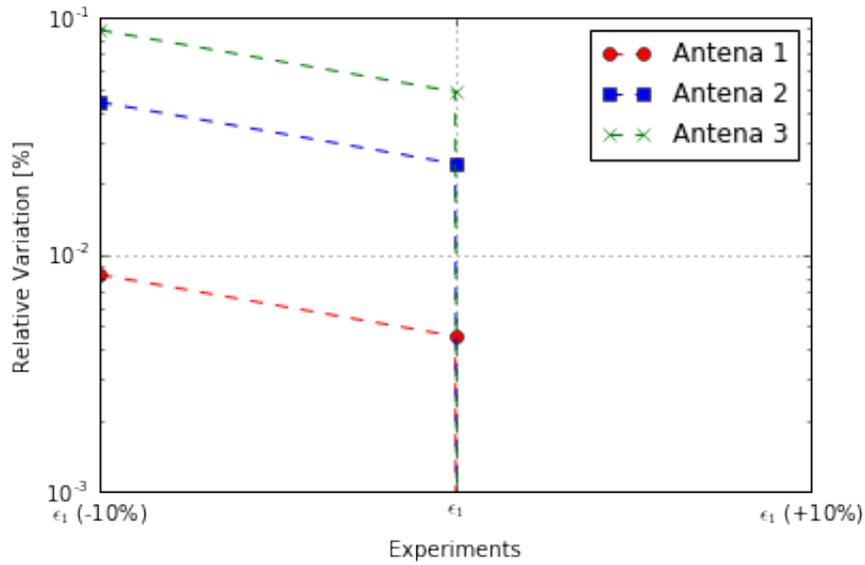


Figura 7.15: Variación de la parte real del potencial eléctrico medido en las antenas modificando la permitividad eléctrica del microhilo.

Relative Variation of the imaginary part of the Electric potential in the Antena

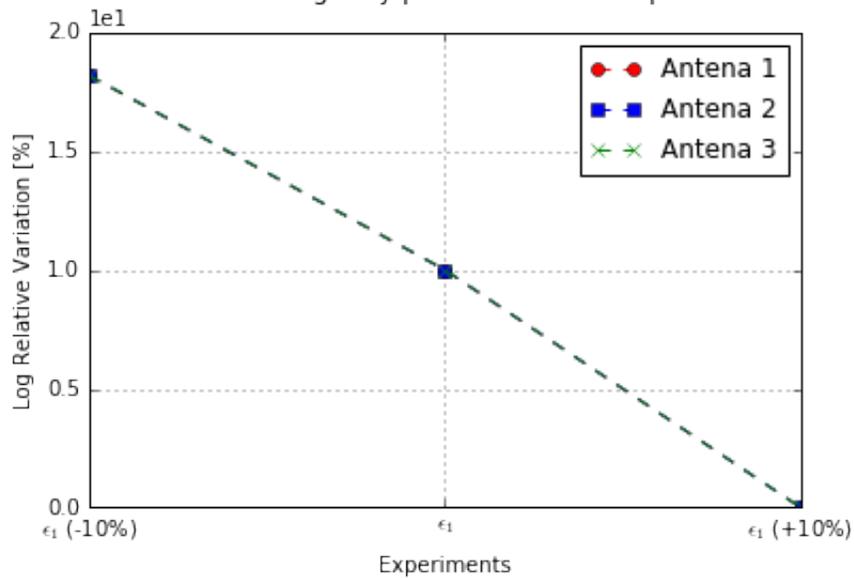


Figura 7.16: Variación de la parte imaginaria del potencial eléctrico medido en las antenas modificando la permitividad eléctrica del microhilo.

Relative Variation of the imaginary part of the Electric potential in the Antena

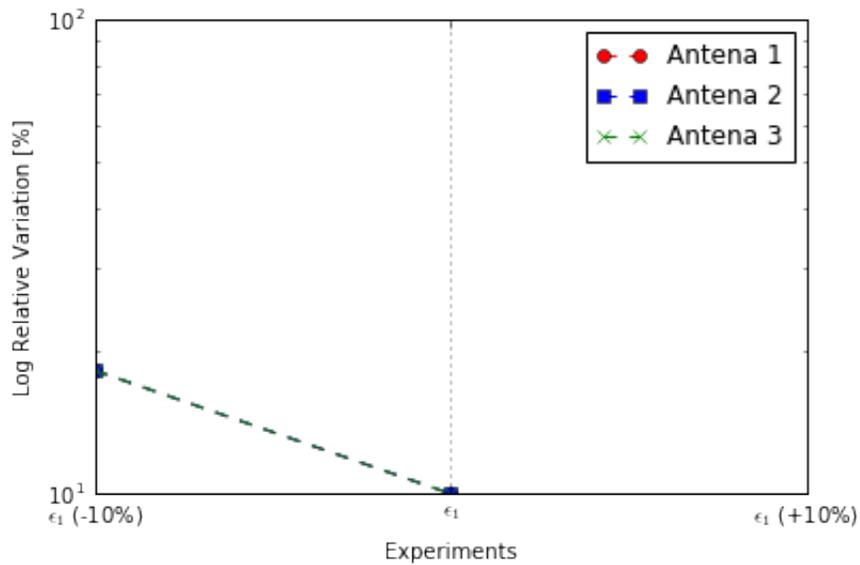


Figura 7.17: Variación de la parte imaginaria del potencial eléctrico medido en las antenas modificando la permitividad eléctrica del microhilo.

De lo obtenido se puede decir que la variabilidad de la parte real del potencial eléctrico es muy baja (del orden de 0.09%) por lo que se podría decir que no es un parámetro muy sensible a las variaciones de las propiedades mecánicas del material. Por otro lado, hay una variación importante de la parte imaginaria del potencial eléctrico en las antenas (de entre 10% a 15%).

De lo anterior se puede concluir que la parte imaginaria del campo eléctrico medido es un parámetro sensible a las variaciones mecánicas del material de los microhilos, por lo tanto podría servir como un parámetro de medición en aplicaciones prácticas con este material.

7.3 Caso 3: 2 microhilos insertos en una matriz.

7.3.1 Planteamiento matemático del problema.

El último caso evaluado serán 2 microhilos insertos en la matriz, se verá como afecta la interacción de ambos en la intensidad medida en la antena.

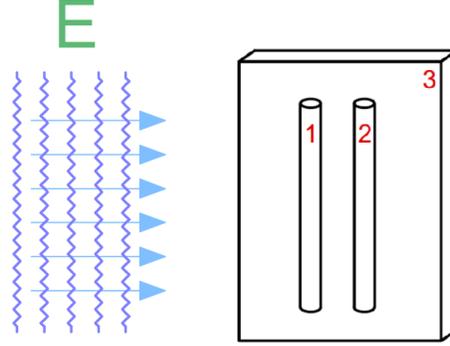


Figura 7.18: Representación esquemática del caso 3.

La formulación matricial de la situación que se observa en la figura 7.18 es:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2}I + K_{1-1} & -V_{1-1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}I - K_{1-1} & \frac{\varepsilon_4}{\varepsilon_3}V_{1-1} & K_{1-2} & -V_{1-2} & 0 & 0 \\ -K_{2-1} & \frac{\varepsilon_4}{\varepsilon_3}V_{2-1} & \frac{1}{2}I + K_{2-2} & -V_{2-2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2}I - K_{2-2} & \frac{\varepsilon_3}{\varepsilon_2}V_{2-2} & K_{2-3} & -V_{2-3} \\ 0 & 0 & -K_{3-2} & \frac{\varepsilon_3}{\varepsilon_2}V_{3-2} & \frac{1}{2}I + K_{3-3} & -V_{3-3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}I - K_{2-2} & \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}V_{3-3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_{1d} \\ \frac{\partial}{\partial n}\varphi_{1d} \\ \varphi_{2d} \\ \frac{\partial}{\partial n}\varphi_{2d} \\ \varphi_{3d} \\ \frac{\partial}{\partial n}\varphi_{3d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_3} \frac{\partial \varphi_{i1}}{\partial n} + \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_3}{\varepsilon_3} \frac{\partial \varphi_{i2}}{\partial n} \\ \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_3} \frac{\partial \varphi_{i1}}{\partial n} + \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_3}{\varepsilon_3} \frac{\partial \varphi_{i2}}{\partial n} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (7.7)$$

7.3.2 Condiciones de diseño del problema.

En este caso se utilizarán las mismas geometrías y propiedades que se utilizaron para el caso 2, ambos cilindros son idénticos. El conjunto de mallas (ambos cilindros y la matriz) se puede ver de la siguiente manera:

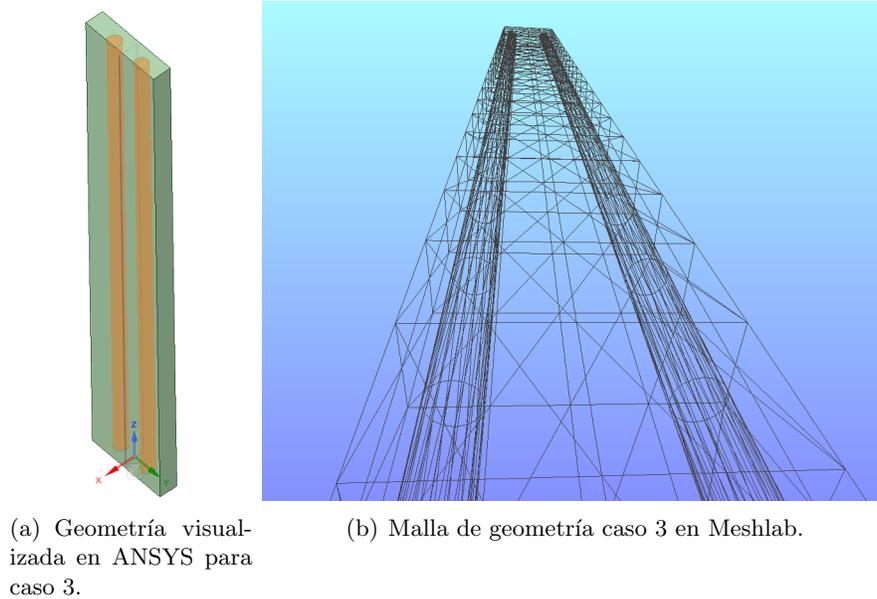


Figura 7.19: Geometría y malla utilizada en caso 3.

7.3.3 Resultados.

A continuación, se presentan los resultados para el último caso, el cual corresponde a 2 microhilos insertos en una matriz polimérica. Las mallas utilizadas para el desarrollo del cálculo tienen 1,056 elementos en ambos hilos y 992 elementos en la matriz y las propiedades electromagnéticas fueron las mismas utilizadas en el caso anterior.

En este experimento en particular solo se midió el potencial eléctrico en las antenas:

Table 7.6: Medición de potencial eléctrico en antenas, Caso 3.

Medidor	Potencial eléctrico [μV]
Antena 1	$0.76989615+0.13639286i$
Antena 2	$0.15407255+0.02729511i$
Antena 3	$0.07704211+0.01364859i$

El resultado obtenido nos permite observar como cambia la medición en las antenas al agregar microhilos a la matriz. De este punto es correcto afirmar que la medición baja aproximadamente 1 orden de magnitud en todos los casos.

Es también necesario resaltar que al haber más geometrías, la matriz de resolución es mucho más grande. En el caso de 1 microhilo inserto en el polimero la matriz es de $4,096 \times 4,096$, mientras que en este caso la matriz a resolver tiene un tamaño de $6,208 \times 6,208$, por lo que se debe ser cuidadoso con la capacidad computacional disponible.

No obstante lo anterior, se debe recordar que si el objetivo es la medición de potenciales eléctricos, este trabajo ha demostrado que el resultado obtenido puede ser calculado con mallas con un número bajo de elementos sin afectar el resultado final. Por lo que, se propone para un trabajo futuro evaluar configuraciones con mayor cantidad de geometrías (en este caso en particular, insertar una mayor cantidad de microhilos en la matriz polimérica) y verificar el comportamiento de la medición obtenida.

Capítulo 8

Conclusiones.

Las conclusiones obtenidas del trabajo realizado se detallan a continuación. Para el caso de verificación es posible decir que del gráfico 7.3 se observa que entre más elementos tiene la malla de estudio, el resultado del cálculo de la *Extinction Cross Section* tiende a converger y acercarse al valor de acuerdo a la formula de Mischenko. Al comparar el resultado de la *Extinction Cross Section* de acuerdo a la formula de Mischenko y lo obtenido del cálculo con *bempp*, se obtiene un error relativo de 0.5% con una malla de 7,968 elementos. Este error podría disminuir al aumentar los elementos de la malla, sin embargo, las capacidades computacionales a las que se tienen acceso no lo permiten, no obstante el error relativo obtenido permite concluir que el caso de verificación cumple el objetivo de validar la modelación y formulación del problema.

Por otro lado, de acuerdo a lo obtenido en la medición del potencial eléctrico en las antenas ubicadas en el modelo, se puede decir con una inspección visual preliminar de los gráficos 7.6 y 7.7 que existe poca variabilidad en la medición, tanto de la parte real como de la parte imaginaria. De acuerdo a los gráficos 7.8 y 7.9 se obtiene una variación menor al 3% en la parte real del potencial eléctrico y menor al 2.5% en la parte imaginaria.

Se puede concluir que el caso estudiado verifica la hipótesis postulada en el presente trabajo, la cual consistía en que dadas las condiciones cuasiestáticas del problema planteado es correcto reducir las ecuaciones de Maxwell que rigen las situaciones presentadas, pudiendo simular el comportamiento del campo magnético dispersado dentro de los cuerpos resolviendolos a través de BEM utilizando Laplace como función de Green, en lugar de Helmholtz, lo que haría que la resolución sea más simple y rápida.

De la medición del potencial eléctrico en las antenas se observa una baja variabilidad respecto de los elementos de la malla de estudio, por lo que no se justificaría refinar aún más la malla, exigiendo las capacidades computacionales del equipo por un resultado que no debería variar en demasía en la medición del potencial en antenas.

Para el caso de 2 superficies, al igual que en el caso anterior, se observa en los gráficos que la variación de la permitividad eléctrica en los microhilos no produce una gran variación en la medición del potencial en las antenas. Se obtiene una variación máxima de 0.09% en la parte real de la antena más alejada. Las 3 antenas tienen una variación distinta. La variación de la parte imaginaria del potencial eléctrico en las 3 antenas se comporta de la misma manera. La variación con una permitividad eléctrica (+10%) respecto del caso con -10% de la permitividad es de 18.2%.

Finalmente, para el caso de 3 superficies, si bien es posible resolver el caso, con las condiciones computacionales a las que se tiene acceso no es posible refinar mucho más la malla utilizada.

Referencias

- [1] Campos vectoriales. http://www.mate.unlp.edu.ar/practicas/114_8_16062015111652.pdf, 2014.
- [2] Michael D. Altman, Jaydeep P. Bardhan, Jacob K. White, and Bruce Tidor. Accurate solution of multi-region continuum biomolecule electrostatic problems using the linearized poisson-boltzmann equation with curved boundary elements. *Journal of Computational Chemistry*, 30(1):132–153, 2009.
- [3] Ansys, Inc. "ansys academic mechanical". <https://www.ansys.com/products/structures/ansys-mechanical-enterprise>.
- [4] Artículo Wikipedia. Campo vectorial. https://es.wikipedia.org/wiki/Campo_vectorial, 2018.
- [5] C.A. Brebbia and J. Dominguez. *Boundary Elements: An Introductory Course*. Sydney Grammar School Press, 1994.
- [6] Paolo Cignoni, Marco Callieri, Massimiliano Corsini, Matteo Dellepiane, Fabio Ganovelli, and Guido Ranzuglia. MeshLab: an Open-Source Mesh Processing Tool. In Vittorio Scarano, Rosario De Chiara, and Ugo Erra, editors, *Eurographics Italian Chapter Conference*. The Eurographics Association, 2008.
- [7] Natalia C Clementi, Christopher D Cooper, and Lorena A Barba. Computational nanoplasmonics for biosensing applications using pygbe-lspr. *arXiv preprint arXiv:1812.10722*, 2018.
- [8] Margaret Fedele, Francesco & Eppstein, Jeffrey P. Laible, Anuradha Godavarty, and Eva. Sevick. Fluorescence photon migration by the boundary element method. *Journal of Computational Physics.*, 210:109–132.
- [9] Christophe Geuzaine and Jean-François Remacle. Gmsh: A 3-d finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities. *International journal for numerical methods in engineering*, 79(11):1309–1331, 2009.
- [10] Isaak D. Mayergoyz, Donald R. Fredkin, and Zhenyu Zhang. Electrostatic (plasmon) resonances in nanoparticles. *Phys. Rev. B*, 72:155412, Oct 2005.
- [11] Ungerer Muñoz Milán Simón Enrique. Estudio numérico-computacional de la disposición ideal de microhilos ferromagnéticos en un dispositivo sensor de tensiones en polímeros. 2017.
- [12] M. I. Mischenko. *Opt. express* 20, 13188. 2007.
- [13] R.A. Serway, J.W. Jewett, and S.R.C. González. *Física para ciencias e ingeniería. Vol. 2 (9a. ed.)*. CENGAGE Learning, 2015.

- [14] W. Śmigaj, T. Betcke, S. Arridge, J. Phillips, and M. Schweiger. Solving boundary integral problems with BEM++. *ACM Transactions on mathematical software*, 41(2):6:1–6:40, 2015.