CREACION DE MODELOS MATEMATICOS PARA EL ESTUDIO DE TRANSITORIOS

Por R. Marqués Fernández (*)

Primera parte

Introducción.-

a) Ante todo es necesario hacer patente nuestro agradecimiento al Centro de Cálculo de la Universidad de Madrid por la concesión de una beca del Fondo de Investigación IBM, que permitirá desarrollar una amplia labor de estudio en el campo de los diversos transitorios que se presentan en el dominio de la Física Aplicada.

b) Objeto del trabajo: En el transcurso de los últimos años, los avances experimentados en el mundo de los ordenadores permite replantear la resolución de numerosos problemas, mediante el uso de técnicas propias del cálculo numérico, así como dar solución a otros muchos que por su complejidad matemática no poseen solución análitica conocida más que en aquellos casos en que ciertas hipótesis restrictivas permiten tratamientos aproximados de estos problemas.

Así por ejemplo en el estudio de transitorios aparecen ecuaciones diferenciales en derivadas totales y parciales, de primer y segundo orden, no - lineales con condiciones de contorno que complican extraordinariamente la resolución de estos problemas, exigiendo constantemente el uso de tratamientos numéricos para su resolución.

c) Plan de trabajo: El equipo ha iniciado el trabajo propuesto, agrupando las ecuaciones a tratar en la primera etapa de su estudio en los siguientes grupos:

(*) Trabajo realizado con beca de ayuda a la investigación del Fondo IBM (Equipo formado por R. Marqués Fernández, M. Llorens Morraja, L. Jutglar Banyeres, M. Villarrubia López, A. L. Miranda Barreras, J. L. González Vicente, C. Franco Peral, J. Gultresa Colomer, G. Franco González; de la Cátedra de Física Industrial de la Facultad de Ciencias. Barcelona).

<u>Primer grupo</u>: Ecuaciones diferenciales de segundo orden de la forma,

$$A \frac{d^2 z}{d t^2} + B \frac{d z}{d t} + Cz + D = 0$$

donde $z = z(t)$ y donde A,B,C,D pueden ser en general funciones de t,z y de dz/dt; siendo las condiciones iniciales $t=t_o$, $z=z_o$, $dz/dt)_o$

<u>Segundo grupo</u>: Sistemas de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales de la forma,

$$A_1 \frac{\partial u}{\partial x} + B_1 \frac{\partial u}{\partial t} + C_1 \frac{\partial v}{\partial x} + D_1 \frac{\partial v}{\partial t} + E_1 = 0$$

$$A_2 \frac{\partial u}{\partial x} + B_2 \frac{\partial u}{\partial t} + C_2 \frac{\partial v}{\partial x} + D_1 \frac{\partial v}{\partial t} + E_2 = 0$$

donde $u=u(x,t)$, $v=v(x,t)$ y donde $A_1 A_2$, .., E_1, E_2 son funciones de u, v,x,t; sujetas a unas determinadas condiciones de contorno propias de cada problema particular.

<u>Tercer grupo</u>: Ecuaciones diferenciales en derivadas parciale de segundo orden de la forma,

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} = g(x,y,z) + \alpha \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} + \beta \frac{\partial f}{\partial t}$$

donde $f = f(x,y,z,t)$, junto con las condiciones de contorno específicas de cada problema en particular.

<u>Observaciones</u>: Es necesario hacer constar que ecuaciones del primer grupo aparecen en el estudio de algunos transitorios hidraúlicos tales como: vaciado de un depósito y oscilaciones entre depósito cámaras de equilibrio, cámaras de aire, etc. ([1]), ([2]), ([3]), ([4]). Ecuaciones del segundo grupo aparecen a su vez en el estudio del gol de ariete, en problemas unidimensionales de flujo isentrópico, etc.. ([5]), ([6]). Finalmente ecuaciones del tercer grupo aparecen fundamentalmente en problemas de transmisión de calor, propagación de ondas y vibraciones elásticas([7]), ([8]), ([9]).

d) Organización del equipo de trabajo: Se ha procedido a la subdivisión del personal becado en dos bloques o subequipos (equipo 1 y equipo 2) de forma tal que mientras el primero de ellos trabaja sobre ecuaciones del tipo 1 y 2 , el otro lo hace sobre las del tipo 3, existiendo un coordinador entre ambos equipos. La presentación de las ecuaciones propuestas se irá verificando las sucesivas fases de trabajo prefijadas a partir de las cuales, partiendo de niveles relativamente sencillos se irán incrementando los niveles de dificultad.

Básicamente la labor de programación, será realizada en el ordenador IBM 360/30 del Centro de Cálculo de la Facultad de Ciencias de Barcelona.

Ecuaciones del primer grupo: En una primera fase, abordamos la resolución de la ecuación,

$$A \frac{d^2 z}{dt^2} + B\frac{dz}{dt} + Cz + D = 0 \qquad (1)$$

antes mencionada, y en el siguiente caso particular:

$$A,C,D, = \text{Ctes} \qquad B = K \cdot \left| \frac{dz}{dt} \right|$$

Condiciones iniciales:

$$t_o = 0 \qquad z = z_o \qquad \frac{dz}{dt} = \left.\frac{dz}{dt}\right)_o$$

con lo que (1) una vez normalizada será de la forma,

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = \beta \frac{dz}{dt} \cdot \left| \frac{dz}{dt} \right| + \gamma z + \theta \qquad (2)$$

donde β, γ, θ , serán a su vez constantes

Procedamos al siguiente cambio de variables:

$$z = z_1 \qquad \frac{dz}{dt} = z_2 \qquad (3)$$

con ello se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden casi-lineal equivalente a (2)

$$\frac{dz_1}{dt} = z_2 \qquad (4a)$$

$$\frac{dz_2}{dt} = \beta\, z_2 \cdot |z_2| + \gamma\, z_1 + \theta \qquad (4b)$$

siendo las condiciones iniciales referidas a las nuevas variables:

$$t_o = 0 \qquad z_1)_o = z_{1_o} \qquad z_2)_o = z_{2_o}$$

Existen numerosos métodos numéricos para proceder a la integración de nuestro sistema, dadas las condiciones iniciales. Hemos centrado nuestra atención en los de Runge-Kutta y Hamming.

El método de Runge-Kutta, se basa en la integración (integración de cuarto orden), usando un algoritmo que aproxima la solución en series de Taylor hasta términos en h^4.(10), (11),(12). Es un método que no requiere evaluaciones ni definiciones explicítas de la función y su derivada primera en instantes diferentes del inicial; es además un método estable y permite variar en cualquier momento el intervalo de integración h. Como inconvenientes cabe mencionar los siguientes: en cada paso de computación exige el cálculo por cuatriplicado de los segundos miembros del sistema; además el método no permite predecir ni estimar el error de truncamiento.

El método de Hamming, es un método predictor-corrector que opera de modo similar al Runge-Kutta. Es a su vez un método estable que integra en una aproximación de cuarto orden y que presenta frente al anterior las siguientes ventajas: aunque requiere una doble evaluación de los segundos miembros del sistema en cada paso del computo, suministra a su vez una estimación del error de truncamiento local. Sin embargo el método de Hamming presenta un notable inconveniente: no se auto-inicia, es decir requiere una previa estimación de las funciones y sus respectivas derivadas en intervalos de tiempo anteriores al inicial, para lo que se precisa la utilización previa de un método Runge-Kutta para su evaluación.

Frente a los métodos (Runge-Kutta y Hamming) anteriormente expuestos hemos decidido abordar un ejemplo concreto ensayando el primero de ellos para la resolución de la ecuación (2), en la que hemos tomado:

$$\beta = -0{,}10451 \qquad \gamma = -4{,}89956.10^{-5} \qquad \theta = 0 \qquad (5)$$

con las siguientes condiciones iniciales:

$$t=0\ , \qquad z\Big)_{t=o} = 7{,}66 \qquad \frac{dz}{dt}\Big)_{t=o} = -0{,}0599 \qquad (6)$$

con lo que el sistema de ecuaciones diferenciales (4a), (4b) será de la forma:

$$\frac{dz_1}{dt}\Big) = z_2 \qquad (7a)$$

$$\frac{dz_2}{dt}\Big) = -0{,}10451 z_2 |z_2| -4{,}89956.10^{-5} z_1 \qquad (7b)$$

siendo las condiciones iniciales;

$$t=0 \qquad z_1\Big)_o = 7{,}66 \qquad z_2\Big)_o = -0{,}0599 \qquad (8)$$

El problema se ha resuelto a partir de la subroutine RKGS ([13]) modificada y adaptada al sistema propuesto.

Al presente informe adjuntamos el listado del programa, así como los resultados obtenidos.

NOTA: Los valores numéricos corresponden al problema planteado por Schäfer, las cámaras abiertas de equilibrio para grandes obras hidráulicas.

BIBLIOGRAFIA

(1) STREETER, V.L. Fluid Mechanics. McGraw-Hill. New York - 1966

(2) PICKFORD, J. Mecánica de Fluídos. McMillan. 1969

(3) RICH, G.R. Hydraulic Transients. Dover Publications. New York - - 1963

(4) STREETER, V.L. - WYLIE, E.B. Hydraulic Transients. McGraw-Hill. New York - 1967

(5) PARMAKIAN, J. Waterhammer Analysis. Dover Publications. New York - 1963.

(6) SWANSON, W.M. Fluid Mechanics. Holt-Rinehart-Winston. New York 1970.

(7) KERN, D.Q. Process Heat Transfer. McGraw-Hill. New York - 1950

(8) JAKOB, M. Heat Transfer. John Wiley and Sons. New York - 1965

(9) VERNON, J.B. Linear Vibration Theory: Generalized Properties and Numerical Methods. John Wiley and Sons. London - 1967

(10) RALSTON, A. - WILF, H.S. Mathematical Methods for Digital Computers. John Wiley and Sons. New York 1967

(11) HILDEBRAND, F.B. Introdution to Numerical Analysis. McGraw - - Hill. New York - 1965

(12) MILNE, W.E. Numerical Solution of Differential Equations. John Wiley and Sons. New York - 1953.

(13) IBM Application Program. System/360 Scientific Subroutine Package. Version III - Programmer's Manual. Fifth Edition - 1970

Segunda parte

Introducción.- El notable avance experimentado en el campo de la Mecánica de Fluídos en los últimos años ha contribuído notablemente al conocimiento de las ecuaciones diferenciales no lineales, ordinarias o bien parciales. Tan solo en algunos casos muy especiales se conocen soluciones analíticas, por lo que generalmente deben usarse métodos numéricos de integración, tal como el método de Runge-Kutta aplicable en la mayoría de problemas de condiciones iniciales determinadas. Sin embargo en ocasiones suelen presentarse dificultades para la integración de este tipo de ecuaciones debido a que las condiciones de contorno vienen dadas en dos puntos, por lo que para poder proceder a la integración de la ecuación debe: 1) Suponerse un valor arbitrario de la condición inicial que se ignora. 2) Integrar numéricamente la ecuación. 3) Comprobar que se verifica la condición de contorno en el segundo punto. 4) De ser negativo el test del apartado 3) debe suponerse un nuevo valor y repetirse el proceso hasta que se obtengan los resultados adecuados.

Una notable simplificación, del proceso indicado, puede conseguirse de introducir, cuando ello sea posible, una transformación que reduzca el problema de condición de contorno a condiciones iniciales genéricas.

Ejemplo de transitorio: Flujo isotermo de un gas de un medio poroso (1).

El problema del flujo isotermo no estacionario de un gas a través de un medio poroso semi-inifinito ha sido resuelto por métodos aproximados por desarrollos en series por Kidder (2). T.Y. Na (1) (3) (4) (5) propone el tratamiento que resumidamente exponemos a continuación:

Ecuación diferencial que rige el transitorio,

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(p\,\frac{\partial p}{\partial x}\right) = \frac{\varphi\,\mu}{K}\cdot\frac{\partial p}{\partial t} \qquad (1)$$

condiciones de contorno,

$$p\ (x,o) = p_o \qquad 0 < x < \infty$$

$$p\ (o,t) = p_1 \quad (< p_o) \qquad 0 \leq t < \infty \tag{2}$$

Consideremos la siguiente transformación de semejanza:

$$z = \frac{x}{\sqrt{t}} \left(\frac{\varphi \mu}{4 p_o k} \right)^{1/2} \tag{3}$$

$$w\ (z) = \alpha^{-1} \cdot \left(1 - \frac{p^2(z)}{p_o^2}\right) \tag{4}$$

donde

$$\alpha = 1 - \frac{p_1^2}{p_o^2} \tag{5}$$

con lo que (1) se reduce a la siguiente ecuación diferencial ordinaria

$$\frac{d^2 w}{dz^2} + \frac{2z}{\left(1 - \alpha w\right)^{1/2}} \frac{dw}{dz} = 0 \tag{6}$$

sujeta a las condiciones del contorno,

$$w\ (o) = 1 \qquad w\ (+\infty) = 0 \tag{7}$$

Definamos ahora dos funciones η y $f(\eta)$,

$$\eta = \frac{z}{(1 - \alpha)^{1/4}} \qquad f(\eta) = w - 1 \tag{8}$$

de modo que (6) y (7) se convierten en (9) y (10) respectivamente

$$\frac{d^2 f}{d \eta^2} + \frac{2 \eta}{\left(1 - \frac{\alpha}{1-\alpha} f\right)^{1/2}} \quad \frac{df}{d\eta} = 0 \tag{9}$$

$$f\ (0) = 0 \qquad f\ (\infty) = -1 \tag{10}$$

La ecuación (9) se reduce a un problema de valores iniciales mediante el grupo de transformaciones lineales

$$\eta = A^{\alpha_1} \bar{\eta} \qquad f = A^{\alpha_2} \bar{f} \tag{11}$$

donde A es el parámetro de transformación y α_1, α_2, son constantes a determinar. Así resulta,

$$\frac{d^2 \bar{f}}{d \bar{\eta}^2} + \frac{2 \bar{\eta}}{(1 - \beta \bar{f})^{1/2}} \frac{d \bar{f}}{d \bar{\eta}} = 0 \tag{12}$$

a fin de que (12) no dependa de A se ha tomado $\alpha_1 = 0$ y se ha definido

$$\beta = \frac{\alpha}{1 - \alpha} A^{\alpha_2} \tag{13}$$

siendo ahora, las condiciones de contorno

$$\bar{f}(0) = 0 \qquad \bar{f}(\infty) = - \frac{1}{A} \tag{14) - (14a}$$

Si consideramos la condición inicial ignorada en (10) para el tratamiento numérico de la ecuación (9) como

$$\frac{df(0)}{d\eta} = A \tag{15}$$

se tendrá por (11) y recordando que se ha tomado $\alpha_1 = 0$,

$$\frac{d\bar{f}(0)}{d\bar{\eta}} = A^{1-\alpha_2} \tag{16}$$

y para que a su vez (16) sea independiente de A, deberá tomarse $\alpha_2 = 1$, con lo que

$$\frac{d\bar{f}(0)}{d\bar{\eta}} = 1 \tag{17}$$

Resumen del proceso de cálculo

Para el amplio margen de condiciones de contorno (2), lo que equivale a operar según (5) con

$$0 < \alpha < 1 \qquad (18)$$

el proceso de cálculo puede resumirse en los siguientes pasos;

1) Asignar un valor a β

2) Integrar numéricamente (12) con las condiciones iniciales dadas por (14) y (17) esto es,

$$\bar{f}(0) = 0 \qquad \frac{d\bar{f}(0)}{d\bar{\eta}} = 1 \qquad (19)$$

3) De 2) tomar $\bar{f}(\infty)$ y por (14a) determinar el parámetro de transformación A

4) El valor de α correspondiente a la solución particular estudiada ser según (13) (y recordando que $\alpha_2 = 1$)

$$\alpha = \frac{\beta}{A + \beta} \qquad (20)$$

5) La solución de la ecuación (6) se determinará a partir de las relaciones de transformación (11) y (8)

6) Considérese nuevos valores de β, y repetir los pasos 2-5 hasta completar el dominio de α, definido en (18).

Ejemplo de cálculo

Hemos abordado la resolución de la ecuación,

$$\frac{d^2\bar{f}}{d\bar{\eta}^2} + \frac{2\bar{\eta}}{\left(1-\beta\bar{f}\right)^{1/2}}\frac{d\bar{f}}{d\bar{\eta}} = 0$$

con las condiciones iniciales,

$$\bar{f}(0) = 0 \qquad \frac{d\bar{f}(0)}{d\bar{\eta}} = 1$$

para valores de que varían desde -2.0 hasta -3.0 con incrementos de 10^{-1}.

A fin de transformar nuestra ecuación diferencial de 2º orden en un sistema de tales ecuaciones de primer orden, hagamos

$$\bar{f} = \bar{f}_1 \qquad \frac{d\bar{f}}{d\bar{\eta}} = \bar{f}_2$$

se tendrá entonces,

$$\frac{d\bar{f}_1}{d\bar{\eta}} = \bar{f}_2$$

$$\frac{d\bar{f}_2}{d\bar{\eta}} = - \frac{2\bar{\eta}}{(1-\beta\bar{f}_1)^{1/2}} \bar{f}_2$$

siendo las condiciones iniciales para el sistema:

$$\bar{\eta}(0) = 0 \qquad \bar{f}_1(0) = 0 \qquad \bar{f}_2(0) = 1$$

El problema se ha resuelto a partir del método de Runge-Kutta modificado por Gill, utilizando de nuevo la subroutine RKGS ([6]). A continuación presentamos una tabla resumen de los resultados.

β	$\bar{f}(\infty)$	A	α
-2,00	1,08950	-0,91785	0,68544
-2,10	1,09793	-0,91080	0,69749
-2,20	1,10623	-0,90397	0,70877
-2,30	1,11441	-0,89734	0,71935
-2,40	1,12249	-0,89088	0,72929
-2,50	1,13046	-0,88460	0,73864
-2,60	1,13831	-0,87850	0,74745
-2,70	1,14608	-0,87850	0,75576
-2,80	1,15374	-0,86675	0,76362
-2,90	1,16131	-0,86110	0,77105
-3,00	1,16879	-0,85559	0,77809

Nomenclatura:

f = Variable dependiente de semejanza
k = Permeabilidad
p = Presión
P_0, P_1 = Presiones antes y después de $t = 0$
w = Variable dependiente definida en la ecuación (4)
x = Eje de coordenadores cartesianas
z = Variable independiente de semejanza
φ = Porosidad
η = Variable independiente de semejanza definida en (8)
α = Constante física, definida en (5)
α_1, α_2 = Constantes de la relación de transformación
β = Constante física, definida en (13)
μ = Viscosidad dinámica

Bibliografía

(1) T.Y.Na. An Initial Value Method for the Solution of a Class of Nonlinear Equations in Fluid Mechanics. Transactions of the ASME. September 1970.

(2) Kidder R.E. "Unsteady Flow of Gas Through a Semi-Infinite Porous Medium" Journal of Applied Mechanics, Vol,24 Trans ASME, Vol,79 1957, pp, 329-334.

(3) NaT.Y. "Transforming Boundary Conditions to Initial Conditions for Ordinary Differential Equations" SIAM Review Vol,9 1967,pp 204-210.

(4) Na.T.Y. "Frurther Extension on Transformation From Boundary Value of Initial Value Problems" SIAM Review Vol,10 1968,pp 85-87.

(5) Na. T.Y. and Tang S.C.,"A Method for the Solution of Heat Conduction With Nonlinear Heat Generation" ZAMM, Vol, 49 -1/2 1969, pp. 45-52.

(6) IBM Application Program. System 1360, Scientific Subroutine Package, Version III. Programmer's Manual. Fifth Edition, 1970.