METODOS NUMERICOS PARA LA RESOLUCION DE ECUACIONES DIFERENCIALES EN DERIVADAS PARCIALES CON ESPECIAL ENFASIS EN LA MECANICA DE LOS FLUIDOS COMPUTACIONAL (CFD)

Uri Groisman

1.- INTRODUCCION

1.a.- MOTIVACION

El gigantezco poder de la matemática es valorado por la gran mayoría de las personas cuando “ponemos números” en las expresiones matemáticas. Mientras que una ecuación o fórmula puede proporcionar mucha información acerca del comportamiento de un sistema físico, esta solo puede ser apreciada por unos pocos, que en general ya conocen el sistema con profundidad y rigurosidad. La misma ecuación o fórmula puesta a generar números, revela mucho más a mucha más gente. Por ejemplo las ecuaciones de Navier Stokes, que gobiernan el movimiento de un fluido no se ven muy atractivas ni descriptivas escritas en papel

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \vec{F} + \nu \nabla^2 \vec{v}$$

salvo para un pequeño grupo de expertos. Sin embargo, su solución apropiadamente postprocesada, es decir graficada, y animada, puede ser comprendida y hasta una fuente de inspiración para un estudiante de secundaria sin ninguna formación aún en los conceptos matemáticos y físicos incluidos en las expresiones anteriores.

Por esta razón matemáticos y físicos aplicados, vienen intentando generar, lo más rápido posible, números a partir de ecuaciones. La necesidad de generar números aparece también como consecuencia que en la gran mayoría de los sistemas de interés las ecuaciones que surgen de modelarlos no tienen solución analítica cerrada. Esa motivación junto al dramático desarrollo de las computadoras en las últimas décadas pone estos intentos literalmente en la palma de nuestras manos.

Como ejemplo basta citar que la Academia Nacional de Ingeniería de los Estados Unidos ha reconocido, entre otros, al análisis por elementos finitos y a la mecánica de los fluidos computacional como disciplinas básicas, y cada vez más estos temas entran en los programas de grado de las facultades de ingeniería de todo el mundo. La necesidad de conocer esta metodología de trabajo es cada vez más importante tanto en la industria como en la academia. El aumento del poder computacional, la interconexión a nivel mundial ha vuelto a despertar mucho interés en el desarrollo de nuevos algoritmos numéricos para ejecutar tareas muy complejas de manera eficiente. Hoy en día es factible simular procesos cuyas escalas van de los picometros a años luz, y escalas de tiempo que van de los femtosegundos a décadas. Desde colisiones de agujeros negros al espectro de vibración atómica, pasando por la simulación de la turbulencia en la capa límite atmosférica para la predicción del clima. El poder de este tipo de simulación para ayudarnos a comprender el mundo que nos rodea y para mejorar nuestras vidas es enorme.

1.b.- EL ANALISIS EN LA INGENIERIA

Previo al advenimiento de las computadoras digitales, máquinas y dispositivos eran diseñados por prueba y error. El paradigma de diseñar por el método de prueba y error, o de construir y romper sigue vigente hoy y lo seguirá estando en el futuro, pero en una escala mucho menor. La única manera de estar totalmente seguro de que una máquina o dispositivo va a funcionar como se pretende es construyéndola y probándola.

Supongamos que estamos desarrollando un nuevo álabe para una turbina a gas, este no solo tendrá que suministrar la potencia requerida (ciencia) sino que tendrá que ser capaz de soportar las temperaturas y presiones del gas en el punto de operación (ingeniería). Si se logra diseñar un álabe que cumpla todas esas exigencias por el método de prueba y error es imposible saber si es el mejor diseño posible. El álabe que se tiene es solo un diseño que funciona. Podría haber otros mucho más eficientes (que generen mayor potencia) que el que construimos y ensayamos. Por supuesto se podrían construir muchos prototipos y ensayarlos para resolver este problema, pero ese camino tiene por lo menos dos inconvenientes. Primero requiere mucho tiempo y tiene un altísimo costo. Y segundo se seguiría sin estar completamente seguros de que cubrimos todo el espacio de diseños posibles. Es en este punto donde el análisis científico o de ingeniería se vuelve muy útil.

Durante la revolución industrial y por décadas luego de la misma, el análisis de los mecanismos construidos por el hombre no fueron críticos. El llamado factor de seguridad que se aplicaba en los diseños de la mayoría de los dispositivos era tan grande que estos funcionaban y eso fue lo único que importó en esa época. La gran mayoría de las máquinas eran juzgadas por su capacidad de realizar la tarea para la que eran construidas. La gente estaba maravillada por el invento del automóvil que era capaz de transportar personas de un punto A a un punto B sin la necesidad de utilizar tracción a sangre. Nadie en aquel momento se hizo preguntas del tipo cuantos kilómetros por litro recorre ese automóvil. Hoy con el crecimiento exponencial de la población mundial, y el agotamiento de los recursos naturales la eficiencia se ha vuelto crítica en el diseño en ingeniería.

Analizar en este contexto, refiere al uso de ciertos principios matemáticos y físicos que nos permitan establecer relaciones del tipo causa efecto aplicadas al dispositivo o mecanismo en cuestión. A esa relación se le suele llamar modelo matemático, que dependiendo del caso puede ser desde una simple ecuación algebraica explícita hasta un complejo sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales.

El modelo matemático puede estar basado en correlaciones empíricas o en leyes fundamentales como la conservación de la masa, la cantidad de movimiento, la energía, la carga o cualquier otra magnitud relevante al caso específico. La existencia de estos modelos independientemente de su origen, nos permiten responder a preguntas del tipo "¿qué ocurriría sí? Volviendo al ejemplo del álabe, ¿qué ocurriría si cambiamos el ángulo del álabe 2 grados?, ¿qué ocurriría si aumentamos la velocidad del álabe un 2%?, esta metodología nos permite cubrir todo el espacio de diseños posibles, en un tiempo prudencial y con una inversión económica adecuada.

Los modelos matemáticos empíricos se desarrollan basados en datos obtenidos de ensayos y mucha experiencia en el tema. Una gran cantidad de experiencias se realizan sobre el dispositivo o sistema a estudio y se procesan los datos obtenidos a los efectos de obtener una o más ecuaciones que describen la relación de causalidad. Un ejemplo de este tipo de modelos son las correlaciones utilizadas para calcular los coeficientes que intervienen en fenómenos de transferencia de calor en fluidos en función de las propiedades termofísicas del fluido y su velocidad, o las correlaciones usadas para calcular la fuerza de arrastre producidas por fluidos en movimiento sobre cuerpos sólidos. La gran ventaja de estos modelos es que son muy simples, fáciles de entender e implementar. La desventaja es su rango de aplicabilidad. Un modelo desarrollado para calcular el coeficiente de transferencia de calor para una superficie plana da resultados incorrectos si lo aplico a una superficie curva.

Los modelos basados en principios físicos fundamentales tienen un rango de aplicabilidad mucho mayor. Por ejemplo, la ley de Fourier aplicada a fenómenos de transferencia de calor por conducción es válida mientras se cumpla la hipótesis de medio continuo. De la misma forma la conservación de la energía (primera ley de la termodinámica) es siempre valida, sin importar la geometría, las condiciones de operación o el tipo o estado del material de trabajo. El primer ejemplo se trata de una ley del tipo fenomenológico, mientras que el segundo de una ley fundamental. Las leyes fenomenológicas nacen a partir de la observación experimental junto con una cierta visión física del fenómeno en lugar de axiomas de la física. Su rango de aplicabilidad es menor que el de los modelos basados en leyes fundamentales, pero aún así mucho mayores que el de los modelos basados en correlaciones empíricas.

Crear un modelo matemático que describa adecuadamente un fenómeno físico requiere de un investigador que posea un profundo conocimiento del fenómeno físico que se propone modelar. Por otro lado, uno de los propósitos del modelo matemático es descubrir las relaciones de causalidad en el fenómeno físico que se estudia. ¿Cómo reconciliamos esta paradoja? Por fortuna, si utilizamos modelos basados en principios fundamentales de la física, podemos aplicarlos a ciegas. A modo de ejemplo si asumimos la segunda ley de Newton como un principio universal, podemos aplicarla a la resolución de problemas muy complejos de los que sabemos muy poco o nada. La física de la interacción entre la onda de choque y la turbulencia detrás de una aeronave supersónica es extremadamente compleja, pero su solución se encuentra en las ecuaciones de Navier Stokes, que son esencialmente el principio de conservación de la masa, la cantidad de movimiento y la energía. Por lo tanto, si el modelo matemático se basa en principios fundamentales de la física podemos usarlo en la descripción de fenómenos que no conocemos. Allí radica la belleza de estos métodos y su inmenso poder que los ha llevado a tener un papel cada vez más protagónico en la era moderna.

A pesar de las enormes ventajas de utilizar modelos matemáticos basados en leyes fundamentales o fenomenológicas, su uso sigue siendo limitado en el día a día del ingeniero. Esto se debe a su complejidad. Algunas de las leyes fundamentales más generales, como la conservación de la masa, la cantidad de movimiento, la energía, la carga entre otras se describen mediante la utilización de ecuaciones diferenciales. La resolución de este tipo de ecuaciones está lejos de ser trivial y requiere de métodos matemáticos avanzados. En la gran mayoría de los casos su solución solo puede ser obtenida recurriendo a una computadora. El desarrollo de la tecnología computacional permite hoy en día la utilización de modelos matemáticos basados en principios fundamentales para la simulación de dispositivos y sistemas.

De todas formas, mientras el análisis ayuda a encontrar relaciones entre los parámetros que gobiernan el sistema, y explorar gran parte del espacio de los factibles diseños, no es y no debe ser percibido como un substituto de las observaciones experimentales. Sin importar cuan sofisticado o fundamental es un modelo matemático, siempre contendrá alguna suposición que hará que no describa totalmente la realidad. Por ejemplo, la simulación del movimiento de un fluido dentro de una tubería seguramente no tenga en cuenta las imperfecciones microscópicas de la pared del tubo (es decir asume que esas imperfecciones no afectan el movimiento del fluido). En algunos casos esta suposición puede ser justificada, pero en otros casos no. Para tener un conocimiento claro del efecto de las suposiciones hechas durante la creación del modelo es necesario validarlo. Se dedicará un capítulo a este tema ya que es de suma importancia cuando aplicamos este tipo de metodología a problemas de la vida real.

Un modelo matemático, por definición, relaciona datos de entrada al modelo con datos de salida, la ya mencionada relación de causalidad. Aún en el caso que el modelo haya sido validado y describa a la perfección esta relación, es necesario proveerlo de datos de entrada apropiados. Si se desea obtener los mismos resultados en una simulación numérica y en un experimento los datos de entrada al modelo deben ser lo más cercanos posibles a los del dispositivo experimental. Esto es fácil de decir, pero muy difícil de implementar, ya que el experimento nunca es perfectamente reproducible. Por ejemplo, el caudal en la embocadura de una tubería para hacer un experimento sobre flujo confinado puede variar de un día a otro, o de una hora a otra, o durante la realización de la experiencia. Estos pequeños errores en los datos de entrada, *incertidumbres*, pueden ser amplificados o atenuados por el modelo matemático, es decir un error del 1% en los datos de entrada se puede transformar en un error del 10% o del 0,1% en los datos de salida. La cuantificación de los cambios en los datos de salida del modelo en función de las perturbaciones a la entrada se ha convertido en un campo de estudio en sí mismo bajo el paraguas del análisis numérico.

En este texto, curso, nos enfocaremos esencialmente en modelos matemáticos que incluyen ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, EDPs. Estas ecuaciones aparecen en la gran mayoría de los modelos matemáticos basados en leyes fundamentales o fenomenológicas y son capaces de predecir la evolución espaciotemporal de una magnitud física de interés. Por ejemplo, la solución de la ecuación de calor no estacionaria, que es una EDP con cuatro variables independientes puede predecir la evolución espaciotemporal de la temperatura que en este caso sería la variable dependiente. Como la solución de la EDP puede, potencialmente predecir la magnitud de interés (la temperatura en el ejemplo) en cada punto del espacio y para cada instante de tiempo, se puede considerar la solución con un experimento virtual con sensores (termómetros en el ejemplo) ubicados imaginariamente en cada uno de los puntos donde tenemos solución. Realizar esto en una experiencia real puede ser económicamente inviable o peor aún, la presencia de los sensores puede alterar el resultado de la misma, lo cual le quita toda validez al experimento

Por tanto, uno de los roles de este tipo de análisis es el de complementar campañas de medición llenando los vacíos o huecos en el espacio y el tiempo donde los sensores no pueden ser colocados sin interferir con las medidas, generando una cantidad de datos muy importante que de otra forma sería imposible de obtener.

La discusión precedente nos permite concluir que el análisis científico o de ingeniería sirve a los siguientes propósitos:

- Ayuda a comprender las relaciones entre causas (parámetros de entrada, condiciones iniciales) y efectos (datos de salida) dándonos pistas de cómo funciona un dispositivo o sistema o cual es la razón de que falle bajo ciertas condiciones de operación

- Para aplicaciones de ingeniería, nos permite la exploración de regiones en el espacio de los diseños factibles que sería imposible de realizar experimentalmente. Lo cual nos habilita a rechazar diseños o a mejorar (optimizar) alguno existente.

- Durante el proceso de análisis de un sistema muy complejo, en el que ocurren muchos procesos físicos a la vez, el efecto de uno o más fenómenos puede ser fácilmente anulado y así tener una idea clara de su importancia relativa. Por ejemplo, el efecto de la convección natural en el estudio del movimiento de un fluido compresible puede ser aislado y anulado simplemente igualando la aceleración de la gravedad a cero. Esto es casi irrealizable en el laboratorio, la gravedad es omnipresente en la tierra y no puede ser "apagada" en investigaciones experimentales terrestres. La única posibilidad sería la de montar el experimento en un laboratorio en caída libre, como por ejemplo la Estación Espacial Internacional

- El análisis que utiliza modelos matemáticos basados en leyes físicas nos permite obtener series de datos espaciotemporales que complementan las observaciones experimentales.

PROXIMOS CAPITULOS:

1.c.- CLASIFICACION DE EDPS

1.d.- VISIÓN GENERAL DE LOS METODOS DE RESOLUCION DE EDPS