

ESTUDIO DE LOS PROBLEMAS NUMÉRICOS EN UN MODELO DE EVAPORACIÓN EN TUBOS VERTICALES

Eduardo J. Adam, Jacinto L. Marchetti

*Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química (INTEC), CONICET- Universidad
Nacional del Litoral, Güemes 3450, 3000 Santa Fé, Argentina.*

Gustavo Pérez, Ernesto Martínez

Instituto de Desarrollo y Diseño (INGAR), CONICET, Avellaneda 3657, 3000 Santa Fé, Argentina

RESUMEN

En este trabajo se estudian los problemas numéricos originados en un modelo de simulación de la evaporación de un fluido en tubos verticales. Dichos problemas tienen su origen en los distintos órdenes de magnitud que presentan ciertas propiedades físicas para ambas fases, lo cual parece ser una característica común de los modelos matemáticos de flujo de dos fases, y en errores de redondeo y truncamiento. Estas causas pueden jugar un papel decisivo en los resultados de la simulación dado que producen mal condicionamiento del sistema de ecuaciones resultante. El problema es abordado mediante dos estrategias completamente distintas: 1) la obtención explícita de las derivadas mediante la inversión de una matriz rara, seguida de la integración utilizando el método de Runge-Kutta con paso variable, y 2) la discretización de las derivadas mediante un balance de dos puntos, seguida de la resolución simultánea del sistema de ecuaciones no lineales resultantes.

ABSTRACT

This paper addresses the numerical problems appearing during the simulation of the evaporation of a fluid inside vertical tubes. The significant differences existing between magnitudes of vapor and liquid physical properties seem to be the principal reason for the ill-condition, which frequently arises when modeling detailed two-phase flow systems. Round-off and truncation errors collaborate to increase the mismatch between the desired response and the result. Two completely different numerical strategies are suggested here to solve the fluid evaporation model, 1) the explicit derivatives, obtained after a main matrix inversion are integrated using the semi-implicit Runge-Kutta method with variable integration interval and, 2) a set of nonlinear equations, obtained by a two point weighted discretization, is solved through an implicit optimization.

INTRODUCCION

Los sistemas ingenieriles de valores iniciales presentan como parte de la descripción matemática conjuntos de ecuaciones diferenciales de diverso orden sujetas a condiciones iniciales con o sin restricciones algebraicas. Estos conjuntos deben ser tratados algebraicamente para explicitar las derivadas de las variables de estado y posibilitar una estrategia numérica a través de métodos conocidos.

Si el problema es transformable en un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden sujetas a valores iniciales, éste puede ser resuelto por una variedad de métodos, tales como los métodos de Euler, Runge-Kutta, Runge-Kutta semimplicito (como lo proponen varios de autores), el método implícito de dos puntos, los predictores correctores como los de Adams-Bashford, Gear, etc. Además, todos éstos métodos presentan varias de modificaciones producto del esfuerzo de un gran número de investigadores.

Cuando la formulación del problema no solo conduce a ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden sujetas a valores iniciales sino que incluye ecuaciones algebraicas acopladas, frecuentemente se emplea el algoritmo generalizado de Michelsen basado en el método de Runge-Kutta semimplicito, o el método de Gear (Holland y Liapis [1]).

Como se puede observar existe un conjunto de posibles opciones, y la decisión de adoptar un método sobre otros es tomada en base a la complejidad del problema y a las características del comportamiento de las variables del sistema.

En este trabajo se consideran dos formulaciones de un modelo de un flujo de dos fases, los resultados obtenidos y a las dificultades numéricas observadas.

MODELO DEL SISTEMA

El conjunto de ecuaciones que representa a un flujo de dos fases en un tubo está constituido por balances de masa, energía, cantidad de movimiento, y por leyes constitutivas que modelan el flujo de calor en la pared, la pérdida de presión por fricción, etc. Todo esto da lugar a modelos con un alto grado de detalle y con ecuaciones diferenciales a derivadas parciales no lineales. Desarrollar un modelo y llevar a cabo simulaciones numéricas implica el conocimiento de los aspectos físicos del sistema así como también una cierta experiencia en los métodos a aplicar.

Una táctica muy común en este tipo de problemas es abordar primeramente un modelo simplificado, o con menor grado de detalle, como el modelo de mezcla homogénea que aquí se presenta. El modelo matemático desarrollado consta de tres ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales acopladas entre sí, ecuaciones constitutivas para el coeficiente de transferencia local del calor, para el factor de fricción, ecuaciones de estado, etc., formando un total de nueve ecuaciones con nueve incógnitas.

A continuación se presentan las ecuaciones fundamentales del modelo:

Balance de materia para la mezcla :

$$\frac{d}{dz} [\epsilon_s \rho_s u + (1 - \epsilon_s) \rho_l u] = 0 \quad (1)$$

Balance de cantidad de movimiento para la mezcla :

$$\frac{d}{dz} [\epsilon_s \rho_s u^2 + (1 - \epsilon_s) \rho_l u^2] + \frac{d}{dz} [p] = - [\epsilon_s \rho_s + (1 - \epsilon_s) \rho_l] g - \tau_{wm} \quad (2)$$

Balance de energía para la mezcla :

$$\frac{d}{dz} \left[\varepsilon_g \rho_g u \left(h_g + \frac{1}{2} u^2 \right) \right] + \frac{d}{dz} \left[(1 - \varepsilon_g) \rho_l u \left(h_l + \frac{1}{2} u^2 \right) \right] = q_{wm} + \left[\varepsilon_g \rho_g + (1 - \varepsilon_g) \rho_l \right] g \quad (3)$$

Curva de Equilibrio :

$$T = T_b [A \ln(P_{ad}) + B \ln^2(P_{ad}) + C \ln^3(P_{ad}) + D \ln^4(P_{ad})] \quad (4)$$

con,

$$P_{ad} = \frac{P}{P_o} \quad (5)$$

Ecuación de Estado de los Gases :

$$P M = \rho_g R T \quad (6)$$

En forma genérica el modelo que nos ocupa, queda definido por un sistema de ecuaciones diferenciales no lineales sujeto a condiciones iniciales, con ecuaciones algebraicas no lineales acopladas, que luego de ser tratadas se pueden escribir como,

$$\mathbf{B}(\mathbf{y})_{(m \times n)} \left[\frac{d\mathbf{y}}{dz} \right]_{(n \times 1)} = \mathbf{F}(\mathbf{y})_{(m \times 1)} \quad (m \leq n) \quad (7)$$

$$\mathbf{0}_{[(n-m) \times 1]} = \mathbf{G}(\mathbf{y})_{[(n-m) \times 1]} \quad (8)$$

sujeto a las condiciones iniciales,

$$\mathbf{y}_o = \mathbf{y}(z = 0) \quad (9)$$

PRIMERA ESTRATEGIA DE RESOLUCIÓN

Para encontrar la solución del sistema de ecuaciones presentado, se propuso en primer lugar, explicitar las derivadas de las variables individuales (Adam y Marchetti [2]). Para ello todas las derivadas de los productos de las variables son expandidas en base a las derivadas de las variables individuales y el conjunto es reordenado para formar un sistema matricial-vectorial que permite la resolución simultánea de las ecuaciones. En otras palabras el sistema de ecuaciones puede ser escrito como :

$$\underline{\mathbf{A}} \frac{d}{dz} [\underline{\mathbf{y}}] = \underline{\mathbf{b}} \quad (10)$$

sujeto a condiciones iniciales,

$$\mathbf{y}_o = \mathbf{y}(t = 0) \quad (11)$$

Debe prestarse atención en ésta estrategia de resolución a los siguientes detalles:

1.- Se trata de un sistema de ecuaciones diferenciales no lineales sujeto a condiciones iniciales con ecuaciones algebraicas no lineales acopladas. Por lo tanto, para obtener el sistema de ecuaciones diferenciales (10) se debió derivar las ecuaciones (4) y (6) respecto a la coordenada axial.

2.- El tubo donde se produce el proceso de evaporación se divide en tramos iguales, según se indica en figura 1, a fin de tener una descripción conveniente del estado de las variables

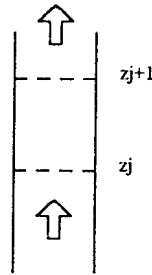


Figura 1: Tramo de Integración Genérica

3.- Adam y Marchetti [2] proponen para su resolución, la linealización del sistema de ecuaciones, tomando a la matriz A y al vector b como constantes e iguales al valor que poseen en la entrada de cada tramo de integración, o sea,

$$\frac{d}{dz}[\underline{y}] = \underline{A}^{-1} \underline{b} \quad (12)$$

4.- Para la integración de la ecuación (12) se adoptó el método de Runge-Kutta de 4to - 5to orden semiplicito de paso adaptivo por resultar éste un método sencillo y robusto.

Esta estrategia no presenta inestabilidad numérica, sin embargo debe prestarse atención al condicionamiento numérico de la matriz A , la cual contiene coeficientes de distintos órdenes de magnitud.

SEGUNDA ESTRATEGIA DE RESOLUCIÓN

Si se integra la ecuación (7) con respecto a la coordenada axial, entre z_j y z_{j+1} , se tendrá,

$$\int_{z_j}^{z_{j+1}} [B(y(z)) \frac{dy}{dz}] dz = \int_{z_j}^{z_{j+1}} [F(y(z))] dz \quad , \quad (13)$$

lo que se puede reescribir,

$$\int_{y(z_j)}^{y(z_{j+1})} [\mathbf{B}(y(z))]\,dy = \int_{z_j}^{z_{j+1}} [\mathbf{F}(y(z))]\,dz . \quad (14)$$

Admitiendo que el paso de integración es lo suficientemente pequeño como para suponer una variación lineal de cada integrando de la ecuación (14), entonces cada integral es aproximable por el área de un trapecio. Para el lado izquierdo de dicha ecuación,

$$\int_{y(z_j)}^{y(z_{j+1})} [\mathbf{B}(y(z))]\,dy \approx \{\mathbf{B}(y(z_n)) + \mathbf{B}(y(z_{n+1}))\} \frac{\Delta y}{2} , \quad (15)$$

donde,

$$\Delta y = y(z_{n+1}) - y(z_n) . \quad (16)$$

Para el lado derecho,

$$\int_{z_j}^{z_{j+1}} [\mathbf{F}(y(z))]\,dz \approx \{\mathbf{F}(y(z_n)) + \mathbf{F}(y(z_{n+1}))\} \frac{\Delta z}{2} , \quad (17)$$

Adoptando por simplicidad la siguiente notación,

$$y_n = y(z_n) , \quad (18)$$

$$y_{n+1} = y(z_{n+1}) , \quad (19)$$

y reemplazando (15) y (17) en (14), se tiene,

$$\frac{1}{2} [\mathbf{B}(y_n) + \mathbf{B}(y_{n+1})] \Delta y = \frac{1}{2} [\mathbf{F}(y_n) + \mathbf{F}(y_{n+1})] \Delta z . \quad (19)$$

Finalmente reordenando (19), (8) y (9) el problema ahora a resolver se presenta como,

$$\left[\frac{1}{2} \mathbf{B}(y_{n+1}) + \frac{1}{2} \mathbf{B}(y_n) \right] \left[\frac{y_{n+1} - y_n}{z_{n+1} - z_n} \right] = \left[\frac{1}{2} \mathbf{F}(y_{n+1}) + \frac{1}{2} \mathbf{F}(y_n) \right] \quad (20)$$

$$0 = \mathbf{G}(y_{n+1}) \quad (21)$$

sujeto a las condiciones iniciales,

$$y_0 = y(z = 0) \quad (22)$$

El conjunto de ecuaciones (20), (21) y (22) surge bajo la hipótesis de una variación lineal del integrando para un intervalo de integración suficientemente pequeño. Sin embargo si se aplica el teorema del valor medio del cálculo integral al lado derecho de la ecuación (14), se tiene,

$$\int_{y(z_j)}^{y(z_{j+1})} [\mathbf{B}(y(z))]\,dy = \mathbf{B}(y(z_\zeta)) \Delta y \quad (23)$$

con $z_\zeta \in \Delta z$.

Es posible demostrar para el lado derecho de la ecuación (23) que existe un valor de α tal que cumpla,

$$B(y(z_c)) = \alpha B(y(z_{n+1})) + (1 - \alpha)B(y(z_n)) \quad , \quad (24)$$

donde ,

$$0 < \alpha < 1 \quad . \quad (25)$$

Similar razonamiento puede ser aplicado al lado derecho de la ecuación (14),

$$F(y(z_c)) = \beta F(y(z_{n+1})) + (1 - \beta)F(y(z_n)) \quad , \quad (26)$$

donde,

$$0 < \beta < 1 \quad . \quad (27)$$

Luego, llevando (23), (24), y (26) a (14), junto con (11) y (12), el problema numérico puede ser escrito en forma más general,

$$[\alpha B(y_{n+1}) + (1 - \alpha) B(y_n)] \left[\frac{y_{n+1} - y_n}{z_{n+1} - z_n} \right] = [\beta F(y_{n+1}) + (1 - \beta) F(y_n)] \quad (28)$$

$$0 = G(y_{n+1}) \quad (29)$$

sujeto a las condiciones iniciales,

$$y_* = y(z = 0) \quad (30)$$

Debe prestarse atención en ésta segunda estrategia de resolución a los siguientes detalles,

1.- El modelo se ha transformado ahora un *sistema de ecuaciones algebraicas no lineales*. En este trabajo se utilizó para su resolución el método de Newton, con el cual se obtuvieron buenos resultados.

2.- En forma similar a lo realizado en la primera estrategia, el tubo se divide en tramos iguales, según figura 1, y se procede a la resolución.

SIMULACIÓN NUMÉRICA

Se busca encontrar cual de las dos estrategias anteriores es la mejor para realizar simulaciones numéricas, y detectar problemas que puedan surgir debido a los distintos criterios utilizados. Para ello se propone aplicar ambas estrategias al siguiente problema: Simular un tubo vertical de 3 metros de longitud en cuyo interior circula agua que cambia de fase debido al calor entregado en la pared por un vapor de calefacción y a la pérdida de presión que sufre en su ascenso.

En las figuras 2, 3, 4, 5 y 6 se puede observar una coincidencia prácticamente total en los resultados, cuando los parámetros α y β son puestos en 0.5. Cuando dichos parámetros toman los valores 0 ó en 1, se observa una diferencia tanto por exceso como por defecto según sea la variables, en comparación con la primera estrategia.

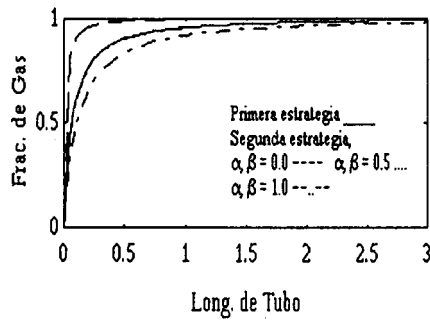


Figura 2: Fracción de gas vs. Long. de Tubo

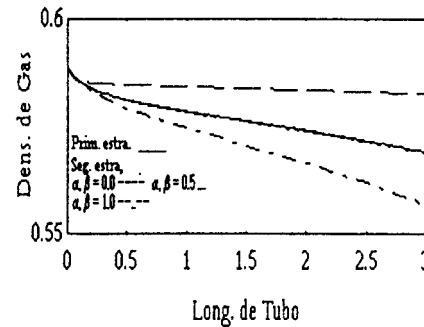


Figura 3: Densidad de gas vs. Long. de Tubo

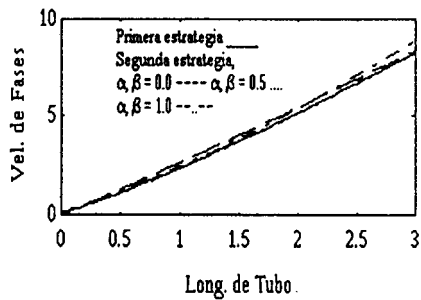


Figura 4 : Velocidad vs. Long. de Tubo

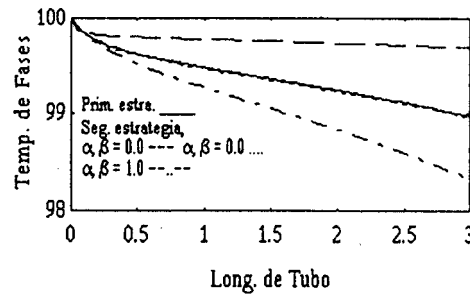


Figura 5: Temperatura vs. Long. de Tubo

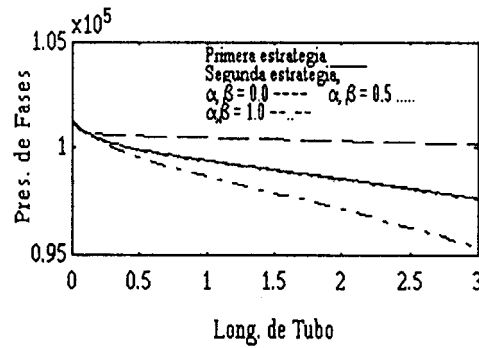


Figura 6: Presión vs. Long. de Tubo

Es de destacar que los tiempos computacionales son considerablemente menores cuando se aplica la segunda estrategia, ya que ésta utiliza un paso fijo de integración, mientras que en el caso de la primera estrategia el método de Runge-Kutta semiplicito de paso adaptivo necesita obligadamente reducir el paso

en cada tramo de integración particularmente cuando el comportamiento de las variables del sistema es "stiff".

Otra razón por la cual segunda forma de resolver el sistema de ecuaciones diferenciales requiere un bajo tiempo de cálculo, está relacionado con que el método de Newton tiene convergencia cuadrática, y esto en la práctica ha demostrado que conduce a tiempos computacionales bajos en comparación con otros métodos que presentan diferentes índices de convergencia.

En la figura 7 se pueden observar los diferentes tiempos computacionales obtenidos para ambas estrategias,

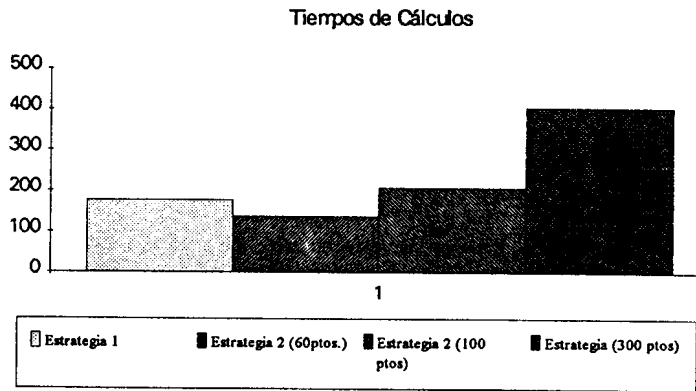


Figura 7: Tiempo de Cálculo de los Diferentes Métodos en Segundos.

En cuanto a la primera estrategia dado, que el orden de magnitud de las propiedades físicas que intervienen en los coeficientes son muy disímiles entre sí, es de esperar que la matriz A presente coeficientes muy diferentes. Además como consecuencia de que no todos los coeficientes y las propiedades se presentan en todas las ecuaciones de balance, dicha matriz es rara, a continuación se muestra la estructura de la matriz A, y de los vectores y y b,

$$\underline{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & 0 & a_{35} \\ 0 & 0 & 0 & a_{44} & a_{45} \\ 0 & a_{52} & 0 & a_{54} & a_{55} \end{bmatrix}, \quad \underline{y} = \begin{bmatrix} \varepsilon_z \\ \rho_z \\ u \\ T \\ P \end{bmatrix}, \quad \underline{b} = \begin{bmatrix} 0 \\ b_2 \\ b_3 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (31), (32) \text{ y } (33)$$

El problema planteado genera una matriz mal condicionada. Una medida del condicionamiento es el número de condición espectral dado por,

$$K_2(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 \quad (34)$$

Dicho número de condición se encuentra fuertemente relacionado con los errores relativos, como lo muestra Ralston y Rabinowits [3].

A fin de mejorar el condicionamiento del sistema, se incorporan operaciones algebraicas conocidas como "equilibrado", con el objeto de balancear los coeficientes de la matriz.

Dado que los coeficientes de la matriz A y del vector b son muy diferentes, la operación de redondeo puede llevar a anular elementos, lo cual puede afectar el rango de la matriz dirigiendo el cálculo a una singularidad. Esto obliga a aplicar una cuidadosa política de redondeo.

CONCLUSIONES

En este trabajo se presenta un análisis de dos estrategias de resolución de un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas no lineales sujetas a condiciones iniciales, y acompañadas de restricciones algebraicas acopladas.

Ambas estrategias son aplicadas a un ejemplo ingenieril concreto como es el caso de un flujo de dos fases en estado estacionario, mostrando una coincidencia prácticamente total en sus resultados. Además se puede observar que los tiempos de cálculo resultan ser menores aplicando la segunda estrategia.

En sistemas físicos donde hay una coexistencia de más de una fase, éstas presentan naturalmente propiedades físicas muy disímiles, lo cual hace que el sistema por su propia naturaleza induzca hacia modelos con matrices mal condicionadas. Una de las posibilidades con que se cuenta para mejorar este condicionamiento es el procedimiento conocido como equilibrado. Por otra parte, parece siempre conveniente primero adimensionalizar las ecuaciones, para luego hacer tratamiento de equilibrado de la matriz.

Finalmente se puede afirmar, que en problemas de este tipo la única forma de garantizar resultados satisfactorios es trabajando con doble precisión en todas las variables. Como contrapartida, el tiempo de máquina puede aumentar sensiblemente por lo que es frecuente recurrir a una solución de compromiso.

NOTACIÓN

- A : coeficiente de la ecuación de Antoine modificada.
- A : matriz de los coeficientes para la primer estrategia.
- b : vector de términos independientes para la primera estrategia.
- B : matriz de coeficientes para el modelo general o para la segunda estrategia.
- B, C y D : coeficientes de la ecuación de Antoine modificada.
- F : vector de términos independientes para el modelo general o para la segunda estrategia.
- g : constante gravitacional, m/s².
- G : conjunto de ecuaciones algebraicas no lineales para el modelo general o para la segunda estrategia.
- h : entalpía, joule/sm²K.
- P : presión, N/m².
- Pad: Presión adimensional.
- q : calor intercambiado, joule/sm³.
- M : Peso molecular, Kg/Kmol.

R : constante universal de los gases.
T : temperatura, °K
u : velocidad de las fases de acuerdo al modelo homogéneo, m/s.
y : vector de las variables a integrar.
z : coordenada axial de integración.

Letras Griegas

ε : fracción de volumen de la fase vapor
 ρ : densidad de la fase, Kg/m³.
 τ : tensor de tensiones

Subíndices

g : gas.
l : líquido.
m : mezcla.
w : pared.
o : condición de entrada al tubo (o condición inicial).

REFERENCIAS

1. Holland, C. D. y Liapis, A. I., Computer Methods for Solving Dynamic Separation Problems, McGraw - Hill Book Company, (1983).
2. Adam, E. J., Marchetti, J. L., "Modelo Estacionario de Evaporación en Tubos Verticales", CIT, vol. 5, Nro. 3, 1994, págs 67-76.
3. Ralston, A. y Rabinowitz, P., A First Course in Numerical Analysis, McGraw-Hill, Inc., (1978).