Métodos Computacionales

Taller 6 - Ecuaciones diferenciles ordinarias y parciales

Profesor: Sebastián Pérez Saaibi

Fecha de Publicación: *Marzo 23 de 2015*

Fecha de Entrega: **Abril 22 de 2015 antes de las 23:59 COT**

Instrucciones de Entrega

Todo el código fuente y los datos se debe encontrar en un repositorio público en github con un commit final hecho antes de la fecha de entrega. El nombre del repositorio debe ser `CM20151_HW6_Apellido1Apellido2`. El link al repositorio lo deben enviar a través de **sicuaplus** antes de la fecha/hora límite. Se hará una entrega parcial de discusión de progreso el Jueves 16 de Abril 07:00 COT. Esa entrega entrega parcial es obligatoria para que su taller tenga nota distinta de cero.

En cada parte del ejercicio se entrega 1/3 de los puntos si el código propuesto es razonable, 1/3 si se puede ejecutar y 1/3 si entrega resultados correctos.

1. $\boxed{\text{50 pt}}$ **El fin del mundo?**

Se ha descubierto un supuesto asteroide que al parecer va a pasar por la tierra, la NASA ha contratado a los estudiantes de Métodos Computacionales para que encuentren la orbita de dicho asteroide y determinen si realmente constituye un peligro para la tierra. Para esto hay que resolver la ecuación gravitacional:

$$\frac{d^2\vec{r_i}}{dt^2} = \sum_{j=1,j!=i}^{N} \frac{Gm_j(r_i - r_j)}{|\vec{r_i} - \vec{r_j}|^3} \tag{1}$$

Considere el sistema **Tierra-Sol-Luna-Asteroide**, con las siguientes condiciones iniciales:

- $x_{sol} = y_{sol} = z_{sol} = 0$
- $x_{tierra} = 1, y_{tierra} = z_{tierra} = 0$
- $x_{luna} = 1.0026, y_{luna} = 0, z_{luna} = 0$
- $x_{ast} = 1, y_{ast} = 0.0963, z_{ast} = 0$
- $Vx_{sol} = Vy_{sol} = Vz_{sol} = 0$
- $Vx_{tierra} = 0, Vy_{tierra} = 30km/s, Vz_{tierra} = 0$
- $Vx_{luna} = 0, Vy_{luna} = 1.023km/s, Vz_{luna} = 0$
- $Vx_{ast} = 1570km/s, Vy_{ast} = 0, Vz_{ast} = 29959km/s$
- $M_{sol} = 1$, $M_{tierra} = 3.003E-6$, $M_{luna} = 3.695E-8$, $M_{ast} = 5E-11$

(a) $\boxed{\text{30 pt}}$ Escriba un codigo en C (`4body.c`) que resuelva la ecuación 1 usando Runge-kutta4 teniendo en cuenta las condiciones iniciales. El codigo debe leer un archivo con las condiciones iniciales *ic.txt*. Adicionalmente el codigo debe compilarse así:

```
./4body.x ic.txt h t
```

Donde $h = x - x_0$ y $t = N/h$ es el tiempo, ajuste N de tal forma que la tierra de una orbita completa alrededor del Sol. El codigo debe escribir un archivo `orbitas.txt` con las orbitas del Sol, Tierra, Luna, Asteroide en coordenadas cartesianas. Haga esto para dos tiempos diferentes $t_1 = 1$ año terrestre y $t_2 = 1000$ años terrestres.

(b) $\boxed{\text{10 pt}}$ Escriba un codigo en python `treyectorias.py` que lea el archivo `orbitas.txt` y haga graficas en el plano (X, Y) de las orbitas, este programa debe generar dos figuras $orbitas - 1yr.png$ y $orbitas - 1000yr.png$ correspondientes a los tiempos t_1 y t_2.

(c) $\boxed{\text{10 pt}}$ Escriba un Makefile que compile y ejecute todos los programas.

2. $\boxed{\text{50 pt}}$ **Difusión en un reactor tubular**

Un fluído newtoniano se mueve dentro de un reactor químico tubular con flujo laminar, de la siguiente manera:

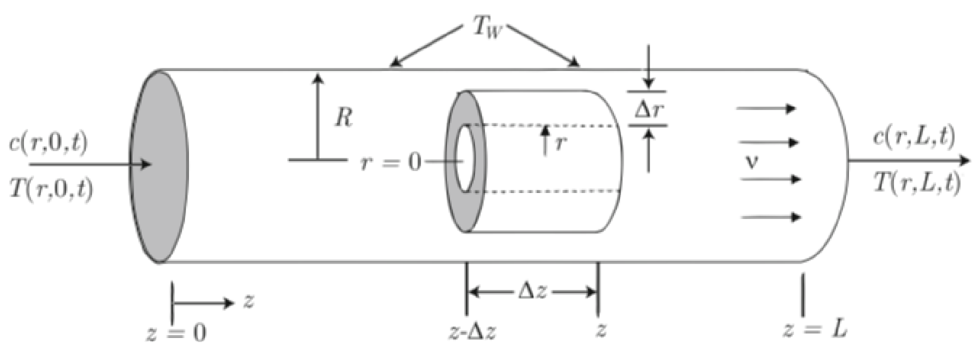

Figura 1: Reactor Tubular

En dos dimensiones el problema del reactor se puede plantear con sus respectivos balances de masa y energía, incluyendo convección, difusión y una reacción química.

Se puede expresar de la siguiente manera

$$c_t = -v(r)c_z + D(c_{zz} + c_{rr} + \frac{1}{r}c_r) - r(c,T)$$
$$T_t = -v(r)T_z + \frac{\lambda}{\rho c_p}(T_{zz} + T_{rr} + \frac{1}{r}T_r) + \frac{-\Delta H}{\rho c_p}r(c,T)$$

Donde $r(c,T) = k_0 \exp(-\frac{E}{RT})c^2$. El perfil de velocidad de flujo parabólico corresponde a $v(r) = v_{max}(1 - (\frac{r}{R})^2)$.

Las **condiciones iniciales** son:

$$c(r,z,0) = c_0(r,z)$$
$$T(r,z,0) = T_0(r,z)$$

Las **condiciones de frontera** son:

Simetría Radial sin transferencia de masa

$$c_r(0,z,t) = 0$$
$$T_r(0,z,t) = 0$$
$$c_r(R,z,t) = 0$$

Intercambio térmico con la pared

$$T_r(R,z,t) = \frac{h}{\lambda}(T_w - T(R,z,t))$$

Concentración y Temperatura constantes al interior del tubo

$$c(r,0,t) = c_{in}$$
$$T(r,0,t) = T_{in}$$

Difusión cero a la salida

$$c_z(r,L,t) = 0$$
$$T_z(r,L,t) = 0$$

(a) $\boxed{\text{5 pt}}$ Usando la regla de l'Hôpital, muestre que para $r = 0$, es decir, en el centro del tubo:

$$c_t = -vc_z + D(c_{zz} + 2c_{rr}) - r(c,T)$$
$$T_t = -vT_z + \frac{\lambda}{\rho c_p}(T_{zz} + 2T_{rr}) + \frac{-\Delta H}{\rho c_p} r(c,T)$$

(b) $\boxed{\text{35 pt}}$ Escriba un programa (en R, Python o C) que resuelva la PDE en 2D con el método de diferencias finitas. El programa debe mostrar la solución de manera gráfica para la concentración $c(r,z,t)$ y la temperatura $T(r,z,t)$. Puede usar gráficos en 3D o curvas de nivel.

(c) $\boxed{\text{10 pt}}$ Escriba un programa que resuelva el problema en 1D (es decir, resuelva para el centro del tubo y asuma que no hay diferencias con variaciones del radio). El programa debe mostrar la solución de manera gráfica para la concentración $c(z,t)$ y la temperatura $T(z,t)$. Use curvas de nivel.

Para su solución, puede usar las siguientes especificaciones

$$R = 1; L = 30; T_w = 100; k_0 = 10; E = 10$$

Nota: En general, escriba sus funciones para recibir valores distintos de dichos parámetros y de otros que no están especificados claramente $(\Delta H, \rho, \lambda, h, ...)$. De qué material es el reactor tubular? Cuáles son sus propiedades?Especifique sus supuestos claramente antes de la primera entrega.