

**ESTUDIO DEL COMPORTAMIENTO DE UNA BURBUJA DENTRO DEL
PROCESO DE PRODUCCIÓN DE BIODIESEL MEDIANTE MEZCLADO
ULTRASÓNICO**

Por

Carlos Javier Beltrán Sampayo

Tesis sometida en cumplimiento parcial
de los requisitos para el grado de

MAESTRO EN CIENCIAS

En

Matemática Aplicada

UNIVERSIDAD DE PUERTO RICO

RECINTO UNIVERSITARIO DE MAYAGÜEZ

2004

Aprobado por

Gooransarab Haedeh, Ph.D.
Miembro, Comité Graduado

Fecha

Rozga Krzysztof, Ph.D.
Miembro, Comité Graduado

Fecha

Portnoy Arturo, Ph.D.
Presidente, Comité Graduado

Fecha

Vásquez Urbano Pedro, Ph.D.
Director del Departamento

Fecha

José A. Colucci, Ph.D.
Representante Estudios Graduados

Fecha

ABSTRACT

Biodiesel is an environmental alternative to diesel. In its production process, it is necessary to mix alcohols and oils, immiscible fluids. Ultrasonic mixing creates cavities or bubbles that implode (phenomenon during which the speed of the bubble wall reaches the speed of sound in the medium), generating local jets that mix. In this work, we concentrate on the analysis of a single bubble that receives an ultrasonic stimulus looking to find an approximation to the energy liberated by the imploding bubble and its life span. This allows us, in theory, to distinguish, in terms of energy and life span, the optimal frequencies, pressure amplitudes and initial radii, that is, those that correspond to violent implosions and short bubble life span. Also, we have found a priori lower bound on the radius, and a general method, useful in studying non autonomous dynamical systems. This lower bound is essential in the error analysis of the numerical methods used.

RESUMEN

El Biodiesel es una alternativa ambiental y renovable para alimentar motores diesel. En el proceso de su producción es necesario mezclar aceites y alcoholes, líquidos inmiscibles. El método de mezclado ultrasónico genera cavidades o burbujas que implotan (fenómeno durante el cual la velocidad de las paredes de la burbuja alcanza la velocidad del sonido) generando “jets” (chorros) locales que mezclan. En este trabajo, nos centramos en el análisis del radio de una burbuja que recibe un estímulo ultrasónico previendo encontrar una aproximación de la energía liberada por ésta y su tiempo de vida, todo enmarcado dentro del fenómeno de implosión. Esto nos permite, en teoría, distinguir en términos de energía y tiempo de vida de la burbuja, las frecuencias, amplitud de presiones (que hacen parte del estímulo) y radios iniciales óptimos, es decir, que corresponden a implosiones más violentas en tiempos cortos de vida de la burbuja. Además, encontramos una cota inferior a priori del radio de la burbuja, y un método generado, útil en el estudio de sistemas dinámicos no autónomos. Esta cota es esencial en el análisis del error de los métodos numéricos utilizados.

*A **Jesús**, mi Señor, por que todo lo puedo en Él.
A mi **Familia**, que siempre la llevo en mi corazón.
Y a mi novia, **Talumy**, mi gran amor.*

AGRADECIMIENTOS

Primero que todo, agradezco a Dios por su bendición y por la cobertura de su Hijo en todo momento, en particular para lograr terminar este trabajo. En segundo lugar, a mi director de tesis, Ph.D. Arturo Portnoy, por sus oportunas asesorías y magistral dirección de toda la investigación. En tercer lugar, a Luis De La Torre por su ayuda para organizar los programas en Matlab. En cuarto lugar, al Departamento de Matemáticas por las facilidades necesarias para llevar a buen termino el estudio. Por ultimo, a mi novia y a mi familia por su apoyo moral, y al resto de las personas que de alguna u otra forma tuvieron que ver con mi estancia en Puerto Rico y con la realización de este trabajo, que aquí no alcanzan a ser mencionados.

TABLA DE CONTENIDO

TABLA DE CONTENIDO.....	vi
LISTA DE TABLAS	viii
LISTA DE FIGURAS	ix
1.INTRODUCCIÓN	10
1.1 JUSTIFICACIÓN	12
1.2 OBJETIVOS	13
1.3 TEORÍA	14
1.3.1 Cavitación, Implosión y Ultrasonidos.....	14
1.3.2 La Burbuja (⁴).....	15
1.3.2.1 Presión de la Superficie de Tensión.....	15
1.3.2.2 Burbuja en Equilibrio.....	16
1.3.2.3 Presión del Líquido	16
1.3.2.4 Líquidos Incompresibles	17
1.3.2 Ecuación de Rayleigh-Plesset (⁴)	18
1.3.3 Energía dentro de la burbuja (⁴)	21
1.3.4 Análisis Numérico.....	23
1.3.4.1 Métodos Runge-Kutta (RK).....	23
1.3.4.2 Teoremas y definiciones importantes:	24
1.4 REVISIÓN DE LITERATURA.....	25
1.4.1 Análisis de la ecuación de Rayleigh Plesset	26
1.4.2 Análisis Numérico del modelo.....	26
1.4.3 Biodiesel.....	27
2.ANÁLISIS DE LA ECUACIÓN	29
2.1 PLANTEAMIENTO INICIAL:	29
2.2 COTA PARA f :	31
2.3 COTA PARA EL GRADIENTE DE f :.....	31

2.4	ESTIMACIÓN Y EXISTENCIA DE τ :	33
2.5	f ES LIPSCHITZ-CONTINUA.....	37
2.6	COTA PARA LAS SEGUNDAS DERIVADAS DE f :.....	38
3.	ANÁLISIS DEL ERROR	41
3.1	EL MÉTODO NUMÉRICO	41
3.2	ERROR DE TRUNCAMIENTO LOCAL.....	42
3.3	ESTIMACIÓN DEL PASO	48
3.3.1	La función F es Lipschitz-continua.....	48
3.3.2	Φ es Lipschitz-continua	49
3.3.3	Estimación de h	51
4.	RESULTADOS.....	52
4.1	COMPARANDO LOS MÉTODOS NUMÉRICOS	52
4.2	ALGUNOS COMPORTAMIENTOS DEL RADIO	60
4.3	MAPA TRIDIMENSIONAL.....	64
5.	CONCLUSIONES	68
6.	RECOMENDACIONES TRABAJOS FUTUROS	71
7.	BIBLIOGRAFÍA	72
	APÉNDICE A	73
	A1. DEMOSTRACIÓN TEOREMA 1.3.2.....	73
	A2. DEMOSTRACIÓN TEOREMA 1.3.4 (³).....	73
	APÉNDICE B	76
	APÉNDICE C	79
	C.1 SEGUNDAS DERIVADAS A PARTIR DE f_x	79
	C.2 SEGUNDAS DERIVADAS A PARTIR DE f_y	79
	C.3 SEGUNDAS DERIVADAS A PARTIR DE f_t	80

LISTA DE TABLAS

Tabla 1. 1 Descripción de las constantes que aparecen en la ecuación Rayleigh-Plesset.....	20
Tabla 1. 2 Propiedades desde el punto de vista ambiental, social y físico del Biodiesel.....	27
Tabla 2. 1 Cálculo de $\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3$ tomando $\rho = 732$, $\sigma = 0.0725$, $\mu = 0.013$, $R_0 = 1 \cdot 10^{-6}$, $p_v = 350$, $p_0^\infty = 1.1 \cdot 10^5$, $p_A = 10^6$, $v_s = 1460$	35
Tabla 4. 1 Resultados de las corridas de los métodos Runge-Ketta (RK) clasico, variable, el método predictor corrector de Adams (Pred-Correct) y Matlab ode45.....	58

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.3 1 Las presiones de una burbuja estática de gas y vapor en un líquido.	15
Figura 1.3 2 Burbuja en un líquido incompresible.....	18
Figura 1.3 3 El radio de una burbuja, R , sometida a un estímulo ultrasónico; partiendo de un radio inicial R_0	21
Figura 2. 1 Familia de curvas de nivel para $E(x, y)$	36
Figura 4.1 1 RK paso variable de acuerdo a la desigualdad (3.19).....	53
Figura 4.1 2 RK con paso fijo tomado de $4.1667e-9$	54
Figura 4.1 3 RK con paso variable que depende de la tolerancia dada.....	55
Figura 4.1 4 Pred-corrector con paso fijo tomado de $2.0833e-9$	56
Figura 4.1 5 Ode 45 de Matlab, paso variable que depende de la tolerancia.....	57
Figura 4.1 6 Gráfica sobre un mismo plano de las corridas numéricas de los métodos en la tabla 4.2 1.	58
Figura 4.1 7 Aproximación de las curvas en la figura 4.1 6. Parte central.	59
Figura 4.1 8 Aproximación de las curvas en la figura 4.1 6. Parte final.....	59
Figura 4.2 1 Burbuja estable con radio inicial $20 \cdot 10^{-6}$, Amplitud de presión $0.6 \cdot 10^5$ y frecuencia $3.1 \cdot 10^4$	60
Figura 4.2 2 Burbuja inestable con radio inicial $20 \cdot 10^{-6}$, Amplitud de presión $2.4 \cdot 10^5$ y frecuencia $300 \cdot 10^4$	61
Figura 4.2 3 Burbuja con radio infinito. Radio inicial $20 \cdot 10^{-6}$, Amplitud de presión $2.4 \cdot 10^5$, frecuencia $3 \cdot 10^4$ y Presión de vapor $0.5 \cdot 10^5$	62
Figura 4.2 4 Burbuja con radio infinito. Radio inicial $20 \cdot 10^{-6}$, Amplitud de presión $30.4 \cdot 10^5$ y frecuencia $3 \cdot 10^4$	63
Figura 4.3 1 $P = 10$, R_0 de $2 \cdot 10^{-6}$ a $3 \cdot 10^{-6}$, p_A de $2.1 \cdot 10^5$ a $2.5 \cdot 10^5$ y Ω de $3.1 \cdot 10^4$ a $3.6 \cdot 10^4$	65
Figura 4.3 2 Energía máxima $6.9704 \cdot 10^{-4}$, Energía mínima $2.1493 \cdot 10^{-4}$, Tiempo máximo $1.5934 \cdot 10^{-4}$, Tiempo mínimo $1.3117 \cdot 10^{-4}$	65
Figura 4.3 3 $P = 10$, R_0 de $1 \cdot 10^{-6}$ a $2 \cdot 10^{-6}$, p_A de $150 \cdot 10^5$ a $160 \cdot 10^5$ y Ω de $10 \cdot 10^4$ a $10.5 \cdot 10^4$	66
Figura 4.3 4 Energía máxima 0.17173, Energía mínima 0.14509, Tiempo máximo $1.4045 \cdot 10^{-4}$, Tiempo mínimo $1.3373 \cdot 10^{-4}$	66
Figura 4.3 5 $P = 10$, R_0 de $10 \cdot 10^{-6}$ a $20 \cdot 10^{-6}$, p_A de $150 \cdot 10^5$ a $160 \cdot 10^5$ y Ω de $10 \cdot 10^4$ a $10.5 \cdot 10^4$	67
Figura 4.3 6 Energía máxima 0.15057, Energía mínima 0.10672, Tiempo máximo $1.4155 \cdot 10^{-4}$, Tiempo mínimo $1.3429 \cdot 10^{-4}$	67

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

Para entender el **comportamiento de una burbuja dentro del proceso de producción de Biodiesel mediante mezclado ultrasónico**, se mostraron algunas propiedades matemáticas (**Capítulo 2**) y se hizo un estudio numérico de la versión isotérmica y viscosa de la ecuación de Rayleigh–Plesset (¹). Esta ecuación modela el comportamiento del radio de una cavidad sometida a un estímulo ultrasónico teniendo en cuenta las condiciones físicas que imperan en el medio (**Sección 1.3.1 y 1.4.3**).

Dentro de ese proceso, se buscó implementar un método numérico que fuera capaz de detectar los cambios bruscos característicos de la ecuación. En esa medida, se probaron métodos como Runge-Kutta clásico, Runge-Kutta con paso variable, método predictor corrector de Adams y el método desarrollado en Matlab ode45 (**Sección 1.3.3**). En particular, se implementó además un Runge-Kutta propio con paso variable que dependía exclusivamente del análisis del error hecho para el método (**Sección 3.2 y 3.3**).

Por último, se resolvió numéricamente el problema planteado en el Capítulo 2 mostrando además algunos comportamientos del radio de la burbuja (**Sección 4.2**); en este aspecto se tendrán en cuenta los valores apropiados de las constantes físicas presentes en la versión de la ecuación de Rayleigh-Plesset con la que se está trabajando. Salvo en la figura 4.2 3, en donde se varió la presión de vapor fija por una más baja. Esto solo fue para mostrar ese comportamiento (caótico) en particular, pues nuestro mayor interés está en el fenómeno de implosión. Físicamente la variación de la presión de vapor depende de la temperatura, y se incorpora en el

modelo de la burbuja como una versión no isotérmica de la ecuación de Rayleigh-Plesset (⁴).

Luego se incluyeron varios mapas tridimensionales donde se muestran, de acuerdo a los resultados numéricos, las regiones más favorables de implosiones con desprendimiento de energía mayor (regiones en rojo) y las no favorables (regiones en azul), pasando por las regiones de un rendimiento intermedio (amarillo y verde). Las resoluciones que tienen las predicciones hechas en los mapas pueden variar dependiendo de la partición que se haga para los intervalos en que se tomen los valores iniciales, del procesador que se este utilizando para efectuar las corridas y de la plataforma usada para hacer las corridas numéricas.

Con respecto a la velocidad del sonido (v_s) utilizada a lo largo del trabajo, básicamente se tomaron dos valores. Uno es 1480 m/s y el otro 1460 m/s; el primero se documenta en (⁴) y es la velocidad del sonido en el agua, este se usó para hacer pruebas numéricas y compararlas con los resultados de la literatura. El segundo valor, se documenta en (⁶) y fue utilizado para obtener resultados con relación al mezclado ultrasónico para obtener Biodiesel; por ejemplo en todas las corridas de la **Sección 4.3** y en el proceso para obtener la cota inferior para el radio (**Sección 2.4**).

Dentro de este estudio, destacamos los resultados obtenidos en la **Sección 2.4** (proceso para obtener la cota inferior para el radio) y detallado en el **Apéndice C**, ya que ese proceso puede convertirse en una herramienta útil para atacar problemas dinámicos no-autónomos. De resultar el procedimiento en algo completamente original, habremos hecho un aporte significativo para aplacar las dificultades que generalmente vienen en los modelos que describen sistemas dinámicos.

1.1 JUSTIFICACIÓN

El Biodiesel es una alternativa ambiental y renovable para alimentar motores diesel. En el proceso de su producción es necesario mezclar aceites y alcoholes, líquidos inmiscibles. Este proceso de producción necesita ser rápido, efectivo y económico. El proceso tradicional involucra mezclado mecánico y este es ineficiente y costoso. Así, en la búsqueda de optimizar el proceso, se ha desarrollado un método alternativo de mezclado por medio de ultrasonido. Este promete ser más rápido, eficiente y económico que métodos tradicionales.

Dentro de este método, se forman cavidades o burbujas que posteriormente implotan generando “jets” o “chorros” locales que constantemente mezclan; es en este hecho que se centra la atención del presente trabajo. Por lo tanto en este trabajo buscamos encontrar, en términos numéricos, cantidades apropiadas para los valores iniciales (radio inicial, amplitud de presión y frecuencia de estímulo) y parámetros que promuevan la formación de burbujas con gran cantidad de energía final y tiempo de vida cortos hasta el momento de la implosión.

Nuestros esfuerzos están encaminados a entender este método de mezclado a partir del estudio de una burbuja.

1.2 OBJETIVOS

- Encontrar una cota inferior para el radio de una cavidad, que dependa de los parámetros físicos presentes en la versión isotérmica y viscosa de la ecuación Rayleigh-Plesset, y que permita hacer un análisis del error a priori.
- Resolver numéricamente la ecuación isotérmica y viscosa de Rayleigh-Plesset ⁽¹⁾ buscando lograr una buena aproximación de la solución. Verificar que los datos numéricos obtenidos se den de acuerdo a los procesos ya estudiados del comportamiento del radio de una burbuja sometida a un estímulo ultrasónico ⁽⁴⁾. Hacer un análisis del error del método numérico.
- Cuantificar en la forma más precisa el tiempo y la cantidad de energía total y energía de mezclado, liberada por la burbuja hasta la implosión.
- Mostrar en un mapa tridimensional las regiones más favorables de mayor energía en menor tiempo de implosión, a partir de la frecuencia, presión de amplitud y radio inicial de la burbuja.
- Contribuir de manera fundamental en la optimización del proceso para obtener Biodiesel usando mezclado ultrasónico.

1.3 TEORÍA

1.3.1 Cavitación, Implosión y Ultrasonidos

La **cavitación** es la formación y la acción de cavidades (en nuestro caso estas cavidades están llenas de vapor del líquido contenedor) en el interior de un líquido expuesto a un intenso estímulo ultrasónico. En un medio líquido, **las ondas ultrasónicas generadas por un transductor** crean ondas de compresión y depresión a altísima velocidad. Estas ondas de compresión y depresión en el líquido originan el fenómeno de la "cavitación". Durante la fase de la depresión, se "crean" en el interior del líquido una infinidad de burbujas (cavidades). Durante la segunda fase, la compresión, la enorme presión ejercida sobre estas burbujas hacen que estas se compriman, cargándose de energía para repetir la primera fase, o hasta hacerlas colapsar en sí mismas (**implosión**) con la consiguiente despedida de energía. Esta energía puede manifestarse como calor, o como energía cinética de mezclado a través de "jets" o chorros, o como luz (Sonoluminescencia). Nosotros estudiamos la ecuación isotérmica, por que estamos interesados en conocer el comportamiento de burbujas que al implotar, mezclan. Por otro lado, dado que se está estudiando el comportamiento de la burbuja a partir de su radio, definimos entonces el **fenómeno de implosión** como el instante en el cual la velocidad de la pared de la burbuja alcanza la velocidad del sonido en el líquido y forma así una discontinuidad o "shock".

La velocidad del sonido que se ha considerado es de 1460 m/seg según las condiciones dadas en la producción de Biodiesel ⁽⁶⁾ o 1480 m/seg si el líquido es agua. En cuanto al ultrasonido, se trata de ondas sonoras de frecuencia superior al límite máximo de audibilidad (16 Khz.); este tiende a ser dividido en tres categorías: ultrasonido de potencia (20-100 Khz.), de alta frecuencia (100 Khz.-1MHz) y de diagnostico (1-10MHz). En este trabajo, el rango de ultrasonidos a utilizar es desde el de potencia en adelante.

El fenómeno de Cavitación ha sido extensamente estudiado utilizando tanto la teoría lineal como la no lineal. No obstante, requiere de la teoría no lineal para poder tratar con el comportamiento de una burbuja que contiene gas o vapor tanto en usos hidrodinámicos como en usos donde la amplitud de presión acústica es relativamente alta.

1.3.2 La Burbuja ⁽⁴⁾

1.3.2.1 Presión de la Superficie de Tensión.

Para una burbuja esférica de radio R , que contiene gas y vapor, considere la figura A1. Allí se observa que la presión interna (p_i) es el resultado de sumar la presión del gas (p_g) y la presión de vapor del líquido (p_v), esto es

$$p_i = p_g + p_v \quad (1.1)$$

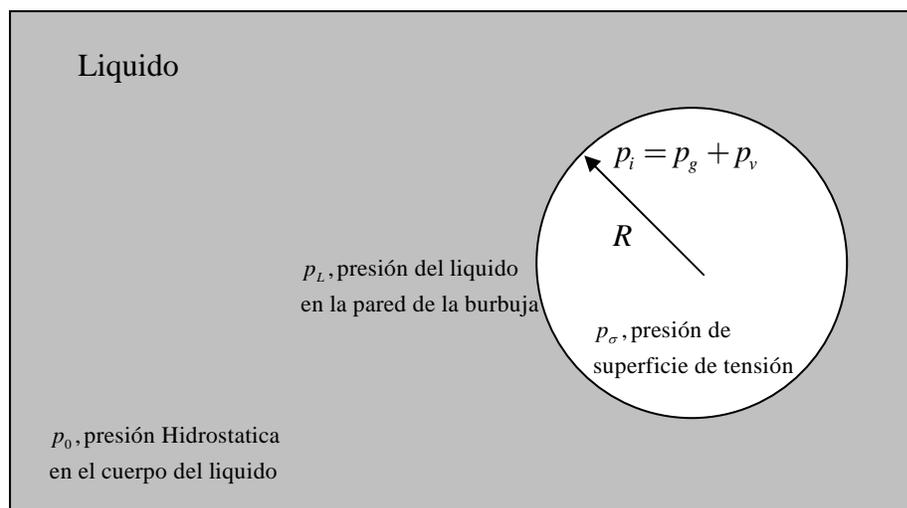


Figura 1.3 1 Las presiones de una burbuja estática de gas y vapor en un líquido.

Las presiones dentro de una burbuja en reposo son mayores que la presión en el líquido inmediatamente fuera de la burbuja como consecuencia de fuerzas de tensión superficiales. Si la presión en el líquido fuera de la burbuja, en la pared de la burbuja, es p_L , dentro de la burbuja es

$$p_i = p_L + p_\sigma. \quad (1.2)$$

De acuerdo al análisis hecho en (3), se deduce que

$$p_\sigma = \frac{2\sigma}{R}. \quad (1.3)$$

1.3.2.2 Burbuja en Equilibrio

Sea R_0 el radio de una burbuja esférica en equilibrio. La presión interna en equilibrio, $p_{i,e}$, según la sección anterior, depende de la presión del gas en equilibrio ($p_{g,e}$) y de la presión de vapor (p_v , que es constante). La presión en el líquido fuera de la burbuja, p_L , en el equilibrio es igual a la presión remota de la burbuja, p_∞ . Así, de las ecuaciones (1.1), (1.2) y (1.3) se obtiene que

$$p_{i,e} = p_{g,e} + p_v \quad (1.4)$$

$$p_\sigma = \frac{2\sigma}{R_0} \quad (1.5)$$

y

$$p_{i,e} = p_\infty + \frac{2\sigma}{R_0}. \quad (1.6)$$

1.3.2.3 Presión del Líquido

Se debe decir que la presión en el líquido cambia de p_0 en una manera cuasi-estática tal que fuera de la burbuja esta tiene valor p_L . En respuesta al cambio en la

presión del líquido, el radio de la burbuja cambiará de R_0 a R , y la presión del gas dentro de la burbuja, combinando (1.4) con (1.6) será

$$p_g = p_{g,e} \left(\frac{R_0}{R} \right)^{3\kappa} = \left(p_0 + \frac{2\sigma}{R_0} - p_v \right) \left(\frac{R_0}{R} \right)^{3\kappa}$$

asumiendo que el gas obedece la ley politrópica. Sustituyendo en la ecuación (1.1) da que la presión en la burbuja es

$$p_i = \left(p_0 + \frac{2\sigma}{R_0} - p_v \right) \left(\frac{R_0}{R} \right)^{3\kappa} + p_v$$

y de esta forma, de las ecuaciones (1.2) y (1.3) se obtiene que

$$p_L = \left(p_0 + \frac{2\sigma}{R_0} - p_v \right) \left(\frac{R_0}{R} \right)^{3\kappa} + p_v - \frac{2\sigma}{R} \quad (1.7)$$

donde κ es el índice politrópico (es isothermal cuando $\kappa = 1$).

1.3.2.4 Líquidos Incompresibles

Si un líquido es incompresible, entonces en un instante dado la tasa de masa de líquido que fluye por cualquier superficie esférica (el radio r) equicéntrica con la burbuja debe ser una constante. En el tiempo Δt , una masa de líquido $4\pi r^2 \rho \dot{r} \Delta t$ fluye a través de una superficie en algún radio general r fuera de la burbuja. Igualando esto al fluido en la pared de la burbuja da

$$\frac{\dot{r}}{\dot{R}} = \frac{R^2}{r^2}. \quad (1.8)$$

1.3.2 Ecuación de Rayleigh-Plesset (4)

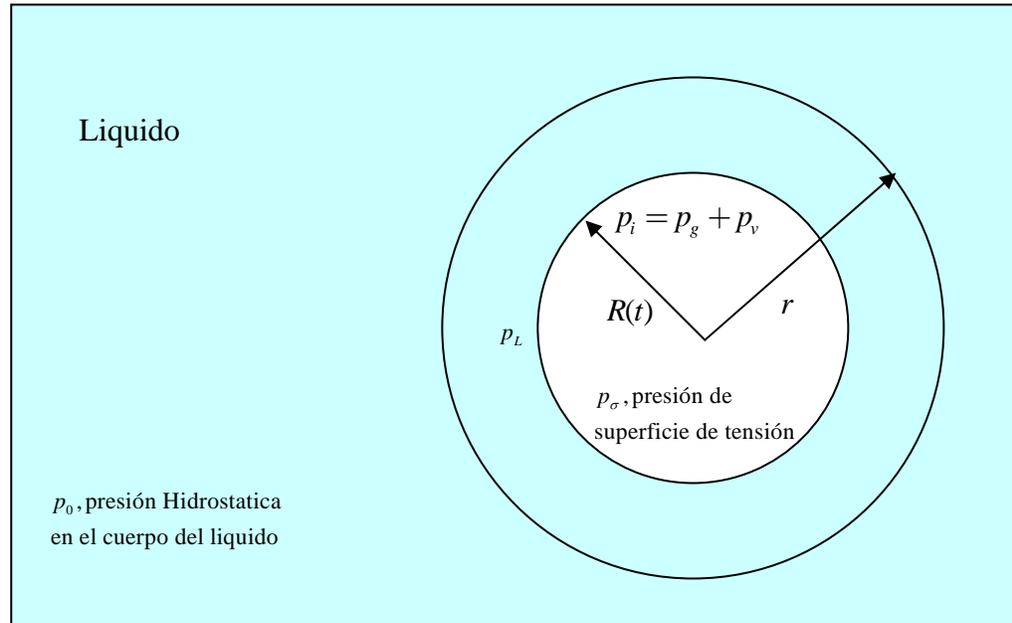


Figura 1.3.2 Burbuja en un líquido incompresible.

Para examinar la dinámica de la burbuja en amplitudes finitas, se toma en cuenta una ecuación aproximada, no lineal de movimiento. Esta ecuación describe la respuesta de una burbuja esférica a un campo de presión tiempo-variante en un líquido incompresible. En un tiempo $t = 0$, una burbuja de radio R_0 está en reposo en un líquido incompresible y viscoso. La presión hidrostática es constante, p_0 . En $t > 0$, una presión $P(t)$ que varía con el tiempo es superpuesta sobre p_0 , de modo que la presión del líquido en un punto remoto de la burbuja es $p_\infty = p_0 + P(t)$.

Consecuentemente el radio de la burbuja cambiará a algún nuevo valor $R(t)$. Durante este proceso, el líquido adquiere una energía cinética de

$$\frac{1}{2}\rho \int_R^\infty \dot{r}^2 4\pi r^2 dr \quad (1.9)$$

la cual (usando la condición de incompresibilidad del líquido $\dot{r}/\dot{R} = R^2/r^2$ dada en el apéndice A) puede ser integrada para dar $2\pi\rho R^3\dot{R}^2$. Igualando esto a la diferencia entre el trabajo hecho por p_∞ desde un punto remoto a la burbuja y el trabajo hecho por la presión p_L en el líquido justo fuera de la pared de la burbuja da

$$\int_{R_0}^R (p_L - p_\infty) 4\pi R^2 dR = 2\pi\rho R^3\dot{R}^2.$$

Derivando esta ecuación con respecto a R , notando que

$$\frac{\partial(\dot{R}^2)}{\partial R} = \frac{1}{\dot{R}} \frac{\partial(\dot{R}^2)}{\partial t} = 2\ddot{R}$$

da

$$\frac{p_L - p_\infty}{\rho} = \frac{3\dot{R}^2}{2} + R\ddot{R} \quad (1.10)$$

La presión del líquido p_L para una burbuja pulsante que contiene gas y vapor se puede apreciar en la Sección 1.3.2.3, aunque en la observación de la respuesta de la burbuja (por el efecto de la presión), p_L cambie a una presión cuasi-estática. Teniendo en cuenta esta restricción, la ecuación (1.7) puede ser substituida en la ecuación (1.1) y p_∞ expandido a $p_0 + P(t)$, para dar

$$R\ddot{R} + \frac{3\dot{R}^2}{2} = \frac{1}{\rho} \left\{ \left(p_0 + \frac{2\sigma}{R_0} - p_v \right) \left(\frac{R_0}{R} \right)^{3\kappa} + p_v - \frac{2\sigma}{R} - p_0 - P(t) \right\}. \quad (1.11)$$

Este tratamiento inicial puede ser mejorado para incorporar los efectos de viscosidad. Este procedimiento se puede apreciar en detalle en ⁽⁴⁾, donde se obtiene la ecuación

$$\rho \left[R\ddot{R} + \frac{3}{2}\dot{R}^2 \right] + 4\mu \frac{\dot{R}}{R} = \left(p_0^\infty - p_v + \frac{2\sigma}{R_0} \right) \left(\frac{R_0}{R} \right)^{3\kappa} + p_v - \frac{2\sigma}{R} - p_0 - P(t)$$

similar a (1.11). Ahora, considerando la condición isothermal ($\kappa = 1$) conseguimos la ecuación isotérmica y viscosa de Rayleigh-Plesset dada por:

$$\rho \left[R\ddot{R} + \frac{3}{2}\dot{R}^2 \right] + 4\mu \frac{\dot{R}}{R} = \left(p_0^\infty - p_v + \frac{2\sigma}{R_0} \right) \left(\frac{R_0}{R} \right)^3 + p_v - \frac{2\sigma}{R} - p_0^\infty + p_A \sin(\Omega t). \quad (1.12)$$

Tabla 1. 1 Descripción de las constantes que aparecen en la ecuación Rayleigh-Plesset.

	Nombre	Valores entre	Unidades
ρ	Densidad del líquido	732 y 998	Kg/m ³ .
μ	Viscosidad.	0.00035 y 0.013	Kg/m*s.
σ	Tensión superficial del líquido.	0.0227 y 0.0725	N/m.
p_v	Presión de vapor.	3000 y 200000	Pa.
p_0^∞	Presión ambiental.	10000 y 110000	Pa.

Esta modela el comportamiento del radio R de una burbuja a partir de un radio inicial R_0 , de una frecuencia Ω y una amplitud de presión p_A . El resto de las constantes que aparecen en la ecuación se describen en la tabla 1.1.

Esta ecuación se denomina isotérmica por que se presume una temperatura constante y se le denomina viscosa, por que a diferencia de otras versiones de la

ecuación Rayleigh-Plesset aparece el término $4\mu\frac{\dot{R}}{R}$, donde μ representa la viscosidad.

1.3.3 Energía dentro de la burbuja (4)

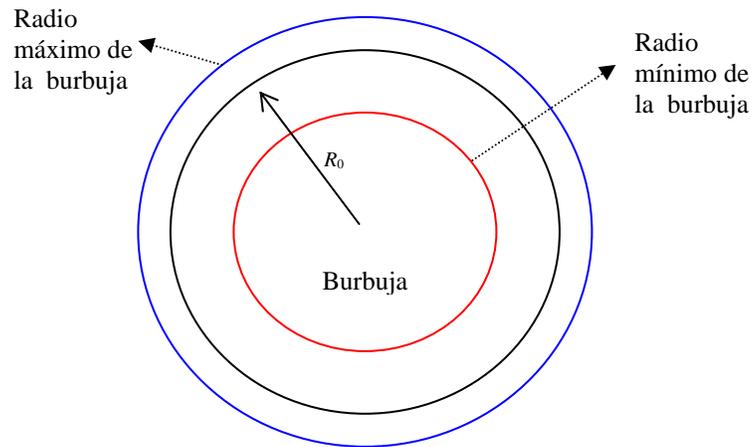


Figura 1.3 2 El radio de una burbuja, R , sometida a un estímulo ultrasónico varía entre un radio mínimo y un radio máximo; partiendo de un radio inicial R_0 .

De la fórmula (1.9), si $R = R(t)$ es el radio de la burbuja en un instante t , entonces la energía cinética dentro de la burbuja está dada por

$$\phi_k = \frac{1}{2}\rho \int_R^\infty \dot{r}^2 4\pi r^2 dr$$

que por la condición de incompresibilidad (1.8) nos da que

$$\phi_k = 2\pi\rho R^3 \dot{R}^2. \quad (1.13)$$

Por otro lado, el trabajo que se efectúa al interior de la burbuja para pasar de un volumen V_0 , que depende de R_0 , a un volumen V_R , que depende de R ; es la integral de $(p_g - p_0)dV$, esto es la energía potencial ϕ_P

$$\begin{aligned}\phi_P &= - \int_{R_0}^R (p_g - p_0) 4\pi r^2 dr \\ \phi_P &= -(p_g - p_0)(4/3)\pi(R^3 - R_0^3)\end{aligned}\quad (1.14)$$

Asumiendo que el gas se comporta politrópicamente ($p_g V^\kappa = \text{Constante}$ donde κ es el índice politrópico ⁽⁴⁾ y V el volumen de la esfera) y que el proceso es isotermal ($\kappa = 1$), entonces $p_g V = \text{Constante}$; luego igualando la presión y volumen en condiciones de equilibrio da $p_g (R)^3 = p_0 R_0^3$,

$$\frac{p_g}{p_0} = \left(\frac{R_0}{R}\right)^3 \quad (1.15)$$

de donde

$$p_g = p_0 \left(\frac{R_0}{R}\right)^3. \quad (1.16)$$

Por lo tanto, reemplazando (1.16) en (1.14), se obtiene que

$$\phi_P = - \left(p_0 \left(\frac{R_0}{R}\right)^3 - p_0 \right) 4\pi(R^3 - R_0^3) = \frac{4\pi p_0 (R^3 - R_0^3)^2}{3R^3}. \quad (1.17)$$

Finalmente, la energía total al interior de la burbuja, E_B , esta dada por

$$E_B = \phi_K + \phi_P \quad (1.18)$$

1.3.4 Análisis Numérico

1.3.4.1 Métodos Runge-Kutta (RK)

Runge-Kutta clásico:

Dado el problema de valor inicial

$$X' = F(t, X), \quad a \leq t \leq b, \quad X(a) = X_0.$$

Entonces el método se define por

$$\begin{aligned} \xi_0 &= X_0, \\ K_1 &= F(t_i, \xi_i), \\ K_2 &= F\left(t_i + \left(\frac{h}{2}\right), \xi_i + \left(\frac{h}{2}\right)K_1\right), \\ K_3 &= F\left(t_i + \left(\frac{h}{2}\right), \xi_i + \left(\frac{h}{2}\right)K_2\right), \\ K_4 &= F(t_i + h, \xi_i + hK_3), \\ \xi_{i+1} &= \xi_i + \left(\frac{h}{6}\right)(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4). \end{aligned}$$

Para cada $i = 0, 1, \dots, N - 1$.

De lo anterior se deduce que

$$\xi_{i+1} = \xi_i + h\Phi(t_i, \xi_i; h) \tag{1.20}$$

donde

$$\Phi(t_i, \xi_i; h) = \frac{K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4}{6}.$$

Runge Kutta con paso variable ⁽³⁾:

Este método consiste en comparar una corrida de un paso h del método Runge-Kutta $(\xi_{i+h}^{(1)})$ y una corrida de dos pasos para el mismo punto $(\xi_{i+h}^{(2)})$. La corrida de dos pasos se hace tomando pasos de tamaño $h/2$. Se calcula la diferencia entre esas dos aproximaciones y se procede a compararla con la tolerancia dada. Finalmente se

calcula el nuevo paso h a tomar, si es necesario en caso de que no se satisfaga la tolerancia dada (se repite la iteración) o en caso de estar por debajo de la tolerancia mínima estimada (se busca un paso h más grande); luego se hace la próxima iteración.

Método predictor corrector de Adams (²):

Este método utiliza tres valores iniciales w_1, w_2 y w_3 los cuales se calculan de las condiciones iniciales t_0, w_0 del problema utilizando el método RK. Luego estos tres valores se utilizan para predecir el siguiente valor a través de la fórmula

$$w = w_3 + h[55f(t_3, w_3) - 59f(t_2, w_2) + 37f(t_1, w_1) - 9f(t_0, w_0)]/24.$$

Finalmente se corrige este último valor encontrado a través de la fórmula

$$w = w_3 + h[9f(t, w) + 19f(t_3, w_3) - 5f(t_2, w_2) + f(t_1, w_1)]/24.$$

En la próxima corrida se hace $w = w_3, w_3 = w_2, w_2 = w_1$ y $w_1 = w_0$ y se procede como en el principio.

1.3.4.2 Teoremas y definiciones importantes:

Las demostraciones de los teoremas que aparecen en esta sección, se pueden apreciar en el Apéndice B.

Definición 1.3.1 Una función $f(t, x)$ es Lipschitz continua con respecto a x en un dominio $\mathfrak{R} \in \mathbb{R}^2$ si existe una constante $L > 0$ tal que

$$|f(t, x_1) - f(t, x_2)| < L|x_1 - x_2|$$

para todo $(t, x_1), (t, x_2) \in \mathfrak{R}$.

Teorema 1.3.2. Sea $f(t, x)$ diferenciable con respecto a x en un rectángulo \mathfrak{R} . Si existe una constante L tal que

$$\left| \frac{\partial f}{\partial x}(t, x) \right| \leq L$$

para todo (t, x) en \mathfrak{R} ; entonces f es Lipschitz continua con respecto a x con constante L .

Definición 1.3.3. Sea Φ la función que define un método numérico. El error de truncamiento local de un método de un paso es

$$\varepsilon_i(h) := x(t_{i+1}) - x(t_i) - h\Phi(t_i, x(t_i); h).$$

Teorema 1.3.4. Sea Φ Lipschitz continua con constante L en la variable x en un rectángulo $\mathfrak{R} = \{(t, x); t_0 \leq t \leq t_f, c \leq x \leq d\}$, donde $c \leq x(t_i), \xi_i \leq d$ para t_i , con $i = 0, \dots, N$. Entonces

$$\|x(t_i) - \xi_i\| \leq \frac{\varepsilon(h)}{hL} (e^{L(t_i - t_0)} - 1);$$

donde

$$\varepsilon(h) := \max_{0 \leq i \leq N-1} \|\varepsilon_i(h)\|.$$

1.4 REVISIÓN DE LITERATURA

En esta sección se incluyen comentarios sobre estudios realizados alrededor del análisis de la ecuación de Rayleigh Plesset en sus distintas formas. También se incluyen comentarios sobre trabajos que detallan la producción de Biodiesel en su parte química, estos permiten conocer las condiciones en las cuales se da dicha producción.

1.4.1 Análisis de la ecuación de Rayleigh Plesset

En “On acoustic cavitation of slightly subcritical bubbles” ⁽¹⁾ los autores hacen un estudio numérico y cualitativo de la versión isotérmica y viscosa de la ecuación Rayleigh-Plesset (1.12), pero con el objeto de estudiar cavidades inestables. A partir de la ecuación (1.12) los autores desarrollan la “ecuación del límite distinguido”, con la cual hacen todo el análisis numérico. Para ello tienen en cuenta tres parámetros de entrada (frecuencia, presión acústica y radio inicial) los cuales conducen, a través de la ecuación del límite distinguido, a un comportamiento del radio de la burbuja. Dentro de sus análisis se pueden apreciar varios comportamientos de la burbuja a excepción del de implosión. Nuestro análisis sigue ⁽¹⁾, en el sentido de que hacemos un estudio numérico del efecto de tres parámetros: frecuencia, amplitud y radio inicial sobre la energía liberada y tiempo de vida de la burbuja. Además parte de los experimentos numéricos que se hacen en esta tesis, se hacen teniendo en cuenta las condiciones que se usaron en esta publicación; por ejemplo, tomar el agua como medio para generar la cavitación.

Un estudio mucho más detallado de la cavitación por ultrasonido se encuentra en “the Acoustic Bubble” ⁽⁴⁾. Esta densa obra es una maravillosa recopilación de muchos de los resultados obtenidos sobre los diferentes tipos de cavitación hasta poco antes de su fecha de publicación (1997). La aportación de esta obra a este trabajo fue fundamental, ya que de ella se justificaron y tomaron las herramientas para derivar nuestro modelo matemático. De esta manera la notación que se utiliza en este trabajo (para los diferentes parámetros físicos) está dentro de lo estipulado en esta obra.

1.4.2 Análisis Numérico del modelo

Los métodos numéricos implementados en este trabajo han sido ampliamente estudiados y hasta optimizados por muchos autores. Se escogieron a ⁽²⁾ y ⁽³⁾ por su

fácil acceso y por que en ambos se encuentran perfectamente detallados los algoritmos necesarios para implementar los métodos. Además gran parte de la teoría necesaria se pudo encontrar en estos textos que finalmente se complementó con (7).

1.4.3 Biodiesel

En el siguiente cuadro se muestran las propiedades mas importantes del Biodiesel desde el punto de vista ambiental, social y fisico:

Tabla 1. 2 Propiedades desde el punto de vista ambiental, social y físico del Biodiesel. **III Foro Nacional de Biocombustibles** 29 y 30 de Octubre de 2003 (Argentina) (SAGPyA - UCES - Solution Partners)

- | |
|---|
| <ul style="list-style-type: none"> • Su producción es renovable. • Su proceso de producción primaria y elaboración industrial determina un balance de carbono menos contaminante que los combustibles fósiles. • Cumple con los requisitos de la Environmental Protection Agency (EPA) para los combustibles alternativos. • Puede emplearse puro o combinado con los combustibles fósiles en cualquier proporción. • No contiene azufre y por ende no genera emanaciones de este elemento, las cuales son responsables de las lluvias ácidas. • Mejor combustión, que reduce el humo visible en el arranque en un 30%. • Cualquiera de sus mezclas reduce en proporción equivalente a su contenido, las emanaciones de CO₂, CO, partículas e hidrocarburos aromáticos. Dichas reducciones están en el orden del 15% para los hidrocarburos, del 18% para las partículas en suspensión, del 10% para el óxido de carbono y del 45% para el dióxido de carbono. Estos indicadores se mejoran notablemente si se adiciona un catalizador. |
|---|

- Los derrames de este combustible en las aguas de ríos y mares resultan menos contaminantes y letales para la flora y fauna marina que los combustibles fósiles. Aunque los peces se afectan al entrar en contacto con el combustible.
- Volcados al medio ambiente se degradan mas rápidamente que los petrocombustibles.
- Su combustión genera menos elementos nocivos que los combustibles tradicionales reduciendo las posibilidades de producir cáncer.
- Es menos irritante para la epidermis humana.
- Actúa como lubricante de los motores prolongando su vida útil.
- Su transporte y almacenamiento resulta mas seguro que el de los petroderivados ya que posee un punto de ignición más elevado. El biodiesel puro posee un punto de ignición de 148°C contra los escasos 51°C del gasoil

En ⁽⁵⁾ se puede encontrar mas a cerca de la importancia del Biodiesel como combustible, además de sus propiedades químicas y de las propiedades de los compuestos que lo forman. También se puede apreciar allí las diferencias entre los resultados obtenidos variando los compuestos para la producción de Biodiesel (aceites vegetales o animales). Por otro lado en ⁽⁶⁾ el estudio se hace a un más detallado puesto que se explora la mezcla desde su parte mínima (una gota de aceite rodeada de metanol) teniendo en cuenta las condiciones extremas producidas por las implosiones de las burbujas. De ⁽⁶⁾ se tomaron los datos para hacer los experimentos numéricos bajo las condiciones de producción de Biodiesel, por ejemplo, velocidad del sonido en el medio (1460 m/s) así como también los valores de las presiones presentes en el modelo.

CAPÍTULO 2

ANÁLISIS DE LA ECUACIÓN

2.1 PLANTEAMIENTO INICIAL:

Con base en la ecuación isotérmica y viscosa de Rayleigh-Plesset (1.3), haciendo el cambio de variables $x = R$ y $y = \dot{R}$ pasamos de la ecuación (1.3) al siguiente sistema de ecuaciones no lineales para el cual $F: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^2$ y $f: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ son funciones tales que si $X(t) = \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$, se satisface el problema

$$\dot{X}(t) = F(x(t), y(t), t)$$

o lo que es lo mismo

$$\begin{pmatrix} \dot{x}(t) \\ \dot{y}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y(t) \\ f(x(t), y(t), t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y \\ f \end{pmatrix}.$$

Donde

$$f(x, y, t) = -\frac{3y^2}{2x} - \frac{Ay}{x^2} + \frac{B}{x^4} + \frac{C}{x} - \frac{D}{x^2} + \frac{E \sin(Ft)}{x}. \quad (2.1)$$

Las constantes A, B, C, D, E y F , que dependen de los parámetros físicos establecidos en la ecuación (1.3), las definiremos a continuación:

$$A = \frac{4\mu}{\rho}.$$

$$B = (p_0^\infty - p_v + \frac{2\sigma}{R_0}) \frac{R_0^3}{\rho}.$$

$$C = \frac{p_v - p_0^\infty}{\rho}. \quad (2.2)$$

$$D = \frac{2\sigma}{\rho}.$$

$$E = \frac{p_A}{\rho}.$$

$$F = \Omega.$$

Ahora, dado que x representa el radio de la burbuja en un instante t y existe una presión en la mezcla producida por la aplicación de ultrasonido (p_A), entonces cuando la velocidad del radio supera la velocidad del sonido, la burbuja implota. Esto es, la burbuja implota cuando $|\dot{x}| \geq 1480 \text{ m/s}$ (velocidad del sonido en el agua). Por lo tanto, la burbuja se mantiene mientras que $|y| = |\dot{x}| \leq 1480 \text{ m/s}$. Estas condiciones serán asumidas durante todo nuestro estudio, excepto cuando se indique lo contrario. En particular, se asumirá esto para probar que la función F es Lipschitz continua. Pero, ya que

$$F(x, y, t) = \begin{pmatrix} y \\ f(x, y, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y \\ f \end{pmatrix}$$

y como la derivada del radio y se encuentra acotada, entonces solo restó probar que $f(x, y, t)$ es Lipschitz continua en x e y . Por lo tanto, a continuación se muestra que

el gradiente de f , con respecto a x e y , está acotado. A priori buscaremos una cota para f .

2.2 COTA PARA f :

Desde la ecuación (2.1) vemos que

$$|f| \leq \frac{3y^2}{2x} + \frac{|A||y|}{x^2} + \frac{|C|+|E|}{x} + \frac{|D|}{x^2} + \frac{|B|}{x^4}. \quad (2.3)$$

de donde, como $|y| \leq vs$ (con $vs = 1480$ m/seg la velocidad del sonido en el agua ⁽⁴⁾) se obtiene que

$$|f| < \frac{C_1 vs^2}{\tau^4} \quad (2.4)$$

para algún τ tal que $0 < \tau < x$, con $C_1 = \frac{3}{2} + |A| + |C| + |E| + |D| + |B|$.

Nota: En las operaciones para calcular C_1 solo se tiene en cuenta el valor numérico de las cantidades, no las dimensiones.

2.3 COTA PARA EL GRADIENTE DE f :

En efecto, de acuerdo con (2.1), tenemos lo siguiente:

$$f_x = \frac{\partial f}{\partial x}(x, y, t) = \frac{3y^2}{2x^2} + \frac{2Ay}{x^3} - \frac{4B}{x^5} - \frac{C}{x^2} + \frac{2D}{x^3} - \frac{E \sin(Ft)}{x^2}$$

de donde, por ser x positivo

$$\begin{aligned} |f_x| &= \left| \frac{\partial f}{\partial x}(x, y, t) \right| = \left| \frac{3y^2}{2x^2} + \frac{2Ay}{x^3} - \frac{4B}{x^5} - \frac{C}{x^2} + \frac{2D}{x^3} - \frac{E \sin(Ft)}{x^2} \right| \\ &\leq \frac{3y^2}{2x^2} + \frac{2|A||y|}{x^3} + \frac{4|B|}{x^5} + \frac{|C|}{x^2} + \frac{2|D|}{x^3} + \frac{|E||\sin(Ft)|}{x^2} \\ &\leq \frac{3y^2}{2x^2} + \frac{2|A||y|}{x^3} + \frac{4|B|}{x^5} + \frac{|C|}{x^2} + \frac{2|D|}{x^3} + \frac{|E|}{x^2} \end{aligned}$$

obteniendo

$$|f_x| \leq \frac{3y^2}{2x^2} + \frac{2|A||y|}{x^3} + \frac{4|B|}{x^5} + \frac{|C|}{x^2} + \frac{2|D|}{x^3} + \frac{|E|}{x^2}. \quad (2.5)$$

De igual manera se obtiene que

$$\begin{aligned} f_y &= -\frac{3y}{x} - \frac{A}{x^2} \\ |f_y| &\leq \frac{3y}{x} + \frac{|A|}{x^2}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Y finalmente

$$f_t = \frac{EF \cos(Ft)}{x},$$

de donde,

$$|f_t| = \left| \frac{EF \cos(Ft)}{x} \right| = \frac{|EF||\cos(Ft)|}{x} \leq \frac{|EF|}{x}. \quad (2.7)$$

Ahora, de las desigualdades (2.5) y (2.6) se observa que

$$\begin{aligned} \|\nabla f\| &= \sqrt{(f_x)^2 + (f_y)^2} \leq |f_x| + |f_y| \\ &\leq \frac{3y}{x} + \frac{3y^2}{2x^2} + \frac{2|A||y|}{x^3} + \frac{|A|+|C|+|E|}{x^2} + \frac{2|D|}{x^3} + \frac{4|B|}{x^5}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Ahora de (2.8), teniendo en cuenta las mismas condiciones que en (2.4) (con $v_s = 1480$ la velocidad del sonido en el agua) se obtiene que para algún τ tal que $0 < \tau < x$,

$$\|\nabla f\| \leq \frac{C_2 v_s^2}{\tau^5} \quad (2.9)$$

con $C_2 = 6 + 3|A| + |C| + |E| + 2|D| + 4|B|$.

Nota: En las operaciones para calcular C_2 solo se tiene en cuenta el valor numérico de las cantidades, no las dimensiones.

2.4 ESTIMACIÓN Y EXISTENCIA DE τ :

La existencia de este valor está determinada desde un punto de vista físico a partir del hecho de que al ya estar la burbuja creada, para nuestro caso que tiene un radio inicial, es imposible que ese radio se haga cero con la burbuja físicamente constituida; puesto que la burbuja no se puede comprimir hasta ese punto ya que se necesitaría una fuerza infinita. Ahora desde el punto de vista matemático seguiremos la línea del Apéndice C, esto es, si integramos la ecuación (2.1) se puede apreciar que

$$\int_0^t f dt = \int_0^t \left(-\frac{3y^2}{2x} - \frac{Ay}{x^2} + \frac{B}{x^4} + \frac{C}{x} - \frac{D}{x^2} + \frac{E \sin(Ft)}{x} \right) ds,$$

pero ya que $\dot{y} = f, \dot{x} = y, y(0) = 0$ y $x(0) = R_0$, entonces se obtiene que

$$\begin{aligned} y(t) - y(0) &= \frac{A}{x} - \frac{A}{x(0)} + \int_0^t \left(-\frac{3y^2}{2x} + \frac{B}{x^4} + \frac{C}{x} - \frac{D}{x^2} + \frac{E \sin(Fs)}{x} \right) ds \\ y &= \frac{A}{x} - \frac{A}{R_0} + \int_0^t \left(-\frac{3y^2}{2x} + \frac{B}{x^4} + \frac{C}{x} - \frac{D}{x^2} + \frac{E \sin(Fs)}{x} \right) ds. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Por lo tanto, para aplicar el teorema C1 (**Apéndice C**), notamos que

$$E(x, y) = y - \frac{A}{x} \quad \text{y} \quad G(x, y, t) = -\frac{3y^2}{2x} + \frac{B}{x^4} + \frac{C}{x} - \frac{D}{x^2} + \frac{E \sin(Ft)}{x}.$$

Para encontrar una cota inferior, debemos aplicar la parte (b) del teorema, y por tanto encontrar un valor m tal que si $E(x, y) \leq m$ entonces $G(x, y, t) \geq 0$. Note que

$$B = (p_0^\infty - p_v + \frac{2\sigma}{R_0}) \frac{R_0^3}{\rho}, \quad (2.2), \quad \text{y que para un radio inicial suficientemente pequeño, } B$$

es positivo. Esto lo convierte en el termino dominante en $G(x, y, t)$ para radios pequeños. Usaremos esto para encontrar un valor $\zeta > 0$ tal que si $x \leq \zeta$, entonces $G(x, y, t) \geq 0$:

$$\begin{aligned} \left| \frac{B}{x^4} \right| &> \left| -\frac{3y^2}{2x} + \frac{C}{x} - \frac{D}{x^2} + \frac{E \sin(Fs)}{x} \right| \\ \frac{B}{x^4} &> \frac{3y^2}{2x} + \frac{|C|}{x} + \frac{|D|}{x^2} + \frac{E}{x}. \end{aligned}$$

Entonces sólo se tiene que buscar x tal que

$$\frac{B}{x^4} > 4 \max \left\{ \frac{3y^2}{2x}, \frac{|C|+E}{x}, \frac{|D|}{x^2} \right\}. \quad (2.11)$$

Luego

$$\frac{B}{x^4} > 4 \left(\frac{3y^2}{2x} \right) \Rightarrow \left(\frac{B}{6y^2} \right)^{\frac{1}{3}} > x \Rightarrow \zeta_1 = \left(\frac{B}{6vs^2} \right)^{\frac{1}{3}} > x \quad (2.12)$$

$$\frac{B}{x^4} > 4 \left(\frac{|C|+E}{x} \right) \Rightarrow \zeta_2 = \left(\frac{B}{4(|C|+E)} \right)^{\frac{1}{3}} > x \quad (2.13)$$

$$\frac{B}{x^4} > 4 \left(\frac{|D|}{x^2} \right) \Rightarrow \zeta_3 = \left(\frac{B}{4|D|} \right)^{\frac{1}{2}} > x. \quad (2.14)$$

Y de esto, haciendo $\zeta = \min \{ \zeta_1, \zeta_2, \zeta_3 \}$; se obtiene que si $x < \zeta$, entonces (2.12), (2.13), (2.14) se satisfacen y por tanto (2.11) también.

Ahora, teniendo en cuenta los valores para las constantes físicas de la ecuación (2.1) en la tabla 1.1, las ecuaciones (2.2), (2.12), (2.13) y (2.14) construimos la siguiente tabla

ζ_1	ζ_2	ζ_3
3.0074e-8	3.8568e-7	6.6261e-7

Tabla 2.1 Cálculo de $\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3$ tomando $\rho = 732$, $\sigma = 0.0725$, $\mu = 0.013$, $R_0 = 1 \cdot 10^{-6}$, $p_v = 350$, $p_0^\infty = 1.1 \cdot 10^5$, $p_A = 10^6$, $vs = 1460$.

En consecuencia,

$$\zeta = 3.0074e-8.$$

Ahora, consideremos las curvas de nivel de $E(x, y)$:

$$y = \frac{A}{x} - m. \quad (2.15)$$

Encontraremos la “primera” curva de nivel cuyos puntos, con coordenada en y entre mas o menos la velocidad del sonido (vs), todos tienen coordenada en x satisfaciendo $x < \zeta$. Llamaremos τ al mínimo de todas las coordenadas en x en la curva de nivel.

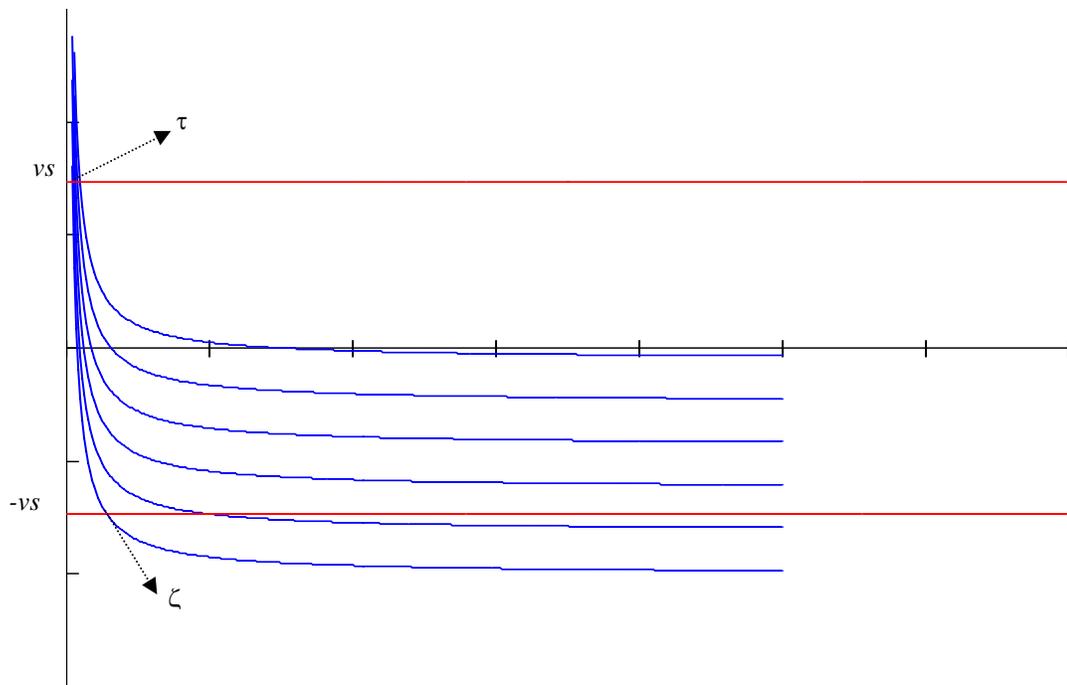


Figura 2.1 Familia de curvas de nivel para $E(x, y)$.

$$\begin{aligned}
 -vs &= \frac{A}{\zeta} - m \\
 m &= \frac{A}{\zeta} + vs.
 \end{aligned}
 \tag{2.16}$$

Desde lo cual, cuando $y = vs$, reemplazando (2.16) en (2.15) se obtiene que

$$vs = \frac{A}{\tau} - m$$

$$\tau = \frac{A}{vs + m} = \frac{A}{2vs + \frac{A}{\zeta}}.$$

De esta manera, m es tal que si $E(x, y) \leq m$, entonces $G(x, y, t) \geq 0$ para todo $t \in \mathbb{R}$. Por tanto

$$\tau = \frac{A}{2vs + \frac{A}{\zeta}} \tag{2.17}$$

es una cota inferior a priori para x , y $E(x, y) = m$ acota las orbitas que comienzan en la región $E(x, y) \geq m$.

Y por lo tanto, de la ecuación (2.17) y del valor estimado para ζ se estima que

$$\tau = 1.3449e-8 \tag{2.18}$$

2.5 f ES LIPSCHITZ-CONTINUA

Del **teorema 1.3.2** se comprueba que f es Lipschitz-continua ya que ∇f con respecto a x e y esta acotado (Sección 2.3). Por lo tanto, en lo sucesivo se tomará en consideración la constante de Lipschitz “ L ” dada por

$$L = \frac{C_2 v s^2}{\tau^5} \quad (2.19)$$

donde C_2 está definido en (2.9) y τ en la sección anterior (2.18). Cabe anotar que los valores obtenidos en (2.4) y posteriormente en (2.9) son cotas superestimadas, de acuerdo a las sustituciones que se efectuaron para conseguirlos. De esto se obtiene por tanto, una constante de Lipschitz superestimada; aunque a la hora de implementar estos resultados en los métodos numéricos a utilizar, se puede trabajar directamente con las igualdades en lugar de las desigualdades.

2.6 COTA PARA LAS SEGUNDAS DERIVADAS DE f :

En el próximo capítulo también se van a necesitar expresiones que definan o en su defecto que acoten las segundas derivadas de f . Por lo tanto en esta sección mostraremos las expresiones resultantes y su deducción se detalla en el Apéndice D. En ese orden, ya que $y = \dot{x}$ y $\dot{y} = f$:

$$f_{xx}(x, y, t) = \frac{-3y^2}{x^3} - \frac{6Ay}{x^4} + \frac{20B}{x^6} + \frac{2C}{x^3} - \frac{6D}{x^4} + \frac{2E \sin(Ft)}{x^3}.$$

$$f_{xy}(x, y, t) = \frac{3y}{x^2} + \frac{2A}{x^3}.$$

$$f_{xt}(x, y, t) = -\frac{EF \cos(Ft)}{x^2}. \quad (2.20)$$

$$f_{yx}(x, y, t) = \frac{3y}{x^2} + \frac{2A}{x^3}.$$

$$f_{yy}(x, y, t) = \frac{-3}{x}.$$

$$f_{yt}(x, y, t) = 0.$$

$$f_{tx}(x, y, t) = -\frac{EF \cos(Ft)}{x^2}.$$

$$f_{ty}(x, y, t) = 0.$$

$$f_{tt}(x, y, t) = -\frac{EF^2 \sin(Ft)}{x}.$$

Ahora, ya que $|y| \leq vs$ (con vs velocidad del sonido) y por (2.18) $\tau < x$; se concluye que existen constantes $M_i \geq 0$ con $i = 1, \dots, 5$ tal que $|f_{xx}| < M_1$, $|f_{xy}| = |f_{yx}| < M_2$, $|f_{xt}| = |f_{tx}| < M_3$, $|f_{yy}| < M_4$ y $|f_{tt}| < M_5$. Donde, de las ecuaciones (2.20) teniendo en cuenta que $\frac{1}{\tau} > \frac{1}{x}$, se tiene que

$$|f_{xx}| < \frac{3vs^2 + 2|C| + 2|E|}{\tau^3} + \frac{6|A|vs + 6|D|}{\tau^4} + \frac{20|B|}{\tau^6} = M_1.$$

$$|f_{xy}| = |f_{yx}| < \frac{3vs}{\tau^2} + \frac{2|A|}{\tau^3} = M_2.$$

$$|f_{xt}| = |f_{tx}| < \frac{|EF|}{\tau^2} = M_3.$$

(2.21)

$$|f_{yy}| < \frac{3}{\tau} = M_4.$$

$$|f_{tt}| < \frac{|E|F^2}{\tau} = M_5.$$

CAPÍTULO 3

ANÁLISIS DEL ERROR

3.1 EL MÉTODO NUMÉRICO

El método numérico que se implementará para resolver la ecuación (2.1) es Runge-Kutta de orden 4 (Sección 1.3.5). Por tanto, de acuerdo con el capítulo anterior, Sección 2.1, sea $\Phi: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^2$, dada por

$$\Phi(x, y, t; h) = \frac{K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4}{6} \quad (3.1)$$

con

$$K_1 = F(x, y, t) = \begin{pmatrix} y \\ f(x, y, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_1^x \\ K_1^y \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

$$K_2 = F\left(x + \frac{h}{2}K_1^x, y + \frac{h}{2}K_1^y, t + \frac{h}{2}\right) = \begin{pmatrix} y + \frac{h}{2}K_1^y \\ f\left(x + \frac{h}{2}K_1^x, y + \frac{h}{2}K_1^y, t + \frac{h}{2}\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_2^x \\ K_2^y \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

$$K_3 = F\left(x + \frac{h}{2}K_2^x, y + \frac{h}{2}K_2^y, t + \frac{h}{2}\right) = \begin{pmatrix} y + \frac{h}{2}K_2^y \\ f\left(x + \frac{h}{2}K_2^x, y + \frac{h}{2}K_2^y, t + \frac{h}{2}\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_3^x \\ K_3^y \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

$$K_4 = F(x + hK_3^x, y + K_3^y, t + h) = \begin{pmatrix} y + hK_3^y \\ f(x + hK_3^x, y + K_3^y, t + h) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_4^x \\ K_4^y \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

De donde

$$\Phi(x, y, t; h) = \begin{pmatrix} \Phi^x(x, y, t; h) \\ \Phi^y(x, y, t; h) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{K_1^x + 2K_2^x + 2K_3^x + K_4^x}{6} \\ \frac{K_1^y + 2K_2^y + 2K_3^y + K_4^y}{6} \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

3.2 ERROR DE TRUNCAMIENTO LOCAL

De (3) tenemos que el error de truncamiento local para nuestro método es

$$\varepsilon_i(h) = X(t_{i+1}) - X(t_i) - h\Phi(x_i, y_i, t_i; h). \quad (3.7)$$

Nuestro propósito es encontrar un tamaño de paso h que nos permita satisfacer una tolerancia (tol) dada para el error. Inicialmente buscaremos una cota para $\varepsilon_i(h)$. Así, para acotar la diferencia (3.7), calcularemos cotas por separado para $X(t_{i+1}) - X(t_i)$ y para $\Phi(x_i, y_i, t_i; h)$.

Se tiene que $X(t_{i+1}) = X(t_i + h)$. Por tanto, teniendo en cuenta que X' representa la derivada total con respecto a t , por el teorema de Taylor se obtiene

$$X(t_{i+1}) - X(t_i) = X'(t_i)h + \frac{1}{2}X''(t_i)h^2 + \frac{1}{6}X'''(t_i)h^3 + O(h^4).$$

Pero
$$X'(t) = F(x, y, t) = \begin{pmatrix} y \\ f(x, y, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix},$$

entonces

$$\begin{aligned}
X''(t) &= \begin{pmatrix} y' \\ f_x x' + f_y y' + f_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ f_x y + f_y f + f_t \end{pmatrix}; \\
X'''(t) &= \begin{pmatrix} f_x x' + f_y y' + f_t \\ (f_{xx} y + f_{xy} f + f_{xt}) y + f_x y' + (f_{yx} y + f_{yy} f + f_{yt}) f + f_y (f_x y + f_y f + f_t) \\ + f_{tx} y + f_{ty} f + f_u \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} f_x y + f_y f + f_t \\ f_{xx} y^2 + f_{xy} f y + f_{xt} y + f_x y f + f_{yx} y f + f_{yy} f^2 + f_{yt} f + f_y f_x y + f_y^2 f + f_y f_t \\ + f_{tx} y + f_{ty} f + f_u \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Luego tenemos las componentes en x y en y de $X(t_{i+1}) - X(t_i)$, dadas respectivamente por $X^x(t_{i+1}) - X^x(t_i)$ y $X^y(t_{i+1}) - X^y(t_i)$, definidas como sigue:

$$X^x(t_{i+1}) - X^x(t_i) = h y + \frac{h^2}{2} f + \frac{h^3}{6} f_x y + \frac{h^3}{6} f_y f + \frac{h^3}{6} f_t + O(h^4); \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned}
X^y(t_{i+1}) - X^y(t_i) &= h f + \frac{h^2}{2} (f_x y + f_y f + f_t) + \frac{h^3}{6} (f f_x + f_{xx} y^2 + f_{xy} f y \\
&\quad + f_{xt} y + f_{yx} y f + f_{yy} f^2 + f_{yt} f + f_y f_x y + f_y^2 f + f_y f_t \\
&\quad + f_{tx} y + f_{ty} f + f_u) + O(h^4); \quad (3.9)
\end{aligned}$$

Ambas expresiones evaluadas en t_i .

Por otro lado, en (3.3), (3.4) y (3.5) aplicando el teorema de Taylor de varias variables, conseguimos para cada componente K_2, K_3 y K_4 (evaluadas en t_i) que:

$$K_2 = \begin{pmatrix} y + \frac{h}{2} K_1^y \\ f(x + \frac{h}{2} K_1^x, y + \frac{h}{2} K_1^y, t + \frac{h}{2}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y + \frac{h}{2} K_1^y \\ f[(x, y, t) + (\frac{h}{2} K_1^x, \frac{h}{2} K_1^y, \frac{h}{2})] \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
K_2 &= \left(\begin{array}{c} y + \frac{h}{2} K_1^y \\ K_1^y + \frac{h}{2} K_1^x f_x + \frac{h}{2} K_1^y f_y + \frac{h}{2} f_t + \frac{h^2}{4} K_1^{x2} f_{xx} + \frac{h^2}{4} K_1^y K_1^x f_{xy} + \frac{h^2}{4} K_1^x f_{xt} \\ + \frac{h^2}{4} K_1^x K_1^y f_{yx} + \frac{h^2}{4} K_1^{y2} f_{yy} + \frac{h^2}{4} K_1^y f_{yt} + \frac{h^2}{4} K_1^x f_{tx} + \frac{h^2}{4} K_1^y f_{ty} + \frac{h^2}{4} f_{tt} + O(h^3) \end{array} \right) \\
&= \left(\begin{array}{c} K_1^x + \frac{h}{2} K_1^y \\ K_1^y + \frac{h}{2} K_1^x f_x + \frac{h}{2} K_1^y f_y + \frac{h}{2} f_t + O(h^2) \end{array} \right) = \begin{pmatrix} K_2^x \\ K_2^y \end{pmatrix};
\end{aligned}$$

Similarmente para K_3 se obtiene:

$$\begin{aligned}
K_3 &= \left(\begin{array}{c} y + \frac{h}{2} K_2^y \\ K_1^y + \frac{h}{2} K_2^x f_x + \frac{h}{2} K_2^y f_y + \frac{h}{2} f_t + \frac{h^2}{4} K_2^{x2} f_{xx} + \frac{h^2}{4} K_2^y K_2^x f_{xy} + \frac{h^2}{4} K_2^x f_{xt} \\ + \frac{h^2}{4} K_2^x K_2^y f_{yx} + \frac{h^2}{4} K_2^{y2} f_{yy} + \frac{h^2}{4} K_2^y f_{yt} + \frac{h^2}{4} K_2^x f_{tx} + \frac{h^2}{4} K_2^y f_{ty} + \frac{h^2}{4} f_{tt} + O(h^3) \end{array} \right) \\
K_3 &= \left(\begin{array}{c} K_1^x + \frac{h}{2} (K_1^y + \frac{h}{2} K_1^x f_x + \frac{h}{2} K_1^y f_y + \frac{h}{2} f_t + O(h^2)) \\ K_1^y + \frac{h}{2} (K_1^x + \frac{h}{2} K_1^y) f_x + \frac{h}{2} (K_1^y + \frac{h}{2} K_1^x f_x + \frac{h}{2} K_1^y f_y + \frac{h}{2} f_t + O(h^2)) f_y + \frac{h}{2} f_t \\ + \frac{h^2}{4} (K_1^x + O(h))^2 f_{xx} + \frac{h^2}{4} (K_1^y + O(h))(K_1^x + O(h)) f_{xy} + \frac{h^2}{4} (K_1^x + O(h)) f_{xt} \\ + \frac{h^2}{4} (K_1^x + O(h))(K_1^y + O(h)) f_{yx} + \frac{h^2}{4} (K_1^y + O(h))^2 f_{yy} + \frac{h^2}{4} (K_1^y + O(h)) f_{yt} \\ + \frac{h^2}{4} (K_1^x + O(h)) f_{tx} + \frac{h^2}{4} (K_1^y + O(h)) f_{ty} + \frac{h^2}{4} f_{tt} + O(h^3) \end{array} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
K_3 &= \left(\begin{array}{c} K_1^x + \frac{h}{2} K_1^y + \frac{h^2}{4} K_1^x f_x + \frac{h^2}{4} K_1^y f_y + \frac{h^2}{4} f_t + O(h^3) \\ K_1^y + \frac{h}{2} K_1^x f_x + \frac{h^2}{4} K_1^y f_x + \frac{h}{2} K_1^y f_y + \frac{h^2}{4} K_1^x f_x f_y + \frac{h^2}{4} K_1^y f_y^2 + \frac{h^2}{4} f_t f_y + \frac{h}{2} f_t \\ + \frac{h^2}{4} K_1^{x2} f_{xx} + \frac{h^2}{4} K_1^y K_1^x f_{xy} + \frac{h^2}{4} K_1^x f_{xt} + \frac{h^2}{4} K_1^x K_1^y f_{yx} + \frac{h^2}{4} K_1^{y2} f_{yy} + \frac{h^2}{4} K_1^y f_{yt} \\ + \frac{h^2}{4} K_1^x f_{tx} + \frac{h^2}{4} K_1^y f_{ty} + \frac{h^2}{4} f_{tt} + O(h^3) \end{array} \right) \\
&= \begin{pmatrix} K_3^x \\ K_3^y \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Y con un procedimiento igual al anterior, reemplazando en la expansión de Taylor para f las expresiones correspondientes a K_3^x y K_3^y previendo obtener $O(h^3)$ en la expresión resultante, obtenemos que

$$\begin{aligned}
K_4 &= \left(\begin{array}{c} y + hK_3^y \\ K_1^y + hK_3^x f_x + hK_3^y f_y + hf_t + h^2 K_3^{x2} f_{xx} + h^2 K_3^y K_3^x f_{xy} + h^2 K_3^x f_{xt} \\ + h^2 K_3^x K_3^y f_{yx} + h^2 K_3^{y2} f_{yy} + h^2 K_3^y f_{yt} + h^2 K_3^x f_{tx} + h^2 K_3^y f_{ty} + h^2 f_{tt} + O(h^3) \end{array} \right) \\
K_4 &= \left(\begin{array}{c} K_1^x + hK_1^y + \frac{h^2}{2} K_1^x f_x + \frac{h^2}{2} K_1^y f_y + \frac{h^2}{2} f_t + O(h^3) \\ K_1^y + hK_1^x f_x + \frac{h^2}{2} K_1^y f_x + hK_1^y f_y + \frac{h^2}{2} K_1^x f_x f_y + \frac{h^2}{2} K_1^y f_y^2 + \frac{h^2}{2} f_t f_y + hf_t \\ + \frac{h^2}{2} K_1^{x2} f_{xx} + \frac{h^2}{2} K_1^y K_1^x f_{xy} + \frac{h^2}{2} K_1^x f_{xt} + \frac{h^2}{2} K_1^x K_1^y f_{yx} + \frac{h^2}{2} K_1^{y2} f_{yy} + \frac{h^2}{2} K_1^y f_{yt} \\ + \frac{h^2}{2} K_1^x f_{tx} + \frac{h^2}{2} K_1^y f_{ty} + \frac{h^2}{2} f_{tt} + O(h^3) \end{array} \right) \\
&= \begin{pmatrix} K_4^x \\ K_4^y \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Por lo tanto, de (3.6)

$$\begin{aligned}
\Phi^x(x, y, t; h) &= \frac{K_1^x + 2K_2^x + 2K_3^x + K_4^x}{6} \\
&= [K_1^x + 2(K_1^x + \frac{h}{2}K_1^y) + 2(K_1^x + \frac{h}{2}K_1^y + \frac{h^2}{4}K_1^x f_x + \frac{h^2}{4}K_1^y f_y + \frac{h^2}{4}f_t \\
&\quad + O(h^3)) + K_1^x + hK_1^y + \frac{h^2}{2}K_1^x f_x + \frac{h^2}{2}K_1^y f_y + \frac{h^2}{2}f_t + O(h^3)]/6 \\
&= K_1^x + \frac{h}{2}K_1^y + \frac{h^2}{6}K_1^x f_x + \frac{h^2}{6}K_1^y f_y + \frac{h^2}{6}f_t + O(h^3)
\end{aligned}$$

todo evaluado en t_i . Pero de (3.2) $K_1^x = y$, $K_1^y = f$; así que de la ecuación anterior se obtiene que

$$\Phi^x(x, y, t; h) = y + \frac{h}{2}f + \frac{h^2}{6}yf_x + \frac{h^2}{6}ff_y + \frac{h^2}{6}f_t + O(h^3). \quad (3.10)$$

Y de igual manera, reemplazando las expansiones de Taylor de K_i^y con $i = 1, \dots, 4$ en la componente en y de (3.6), obtenemos que

$$\begin{aligned}
\Phi^y(x, y, t; h) &= \frac{K_1^y + 2K_2^y + 2K_3^y + K_4^y}{6} \\
&= K_1^y + \frac{h}{2}K_1^x f_x + \frac{h}{2}K_1^y f_y + \frac{h}{2}f_t + \frac{h^2}{3}K_1^{x2} f_{xx} + \frac{h^2}{3}K_1^y K_1^x f_{xy} + \frac{h^2}{3}K_1^x f_{xt} \\
&\quad + \frac{h^2}{3}K_1^x K_1^y f_{yx} + \frac{h^2}{3}K_1^{y2} f_{yy} + \frac{h^2}{3}K_1^y f_{yt} + \frac{h^2}{3}K_1^x f_{tx} + \frac{h^2}{3}K_1^y f_{ty} + \frac{h^2}{3}f_{tt} \\
&\quad + \frac{h^2}{6}K_1^y f_x + \frac{h^2}{6}K_1^x f_x f_y + \frac{h^2}{6}K_1^y f_y^2 + \frac{h^2}{6}f_t f_y + O(h^3)
\end{aligned}$$

todo evaluado en t_i . De donde, por (3.2)

$$\begin{aligned}
\Phi^y(x, y, t; h) &= f + \frac{h}{2} yf_x + \frac{h}{2} ff_y + \frac{h}{2} f_t + \frac{h^2}{3} y^2 f_{xx} + \frac{h^2}{3} yff_{xy} + \frac{h^2}{3} yf_{xt} \\
&+ \frac{h^2}{3} yff_{yx} + \frac{h^2}{3} f^2 f_{yy} + \frac{h^2}{3} ff_{yt} + \frac{h^2}{3} yf_{tx} + \frac{h^2}{3} ff_{ty} + \frac{h^2}{3} f_{tt} \quad (3.11) \\
&+ \frac{h^2}{6} ff_x + \frac{h^2}{6} yf_x f_y + \frac{h^2}{6} ff_y^2 + \frac{h^2}{6} f_t f_y + O(h^3)
\end{aligned}$$

evaluado en t_i .

Ahora, de (3.7) vemos que

$$\begin{aligned}
\varepsilon_i(h) &= X(t_{i+1}) - X(t_i) - h\Phi(x(t_i), y(t_i), t_i; h) \\
&= \begin{pmatrix} X^x(t_{i+1}) - X^x(t_i) - h\Phi^x(x(t_i), y(t_i), t_i; h) \\ X^y(t_{i+1}) - X^y(t_i) - h\Phi^y(x(t_i), y(t_i), t_i; h) \end{pmatrix} \quad (3.12) \\
&= \begin{pmatrix} \varepsilon_i^x(h) \\ \varepsilon_i^y(h) \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Luego, sustituyendo (3.8) y (3.10) en (3.12)

$$\varepsilon_i^x(h) = X^x(t_{i+1}) - X^x(t_i) - h\Phi^x(x(t_i), y(t_i), t_i; h) = 0;$$

y sustituyendo (3.9) y (3.11) en (3.12)

$$\begin{aligned}
\varepsilon_i^y(h) &= X^y(t_{i+1}) - X^y(t_i) - h\Phi^y(x(t_i), y(t_i), t_i; h) \\
&= -\frac{h^3}{6} y^2 f_{xx} - \frac{h^3}{6} yff_{xy} - \frac{h^3}{6} yf_{xt} - \frac{h^3}{6} yff_{yx} - \frac{h^3}{6} f^2 f_{yy} - \frac{h^3}{6} ff_{yt} \\
&\quad - \frac{h^3}{6} yf_{tx} - \frac{h^3}{6} ff_{ty} - \frac{h^3}{6} f_{tt} + O(h^4) \\
&= -[y^2 f_{xx} + yff_{xy} + yf_{xt} + yff_{yx} + f^2 f_{yy} + ff_{yt} \\
&\quad + yf_{tx} + ff_{ty} + f_{tt}] \frac{h^3}{6} + O(h^4).
\end{aligned}$$

todo evaluado en t_i .

Por lo tanto, reemplazando en (3.12) se obtiene que

$$\varepsilon_i(h) = \left(\begin{array}{c} 0 \\ -[y^2 f_{xx} + yff_{xy} + yf_{xt} + yff_{yx} + f^2 f_{yy} + ff_{yt} + yf_{tx} + ff_{ty} + f_{tt}] \frac{h^3}{6} + O(h^4) \end{array} \right)$$

de donde

$$\|\varepsilon_i(h)\| \leq \left| y^2 f_{xx} + yff_{xy} + yf_{xt} + yff_{yx} + f^2 f_{yy} + ff_{yt} + yf_{tx} + ff_{ty} + f_{tt} \right| \frac{h^3}{6} + O(h^4). \quad (3.13)$$

Ahora, en la sección 2.2 se encontró una cota para f ; además en la sección 2.6 se mostró que las segundas derivadas parciales de f también están acotadas. Por lo tanto, ya que $|y| \leq v_s$, entonces existe $M_6 \geq 0$ independiente de i y de h , tal que

$$\|\varepsilon_i(h)\| \leq M_6 \frac{h^3}{6}. \quad (3.14)$$

3.3 ESTIMACIÓN DEL PASO

Para lograr estimar un paso h apropiado con el que el error de truncación local satisfaga una tolerancia “tol” dada, se implementó el **teorema 1.3.4** aprovechando el hecho de que f es una función Lipschitz-continua en las variables x e y (Sección 2.5). A partir de esto comprobamos que F y Φ también son funciones Lipschitz-continuas con respecto a las mismas variables. Esto se muestra en las próximas secciones:

3.3.1 La función F es Lipschitz-continua

Considere dos tiempos t_1 y t_2 cualquiera, dentro de un intervalo de tiempo de corrida $[0, t_f]$ donde t_f es el tiempo final de una corrida numérica.

Sea $x(t_1) = x_1, y(t_1) = y_1, \bar{X}_1 = (x_1, y_1)$ y $\bar{X}_2 = (x_2, y_2)$.

Entonces

$$\begin{aligned} \|F(\bar{X}_1) - F(\bar{X}_2)\| &= \|(y_1 - y_2, f(\bar{X}_1) - f(\bar{X}_2))\| \\ &\leq |y_1 - y_2| + |f(\bar{X}_1) - f(\bar{X}_2)| \\ &\leq |\bar{X}_1 - \bar{X}_2| + L|\bar{X}_1 - \bar{X}_2| \\ &= (1+L)|\bar{X}_1 - \bar{X}_2|. \end{aligned}$$

Por lo tanto, se obtiene que

$$\|F(\bar{X}_1) - F(\bar{X}_2)\| \leq (1+L)|\bar{X}_1 - \bar{X}_2|. \quad (3.15)$$

Luego F es de Lipschitz y su constante aproximada es $(1+L)$.

3.3.2 Φ es Lipschitz-continua

Para probar esto, de la ecuación (3.1), se comprueba primero que cada función K_i ($i = 1, \dots, 4$) es también Lipschitz-continua. De (3.2) y (3.15) tenemos que K_1 es Lipschitz-continua. Ahora, para K_2 desde (3.15), se tiene que

$$\begin{aligned} \|K_2(\bar{X}_1) - K_2(\bar{X}_2)\| &= \left\| F\left(\bar{X}_1 + \left(\frac{h}{2}\right)K_1(\bar{X}_1)\right) - F\left(\bar{X}_2 + \left(\frac{h}{2}\right)K_1(\bar{X}_2)\right) \right\| \\ &\leq (1+L) \left\| (\bar{X}_1 - \bar{X}_2) + \left(\frac{h}{2}\right)(K_1(\bar{X}_1) - K_1(\bar{X}_2)) \right\| \\ &\leq (1+L) \left(\|\bar{X}_1 - \bar{X}_2\| + \left(\frac{h}{2}\right) \|K_1(\bar{X}_1) - K_1(\bar{X}_2)\| \right) \\ &\leq (1+L) \left(\|\bar{X}_1 - \bar{X}_2\| + \left(\frac{h}{2}\right)(1+L) \|\bar{X}_1 - \bar{X}_2\| \right) \\ &\leq (1+L) \left(1 + \left(\frac{h}{2}\right)(1+L) \right) \|\bar{X}_1 - \bar{X}_2\|. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Por lo tanto, K_2 es Lipschitz-continua y podemos aproximar su constante de Lipschitz por $L_2 = (1+L)\left(1+(\frac{h}{2})(1+L)\right)$. Análogamente para K_3 se comprueba que

$$\begin{aligned}
\|K_3(\bar{X}_1) - K_3(\bar{X}_2)\| &= \left\| F\left(\bar{X}_2 + (\frac{h}{2})K_2(\bar{X}_1)\right) - F\left(\bar{X}_2 + (\frac{h}{2})K_2(\bar{X}_2)\right) \right\| \\
&\leq (1+L) \left\| (\bar{X}_1 - \bar{X}_2) + (\frac{h}{2})(K_2(\bar{X}_1) - K_2(\bar{X}_2)) \right\| \\
&\leq (1+L) \left(\|\bar{X}_1 - \bar{X}_2\| + (\frac{h}{2})\|K_2(\bar{X}_1) - K_2(\bar{X}_2)\| \right) \\
&\leq (1+L) \left(\|\bar{X}_1 - \bar{X}_2\| + (\frac{h}{2})L_2\|\bar{X}_1 - \bar{X}_2\| \right) \\
&\leq (1+L)\left(1+(\frac{h}{2})L_2\right)\|\bar{X}_1 - \bar{X}_2\|.
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Por lo tanto, K_3 es Lipschitz-continua con constante aproximada $L_3 = (1+L)\left(1+(\frac{h}{2})L_2\right)$.

Igualmente, para K_4 se obtiene que

$$\begin{aligned}
\|K_3(\bar{X}_1) - K_3(\bar{X}_2)\| &= \left\| F\left(\bar{X}_2 + hK_2(\bar{X}_1)\right) - F\left(\bar{X}_2 + hK_2(\bar{X}_2)\right) \right\| \\
&\leq (1+L) \left\| (\bar{X}_1 - \bar{X}_2) + h(K_2(\bar{X}_1) - K_2(\bar{X}_2)) \right\| \\
&\leq (1+L) \left(\|\bar{X}_1 - \bar{X}_2\| + h\|K_2(\bar{X}_1) - K_2(\bar{X}_2)\| \right) \\
&\leq (1+L) \left(\|\bar{X}_1 - \bar{X}_2\| + hL_3\|\bar{X}_1 - \bar{X}_2\| \right) \\
&\leq (1+L)(1+hL_3)\|\bar{X}_1 - \bar{X}_2\|.
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Por lo tanto, K_4 es Lipschitz-continua con constante aproximada $L_4 = (1+L)(1+hL_3)$.

En consecuencia, de las desigualdades (3.15), (3.16), (3.17), y (3.18); se obtiene que

$$\|\Phi(\bar{X}_1; h) - \Phi(\bar{X}_2; h)\| \leq \left(\frac{1}{6}\right) \left((1+L) + 2L_2 + 2L_3 + L_4 \right) \|\bar{X}_1 - \bar{X}_2\|.$$

De donde se obtiene que Φ es Lipschitz-continua con constante aproximada

$$L_5 = \frac{((1+L) + 2L_2 + 2L_3 + L_4)}{6}.$$

3.3.3 Estimación de h

Ahora, del **teorema 1.3.4 (Sección 1.3.3)** y la desigualdad (3.14), con EG como el error global del método, se tiene que

$$EG \leq \frac{M_{10}h^2}{L_5} (\exp(L_5(t_f - t_0)) - 1).$$

Pero se desea que $EG \leq tol$ para una tolerancia (tol). Por lo tanto h debe cumplir que:

$$h \leq \sqrt{\frac{tolL_5}{M_6(\exp(L_5(t_f - t_0)) - 1)}}. \quad (3.19)$$

CAPÍTULO 4

RESULTADOS

4.1 COMPARANDO LOS MÉTODOS NUMÉRICOS

Las siguientes gráficas muestran los resultados obtenidos de resolver numéricamente el problema (2.0) con radio inicial, $1 \cdot 10^{-6}$, Amplitud de presión, $80 \cdot 10^5$ y frecuencia, $500 \cdot 10^4$; estas condiciones fueron tomadas de (4). El medio que se asume es agua (de (1) se tomaron los valores de las respectivas constantes físicas). La velocidad del sonido que se utiliza es 1480 m/s (4).

La línea roja punteada que aparece en las gráficas, indica los puntos del tiempo evaluados numéricamente para un periodo fijo; en esto se puede apreciar cuando se dan pasos más pequeños o más grandes en el recorrido de la curva (en el caso de los métodos con paso variable). El periodo que se utiliza para este propósito se detalla al pie de cada gráfica y es el número de pasos que se espera para que se grafique cada punto rojo.

Dentro de los métodos numéricos utilizados, destacamos la implementación de Runge- Kutta propio (RK propio); este consiste en implementar un método Runge- Kutta clásico variando el paso de acuerdo a los resultados obtenidos en el **Capítulo 3**, en especial la desigualdad (3.19).

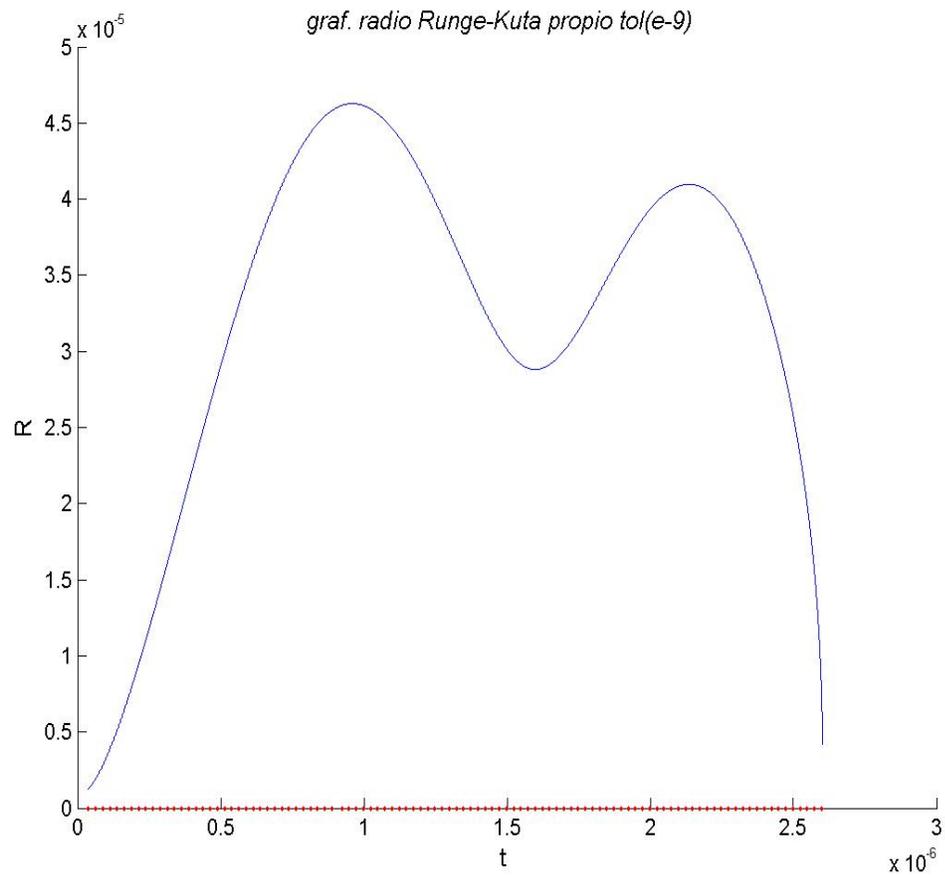
Runge Kutta propio (RK prop):

Figura 4.1 1 RK paso variable de acuerdo a la desigualdad (3.19).

El periodo tomado para la línea roja es de 3000 ítems por cada punto.

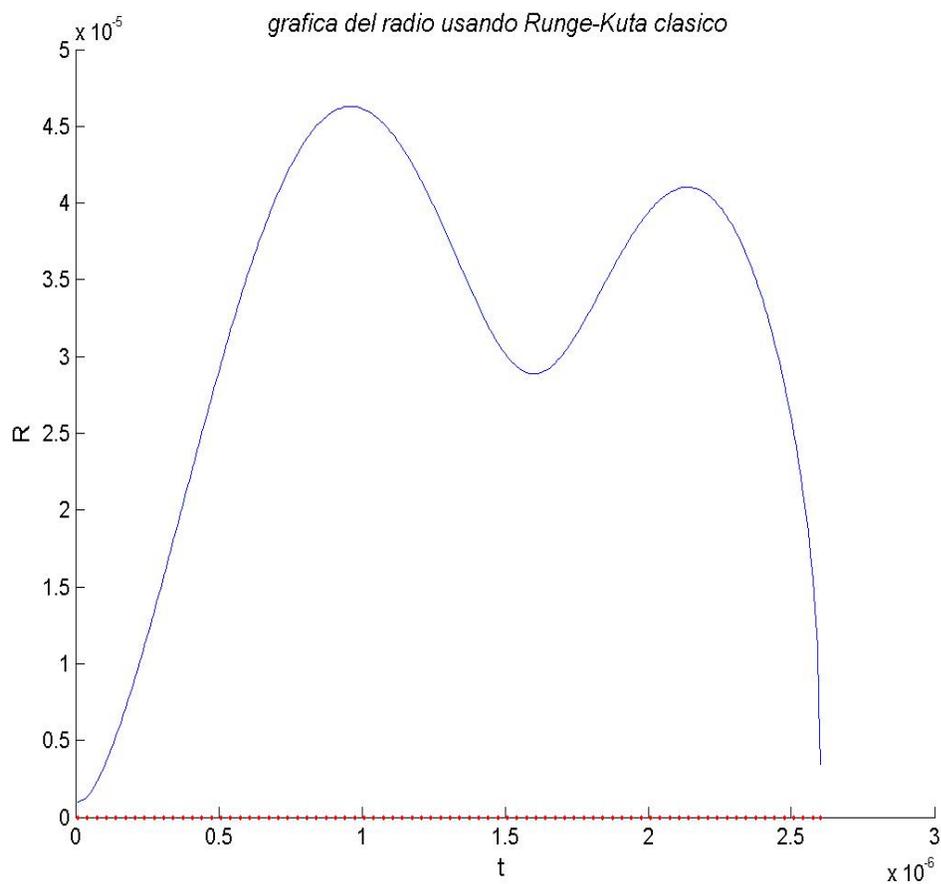
Runge Kutta Clásico (RK clas):

Figura 4.1 2 RK con paso fijo tomado de $4.1667e-9$.

El periodo tomado para la línea roja es de 4 ítems por cada punto.

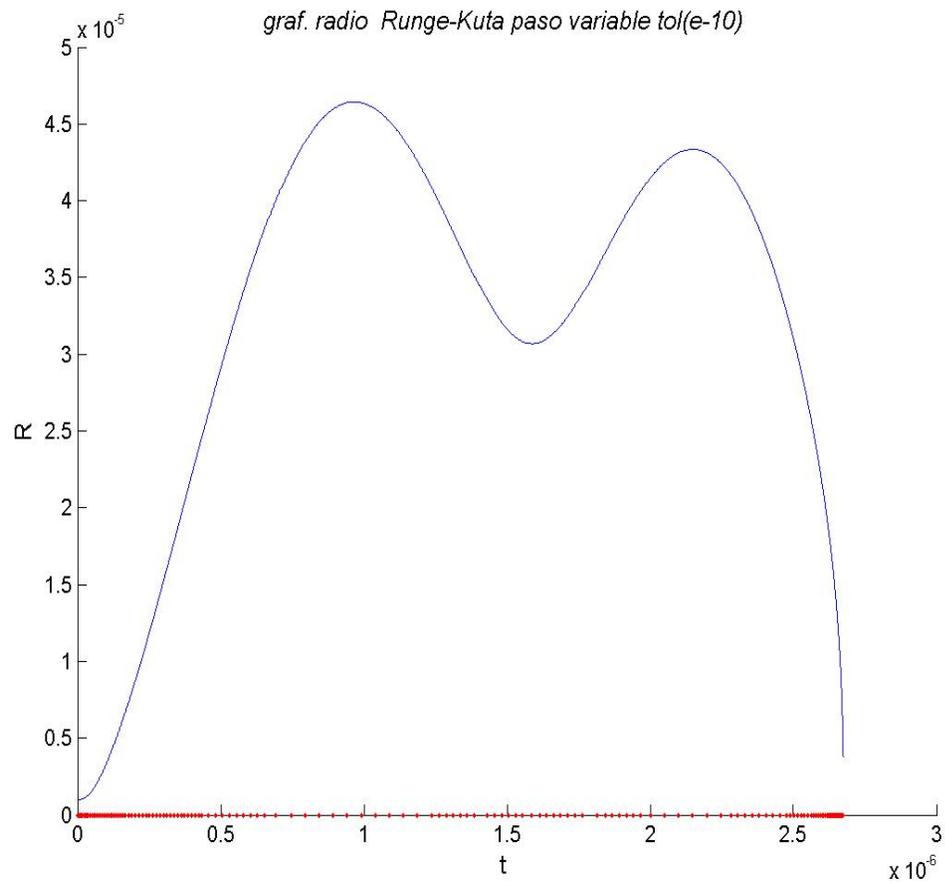
Runge Kutta con paso variable (RK var):

Figura 4.1 3 RK con paso variable que depende de la tolerancia dada.

El periodo utilizado para la línea roja es de 20 ítems por cada punto.

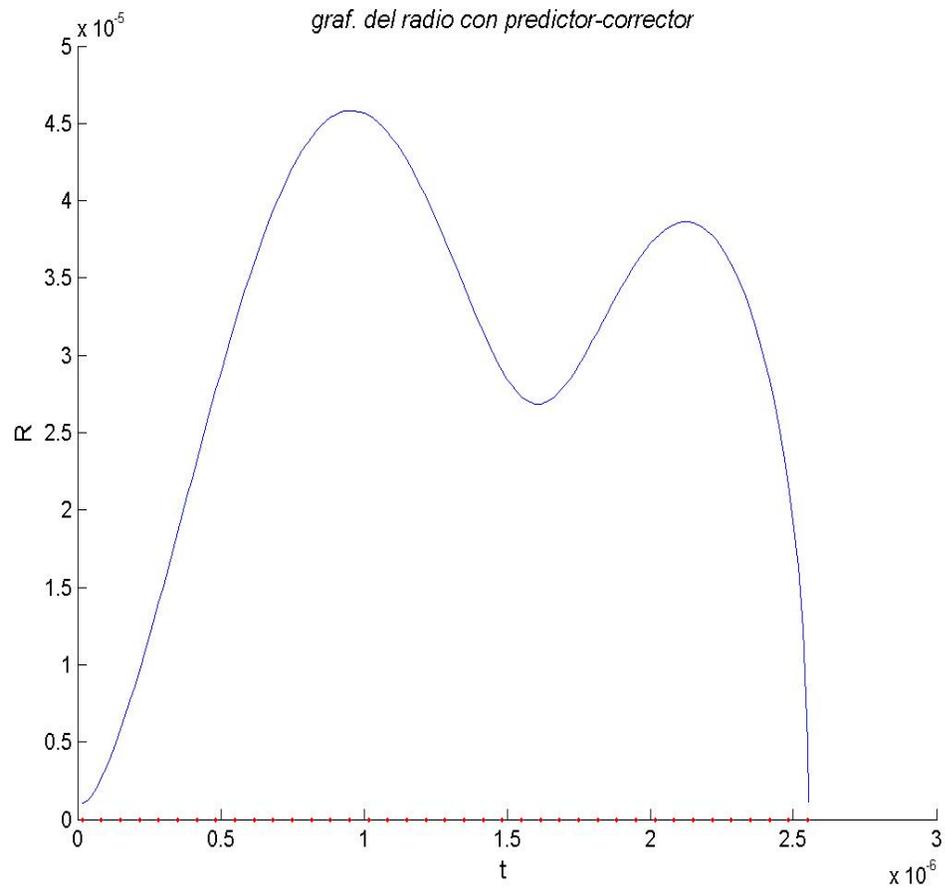
Predictor Corrector de Adams (Pred-Corrector):

Figura 4.1 4 Pred-corrector con paso fijo tomado de $2.0833e-9$.

El periodo tomado para la línea roja es de 4 ítems por cada punto.

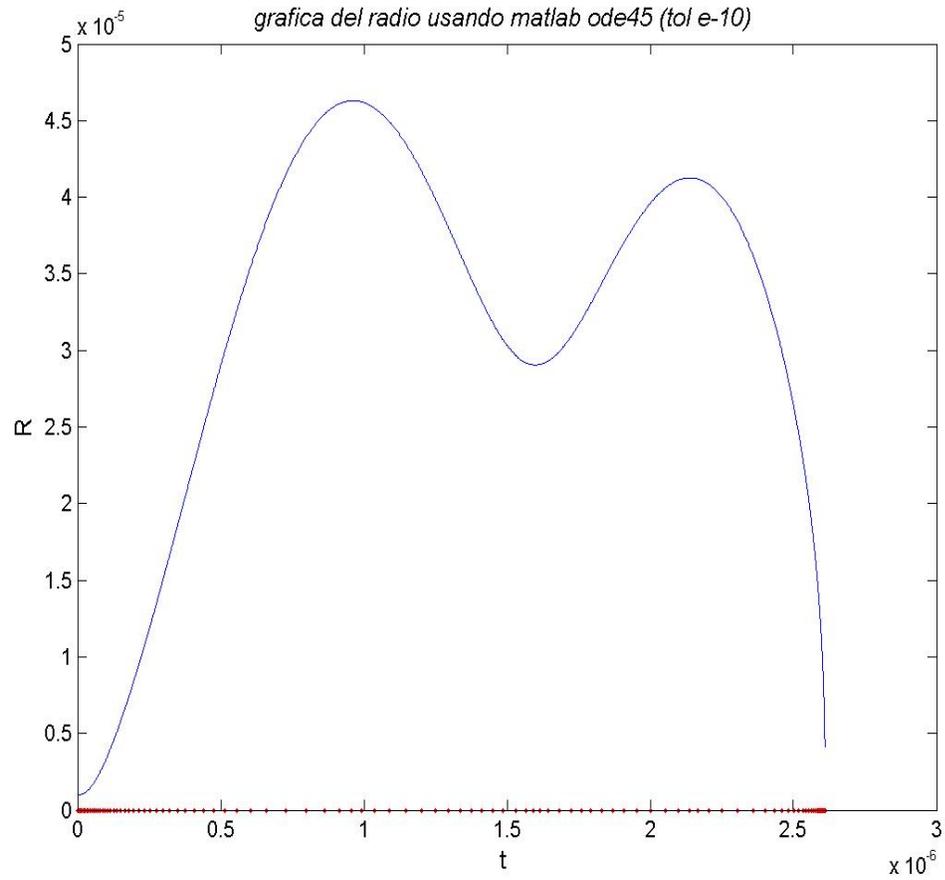
Matlab ode 45

Figura 4.1 5 Ode 45 de Matlab, paso variable que depende de la tolerancia.

El periodo tomado para la línea roja es de 20 ítems por cada punto.

En la siguiente tabla se muestran los resultados de las corridas ilustradas en las gráficas anteriores:

Método	# de pasos	T. corrida s	R final m	Vel. Final m/s	Energía final Nm	T. vida s
RK propio	306532	5065.4	4.1735e-6	-1484.6	1.0072e-6	2.6021e-6
RK clásico	313	0.141	3.4328e-6	-2010.1	1.0262e-6	2.6e-6
RK variable	4418	8.642	3.8034e-6	-1480.2	7.5776e-7	2.6742e-6
Pred-Correct	154	0.171	1.1105e-6	-13113	1.4767e-6	2.5521e-6
Matlab ode45	5037	1.342	4.1452e-6	-1482.1	9.8536e-7	2.6101e-6

Tabla 4. 1 Resultados de las corridas de los métodos Runge-Ketta (RK) clasico, variable, el método predictor corrector de Adams (Pred-Correct) y Matlab ode45. En las columnas se muestra el numero de pasos (# de pasos), tiempo que se demoró la corrida (T. corrida), radio final (R. final), velocidad final (Vel. Final), energía final y el tiempo de vida de la burbuja (T. vida).

Conforme a los datos en la tabla 4.1 se determina que el método numérico a implementar es ode 45 de Matlab, ya que es el que nos muestra un mejor rendimiento, en términos de evaluaciones numéricas en un lapso corto de tiempo, teniendo en cuenta una precisión aceptable.

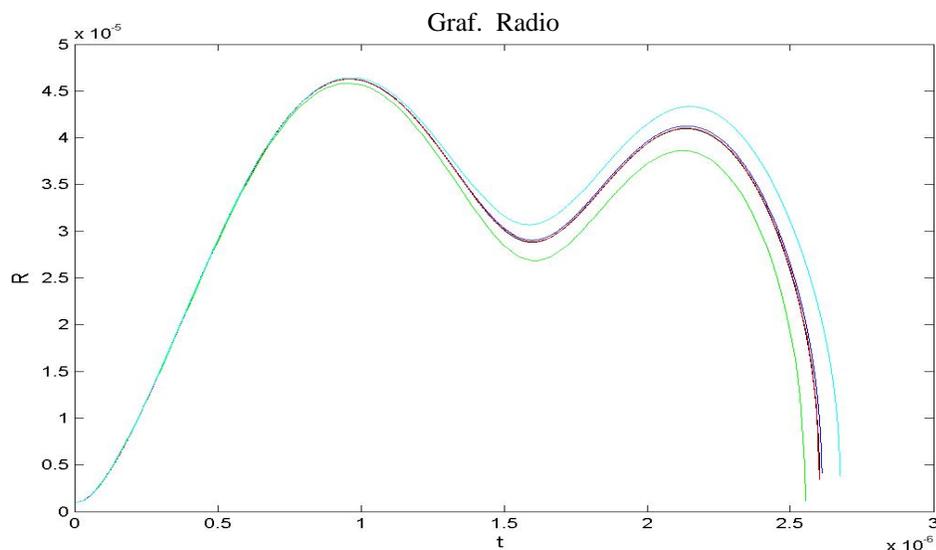


Figura 4.1 6 Gráfica sobre un mismo plano de las corridas numéricas de los métodos en la tabla 4.2 1.

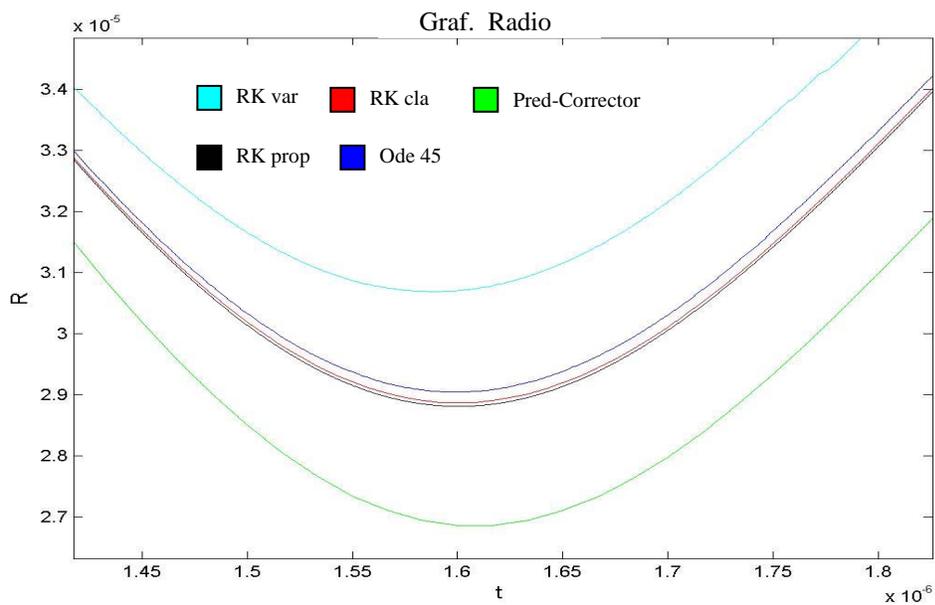


Figura 4.1 7 Aproximación de las curvas en la figura 4.1 6. Parte central.

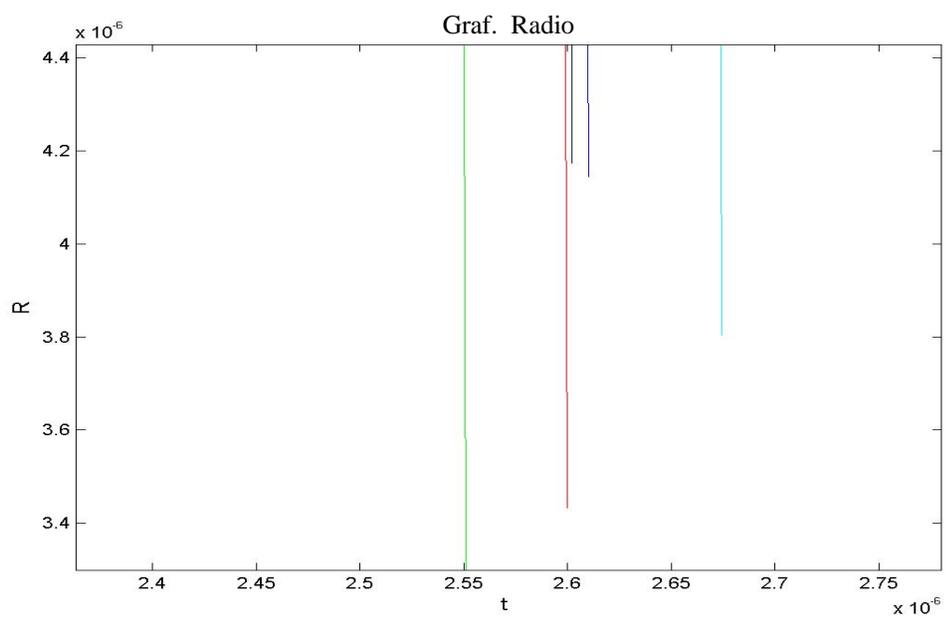


Figura 4.1 8 Aproximación de las curvas en la figura 4.1 6. Parte final.

4.2 ALGUNOS COMPORTAMIENTOS DEL RADIO

En las próximas figuras se podrán observar algunos de los comportamientos del radio de una burbuja, estos se dan al resolver numéricamente la ecuación (2.0) a partir de un radio inicial, una amplitud de presión y frecuencia dada. En cada figura se describen estos valores dados. Las graficas en azul representan al radio, en rojo a la energía cinética (1.4), en verde a la energía potencial (1.8) y en negro a la energía total al interior de la burbuja (1.9).

Comportamiento Estable:

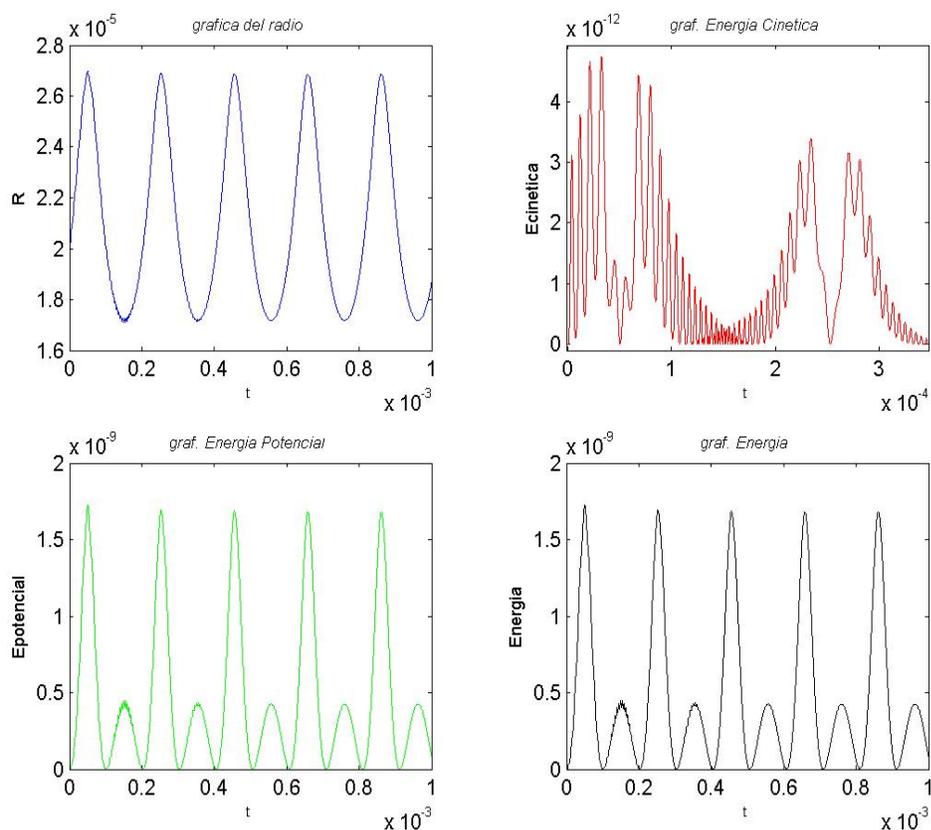


Figura 4.2 1 Burbuja estable con radio inicial 20×10^{-6} , Amplitud de presión 0.6×10^5 y frecuencia 3.1×10^4 .

Comportamiento Caótico:

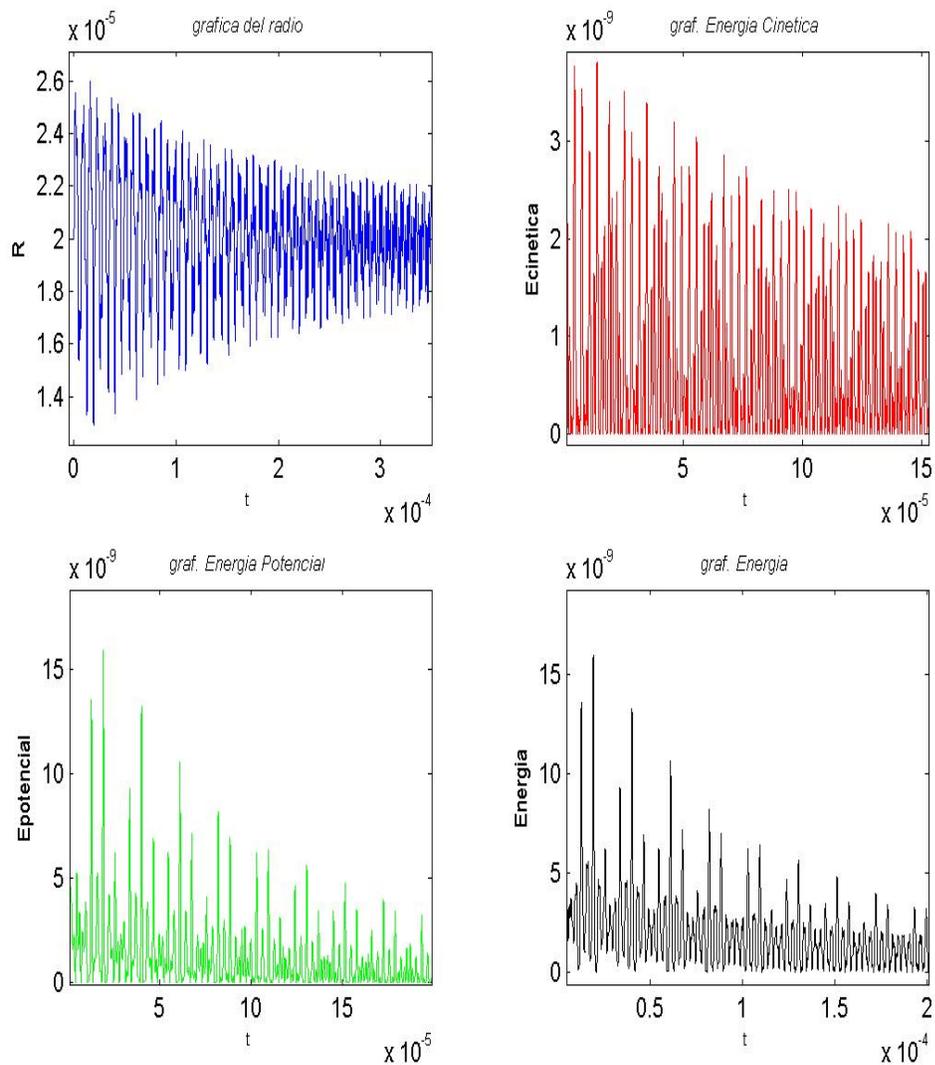


Figura 4.2 2 Burbuja inestable con radio inicial $20 \cdot 10^{-6}$, Amplitud de presión $2.4 \cdot 10^5$ y frecuencia $300 \cdot 10^4$.

Comportamiento Infinito:

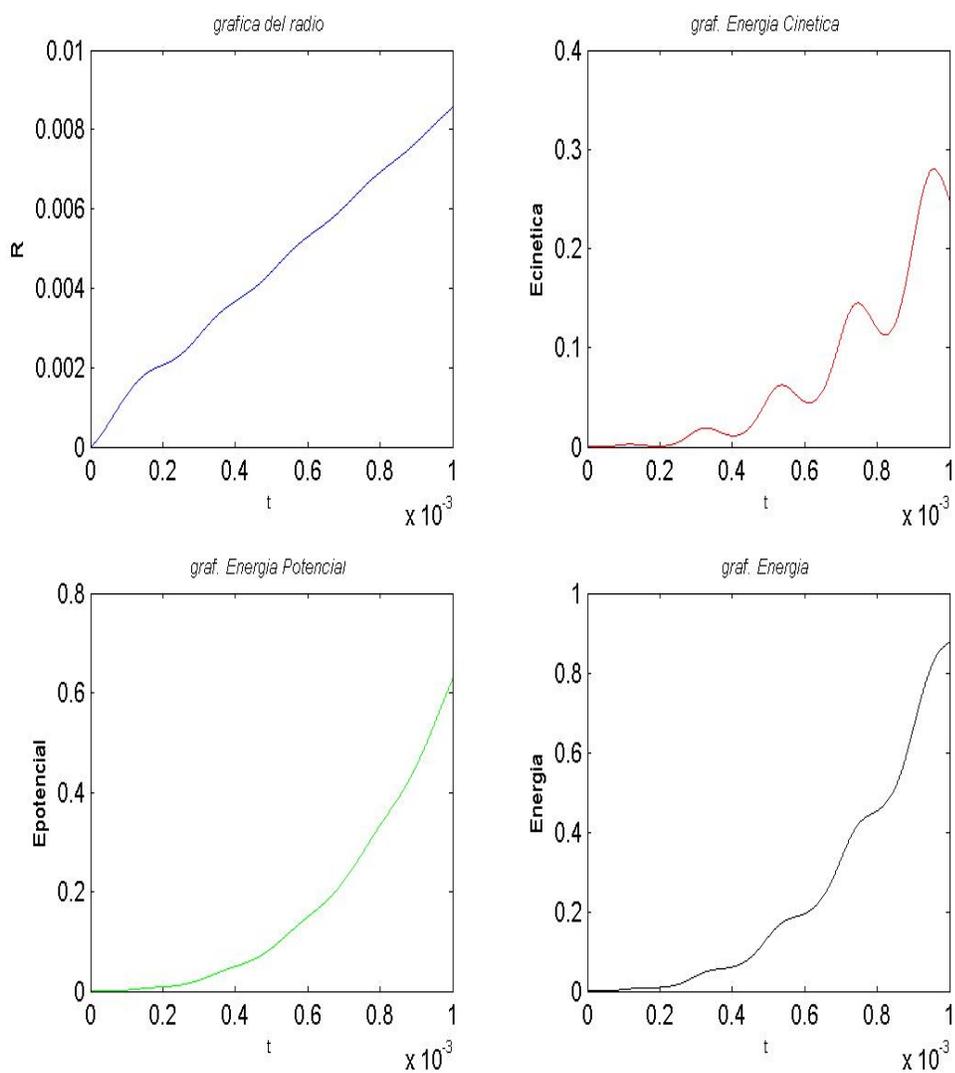


Figura 4.2 3 Burbuja con radio infinito. Radio inicial $20 \cdot 10^{-6}$, Amplitud de presión $2.4 \cdot 10^5$, frecuencia $3 \cdot 10^4$ y Presión de vapor $0.5 \cdot 10^5$.

Comportamiento de Implosión:

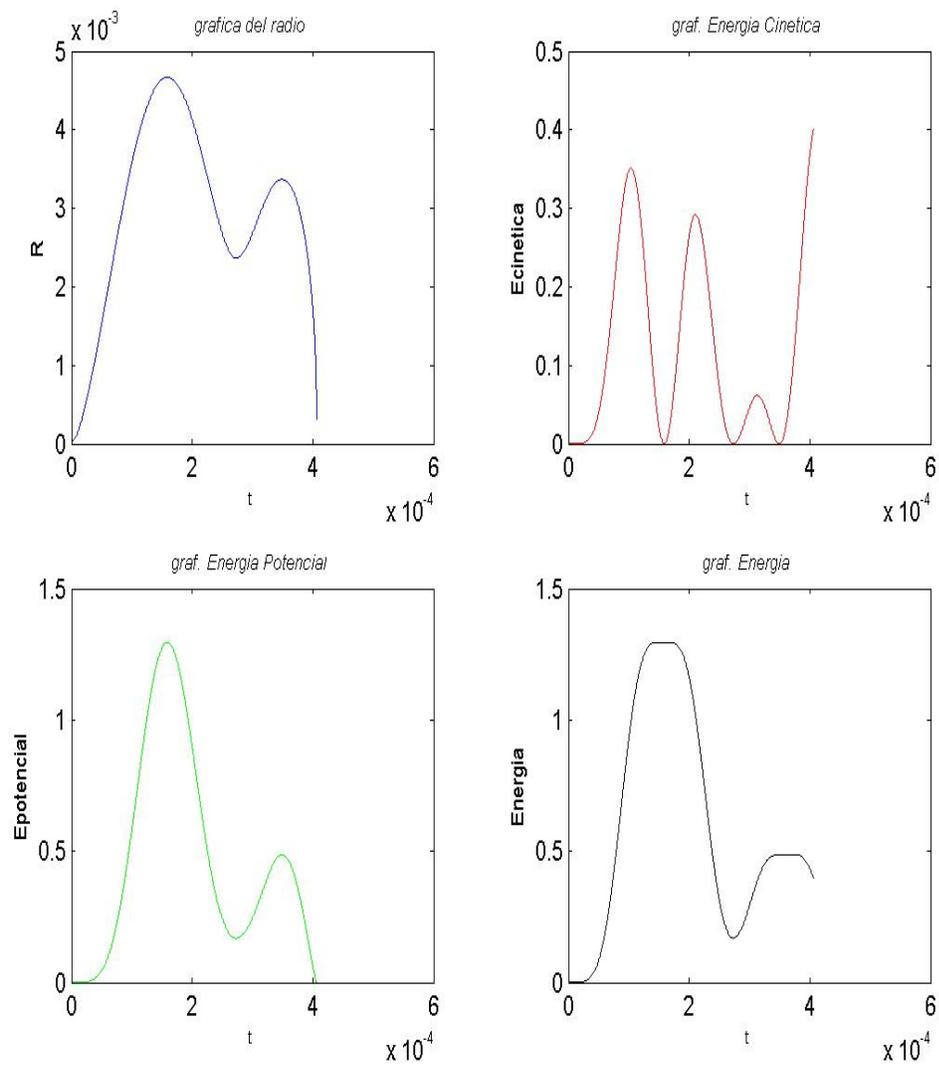


Figura 4.2.4 Burbuja con radio infinito. Radio inicial 20×10^{-6} , Amplitud de presión 30.4×10^5 y frecuencia 3×10^4 .

4.3 MAPA TRIDIMENSIONAL

Para cada una de las gráficas que se muestran en esta sección se implementó el

$$\text{mapa } (R_0, p_A, \Omega) \rightarrow \frac{E}{T+1} \quad (4.1)$$

donde E es la energía final y T el tiempo final de la burbuja al momento de la implosión. El mapa tridimensional se construye sobre Matlab, teniendo en cuenta que cada parámetro en la tripleta (R_0, p_A, Ω) tiene un valor inicial y un valor final; a partir de esto se elige un parámetro P que sirve para particionar uniformemente los intervalos para cada uno de los parámetros. Finalmente se hace una corrida numérica con cada tripleta deduciendo E y T en cada en cada posición.

Con el objeto de obtener los resultados en un tiempo relativamente corto, los valores de P utilizados para este estudio han sido 10 y 20; hay que tener en cuenta que para $P = 10$ se hacen 1000 corridas numéricas y que el tiempo para cada corrida varía entre 0.5 y 20 seg (aunque en ocasiones pueden ser más). El valor de P también determina el número de “slice” (cortes transversales) presentes en cada mapa. Las limitaciones que traen estos valores pequeños de P se trataron de contrarrestar analizando varias regiones para la tripleta (R_0, p_A, Ω) .

Para entender un poco la escala de colores en cada figura, se dan con ella los valores de energía más alta en la región, la energía más baja, el tiempo más alto y más bajo, el radio final más bajo y el más alto. Las condiciones físicas para estos cálculos se tomaron de (6).

A continuación mostramos las figuras:

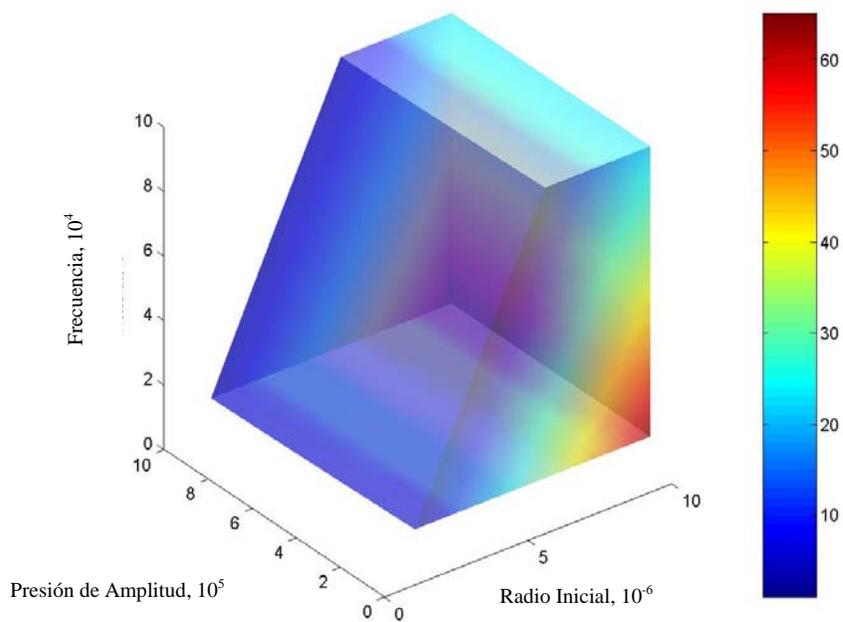


Figura 4.3 1 $P = 10$, R_0 de $2 \cdot 10^{-6}$ a $3 \cdot 10^{-6}$, p_A de $2.1 \cdot 10^5$ a $2.5 \cdot 10^5$ y Ω de $3.1 \cdot 10^4$ a $3.6 \cdot 10^4$.

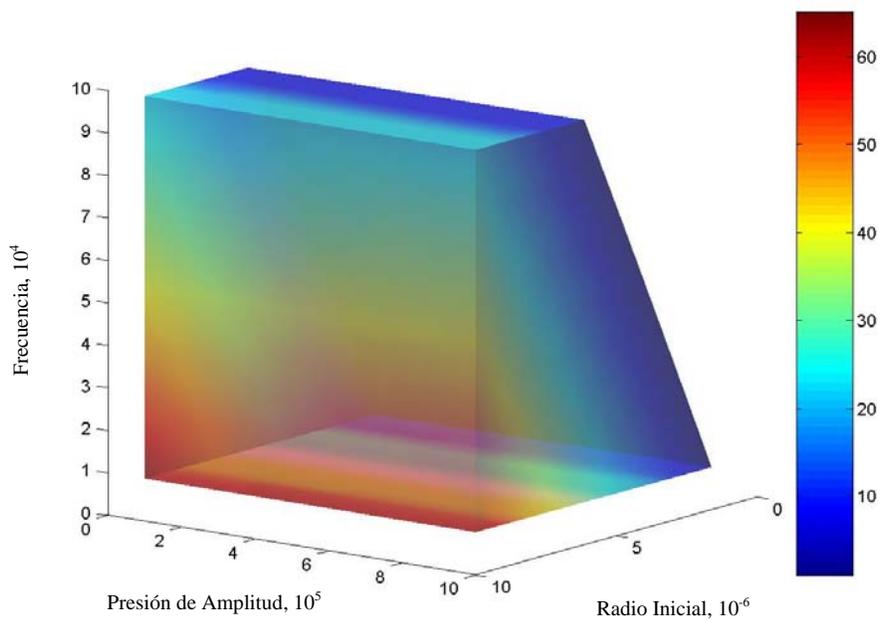


Figura 4.3 2 Energía máxima $6.9704 \cdot 10^{-4}$, Energía mínima $2.1493 \cdot 10^{-4}$, Tiempo máximo $1.5934 \cdot 10^{-4}$, Tiempo mínimo $1.3117 \cdot 10^{-4}$.

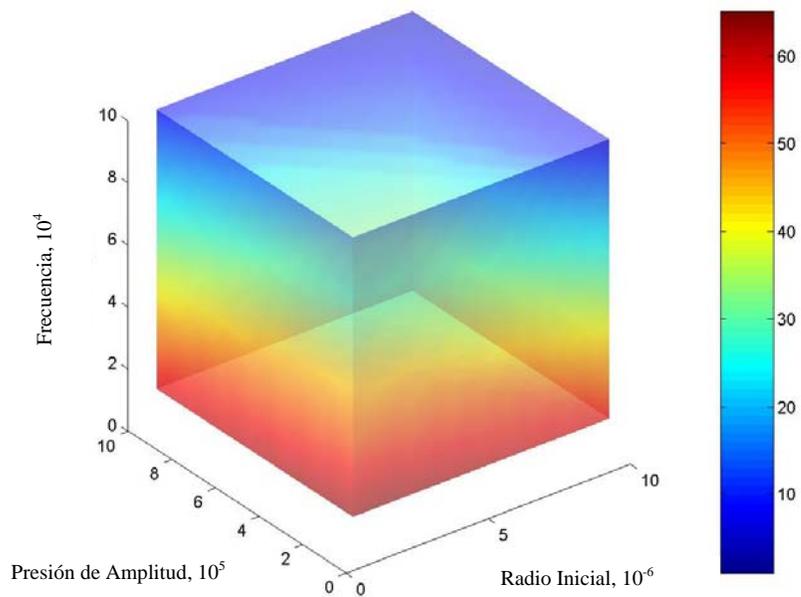


Figura 4.33 $P = 10$, R_0 de $1 \cdot 10^{-6}$ a $2 \cdot 10^{-6}$, p_A de $150 \cdot 10^5$ a $160 \cdot 10^5$ y Ω de $10 \cdot 10^4$ a $10.5 \cdot 10^4$.

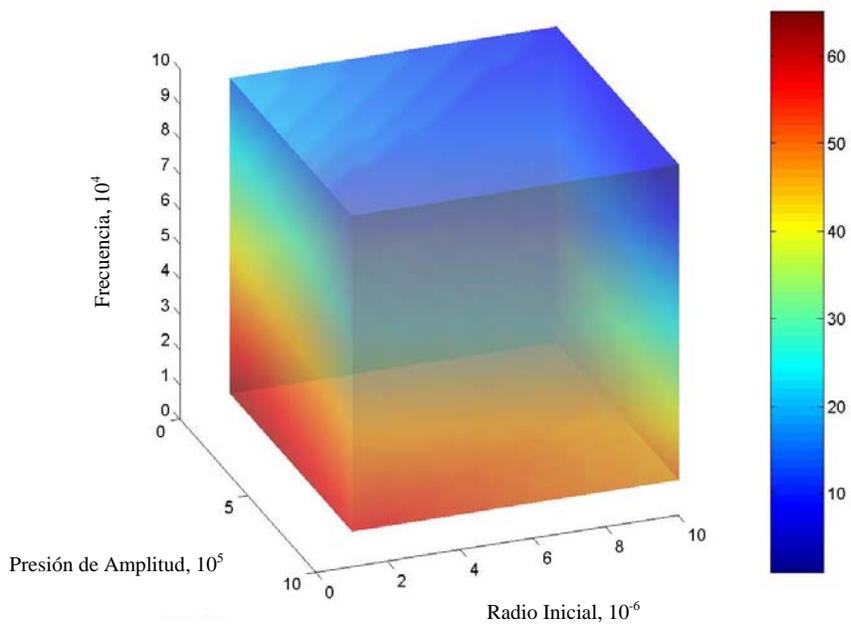


Figura 4.34 Energía máxima 0.17173 , Energía mínima 0.14509 , Tiempo máximo $1.4045 \cdot 10^{-4}$, Tiempo mínimo $1.3373 \cdot 10^{-4}$.

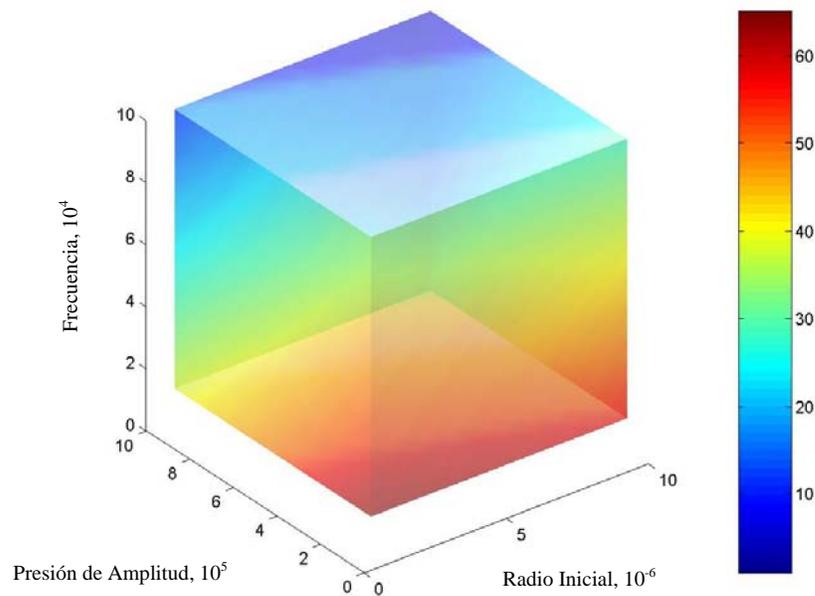


Figura 4.3 5 $P = 10$, R_0 de $10 \cdot 10^{-6}$ a $20 \cdot 10^{-6}$, p_A de $150 \cdot 10^5$ a $160 \cdot 10^5$ y Ω de $10 \cdot 10^4$ a $10.5 \cdot 10^4$.

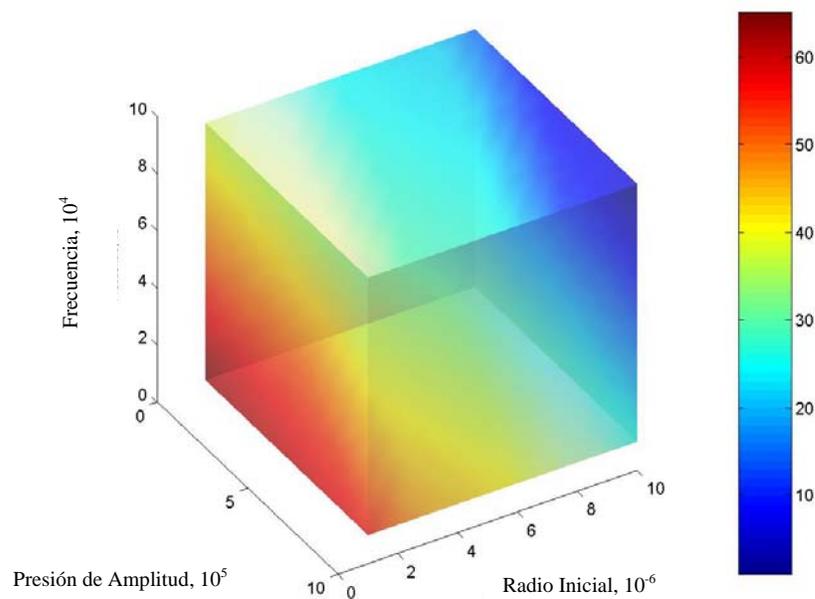


Figura 4.3 6 Energía máxima 0.15057 , Energía mínima 0.10672 , Tiempo máximo $1.4155 \cdot 10^{-4}$, Tiempo mínimo $1.3429 \cdot 10^{-4}$.

CAPÍTULO 5

CONCLUSIONES

Los objetivos de este estudio estaban enfocados en tres aspectos básicos, obtener información contundente de la ecuación (2.1), la elección de un método numérico apropiado para analizar numéricamente dicha ecuación y finalmente para la aportación de resultados al proceso de producción de Biodiesel mediante mezclado ultrasónico. Siguiendo este orden de ideas, con respecto al aspecto de obtener información de la versión isotérmica y viscosa de ecuación de Rayleigh-Plesset (ERP) concluimos lo siguiente:

1. Existe una cota mínima a priori para el radio de una burbuja sometida a un estímulo ultrasónico dentro del fenómeno de implosión.
2. El valor para esa cota mínima a priori depende del radio inicial y de las constantes físicas dadas por el medio.
3. El proceso mediante el cual se abordó el problema de encontrar esa cota, proporciona un método de energía para tratar con sistemas dinámicos no-autónomos.

Ahora, con respecto a la elección de un método numérico apropiado para analizar numéricamente ERP, concluimos que:

1. A pesar de la marcada no linealidad de la ERP, esta se puede resolver numéricamente con métodos de fácil implementación (Runge-Kutta) a pesar de los cambios bruscos de la gráfica del radio (rigidez).

2. La utilización del método Runge-Kutta “propio” (usando la variación del paso deducida del Análisis del Error), aunque fue útil para hacer la comparación y posterior elección de un método numérico apropiado; no es el más indicado para hacer todo el análisis numérico que requiere la ecuación, por el elevado tiempo de corrida.

Por último, con respecto a la aportación de resultados al proceso de producción de Biodiesel mediante mezclado ultrasónico, concluimos que:

1. Los comportamientos estables del radio de la burbuja parecen darse para una amplitud de presión menor que $0.8 \cdot 10^5$ Pa.
2. Los comportamientos caóticos del radio de la burbuja parecen darse para frecuencias altas, aunque en ocasiones no se da la implosión.
3. El comportamiento infinito del radio de la burbuja, aunque físicamente improbable, ocurre cuando la diferencia entre la presión de vapor al interior de la burbuja es muy inferior a la presión hidrostática.
4. El comportamiento de implosión del radio de la burbuja se presenta para un rango amplio de amplitud de presión, comenzando desde $1.0055 \cdot 10^5$ Pa con radio inicial mínimo de $10 \cdot 10^{-6}$ m y una frecuencia fija de $3.1 \cdot 10^4$ Hz. Pero si el radio inicial mínimo es de 10^{-6} m, entonces la amplitud de presión más baja va desde $1.17 \cdot 10^5$ Pa. Se deduce de esto que al tener radios iniciales más bajos, la amplitud de presión mínima utilizada deberá ser más alta.
5. La información que se deduce de los mapas tiende a ser más valiosa en la medida en que P sea más grande. Sin embargo, a pesar de un valor pequeño de P ($P = 10$), se aprecia que para presiones de amplitud (p_A) del orden de

10^5 , las energías resultantes son mucho más pequeñas con valores de p_A altos (del orden 10^7).

6. Mientras se tengan los valores adecuados para p_A y Ω , la variación del radio tiende a arrojar energías finales más altas para radios iniciales más pequeños.
7. En la variación de Ω , valores bajos siempre favorecen las energías finales altas (regiones en rojo de los mapas).

CAPÍTULO 6

RECOMENDACIONES TRABAJOS FUTUROS

Con base en los resultados obtenidos en este estudio y a las observaciones hechas dentro del análisis numérico implementado para este, daremos las siguientes sugerencias para futuros trabajos:

- El modelo que se trabajó en este estudio, es un modelo isotérmico. Sin embargo en ⁽⁴⁾ también aparece referenciado un modelo adiabático, en este efecto se presume que las energías resultantes de las burbujas al implotar se transforman en calor. Un aspecto interesante sería determinar cuando se producen las implosiones isotérmicas y cuando las adiabáticas.
- Hacer un completo estudio de cómo se afectan entre si y para el proceso la interacción de dos o más burbujas.
- Mediante procesos más óptimos y tal vez con equipos más potentes, refinar la búsqueda de regiones que ofrezcan mayor información en los mapas.
- Interpretar físicamente las cotas obtenidas en la **Sección 2.4** para dar con una cota mínima para el radio de la burbuja, y buscar restricciones apropiadas para encontrar una cota superior.

BIBLIOGRAFÍA

- ¹ Harkin, Nadim & Kaper. “On acoustic cavitation of slightly subcritical bubbles”. **Physics of fluids**. Volume II, number 2. (February 1999).
- ² Burden & Faires. Análisis Numérico. Grupo Editorial Iberoamericana. 1985.
- ³ Buchanan & Turner. Numerical Methods and Analysis. McGraw Hill. 1992.
- ⁴ T.G. Leighton. The Acoustic Bubble. Academic Press. 1997.
- ⁵ Ernesto Borrero Quintana. “Optimization studies for the alkaline transesterification Biodiesel reaction using ultrasound mixing”. Thesis for the degree Master of Science in Chemical Engineering. UPRM. 2002.
- ⁶ Fabio Alape. “ Effects of the use of ultrasonic waves over biodiesel production in alkaline transesterification of bleach tallow and vegetable oils : Cavitation Model. Thesis for the degree Master of Science in Chemical Engineering. UPRM.
- ⁷ Eugene Isaacson & Herbert Bishop Keller. Analysis of Numerical Methods. Dover Publications, Inc. 1994.
- ⁸ V.I. Arnold. Ordinary Differential Equations. The MIT Press, 1991.

APÉNDICE A

Demostraciones de los Teoremas Sección 1.3

A1. DEMOSTRACIÓN TEOREMA 1.3.2

Sea $f(t, x)$ diferenciable con respecto a x en una región \mathfrak{R} y sea $L > 0$ tal que

$$\left| \frac{\partial f}{\partial x}(t, x) \right| \leq L.$$

Entonces por el teorema fundamental del calculo, para $x_1, x_2 \in \mathfrak{R}$ cualesquiera, se tiene que

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial f}{\partial x} dx = f(t, x_2) - f(t, x_1);$$

además

$$\left| \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial f}{\partial x} dx \right| \leq \int_{x_1}^{x_2} \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right| dx < \int_{x_1}^{x_2} L dx = (x_2 - x_1)L.$$

Por lo tanto tenemos que

$$|f(t, x_2) - f(t, x_1)| < L|x_2 - x_1|.$$

A2. DEMOSTRACIÓN TEOREMA 1.3.4 ⁽³⁾

Lema A2.1 Sea $a > 0, b \geq 0$ y sea $x_n, n = 0, 1, 2, \dots$, una sucesión de números no negativos que satisfacen la desigualdad

$$x_{n+1} \leq (1 + a)x_n + b.$$

Entonces

$$x_n \leq \exp(na)x_0 + b \frac{\exp(na) - 1}{a}.$$

Demostración: Se tiene que

$$\begin{aligned}
 x_1 &\leq (1+a)x_0 + b \\
 x_2 &\leq (1+a)x_1 + b \leq (1+a)[(1+a)x_0 + b] + b = (1+a)^2 x_0 + (1+a)b + b \\
 x_3 &\leq (1+a)x_2 + b \\
 &\leq (1+a)[(1+a)^2 x_0 + (1+a)b + b] + b = (1+a)^3 x_0 + (1+a)^2 b + (1+a)b + b.
 \end{aligned}$$

Siguiendo un procedimiento inductivo se obtiene que

$$\begin{aligned}
 x_n &\leq (1+a)^n x_0 + b \sum_{j=0}^{n-1} (1+a)^j \\
 &= (1+a)^n x_0 + \frac{b}{a} \left(a \sum_{j=0}^{n-1} (1+a)^j \right) = (1+a)^n x_0 + \frac{b}{a} \left(((1+a) - 1) \sum_{j=0}^{n-1} (1+a)^j \right) \\
 &= (1+a)^n x_0 + \frac{b}{a} ((1+a)^n - 1).
 \end{aligned}$$

Pero de la expansión en series de Maclaurin de $\exp(a)$, se tiene que $1+a < \exp(a)$ con $a > 0$; de donde $(1+a)^n < \exp(na)$. Luego, reemplazando en la desigualdad obtenida para x_n se da que $x_n \leq \exp(na)x_0 + \frac{b}{a}(\exp(na) - 1)$.

Demostración Teorema 1.3.4

De la ecuación (1.3), la definición 1.3.3 y por ser Φ Lipschitz-continua, teniendo en cuenta que $x(t_i) = x_i$, se tiene que

$$\begin{aligned}
|x_{i+1} - \xi_{i+1}| &= |x_{i+1} - (\xi_i + h\Phi(t_i, \xi_i; h))| \\
&= |x_{i+1} - (x_i + h\Phi(t_i, x_i; h)) + (x_i + h\Phi(t_i, x_i; h)) - (\xi_i + h\Phi(t_i, \xi_i; h))| \\
&= |(x_{i+1} - x_i - h\Phi(t_i, x_i; h)) + (x_i - \xi_i) + h(\Phi(t_i, x_i; h) - \Phi(t_i, \xi_i; h))| \\
&= |\varepsilon_i(h) + (x_i - \xi_i) + h(\Phi(t_i, x_i; h) - \Phi(t_i, \xi_i; h))| \\
&\leq |\varepsilon_i(h)| + |x_i - \xi_i| + h|\Phi(t_i, x_i; h) - \Phi(t_i, \xi_i; h)| \\
&\leq \varepsilon(h) + |x_i - \xi_i| + hL|x_i - \xi_i| \\
&= \varepsilon(h) + (1 + hL)|x_i - \xi_i|.
\end{aligned}$$

Esto es, $|x_{i+1} - \xi_{i+1}| = \varepsilon(h) + (1 + hL)|x_i - \xi_i|$. Ahora por el lema A2.1 para t_i , con $i = 1, 2, \dots, N$ se obtiene

$$|x_i - \xi_i| \leq |x_0 - \xi_0| \exp(ihL) + \frac{\varepsilon(h)}{hL} (\exp(ihL) - 1).$$

Pero ya que $ih = t_i - t_0 \leq t_f - t_0$ y $x_0 = \xi_0$, entonces

$$|x_i - \xi_i| \leq \frac{\varepsilon(h)}{hL} (\exp((t_f - t_0)L) - 1).$$

APÉNDICE B

Un método de energía para el estudio de sistemas dinámicos no autónomos:

Este método se fundamenta en el siguiente teorema:

Teorema B1. Sea $F: \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}$, $E: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $G: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$. Sea $F(\ddot{x}, \dot{x}, x, t) = 0$ que define un sistema dinámico no-autónomo, y sea

$$E(\dot{x}, x) = E(\dot{x}(0), x(0)) + \int_0^t G(\dot{x}, x, s) ds$$

un *integrado* o *energía* desde la ecuación gobernante.

Entonces,

- a) Si tenemos que cada vez que $E(\dot{x}, x) \geq M \Rightarrow G(\dot{x}, x, t) \leq 0$, entonces una órbita que comienza en la región del espacio fase definida por $E(\dot{x}, x) \leq M$ está en la región.
- b) Similarmente, si tenemos que cuando $E(\dot{x}, x) \leq m \Rightarrow G(\dot{x}, x, t) \geq 0$, entonces una órbita que comienza en la región de espacio fase definida por $E(\dot{x}, x) \geq m$ está en la región.

Alternativamente, sea $\begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_y(x, y) \\ -E_x(x, y) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} G_1(x, y, t) \\ G_2(x, y, t) \end{pmatrix}$ que define un sistema

dinámico no-autónomo. Entonces,

- a) Si tenemos que cuando $E(x, y) \geq M \Rightarrow \nabla E \cdot \begin{pmatrix} G_1 \\ G_2 \end{pmatrix} \leq 0$, entonces una órbita que comienza en la región de fase definida por $E(x, y) \leq M$ está en la región.

- b) Si tenemos que cuando $E(x, y) \leq m \Rightarrow \nabla E \cdot \begin{pmatrix} G_1 \\ G_2 \end{pmatrix} \geq 0$, entonces una orbita que comienza en la región de fase definida por $E(x, y) \geq m$ está en la región.

Demostración:

Para probar a) procederemos por contradicción. Supóngase que $E|_{t=0} \leq M$ y sean t_0 y t_1 tales que $E|_{t=t_0} = M$, $E|_{t=t_1} > M$ y $E \geq M$ si $t \in [t_0, t_1]$. Entonces tenemos una contradicción:

$$0 < E|_{t_0}^{t_1} = \int_{t_0}^{t_1} G(\dot{x}, x, s) ds \leq 0.$$

Por lo tanto $E|_{t=t_1} \leq M$ para todo $t_1 \geq 0$. La prueba de b) es análoga.

Para la versión alternativa, si estamos en una orbita, entonces

$$\frac{dE}{dt} = \nabla E \cdot \begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = \nabla E \cdot \begin{pmatrix} G_1 \\ G_2 \end{pmatrix}.$$

Probar a), nótese que quiere decir que $\frac{dE}{dt} \leq 0$ siempre que $E \geq M$. Esto conduce a la prueba anterior. La prueba de b) es análoga.//

Nota: Este resultado es útil en “el atrapar” las orbitas en regiones de la forma $m \leq E(\dot{x}, x) \leq M$ (o $m \leq E(x, y) \leq M$ en la versión alternativa), la cual puede resultar en límites muy útiles para las variables dependientes. La forma alternativa se parece a los métodos de Lyapunov para determinar estabilidad. La función $E(x, y)$ es la análoga a la función energía de Lyapunov.

Nota: En la forma alternativa, el resultado puede ser extendido a un sistema de $2n$ ecuaciones con $2n$ incógnitas, esto se diría como sigue: Sea

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} E_{y_1} \\ \vdots \\ E_{y_n} \\ -E_{x_1} \\ \vdots \\ -E_{x_n} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} G_1 \\ \vdots \\ G_n \\ G_{n+1} \\ \vdots \\ G_{2n} \end{pmatrix} \text{ que define un sistema dinámico no-autónomo. Entonces,}$$

- (a) Si tenemos que cuando $E(x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n) \geq M \Rightarrow \nabla E^T \begin{pmatrix} G_1 \\ \vdots \\ G_{2n} \end{pmatrix} \leq 0$ para todo $t \geq 0$, entonces una órbita que comienza en la región de fase definida por $E(x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n) \leq M$ está en la región.

- (b) Si tenemos que cuando $E(x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n) \leq m \Rightarrow \nabla E^T \begin{pmatrix} G_1 \\ \vdots \\ G_{2n} \end{pmatrix} \geq 0$ para todo $t \geq 0$, entonces una órbita que comienza en la región de fase definida por $E(x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n) \geq m$ está en la región.

APÉNDICE C

Segundas derivadas de f

C.1 SEGUNDAS DERIVADAS A PARTIR DE f_x

De la **Sección 2.3** se tiene que

$$f_x = \frac{3y^2}{2x^2} + \frac{2Ay}{x^3} - \frac{4B}{x^5} - \frac{C}{x^2} + \frac{2D}{x^3} - \frac{E \sin(Ft)}{x^2}. \quad (\text{C.1})$$

Entonces, derivando (C.1) parcialmente con respecto a x , se obtiene que

$$f_{xx} = -\frac{3y^2}{2x^3} - \frac{6Ay}{x^4} + \frac{20B}{x^6} + \frac{2C}{x^3} - \frac{6D}{x^4} + \frac{2E \sin(Ft)}{x^3}. \quad (\text{C.2})$$

De igual forma derivando (C.1) parcialmente con respecto a y , se obtiene que

$$f_{xy} = \frac{3y}{x^2} + \frac{2A}{x^3}. \quad (\text{C.3})$$

Y por último, derivando (C.1) parcialmente con respecto a t , se obtiene que

$$f_{xt} = -\frac{EF \cos(Ft)}{x^2}. \quad (\text{C.4})$$

C.2 SEGUNDAS DERIVADAS A PARTIR DE f_y

De la **Sección 2.3** se tiene que

$$f_y = -\frac{3y}{x} - \frac{A}{x^2}. \quad (\text{C.5})$$

Entonces, derivando (C.5) parcialmente con respecto a x , se obtiene que

$$f_{yx} = \frac{3y}{x^2} + \frac{2A}{x^3}. \quad (\text{C.6})$$

De igual forma derivando (C.5) parcialmente con respecto a y , se obtiene que

$$f_{yy} = \frac{-3}{x}. \quad (\text{C.7})$$

Y por último, derivando (C.5) parcialmente con respecto a t , se obtiene que

$$f_{yt} = 0. \quad (\text{C.8})$$

C.3 SEGUNDAS DERIVADAS A PARTIR DE f_t

De la **Sección 2.3** se tiene que

$$f_t = \frac{EF \cos(Ft)}{x}. \quad (\text{C.9})$$

Entonces, derivando (C.9) parcialmente con respecto a x , se obtiene que

$$f_{xt} = -\frac{EF \cos(Ft)}{x^2}. \quad (\text{C.10})$$

De igual forma derivando (C.9) parcialmente con respecto a y , se obtiene que

$$f_{ty} = 0. \quad (\text{C.11})$$

Y por último, derivando (C.9) parcialmente con respecto a t , se obtiene que

$$f_{tt} = -\frac{EF^2 \sin(Ft)}{x}. \quad (\text{C.12})$$