



Programa de Simulación

- ✎ Introducción
- ✎ Modelado y Simulación de sistemas continuos en el tiempo
 - ✓ Sistemas amortiguados
 - ✓ Solución estacionaria
 - ✓ Solución dinámica
 - ✓ Sistemas distribuidos
 - ✓ Solución estacionaria
 - ✓ Solución dinámica
 - ✓ Ejemplos de modelado de procesos químicos
 - ✓ Identificación de sistemas
- ✎ Modelado y Simulación de sistemas discretos
 - ✓ Herramientas matemáticas
 - ✓ Ejemplos y herramientas



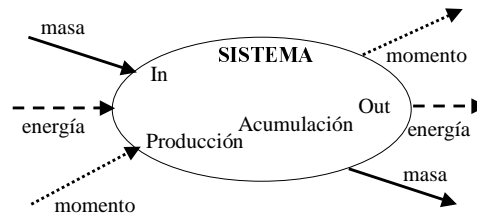
Sistemas de acumulación

- ✎ Introducción
- ✎ Desarrollo de balances macroscópicos
 - ✓ Masa (total y por componentes)
 - ✓ Energía
 - ✓ Térmica
 - ✓ Eléctrica
 - ✓ Momento
- ✎ Resolución de los sistemas amortiguados
 - ✓ Estacionaria
 - ✓ Dinámica



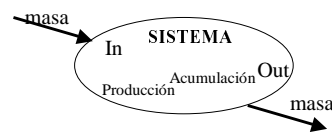
Introducción

- ✎ El objetivo es determinar ecuaciones (o condiciones) de continuidad en tres propiedades
 - ✓ Masa, Energía, momento
- ✎ Enunciado básico
 - ✓ $\text{Entrada} + \text{Producción} = \text{Salida} + \text{Acumulación}$
- ✎ Balances macroscópicos
 - ✓ No producen una descripción espacial
 - ✓ Sistemas amortiguados



Conservación de la masa total

- ✎ El principio de conservación es aplicado a un volumen de control
 - ✓ Enunciado
 - ✓ Velocidad de acumulación = Velocidad neta de los flujos másicos de salida
 - ✓ Aparecen
 - ✓ La integral de volumen de la densidad → la masa total
 - ✓ Integral de superficie del producto densidad por la velocidad de flujo que apunta al exterior → flujo neto másico



$$\frac{d}{dt} \iiint_V \rho dV = - \iint_A \rho(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dA$$



Conservación de la masa total II

Hipótesis

- ✓ Volumen bien mezclado
 - ✓ Densidad no tiene dependencia espacial
- $$\frac{d}{dt} \iiint_V \rho dV = \frac{d}{dt} \rho \iiint_V dV = \frac{d(\rho V)}{dt} = \frac{dm}{dt}$$

- ✓ Un numero numerable (m) de flujos (*in* & *out*) de entrada y salida
- ✓ Densidad de flujo homogénea
 - ✓ Densidad no depende de la superficie

$$\iint_A \rho(v \cdot n) dA = \sum_{i=1}^m \iint_{A_i} \rho v_i dA_i = \rho_{in} v_{in} A_{in} - \rho_{out} v_{out} A_{out}$$



Conservación de la masa total II

Balance de masa

$$\frac{d(\rho V)}{dt} = \rho_{in} v_{in} A_{in} - \rho_{out} v_{out} A_{out}$$

✓ Considerando

- ✓ Flujos volumétricos $\frac{dm}{dt} = \rho_{in} F_{in} - \rho_{out} F_{out}$

- ✓ Flujos másicos $\frac{dm}{dt} = w_{in} - w_{out}$



Conservación de componentes I

En las mezclas multicomponente

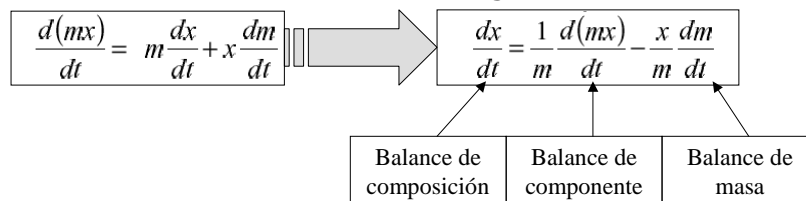
- ✓ La masa total debe ser descompuesta en balance de masa por componentes
- ✓ Los balances de componentes deben ser expresados en moles
- ✓ Las reacciones químicas modifican las cantidades
 - ✓ Vel. de acum = Vel. In – Vel. Out + Vel. de generación

$$\frac{d}{dt} \iiint_V \rho_i dV = w_{i,in} - w_{i,out} + \iiint_V r_i dV$$



Conservación de componentes II

Relación con el balance de masa global



Utilizando ω (moles/unidad de masa) y dos caudales (in & out)

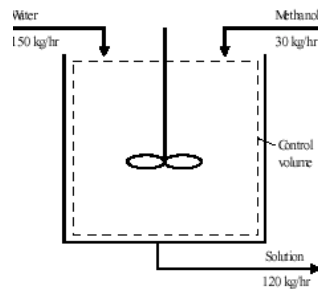
$$\left. \begin{aligned} \frac{dM}{dt} &= w_{in} - w_{out} \\ \frac{d(M\omega)}{dt} &= w_{in}\omega_{in} - w_{out}\omega_{out} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \omega \frac{dM}{dt} + M \frac{d\omega}{dt} = w_{in}\omega_{in} - w_{out}\omega_{out} \Rightarrow \frac{d\omega}{dt} = \frac{w_{in}}{M} (\omega_{in} - \omega_{out})$$



C. de componentes (Ejemplos)

Mezcla perfecta

- ✓ Dos flujos másicos de entrada
 - ✓ Agua (150 Kg/hora)
 - ✓ Metanol (30 Kg/hora)
- ✓ Un flujo de salida de 120 Kg/hora
- ✓ Objetivo: Determinar la evolución en la concentración de concentración en moles/Kg



C. de componentes (Ejemplos II)

Conservación de la masa

$$\frac{dM}{dt} = w_w + w_m - w_s$$

Conservación de componentes

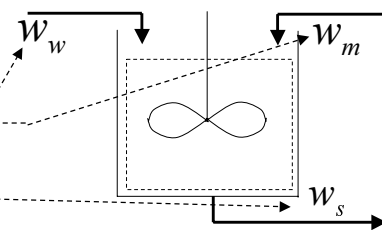
$$\frac{d(M\omega)}{dt} = 0 + \omega_m w_m - \omega_s w_s + 0$$

Hipótesis: Mezcla perfecta ($\omega = \omega_s$)

$$M \frac{d\omega}{dt} = \frac{d(M\omega)}{dt} - \omega \frac{dM}{dt}$$

$$\frac{d\omega}{dt} = \frac{1}{M} (\omega_m w_m - \omega w_s - \omega (w_w + w_m - w_s))$$

$$\frac{d\omega}{dt} = \frac{w_m}{M} (\omega_m - \omega) - \frac{w_w}{M} \omega$$





C. de componentes (Ejemplos III)

Modelo

$$\frac{dM}{dt} = w_w + w_m - w_s$$

$$\frac{d\omega}{dt} = \frac{w_m}{M}(\omega_m - \omega) - \frac{w_w}{M}\omega$$

Particularizando

$$\frac{dM}{dt} = 150 + 30 - 120 = 60$$

$$\frac{d\omega}{dt} = \frac{30}{M}(1 - \omega) - \frac{150}{M}\omega$$

Evolución de la masa

$$\frac{dM}{dt} = 60 \Rightarrow M(t) = 100 + 60 \cdot t$$

Evolución de la concentración

$$\frac{d\omega}{dt} = \frac{30}{M}(1 - \omega) - \frac{150}{M}\omega$$



C. de componentes (Ejemplos IV)

Solución de la concentración

$$\int_0^{\omega_1} \frac{1}{30 - 180\omega} d\omega = \int_0^T \frac{1}{100 + 60t} dt$$

$$\left[-\frac{1}{180} \ln(30 - 180\omega) \right]_0^{\omega_1} = \left[\frac{1}{60} \ln(100 + 60t) \right]_0^T$$

$$\ln\left(\frac{30}{30 - 180\omega_1}\right) = \frac{180}{60} \ln\left(\frac{100 + 60T}{100}\right)$$

$$\left(\frac{1}{1 - 6\omega_1}\right) = (1 + 0.6T)^3$$

$$\omega_1(T) = \frac{1}{6} \left(1 - \frac{1}{(1 + 0.6T)^3} \right) \quad \omega_1(1) = \frac{1}{6} \left(1 - \frac{1}{(1.6)^3} \right) \approx 0.126$$



Sistemas de balances

Un conjunto de balance de ecuaciones da lugar a un **sistema de ecuaciones** algebraicas o diferenciales

Sistemas de ecuaciones

✓ Forma del **espacio de estados**

✓ **Derivadas de primer orden a la izquierda**

✓ **Expresiones algebraicas a la derecha**

$$\frac{dx}{dt} = f(x, u, t) \Rightarrow \dot{x} = f(x, u, t)$$

Solución estacionaria

✓ No existe acumulación

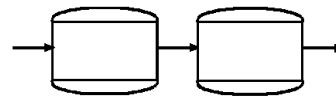
✓ Derivadas nulas

$$\Rightarrow 0 = f(x, u)$$



Sistemas de balances (Ejemplo I)

Se consideran dos
tanques en serie



✓ **Hipótesis**

✓ Densidad constante

✓ No existe reacción

✓ Se desprecia la acumulación
volumétrica total

- Volumen constantes

✓ **Objetivo**

✓ Expresión en términos del
espacio de estados

$$\text{In} = \text{Out} + \text{Acc}$$

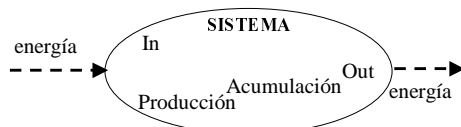
$$qC_{in} = qC_1 + V_1 \frac{dC_1}{dt} \Rightarrow \frac{dC_1}{dt} = \frac{q}{V_1} (C_{in} - C_1)$$

$$qC_1 = qC_2 + V_2 \frac{dC_2}{dt} \Rightarrow \frac{dC_2}{dt} = \frac{q}{V_2} (C_1 - C_2)$$

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{q}{V_1} & 0 \\ \frac{q}{V_2} & -\frac{q}{V_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{q}{V_1} \\ 0 \end{bmatrix} C_{in}$$



Conservación de la Energía



☞ Energía. Tres términos (por unidad de masa)

$$E = K + P + U$$

✓ Cinética

✓ Velocidad v

$$K = \frac{v^2}{2}$$

✓ Potencial

✓ Altura sobre una ref

$$P = gZ$$

✓ Interna

✓ Entalpía H y Trabajo pV

$$U = H + pV$$



Conservación de la Energía

☞ Términos que aparecen en el balance

✓ Acumulación

$$\frac{d}{dt} \iiint_V \rho E dV$$

✓ Intercambio debido a flujo de masa

$$\iint_A \rho E (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dA$$

✓ Aportación de calor Q

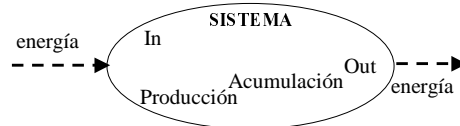
✓ Trabajo realizado por el sistema;

Trabajo de giro (W_s), viscoso (W_η)

$$W = W_s + \iint_A \rho p V_m (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dA - W_\eta$$



Conservación de la Energía



Balance global

$$\frac{d}{dt} \iiint_V \rho E dV = Q - \iint_A \rho (E - pV_m) (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dA + W_\eta - W_s$$

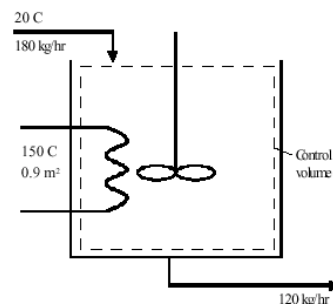
$$\frac{d}{dt} \iiint_V \rho E dV = Q - \iint_A \rho \left(H + \frac{v^2}{2} + gZ \right) (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dA + W_\eta - W_s$$



Conservación de la Energía (Ejemplo I)

Tanque bien agitado

- ✓ Flujo (180 Kg/hora) de entrada a 20 °C
- ✓ Flujo de salida 120 Kg/hora
- ✓ Un calentador con una superficie de 0.9 m² y vapor a 150 °C
 - ✓ $k=349$ Kg/hora m² °C
- ✓ Objetivo
 - ✓ Modelo de conservación de masa y energía

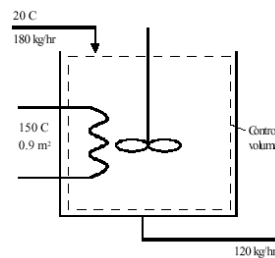




Conservación de la Energía (Ejemplo II)

Hipótesis

- ✓ Desprecian términos E. Cinética y potencial
- ✓ No se realiza trabajo
- ✓ E=U=H en fluidos incompresibles



$$\frac{d}{dt} \iiint_V \rho E dV = Q - \iint_A \rho \left(H + \frac{v^2}{2} + gZ \right) (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dA + W_\eta - W_s$$

$$\frac{d(MH)}{dt} = w_m H_m + Q - w_{out} H_{out} + 0$$



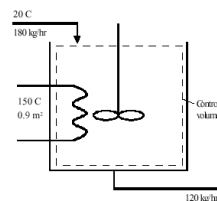
Conservación de la Energía (Ejemplo III)

Hipótesis

$$H = C_p (T - T_{ref})$$

Transferencia de calor

$$Q = kA(T_s - T)$$



$$\left. \begin{aligned} \frac{d(MH)}{dt} &= M \frac{dH}{dt} + H \frac{dM}{dt} \\ \frac{d(MH)}{dt} &= w_{in} H_{in} + Q - w_{out} H \end{aligned} \right\} \xrightarrow{\frac{dM}{dt} = w_{in} - w_{out}} \left\{ \begin{aligned} \frac{dM}{dt} &= w_{in} - w_{out} \\ \frac{dT}{dt} &= \frac{w_{in}}{M} (T_{in} - T) + \frac{kA}{MC_p} (T_s - T) \end{aligned} \right.$$



Balances de Energía mecánica

Se consideran cuando se admiten condiciones isotérmicas (en fluidos)

$$\frac{d}{dt} \iiint_V \rho E dV = Q - \iint_A \rho \left(H + \frac{v^2}{2} + gZ \right) (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dA + W_\eta - W_s$$

✓ Energía Interna (U) se convierte en la Energía libre de Helmholtz

$$A = - \int_{T_1}^{T_2} S dT - \int_{V_m}^{V_m'} p dV_m = - \int_{V_m}^{V_m'} p dV_m$$

✓ Entalpía (H) se convierte en la Energía libre de Gibbs

$$G = - \int_{T_1}^{T_2} S dT - \int_{p_1}^{p_2} \frac{1}{\rho} dp = - \int_{p_1}^{p_2} \frac{1}{\rho} dp$$

$$\frac{d}{dt} \iiint_V \rho \left(A + \frac{v^2}{2} + gZ \right) dV = - \iint_A \rho \left(G + \frac{v^2}{2} + gZ \right) (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dA - E_v - W_s$$



Conservación de momento

Momento (mv)

✓ Magnitud vectorial

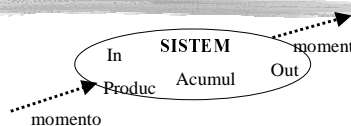
✓ Para la componente x

✓ Término de acumulación

✓ Momento

✓ Generación

- Gravedad $f_{xg} = \iiint_V \rho g_x dV$
- Presión $f_{xp} = \iint_A p n_x dA$
- Fricción $f_{xd} = f \frac{\rho v^2}{2}$
- Resultante r_x



$$\frac{d}{dt} \iiint_V \rho v_x dV$$

$$\iint_A (\rho v_x) (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dA$$



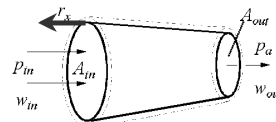
Conservación de momento

Ejemplo

$$\frac{d}{dt} \iiint_V \rho \mathbf{v} dV = 0 - \iint_A \rho \mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dA + \mathbf{f}_g + \mathbf{f}_p + \mathbf{f}_d + \mathbf{r}$$

Ejemplo

- ✓ Modelo de fuerzas y momento (velocidades) en un estrechamiento
 - ✓ Diferentes diámetros de entrada y salida
 - ✓ Se rechazan las fuerzas de fricción
 - ✓ SOLUCION ESTACIONARIA



- ✓ Balance de masas $0 = w_{in} - w_{out}$

- ✓ Balance de momento $0 = w_{x,in} v_{x,in} - w_{x,out} v_{x,out} + f_{xp} + r_x$

$$f_{xp} = A_{in} p_{in} - A_{out} p_{out} - p_{out} (A_{in} - A_{out}) = -A_{in} (p_{out} - p_{in})$$

- ✓ Energía mecánica

$$0 = \left(\frac{p_{in} - p_r}{\rho} + \frac{v_{x,in}^2}{2} \right) - \left(\frac{p_{out} - p_r}{\rho} + \frac{v_{x,out}^2}{2} \right)$$



Conservación de momento

Ejemplo

Modelo de acumulación estacionario

- ✓ Ecuación algebraica

- ✓ Entradas p_{in} y r_x

- ✓ Salidas q y p_a

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 = \left(\frac{p_{in}}{\rho} + \frac{1}{2} \left(\frac{q}{A_{in}} \right)^2 \right) - \left(\frac{p_a}{\rho} + \frac{1}{2} \left(\frac{q}{A_{out}} \right)^2 \right) \\ 0 = \rho q \frac{q}{A_{in}} - \rho q \frac{q}{A_{out}} - A_{in} (p_a - p_{in}) + r_x \end{array} \right.$$



Conclusiones

- ✍ Balances macroscópicos
 - ✓ Sistemas de acumulación
 - ✓ Ecuaciones de continuidad
 - ✓ Masa
 - ✓ Componentes
 - ✓ Energía
 - ✓ Momento
 - ✓ Sistemas DSCT
 - ✓ Sin acumulación
 - Ecuaciones algebraicas
 - ✓ Con acumulación
 - Ecuaciones diferenciales ordinarias



Sistemas acumulación. Solución estacionaria

- ✍ Métodos para ecuaciones algebraicas
 - ✓ Sistemas de ecuaciones Lineales
 - Eliminación gaussiana
 - Descomposición LU
 - Ejemplo (Columna de absorción)
 - ✓ Ecuaciones no lineales
 - ✓ Ecuación sencilla
 - ✓ Sistemas de ecuaciones
 - Método de Newton

Estado estacionario



Acumulación=0

$$f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$$

$$f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$$

...

$$f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$$



Descomposición LU

Eliminación gaussiana (Descomposición LU)

Dada la ecuación $Ax = u$

✓ Descomponer $A = LU$

✓ L Matriz triangular inferior

✓ 1's en la diagonal principal

✓ U Matriz triangular superior

Se considera el sistema de ecuaciones

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 3 & -4 \\ 3 & -2 & 3 & -7 \\ 5 & -18 & 29 & -23 \\ 4 & -4 & 0 & -29 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 5 \\ 1 \\ -25 \end{bmatrix} \Rightarrow \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & -2 & 3 & -4 & 0 \\ 3 & -2 & 3 & -7 & 5 \\ 5 & -18 & 29 & -23 & 1 \\ 4 & -4 & 0 & -29 & -25 \end{array} \right]$$



Descomposición LU. Ejemplo

1ª columna

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 3 & -4 \\ 3 & -2 & 3 & -7 \\ 5 & -18 & 29 & -23 \\ 4 & -4 & 0 & -29 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 5 \\ 1 \\ -25 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & -2 & 3 & -4 \\ 3 & 0 & 4 & -6 \\ 5 & 0 & -8 & 14 \\ 4 & 0 & -12 & -13 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 5 \\ 1 \\ -25 \end{bmatrix}$$

$u'_{ij} = \frac{a_{ij}}{l_{11}}$
 $u'_{ij} = a_{ij} - l_{j1}u_{1j}$

Columna i ($i=2$)

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj} \quad i \leq j$$

$$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj}}{u_{ii}} \quad j < i$$

$$b'_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}b'_k$$

1	1	-2	3	-4	0
3	1	0	4	-6	5
5	-2	0	0	2	7
4	1	0	0	-6	-30

$$A = LU = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 & 0 \\ 5 & -2 & 1 & 0 \\ 4 & 1 & -3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -2 & 3 & -4 \\ 0 & 4 & -6 & 5 \\ 0 & 0 & 2 & 7 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & -2 & 3 & -4 & 0 \\ 3 & 1 & 0 & 4 & 5 \\ 5 & -2 & 1 & 0 & 7 \\ 4 & 1 & -3 & 0 & -30 \end{array} \right]$$



Descomposición LU. Ejemplo II

➤ Solución: $Ux=L^{-1}b$

✓ Se realiza una propagación hacia atrás

$$\left[\begin{array}{cccc|c} 1 & -2 & 3 & -4 & 0 \\ 0 & 4 & -6 & 5 & 5 \\ 0 & 0 & 2 & 7 & 11 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 3 \end{array} \right]$$

Sustitución hacia atrás

$$x_n = \frac{b'_n}{u_{nn}} \quad x_j = \frac{b'_j - \sum_{k=j+1}^n u_{jk}x_k}{u_{jj}}$$

$$\left[\begin{array}{cccc|c} -4 & 1 & -2 & 3 & 0 & 4 \\ 5 & 0 & 4 & -6 & 0 & 0 \\ 7 & 0 & 0 & 2 & 0 & 4 \\ 3 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ \hline 3 & -4 & 1 & -2 & 0 & 0 & -2 \\ -6 & 5 & 0 & 4 & 0 & 0 & 12 \\ \mathbf{2} & 7 & 0 & 0 & 1 & 0 & 2 \\ \mathbf{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{array} \right]$$

Factores de escala

$$\left[\begin{array}{cccc|c} \textcircled{1} & -2 & 3 & -4 & 1 & 0 & 0 & 0 & 4 \\ \textcircled{4} & -6 & 5 & 0 & 1 & 0 & 0 & 3 \\ \textcircled{2} & 7 & 0 & 0 & 1 & 0 & 2 \\ \textcircled{3} & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{array} \right]$$



Descomposición LU Aplicación: Columna absorción

➤ Columna de absorción

✓ 6 platos

✓ Equilibrio $y_i = ax_i + b$

✓ Flujos de entrada

✓ Fase líquida

- 40.8 litros/hora

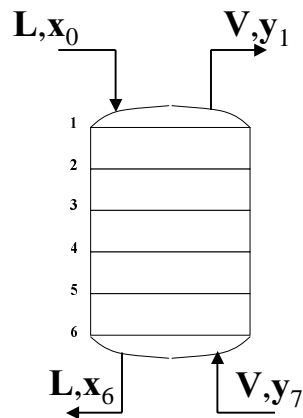
✓ Fase gaseosa

- 66.7 litros/hora

✓ Objetivo

✓ Obtener modelo de las composiciones de líquido

✓ Valores estacionarios





Descomposición LU Aplicación: Columna absorción

Estacionario

✓ No existe acumulación $\frac{dM}{dt} = 0$

✓ Considerando la relación de equilibrio $Lx_{i-1} + Vy_{i+1} = Lx_i + Vy_i$
 $y_i = ax_i + b$

✓ Se obtiene

$$\begin{bmatrix} -(L+Va) & Va & & & & \\ L & -(L+Va) & Va & & & \\ & L & -(L+Va) & Va & & \\ & & L & -(L+Va) & Va & \\ & & & L & -(L+Va) & Va \\ & & & & L & -(L+Va) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -Lx_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -L(y_7-b) \end{bmatrix}$$



Descomposición LU Aplicación: Columna absorción

Solución en MatLab

✓ Parámetros

```
a = 0.72;
b = 0;
G = 66.7;
L = 40.8;
x0 = 0;
y7 = 0.3;
```

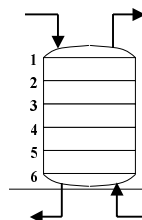
✓ Creación de
Matrices

```
eyelow = [zeros(1,6); eye(5) zeros(5,1)];
A = -(L+G*a)*eye(6) + L*eyelow + G*a*eyelow';
u = [-L*x0 0 0 0 0 -G*a*(y7-b)/a]';
x = A\u
```

✓ Invocación LU

```
x =
0.0921
0.1703
0.2368
0.2933
0.3413
0.3820
```

Solución





Ecuaciones algebraicas no lineales

Métodos de solución

- ✓ Una ecuación no lineal
 - ✓ Bisección
 - Intervalo mitad
 - ✓ Regula Falsi
 - Interpolación lineal inversa
 - ✓ Sustitución directa
 - ✓ Newton
- ✓ Sistemas de ecuaciones no lineales
 - ✓ Newton multidimensional



Métodos Ec. Algeb. (1 ecuación)

Bisección

- ✓ Determinar el punto medio c en un intervalo $[a, b]$

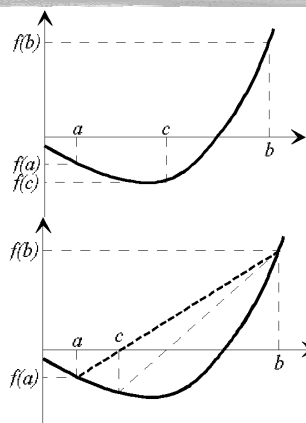
$$c = a + \frac{(b-a)}{2}$$

- ✓ Seleccionar un nuevo intervalo $[c, b]$ si $f(c) < 0$

Regula Falsi

- ✓ Determinar el punto medio

$$c = \frac{af(b) - bf(a)}{f(b) - f(a)}$$
- ✓ Seleccionar un nuevo intervalo $[a, c]$ o $[c, b]$





Métodos Ec. Algeb. (1 ecuación)

➤ Sustitución directa

✓ Procedimiento

✓ Re-escribir la ecuación

$$f(x) = 0 \Rightarrow x = g(x)$$

✓ Realizar una hipótesis inicial x_0

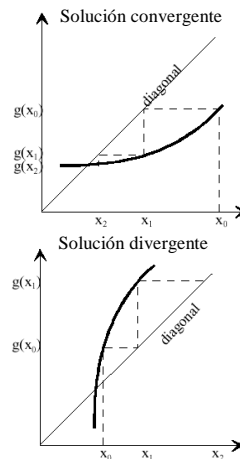
✓ Calcular nuevo valor $x_1 = g(x_0)$

✓ Repetir hasta que $x_{i+1} - x_i < \varepsilon$

✓ Problema

✓ Elección de $g(x)$ para que converga la solución

- Acelerador de *Wegstein* es una modificación muy extendida



Métodos Ec. Algeb. (1 ecuación)

➤ Realizar un desarrollo en serie de Taylor de $f(x)$ alrededor de x_0

$$f(x) = 0 = f(x_0) + f'(x_0)(x_1 - x_0) + HOI$$

➤ Considerar el primer orden

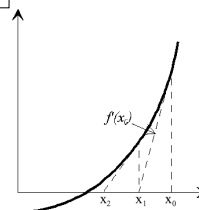
$$f(x_0) = -f'(x_0)(x_1 - x_0) \Rightarrow x_1 \approx x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

➤ Problemas

- ✓ Zonas con derivadas próximas a 0
- ✓ Soluciones múltiples

➤ Otras denominaciones

- ✓ Newton-Rapson





Métodos sistemas de ecuaciones. Newton

- Realizar un desarrollo en serie de Taylor alrededor de x_0

$$0 = f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x_1 - x_0) + HOI$$

- Considerar el primer orden

$$f(x^i) \approx J(x^i)(x^{i+1} - x^i) \Rightarrow x^{i+1} \approx x^i - J^{-1}(x^i)f(x^i)$$

- Matriz Jacobiana J está formada por las derivadas parciales evaluadas en dicho punto

✓ Ejemplo

✓ Sistema con dos variable

$$\frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{x}}(x^i) = \mathbf{J}(x^i) = \begin{bmatrix} \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_1} \right|_{x^i} & \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \right|_{x^i} \\ \left. \frac{\partial f_2}{\partial x_1} \right|_{x^i} & \left. \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \right|_{x^i} \end{bmatrix}$$



Métodos sistemas de ecuaciones. Newton

- Resolución del sistema según el método de Newton

✓ No utilizada $x^{i+1} \approx x^i - J^{-1}(x^i)f(x^i)$

✓ Se resuelve la ecuación como si se tratara de un sistema de ecuaciones lineales

$$\begin{cases} -f(x^i) \approx J(x^i)(x^{i+1} - x^i) \\ J(x^i)\Delta x = -f(x^i) \Rightarrow \mathbf{A}\Delta x = \mathbf{b} \end{cases}$$

✓ La solución se actualiza $x^{i+1} = x^i + \Delta x$

✓ Criterio de terminación

Δx suficientemente pequeño



Métodos de solución con MatLab

- ✍️ Sistemas de ecuaciones lineales
 - ✓ División de matrices
- ✍️ Ecuación no lineal
 - ✓ Función `fzero`
 - ✓ Combinación de métodos: bisección, secante, interpolación cuadrática inversa
 - ✓ Se pueden desarrollar funciones para utilizar el método de Newton
 - ✓ Ramirez et al. Univ. Massachussets
 - Función `new2dim`
 - Método de Newton 2 dimensiones
 - Definición de dos funciones: $f(x)$ y Jacobiano



Conclusiones métodos de sol. (problemas estacionarios)

- ✍️ Sistemas lineales
 - ✓ Descomposición LU
- ✍️ Sistemas no lineales
 - ✓ No existen procedimientos de obtención de solución exacta
 - ✓ Bisección
 - ✓ Ecuación no lineal
 - ✓ Método de Newton
 - ✓ Sistemas de ecuaciones no lineales



Sistemas acumulación. Solución dinámica

✍ Métodos de ODE (Ordinary Differential Equation)

- ✓ Un paso
 - ✓ Explícitos
 - Euler, Runge-Kutta
 - ✓ Implícitos
 - Problema de *Stiff*
- ✓ Multipaso
 - ✓ Adams, Gear



Sistemas acumulación: Solución dinámica

- ✍ Sistemas en los que el término de acumulación es no nulo
 - ✓ Ec. Conservación de masa, componentes, energía, momento
- ✍ Modelo matemático: Sistemas de ecuación diferenciales ordinarias

$$\frac{dx_1}{dt} = f_1(x_1, \dots, x_n, u_1, \dots, u_n)$$

...

$$\frac{dx_n}{dt} = f_n(x_1, \dots, x_n, u_1, \dots, u_n)$$



Métodos de resolución ODE

Un paso

✓ Explícitos

✓ Runge-Kutta

$$x(t+h) = x(t) + h\phi_e(x(t))$$

✓ Implícitos

$$x(t+h) = x(t) + h\phi_i(x(t+h))$$

Multipaso

✓ Gear

$$x(t+h) = x(t) + h\phi_m(x(t+h), x(t), x(t-h), \dots)$$



Método de Euler

Se considera la ecuación diferencial

$$\frac{dx}{dt} = f(x)$$

Desarrollo en serie de Taylor

$$x(t+h) = x(t) + \frac{dx}{dt}(t)h \Rightarrow \boxed{x(t+h) = x(t) + f(x(t))h} \quad h = \Delta t = t_{i+1} - t_i$$

Método de Euler comienza en un valor x_0 y realiza una serie de cálculos sucesivos

$$\mathbf{x}(t_{i+1}) = \mathbf{x}(t_i) + h\mathbf{f}(\mathbf{x}(t_i))$$

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$$



Método de Euler. Estabilidad I

➤ Considérese la ecuación $\frac{dx}{dt} = -Kx$

➤ Aproximación de Euler

$$x_{i+1} = x_i - hKx_i = (1 - hK)x_i$$

➤ Elección del paso o incremento $|1 - hK| < 1 \Rightarrow x_{i+1} = (1 - hK)x_i < x_i \Rightarrow x_\infty \rightarrow 0$
 $|1 - hK| > 1 \Rightarrow x_{i+1} = (1 - hK)x_i > x_i \Rightarrow x_\infty \rightarrow \infty$

$$|1 - hK| = 1 \Rightarrow -hK = -2 \Rightarrow h = \frac{2}{K}$$

➤ Criterio de estabilidad

$$h < \frac{2}{K}$$



Método de Euler. Estabilidad II

➤ Ejemplo

✓ Mezcla en un tanque

✓ Homogeneidad (DSCT)

✓ Balance de componentes

- Flujo y volumen constantes

✓ Código MatLab

$$\frac{d(Vc)}{dt} = q_{in}c_{in} - q_{out}c_{out}$$

$$V \frac{dc}{dt} = q(c_{in} - c)$$

$$\frac{dc}{dt} = \frac{q}{V}(c_{in} - c)$$

```
function dc=tanque(t,c)
% TANQUE representa el modelo de un sistema formado por un
tanque en el que se realiza una mezcla.
% Los caudales y volúmenes son considerados constantes
(parámetros del sistema)
cin=1;
q=1;
V=1;
dc=(q/V)*(cin-c);
```



Método de Euler. Estabilidad III

Elección del paso

`[t,y]=eulers('tanque',0,10,0,20)`

✓ 10 pasos → $h=1$

✓ 5 pasos → $h=2$

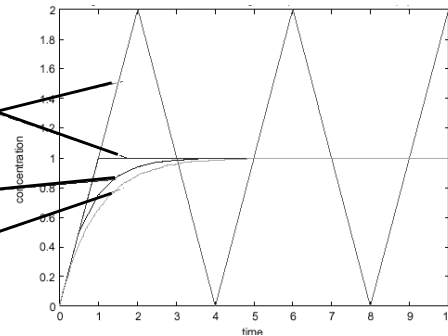
✓ 20 pasos → $h=0.5$

✓ 100 pasos → $h=0.1$

✓ Condición

✓ $H=2$

Se requieren pasos de integración pequeños para garantizar la estabilidad



Método de Runge-Kutta (I)

Familia de métodos en un paso

✓ No es un método único

Explícito

Dado $x(t+h) = x(t) + h\Phi_e(x(t))$

Ejemplo

✓ Aproximación de segundo orden

$$\Phi_e = ak_1 + bk_2$$

$$k_1 = f(t_i, x_i)$$

$$k_2 = f(t_i + ph, x_i + qhk_1)$$



Método de Runge-Kutta (II)

Si se considera

$$k_2 = f(t_i, x_i) + phf_i(t_i, x_i) + qhf(t_i, x_i)f_x(t_i, x_i) + HOT$$

$$\text{donde } f_x(t_i, x_i) = \frac{\partial f}{\partial x} \quad f_t(t_i, x_i) = \frac{\partial f}{\partial t}$$

$$x_{i+1} = x_i + h(af(t_i, x_i) + bf(t_i, x_i)) + h^2(bp f_i(t_i, x_i) + bq f(t_i, x_i)f_x(t_i, x_i)) + O(h^3)$$

Si se compara con un desarrollo en serie de Taylor de x respecto

$$x_{i+1} = x_i + \frac{dx}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2x}{dt^2} \Delta t^2$$

$$x_{i+1} = x_i + hf(t_i, x_i) + \frac{h^2}{2} (f_x(t_i, x_i) + f_x(t_i, x_i)f(t_i, x_i)) + O(h^3)$$

se obtiene

$$1 = a + b \quad bp = \frac{1}{2} \quad bq = \frac{1}{2}$$

Requerimientos de una aproximación de R-K

Elección de b determina procedim. R-K 2º orden



Método de Runge-Kutta (y III)

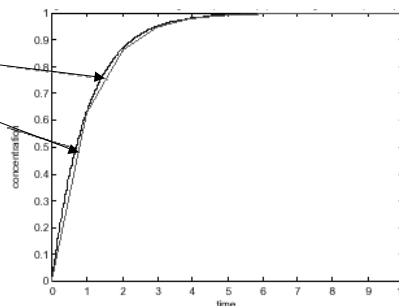
Clasificación

- ✓ b=0 => Método de Euler
- ✓ b=1 => Aproximación del punto medio
- ✓ b=1/2 => Importancia igual de $f(x_i)$ y $f(x_{i+1})$
 - p=q=1

Comparación de métodos

- ✓ 10 pasos para R-K4
- ✓ 1000 pasos para M. Euler
- ✓ Resultados
 - ✓ Los métodos R-K utilizan pasos más largos para la misma exactitud

Métodos R-K pueden tener problemas de estabilidad





Métodos de R-K en herramientas de simulación (MatLab)

Tamaños de paso variables

- ✓ Permiten un control de estabilidad y error
- ✓ Utilizan un estimador del error basado en una función de aproximación con orden mayor que el método de Runge-Kutta
 - ✓ Método R-K45
 - Aproximación de 4º orden
 - Estimador del error de 5º orden para el control de errores

```

>> [t x]
ans =
    0         0
    0.0001    0.0001
    0.0005    0.0005
    0.0025    0.0025
    0.0125    0.0124
    0.0625    0.0606
    0.1791    0.1640
    0.3485    0.2943
    0.5668    0.4328
    0.8350    0.5663
    1.1574    0.6860
    1.5431    0.7868
    2.0077    0.8664
    2.5790    0.9251
    3.3139    0.9649
    4.3139    0.9883
    5.3139    0.9961
    6.3139    0.9987
    7.3139    0.9996
    8.3139    0.9999
    9.3139    1.0000
   10.0000    1.0000

>> [t x]
ans =
    0         0
    0.0001    0.0001
    0.0002    0.0002
    0.0002    0.0002
    0.0005    0.0005
    0.0007    0.0007
    0.0010    0.0010
    0.0012    0.0012
    0.0025    0.0025
    0.0037    0.0037
    0.0050    0.0050
    0.0062    0.0062
    0.0125    0.0124
    0.0188    0.0188
    0.0251    0.0248
    0.0313    0.0309
    0.0627    0.0608
    0.0941    0.0908
    0.1255    0.1180
    0.1569    0.1452
    0.2083    0.2079
    0.4397    0.3558
    0.8810    0.4407
    0.7224    0.5144
    0.9029    0.5946
    1.0833    0.6616
    1.2638    0.7174
    1.4443    0.7641
    1.6606    0.8100
    1.8768    0.8470
    2.0931    0.8767
    2.3093    0.9006
    2.5593    0.9227
    2.8093    0.9398
    3.0593    0.9531
    3.3093    0.9634
    3.5593    0.9715
    
```

Matlab

- ✓ Métodos básicos
 - ✓ ode23 y ode45

```
[t, x]=ode45('tanque',[0 10],0)
```



Métodos implícitos

Euler

$$x(t) = x(t+h) + \frac{dx}{dt}(t+h)(-h)$$

$$x(t+h) = x(t) + f(x(t+h))h$$

Método implícito

- ✓ Comienza en x_0 y resuelve la ecuación no lineal en cada paso de tiempo

$$x(t_{i+1}) - x(t_i) - f(x(t_{i+1}))h = 0$$

$$x(t_0) = x_0$$

Ejemplo

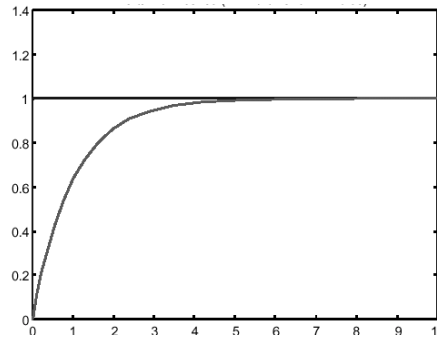
$$\frac{dx}{dt} = -Kx \Rightarrow x_{i+1} = x_i - hKx_{i+1} \Rightarrow x_{i+1} = \frac{1}{1+hK} x_i$$



Métodos para problemas "Stiff" (Rígidos)

Definición

- ✓ Sistemas lentos
- ✓ Componentes dinámicos (Ktes de tiempo) rápidos
 - ✓ La estabilidad de las dinámicas rápidas limita el tamaño del paso para los métodos explícitos pero no para los implícitos
- ✓ Ejemplo
 - ✓ Función en Matlab `ode23s` (Rosenbrock)



- Se considera el problema de dos tanques acoplados de dimensiones diferentes
 - ✓ $V1=0.01$ y $V2=0.99$



Métodos para problemas "Stiff" (Rígidos)

Comparación

	$V1 = 0,5$	$V1 = 0,001$
ode23	33 steps, 4968 flops	3995 steps, 63932 flops
ode23s	35 steps, 9453 flops	41 steps, 11143 flops

- Para los problemas con "Stiff" y otros tipos de problema se utilizan los métodos multipaso

- ✓ Se incrementa la exactitud mediante el uso de más de un punto previo de solución
 - ✓ ADAMS: Método explícito o semi-implícito (Método corrector-predictor)
 - ✓ GEAR: Método implícito. (Método BDF)



Método Adams

- Se considera la fórmula explícita para predecir

$$x_{i+1}^0 = x_i + hf_i$$

- Se considera la fórmula implícita para corregir
 - Realiza iteraciones (convergencia rápida)

$$x_{i+1}^{s+1} = x_i + \frac{h}{2} (f(x_{i+1}^{s+1}) + f(x_{i+1}^s))$$

- Denominación en Matlab *ode113*
 - Orden variable
 - Tamaño de paso variable
- Comparación (Problema de los 2 tanques)
 - Tolerancia por defecto y mitad

<i>ode23</i>	33 steps, 6463 flops	251 steps, 40180 flops
<i>ode45</i>	81 steps, 13539 flops	201 steps, 31539 flops
<i>ode113</i>	46 steps, 13056 flops	95 steps, 25576 flops



Método Gear

- La derivada se aproxima con múltiples elementos (o pasos)

- Nuevo valor

- Varios valores antiguos

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j x_{i+1-j} = hf_{i+1}$$

- Se resuelve con un método de Newton

- En Matlab se denomina *ode15s*

$$\alpha_0 x_{i+1} - hf_{i+1} - \sum_{j=1}^k \alpha_j x_{i+1-j} = 0$$

- Orden variable

- Son ventajosos cuando aumenta el tamaño del estado

- Dimensión 2 y 8

<i>ode23s</i>	35 steps, 9453 flops	41 steps, 170647 flops
<i>ode15s</i>	49 steps, 10701 flops	65 steps, 59228 flops