Sistemas distribuidos

- Modelado
  - ✓ Introducción
  - ✓ Análisis vectorial
  - ✓ Ejemplos
  - ✓ BVP (problema de valores de contorno) para ODE y PDE
- Solución estacionaria
  - ✓ Métodos de disparo
  - ✓ Métodos de diferencias finitas
- Solución dinámica
  - ✓ Clasificación de modelos
  - ✓ Métodos de elementos finitos

Introducción

- Desarrollo de balances microscópicos
  - ✓ Conservación de masa, componentes, energía (térmica), momento
  - ✓ Se generan problemas BVP
    - ✓ Las condiciones impuestas a la ecuación diferencial ya no son las condiciones iniciales

$$\frac{d^2x}{dt^2}(t) = f\left(x(t), \frac{dx}{dt}(t), u(t)\right)$$

$C.i \quad x(0) \text{ y } \frac{dx}{dt}(0)$

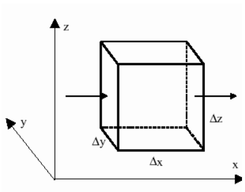
$C.i \quad x(a) \text{ y } x(b)$

Introducción

- Los balances se realizan
  - Macroscópicos
    - Sobre elementos de volumen de control
    - Independientes del espacio
  - Microscópicos
    - Sobre elementos de volumen diferencial

$$\Delta x \Delta y \Delta z$$

    - Dependientes de la variables espacial
    - Ejemplo
      - Caso sencillo: Flujo en una dirección x
      - General: No existe una dirección dominante



Análisis vectorial

- Variables escalares
  - Densidad, temperatura, concentración
  - Operador
    - Gradiente (Vector)

$$\nabla \rho = \left[\frac{\partial \rho}{\partial x}, \frac{\partial \rho}{\partial y}, \frac{\partial \rho}{\partial z} \right]$$

    - Laplaciano (Escalar)

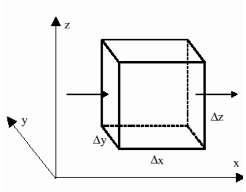
$$\nabla^2 \rho = \left[\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} \right]$$

      - Divergencia del gradiente Variables vectoriales
  - Velocidades
  - Flujos (molar, másico, volumétrico)
  - Operador
    - Divergencia

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z}$$

Ejemplo I: Principio de conservación de la masa

- Aplicación en un elemento de volumen
  - ✓ 1 dimensión
    $$\frac{d(\rho\Delta x\Delta y\Delta z)}{dt}=\Delta y\Delta z\left(\rho v_x\big|_x-\rho v_x\big|_{x+\Delta x}\right)$$
    $$\frac{\partial\rho}{\partial t}=-\frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x}$$



  - ✓ En las tres dimensiones
    $$\frac{\partial\rho}{\partial t}=-\left(\frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x)+\frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y)+\frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z)\right)$$
    $$\frac{\partial\rho}{\partial t}=-\nabla\cdot(\rho\mathbf{v})$$
  - ✓ Para fluidos incompresibles
    - ✓ No hay cambios en la densidad
      - No existen cambios de velocidad

$$\Rightarrow \quad \boxed{\nabla\cdot\mathbf{v}=0}$$

Ejemplo II

- Si se considera que el elemento de volumen se produce una reacción caracterizada por
  - ✓ Velocidad de reacción r_i
    $$\frac{\partial\rho_i}{\partial t}=-\nabla\cdot\mathbf{n}_i+r_i$$
  - ✓ Flujo másico
    - ✓ 2 componentes
      - Convectivo
      - Difusión

      $$\mathbf{n}_i=\rho_i\mathbf{v}+\mathbf{j}_i$$
    - ✓ Componente difusiva
      - Sistema binario
        - Expresado en términos de masa
          $$\mathbf{j}_A=-\rho_A D^m_{AB}\nabla\omega_A$$
        - Expresado en términos de concentración
          $$\mathbf{J}_A=-\rho_A D_{AB}\nabla c_A$$

Ejemplo II

- Balance de componente
  - ✓ Caso unidimensional *D*=cte y *v*=cte

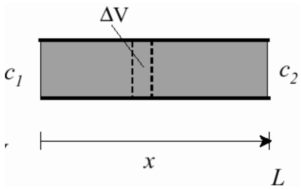
$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} N_A + R_A = -\frac{\partial}{\partial x}\left(v_x c_A - D_{AB}\frac{\partial c_A}{\partial x}\right) + R_A$$

$$= D_{AB}\frac{\partial^2 c_A}{\partial t^2} - v_x \frac{\partial c_A}{\partial x} + R_A$$

  - ✓ Caso tridimensional

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla c_A) - \nabla \cdot (c_A \mathbf{v}) + R_A$$

  - ✓ Si se considera un tubo
    - ✓ Longitud, sección, densidad constante
    - ✓ 3 casos
      - Flujo de convección
      - Flujo de difusión
      - Ambos



Ejemplo: Reactor tubular

- Convectivo $\frac{d(c_A \Delta x A)}{dt} = A\left(c_A v_x\big|_x - c_A v_x\big|_{x+\Delta x}\right)$

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = -v\frac{\partial c_A}{\partial x} \qquad 0 = -v\frac{\partial c_A}{\partial x} \Rightarrow c_A = \text{const}$$

C. Contorno $c_A(x) = c_1 \quad x = 0$

- Difusión $\frac{d(c_A \Delta x A)}{dt} = A\left(J_A\big|_x - J_A\big|_{x+\Delta x}\right)$

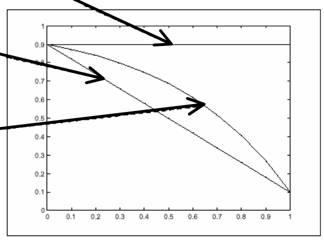
$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = -\frac{\partial J_A}{\partial x} = D_{AB}\frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} \qquad 0 = D_{AB}\frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} \Rightarrow \frac{\partial c_A}{\partial x} = \text{const}$$

C. Contorno $c_A(x) = c_1 \quad x = 0$; $c_A(x) = c_2 \quad x = 1$

- Ambos $\frac{d(c_A \Delta x A)}{dt} = A\left(c_A v\big|_x - c_A v\big|_{x+\Delta x}\right) + A\left(J_A\big|_x - J_A\big|_{x+\Delta x}\right)$

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = -v\frac{\partial c_A}{\partial x} - \frac{\partial J_A}{\partial x} = -v\frac{\partial c_A}{\partial x} + D_{AB}\frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} \qquad 0 = -v\frac{\partial c_A}{\partial x} + D_{AB}\frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2}$$

Solución estacionaria



Problemas de valor de contorno
(*Boundary Value Problems*-BVP)

- Tienen una descripción que depende del espacio
  - Estacionario
    - Modelos
      - 1 dimensión → ODE
      - 2-3 dimensiones → PDE (elípticas)
        - Valores de contorno en el espacio
  - No estacionario
    - Modelos con PDE (parabólica e hiperbólicas)
    - Condiciones de contorno (*Matemáticamente hablando*)
      - Espacio (Valores de contorno)
        - Ejemplo: Temperatura en el borde
      - Valores iniciales
        - Ejemplo: Concentración inicial

Solución estacionaria

- No existe acumulación
- Se tienen condiciones de valores de contorno

$$\frac{dx_1}{dz} = f_1(x_1, x_2, z) \qquad \qquad x_1(0) = x_{10}$$
$$\text{con condiciones iniciales}$$
$$\frac{dx_2}{dz} = f_2(x_1, x_2, z) \qquad \qquad x_2(L) = x_{20}$$

- Métodos de solución
  - Tiro ("*Shooting*")
  - Diferencias finitas (ODE-BVP y PDE)
  - Elementos finitos (ODE-BVP y PDE)

Métodos de Tiro (*“Shooting”*)

- Si se considera $\frac{dx_1}{dz} = f_1(x_1, x_2, z)$
  $\frac{dx_2}{dz} = f_2(x_1, x_2, z)$
- Procedimiento general

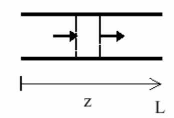
Hipótesis $x_1(0) = x_{10}$, $x_2(0) = x_{20}$ → Resolver ODE → Calcular $x_1(0) = x_{10}$, $x_2(L) = x_{2L}$

Realizar nueva hipótesis

  - ✓ Para realizar las iteraciones se utilizan las funciones que resuelven ecuaciones no lineales
    - Error (valores de contorno) = función (Condiciones iniciales)
  - ✓ En Matlab
    - Utilización de la función
      - *Fzero*
      - *newsol*

Métodos de disparo (*“Shooting”*)

- Ejemplo
  - ✓ Sea un reactor tubular
    - ✓ Balance de componente (Estacionario)
    - ✓ Velocidad constante
    - ✓ Cinética de primer orden



  - ✓ Casos
    - ✓ Conocida concentración de entrada
      - TRIVIAL
    - ✓ Conocida la concentración de salida

$$v_z \frac{dc_A}{dz} = -kc_A$$

Modelo Matlab →

```
function dc=tubular(t,c)
% Tubular es un reactor tubular con una cinética de primer orden
v=1;
k=10;
dc=-k/v*c
```

```
[t,c]=ode23(‘tubular’,[0 0.35],1);
```

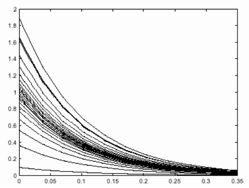
Métodos de disparo (*"Shooting"*)

- Se considera la función de error

```
function error=funerror(ci)
cL=0.05;
[z,cz]=ode23('tubular',[0 0.35], ci):
cLp=c(max(size(cz)),1);
error=cL-cLp;
```

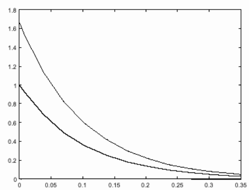
```
c0n=fzero('funerror',1)
```

```
c0n =
    1.6664
```



```
c0n=newsol('funerror',1)
```

```
c0n =
    1.6664
```



Métodos de diferencias finitas

- Se define un número de puntos
- Se discretizan las derivadas en diferencias

$$\frac{dx}{dz} \approx \frac{c_i - c_{i-1}}{h}$$

Diferencias hacia atrás

$$\frac{dc}{dz} \approx \frac{c_{i+1} - c_{i-1}}{h}$$

$$\frac{d^2c}{dz^2} \approx \frac{c_{i+1} - 2c_i + c_{i+1}}{2h}$$

Diferencias centradas

- La ODE se transforma en un conjunto de ecuaciones algebraicas

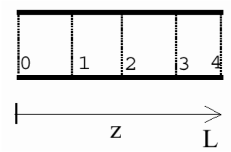
$$v\frac{dc_A}{dz} = -kc_A \quad \Rightarrow \quad v\frac{c_i - c_{i-1}}{h} \approx -kc_i$$

- Se resuelve el sistema de ecuaciones

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

Métodos de diferencias finitas

- Ejemplo: Reactor tubular
  - ✓ 2 puntos interiores
  - ✓ Conocida la concentración de entrada
    - ✓ SISTEMA DE ECUACIONES ALGEBRAICAS



$$\frac{1}{h}\begin{bmatrix}1&0&0&0\\-1&1&0&0\\0&-1&1&0\\0&0&-1&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_1\\c_2\\c_3\\c_4\end{bmatrix}+\frac{k}{v}\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_1\\c_2\\c_3\\c_4\end{bmatrix}=\frac{1}{h}\begin{bmatrix}c_0\\0\\0\\0\end{bmatrix}$$

$$\frac{1}{h}\left(c_{A_1}-c_0\right)+\frac{k}{v}c_{A_1}=0$$
$$\frac{1}{h}\left(c_{A_2}-c_{A_1}\right)+\frac{k}{v}c_{A_2}=0$$
$$\frac{1}{h}\left(c_{A_3}-c_{A_2}\right)+\frac{k}{v}c_{A_3}=0$$
$$\frac{1}{h}\left(c_{A_4}-c_{A_3}\right)+\frac{k}{v}c_{A_4}=0$$

$$\begin{bmatrix}1+\frac{hk}{v}&0&0&0\\-1&1+\frac{hk}{v}&0&0\\0&-1&1+\frac{hk}{v}&0\\0&0&-1&1+\frac{hk}{v}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_1\\c_2\\c_3\\c_4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}c_0\\0\\0\\0\end{bmatrix}$$

Solución no estacionaria

- Aplicación de la ecuación de continuidad sobre un elemento de volumen finito
  - ✓ Existe término de acumulación
- Modelo matemático
  - ✓ Ecuación diferencial en derivadas parciales (PDE) con condiciones iniciales y de contorno
  - ✓ Se realiza una clasificación de las ecuaciones diferenciales

Tipos de ecuaciones diferenciales

- Estado estacionario
  - ✓ Elípticas

$$0 = D\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2}\right) + kc$$

- Ecuaciones con término de difusión
  - ✓ Parabólicas

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2}\right) + kc$$

- Ecuaciones con término convectivo
  - ✓ Hiperbólica de primer orden

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v\frac{\partial c}{\partial x} + kc$$

- Ecuaciones de onda
  - ✓ Hiperbólicas

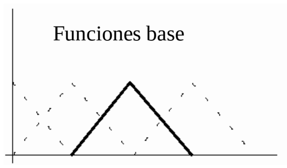
$$\frac{\partial^2 c}{\partial t^2} = D\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2}\right) + kc$$

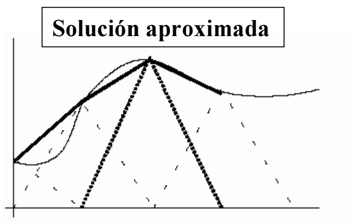
Métodos de solución

- Métodos de líneas
  - ✓ Discretización del espacio
  - ✓ Resolución de ODE's
- Diferencias finitas
  - ✓ Discretizar el espacio en un número de puntos
  - ✓ Resolver el sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias
- Elementos finitos
  - ✓ Se asume que se puede discretizar la solución a un conjunto de funciones base *a trozos*
  - ✓ Ajustar las funciones base para que coincidan con la ecuación
  - ✓ Resolver el sistema de ecuaciones diferenciales

Método de elementos finitos

- Procedimiento
  - Definir unas funciones base
  - Aproximar la solución con un conjunto de dichas funciones
    - ELEMENTOS
  - Utilizar la aproximación en la ecuación diferencial en derivadas parciales (PDE)
  - Minimizar el error residual (MWR)
    - Estacionario. Sistema de ecuaciones algebraicas
    - No estacionario. Sistema de ecuaciones diferenciales
- Método
  - Selección de funciones base
    - Ejemplo: TRIANGULARES
  - Medida del error
    - Integral del error





Conclusiones

- En los sistemas distribuidos las condiciones de contorno configuran un problema BVP cuyas soluciones
  - Estacionarios. Métodos de disparo
- Son necesarios procedimientos de minimización del error
  - Obtener una solución
    - *ferror(Param)=0* → (Métodos de solución de ecuaciones algebraicas)
- Los métodos de solución son complementarios
  - Ejemplos
    - Resolución de PDE necesitan procedimientos de ODE's
      - Resolución de ODE necesitan procedimientos de solución de ecuaciones algebraicas