Conceptos básicos de sistemas de ecuaciones diferenciales en la simulación de procesos ambientales y químicos

Apellidos, nombre	Torregrosa López, Juan Ignacio (jitorreg@iqn.upv.es)
Departamento	Ingeniería Química y Nuclear
Centro	Universitat Politècnica de València

1 Resumen de las ideas clave

En este artículo se presentan los conceptos básicos sobre sistemas de ecuaciones diferenciales que ha de tener presente un ingeniero ante la necesidad de valorar modelos de procesos ambientales y/o químicos.

Se centra sobre una visión general de la resolución de sistemas que implican sistemas de:

- Ecuaciones algebraicas lineales y no lineales
- EDO
- EDP

2 Introducción

Los sistemas de ecuaciones diferenciales son elementos habituales en los cálculos desarrollados por ingenieros. En particular, son frecuentes en los modelos matemáticos de procesos químicos y ambientales.

En esta introducción se describe la Utilidad del artículo, los conocimientos previos necesarios, los objetivos, el esquema de contenidos y la secuencia de aprendizaje que se propone.

2.1 Utilidad

Al acabar este artículo, el alumno sabrá reconocer distintas estrategias de cálculo numérico y analítico de interés en la resolución de problemas y procesos estacionarios y dinámicos

2.2 Conocimientos previos

Para obtener el mayor beneficio de este artículo docente, es necesario tener conocimientos básicos de cálculo.

2.3 Secuencia de aprendizaje

Inicialmente se aprenderá la importancia de los métodos numéricos en la ingeniería en general y en la simulación de procesos en particular. Posteriormente, se estudiará su aplicación en la resolución de modelos de interés en la ingeniería ambiental y química.

2.4 Esquema de contenidos

A continuación, se presenta el esquema de los contenidos de este artículo docente.

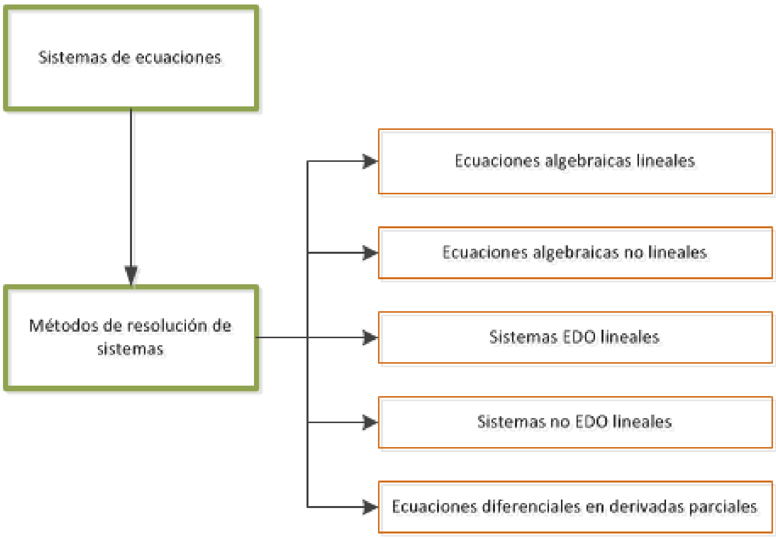

Figura 1. Esquema de contenidos

3 Objetivos

Una vez el alumno estudie con detenimiento este artículo docente, será capaz de reconocer algunos métodos matemáticos de aplicación directa en la simulación de procesos dinámicos y en el estado estacionario.

4 Sistemas de ecuaciones

Los sistemas de ecuaciones más frecuentes en la ingeniería pueden clasificarse en dos grupos: sistemas en estado estacionario y sistemas dinámicos.

En los *sistemas en el estado estacionario* se busca definir la configuración de sistemas cuya solución no varía con el tiempo.

Para el caso de los *sistemas dinámicos*, se pretende conocer la evolución de los mismos con el tiempo a partir del conocimiento que se tenga en el mismo en un momento inicial.

Como es sabido, la mayoría de los modelos de procesos ambientales y/o químicos se formulan partiendo del establecimiento de los balances de materia y energía.

Como resultado de todo ello se obtienen ecuaciones algebraicas, ecuaciones diferenciales, ecuaciones integrales o una combinación de ellas. Las soluciones para estas ecuaciones requieren de la aplicación de métodos analíticos y métodos numéricos.

El análisis numérico o cálculo numérico es la rama de las matemáticas que se encarga de diseñar algoritmos para, a través de números y reglas matemáticas simples, simular procesos matemáticos más complejos aplicados a procesos del mundo real.

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

El análisis numérico cobra especial importancia con la llegada de los ordenadores. Los ordenadores son útiles para cálculos matemáticos extremadamente complejos, pero en última instancia, operan con números binarios y operaciones matemáticas simples.

Existen distintos software especializados para realizar este tipo de tratamientos matemáticos. Por ejemplo, Matlab® utiliza métodos matemáticos y numéricos previamente programados. Los ingenieros pueden resolver problemas de ingeniería usando este software sin conocer con exactitud los métodos utilizados. No obstante, conocerlos con algo de detalle es imprescindible. Scilab® también es un buen ejemplo de este tipo de software; su potencia semejante a la del conocido Matlab®, su similitud en el lenguaje de programación y su licencia gratuita, hacen de Scilab® una excelente alternativa.

La siguiente figura, relaciona distintas áreas de la ingeniería con las herramientas matemáticas habituales que se aplican en cada una de ellas.

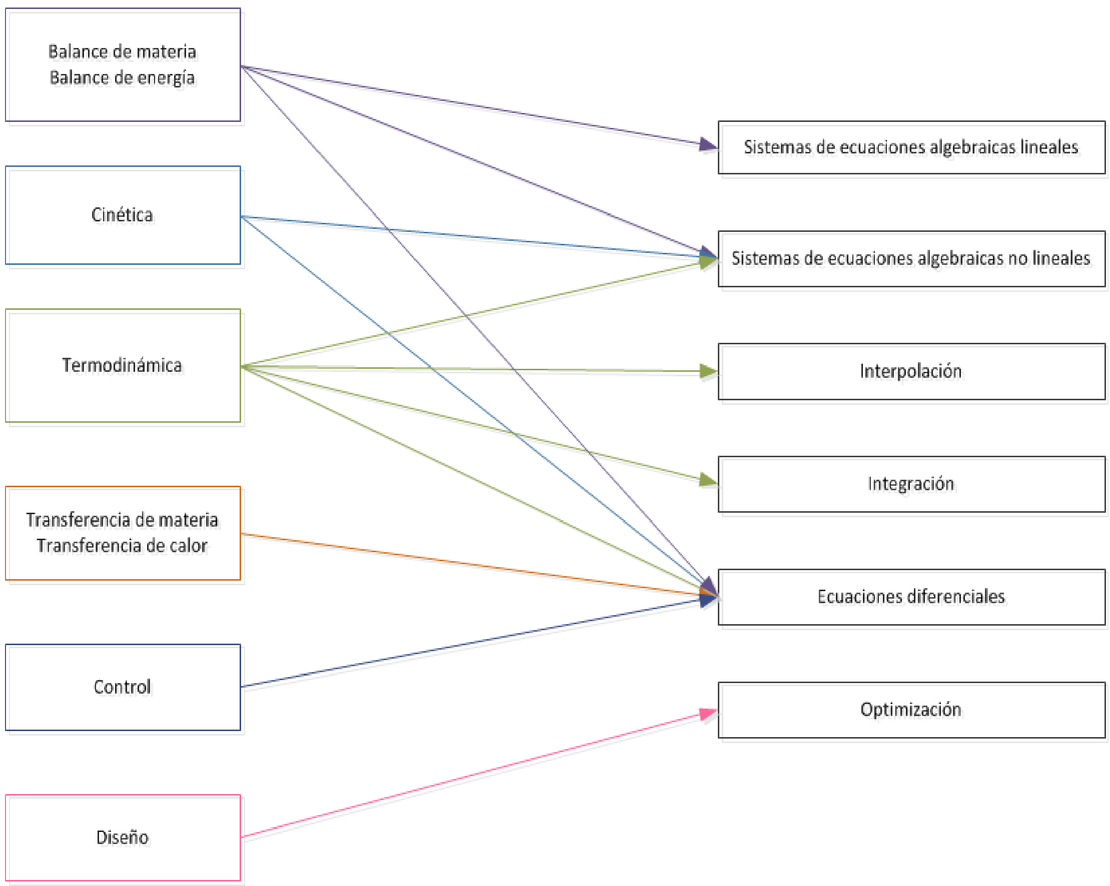

Figura 2. Relación entre áreas de la ingeniería y las herramientas matemáticas

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

5 Métodos de resolución de sistemas

Existen distintos métodos de cálculo para resolver modelos matemáticos. En este artículo, se reúnen las características de los métodos más utilizados para el análisis y la simulación de los modelos más frecuentes.

En la siguiente tabla se define, desde el punto de vista matemático, la tipología de ecuaciones diferenciales y sus aplicaciones para el modelado de sistemas de interés en la ingeniería ambiental y la ingeniería química.

Tabla 1. Tipología de ecuaciones diferenciales y su aplicación en ingeniería ambiental y química.

Tipo	Modelo	Estado
EDO – Condiciones Iniciales	Cinética química Reactores de mezcla perfecta Flujo Pistón	Dinámico Dinámico Estacionario
EDO – Condiciones frontera	Transmisión de calor en una dirección Difusión de materia en una dirección	Estacionario Estacionario
EDP – 1 variable independiente	Transmisión de calor en una dirección Difusión de materia en una dirección	Dinámico Dinámico
EDP – 2 variables independiente	Transmisión de calor en dos direcciones Transmisión de calor en dos direcciones	Dinámico Dinámico
EDP – 3 variables independiente	Transmisión de calor en dos direcciones Transmisión de calor en dos direcciones	Dinámico Dinámico
EDP – Elípticas	Transmisión de calor en varias direcciones Transmisión de calor en varias direcciones	Estacionario Estacionario

EDO – Ecuaciones Diferenciales Ordinarias

EDP –Ecuaciones en Derivadas Parciales

Este artículo, se centra sobre una visión general de la resolución de sistemas que implican sistemas de:

- Ecuaciones algebraicas lineales y no lineales
- EDO
- EDP

La siguiente tabla, muestra una relación entre los métodos matemáticos y los procesos y sistemas a simular.

Tabla 2. Relación habitual entre métodos matemáticos y procesos de la ingeniería.

Método	Sistema a simular
Ecuaciones algebraicas lineales	Simulación del proceso de fabricación de amoniaco Transmisión de calor en un conducto
EDO lineales y no lineales	Fermentador Reactores Químicos
Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (tiempo y una o dos dimensiones espaciales)	Transmisión de calor en un cilindro Reacciones químicas en sedimentos Dispersión de contaminantes en la atmósfera

5.1 Ecuaciones algebraicas lineales

Los balances de materia y energía requieren, en muchos casos, plantear sistemas de ecuaciones lineales algebraicas que, de forma analítica o iterativa, permitan su resolución.

Conviene recordar que, en general, un sistema con *m* ecuaciones lineales y *n* incógnitas puede ser escrito en forma normal como:

$$\begin{array}{ccccc} a_{11}x_1 & +a_{12}x_2 & +\dots & +a_{1n}x_n & =b_1 \\ a_{21}x_1 & +a_{22}x_2 & +\dots & +a_{2n}x_n & =b_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1}x_1 & +a_{m2}x_2 & +\dots & +a_{mn}x_n & =b_m \end{array}$$

Ecuación 1. Sistema de ecuaciones lineales

Donde x_i son las incógnitas y los números a_{ij} son los coeficientes del sistema. Es posible reescribir el sistema separando con coeficientes con notación matricial:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

Ecuación 2. Sistema de ecuaciones lineales

Representando cada matriz con una única letra, el sistema quedaría representado por:

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

Ecuación 3. Sistema de ecuaciones lineales

Donde *A* es una matriz *m* por *n*, *x* es un vector columna de longitud *n* y *b* es otro vector columna de longitud *m*. El sistema de eliminación de Gauss-Jordan se aplica a este tipo de sistemas, sea cual sea el cuerpo del que provengan los coeficientes.

Resolver un sistema de ecuaciones lineales es encontrar todas sus soluciones. Existen diversos métodos analíticos para ello:

- Igualación
- Sustitución
- Reducción
- Gauss
- Método de la Matriz Inversa
- Regla de Cramer

Un caso particular en este tipo de sistemas de interés en procesos es cuando se quiere calcular los flujos en un proceso con retroalimentación.

{}	***Actividad 1:*** Entra en los hipervínculos de cada método analítico para repasar la base de los mismos.

5.2 Ecuaciones algebraicas no lineales

Las ecuaciones algebraicas no lineales, al igual que las lineales, son de uso frecuente en la descripción de procesos.

Por ejemplo, para calcular la concentración de las especies involucradas en un equilibrio, es necesario resolver un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales.

Con el fin de ilustrar su aplicación, se presentan las siguientes reacciones que forman parte de un sistema en equilibro en el que participan cuatro especies: A, B, C y D.

$$\begin{array}{rclrcccl} 2A+B & \rightleftharpoons & C & K_1 & = & \frac{C_C}{C_A^2 C_B} & = & 5\times 10^{-4} \\ A+D & \rightleftharpoons & C & K_2 & = & \frac{C_C}{C_A C_B} & = & 4\times 10^{-2} \\ C_{A,0}=40 & & C_{B,0}=15 & C_{C,0} & = & 0 & & C_{D,0}=10 \end{array}$$

Ecuación 4. Ejemplo: proceso con reacciones simultáneas

Sean x1 y x2 las conversiones de las reacciones anteriores, entonces:

$$\begin{array}{rclcl} C_A & = & C_{A,0}-2x_1C_{B,0}-x_2C_{D,0} & = & 40-30x_1-10x_2 \\ C_B & = & (1-x_1)C_{B,0} & = & 15-15x_1 \\ C_C & = & C_{C,0}+x_1C_{B,0}+x_2C_{D,0} & = & 15x_1+10x_2 \\ C_D & = & (1-x_2)C_{D,0} & = & 10-10x_2 \\ \Rightarrow\ f_1(x_1,x_2) & = & \frac{C_C}{C_A^2C_B}-5\times 10^{-4} & = & 0 \\ f_2(x_1,x_2) & = & \frac{C_C}{C_AC_B}-4\times 10^{-2} & = & 0 \end{array}$$

Ecuación 5. Ejemplo

Así se obtiene un sistema de 6 ecuaciones con 6 incógnitas que puede ser definido como un *sistema de ecuaciones algebraicas no lineal*.

De forma genérica, el sistema de ecuaciones puede escribirse como:

$$\begin{array}{c} a_{1,11}x_1^2+a_{1,12}x_1x_2+\cdots+a_{1,nn}x_n^2+b_{1,1}x_1+\cdots+b_{1,n}x_n+c_1=0 \\ a_{2,11}x_1^2+a_{2,12}x_1x_2+\cdots+a_{2,nn}x_n^2+b_{2,1}x_1+\cdots+b_{2,n}x_n+c_2=0 \\ \cdots \\ a_{n,11}x_1^2+a_{n,12}x_1x_2+\cdots+a_{n,nn}x_n^2+b_{n,1}x_1+\cdots+b_{n,n}x_n+c_n=0 \end{array}$$

Ecuación 6. Sistema de ecuaciones algebraicas no lineales

Para estos casos, se requieren de soluciones numéricas o gráficas para obtener el valor de las variables que satisfacen el sistema. Existen varios métodos iterativos aplicables como son, entre otros, el método de sustitución y el método de Newton-Raphson, perfectamente aplicable al ejemplo anterior.

5.3 Sistemas de EDO lineales

Los sistemas más sencillos se definen con sistemas de ecuaciones o ecuaciones lineales de primer orden.

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

Por ejemplo, al estudiar el balance de materia de un reactor con volumen constante, se obtiene una ecuación diferencial lineal de primer orden. En esta ocasión, A se transforma en B.

$$A \rightarrow B$$

Ecuación 7. Ejemplo

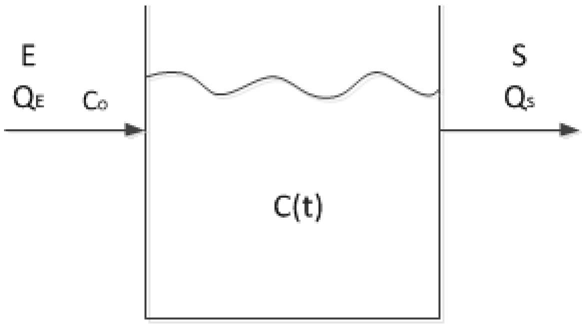

Figura 3. Ejemplo: reactor de volumen constante

Dónde *E* denota la corriente de entrada con caudal *QE* y *S* la corriente de salida con caudal *QS*. C_o es la concentración inicial del producto B y *C(t)* es la concentración de B en el reactor que varía con el tiempo.

El balance de materia resulta una ecuación lineal de primer orden:

$$Q_E \cdot C_o - Q_S \cdot C_{(t)} = \frac{dC_{(t)}}{dt}$$

Ecuación 8. Balance de materia del ejemplo

Los algoritmos de resolución de Sistemas de EDOs implican la evaluación explícita de las derivadas y el avance paso a paso en el tiempo o espacio sin necesidad de recurrir a procedimientos iterativos.

Existen dos métodos de cálculo numérico para resolver estas ecuaciones muy difundidas y fáciles de usar. Estos son:

- El Método de Euler
- El Método de Runge-Kutta de cuarto orden

5.4 Sistemas de EDO no lineales

Cuando se trabajan con ecuaciones que describen procesos de difusión con reacción química en el estado estacionario, es necesario resolver ecuaciones del siguiente tipo:

$$D\frac{d^2c}{dx^2} = kc$$

Ecuación 9. Ejemplo: EDO no lineal

Con las condiciones de contorno: $\frac{dc}{dx}(x) = 0, c(R) = c_0$

Se trata de EDO no lineales que requieren de resoluciones numéricas. Existen métodos numéricos basados en las diferencias finitas que permiten la discretización de la variable espacial y la resolución de estas ecuaciones.

Otro ejemplo de ecuaciones no lineales es la resultante del modelado de la conducta en estado estacionario de una especie A en un reactor de flujo pistón donde no hay dispersión axial. Para este caso, el modelo se define en forma de ecuación diferencial con una variable dependiente (C_A) y una variable independiente (z) sobre la cual se dispersa radialmente la especie. La C_A vendrá determinada por las condiciones iniciales de la variable dependiente (z=0).

$$u\frac{dC_A}{dz} = -kC^2 \text{ con } C_A(z=0)=C_{A0}$$

Ecuación 10. Ejemplo de EDO no lineal

Estos sistemas de ecuaciones se denominan EDO con valor inicial, independientemente de su orden.

5.5 Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales

Las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, aquellas que relacionan la variación de una variable en función de varias variables independientes, también son habituales en el ámbito de la ingeniería química y ambiental.

Por ejemplo, la ecuación la transmisión de calor para un sólido se puede describir como sigue:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{\dot{e}_{gem}}{k} = 0$$

Ecuación 11. Ecuación de transmisión de calor genérica

En estado transitorio, sin generación de calor, la ecuación puede reordenarse como:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = \frac{1}{\alpha}\frac{\partial T}{\partial t}$$

Ecuación 12. Ejemplo: Ecuación de transmisión de calor en estado transitorio sin generación de calor

En estado estacionario, sin generación de calor, la ecuación puede reordenarse según:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0$$

Ecuación 13. Ecuación de transmisión de calor en estado estacionario sin generación de calor.

Como ejemplo específico de aplicación de estas ecuaciones podría considerarse una pared de longitud L, en estado transitorio. En este caso, la ecuación correspondiente quedaría simplificada de la siguiente forma:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha}\frac{\partial T}{\partial t}, 0 < x < L, t > 0$$

Ecuación 14. Caso particular en estado transitorio sin generación de calor para una pared L.

Se trata de un sistema definido por una EDP con una variable dependiente y una condición de frontera. En este caso el método de diferencias finitas puede ser aplicado para transformar la ecuación diferencial en un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden con el tiempo como única variable dependiente.

De igual manera si se considera una simetría que implique dos o tres ejes de transmisión de calor, la ecuación se transforma en una EDP con dos o tres condiciones de frontera respectivamente.

6 Cierre

En ingeniería ambiental e ingeniería química es frecuente encontrar modelos basados en ecuaciones diferenciales que requieren de métodos numéricos para su resolución. Las herramientas que el usuario tiene a su disposición para afrontar la resolución numérica de estos sistemas es el uso de software donde computar las soluciones. Entre los más usados se encuentran Matlab® y Scilab®.

7 Bibliografía

Bruce A. Finlayson, Introduction to Chemical Engineering Computing, pág. 307-310.

N.J. Scenna et al., "Modelado, simulación y optimización de Procesos químicos", Capiítulo III,

Disponible en:

http://www.edutecne.utn.edu.ar/modelado-proc-quim/modelado-proc-quim.pdf

O. Levenspiel, "Flujo de Fluidos. Intercambio de calor", Editorial reverte, 1993. Capítulo II.