

## **TEMA 1:**

# **SISTEMAS MODELADOS POR ECUACIONES DIFERENCIALES EN INGENIERÍA QUÍMICA. CLASIFICACIÓN. GENERALIDADES.**

- 1. INTRODUCCIÓN. PLANTEAMIENTO DE PROBLEMAS EN INGENIERÍA QUÍMICA**
- 2. PROBLEMAS EXPRESADOS MEDIANTE ECUACIONES DIFERENCIALES EN INGENIERÍA QUÍMICA**
- 3. METODOS GENERALES DE RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS EXPRESADOS MEDIANTE ECUACIONES DIFERENCIALES**
- 4. HERRAMIENTAS PARA LA RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS EN INGENIERÍA QUÍMICA MEDIANTE MÉTODOS NUMÉRICOS**
- 5. BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA**

---

**Asignatura:** Cálculo Avanzado de Procesos Químicos.  
**Titulación:** Ingeniería Química  
**Curso:** Cuarto  
**Cuatrimestre:** Primero

## 1. INTRODUCCIÓN. PLANTEAMIENTO DE PROBLEMAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

Los problemas básicos de la Ingeniería Química pueden clasificarse en dos grupos:

i) **Problemas de estado estacionario (e.e.):** En estos problemas lo que se busca es definir la configuración del sistema. La solución encontrada no cambia con el tiempo (de ahí su clasificación como estado estacionario).

Ejemplos típicos en Ingeniería Química: distribución de temperaturas en un sólido en e.e. equilibrio en reacciones químicas, problemas de difusión en e.e.

ii) **Problemas de propagación:** En estos problemas el objetivo es determinar el comportamiento de un sistema con el tiempo conocida su configuración en el estado inicial ( $t=0$ ). Por esta razón también se conoce a estos problemas como "dinámicos".

Ejemplos típicos en Ingeniería Química incluyen el estudio de la cinética química (estado no estacionario de las reacciones químicas), la propagación de ondas de presión en un fluido, el comportamiento no estacionario de una columna de adsorción o la velocidad de aproximación al equilibrio de una columna de destilación.

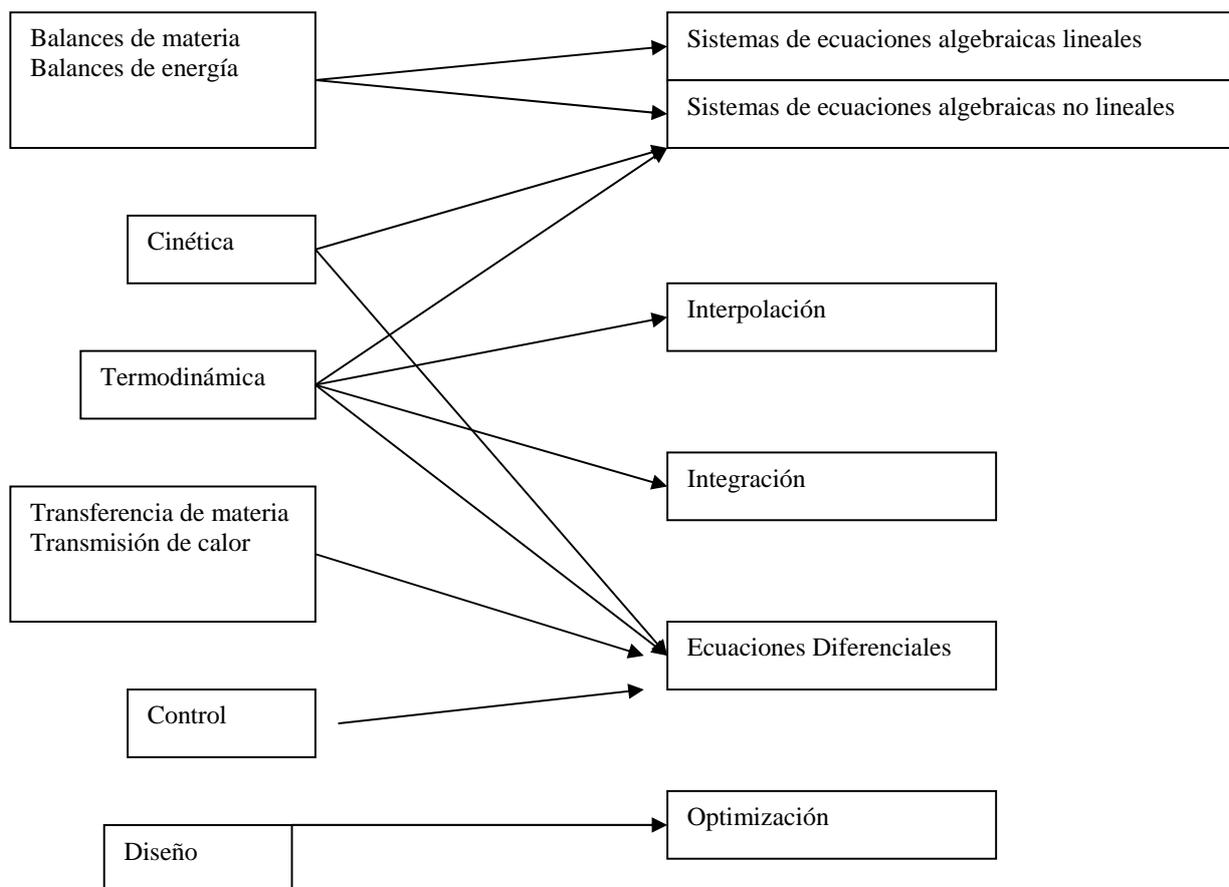


Figura 1.1. Tipos de problemas habituales en Ingeniería Química y técnicas de resolución adecuadas.

Ambos tipos de procesos se modelan mediante ecuaciones matemáticas. El tipo de ecuaciones que es necesario manejar para uno y otro tipo de sistemas es totalmente diferente: los fenómenos relacionados con los procesos de equilibrio requieren habitualmente de la resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas, así como de técnicas de interpolación e integración. Los problemas de propagación se resuelven empleando ecuaciones diferenciales.

El tratamiento matemático de los problemas ingenieriles implica cuatro pasos básicos:

1. **Formulación:** Expresar el problema en lenguaje matemático. Para ello es necesario conocer las leyes físicas que gobiernan el proceso que estudiamos.
2. **Solución:** Llevar a cabo las operaciones de cálculo necesarias para obtener deducciones lógicas a partir del modelo matemático formulado en el punto 1.
3. **Interpretación:** desarrollo de relaciones entre los resultados matemáticos (o numéricos) obtenidos en el punto 2 y su significado en el mundo físico.
4. **Refinamiento:** El reciclado del procedimiento anterior para obtener mejores predicciones (si las comprobaciones experimentales así lo sugieren).

La resolución de la mayor parte de los problemas ingenieriles comienza formulando las ecuaciones de conservación de la masa o de la energía para el sistema problema:

Entrada de propiedad conservada - salida de propiedad conservada +  
producción de cantidad conservada = acumulación de propiedad conservada.

Ó

Velocidad de Entrada de propiedad conservada - velocidad de salida de  
propiedad conservada + velocidad de producción de cantidad conservada =  
velocidad de acumulación de propiedad conservada.

Como resultado podemos obtener ecuaciones algebraicas, ecuaciones diferenciales, ecuaciones integrales, o combinaciones de ellas. En este curso nos centraremos en los problemas que se formulan mediante ecuaciones diferenciales y en los métodos numéricos adecuados para su resolución.

## 2. PROBLEMAS EXPRESADOS MEDIANTE ECUACIONES DIFERENCIALES EN INGENIERÍA QUÍMICA.

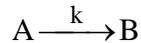
Matemáticamente los fenómenos de velocidad (dinámicos) se representan mediante DERIVADAS. Las relaciones matemáticas entre derivadas y otras funciones constituyen las ecuaciones diferenciales.

La solución de los problemas dinámicos planteados en I.Q. implica la resolución de las ecuaciones diferenciales que los modelan.

Las ecuaciones diferenciales se resuelven eliminando las derivadas que contienen y obteniendo las FUNCIONES que cumplen con la relación expresada en la ecuación diferencial.

### EJEMPLO 1.1.

La cinética es la parte de la Ingeniería Química dedicada al estudio de las reacciones químicas. El problema habitual para el investigador en cinética de las reacciones químicas consiste en determinar la VELOCIDAD con la que un compuesto A (reactivo) se transforma en otro compuesto B (producto).



En los casos más sencillos esta velocidad puede expresarse de la forma:

$$r_A = \frac{dC_A}{dt} = -kC_A \quad (1.1.)$$

$$C_A(0) = C_{A0}$$

Desde un punto de vista cinético la ecuación (1.1.) indica que la velocidad de desaparición de A (variación de la concentración de A con el tiempo) es proporcional a la concentración de A presente en cada instante en el sistema, siendo la constante de proporcionalidad igual a k, además como A es un reactivo su concentración disminuirá con el tiempo por lo tanto su velocidad es "negativa".

Matemáticamente la ecuación (1.1.) es una expresión que relaciona una derivada de primer orden de la variable  $C_A$  respecto a la variable t,  $\left(\frac{dC_A}{dt}\right)$ , con una función de  $C_A$ ,  $(kC_A)$ , es por tanto UNA ECUACION DIFERENCIAL, podemos añadir además que es una ecuación diferencial ordinaria, de primer orden, lineal, y que junto a la condición  $C_A(0)=C_{A0}$  constituye un problema del valor inicial, tal y como veremos más adelante.

Así la solución de la ecuación (1.1.) será una FUNCIÓN de  $C_A$  con respecto al tiempo,  $C_A=F(t)$  que cumpla que su derivada sea en cada instante igual al producto de la función en ese instante por la constante de proporcionalidad k

### 3. MÉTODOS GENEALES DE RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS EXPRESADOS MEDIANTE ECUACIONES DIFERENCIALES.

Los METODOS aplicados a la resolución de Ecuaciones Diferenciales de interés en Ingeniería Química son muchos y dependen principalmente del tipo de ecuación diferencial generado en cada problema. De un modo general podemos distinguir dos grandes grupos:

- i) Métodos analíticos
- ii) Métodos numéricos

*Los métodos analíticos* proporcionan una solución exacta en forma de función continua a lo largo de todo el espacio de integración de la ecuación.

Su principal ventaja es precisamente proporcionar una solución exacta.

Sus desventajas son:

- Cada método se ajusta a un tipo determinado de ecuación diferencial (y existen muchos tipos de ecuaciones diferenciales).
- No todos los tipos de ecuaciones diferenciales disponen de un método analítico para su resolución. Es decir, los métodos analíticos se encuentran limitados a ecuaciones diferenciales "*sencillas*" que normalmente no representan los problemas reales que se pueden encontrar en Ingeniería Química.
- Además, incluso en los casos más sencillos aplicar estos métodos implica un alto conocimiento de complicadas técnicas de análisis matemático que no siempre están al alcance del Ingeniero.

Los sistemas dinámicos reales de I. Q. se modelan mediante ecuaciones diferenciales cuya resolución solo es posible mediante métodos numéricos. Por esta razón estos métodos, y sobre todo su aplicación a los sistemas de Ingeniería Química son de gran interés para los ingenieros químicos. Estos métodos proporcionan una **SOLUCIÓN APROXIMADA** en forma de valores en **PUNTOS DISCRETOS** del intervalo de integración.

Su ventaja radica en su carácter general, es decir un método numérico puede aplicarse a ecuaciones diferenciales de distintos tipos, en realidad el método numérico adecuado para un problema depende más del tipo de condiciones límite del sistema que del tipo de ecuación diferencial que lo modela.

Sus desventajas son:

- No proporciona una solución exacta ni continua.
- Se basan en cálculos repetitivos y tediosos por lo que para llevarse a cabo necesitan de la ayuda de la herramienta informática.

- No proporcionan soluciones generales sino aproximaciones a los problemas concretos planteados (los métodos analíticos permiten obtener soluciones generales para sistemas en los que no se han definido las condiciones límite).

En este curso nos centraremos en el estudio de los métodos numéricos adecuados a la resolución de problemas de Ingeniería Química modelados por ecuaciones diferenciales.

#### 4. HERRAMIENTAS PARA LA RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS EN INGENIERIA QUÍMICA MEDIANTE METODOS NUMERICOS.

Problemas "difíciles"  $\Rightarrow$  solución mediante aproximaciones numéricas  $\Rightarrow$  cálculos largos y repetitivos  $\Rightarrow$  necesidad de herramientas potentes y rápidas para realizarlos  $\Rightarrow$  desarrollo de herramientas de computación científica: colección de herramientas, técnicas y teorías requeridas para resolver en un ordenador los modelos matemáticos que describen problemas en ciencia e ingeniería.

Tipos de lenguaje:

Lenguajes tradicionales de programación: Fortran, C, pascal, Basic.

Toolboxes matemáticas: MATLAB, MATHCAD.

Entornos matemáticos: Maple, Mathematica, Axiom, Macsyma, etc.

Características de un buen programa de cálculo:

**Fiable:** el programa no debe tener errores y debe ser fiable para calcular aquello que se supone debe calcular.

**Robusto:** el programa debe poder tratar con, por ejemplo, datos de entrada no adecuados, de forma satisfactoria para el usuario.

**Universal:** un programa universal es aquel que puede ser utilizado por una gran variedad de máquinas, sin alteraciones y produciendo idénticos resultados.

**Fácil de mantener:** todo programa debe poder ser modificado, con el mínimo esfuerzo.

**Eficiente:** El programa debe calcular aquello para lo que ha sido programado en el mínimo tiempo posible.

## 5. BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA

En este capítulo no se especifica ninguna bibliografía ya que se ha propuesto a los alumnos como parte de los ejercicios prácticos la búsqueda e identificación de bibliografía general de resolución de problemas expresados por ecuaciones diferenciales con especial atención a la aplicación a la resolución de problemas de Ingeniería Química entre los fondos de la biblioteca de la ETSIIyT y a través de Internet.