

TEMA 7:

PROBLEMAS DE INGENIERÍA QUÍMICA CON MÁS DE UNA VARIABLE INDEPENDIENTE: APLICACIÓN DE LAS ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES.

1. INTRODUCCIÓN: SISTEMAS DE INGENIERÍA QUÍMICA CON MÁS DE UNA VARIABLE INDEPENDIENTE.
2. CLASIFICACIÓN DE PROBLEMAS PDE.
3. MÉTODOS DE RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS PDE.
 - 3.1. Métodos numéricos basados en aproximaciones por diferencias finitas.
4. BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA.

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

1. INTRODUCCIÓN: SISTEMAS DE INGENIERÍA QUÍMICA CON MÁS DE UNA VARIABLE INDEPENDIENTE.

Las leyes de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía aplicadas al flujo de fluidos dan lugar a las ecuaciones de variación que describen el cambio en la velocidad, temperatura y concentración con respecto al tiempo y a la posición en un sistema. Estos sistemas, cuando tienen más de una variable independiente, se modelan mediante ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES (PDEs).

1. ⇒ Así el balance de masas, definido por:

$$\left(\begin{array}{l} \text{velocidad de} \\ \text{acumulación} \\ \text{de masa} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{l} \text{velocidad de} \\ \text{entrada de masa} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{l} \text{velocidad de} \\ \text{salida de masa} \end{array} \right) \text{ aplicado a un elemento de volumen}$$

$\Delta x \Delta y \Delta z$ por el que circula un fluido, da como resultado la *ecuación de continuidad*:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \left(\frac{\partial}{\partial x} \rho v_x + \frac{\partial}{\partial y} \rho v_y + \frac{\partial}{\partial z} \rho v_z \right)$$

donde ρ es la densidad del fluido y v_x , v_y , v_z son las velocidades del fluido en las tres coordenadas rectangulares.

2. ⇒ La aplicación del balance de cantidad de movimiento a un elemento de volumen $\Delta x \Delta y \Delta z$ por el que circula un fluido isoterma:

$$\left(\begin{array}{l} \text{velocidad de} \\ \text{acumulación} \\ \text{de cantidad de} \\ \text{movimiento} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{l} \text{velocidad de} \\ \text{entrada de} \\ \text{cantidad de} \\ \text{movimiento} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{l} \text{velocidad de} \\ \text{salida de} \\ \text{cantidad de} \\ \text{movimiento} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{l} \text{suma de fuerzas} \\ \text{que actúan sobre} \\ \text{el sistema} \end{array} \right)$$

lleva a la *ecuación de movimiento* en las tres direcciones:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho v_j = - \left(\frac{\partial}{\partial x} \rho v_x v_j + \frac{\partial}{\partial y} \rho v_y v_j + \frac{\partial}{\partial z} \rho v_z v_j \right) - \left(\frac{\partial}{\partial x} \tau_{xj} + \frac{\partial}{\partial y} \tau_{yj} + \frac{\partial}{\partial z} \tau_{zj} \right) - \frac{\partial p}{\partial j} + \rho g_j, \quad j = x, y, z$$

donde: p = presión, ρ_j son los componentes de la aceleración gravitacional y τ_{ij} son los componentes del tensor esfuerzo cortante.

3. ⇒ La aplicación del balance de energía, definido por:

$$\left(\begin{array}{l} \text{velocidad de} \\ \text{acumulación} \\ \text{de energía} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{l} \text{velocidad de en -} \\ \text{trada de energía} \\ \text{por convección} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{l} \text{velocidad de} \\ \text{salida de energía} \\ \text{por convección} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{l} \text{aporte neto de ca -} \\ \text{lor por conducción} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{l} \text{trabajo neto aportado} \\ \text{por el sistema a los} \\ \text{alrededores} \end{array} \right)$$

en un elemento de volumen $\Delta x \Delta y \Delta z$ por el que circula un fluido no isotermoda como resultado:

La ecuación de energía:

$$\rho C_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = - \left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right) - T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_p \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) - \left[\tau_{xx} \frac{\partial v_x}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial v_y}{\partial y} + \tau_{zz} \frac{\partial v_z}{\partial z} \right] - \left[\tau_{xy} \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) + \tau_{xz} \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right) + \tau_{yz} \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right) \right]$$

donde T es la temperatura, C_v es la capacidad calorífica a volumen constante y q_i son los componentes del flujo de energía dados por la ley de Fourier de la conducción de calor:

$$q_i = -k \frac{\partial T}{\partial i}, i = x, y, z, \text{ siendo } k \text{ la conductividad térmica.}$$

Para la conducción en sólidos, donde los términos de velocidad son cero, la ecuación de energía se simplifica considerablemente; si, además, incluimos la ley de Fourier en la expresión de la ecuación de energía para sólidos, se obtiene la expresión:

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right) = k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right)$$

donde C_p es la capacidad calorífica, que a presión constante reemplaza a C_v , y k se asume constante dentro del sólido.

4. ⇒ Por último, la ecuación de continuidad para un componente A en una mezcla binaria de densidad constante y coeficiente de difusión D_{AB} también constante es:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left(v_x \frac{\partial C_A}{\partial x} + v_y \frac{\partial C_A}{\partial y} + v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} \right) = D_{AB} \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right) + R_A,$$

donde C_a es la concentración molar de A y R_a es la velocidad molar de producción del componente A. Cuando $R_a=0$ y $v_x=v_y=v_z=0$ esta ecuación se reduce a la segunda ley de Fick de la difusión:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_{AB} \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right)$$

2. CLASIFICACIÓN DE PROBLEMAS PDE.

De forma general, las ecuaciones diferenciales parciales (PDE) pueden clasificarse atendiendo a:

- 1) su **orden**
- 2) su **linealidad**
- 3) sus **condiciones de integración.**

1) El **orden** de una ecuación PDE se corresponde con la derivada parcial de mayor orden presente en la ecuación.

2) Con respecto a la **linealidad**, las ecuaciones PDE pueden clasificarse como

- a) *lineales*,
- b) *cuasi-lineales* y
- c) *no lineales*.

Ejemplo 7.1.

Consideremos la PDE: $a(\cdot) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + 2b(\cdot) \frac{\partial^2 u}{\partial y \partial x} + c(\cdot) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + d(\cdot) = 0$ En esta ecuación:

- a) si los coeficientes son constantes o son funciones de las variables independientes $[(\cdot) \equiv (x, y)]$ la ecuación es lineal
- b) si los coeficientes contienen funciones de las variables independientes, de la variable dependiente o de las derivadas de orden inferior al orden de la ecuación, $\left[(\cdot) \equiv x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y} \right]$ entonces la ecuación se clasifica como cuasi-lineal
- c) Por último, si los coeficientes contienen funciones de derivadas de orden igual al orden de la ecuación, $\left[(\cdot) \equiv x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \right]$ la ecuación se clasifica como no lineal.

3) Las **condiciones iniciales y frontera** asociadas a una ecuación PDE deben especificarse de forma que permitan obtener una solución numérica única para cada ecuación. En general las condiciones de contorno asociadas a ecuaciones PDE se clasifican en tres grupos:

1-Condicion de Dirichlet (o condiciones de primera clase):

los valores de la variable dependiente se dan en valores fijos de la variable independiente.

2-Condicion de Neumann (o condiciones de segunda clase):

la derivada de la variable dependiente se da como valor constante o como función de la variable independiente.

3-Condicion de Robbins (o condiciones de tercera clase):

la derivada de la variable dependiente se expresa como función de la misma variable dependiente.

Condicion de Cauchy :

Un problema que combine condiciones de primera y segunda clase se denomina problema de Cauchy.

En función de las condiciones iniciales y de frontera presentes en un problema, las ecuaciones PDE pueden clasificarse así mismo como problemas del valor inicial (PDE-IVP) o problemas del valor frontera (PDE-BVP).

PROBLEMAS PDE-IVP: al menos una de las variables independientes tiene una región abierta, es decir se especifica el punto inicial pero no el final,

PROBLEMA PDE-BVP: cuando para todas las variables independientes se especifican los valores iniciales y finales, es decir se encuentran en regiones cerradas, el problema es del tipo valor frontera.

Ejemplo 7.2.

Tomando como ejemplo la ecuación PDE: $\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ que describe el cambio en la temperatura de un ladrillo sólido en el que la transferencia de calor se lleva a cabo en la dirección x, veamos qué tipos de condiciones de contorno se pueden presentar: (Figuras 7.1.-7.3.)

a) Condiciones tipo Dirichlet:

- $T = f(x)$ para $t = 0$ y $0 \leq x \leq 1 \Rightarrow$ c. inicial
- $T = T_0$ para $t = 0$ y $0 \leq x \leq 1 \Rightarrow$ c. inicial
- $T = f(t)$ para $x = 0$ y $t > 0 \Rightarrow$ c. contorno
- $T = T_1$ para $x = 1$ y $t > 0 \Rightarrow$ c. contorno

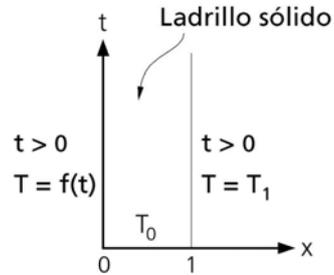


Figura 7.1. Condiciones de Dirichlet

Las dos primeras condiciones presentadas (iniciales) indican que la temperatura inicial dentro del ladrillo es función de la posición, f(x), o tiene un valor constante, T_0 .

Las dos últimas condiciones (frontera) especifican el valor de la variable dependiente en la frontera izquierda como una función del tiempo o como una constante respectivamente (correspondería a dos casos en los que i) la condición frontera indicaría que en un lado del ladrillo se mantiene una temperatura programada, o ii) a un lado del ladrillo se mantiene una temperatura constante).

b) Condiciones de Neumann:

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \text{ para } x = 1 \text{ y } t \geq 0$$

Esta condición especifica que el gradiente de temperatura en la frontera derecha es cero,

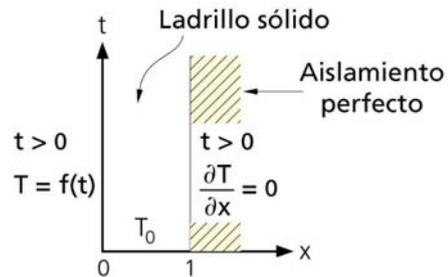


Figura 7.2. Condiciones de Neumann

c) Condiciones de Robbins:

$$k \frac{\partial T}{\partial x} = h(T - T_f) \text{ para } x = 0 \text{ y } t \geq 0$$

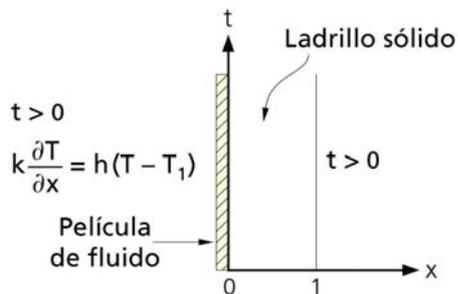


Figura 7.3. Condiciones de Robbins

La condición indica que el flujo de calor en la interfase sólido-líquido puede relacionarse mediante la diferencia de temperaturas de la interfase y el fluido, siendo h el coeficiente de transferencia de calor del fluido.

[Figuras 7.1., 7.2. y 7.3. reelaboradas a partir de Constantinides y Mostoufi, 1999]

4) Además de las clasificaciones anteriores, las ecuaciones PDE lineales de segundo orden con dos variables independientes se clasifican en tres formas **canónicas**:

- parabólicas,
- elípticas e
- hiperbólicas.

Tomando como ejemplo la forma más general de una ecuación lineal de 2º orden con 2 variables independientes

$$a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + d \frac{\partial u}{\partial x} + e \frac{\partial u}{\partial y} + f(u) + g = 0 \quad \text{Si:}$$

$$b^2 - ac < 0 \quad \Rightarrow \quad \text{la ecuación se clasifica como elíptica}$$

$$b^2 - ac = 0 \quad \Rightarrow \quad \text{la ecuación se clasifica como parabólica}$$

$$b^2 - ac > 0 \quad \Rightarrow \quad \text{la ecuación se clasifica como hiperbólica}$$

Ejemplo 7.3.

i) La ecuación de Laplace $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$ es una PDE que describe flujo de una propiedad (energía o materia) a través de dos direcciones espaciales en estado estacionario. En esta ecuación:

$$\left. \begin{array}{l} a = 1 \\ b = 0 \\ c = 1 \end{array} \right\} \Rightarrow b^2 - a * c = -1 < 0 \Rightarrow \text{ecuación elíptica}$$

ii) La conducción de calor (o la difusión de materia) en estado dinámico se expresa: $\alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial u}{\partial t}$:

$$\left. \begin{array}{l} a = \alpha \\ b = 0 \\ c = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow b^2 - a * c = 0 \Rightarrow \text{ecuación parabólica}$$

iii) La ecuación de ondas se expresa como: $a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$. En esta ecuación:

$$\left. \begin{array}{l} a = a^2 \\ b = 0 \\ c = -1 \end{array} \right\} \Rightarrow b^2 - a * c = a^2 > 0 \Rightarrow \text{ecuación hiperbólica}$$

IMPORTANTE:

1. Los métodos de solución de PDEs dependen de su forma canónica.
2. Dado que los coeficientes de las ecuaciones PDE lineales pueden ser funciones de las variables independientes, no es imposible que una ecuación pueda ajustarse a diferentes formas canónicas a lo largo del intervalo de integración.

3. MÉTODOS DE RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS PDE.

La resolución de ecuaciones PDE mediante **técnicas analíticas** no es una estrategia interesante desde el punto de vista práctico del Ingeniero químico ya que estos métodos:

- a) Requieren un gran conocimiento de técnicas matemáticas para su aplicación hasta en los problemas más sencillos,
- b) con la limitación de que generalmente son sólo aplicables a problemas lineales y aún así no siempre es posible su resolución.

Los **métodos numéricos** tiene la ventaja de su relativa sencillez y su gran generalidad, por lo que han sustituido a los métodos analíticos en la resolución de PDEs.

3.1. Métodos Numéricos basados en Diferencias Finitas.

En el Tema 5 se presentó la posibilidad de aproximar las derivadas totales, de primer y segundo orden, mediante sustitución por diferencias finitas, manteniendo siempre un error permitido en la aproximación. En los próximos Temas aplicaremos estas mismas aproximaciones a derivadas parciales de primer y segundo orden.

Dado que las ecuaciones parciales implican a más de una variable independiente, el método general de resolución implicará en primer lugar construir una red de dos (o tres) dimensiones, correspondiendo cada dimensión a una variable independiente. Los nodos mantendrán la notación (i,j) ó (i, j, k), dependiendo de que el sistema tenga dos o tres variables independientes. Las distancias entre los nodos de la red se designan por $\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta t$ respectivamente.

En segundo lugar el método general implicará expresar las derivadas parciales de primer y segundo orden en términos de diferencias finitas. Vamos a desarrollar estas aproximaciones mediante **diferencias centrales**:

La derivada parcial de u respecto a x implica que las variables y, z (o el tiempo) permanecen constantes, por lo tanto

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j,k} \equiv \left. \frac{du}{dx} \right|_{i,j,k}$$

Entonces, la aproximación por diferencias centrales de esta derivada parcial será:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j,k} = \frac{1}{2\Delta x} (u_{i+1,j,k} - u_{i-1,j,k}) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

De la misma forma las aproximaciones a las derivadas parciales de primer orden respecto a y, z :

$$\left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i,j,k} = \frac{1}{2\Delta y} (u_{i,j+1,k} - u_{i,j-1,k}) + \mathcal{O}(\Delta y^2)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial z} \right|_{i,j,k} = \frac{1}{2\Delta z} (u_{i,j,k+1} - u_{i,j,k-1}) + \mathcal{O}(\Delta z^2)$$

De forma análoga, las derivadas segundas se expresan en términos de diferencias centrales:

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{i,j,k} = \frac{1}{\Delta x^2} (u_{i+1,j,k} - 2u_{i,j,k} + u_{i-1,j,k}) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right|_{i,j,k} = \frac{1}{\Delta y^2} (u_{i,j+1,k} - 2u_{i,j,k} + u_{i,j-1,k}) + \mathcal{O}(\Delta y^2)$$

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right|_{i,j,k} = \frac{1}{\Delta z^2} (u_{i,j,k+1} - 2u_{i,j,k} + u_{i,j,k-1}) + \mathcal{O}(\Delta z^2)$$

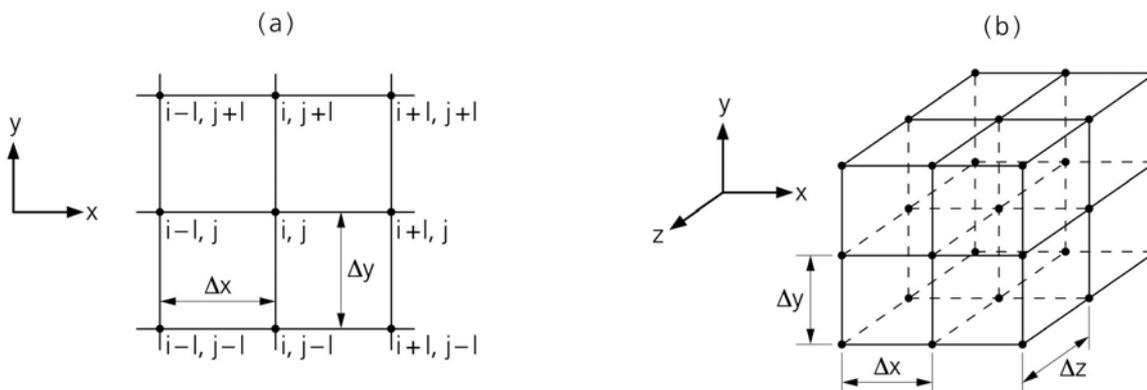


Figura 7.4. Red de aproximaciones por diferencias finitas. (a) Dos dimensiones. (b) Tres dimensiones. [Reelaborado a partir de Constantinides y Mostoufi, 1999]

4. BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA

Constantinides A., Mostoufi, N.; *Numerical Methods for Chemical Engineers with MATLAB Applications*. Prentice Hall PTR, Upper Saddle River, NJ., USA. 1999.

Davis, M. E.; *Métodos y Modelos Numéricos para Ingenieros Químicos* Compañía Editorial Continental de C. V. México, México D.F. 1990.