Simulación
y Optimización

Fundamentos
Parte I

Enrique E. Tarifa, Facultad de Ingeniería, UNJu

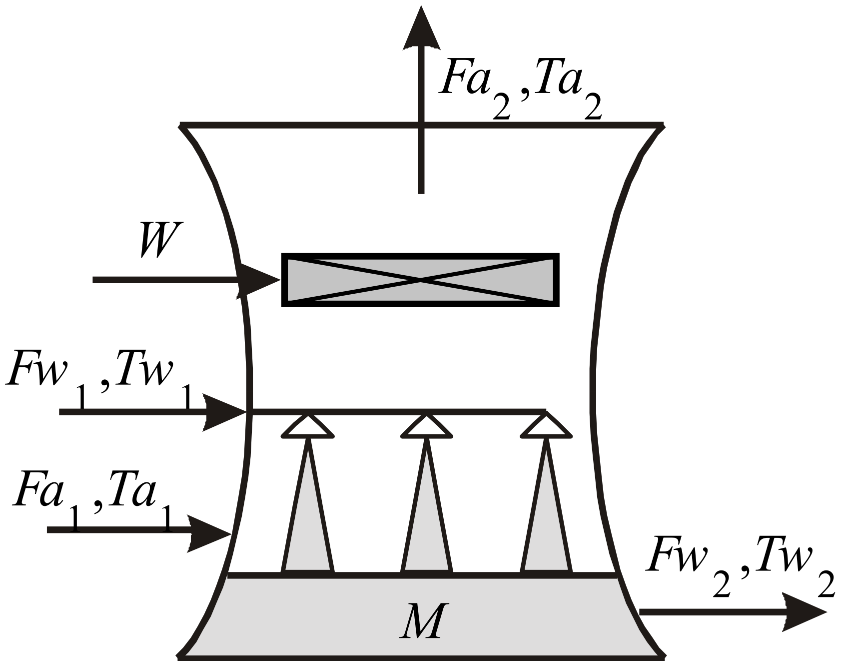
Modelado

Modelado

- Construye una aproximación.
- Es un proceso continuo.
- Es un arte.
- Debe producir un modelo realista y robusto.

Etapas del modelado

1. Definición de los objetivos del modelo
2. Formulación de un modelo conceptual
3. Formulación del modelo matemático
4. Estimación de parámetros



Etapas del modelado

5. Simplificación:
   1. Despreciar fenómenos, linealizar, suponer constante: pérdida de exactitud
   2. Eliminación de variables: pérdida de información

$$\mu = 1\,\mathrm{cP}$$

$$\rho = 1\,\frac{\mathrm{kg}}{l}$$

6. Análisis de la consistencia matemática:
   1. Grados de libertad nulo: incógnitas-ecuaciones
   2. Consistencia de unidades: sistema de unidades

$$\left.\begin{array}{l} r = k\,C_A \\ k = \alpha\, e^{-\frac{E}{R\,T}} \end{array}\right\} \Leftrightarrow r = \alpha\, e^{-\frac{E}{R\,T}}\, C_A$$

Grados de libertad

Datos

Modelo

- Ninguno
  - Incógnitas: a, b, c, d, e, f, x, y
  - GL = 8-2 = 6 > 0, indeterminado
- a, b, c, d, e, f :
  - Incógnitas: x, y
  - GL = 2-2 = 0, determinado

$$ax + by = c$$
$$dx + ey = f$$

Grados de libertad

Datos

- a, b, c, d, e, f, x:
  - Incógnitas: y
  - GL = 1-2 = -1, sobredeterminado
- a, b, c, f, x, y:
  - Incógnitas: d, e
  - GL = 2-2 = 0, ¿?

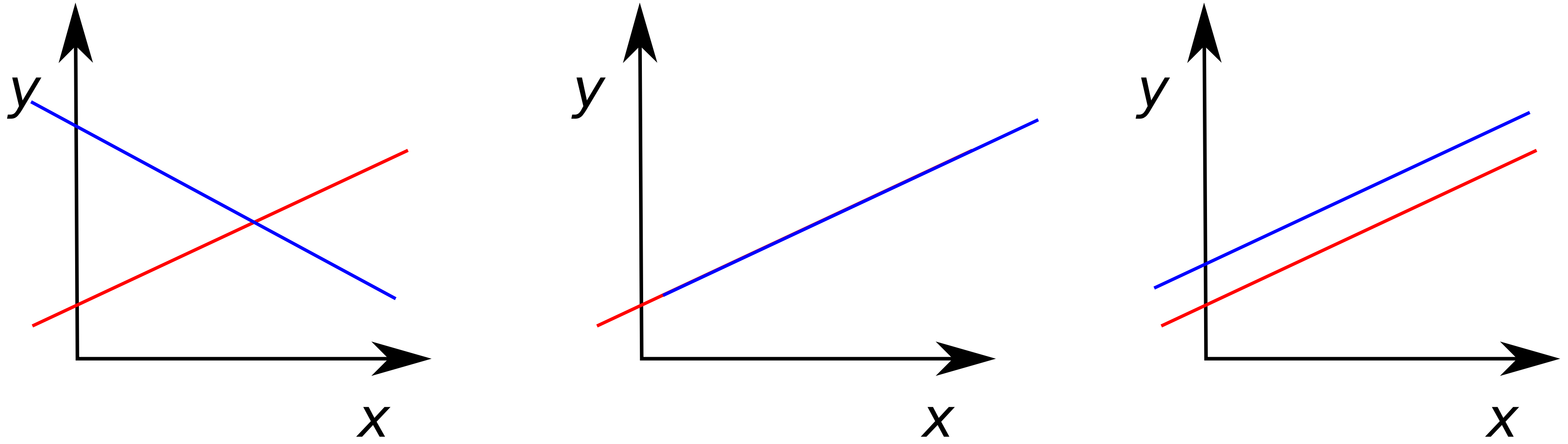
Modelo

$$ax + by = c$$
$$dx + ey = f$$

Sistema de ecuaciones lineales

$$ax + by = c$$
$$dx + ey = f$$

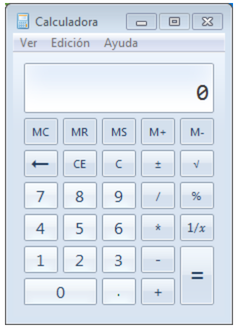
$$y = -\frac{a}{b}x + \frac{c}{b}$$
$$y = -\frac{d}{e}x + \frac{f}{e}$$



Sistema de ecuaciones lineales

Etapas del modelado

7. Resolución del modelo: programación o utilitarios
8. Verificación:
   1. Sintaxis (t = T, log(x) = ln(x))
   2. Orden de precedencia
9. Validación
10. Perfeccionamiento



$$10\frac{x+2}{y-3}+20$$

$$\cancel{10\ x+2/y-3+20}$$

$$10(x+2)/(y-3)+20$$

$$100+2*50=¿5100 \text{ o } 200?$$

Modelo de espacio de estados

Modelo de espacio de estados

- Estado: $X \in \mathbb{R}^n$
- Sistema con parámetros concentrados:

DAEs
Differential Algebraic Equations

ODEs
Ordinary Differential Equations

$$\cancel{\frac{dX}{dt}} = F(X,U,D) = 0$$

AEs
Algebraic Equations

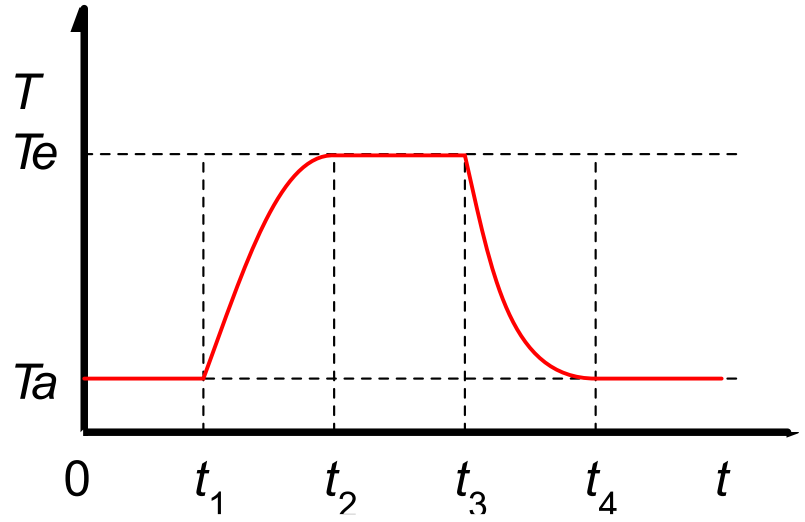
$$Y = H(X,U,D)$$

Condición inicial

$$X(0) = X_0$$

$$X(t)$$

$$Y(t)$$



Modelo de espacio de estados

- Sistema con parámetros distribuidos:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = F\left(X, U, D, \nabla \bullet X, \nabla^2 X, \ldots\right)$$

$$Y = H\left(X, U, D\right)$$

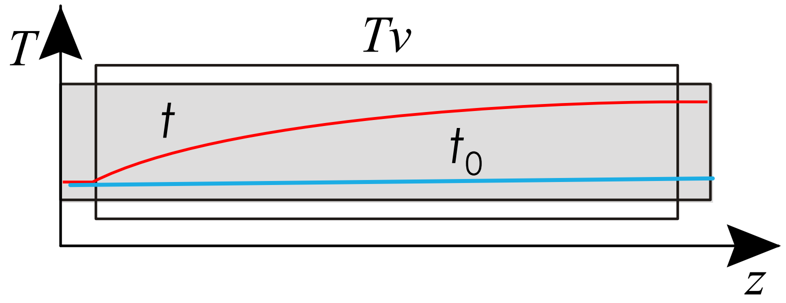
$$X\left(0, x, y, z\right) = X_0(x, y, z)$$

PDEs
Partial Differential Equations

$$X\left(t, x, y, z\right)$$

$$Y\left(t, x, y, z\right)$$

PDAEs
Partial Differential Algebraic Equations



$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x} \quad \frac{\partial}{\partial y} \quad \frac{\partial}{\partial z}\right)^T \qquad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Origen de las ecuaciones

- Ecuaciones diferenciales:
  - Balances dinámicos (materia, componentes, energía, cantidad de movimiento)
  - Variables de estado
- Ecuaciones algebraicas:
  - Balances seudoestacionarios
  - Ecuaciones constitutivas

Balances

Formulación de balances

Un balance expresa el principio de conservación de una determinada *propiedad extensiva* (masa, energía o cantidad de movimiento) en un dado *volumen de control*.

Volumen de control

- Volumen de control
  - Macroscópico
    - Parámetros concentrados
  - Microscópico
    - Parámetros distribuidos

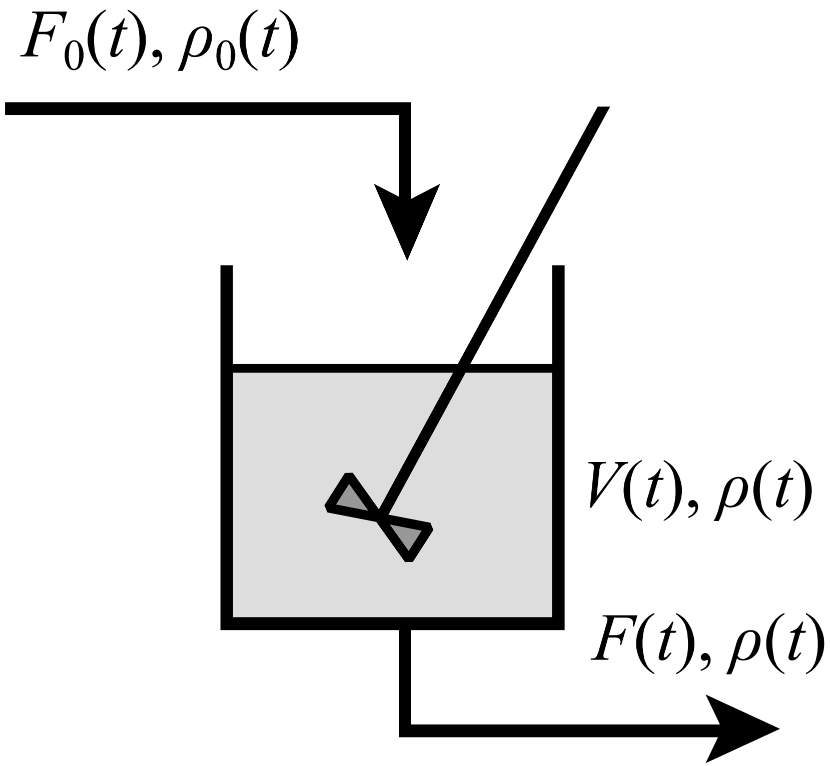
Formulación de balances

1. Definir la propiedad a analizar.
2. Elegir volumen de control macroscópico o microscópico.
3. Identificar ingreso, egreso y generación de la propiedad.
4. Escribir el balance con palabras.
5. Expresar cada término utilizando variables medibles.

Balance de materia global en un sistema con parámetros concentrados

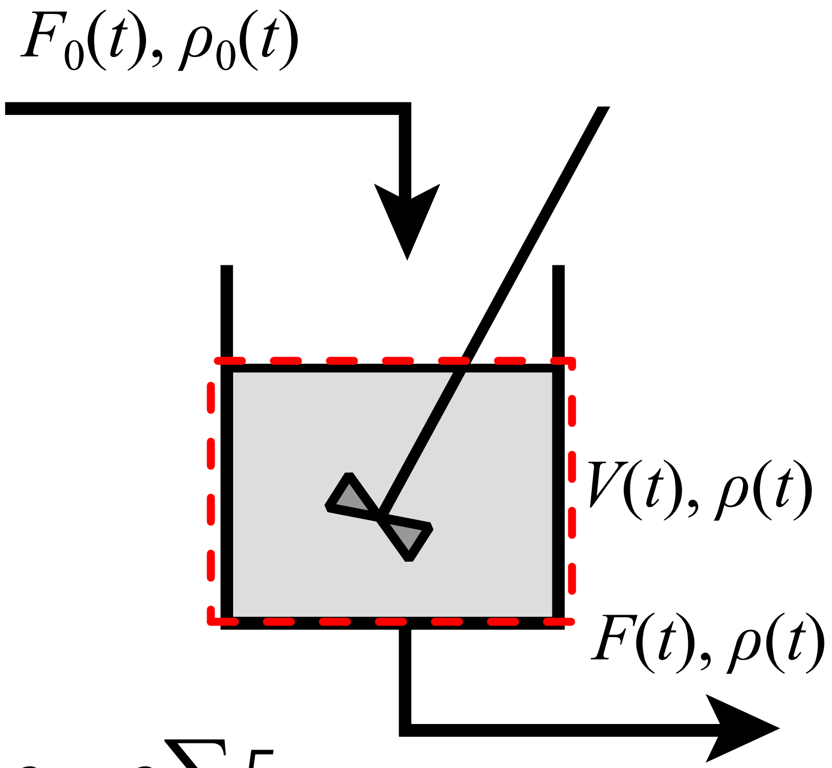
Balance de materia global

- {vel. de acumulación de materia} =
  {velocidad de entrada de materia}
  -{velocidad de salida de materia}
- No existe generación.
- [masa]/[tiempo]: kg/h
- Un único balance por volumen de control.



Balance de materia global

- {vel. de acum.} $= \dfrac{d(V\rho)}{dt}$
- {vel. de entrada} $= F_0\,\rho_0$
- {vel. de salida} $= F\,\rho$

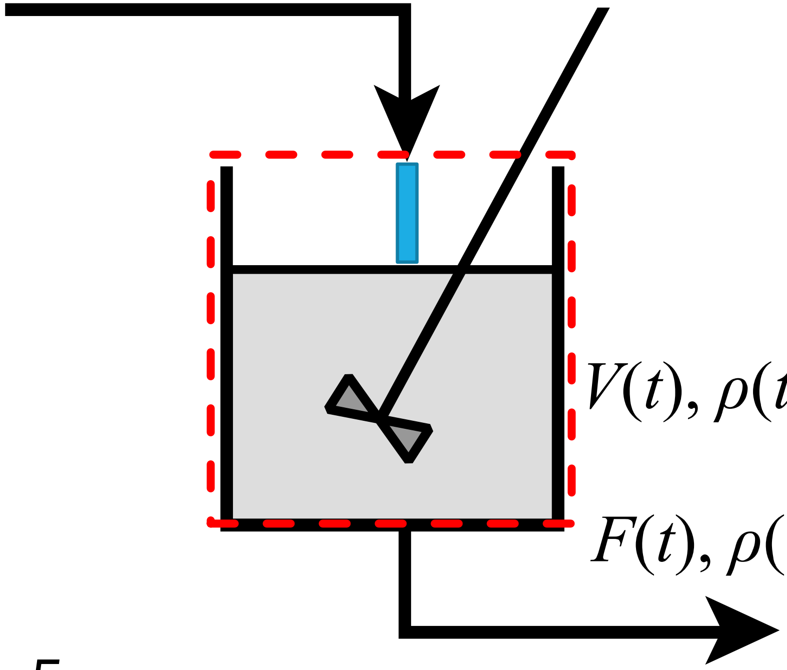


$$\cancel{\frac{d(V\rho)}{dt}} = F_0\,\rho_0 - F\,\rho \ = 0$$

$$\frac{d(V\rho)}{dt} = \sum_{\forall i \in E} F_i\,\rho_i - \rho \sum_{\forall i \in S} F_i$$

Balance de materia global

- {vel. de acum.} $= \dfrac{d\left(V^{*}\rho\right)}{dt}$
- {vel. de entrada} $= F_0\,\rho_0$
- {vel. de salida} $= F\,\rho$

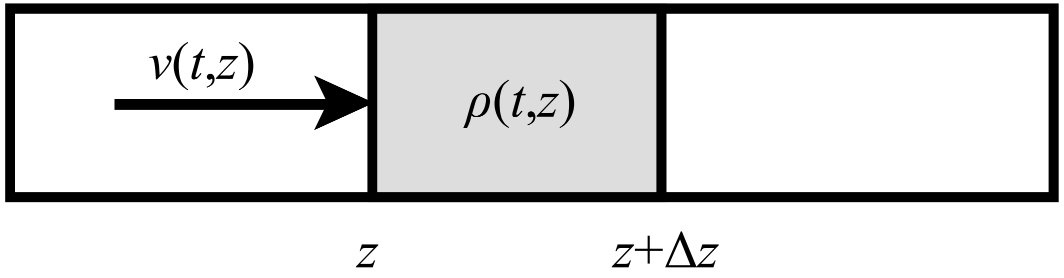


$$\frac{d\left(V^{*}\rho\right)}{dt} = F_0\,\rho_0 - F\,\rho \qquad \frac{d\left(V\rho\right)}{dt} = F_0^{*}\rho_0 - F\,\rho$$

Balance de materia global en un sistema con parámetros distribuidos

Balance de materia global

- {vel. de acum.} $= \left.\left(\dfrac{\partial\left(\Delta z\, A\, \rho\right)}{\partial t}\right)_z\right|_{z+\frac{1}{2}\Delta z}$
- {vel. de entrada} $= v\, A\, \rho\big|_z$
- {vel. de salida} $= v\, A\, \rho\big|_{z+\Delta z}$



$$\frac{\partial\left(\Delta z\, A\, \rho\right)}{\partial t} = v\, A\, \rho\big|_z - v\, A\, \rho\big|_{z+\Delta z}$$

$$\Delta z \frac{\partial \rho}{\partial t} = v\, \rho\big|_z - v\, \rho\big|_{z+\Delta z}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{v\, \rho\big|_{z+\Delta z} - v\, \rho\big|_z}{\Delta z}$$

$$\boxed{\cancel{\frac{\partial \rho}{\partial t}} = -\frac{\partial\left(v\, \rho\right)}{\partial z} = 0}$$