Simulación
y Optimización

Fundamentos
Parte I

Enrique E. Tarifa, Facultad de Ingeniería, UNJu

Mapa curricular de la materia

Simulación

Optimización

Mapa curricular de la materia

- Simulación
- Optimización

Mapa curricular de Simulación

- Definiciones
- Modelo de espacio de estados
- Resolución de modelos
- Simulación de plantas

Mapa curricular de Simulación

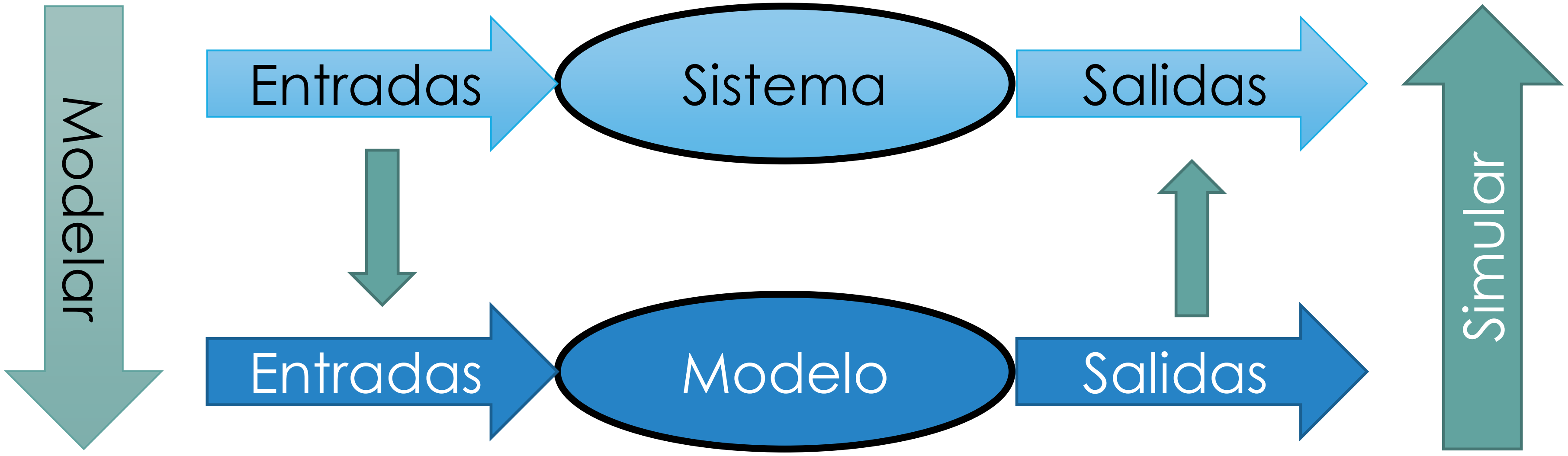
- Definiciones
- Modelo de espacio de estados
- Resolución de modelos
- Simulación de plantas

Mapa curricular de modelado

1. Modelado
2. Etapas del modelado
3. Modelo de espacio de estados
4. Origen de las ecuaciones
5. Balances
6. Balance de materia global y el volumen de control

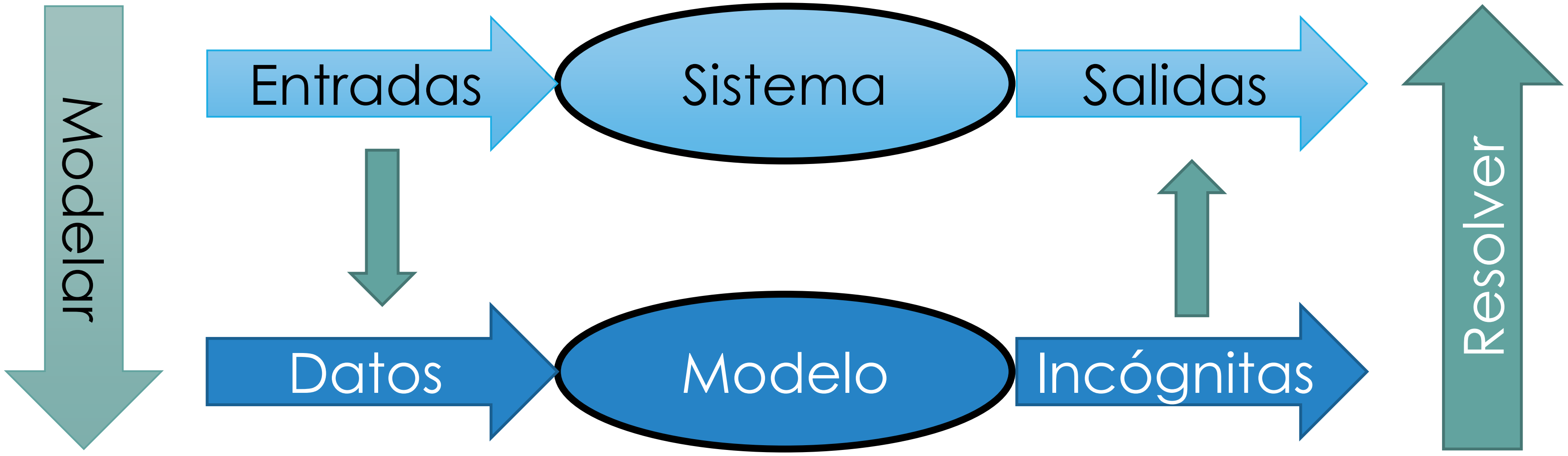
Modelado

Modelar y simular



Objetivo del estudio

Modelos simbólicos



Objetivo de la simulación

Matemática

Sistema

- Variables físicas
- Leyes fisicoquímicas
- Relaciones funcionales

Modelo

- Variables matemáticas
- Ecuaciones
- Funciones

Modelo simbólico

$$V\frac{dC_A}{dt}=F_0\left(C_{A0}-C_A\right)-Vr$$

$$V\frac{dC_B}{dt}=F_0\left(C_{B0}-C_B\right)-Vr$$

$$V\frac{dC_C}{dt}=F_0\left(C_{C0}-C_C\right)+Vr$$

$$V\frac{dC_M}{dt}=F_0\left(C_{M0}-C_M\right)$$

$$VCCp\frac{dT}{dt}=F_0C_0Cp_0(T_0-T)+Vr(-\Delta H)-Q$$

$$r=kC_A$$

$$k=\alpha e^{-\frac{E}{RT}}$$

$$Q=UA\Delta T_{ml}$$

$$Q=N_{s0}Cp_{s0}\left(T_s-T_{s0}\right)$$

$$\Delta T_{ml}=\frac{\left(T-T_{s0}\right)-\left(T-T_s\right)}{\ln\left(\frac{T-T_{s0}}{T-T_s}\right)}$$

$$C=\sum_{j=A,B,C,M}C_j$$

$$x_j=\frac{C_j}{C}\quad j=A,B,C,M$$

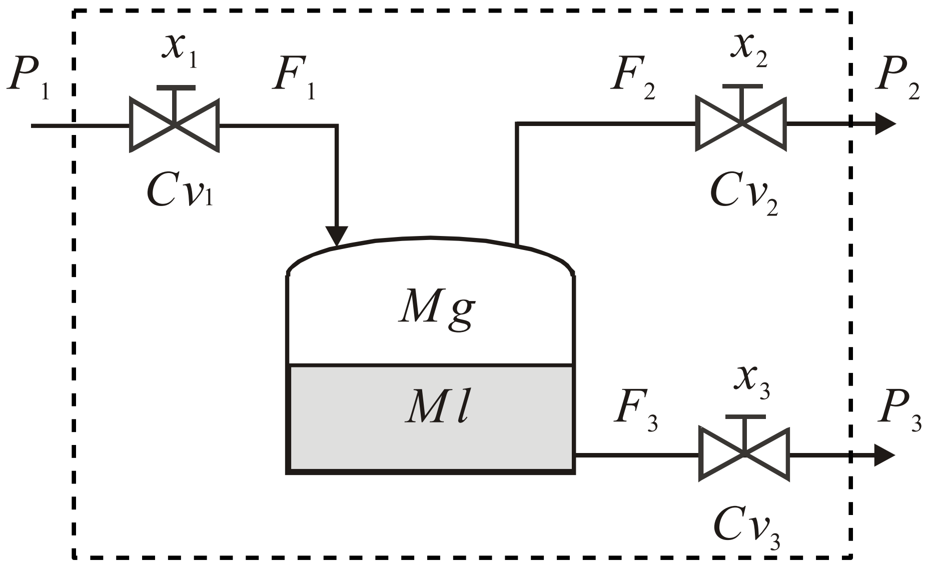
Modelado

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

Etapas del modelado

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.

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

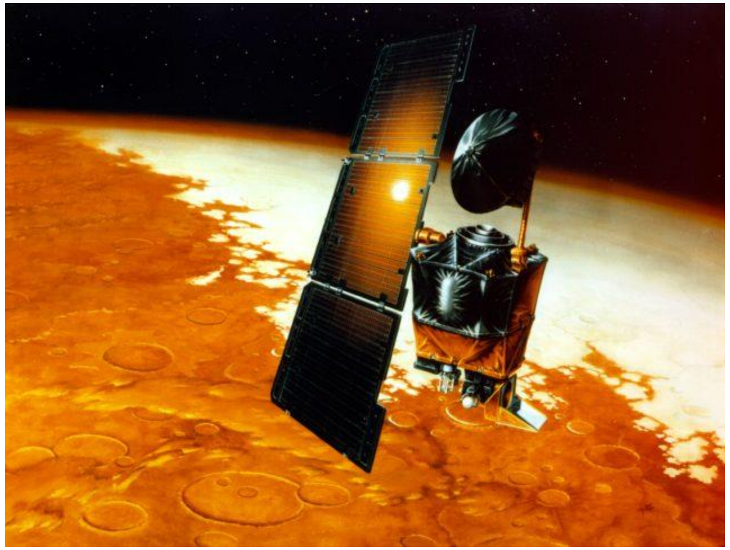
$$\rho = 1\,\frac{\text{kg}}{l}$$

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

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

MATEMOCIÓN

Metros o millas... Houston, tenemos un problema!



El 23 de septiembre de 1999, tras más de nueve meses de viaje entre la Tierra y Marte, la sonda espacial *Mars Climate Orbiter* se desintegró al entrar en contacto con la atmósfera del planeta rojo. La *Mars Climate Orbiter*, que tenía un coste de 125 millones de dólares y formaba parte de un programa espacial con un presupuesto de más de 300 millones de dólares, tenía como objetivo estudiar el clima y las condiciones atmosféricas del planeta Marte, así como servir de apoyo para la transmisión de datos de la *Mars Polar Lander*, ambas parte de la misión espacial *Mars Surveyor'98*.

Link

Grados de libertad

Datos

- 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

Modelo

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

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
  - $GL = 2 - 2 = 0$, ¿?

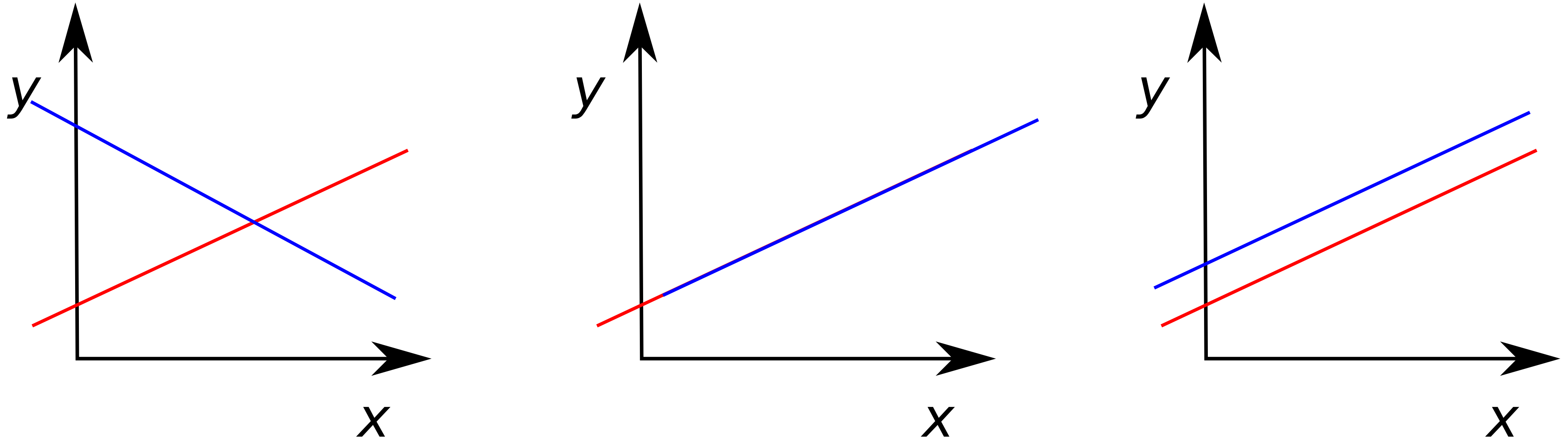
Modelo

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

Sistema de ecuaciones lineales

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

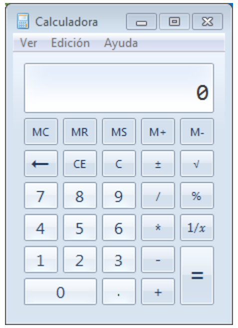
$$y = -\frac{a}{b}x + \frac{c}{b}$$
$$y = -\frac{d}{e}x + \frac{f}{e}$$



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

ChatGPT 4o

¿Qué es un modelo de espacio de estados?

Un **modelo de espacio de estados** es una representación matemática de un **sistema dinámico** que describe su comportamiento mediante un conjunto de **ecuaciones diferenciales (o diferencias)** de primer orden, expresadas en forma matricial.

Es una herramienta muy utilizada en **ingeniería de control**, **procesos químicos**, **robótica**, **economía**, y otros campos donde se modelan sistemas dinámicos multivariables.

✅ ¿En qué consiste?

Un sistema dinámico en espacio de estados se representa con dos ecuaciones principales:

🔷 **Ecuación de estado (dinámica interna del sistema):**

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{A}\mathbf{x}(t) + \mathbf{B}\mathbf{u}(t)$$

🔷 **Ecuación de salida (lo que se mide):**

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{C}\mathbf{x}(t) + \mathbf{D}\mathbf{u}(t)$$

🔤 ¿Qué representan las variables?

Símbolo	Significado
$\mathbf{x}(t)$	Vector de **variables de estado** (describe el estado interno del sistema)
$\dot{\mathbf{x}}(t)$	Derivada del estado (cómo cambia con el tiempo)
$\mathbf{u}(t)$	Vector de **entradas** al sistema (lo que se controla o perturba)
$\mathbf{y}(t)$	Vector de **salidas** (lo que se observa o mide)
$\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{D}$	**Matrices** que definen la dinámica y relación entre variables

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

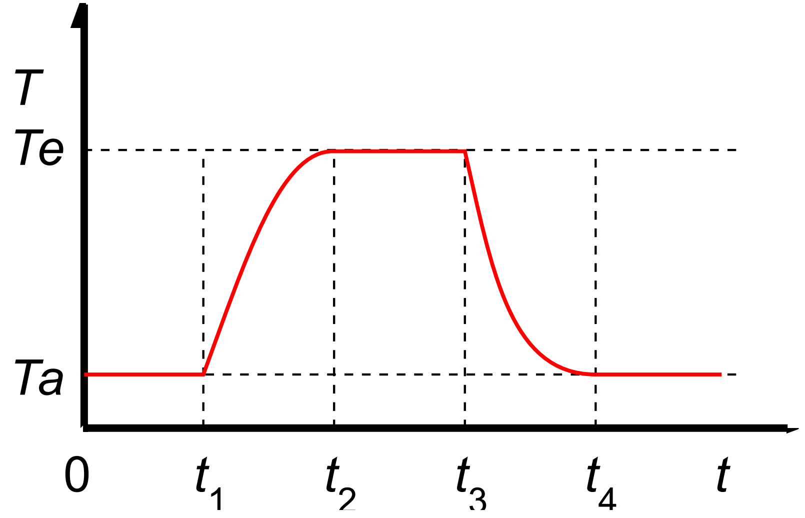
$$Y = H(X,U,D)$$

Condición inicial

$$X(0) = X_0$$

$$X(t)$$

$$Y(t)$$



Modelo de espacio de estados

- Sistema con parámetros distribuidos:

PDEs
Partial Differential Equations

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

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

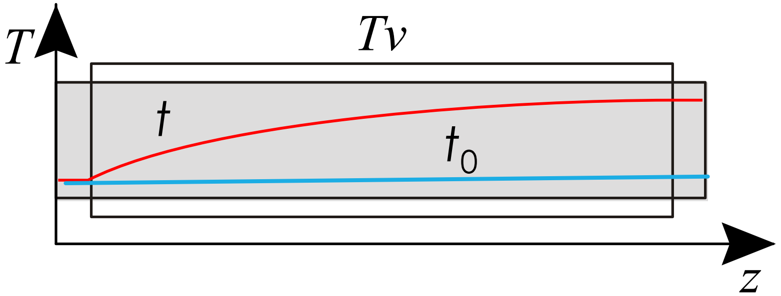
$$X\left(0, x, y, z\right) = X_0(x, y, z)$$

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

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

$$\nabla = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}^T \qquad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

PDAEs
Partial Differential Algebraic Equations



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

Las propiedades son uniformes en el volumen de control.

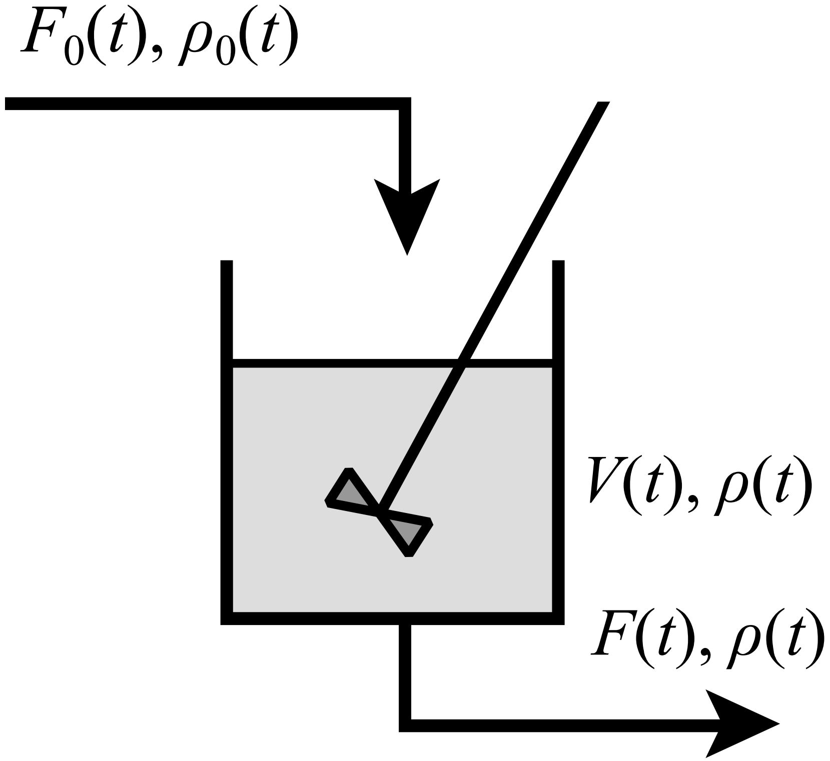
Formulación de balances

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

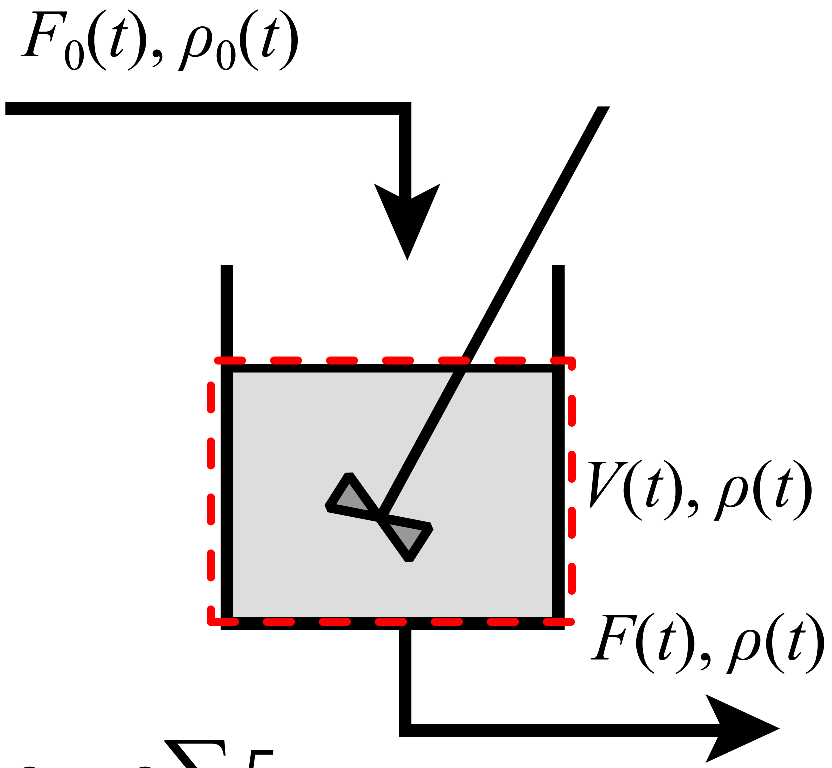
Balance de materia global

- {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} $= F\,\rho$

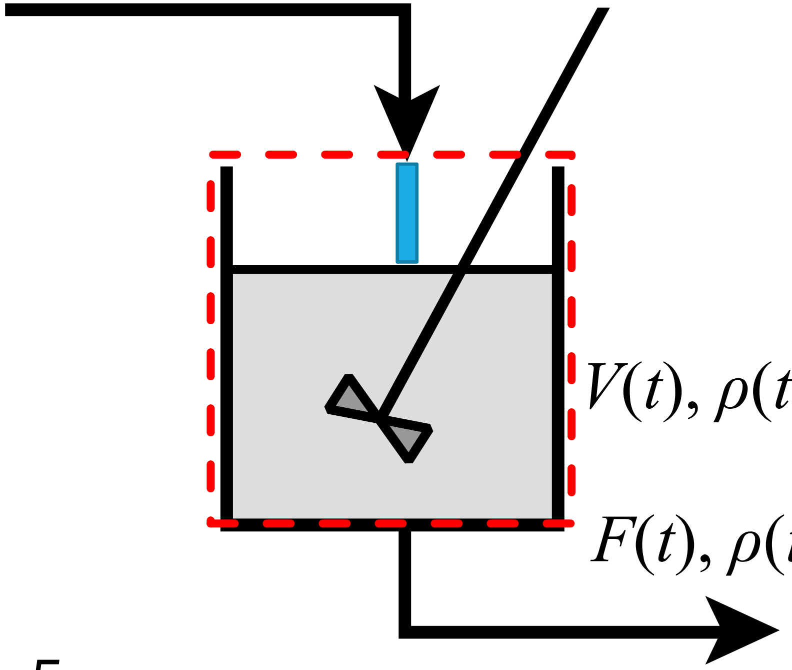


$$\cancel{\frac{d(V\rho)}{dt}} = F_0\,\rho_0 - F\,\rho = 0$$

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

Balance de materia global

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



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

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

Balance de materia global

Plantea el balance dinámico de materia para un tanque agitado continuo que es alimentado con una corriente con caudal F_0 y densidad \rho_0, y tiene una corriente de descarga con caudal F y densidad \rho. El volumen de líquido en el interior del tanque es V.

ChatGPT 4o

✅ **Resultado final (modelo general):**

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

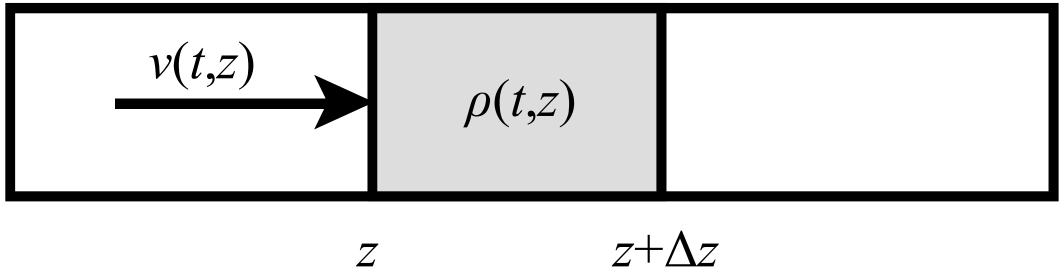
Este es el **balance dinámico de masa total** para el tanque agitado continuo.

LATEX

Balance de materia global en un sistema con parámetros distribuidos

Balance de materia global

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



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

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

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

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

ChatGPT 4o

Plantea el balance de materia total para un reactor tubular con flujo pistón.

✅ Si el fluido es **incompresible** (como un líquido):

- La densidad ρ es constante
- Entonces:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad \text{y} \quad \frac{\partial \rho}{\partial z} = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\frac{\partial v}{\partial z} = 0 \quad \Rightarrow v = \text{constante}}$$

Y el volumen ocupado por el fluido no cambia: **la masa se conserva** y el caudal volumétrico también es constante.

✅ Conclusión

El **balance de materia total** en un reactor tubular de flujo pistón es:

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + v\frac{\partial \rho}{\partial z} = 0}$$

o, para condiciones estacionarias:

$$\boxed{\rho v = \text{constante}}$$

Mapa curricular de modelado

1. Modelado
2. Etapas del modelado
3. Modelo de espacio de estados
4. Origen de las ecuaciones
5. Balances
6. Balance de materia global y el volumen de control