MODELACION Y SIMULACION DE PROCESOS

MODELOS COMPUESTOS POR ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES

Prof: Francisco Cubillos M



Cuando se plantean modelos de balance a propiedades conservativas en medios contínuos en un volumen de control diferencial con mas de una dimensión se obtienen modelos con ecuaciones diferenciales parciales (PDE o EDP).

Las formas más usuales de estas ecuaciones son:

Ecuación parabólica:

$$d\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla (c\nabla u) + au = f$$

Ecuación hiperbólica:

$$d\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \nabla(c\nabla u) + au = f$$

Ecuación elíptica:

$$-\nabla(c\nabla u) + au = f$$

Ecuación de valores propios:

$$-\nabla(c\nabla u) + au = \lambda du$$

Las condiciones de frontera para una función escalar \boldsymbol{u} pueden ser de dos tipos:

Dirichlet: hu = r en la frontera $\partial \Omega$.

Neumann generalizado: $\vec{n}(c\nabla u) + qu = g$ en la frontera $\partial \Omega$.

 \vec{n} es el vector unitario dirigido hacia fuera del dominio $\Omega.$

 $g,\,q,\,h$ yrson funciones complejas definidas dentro del dominio $\Omega.$

El método tradicional de solución numérica toma los siguientes pasos:

- •Descripción de la geometría
- •Generación de la malla de elementos
- Discretizar la ecuación y CB
- Solución del sistema de ecuaciones
- Graficar resultados

La tecnología computacional ha desarrollado programas orientados a la solución de estos problemas considerando la automatización de los pasos anteriores.

Aunque matemáticamente las ecuaciones son similares, los programas están clasificados considerando la aplicación final.

Así tenemos programas para:

- Análisis de esfuerzos mecánicos
- Fluido dinámica computacional (CFD)
- Sistemas electromagnéticos
- Genéricos para uso general.

En el área de ingeniería de procesos son usados los de tipo CFD y de configuración general para resolver problemas de Fluido-dinámica, Transferencia de Calor, Transferencia de Masa, reactores, etc.

Los programas más conocidos son: COMSOL, Fluent, CFX, PDE de Matlab, FeatFlow (gratis)



PDE Toolbox de Matlab

Es una herramienta de MATLAB que facilita la resolución de problemas de ecuaciones diferenciales parciales (EDP). La solución presentada se obtiene haciendo uso el método de elementos finitos para problemas definidos sobre dominios limitados y continuos en el plano.

- Transferencia de calor en tanto en estado estable como en transitorio.
- Flujos en medios porosos y problemas de difusión.
- Propagación de ondas transitorias y armónicas.
- Movimientos transversales en membranas.
- Determinación de estados de vibración natural de membranas y problemas de estructuras mecánicas.



Opción Heat Transfer en PDE de Matlab

(Análogo para Difusión)

Heat Transfer

The heat equation is a parabolic PDE:

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla T) = Q + h \cdot (T_{ext} - T)$$

It describes the heat transfer process for plane and axi-symmetric cases and uses the following parameters:

- $\bullet \ Density \ \rho$
- Heat capacity C
- Coefficient of heat conduction k
- Heat source Q
- Convective heat transfer coefficient h
- External temperature T_{ext}



The term $h \cdot (T_{ext} - T)$ is a model of transversal heat transfer from the surroundings, and it may be useful for modeling heat transfer in thin cooling plates etc.

For the steady state case, the elliptic version of the heat equation,

$$-\nabla \cdot (k\nabla T) = Q + h \cdot (T_{ext} - T)$$

is also available.

The boundary conditions can be of Dirichlet type, where the temperature on the boundary is specified, or of Neumann type where the *heat flux*, $\mathbf{n} \cdot (k\nabla(T))$ is specified. A generalized Neumann boundary condition can also be used. The generalized Neumann boundary condition equation is $\mathbf{n} \cdot (k\nabla(T)) + qT = g$, where q is the heat transfer coefficient.

Visualization of the temperature, the temperature gradient, and the heat flux $k\nabla T$ is available. Plot options include *isotherms* and heat flux vector field plots.



En Matlab activar : pdetool

Aparece la ventana de desarrollo del PDE



Los siguientes pasos se deben desarrollar en un modelo de PDE toolbox:

- 1. Especificar la situacion fisica de la lista (generica o especifica)
- 2. Construir la geometria "el dominio" (mouse o comandos)
- 3. Especificar las condiciones de borde en todo el dominio
- 4. Especificar el tipo de PDE segun el problema a resolver
- 5. Inicializar y refinar la malla
- 6. Solucionar y graficar
- 7. Exportar resultados

Como ejemplo resolveremos el siguiente caso





• Afinar con mouse





El cuadrado es SQ1 y el P1 el triangulo

El dominio es SQ1-P1



• Condiciones de Borde

Boundary condition equation:	h*	$r_{=r}$ $n_1 - n_2$	
Condition type:	Coefficient	Value	Description
🔿 Neumann	g	0	Heat flux
 Dirichlet 	q	0	Heat transfer coefficient
	h	1	Weight
	r	400	Temperature



CB convectiva :

h*T=r

Value

1

280

Coefficient

h

r

OK

📣 Boundary Condition

Condition type:

🔘 Neumann

Dirichlet

Boundary condition equation:



Description

Weight

Cancel

Temperature

Heat transfer coefficient



Info: Enter boundary condition for this segment.

Exit

- en menu 'PDE' seleccionar 'PDE Mode'
- Double-click en el dominio

0 0 $-\nabla \cdot (k\nabla T) = Q + h(T_{ext} - T)$



Notar que esta forma de PDE el termino de conveccion y calor que aparece son relativos a todo el dominio y no a las condiciones de borde.

PDE Specification			
Equation: -div(k*grad(T))=Q+h*(Text-T), T=temperature			
Type of PDE:	Coefficient	Value	Description
 Elliptic 	rho	1.0	Density
🔿 Parabolic	С	1.0	Heat capacity
Hyperbolic	k	4.0	Coeff. of heat conduction
Eigenmodes	Q	0.0	Heat source
	h	0.0	Convective heat transfer coeff.
	Text	0.0	External temperature
	ОК		Cancel

- En el menu 'Mesh' seleccionar 'Mesh Mode'
- En el mismo menu afinar con 'Refine Mesh'



- En el menu 'Plot' seleccionar 'Parameters'
- Especificar las opciones de visualización
- Activar 'Plot'

A Plot Selection			
Plot type:	Property:	User entry:	Plot style:
✓ Color✓ Contour	temperature	_	interpolated shad.
🗹 Arrows	heat flux	-	proportional 🔹
 Deformed mesh Height (3-D plot) Animation 	temperature gradient temperature Options		continuous <u>▼</u>
🔲 Plot in x-y grid	Contour plot levels: 20	✓ Plot sc	olution automatically
Show mesh	Colormap: cool	-	
P	lot	Close	Cancel



Activando 'height (3D plot)' grafica en 3D con plano de contorno



Color: T Height: T Vector field: q



3D para flujo de calor *heat flux*







Transferencia de calor no estacionaria

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla T) = Q + h(T_{ext} - T)$$

A PDE Specification			
Equation: r	ho*C*T'-div(k*grad(T))=Q+h*(Text	-T), T=temperature	
Type of PDE:	Coefficient	Value	Description
C Elliptic	rho	8000.0	Density
C Parabolic	c	100.0	Heat capacity
C Hyperbolic	k	4	Coeff. of heat conduction
C Eigenmodes	Q	0.0	Heat source
	h	0.0	Convective heat transfer coeff.
	Text	0.0	External temperature
	ОК		Cancel

Parametros de Simulación :

En el menu 'Solve' seleccionar 'Parameters'

	Solve Parameters
Tiempo de simulacion	Time:
t=[0,100,200,300,, 5000]	D:400:5000
	0.100.5000
Temperatura Inicial	280
	Relative tolerance:
	0.01
	Absolute tolerance:
	0.001

En el menu 'Plot' seleccionar 'Parameters', y luego 'Animation' para animar la solución con el tiempo

📣 Plot Selection			<u>_ ×</u>
Plot type:	Property:	User entry:	Plot style:
Color	temperature		interpolated shad.
Iv Contour Iv Arrows	heat flux]	proportional 💌
Deformed mesh	temperature gradient 🔄		
 Height (3-D plot) Animation 	temperature Options]	continuous <u>-</u>
Plot in x-y grid	Contour plot levels: 20	Plot s	olution automatically
Show mesh	Colormap: cool	Time for	olot: 5000 💌
	Plot	Close	Cancel