



**fcfm**

FACULTAD DE CIENCIAS  
FÍSICAS Y MATEMÁTICAS  
UNIVERSIDAD DE CHILE

Universidad de Chile

Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas

Departamento de Ingeniería Química y Biotecnología

**IQ46B – Operaciones de Transferencias I**

# MATLAB: MATRIX LABORATORY

Igor Guzmán Olivares

# 0. ESTRUCTURA DE LA PRESENTACIÓN

- 1.- Método Numérico para resolución de EDOs (Runge – Kutta).
- 2.- Reseña de MATLAB y ejemplo de resolución de cinética de Michaelis – Menten.
- 3.- Método Numérico para resolución de EDP (Diferencias Finitas).
- 4.- Ejemplo de transmisión de calor transiente.



# 1. RESOLUCIÓN DE ECUACIONES DIFERENCIALES

Una **ecuación diferencial** es una expresión matemática que relaciona de manera *no trivial* a una función desconocida con una o más de sus derivadas con respecto a una o más variables independientes.

- Si la función desconocida depende de una sola variable la ecuación diferencial se denomina *ordinaria*.
- Si la función desconocida depende de más de una variable la ecuación diferencial se denomina *parcial*.

## EDO: ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS

$$F(x, y, y^{(1)}, y^{(2)}, \dots, y^{(n)}) = 0$$

y: función dependiente de x

x: variable independiente

n: orden de la derivada (número natural)



# 1. RESOLUCIÓN DE ECUACIONES DIFERENCIALES

## Unicidad de solución:

Un *problema de valor inicial* o *de Cauchy*

$$\frac{d^n y}{dx^n} = f(x, y, y^{(1)}, \dots, y^{(n-1)})$$

$$y(x_0) = y_0$$

$$y^{(1)}(x_0) = y_1$$

$$y^{(2)}(x_0) = y_2$$

·

·

·

$$y^{(n-1)}(x_0) = y_{n-1}$$

Un *problema de valores en la frontera* o *de Dirichlet*

$$\frac{d^n y}{dx^n} = f(x, y, y^{(1)}, \dots, y^{(n-1)})$$

$$y(x_0) = y_0$$

$$y(x_1) = y_1$$

$$y(x_2) = y_2$$

·

·

·

$$y(x_{n-1}) = y_{n-1}$$



# 1. RESOLUCIÓN DE ECUACIONES DIFERENCIALES

## ¡IMPORTANTE!

Una EDO de orden mayor que 1 siempre se puede convertir en un sistema EDO de primer orden:

$$\frac{d^n y}{dx^n} = f(x, y, y^{(1)}, \dots, y^{(n-1)})$$

$$y(x_0) = y_0$$

$$y^{(1)}(x_0) = y_1$$

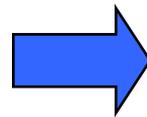
$$y^{(2)}(x_0) = y_2$$

.

.

.

$$y^{(n-1)}(x_0) = y_{n-1}$$



cambio de variables

$$Y = \begin{bmatrix} \eta_1 = y \\ \eta_2 = \frac{dy}{dx} \\ \eta_3 = \frac{d^2 y}{dx^2} \\ \vdots \\ \vdots \\ \eta_n = \frac{d^{n-1} y}{dx^{n-1}} \end{bmatrix}, \quad F(x, Y) = \begin{bmatrix} \eta_2 \\ \eta_3 \\ \eta_4 \\ \vdots \\ \vdots \\ f(x, y, y^{(1)}, \dots, y^{(n-1)}) \end{bmatrix}$$

$$\frac{dY}{dx} = F(x, Y)$$
$$Y(x_0) = Y_0$$



# 1.1 MÉTODOS NUMÉRICOS

Nos avocaremos a encontrar la función  $y(x)$  definida en el intervalo  $[a, b]$  que cumpla:

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad \forall x \in [a, b] \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

- Método de Euler
- Método de Trapecio
- Método de punto medio
- Métodos Runge - Kutta



# 1.1 MÉTODOS NUMÉRICOS

Método de Euler:

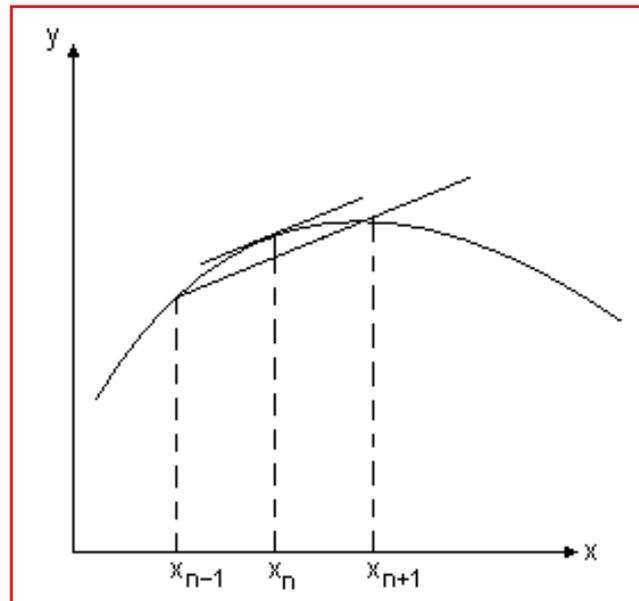
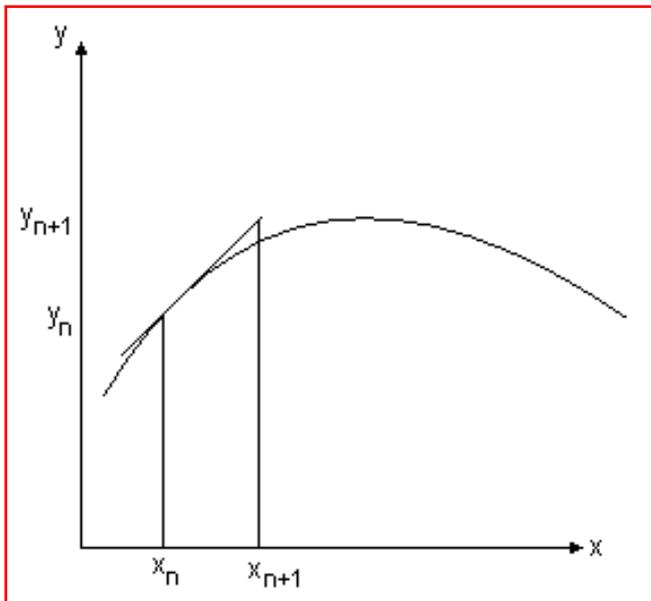
$$s'(\xi_n, y_n) \approx \frac{y_{n+1} - y_n}{h} \Rightarrow$$

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot s'(\xi_n, y_n)$$

Método del Punto Medio:

$$s'(\xi_n, y_n) \approx \frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2 \cdot h} \Rightarrow$$

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2 \cdot h \cdot f(\xi_n, y_n)$$



# 1.1 MÉTODOS NUMÉRICOS: RUNGE - KUTTA

Los métodos Runge – Kutta (RK) se pueden expresar como:

$$y_{n+1} = y_n + \psi(x_n, y_n, h)h$$

$\psi(x_n, y_n, h)$  : Función de incrementos

La idea básica detrás de los métodos RK es hallar la pendiente en  $x_i$  y estimarla en otros puntos intermedios, se combinan linealmente, se multiplica este valor por  $h$  y se suma a  $y_i$

$$\psi(x_n, y_n, h) = \sum_{i=1}^v w_i \cdot k_i \cdot h$$

$$k_i = \left( x_n + c_i h, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j h \right), i = 1, 2, \dots, v; c_1 = 0$$



# 1.1 MÉTODOS NUMÉRICOS: RUNGE - KUTTA

$$y_{n+1} = y_n + \psi(x_n, y_n, h)h$$

Visto de una manera mas amable:

$$\psi(x_n, y_n, h) = \sum_{i=1}^v w_i \cdot k_i \cdot h$$

$$k_1 = f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = f(x_n + c_2h, y_n + a_{21}k_1h)$$

$$k_3 = f(x_n + c_3h, y_n + a_{31}k_1h + a_{32}k_2h)$$

*Donde  $c_2, c_3, \dots, c_v, c_{21}, c_{v(v-1)}$  y  $w_i$  son en principio arbitrarios*



# 1.1 MÉTODOS NUMÉRICOS: RUNGE - KUTTA

## Método de RK de cuarto orden:

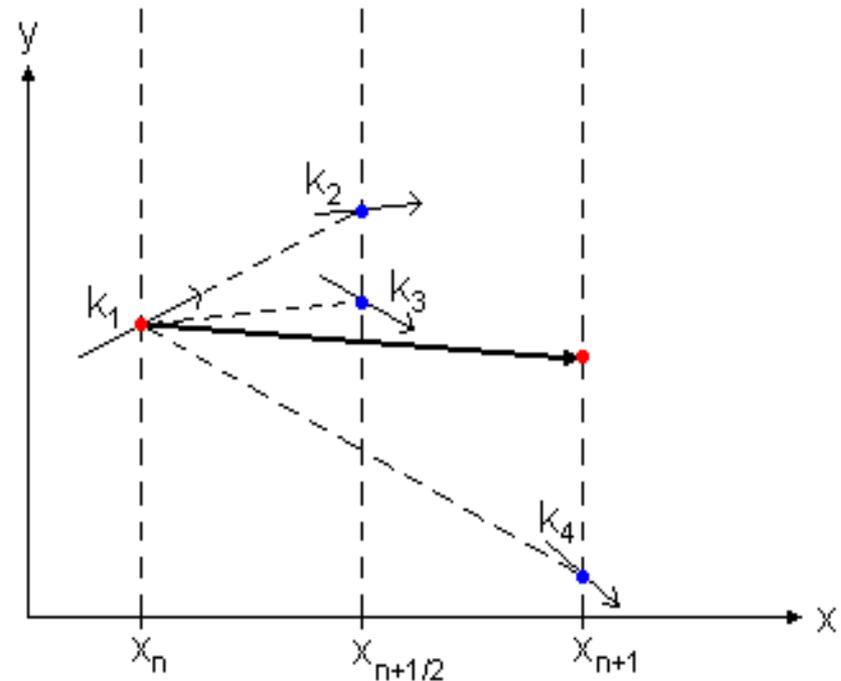
$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h$$

$$k_1 = f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1h\right)$$

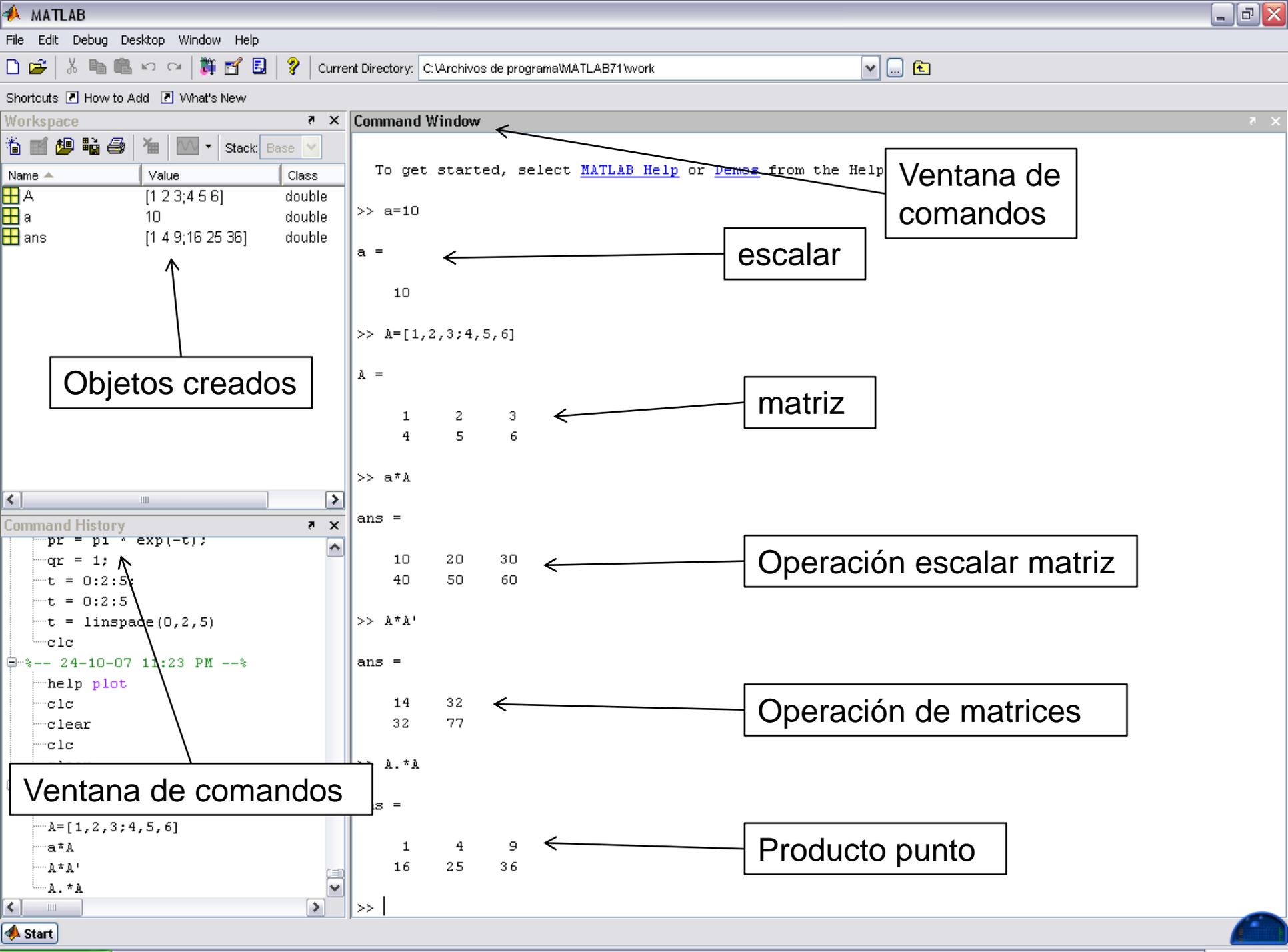
$$k_3 = f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_2h\right)$$

$$k_4 = f(x_n + h, y_n + k_3h)$$



Ahora...  
MATLAB





Workspace

Name	Value	Class
A	[1 2 3;4 5 6]	double
a	10	double
ans	[1 4 9;16 25 36]	double

Objetos creados

Command Window

```
To get started, select MATLAB Help or Demos from the Help  
>> a=10  
  
a =  
  
10  
  
>> A=[1,2,3;4,5,6]  
  
A =  
  
1 2 3  
4 5 6  
  
>> a*A  
  
ans =  
  
10 20 30  
40 50 60  
  
>> A*A'  
  
ans =  
  
14 32  
32 77  
  
A.*A  
  
ans =  
  
1 4 9  
16 25 36  
  
>> |
```

Ventana de comandos

escalar

matriz

Operación escalar matriz

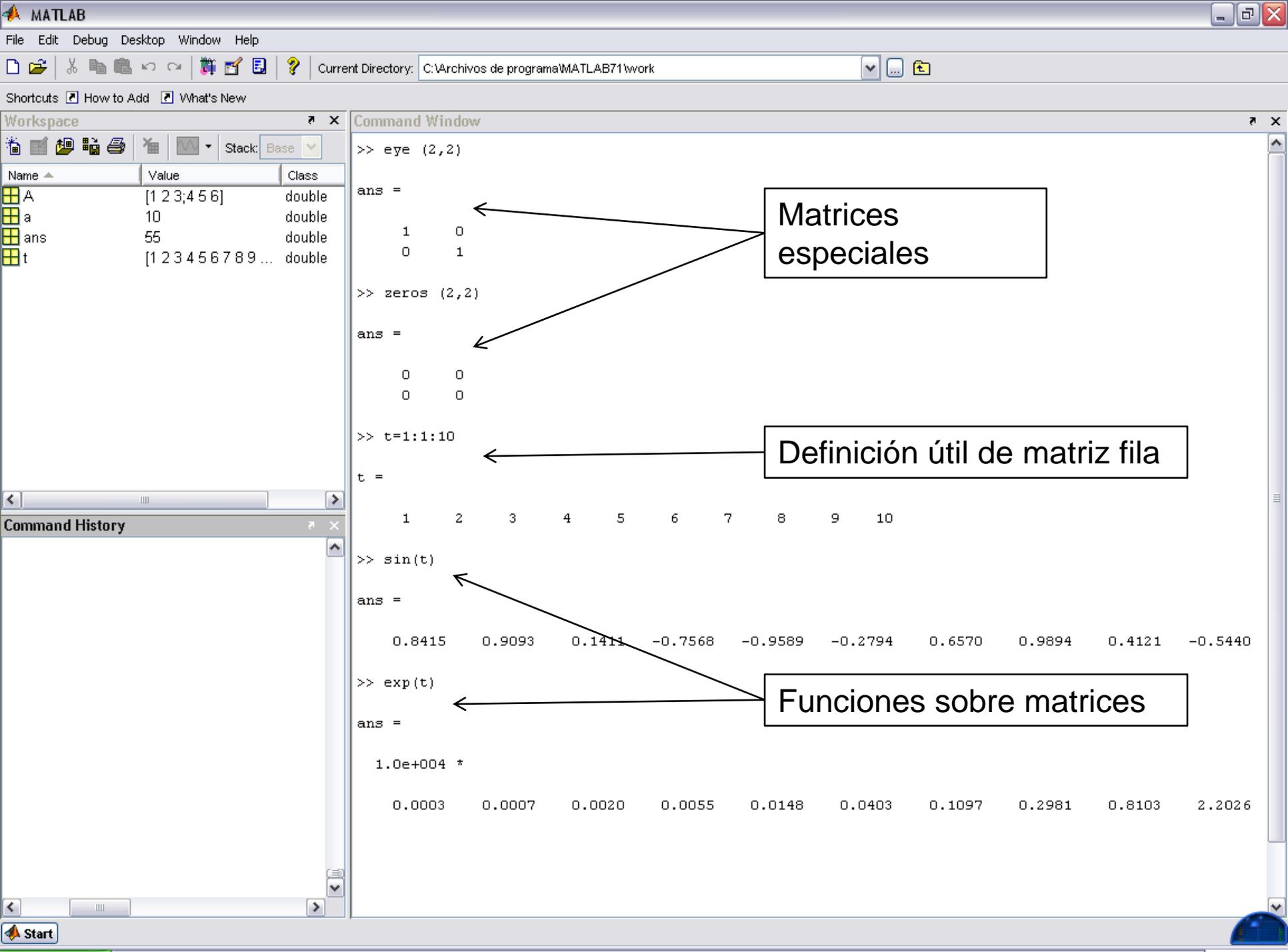
Operación de matrices

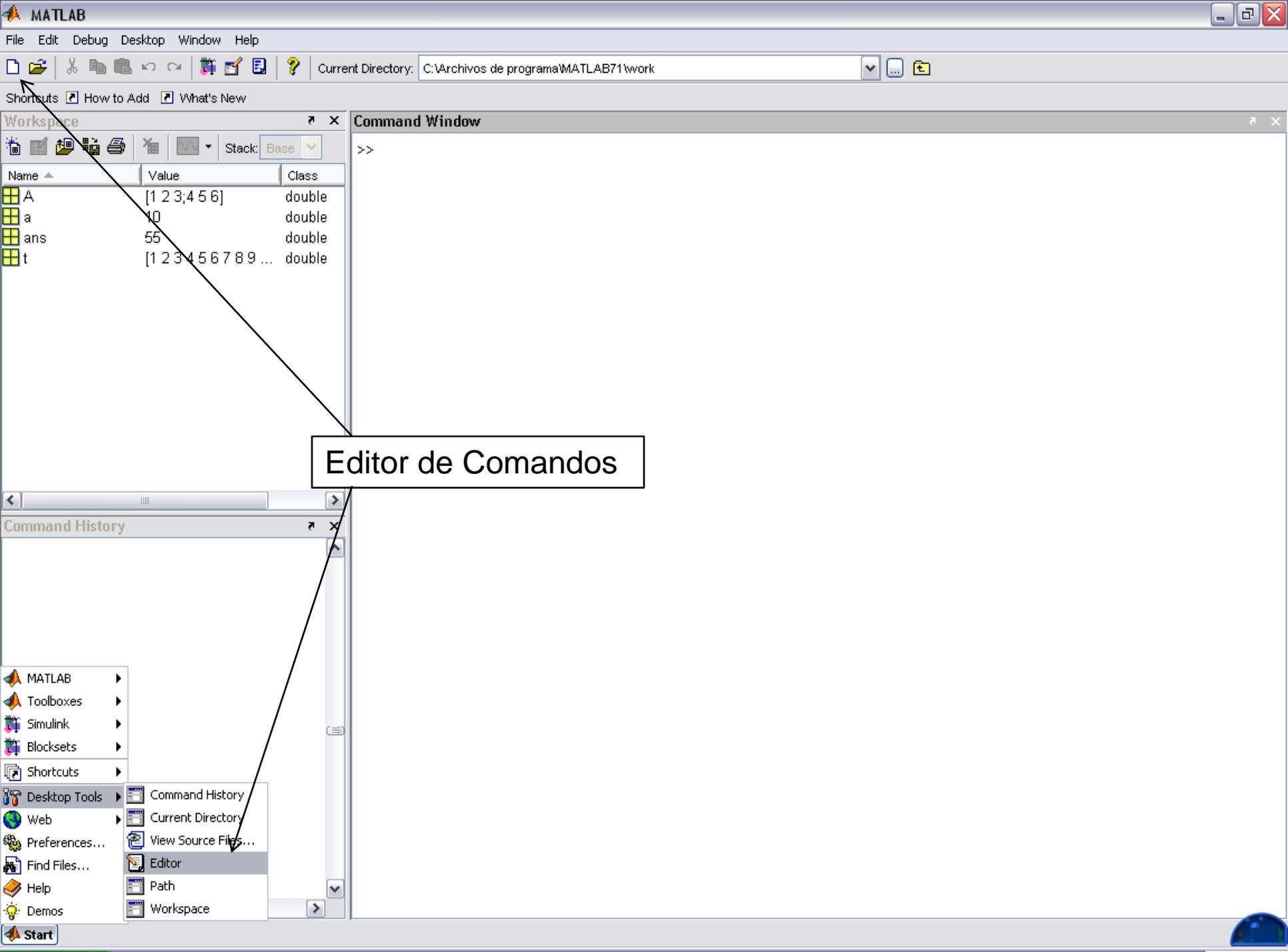
Producto punto

Command History

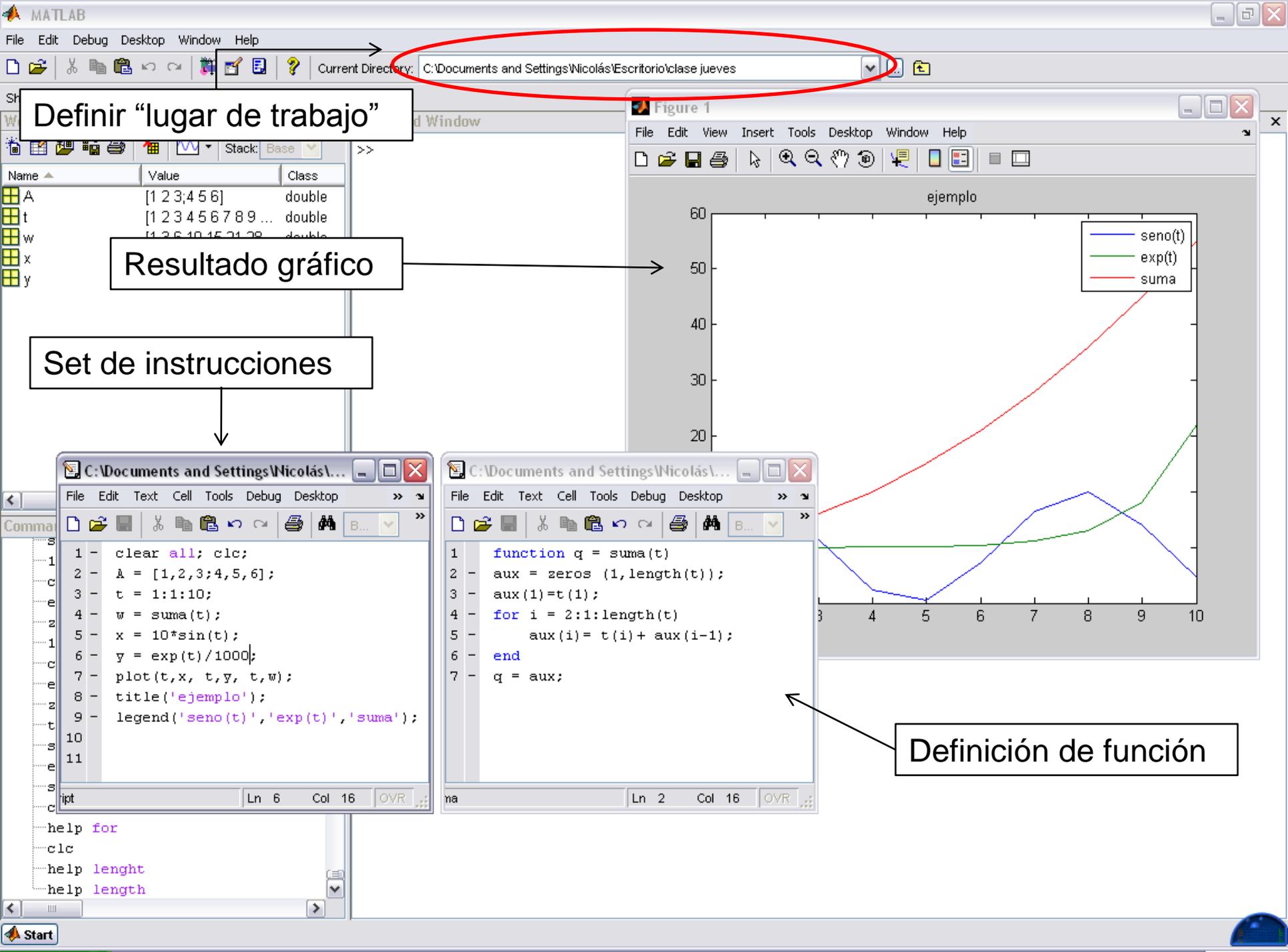
```
pr = pi * exp(-t);  
qr = 1;  
t = 0:2:5;  
t = 0:2:5;  
t = linspace(0,2,5);  
clc  
-- 24-10-07 11:23 PM --  
help plot  
clc  
clear  
clc  
  
A=[1,2,3;4,5,6]  
a*A  
A*A'  
A.*A
```

Ventana de comandos





Editor de Comandos

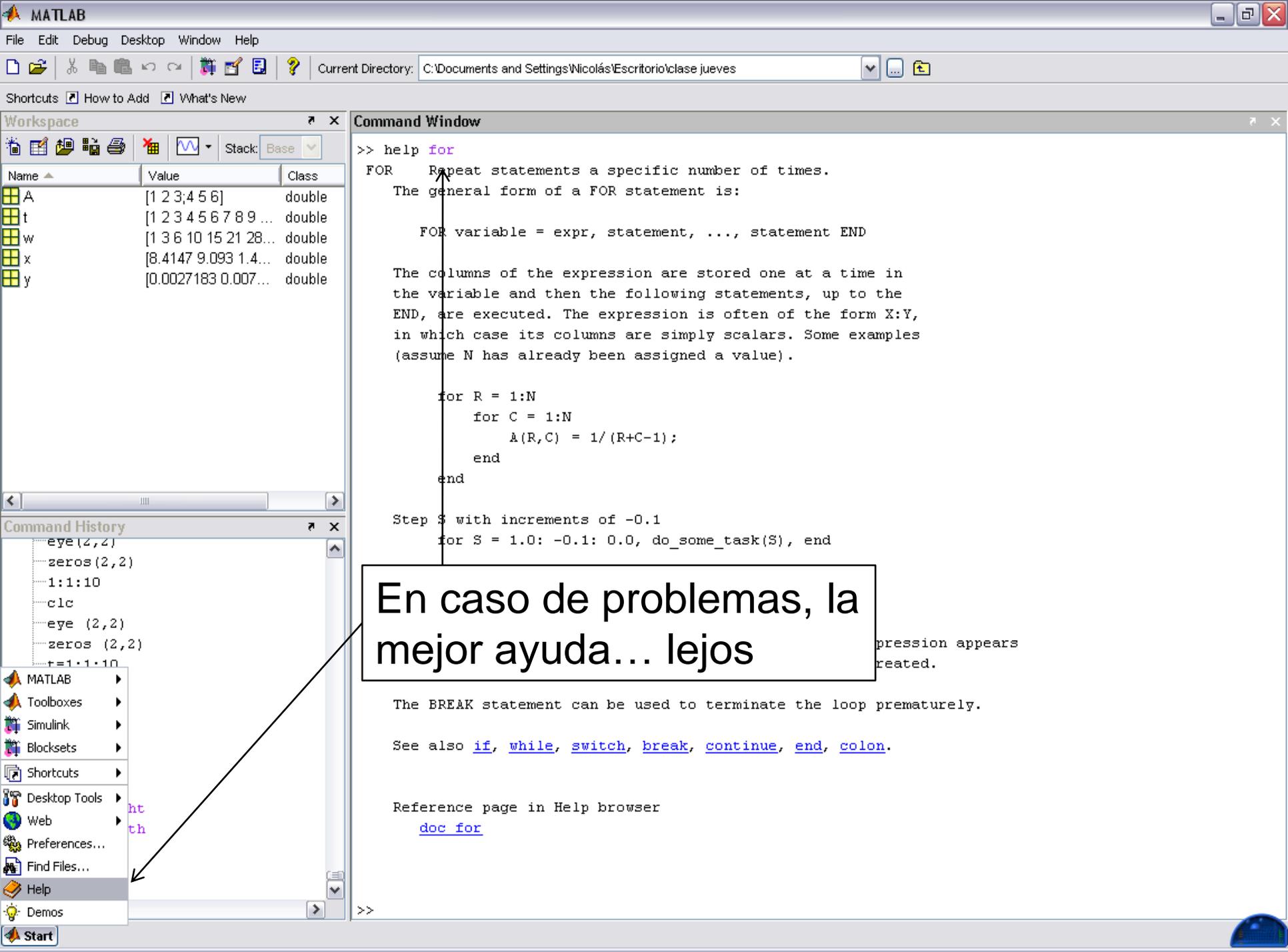


Definir "lugar de trabajo"

Resultado gráfico

Set de instrucciones

Definición de función



En caso de problemas, la mejor ayuda... lejos

```
>> help for
FOR      Repeat statements a specific number of times.
        The general form of a FOR statement is:

        FOR variable = expr, statement, ..., statement END

        The columns of the expression are stored one at a time in
        the variable and then the following statements, up to the
        END, are executed. The expression is often of the form X:Y,
        in which case its columns are simply scalars. Some examples
        (assume N has already been assigned a value).

        for R = 1:N
            for C = 1:N
                A(R,C) = 1/(R+C-1);
            end
        end

        Step $ with increments of -0.1
        for S = 1.0:-0.1:0.0, do_some_task(S), end

The BREAK statement can be used to terminate the loop prematurely.

See also if, while, switch, break, continue, end, colon.

Reference page in Help browser
doc for

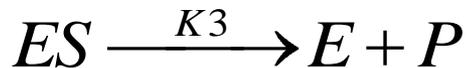
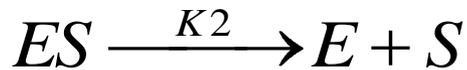
>>
```

```
Command History
eye(2,2)
zeros(2,2)
1:1:10
clc
eye(2,2)
zeros(2,2)
t=1:1:10

MATLAB
Toolboxes
Simulink
Blocksets
Shortcuts
Desktop Tools
Web
Preferences...
Find Files...
Help
Demos
Start
```

## 2. EJEMPLO DE MICHAELIS - MENTEN

Modelo Cinético:



$$\frac{d[S]}{dt} = -K_1 \cdot [S][E] + K_2 \cdot [ES]$$

$$\frac{d[ES]}{dt} = K_1 \cdot [S][E] - K_2 \cdot [ES] - K_3 \cdot [ES]$$

$$\frac{d[E]}{dt} = -K_1 \cdot [S][E] + K_2 \cdot [ES] + K_3 \cdot [ES]$$

$$\frac{d[P]}{dt} = K_3 \cdot [ES]$$

Cuasi Estacionalidad:

$$\frac{d[ES]}{dt} = 0$$

$$\frac{d[P]}{dt} = -\frac{d[S]}{dt} = K_3[E_0] \cdot \frac{[S]}{K_m + [S]}$$

$$[E_0] = [E] + [ES]$$

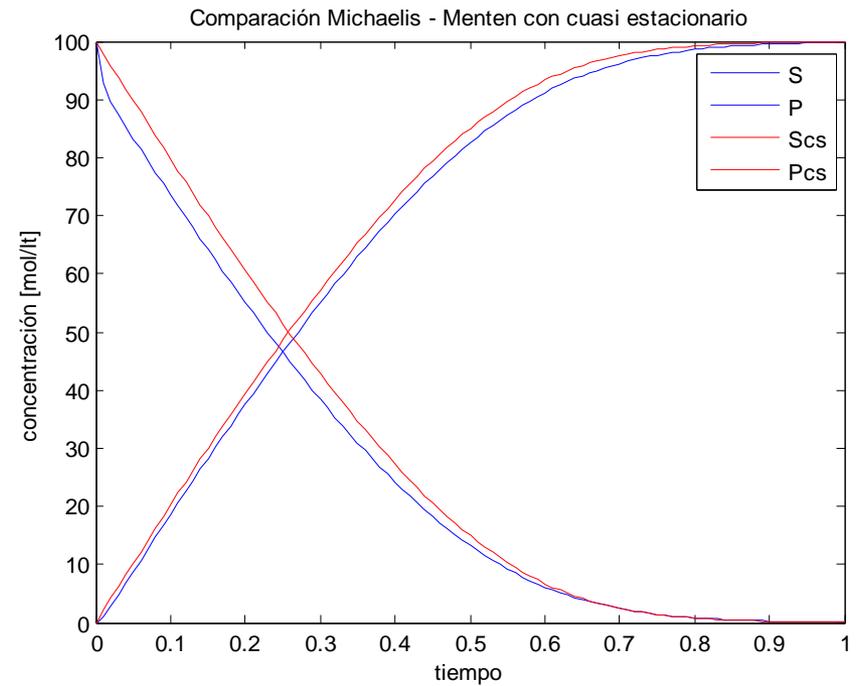
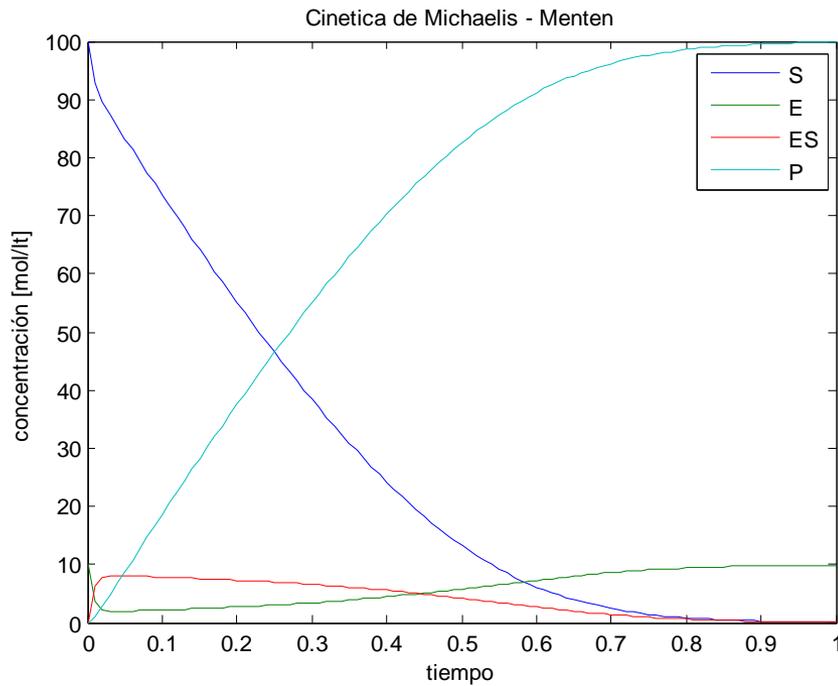
$$K_m = \frac{K_3 + K_2}{K_1}$$



## 2. EJEMPLO DE MICHAELIS - MENTEN

### RESULTADOS:

### Modelo Cinético:



$$K1 = K2 = 0.005; K3 = 0.1$$



Ahora...  
Ecuaciones en  
Derivadas Parciales



# 3. RESOLUCIÓN DE EDPs

## Expresión analítica

Las PDE de segundo orden pueden escribirse de forma general (para dependencia de 2 variables):

$$a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + d \frac{\partial u}{\partial x} + e \frac{\partial u}{\partial y} + f \cdot u + g = 0$$

En que:

$x$  e  $y$  son las variables independientes.

$u$  es la variable dependiente.

Si  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , etc. no son funciones de  $u$ , se dice que la ecuación es lineal.

Complementariamente, las PDE se clasifican según la relación entre sus coeficientes. Si:

$b^2 - 4ac < 0 \rightarrow$  elíptica

$b^2 - 4ac = 0 \rightarrow$  parabólica

$b^2 - 4ac > 0 \rightarrow$  hiperbólica



### 3. RESOLUCIÓN DE EDPs

Para resolver numéricamente este tipo de problemas existen 3 grandes métodos a saber:

- Diferencias Finitas
- Volúmenes Finitos
- Elementos Finitos

Se analiza los métodos numéricos más comunes para resolver PDE mediante el MDF. En particular, se hará mediante la ecuación de transmisión de calor (o de Fick) simplificada.

$$\nabla^2 u = \frac{1}{k} \frac{\partial u}{\partial t}$$

Junto a la ecuación, la interpretación física de una PDE va acompañada con condiciones adicionales. Para la ecuación de calor hay 2 tipos de condiciones:

1.- Condición inicial:

$$u(\vec{x}, 0) = u_0(\vec{x}) \quad \forall \vec{x} \in \text{Dominio}$$

2.- Condiciones de borde:

2.a.- Condiciones tipo Dirichlet:

Consiste en imponer

$$u(\vec{x}, t) = \varphi_0(\vec{x}) \quad \forall t \in [0, T], \quad \forall \vec{x} \in \text{Borde}$$

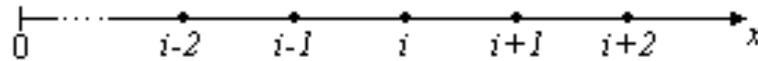
2.b.- Condiciones tipo Neumann: “Flujo de calor en el borde del dominio es conocido”

$$\frac{\partial u}{\partial \hat{n}}(\vec{x}, t) = \psi_0(\vec{x}) \quad \forall t \in [0, T], \quad \forall \vec{x} \in \text{Borde}$$



### 3. RESOLUCIÓN DE EDPs

MDF se basa en la expansión en series de Taylor aproximando la derivada parcial por cociente donde se realiza una discretización del dominio obteniendo una malla de trabajo:



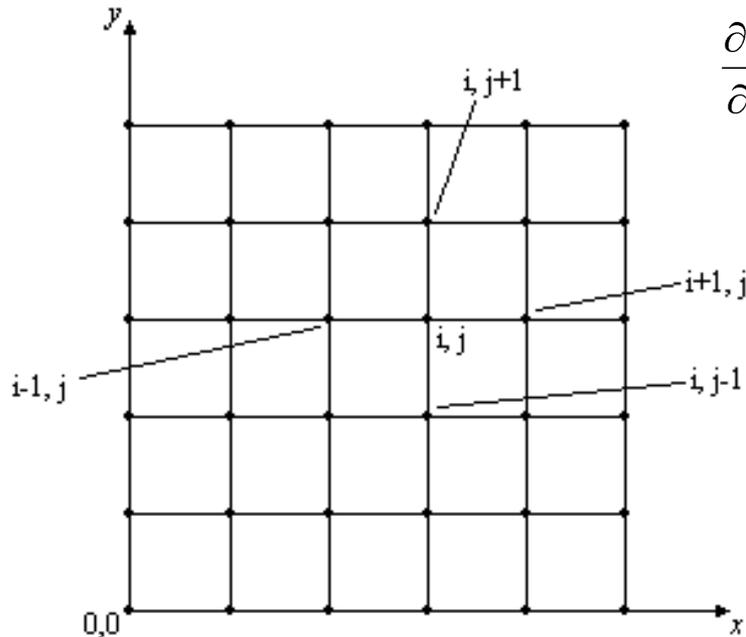
	Primer orden	Error	Segundo orden	Error
Dif. hacia delante	$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$	$0(\Delta x)$	$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_{i+2} - 2u_{i+1} + u_i}{\Delta x^2}$	$0(\Delta x^2)$
Dif. hacia atrás	$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}$	$0(\Delta x)$	$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_i - 2u_{i-1} + u_{i-2}}{\Delta x^2}$	$0(\Delta x^2)$
Dif. central	$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x}$	$0(\Delta x^2)$	$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$	$0(\Delta x^2)$



### 3. RESOLUCIÓN DE EDPs: ELÍPTICA

El caso estacionario de transmisión de calor para una placa cuadrada (2 dimensiones) es:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0 \quad \text{ecuación de Laplace}$$



$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{\Delta x^2}$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\Delta y^2}$$

Reemplazando:

$$\frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\Delta y^2} = 0$$

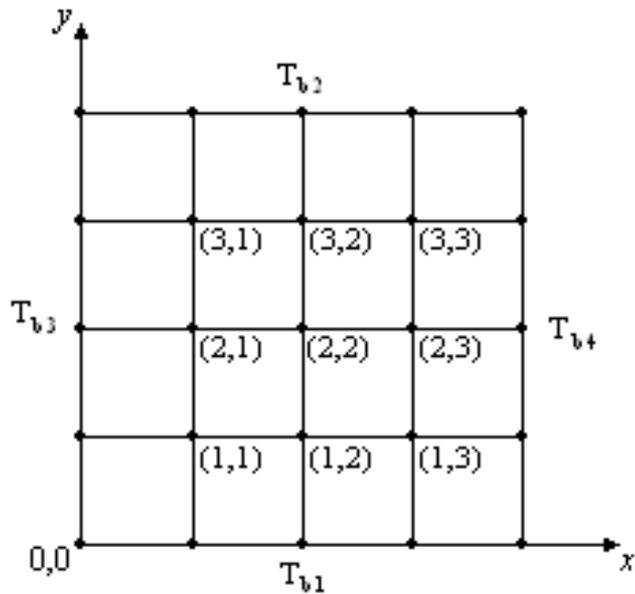
Considerando una malla en que  $\Delta x = \Delta y$ :

$$T_{i+1,j} + T_{i-1,j} + T_{i,j+1} + T_{i,j-1} - 4T_{i,j} = 0$$



# 3. RESOLUCIÓN DE EDPs: ELÍPTICA

C.B. tipo Dirichlet:



$A \cdot T = b$ , y la solución estará dada por  $T = A^{-1} \cdot b$

A

-4	1	0	1	0	0	0	0	0
1	-4	1	0	1	0	0	0	0
0	1	-4	0	0	1	0	0	0
1	0	0	-4	1	0	1	0	0
0	1	0	1	-4	1	0	1	0
0	0	1	0	1	-4	0	0	1
0	0	0	1	0	0	-4	1	0
0	0	0	0	1	0	1	-4	1
0	0	0	0	0	1	0	1	-4

T

$T_{11}$
$T_{21}$
$T_{31}$
$T_{12}$
$T_{22}$
$T_{32}$
$T_{13}$
$T_{23}$
$T_{33}$

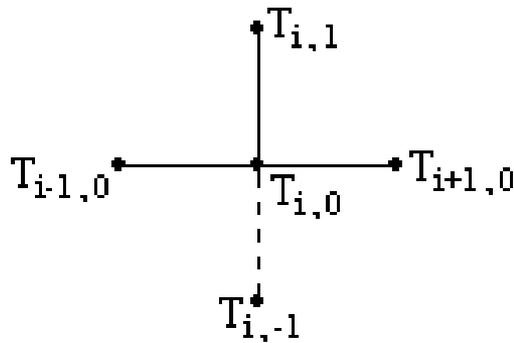
b

$-T_{b1} - T_{b3}$
$-T_{b1}$
$-T_{b1} - T_{b4}$
$-T_{b3}$
0
$-T_{b4}$
$-T_{b2} - T_{b3}$
$-T_{b2}$
$-T_{b2} - T_{b4}$



### 3. RESOLUCIÓN DE EDPs: ELÍPTICA

C.B. tipo Neumann:



$$T_{i+1,0} + T_{i-1,0} + T_{i,1} - T_{i,-1} - 4T_{i,0} = 0$$

Aproximando la derivada en la dimensión y mediante diferencia finita central:

$$\frac{\partial T}{\partial y} \cong \frac{T_{i,1} - T_{i,-1}}{2\Delta y} \quad \longrightarrow \quad T_{i,-1} = T_{i,1} - 2\Delta y \frac{\partial T}{\partial y}$$

Reemplazando:

$$T_{i+1,0} + T_{i-1,0} + 2T_{i,1} - 2\Delta y \frac{\partial T}{\partial y} - 4T_{i,0} = 0$$



### 3. RESOLUCIÓN DE EDPs: PARABÓLICA

La ecuación de calor unidimensional (a través de una barra delgada) es:

$$k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\partial T}{\partial t}$$

- Método explícito
- Método implícito



### 3. RESOLUCIÓN DE EDPs: PARABÓLICA

- Método explícito:

Para éste caso se utiliza una diferencia finita central para estimar la derivada espacial y una diferencia finita hacia adelante para aproximar la derivada en el tiempo.

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i+1}^l - 2T_i^l + T_{i-1}^l}{\Delta x^2} \quad \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\Delta t}$$

Sustituyendo:

$$k \frac{T_{i+1}^l - 2T_i^l + T_{i-1}^l}{\Delta x^2} = \frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\Delta t} \quad \longrightarrow \quad T_i^{l+1} = T_i^l + \alpha \cdot (T_{i+1}^l - 2T_i^l + T_{i-1}^l)$$

$$\text{Con: } \alpha = k\Delta t / (\Delta x)^2$$

$$\text{Criterio de convergencia: } \alpha \leq 1/2 \quad \rightarrow \quad \Delta t \leq \frac{(\Delta x)^2}{2k}$$



### 3. RESOLUCIÓN DE EDPs: PARABÓLICA

#### - Método implícito:

Si bien en el método explícito es bastante simple, existen problemas de inestabilidad de la solución. Este problema se soluciona implementando un método implícito, en el que la derivada espacial se aproxima mediante una diferencia finita central, pero en un tiempo  $l+1$ :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i+1}^{l+1} - 2T_i^{l+1} + T_{i-1}^{l+1}}{\Delta x^2} \qquad \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\Delta t}$$

Sustituyendo:

$$k \frac{T_{i+1}^{l+1} - 2T_i^{l+1} + T_{i-1}^{l+1}}{\Delta x^2} = \frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\Delta t} \quad \longrightarrow \quad -\alpha T_{i-1}^{l+1} + (1 + 2\alpha)T_i^{l+1} - \alpha T_{i+1}^{l+1} = T_i^l$$



### 3. RESOLUCIÓN DE EDPs: PARABÓLICA

Ambos casos pueden escribirse de manera matricial

$$\begin{bmatrix} T_1^{l+1} \\ \vdots \\ T_n^{l+1} \\ \vdots \\ T_{Nx}^{l+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1-2\alpha & \alpha & & & \\ \alpha & 1-2\alpha & \ddots & & \\ & \alpha & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} T_1^l \\ \vdots \\ T_n^l \\ \vdots \\ T_{Nx}^l \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \alpha \cdot f_0(t^l) \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ \alpha \cdot f_{m+1}(t^l) \end{bmatrix} \quad \leftarrow \text{Método explícito}$$

Método implícito  $\rightarrow$

$$\begin{bmatrix} 1+2\alpha & -\alpha & & & \\ -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha & & \\ & -\alpha & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} T_1^{l+1} \\ \vdots \\ T_n^{l+1} \\ \vdots \\ T_{Nx}^{l+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_1^l \\ \vdots \\ T_n^l \\ \vdots \\ T_{Nx}^l \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} f_0(t^{l+1}) \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ f_{m+1}(t^{l+1}) \end{bmatrix}$$


### 3. RESOLUCIÓN DE EDPs: PARABÓLICA EN 2D

Finalmente se analiza el caso en que se tiene transmisión de calor en estado transiente sobre una placa.

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

Para la resolución numérica de este problema se utiliza el *método de las líneas*. En este se aproxima el problema PDE a un sistema de EDOs *lineales*, por eso su nombre.

$$\frac{\partial T_{i,j}}{\partial t} = k \left( \frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\Delta y^2} \right)$$

La ecuación anterior se realiza para una malla. Considerando  $\Delta x = \Delta y$ :

$$\frac{\partial T_{i,j}}{\partial t} = \frac{k}{\Delta x^2} (T_{i+1,j} + T_{i-1,j} + T_{i,j+1} + T_{i,j-1} - 4T_{i,j})$$

Criterio de convergencia:  $\partial t \leq \frac{(\Delta x)^2}{4k}$



Ahora...  
MATLAB... otra vez



**DUDAS?**

