Modelación Axiomática de Sistemas Continuos

Martín A. Díaz-Viera

Instituto Mexicano del Petróleo
mdiazv@imp.mx

Posgrado del Instituto Mexicano del Petróleo

16 de marzo de 2023

Contenido I

1. Sistemas continuos
   - Introducción
   - El concepto del *continuum*
   - Definiciones de cuerpo y dominio
   - Sistemas de coordenadas Lagrangianas y Eulerianas
   - Volumen elemental representativo
2. Enfoque axiomático
   - Propiedades extensivas e intensivas
   - Ecuaciones de balance global y local
   - Ecuaciones básicas de la mecánica de medios continuos
   - Sistemas de varias fases
   - Modelos completos
3. Metodología sistemática
   - Identificar fases y componentes

Contenido II

- Propiedades extensivas e intensivas
- Ecuaciones de balance por componentes
- Modelo completo

4. Ejemplo

5. Referencias

Introducción

- La *mecánica de medios continuos* es una rama de la mecánica.
- Se ocupa del análisis de la cinemática y del comportamiento mecánico de materiales modelados como un *continuum*.
- El matemático francés Augustin Louis Cauchy fue el primero en formular estos modelos en el siglo XIX, pero la investigación en el área continúa hoy en día.
- La modelación de un objeto como un continuum supone que la sustancia del objeto llena por completo el espacio que ocupa.
- El modelado de objetos de esta manera ignora que la materia está compuesta de átomos, y por lo tanto no es continua.
- Sin embargo, en las escalas de longitud mucho mayor que el de las distancias interatómicas, esos modelos son de alta precisión.

Introducción

- Las leyes físicas fundamentales, como la conservación de la masa, el momento, y la energía son la base de los modelos.
- Para derivar las ecuaciones diferenciales que describen el comportamiento de los objetos se requiere conocer las propiedades del material que están constituídos.
- Esto se realiza a través de *relaciones constitutivas*.

Introducción

- La mecánica de medios continuos se ocupa de las propiedades físicas de los sólidos y líquidos
- Son independientes de cualquier sistema de coordenadas particular, en el que se observan.
- Estas propiedades físicas se representan por tensores.
- Los tensores tienen la propiedad de ser independiente del sistema de coordenadas.
- Pueden expresarse en el sistema de coordenadas que sea más conveniente para el cálculo.

Sistemas continuos

Conceptos básicos de los sistemas continuos:

- Los **sistemas continuos** están constituidos por cuerpos.
- Un **cuerpo** es un conjunto (infinito) de puntos materiales que en cualquier instante dado ocupa una región o **dominio**, en el sentido matemático, del espacio tridimensional.
- Un **punto espacial** es un punto fijo en el espacio definido por sus coordenadas
- Un **punto material**, también llamada **partícula**, puede ocupar distintos puntos espaciales en su movimiento a lo largo del tiempo.

Hipótesis del continuum

Hipótesis básica de los sistemas continuos:

- Consiste en considerar que un sistema continuo llena todo el espacio que ocupa.
- Cada punto espacial de un cuerpo de un sistema continuo está ocupado por un punto material (o por una partícula).
- En la teoría de los sistemas continuos se trabaja con los promedios de sus propiedades físicas.
- Existe un volumen llamado representativo, para el cual se calculan y son válidos los promedios de dichas propiedades.

Definiciones de cuerpo y dominio

Definiciones de cuerpo, subcuerpo y dominio:

- Denotaremos por $B(t)$ al dominio, que es la región ocupada por el cuerpo $\mathbf{B}$ en el instante de tiempo t.
- Dado un cuerpo $\mathbf{B}$, toda subregión $\tilde{\mathbf{B}} \subset \mathbf{B}$, constituye a su vez otro cuerpo.
- En tal caso, se puede decir que $\tilde{\mathbf{B}}$ es un subcuerpo de $\mathbf{B}$.

Configuración espacial y de referencia del cuerpo

- Debido a la hipótesis básica de los sistemas continuos, en cualquier instante de tiempo t, y en cada punto espacial $\underline{x} \in B(t)$ de la región ocupada por el cuerpo, hay solo un punto material del cuerpo **B**.
- La **configuración espacial** del cuerpo **B** en el instante t, es el lugar geométrico de las posiciones que ocupan en el espacio los puntos materiales del cuerpo en dicho instante.
- Se le denomina **configuración de referencia** a la configuración espacial en el instante inicial t_0 del intervalo de tiempo de interés $[t_0, t_f]$.

Sistemas de coordenadas Lagrangianas y Eulerianas

- **Coordenadas materiales o Lagrangianas:**
  Son las coordenadas del vector de posición

$$\underline{X} = (X_1, X_2, X_3) \tag{1}$$

  que ocupa un punto material del cuerpo **B** en el instante inicial t_0 en la configuración de referencia.

- **Coordenadas espaciales o Eulerianas:**
  Son las coordenadas del vector de posición

$$\underline{x} = (x_1, x_2, x_3) = \underline{p}(\underline{X}, t) = (p_1, p_2, p_3) \tag{2}$$

  que ocupa el punto material $\underline{X}$ del cuerpo **B** en el instante t en la configuración espacial.

Sistemas de coordenadas Lagrangianas y Eulerianas

- Al haber una relación biunívoca entre ambos sistemas de coordenadas, podemos definir la inversa de la función $\underline{p}(\underline{X}, t)$ a la cual denotaremos por

$$\underline{p}^{-1}(\underline{x}, t) \equiv \underline{X} \tag{3}$$

- La región ocupada por el cuerpo **B** cambia con el tiempo debido al movimiento, si fijamos el tiempo t entonces

$$B(t) = \underline{p}(\mathbf{B}, t) \tag{4}$$

Sistemas de coordenadas Lagrangianas y Eulerianas

- Para observar la trayectoria de un punto material $\underline{X}$, sólo debemos fijar dicho punto y variar t en la función $\underline{p}(\underline{X}, t)$.
- Esto permite obtener la velocidad $\underline{V}(\underline{X}, t)$ de cualquier punto material $\underline{X}$.
- La velocidad $\underline{V}(\underline{X}, t)$ se define como

$$\underline{V}(\underline{X}, t) = \frac{\partial}{\partial t}\underline{p}(\underline{X}, t) \tag{5}$$

- Es la derivada de la posición con respecto al tiempo cuando el punto material se mantiene fijo.

Sistemas de coordenadas Lagrangianas y Eulerianas

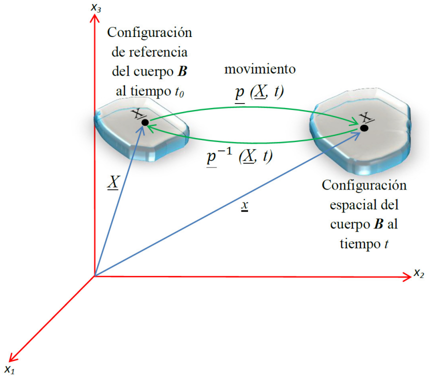

Figura 1: Esquema de la relación entre la configuración de referencia del cuerpo **B**, las coordenadas materiales $\underline{X}$ y las coordenadas espaciales $\underline{x}$ de un punto material $\underline{X} \in \mathbf{B}$.

Volumen elemental representativo

- En los sistemas continuos se trabaja con los promedios de sus propiedades físicas y existe un volumen elemental (o elemento de volumen) llamado representativo, para el cual se calculan y son válidos los promedios de dichas propiedades.
- Ejemplo: Sea $b(r, \underline{x})$ una esfera de radio r con centro en $\underline{x}$ en el cuerpo material $B(t)$.
- Sean $V(b(r, \underline{x}))$ y $M(b(r, \underline{x}))$ el volumen y la masa de la esfera, respectivamente.
- Se puede definir la densidad de masa en el punto $\underline{x}$ como:

$$\rho(\underline{x}) = \lim_{r \to 0_+} \frac{M(b(r, \underline{x}))}{V(b(r, \underline{x}))} \tag{6}$$

Propiedades intensivas

- Son propiedades muy específicas que no dependen de la cantidad de la materia.
- Por ejemplo, la densidad de masa o la densidad de volumen y que pueden expresarse como funciones definidas para cada tiempo en cada uno de los puntos del sistema continuo.
- Son funciones que están definidas en la posición $\underline{x}$ del punto material $\underline{X}$ al tiempo t.
- Pueden ser funciones escalares como la concentración de cierta sustancia al tiempo t o vectoriales como la velocidad, que depende del punto material $\underline{X}$ y del tiempo t.

Propiedades intensivas

- Una propiedad intensiva con valores vectoriales es equivalente a tres escalares, correspondientes a cada una de sus tres componentes.
- En resumen, las propiedades intensivas son funciones definidas en los puntos materiales de un cuerpo.
- Son funciones que hacen corresponder a cada punto material y cada tiempo en un número real o un vector del espacio Euclidiano tridimensional $\mathbb{R}^3$.
- Hay dos formas de representar a las propiedades intensivas: la representación Euleriana y la representación Lagrangiana.

Propiedades intensivas: representación Lagrangiana

- En honor a Joseph Louis Lagrange (1736-1813).
- Consideremos una propiedad intensiva escalar, tal que en el instante t toma en el punto material $\underline{X}$ el valor

  $$\phi(\underline{X}, t)$$

  definiendo una función $\phi : \mathbf{B} \to \mathbb{R}^1$ para cada instante t, a la que se le llama representación Lagrangiana de la propiedad intensiva considerada.
- Esta representación es más utilizada en el estudio de los sólidos.

Propiedades intensivas: representación Euleriana

- En honor a Leonard Euler (1707-1783).
- Consideremos una propiedad intensiva, tal que en el instante t toma en el punto material que ocupa la posición $\underline{x}$ el valor

$$\psi(\underline{x}, t)$$

  definiendo una fución $\psi : B(t) \rightarrow \mathbb{R}^1$ para cada instante t, a la que se le llama representación Euleriana de la función considerada.
- Esta representación es más utilizada en el estudio de los fluidos.

Propiedades intensivas

- Ambas representaciones satisfacen las siguientes identidades:

$$\phi(\underline{X}, t) \equiv \psi\left(\underline{p}(\underline{X}, t), t\right) \quad y \quad \psi(\underline{x}, t) \equiv \phi(\underline{p}^{-1}(\underline{X}, t), t) \tag{7}$$

- Sin embargo

$$\phi(\underline{X}, t) \neq \psi(\underline{x}, t) \tag{8}$$

- Dado que si tomamos $\underline{x} = \underline{X}$, en general

$$\phi(\underline{X}, t) \neq \psi(\underline{X}, t) \tag{9}$$

Propiedades intensivas

- Por ejemplo, la representación Lagrangiana de la velocidad de un punto material se expresa como:

$$\frac{\partial \underline{p}}{\partial t}(\underline{X}, t) = \underline{V}(\underline{X}, t) \equiv \underline{v}(\underline{p}(\underline{X}, t), t) \tag{10}$$

  donde $\underline{v}(\underline{x}, t)$ es la representación Euleriana de la velocidad,

- Entonces se cumple que

$$\underline{v}(\underline{x}, t) \equiv \underline{V}(\underline{p}^{-1}(\underline{x}, t), t) \tag{11}$$

- La velocidad en el punto $\underline{x}$ del espacio físico, es igual a la velocidad del punto material que pasa por dicho punto en el instante t.

La derivada material

- Si obtenemos la derivada parcial con respecto al tiempo de la representación Lagrangiana, $\phi(\underline{X}, t)$, de una propiedad intensiva.
- De acuerdo a la definición de la derivada parcial de una función, es la tasa de cambio con respecto al tiempo que ocurre en un punto material fijo, el resultado final es

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t}(\underline{X}, t) &= \frac{\partial \psi}{\partial t}(\underline{p}(\underline{X}, t), t) + \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial \psi}{\partial x_i}(\underline{p}(\underline{X}, t), t)\frac{\partial p_i}{\partial t}(\underline{X}, t) \\ &= \frac{\partial \psi}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla \psi \end{aligned} \tag{12}$$

La derivada material

- Tiene interés evaluar la tasa de cambio con respecto al tiempo que ocurre en un punto material fijo.
- La derivada material se puede denotar por el siguiente operador:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla \tag{13}$$

Propiedades extensivas

- Son propiedades muy generales de cualquier sustancia que dependen de la cantidad de la materia, por ejemplo, el peso, la masa, el volumen, la longitud, etc.
- Se denotan por $E(t)$ o bien $E(B,t)$ y funciones que a cada cuerpo B de un sistema continuo y a cada tiempo t le asocia un número real o un vector en $\mathbb{R}^3$ y puede expresarse como sigue:

$$E(t) = \int\limits_{B(t)} \psi(\underline{x},t)d\underline{x} \tag{14}$$

donde $\psi(\underline{x},t)$ es la representación euleriana de una propiedad intensiva.

Relación entre propiedades intensivas y extensivas

- Existe una relación biunívoca entre las propiedades extensivas e intensivas.
- Dada la representación euleriana $\psi(\underline{x}, t)$ de cualquier propiedad intensiva.
- Su integral sobre el dominio ocupado por cualquier cuerpo define una propiedad extensiva e inversamente.
- Dada una propiedad extensiva cuando el integrando define una propiedad intensiva.

Relaciones entre propiedades intensivas y extensivas

Ejemplos de relaciones entre propiedades intensivas y extensivas:

Propiedad Extensiva		Propiedad Intensiva
Masa	$\leftrightarrow$	Densidad(de masa)
Momento lineal	$\leftrightarrow$	Densidad de momento lineal
Momento angular	$\leftrightarrow$	Densidad de momento angular
Energía	$\leftrightarrow$	Energía específica
Energía cinética	$\leftrightarrow$	Energía cinética específica
Energía interna	$\leftrightarrow$	Energía interna específica
Volumen	$\leftrightarrow$	La función constante, idéntica a la unidad
Volumen de huecos	$\leftrightarrow$	Porosidad

Ecuación de balance global

- En la mecánica de medios continuos los modelos matemáticos se basan en el balance de las propiedades extensivas en cada cuerpo del sistema continuo.
- Para realizar estos balances, debemos identificar las causas por las que las propiedades extensivas de cualquier cuerpo pueden cambiar, las cuales pueden ser:
  - Por lo que se genera o se destruye en el interior del cuerpo.
  - Por el flujo que se importa o exporta a través de la frontera.

Ecuación de balance global

- En la teoría de sistemas continuos, el postulado básico para la formulación de las ecuaciones de balance de las propiedades extensivas es:
- *Cualquier variación de la propiedad extensiva proviene de lo que se genera o se destruye dentro del cuerpo o de lo que entra o sale a través de su frontera*.
- Pero también debemos tener en cuenta que puede haber discontinuidades (ver Figura 2).

Esquema de un cuerpo material $B(t)$

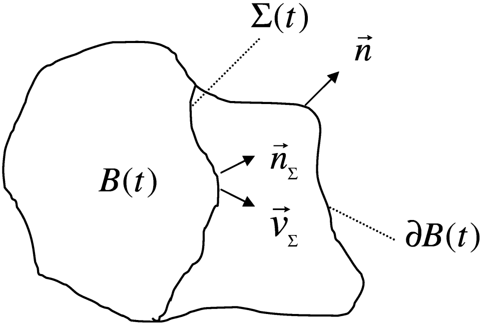

Figura 2: Esquema de un cuerpo material $B(t)$ con frontera $\partial B(t)$, donde $\underline{n}$ es su vector normal externo. La superficie de discontinuidad $\Sigma(t)$ tiene vector normal $\underline{n}_\Sigma$ y se mueve con velocidad $\underline{v}_\Sigma$. $B(t)$ se mueve a velocidad $\underline{v}$.

Ecuación de balance global

Esto conduce a la siguiente ecuación de balance global:

$$\frac{d}{dt}E(t) = \int_{B(t)} g(\underline{x},t)d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} q(\underline{x},t)d\underline{x} + \int_{\Sigma(t)} g_{\Sigma}(\underline{x},t)d\underline{x} \quad (15)$$

- $g(\underline{x},t)$ es el término fuente en el interior del cuerpo $B(t)$, por unidad de volumen por unidad de tiempo.
- $q(\underline{x},t)$ es lo que se importa o exporta a través de la frontera del cuerpo $\partial B(t)$, es decir, es el flujo de la propiedad extensiva a través de la frontera del cuerpo, por unidad de área, por unidad de tiempo.
- $g_{\Sigma}(\underline{x},t)$ es término fuente por unidad de área en $\Sigma(t)$.

Ecuación de balance global

- Para cada tiempo t, existe un campo vectorial $\underline{\tau}(\underline{x}, t)$ tal que el flujo de la propiedad extensiva a través de la frontera se puede expresar como:

$$q(\underline{x}, t) \equiv \underline{\tau}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n}(\underline{x}, t)$$

  donde $\underline{n}$ es la normal exterior a la frontera $\partial B(t)$ (Figura 2),
- Entonces la ecuación de balance global se puede reescribir como:

$$\frac{d}{dt}E(t) = \int\limits_{B(t)} g(\underline{x}, t)d\underline{x} + \int\limits_{\partial B(t)} \underline{\tau}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n}(\underline{x}, t)d\underline{x} + \int\limits_{\Sigma(t)} g_{\Sigma}(\underline{x}, t)d\underline{x} \tag{16}$$

Ecuaciones de balance local

- A cada sistema continuo le corresponde una familia de propiedades extensivas.
- El modelo matemático del sistema está constituido por las condiciones de balance de las propiedades extensivas.
- Sin embargo, las propiedades extensivas mismas no se utilizan directamente en la formulación del modelo.
- En su lugar se usan las propiedades intensivas asociadas a las propiedades extensivas.
- Esto es posible porque las **ecuaciones de balance global** son equivalentes a las llamadas **condiciones de balance local**.
- Las condiciones de balance local son de dos tipos: ecuaciones diferenciales y condiciones de salto.

Ecuación diferencial de balance local

- Son ecuaciones diferenciales parciales que se deben satisfacer en cada punto del espacio ocupado por el sistema continuo, y son de la forma siguiente:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\psi \underline{v}) = g + \nabla \cdot \underline{\tau} \qquad \forall \underline{x} \in B(t) \setminus \Sigma(t) \qquad (17)$$

  - $\psi(\underline{x}, t)$ es la propiedad intensiva que corresponde a $E(t)$.
  - $\underline{v}(\underline{x}, t)$ es la velocidad Euleriana de las partículas.
  - $g(\underline{x}, t)$ es el término fuente en $B(t)$.
  - $\underline{\tau}(\underline{x}, t)$ es el campo de flujo a través de la frontera $\partial B(t)$.

Ecuación diferencial de balance local

- La ecuación diferencial de balance local puede expresarse en términos de la derivada material de ψ como:

$$\frac{D\psi}{Dt} + \psi \nabla \cdot \underline{v} = g + \nabla \cdot \underline{\tau} \qquad \forall \underline{x} \in B(t) \setminus \Sigma(t) \tag{18}$$

  - $\psi(\underline{x}, t)$ es la propiedad intensiva que corresponde a $E(t)$.
  - $\underline{v}(\underline{x}, t)$ es la velocidad Euleriana de las partículas.
  - $g(\underline{x}, t)$ es el término fuente en $B(t)$.
  - $\underline{\tau}(\underline{x}, t)$ es el campo de flujo a través de la frontera $\partial B(t)$.

Condiciones de salto

- Las condiciones de salto son ecuaciones algebraicas que las discontinuidades deben satisfacer en cada punto de la superficie de discontinuidad $\Sigma(t)$, y se escriben como:

$$[\![\psi(\underline{v} - \underline{v}_\Sigma) - \underline{\tau}]\!] \cdot \underline{n}_\Sigma = g_\Sigma \qquad \forall \underline{x} \in \Sigma(t). \tag{19}$$

  - $\underline{v}_\Sigma(\underline{x}, t)$ es la velocidad de la discontinuidad $\Sigma(t)$.
  - $g_\Sigma(\underline{x}, t)$ es el término fuente en $\Sigma(t)$.
  - $\underline{n}_\Sigma(\underline{x}, t)$ es la normal a la superficie de discontinuidad $\Sigma(t)$.
- Los límites por ambos lados de $\Sigma(t)$ existen, pero son diferentes.
  $[\![f]\!] = \lim_{\underline{x}\to\Sigma^+} f(\underline{x}) - \lim_{\underline{x}\to\Sigma^-} f(\underline{x})$ es el salto de la función f.

Ecuaciones básicas de la mecánica de medios continuos

No.	P. Extensiva	P. Intensiva	$\underline{\tau}$	g	g_Σ	Ec. de Balance Local	Condición de salto
1	Masa M(t)	ρ	0	0	0	$\frac{D\rho}{Dt} + \rho\nabla \cdot \underline{v} = 0$	$[\![\rho(\underline{v} - \underline{v}_\Sigma)]\!] \cdot n_\Sigma = 0$
2	Momento Lineal $\mathfrak{M}(t)$	$\rho\underline{v}$	$\underline{\underline{\sigma}}$	$\rho\underline{b}$	0	$\rho\frac{D\underline{v}}{Dt} - \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} - \rho\underline{b} = 0$	$[\![\rho\underline{v}(\underline{v} - \underline{v}_\Sigma) - \underline{\underline{\sigma}}]\!] \cdot n_\Sigma = 0$
3	Momento Angular $\mathfrak{M}_a(t)$	$\rho(\underline{x} \times \underline{v})$	$\underline{x} \times \underline{\underline{\sigma}}$	$\rho(\underline{x} \times \underline{b})$	0	$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\sigma}}^T$	$[\![\rho(\underline{x} \times \underline{v})(\underline{v} - \underline{v}_\Sigma) - \underline{x} \times \underline{\underline{\sigma}}]\!] \cdot n_\Sigma = 0$
4	Energía $\mathcal{E}(t)$	$\rho(E + \frac{1}{2} \mid \underline{v} \mid^2)$	$\underline{q} + \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{v}$	$\rho(h + \underline{b} \cdot \underline{v})$	0	$\rho\frac{DE}{Dt} = \nabla \cdot \underline{q} + \rho h + \underline{\underline{\sigma}} \cdot \nabla\underline{v}$	$[\![\rho(E + \frac{1}{2}\underline{v} \cdot \underline{v})(\underline{v} - \underline{v}_\Sigma) - (\underline{q} + \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{v})]\!] \cdot n_\Sigma = 0$

Cuadro 1: Ecuaciones básicas de la mecánica de medios continuos.

Sistemas de varias fases

- Una fase está compuesta por varios componentes completamente superpuestos, que se mueven todos a la misma velocidad $\underline{v}_\alpha$.
- Sea N el número de fases y $\alpha = 1, ..., N$ el número de la fase.
- Sea M_α el número de componentes y γ es el número de la componente dentro de la fase α, es decir, $\gamma = 1, ..., M_\alpha$.
- Se somete a balance un conjunto de propiedades extensivas que tiene asociado un conjunto de propiedades intensivas.
- En éste caso, consideraremos únicamente una propiedad intensiva por componente la cual se denotará por ψ_α^γ.
- Sea E_α^γ su propiedad extensiva correspondiente.

Sistemas de varias fases

- $\psi_\alpha^\gamma(\underline{x}, t)$ es la **propiedad intensiva** asociada a la **propiedad extensiva** E_α^γ como sigue:

$$E_\alpha^\gamma(t) = \int_{B(t)} \psi_\alpha^\gamma(\underline{x}, t) d\underline{x}, \ \alpha = 1, ..., N, \gamma = 1, ..., M_\alpha \qquad (20)$$

- **Ecuaciones de balance global**

$$\begin{aligned} \frac{dE_\alpha^\gamma(t)}{dt} &= \int_{B(t)} g_\alpha^\gamma(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} \underline{\tau}_\alpha^\gamma(\underline{x}, t) \cdot \underline{n}(\underline{x}, t) d\underline{x} \qquad (21) \\ &+ \int_{\Sigma(t)} g_{\Sigma}{}_\alpha^\gamma(\underline{x}, t) d\underline{x}, \ \alpha = 1, ..., N, \gamma = 1, ..., M_\alpha \end{aligned}$$

Sistemas de varias fases

- **Ecuaciones diferenciales de balance local**

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi_\alpha^\gamma + \nabla \cdot (\psi_\alpha^\gamma \, \underline{v}_\alpha) = g_\alpha^\gamma + \nabla \cdot \underline{\tau}_\alpha^\gamma, \qquad \forall \underline{x} \in B(t) \setminus \Sigma(t) \quad (22)$$
$$\alpha = 1, ..., N, \gamma = 1, ..., M_\alpha$$

- **Condiciones de salto de balance local**

$$[\psi_\alpha^\gamma(\underline{v}_\alpha - \underline{v}_{\Sigma\alpha}) - \underline{\tau}_\alpha^\gamma] \cdot \underline{n}_\Sigma = g_{\Sigma\alpha}^\gamma, \qquad \forall \underline{x} \in \Sigma(t) \qquad (23)$$
$$\alpha = 1, ..., N, \gamma = 1, ..., M_\alpha$$

Modelos completos

Los modelos de los sistemas continuos están constituidos por:

- Una colección de propiedades extensivas e intensivas.
- El conjunto de ecuaciones de balance local correspondientes (diferenciales y de salto).
- Suficientes relaciones que liguen a las propiedades intensivas entre sí y que definan a g, $\underline{\tau}$ y $\underline{v}$ en términos de éstas, las cuales se conocen como leyes constitutivas.
- Sin embargo, el sistema de ecuaciones resultantes no constituye un modelo completo.

Modelos completos

- En general las ecuaciones diferenciales tienen muchas soluciones.
- Por lo que es necesario complementarlas con condiciones iniciales y de frontera.
- El modelo de un sistema continuo es **completo** si define un problema **bien planteado**.
- Un problema con valores iniciales y de frontera es **bien planteado** si se cumple que:
  - Existe una única solución y
  - Ésta depende de las condiciones iniciales y de frontera de manera continua.

Modelos completos

- **Condiciones iniciales**
  Cuando en la ecuación diferencial interviene el tiempo, se incluyen condiciones iniciales que expresan el valor de la solución u al tiempo inicial $t = 0$.

$$u(\underline{x}, 0) = u_0(\underline{x}), \qquad \forall \underline{x} \in B(t) \tag{24}$$

- **Condiciones de frontera**
  Se imponen en la frontera exterior del dominio y pueden ser de varios tipos.

Tipos de condiciones de frontera

- **Dirichlet**
  Especifica los valores que toma la solución $u(\underline{x}, t)$ en la frontera $\partial B(t)$

$$u(\underline{x}, t) = u_{\partial}(\underline{x}, t), \qquad \forall \underline{x} \in \partial B(t) \tag{25}$$

- **Neumann**
  Se prescribe la derivada normal la solución $u(\underline{x}, t)$ en la frontera $\partial B(t)$

$$\nabla u(\underline{x}, t) \cdot \underline{n} = \frac{\partial u(\underline{x}, t)}{\partial \underline{n}} = g_{\partial}(\underline{x}, t), \qquad \forall \underline{x} \in \partial B(t) \tag{26}$$

Tipos de condiciones de frontera

- **Robin**

  Es una combinación lineal de las dos anteriores.

$$\alpha(\underline{x},t)u(\underline{x},t)+\beta(\underline{x},t)\nabla u(\underline{x},t)\cdot\underline{n}=\gamma(\underline{x},t),\ \forall\underline{x}\in\partial B(t) \tag{27}$$

  $\gamma(\underline{x},t)$ es la función prescrita en la frontera exterior.

Metodología sistemática

- Identificar fases α y componentes γ del sistema continuo.
- Establecer el conjunto de propiedades extensivas E_α^γ e intensivas $\psi_\alpha^\gamma(\underline{x}, t)$ por fases α y componentes γ.
- Definir las relaciones constitutivas para g_α^γ, $\underline{\tau}_\alpha^\gamma$ y $g_\Sigma{}_\alpha^\gamma$.
- Escribir las ecuaciones de balance local de cada propiedad intensiva de las componentes por fases.
- Obtener las ecuaciones de balance total de cada propiedad intensiva por componentes.
- Establecer las condiciones iniciales y de frontera.
- Verificar que el problema esté bien planteado.

Identificar fases y componentes

- Identificar las fases y los componentes del sistema continuo.
- Sea N el número de fases.
- Sea M el número total de componentes.
- Se puede construir una matriz (tabla) binaria $M \times N$ de fases y componentes.
- Dicha matriz estará definida por:

$$m_{\gamma\alpha} = \begin{cases} 1, & \text{si existe el componente } \gamma \text{ en la fase } \alpha \\ 0, & \text{si no existe el componente } \gamma \text{ en la fase } \alpha \end{cases}$$

Identificar fases y componentes

		Fases					
		$fase_1$	$fase_2$	$\cdots$	$fase_\alpha$	$\cdots$	$fase_N$
Componentes	$componente_1$	1	1	$\cdots$	0	$\cdots$	1
	$componente_2$	0	1	$\cdots$	1	$\cdots$	0
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\cdots$	$\vdots$	$\cdots$	$\vdots$
	$componente_\gamma$	1	1	$\cdots$	0	$\cdots$	1
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\cdots$	$\vdots$	$\cdots$	$\vdots$
	$componente_M$	1	0	$\cdots$	1	$\cdots$	0

Cuadro 2: Matriz (tabla) binaria $M \times N$ de fases y componentes.

Propiedades extensivas e intensivas

Fases	Componentes	Propiedades extensivas E_k	Propiedades intensivas ψ_k	Fuentes en $B(t)$	Flujos en $\partial B(t)$	Fuentes en $\Sigma(t)$
$fase_1$	$\{\gamma : m_{\gamma 1} = 1\}$	$E_{k}{}_{1}^{\gamma}$	$\psi_{k}{}_{1}^{\gamma}$	$g_{k}{}_{1}^{\gamma}$	$\mathcal{I}_{k}{}_{1}^{\gamma}$	$g_{\Sigma k}{}_{1}^{\gamma}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$fase_\alpha$	$\{\gamma : m_{\gamma \alpha} = 1\}$	$E_{k}{}_{\alpha}^{\gamma}$	$\psi_{k}{}_{\alpha}^{\gamma}$	$g_{k}{}_{\alpha}^{\gamma}$	$\mathcal{I}_{k}{}_{\alpha}^{\gamma}$	$g_{\Sigma k}{}_{\alpha}^{\gamma}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$fase_N$	$\{\gamma : m_{\gamma N} = 1\}$	$E_{k}{}_{N}^{\gamma}$	$\psi_{k}{}_{N}^{\gamma}$	$g_{k}{}_{N}^{\gamma}$	$\mathcal{I}_{k}{}_{N}^{\gamma}$	$g_{\Sigma k}{}_{N}^{\gamma}$

Cuadro 3: Propiedades extensivas e intensivas k por fases y componentes.

Notación:
$E_{k}{}_{\alpha}^{\gamma}$ - propiedad extensiva k de la componente γ en la fase α,
$\psi_{k}{}_{\alpha}^{\gamma}$ - propiedad intensiva k de la componente γ en la fase α,
$g_{k}{}_{\alpha}^{\gamma}$ - término fuente de la propiedad extensiva k en $B(t)$,
$\mathcal{I}_{k}{}_{\alpha}^{\gamma}$ - término de flujo de la propiedad extensiva k en $\partial B(t)$,
$g_{\Sigma k}{}_{\alpha}^{\gamma}$ - término fuente de la propiedad extensiva k en $\Sigma(t)$.

Propiedades extensivas e intensivas

Definir por propiedad extensiva ${E_k}_\alpha^\gamma$ usando relaciones constitutivas:

- ${\psi_k}_\alpha^\gamma$ - propiedad intensiva k de la componente γ en la fase α
- ${g_k}_\alpha^\gamma$ - término fuente de la propiedad extensiva k en $B(t)$,
- ${\underline{\tau}_k}_\alpha^\gamma$ - término de flujo de la propiedad extensiva k en $\partial B(t)$,
- ${g_{\Sigma k}}_\alpha^\gamma$ - término fuente de la propiedad extensiva k en $\Sigma(t)$.

Ecuaciones de balance local por componentes

- Ecuación diferencial

$$\frac{\partial \psi_{\alpha}^{\gamma}}{\partial t} + \nabla \cdot (\psi_{\alpha}^{\gamma} \underline{v}_{\alpha}) = g_{\alpha}^{\gamma} + \nabla \cdot \underline{\tau}_{\alpha}^{\gamma}; \qquad \forall \underline{x} \in B(t) \setminus \Sigma(t) \quad (28)$$

- Condición de salto

$$[\![\psi_{\alpha}^{\gamma} (\underline{v}_{\alpha} - \underline{v}_{\Sigma\alpha}) - \underline{\tau}_{\alpha}^{\gamma}]\!] \cdot n_{\Sigma} = g_{\Sigma\alpha}^{\gamma}; \qquad \forall \underline{x} \in \Sigma(t) \qquad (29)$$

Ecuaciones de balance total por componentes

- Se obtiene las ecuaciones de balance total de cada propiedad intensiva por componentes sumando por todas las fases.
- Con lo cual conseguiremos obtener un sistema de M ecuaciones diferenciales con r número de incógnitas.
- Si ocurre que $r \geq M$, a fin de lograr un sistema de ecuaciones determinado, se hace necesario considerar relaciones adicionales.

Modelo completo

- Establecer las condiciones iniciales y de frontera.
- Verificar que el problema esté bien planteado.

Ejemplo

- Transporte de una componente (trazador) en una fase fluida en un medio poroso.
- Ver presentación Noyola2017_MsThesis_presentacion.pdf [8].

Referencias

[1] M. B. Allen, I. Herrera and G. F. Pinder, *Numerical modeling in science and engineering*, John Wiley & Sons., USA, (1988).

[2] I. Herrera and G. F. Pinder,*Mathematical Modeling in Science and engineering: An Axiomatic Approach*, John Wiley & Sons., USA, (2012).

[3] COMSOL Multiphysics, *Modeling Guide Version 3.4*, COMSOL AB, USA, (2007).

[4] M. A. Díaz-Viera and A. Ortiz-Tapia, *Modelación Matemática, Numérica y Computacional de Flujo y Transporte en Medios Porosos*, Notas del curso, CDMX, México (2018).

[5] B. Flemisch, M. Darcis, K. Erbertseder, B. Faigle, A. Lauser, K. Mosthaf, S. Muthing, P. Nuske, A. Tatomir, M. Wolff, R. Helmig, " DuMu^{X}: Dune for multi-$\{$phase, component, scale, physics,...$\}$ flow and transport in porous media", *Advances in Water Resources*, **34** (9), 1102 - 1112, (2011).

[6] E. Linares and M. A. Díaz-Viera, *Modelo de flujo y transporte en medios porosos en FEniCS usando el método de elementos finitos mixtos. Aplicación a un caso de estudio para la simulación de un proceso de inyección de agua de baja salinidad a escala de laboratorio.*, Universidad Nacional Autónoma de México, México, (2018).

[7] A. Logg, K. A. Mardal and G. Wells, *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method. The FEniCS Book*, Springer-Verlag, Berlin, (2012).

[8] M. Noyola-Rodríguez and M. A. Díaz-Viera, *Modelo de transporte en medios porosos a escala de laboratorio para la simulación del proceso de taponamientodestaponamiento por microorganismos.*, Universidad Nacional Autónoma de México, México, (2017).

[9] C. A. Romano-Pérez and M. A. Díaz-Viera, *Modelos de fractura discreta para la simulación de flujo y transporte en medios porosos fracturados.*, Universidad Nacional Autónoma de México, México, (2018).

Gracias!!!

Preguntas / Comentarios