Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Ingeniería

Departamento de Ingeniería Mecánica y Mecatrónica

Modelación Matemática

Sem II - 2022

TALLER 02 - Versión 00

MODELACIÓN MATEMÁTICA - OPTIMIZACIÓN Y EDPs

Puntos importantes:

- En todos los casos de estudio, y donde corresponda, su grupo deberá presentar:
  1. Descripción clara de los pasos del proceso de modelación matemática empleados
  2. Argumentación de las simplificaciones/suposiciones usadas en cada caso
  3. CONCLUSIONES RELEVANTES, COHERENTES Y BIEN ARGUMENTADAS
  4. Bibliografía usada como apoyo en la solución de cada caso.
- Deben incluirse los códigos fuente de cualquier código computacional usado.
- **Los informes enviados deberán tener como portada la presente hoja.**

La calidad de la presentación de los informes escritos será especialmente considerada en la calificación. Esto incluye la calidad de los gráficos.

Los casos de estudio del presente taller, y sus respectivas ponderaciones de calificación en el taller, son:

Caso de estudio	**Ponderación**
Esquema de producción en una refinería	30 %
Perfil de velocidad laminar en un canal (FDM)	35 %
Transporte unidimensional en un reactor químico (FDM)	35 %

- NO HABRAN PLAZOS O EXTENSIONES ADICIONALES PARA LA ENTREGA DE ESTE TALLER
- NO SE RECIBIRÁ NINGÚN TALLER DESPUÉS DEL PLAZO OFICIAL. POR NINGÚN MOTIVO!!!

Caso de estudio 1. Diseño óptimo de un resorte helicoidal - 30 %

Se desea determinar la sensibilidad del proceso optimización de diseño de un resorte helicoidal sometido a una carga de compresión cíclica (similar al caso de estudio presentado en clase). Al igual que en el caso de estudio, se requieren los valores óptimos de los diferentes parámetros para resortes con masa mínima. En este caso se desea conocer la sensibilidad del modelo de optimización para diferentes combinaciones de esfuerzo cortante admisible y frecuencia de carga, para dos valores de carga diferentes, de acuerdo a los valores presentados en las Tablas 1 a 3.

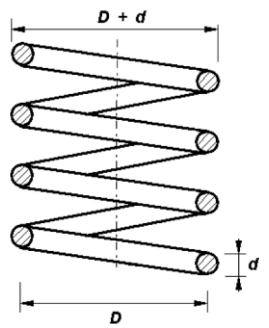

Figura 1: Esquema de resorte helicoidal.

Tabla 1: Valores de Esfuerzo Cortante Admisible, τ_{adm}, para estudio paramétrico

τ_{adm}, [ksi]			
65	70	75	80

Tabla 2: Valores de Frecuencia de Carga, ω_0, para estudio paramétrico

ω_0, [Hz]			
80	90	100	110

Tabla 3: Valores de Carga Aplicada, P, para estudio paramétrico

P, [lbf]		
8	16	24

Nota: Considere variaciones SOLO de estos tres parámetros: τ_{adm}, ω_0, y P. Tome los restantes valores exactamente igual a los presentados en clase.

OJO.

Recuerde llevar a cabo y presentar:

- Identificación de las variables de diseño
- Definición clara de la función objetivo y restricciones del problema
- Formulación del problema en forma estándar de optimización
- Gráficas y curvas coherentes, en donde se establezca los niveles de sensibilidad de la masa óptima del resorte a las variaciones de τ_{adm}, ω_0, y P

Caso de estudio 2. Perfil de velocidad laminar en un canal (35 %)

Considere la ecuación uni-dimensional transitoria para el flujo en un canal de dominio $0 \leq y \leq 2h$,

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \qquad (1)$$

con condiciones de frontera dadas por:

$$\text{en } y = 0: \quad u = 0$$
$$\text{en } y = 2h: \quad u = 0{,}25\, U_m$$

donde ρ es la densidad, μ es la viscosidad dinámica del fluido, y h es la media-altura del canal y donde U_m es la velocidad media del perfil de velocidad a lo largo de y en condiciones de fronteras totalmente estacionarias. Para este ejercicio considere que el gradiente de presión ($\partial p/\partial x$) es constante.

Usted debe:

1. Obtener formas adimensionales de la ecuación (1) y de las condiciones de frontera, sabiendo que se define el número de Reynolds como

$$\mathrm{Re} = \frac{\rho\, U_m\, h}{\mu}$$

2. Considere el caso **estacionario** para Re=300.
   - *a)* Determine el valor de $\partial p/\partial x$ para Re=300, cuando la velocidad de la frontera superior es cero.
   - *b)* Utilizando esquemas de diferencias finitas de segundo orden, construya un esquema de solución numérica para la ecuación (1), en el dominio apropiado, y muestre el sistema algebraico resultante (El cuál debe ser tri-diagonal).
   - *c)* Haga una revisión del uso del algoritmo de Thomas - TDMA para solución de sistemas con matrices de coeficientes tri-diagonales.
   - *d)*) Realice una implementación computacional (en Fortran 90) utilizando el algoritmo de Thomas para matrices tridiagonales (algoritmo Thomas suministrado en clase).
   - *e)* Experimente con al menos cuatro tamaños de malla diferentes y realice experimentos numéricos para obtener el perfil de velocidad a Re=300. Compare resultados con solución analítica.
3. Realice un análisis de los resultados:
   - *a)* Discuta el efecto del tamaño de malla espacial (Δy) y los niveles de error
   - *b)* Compare las velocidades u en las posiciones $y = 0{,}25h,\ 0{,}5h,\ 0{,}75h,\ h$ para cada caso, y cada tamaño de malla
   - *c)* Determine niveles de error de su solución mediante comparación con la solución analítica

Caso de estudio 3. Transporte unidimensional en un reactor químico - 35 %

La ecuación de advección-difusión-reacción *unidimensional*, ecuación (2), es un modelo matemático válido para calcular la distribución de la concentración de un reactivo a lo largo de un reactor químico de sección transversal constante (ver Figura 2), tal como se presenta a continuación:

$$\frac{\partial y}{\partial t} = D\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - U\frac{\partial y}{\partial x} - k\,y \tag{2}$$

donde,

- y : Concentración del reactivo (kg/m^3)
- t : Tiempo (s)
- D : Coeficiente de difusión (m^2/s)
- x : Distancia longitudinal (m)
- U : Velocidad promedio (en x) de flujo de reactivo (m/s)
- k : Velocidad de reacción del reactivo (s^{-1})

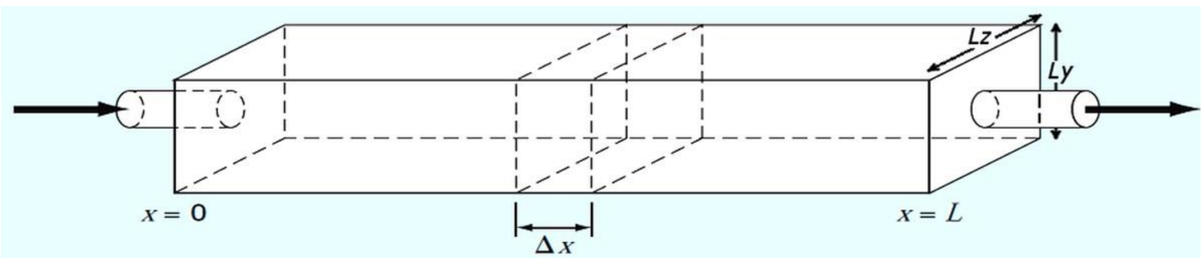

Figura 2: Reactor con un solo punto de entrada y salida.

Este problema en particular viene dado con las siguientes condiciones de frontera,

$$-D\frac{\partial y}{\partial x} + U\,y = U\,c_{\mathrm{ref}} \quad \text{en } x = 0 \qquad \text{y} \qquad \frac{\partial y}{\partial x} = 0 \quad \text{en } x = L \tag{3}$$

donde c_{ref} es un valor de referencia de la concentración. Considere que el reactor opera bajo los siguientes valores paramétricos:

- $D = 1{,}8\ m^2/s$,
- $L = 0{,}9\ m$,
- $U = 0{,}2\ m/s$,
- $c_{\mathrm{ref}} = 0{,}1\ kg/m^3$,
- $k = 5\ s^{-1}$

Que se debe hacer?

Dadas las consideraciones anteriores, su grupo debe:

1. Formular el problema en dorma discreta usando:
   a) Un esquema de discretización espacial con diferencias finitas hacia atrás o centradas (NO IMPORTA cuál).
   b) Un esquema de discretización temporal semi-implicito (Crank-Nicolson) (SI IMPORTA, tiene que ser Crank-Nicolson).
2. Escribir un código computacional para resolver el modelo matemático planteado anteriormente
3. Presentar curvas de concentración a lo largo del reactor para diferentes instantes t.
4. Presentar la curva de concentración a lo largo del reactor para $t = 10\ s$

Importante: Adimensionalice la ecuación (2), así como las condiciones de frontera. *Sugerencia:* Solo normalice variables dependientes e independientes, y tome como tiempo característico el valor $\tau = L/U$.

Con el fin de facilitar el proceso de verificación de la calidad de su código y resultados, a continuación se muestra el resultado esperado (Concentración *vs.* posición), para las condiciones dadas anteriormente, en el instante $t = 10\ s$ (OJO: Revisar nueva condición de frontera en $x = 0$ y valores de parámetros).

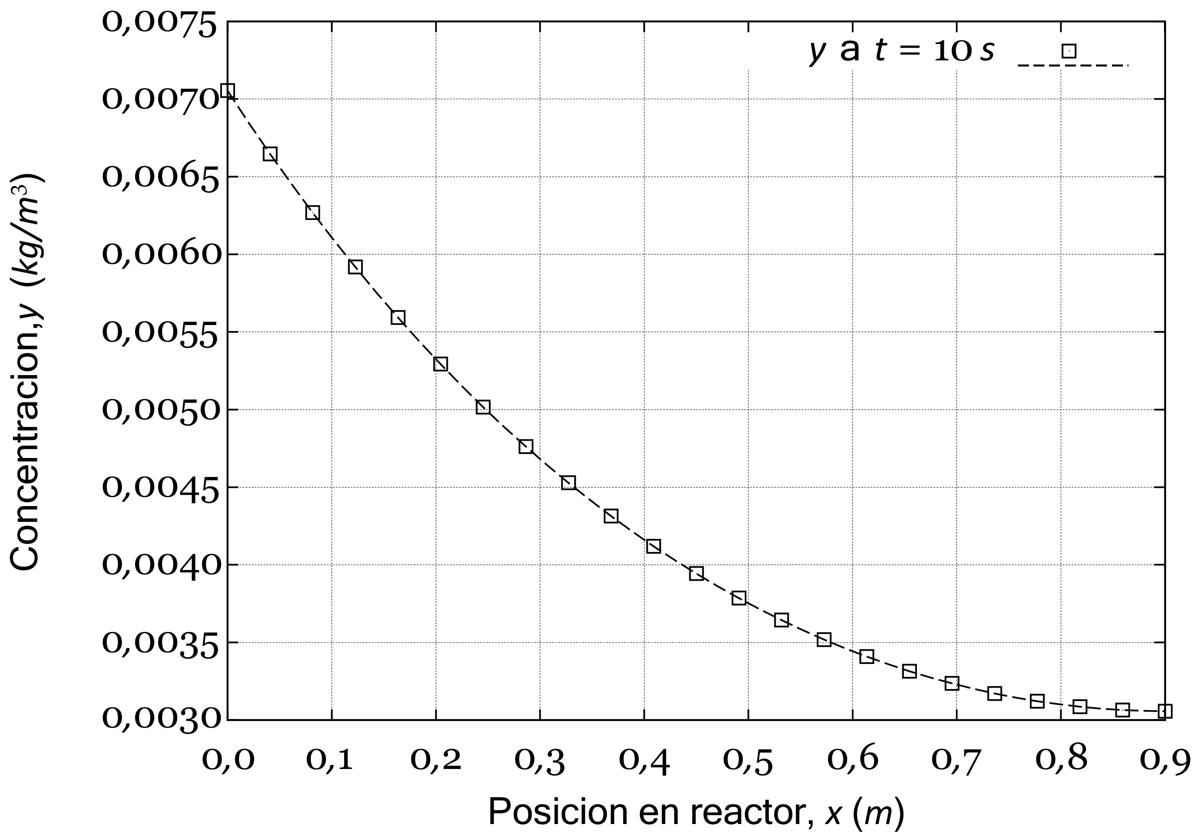

Figura 3: Perfil de concentración, a lo largo del reactor, en el instante $t = 10\,s$. Perfil obtenido usando $\Delta x = 0{,}02$ y $\Delta t = 0{,}01$