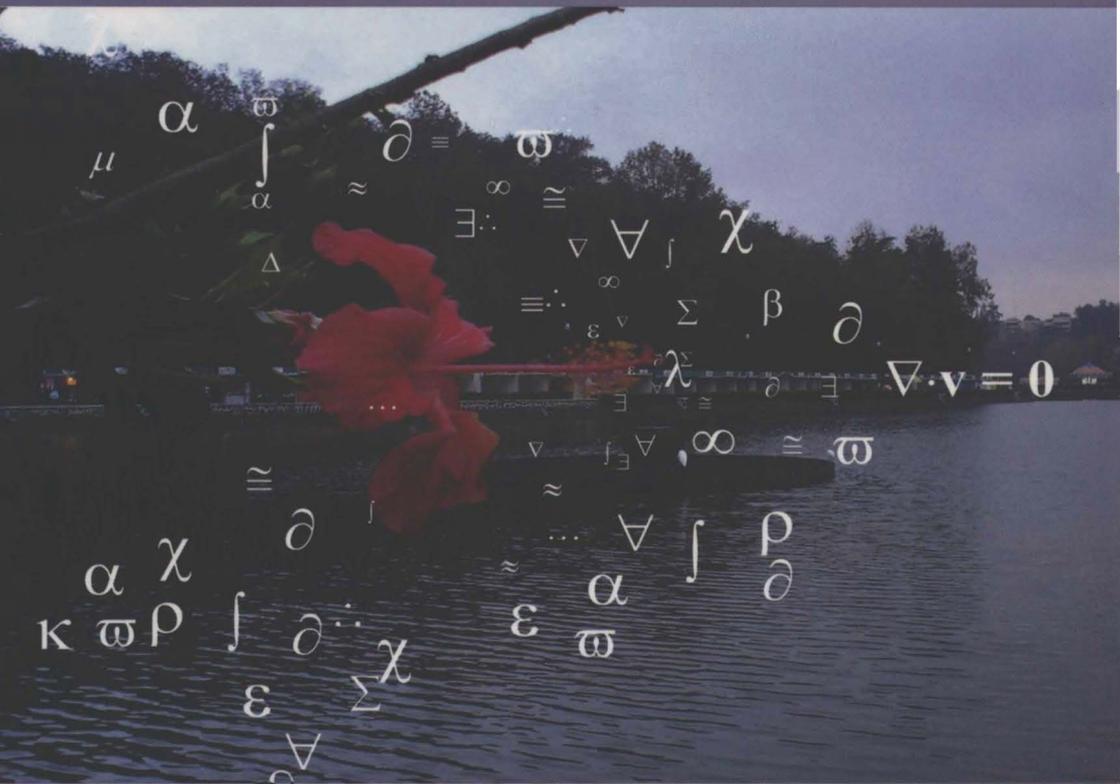


Breviario sobre modelado matemático



Francisco J. Valdés Parada



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD
AUTÓNOMA
METROPOLITANA
Unidad Iztapalapa

Breviario sobre modelado matemático

Francisco J. Valdés Parada



UNIVERSIDAD
AUTÓNOMA
METROPOLITANA
Unidad Iztapalapa



Casa abierta al tiempo

Dr. Salvador Vega y León
Rector General

Mtro. Norberto Manjarrez Álvarez
Secretario General

UNIDAD IZTAPALAPA

Dr. José Octavio Nateras Domínguez
Rector

Dr. Miguel Ángel Gómez Fonseca
Secretario

Dr. José Gilberto Córdoba Herrera
*Director de la División
de Ciencias Básicas e Ingeniería*

Dra. Milagros Huerta Coria
Coordinadora de Extensión Universitaria

Lic. Adrián Felipe Valencia Llamas
Jefe de la Sección de Producción Editorial

Breviario sobre modelado matemático

Primera edición: 2014

© UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA-
IZTAPALAPA

Av. San Rafael Atlixco No. 186, Col. Vicentina,
Del. Iztapalapa, C. P. 09340, México, D. F.

ISBN COLECCIÓN: 978-607-477-998-1

ISBN VOLUMEN: 978-607-28-0294-0

Impreso y hecho en México / Printed in Mexico

Índice general

Prefacio	13
1. Un repaso de filosofía	15
1.1. Introducción	15
1.2. Filosofía antigua	17
1.2.1. Tales de Mileto (630-545 a.C.)	18
1.2.2. Anaximandro de Mileto (610-546 a.C.)	18
1.2.3. Anaxímenes de Mileto (585-524 a.C.)	19
1.2.4. Pitágoras de Samos (570-495 a.C.)	19
1.2.5. Parménides de Elea (540-470 a.C.)	20
1.2.6. Heráclito de Éfeso (535-484 a.C.)	20
1.2.7. Empédocles de Agrigento (494-434 a.C.)	21
1.2.8. Anaxágoras de Clazomene (500 a 428 a.C.)	24
1.2.9. Demócrito de Abdera (460-370 a.C.)	22
1.2.10. Sócrates (469-399 a.C.)	22
1.2.11. Platón (427-347 a.C.)	23
1.2.12. Aristóteles (384-322 a.C.)	24
1.3. Filosofía moderna	24
1.3.1. Francis Bacon (1561-1626)	25
1.3.2. René Descartes (1596-1650)	26
1.3.3. Baruch de Spinoza (1632-1677)	26

1.3.4. Gottfried Wilhelm Leibniz (1646-1716)	27
1.3.5. John Locke (1632-1704)	27
1.3.6. George Berkeley (1685-1753)	28
1.3.7. David Hume (1711-1776)	28
1.3.8. Immanuel Kant (1724-1804)	29
1.3.9. Georg Wilhelm Friedrich Hegel (1770-1831)	31
1.4. Filosofía contemporánea	31
1.4.1. Auguste Comte (1798-1857)	31
1.4.2. Charles Sanders Peirce (1839-1914)	32
1.4.3. William James (1842-1910)	33
1.4.4. John Dewey (1859-1952)	33
1.4.5. Edmund Husserl (1859-1938)	34
1.4.6. Bertrand Russell (1872-1970)	35
1.4.7. Ludwig Wittgenstein (1889-1951)	35
1.4.8. Karl Popper (1902-1994)	36
1.4.9. Thomas S. Kuhn (1922-1996)	37
Problemas	38
2. Un primer vistazo al modelado	43
2.1. Introducción	43
2.2. Algunas de finiciones fundamentales	48
2.3. Modelado matemático	49
2.4. Modelos deterministas y estocásticos	48
2.5. Primeras nociones de modelado matemático	49

2.6. Modelado basado en la observación	50
2.7. Modelos basados en leyes de conservación	58
2.7.1. Conservación de masa	59
2.7.2. Conservación de masa de una especie	61
2.7.3. Conservación de cantidad de movimiento	64
2.7.4. Conservación de energía	66
2.7.5. Relaciones constitutivas auxiliares	72
2.7.6. Sobre condiciones de frontera	73
2.8. Resumen	77
Problemas	79
3. Planteamiento del modelo	85
3.1. Introducción	85
3.2. Niveles de escala	86
3.2.1. Ejemplo cualitativo de escalamiento desde un edificio de la UAM-I hasta el Distrito Federal	88
3.3. Inicio del proceso de modelado	90
3.4. Las máximas para el modelado matemático según Aris (1976)	92
3.5. Algunos problemas de aplicación	102
3.5.1. Modelado de la transferencia de calor en una cabeza humana	102
3.5.2. Penetración de un derrame de petróleo en el subsuelo	104
3.5.3. Destilación diferencial	109
3.5.4. Respuesta transitoria de un panel fotovoltaico	112

3.5.5. Modelos matemáticos del amor	119
3.6. Resumen	121
Problemas	122
4. Solución y análisis de los modelos	149
4.1. Introducción	149
4.2. Soluciones analíticas	150
4.3. Solución de sistemas de ecuaciones algebraicas	151
4.4. Solución de ecuaciones diferenciales ordinarias	155
4.5. Solución de ecuaciones diferenciales parciales	166
4.6. Soluciones numéricas de ecuaciones diferenciales	171
4.6.1. El método de diferencias finitas	173
4.6.2. Solución del modelo no lineal de transferencia de calor en una cabeza humana	178
4.7. Ecuaciones en diferencias	182
4.8. Solución y análisis de ejemplos de aplicación	186
4.8.1. Penetración de un derrame de petróleo en el subsuelo	187
4.8.2. Destilación diferencial	191
4.8.3. Respuesta transitoria de un panel fotovoltaico	196
4.8.4. Modelos matemáticos del amor	198
4.9. Resumen	202
Problemas	203
Comentarios finales	21

Epílogo	213
Referencias	215
Apéndice A. Solución de ecuaciones diferenciales por funciones de Green	223
Apéndice B. Programa en Matlab para la solución de las ecs. (4.6-7)	227

Índice de figuras

2.3-1. Esquema que muestra un universo de atributos de un sistema. Las líneas punteadas representan las suposiciones y restricciones.	46
2.6-1. Ejemplo de distribución de concentración de microorganismos a lo largo de un tiempo adimensional τ .	51
2.6-2.a) Comparación de los resultados de la Fig. 2.6-1 con los que proporciona el Modelo, b) Porcentaje experimentales.	53
2.6-3.a) Comparación de los resultados de la Fig. 2.6-1 con los que proporciona el Modelo 2, b) Porcentaje experimentales.	55
2.6-4. Comparación de los perfiles de concentración experimentales reportados por Long y Ford (2009) para un trazador inerte a 5m/s a través de un medio poroso homogéneo con las predicciones obtenidas con ajustes estadísticos y con el método del promedio volumétrico reportadas por Porter <i>y col.</i> (2010). La zona gris representa los intervalos de 98 % de confianza asociados con los ajustes estadísticos.	57
2.7-1. Esquema de una placa de largo L en contacto con otras dos placas que se encuentran a temperaturas de 25°C y 80°C, respectivamente.	74
2.7-2. Esquema de una placa de largo L en contacto en un extremo con una placa aislante y en el otro con una fuente de calor constante.	75
2.7-3. Esquema de una placa de largo L en contacto en un extremo con una placa a 80°C y en el otro con un flujo de aire a T_x .	77
P.2-1. Esquema del perfil de velocidades de un fluido Newtoniano en una tubería de sección transversal cuadrada.	80
P.2-2. Esquema del transporte de una persona (esfera roja) a través de un flujo de pasajeros (esferas grises) en horas pico del metro	84

3.2-1. Ejemplo de cuatro niveles escala en la ciudad de México.	89
3.4-1. Esquema de una placa de sección transversal rectangular.	94
3.5-1. Esquemas de penetración de una película de aceite en el subsuelo. a) sistema al inicio, b) sistema después de un cierto tiempo.	104
3.5-2. Esquema de destilación diferencial.	110
3.5-3. Esquema del panel fotovoltaico instalado en la azotea del edificio B de la UAM-Iztapalapa.	113
3.5-4. Comparación entre datos experimentales y modelado basado en la observación de los cambios temporales de las formas adimensionales de la temperatura ambiente y la energía solar incidente en el valle de México.	118
P.3-1. Esquema de un canal de sección transversal rectangular ubicando las superficies de entrada (A_e) y de salida (A_s) junto con los correspondientes vectores unitarios normales a estas superficies.	123
P.3-2. Perfiles de concentración de un reactivo en un tanque agitado que contiene una fase fluida y partículas dispersas (tomado de Valdés-Parada, 2004). Los resultados se muestran para las predicciones analíticas y numéricas de la concentración promedio adimensional de las partículas ($\langle U_p \rangle$), en la superficie de las partículas ($U_p _{\xi=1}$) y en la fase fluida (U_f) como función de un tiempo adimensional τ .	124
P.3-3. Esquema de un reactor continuo tipo tanque agitado, detallando tres niveles de escala: macroscópico (Nivel I), interpartícula (Nivel II) e intrapartícula (Nivel III).	125
P.3-4. Esquema de la transferencia de cantidad de movimiento alrededor de un aerogenerador.	137

P.3-5. Esquema de un tumor canceroso <i>in situ</i> en etapa angiogénica.	141
4.4-1. Evaluación de la solución dada en la Ec. (4.4-9): a) variando v_0 manteniendo $a = 1$ y b) variando a fijando $v_0 = 1$.	157
4.4-2. Evolución de la temperatura promedio adimensional utilizando el modelo de generación de calor de Gray (1980) a) como función de Φ fijando $Bi = 1$ y b) como función de Bi fijando $\Phi = 1$. En todos los cálculos se tomó $\Theta_a = 0.5$.	162
4.4-3. Perfiles de temperatura en estado estacionario utilizando el modelo de generación de calor de Gray (1980) a) como función de Φ fijando $Bi = 1$ y b) como función de Bi fijando $\Phi = 1$. En todos los cálculos se tomó $\Theta_a = 0.5$.	166
4.5-1. Comparación de las predicciones de la evolución del promedio de la temperatura utilizando el modelo exacto (línea continua) y el modelo aproximado (línea punteada) utilizando el modelo de generación de calor de Gray (1980) a) como función de Φ fijando $Bi = 1$ y b) como función de Bi fijando $\Phi = 1$. En todos los cálculos se tomó $\Theta_a = 0.5$	170
4.6-1. Perfiles de temperatura obtenidos con las soluciones analítica y numérica: a) en todo el dominio y b) acercamiento en una porción. Los parámetros del modelo fueron $\Phi = Bi = 1$ y $\Theta_a = 0.5$.	178
4.6-2. Comparación de las predicciones de la evolución del promedio de la temperatura utilizando el modelo de Anderson y Arthurs (1981) (línea continua) y de Gray (1980) (línea discontinua) a) como función de Φ fijando $Bi = 1$ y b) como función de Bi fijando $\Phi = 1$. En todos los cálculos se tomó $\Theta_a = 0.5$.	179
4.6-3. Vistas tri- y bidimensionales del esquema empleado para representar una cabeza humana realista.	180

4.6-4. Perfiles de temperatura en estado estacionario tomando como fuente a) $\Phi^2 e^{-\Theta}$, b) $\Phi^2 x^2 e^{-\Theta}$, c) $\Phi^2 (x^2 + y^2) e^{-\Theta}$, d) $\Phi^2 e^{-\Theta} \ln (x^2 + y^2 + z^2)$. Los parámetros utilizados fueron $\Phi = 1$. En todos los cálculos se tomó $\Theta_a = 0.5$ -	180
4.6-5. Comparación de las predicciones de la evolución del promedio de la temperatura utilizando una geometría realista (línea coninua) y una geometría esférica (línea punteada) utilizando el modelo de generación de calor de Anderson y Arthurs (1981) a) como función de Φ fijando $Bi = 1$ y b) como función de Bi fijando $\Phi = 1$. En todos los cálculos se tomó $\Theta_a = 0.5$.	181
4.7-1. Ejemplo de evolución de una población de conejos que obedece a la secuencia Fibonacci.	183
4.8-1. Evolución temporal de la profundidad de penetración como funcion del tiempo para diversos valores de porosidad del subsuelo.	190
4.8-2. Trapecios para los datos de la Tabla 4.6-1.	194
4.8-3. Evolución temporal de la temperatura adimensional de la supercie de un panel fotovoltaico para valores del número de Biot modificado cambiando en tres órdenes de magnitud.	197
4.8-4. Evaluación de las soluciones presentadas en la Tabla 4.6-2.	199
4.8-5. Evaluación de las soluciones presentadas en la Tabla 4.6-3.	201

Prefacio

El propósito de este breviario es proporcionar un recurso útil para modelar matemáticamente sistemas de interés en ciencias básicas e ingeniería. La motivación para este texto viene de mi experiencia en docencia e investigación así como por referencias bibliográficas y colaboraciones con colegas que han sido de gran ayuda en mi formación. Curiosamente, en algunos cursos de formación profesional es común llevar a cabo actividades de modelado sin detenerse a definir conceptos como *modelo*, o *modelo matemático* o sobre si existe algún patrón que sigan la mayoría de los modelos que se desarrollan.

Mi primera motivación hacia el modelado matemático la tuve a la mitad de mis estudios de licenciatura y fue cuando tomé mi primer curso de Fenómenos de Transporte. Por primera vez tuve una clase dedicada a plantear modelos sobre procesos físicos y químicos y no simplemente a usar una “receta” previamente dictada para obtener un resultado, lo cual cambió mis intereses académicos para dirigirlos a estos temas. Más aún, en la actualidad es posible llevar a cabo simulaciones altamente sofisticadas usando software comercial; sin embargo, si no se tienen claros los fundamentos del modelado se corre el riesgo de no llevar a cabo la labor de simulación en una forma adecuada. Por ello, el material contenido aquí es de interés tanto para personas que comiencen a llevar a cabo actividades de modelado matemático como para las que tengan perspectivas de utilizar simuladores.

El material es breve e introductorio pues su propósito es servir de apoyo en varias ~~asignaturas~~ donde se involucre la actividad de modelado. El objetivo de este material es motivar una mayor reflexión y discusión de aspectos fundamentales de modelado dentro y fuera de los salones de clase. Además de buscar que el lector conozca sobre diversos temas referentes al modelado, se desea motivar al lector que esté interesado en profundizar en algún tema en particular a que consulte referencias especializadas. Por tanto, su aplicación no está restringida a una asignatura en particular. Más bien, se recomienda que se utilice este material durante las sesiones introductorias en cursos donde los alumnos se enfrenten con actividades de modelado matemático en ciencias básicas e ingeniería. Por ejemplo, el texto puede ser de ayuda en

materias como Mecánica de fluidos, Transferencia de calor, Transferencia de masa, Fenómenos de transporte computacionales, Integración de procesos, Dispersión de contaminantes, Métodos matemáticos en la ingeniería de procesos, Ingeniería de Reactores, Diseño de reactores biológicos, Fenómenos de transporte en procesos microbianos, entre otras.

El texto está organizado de la siguiente manera: En el Capítulo 1 se presentan algunas definiciones que resultan fundamentales para el desarrollo del resto del material. En los capítulos 2, 3 y 4 se consideran algunas partes del proceso de modelado como son el planteamiento, solución del modelo y análisis de resultados. En cada parte se incluyen algunas sugerencias propuestas en la literatura, sin pretender con esto dar recetas infalibles que garanticen el éxito del proceso de modelado. Más bien, la idea es presentar algunas sugerencias y reflexiones generales que pueden ser de utilidad en el modelado matemático. Acompañando al texto principal se incluyen ejemplos de aplicación que van desde proponer un modelo con base en la forma de una distribución de datos hasta el desarrollo y solución de un modelo matemático para el amor. Por el contenido que aborda, se sugiere que este texto sirva de apoyo tanto al alumno que inicia en una carrera de ciencias básicas e ingeniería, al cual se le recomienda el primer capítulo, como al alumno que se encuentra a la mitad o incluso al final de su formación universitaria. En estos casos se recomienda revisar cuidadosamente los capítulos 2, 3 y 4, así como los problemas que los acompañan. Por último, estoy plenamente agradecido a los profesores y estudiantes que me han ayudado a mejorar este material con sus comentarios, sugerencias e inquietudes.

Francisco J. Valdés-Parada
México, D.F., Enero 2014

Capítulo 1

Un repaso de filosofía

Aprender sin pensar es inútil, pero pensar sin aprender es peligroso
Confucio

1.1. Introducción

El objetivo de este texto trata sobre el modelado matemático en sistemas relacionados con ciencias e ingeniería. Como se explicará en el Capítulo 2, la actividad de modelar consiste en proporcionar una representación sobre ciertos aspectos de la realidad mediante una interpretación particular. Dicha representación puede llevarse a cabo por medios físicos o bien por medio de modelos matemáticos. Mientras que el conocimiento científico es más bien metódico, sistemático y, por lo general, sujeto a la comprobación; la filosofía, entendida como el amor al conocimiento, se origina cuando el hombre busca el conocimiento tan sólo por el saber como un fin en sí mismo. Aunque el resto de este trabajo estará dedicado a modelos matemáticos usados en la adquisición del conocimiento científico, es pertinente dedicar este capítulo al conocimiento filosófico. Este conocimiento se caracteriza por ser reflexivo, unificado y justificado racionalmente. Motivado por lo anterior, este capítulo está dirigido a revisar brevemente la evolución del pensamiento filosófico acerca de la descripción de la realidad, el conocimiento y las ciencias. Como se verá en los siguientes párrafos, muchos matemáticos y científicos a lo largo de la historia se han interesado en temas filosóficos y, de hecho, la brecha entre la filosofía y la ciencia se ha ido haciendo más corta en los últimos años.

Cuando se dice que el conocimiento filosófico es unificado, de ninguna manera se pretende dar la impresión de un saber enciclopédico u homogéneo, más bien la idea es situarse desde el punto de vista de la totalidad para contemplar al mundo en su estructura más general. Sin embargo, los filósofos contemporáneos rechazan la pretensión de un conocimiento absoluto y cierto del universo. En este sentido, la filosofía comparte la naturaleza perfectible de las ciencias, las cuales han pasado por una serie de *revoluciones de pensamiento* (Kuhn, 1996) consistentes en cambios de paradigmas. De hecho, en la edad media era posible hablar de científicos en toda la extensión de la palabra pues estas personas eran capaces de estudiar todas las ciencias en su periodo de vida. Actualmente, el conocimiento científico es cada vez más especializado, donde, si bien se estudia a la realidad, el análisis es cada vez más fragmentado. Se ha pasado de la figura de *científico* a la de *investigador*, el cual se especializa en campos particulares de la ciencia¹ y para enfrentar problemas que no están completamente cubiertos en su área de trabajo busca la colaboración interdisciplinaria. Para aclarar lo anterior, vale la pena recurrir a la siguiente cita de Russell (2010)

Las ciencias nos dicen lo que podemos saber, pero lo que podemos saber es muy poco, y si olvidamos lo que es imposible saber, nos hacemos insensibles a muchas cosas de mayor importancia

De acuerdo a la problemática abordada, se pueden distinguir cuatro épocas de la filosofía:

I. Filosofía antigua (s. VII A.C.-III D.C.): La problemática se centra en la estructura de la realidad.

II. Filosofía medieval (s. IV-XV): La problemática es la relación entre la fe y la razón.

¹Un ejemplo de esto puede verse en la medicina. Alrededor de la mitad del siglo XX, los médicos egresados de las universidades podían llamarse médicos generales en toda la extensión de la palabra, mientras que actualmente, los médicos reciben una formación fundamental y deben especializarse para incorporarse en el campo laboral. Sin embargo, el precio a pagar es que los médicos actuales no pueden actuar con autoridad en campos ajenos a su especialidad y se olvidan que el cuerpo humano, al igual que la ciencia, es un todo interrelacionado.

III. Filosofía moderna (s. XVI-XVIII): La problemática es el conocimiento.

IV. Filosofía contemporánea (s. XIX-): La problemática es la fundamentación de las ciencias.

Para los fines que se persiguen en este texto, se tiene interés en revisar las problemáticas estudiadas sólo por los filósofos antiguos, modernos y contemporáneos. A pesar de la importancia que merece cada una de estas etapas, el llevar a cabo una descripción detallada de ellas está fuera de los propósitos de este texto. De esta forma, el resto del capítulo está organizado como sigue: primeramente se revisa el pensamiento de los filósofos antiguos, centrando la atención a los filósofos griegos. Posteriormente, se revisan las visiones sobre la adquisición del conocimiento de los filósofos modernos, para finalmente llegar a los puntos de vista que proporcionan los filósofos contemporáneos acerca de la fundamentación de las ciencias. Además, el capítulo contiene una serie de problemas para reflexionar un poco más sobre las diversas líneas de pensamiento.

Como se mencionó arriba, el material aquí presentado es meramente introductorio. Sin embargo, al lector interesado se le sugiere revisar textos como los de Méndez-González *y col.* (2006), Xirau (2010) y Hull (1960).

1.2. Filosofía antigua

Los primeros filósofos se distinguieron por su explicación de la realidad basada en principios naturales. Antes de los filósofos, las sociedades recurrían a mitos y leyendas para comprender fenómenos que parecían inexplicables (Armstrong, 2006). El mito tiene la capacidad de dar una explicación congruente y fácil de ser comprendida por una mayoría. Curiosamente, la filosofía griega se inicia en las mismas tierras jónicas donde nacieron los poemas de Homero. En estas tierras surge lo que se conoce como el *pensamiento teórico puro*, es decir, aquel que predomina sobre su aplicación práctica. Los primeros filósofos buscaban dar una explicación única y racional que englobara a toda la realidad comprendida como hechos, pensamientos y acciones (Marshall, 2013). Los primeros filósofos tenían en común la creencia de que existía una materia primaria, que era el origen de todos los cambios;

querían entender los procesos de la naturaleza sin tener que recurrir a los mitos tradicionales. Su pensamiento estaba centrado en tratar de explicar los componentes de la realidad, utilizando sus sentidos y razón.

En los siguientes párrafos se listarán brevemente las aportaciones de algunos filósofos de esta y otras épocas, junto con una frase que los caracterice. La revisión de estos pensamientos filosóficos permitirá al lector relacionarse con temas, no sólo de la descripción y modelado de la realidad, sino además de la ciencia, el conocimiento, entre otros; los cuales no son ajenos a los objetivos del texto.

1.2.1. Tales de Mileto (630-545 a.C.)

Este filósofo tenía una manera práctica de pensar, que lo llevó a creer que lo que sucedía en el mundo no era consecuencia de intervenciones divinas, sino más bien se debía a causas naturales que la razón y la observación podían revelar (Méndez-González *y col.*, 2006). Propuso que si la naturaleza se remite siempre a un principio (o *arché*), cabe preguntarse si es posible concebir una única realidad o sustancia que pueda explicar su origen, composición y comportamiento. Su respuesta fue triple y se puede resumir como sigue: la tierra flota sobre las aguas; el agua es el origen de todas las cosas; todas las cosas están llenas de dioses (*i.e.*, la materia es un ser animado o *hilozoísmo*). A este tipo de pensamiento en el cual todo el universo se reduce a una única sustancia se conoce como *monismo* (Xirau, 2010). Su trascendencia recae en ser el primer pensador en buscar explicaciones naturalistas y racionales a preguntas fundamentales. Lo cual sentó las bases del pensamiento científico y filosófico futuro en el occidente.

Muchas palabras no son signo de ánimo prudente ... Tales de Mileto

1.2.2. Anaximandro de Mileto (610-546 a.C.)

Propuso que el *arché* es el *apeiron*, es decir, lo indeterminado, lo que carece de límites y se caracteriza por ser inmortal e indestructible además de moverse por sí mismo. Su pensamiento sugiere que aquello de lo que están hechas todas las cosas tiene que ser distinto a lo creado. En otras palabras, ninguno de los cuatro elementos (tierra, aire, fuego y agua) puede ser el origen de la totalidad

del universo puesto que, sí uno solo es la causa, entonces, la consecuencia se vuelve la causa de todo, lo cual es contradictorio (Hull, 1960). De manera resumida, puede decirse que las cosas surgen del apeiron por un proceso de separación de los contrarios causado por un movimiento eterno.

Lo ilimitado no tiene principio, pues, en tal caso sería limitado
Anaximandro de Mileto

1.2.3. Anaxímenes de Mileto (585-524 a.C.)

Se opone a Anaximandro al proponer que el arché es el aire. Distingue dos mecanismos de generación, la condensación y la rarefacción. Si el aire se condensa forma nubes y de ahí el agua y cuando ésta se condensa se convierte en tierra (Guthiere, 1960). El proceso inverso es la rarefacción, es decir, la tierra se diluye en agua y ésta en nubes y a su vez en aire. De esta forma, para este filósofo el fuego es aire diluido y todas las cosas provienen del aire mediante cambios de densidad (ver Problema 1.2)

*Como el alma, que es aire, nos conserva en la vida,
el aliento y el aire envuelven y mantienen el mundo*
Anaxímenes de Mileto

1.2.4. Pitágoras de Samos (570-495 a.C.)

Fundó una comunidad dedicada a la ciencia en la ciudad de Crotona al sur de Italia. El grupo de los Pitagóricos sostenía que el mundo que perciben los sentidos es menos real que el mundo de la mente. Lo cual motivó a pensar que el conocimiento científico puede adquirirse por introspección, pues, para ellos, el pensamiento abstracto era superior a la prueba de los sentidos (Méndez-González y col., 2006). Entonces, en esta doctrina se pueden identificar algunas primeras nociones de modelado matemático pues mostraron que los principios que rigen las formas y proporciones pueden descubrirse a través de los números, lo cual sugiere que, eventualmente, se pueda describir matemáticamente todo el universo.

Además, se le atribuye a la comunidad Pitagórica el principio del razonamiento deductivo, en el cual se parte de una serie de axiomas² para ir avanzando hacia una conclusión.

La razón es inmortal, todo lo demás es perecedero ... Pitágoras

1.2.5. Parménides de Elea (540-470 a.C.)

Propuso que existen dos caminos para acceder al conocimiento: la vía de la verdad (la razón) y la vía de la opinión (los sentidos) (Guthiere, 1960). De acuerdo a Parménides, los sentidos ofrecen una imagen del mundo contradictoria que no concuerda con la razón (ver Problema 1.6). Este filósofo pensaba que nada puede surgir de la nada (es imposible la existencia del vacío) y algo que existe debe haber existido siempre en alguna forma y tampoco se puede convertir en nada. De esta forma, Parménides concluye mediante la razón que todo lo real debe ser eterno e inmutable y debe tener una unidad indivisible. Su discípulo más conocido fue Zenón de Elea a quién se le recuerda por sus paradojas (ver problemas 1.7 y 1.8).

Es indiferente para mí por dónde comience; pues allí volveré nuevamente ... Parménides de Elea

1.2.6. Heráclito de Éfeso (535-484 a.C.)

Se opone a Parménides afirmando que todo fluye, es decir, el fundamento de todo está en el constante cambio (ver problemas 1.9 y 1.10). Para referirse a este cambio constante del mundo utiliza la metáfora del fuego como principio natural (Xirau, 2010). Es decir, todo lo que vive, lo hace por la destrucción de otras cosas; de esta forma, el fuego vive por la muerte del aire (y viceversa) y el agua vive por la muerte de la tierra (y viceversa). Sostuvo que la verdad

²Un axioma es una proposición que se considera *evidente* y se acepta sin demostración previa. La única restricción impuesta a un sistema axiomático es que los axiomas deben ser elegidos de tal forma que en el modelo resultante no puedan deducirse dos proposiciones mutuamente contradictorias. Esto lleva a que los axiomas deben ser independientes entre sí, es decir, no debe ser posible deducir un axioma a partir del resto de axiomas que constituyen al modelo.

obedece al *logos*, la razón universal que dirige todo lo que sucede en la naturaleza (Guthiere, 1960). Defiende el uso de los sentidos aunque admite sus limitaciones.

Los que buscan oro excavan mucha tierra y encuentran poco
Heráclito de Éfeso

1.2.7. Empédocles de Agrigento (494-434 a.C.)

Rechazó la idea de que un solo elemento debía ser el principio de todas las cosas, propuso que la naturaleza tiene cuatro elementos o raíces (tierra, aire, agua y fuego) que se mezclan y se separan en distintas proporciones³. Desde este punto de vista, nada cambia, simplemente los elementos se mezclan y luego se separan para volverse a mezclar de manera distinta. Partes de estas ideas se pueden encontrar en el desarrollo de la química moderna a finales del siglo XVIII (Hull, 1960). De acuerdo a este filósofo, podemos conocer algo porque estamos constituidos con los mismos elementos de aquello que conocemos; es decir, se conoce *lo semejante por lo semejante* (Méndez-González y col., 2006).

Conviene repetir las palabras útiles ... Empédocles de Agrigento

1.2.8. Anaxágoras de Clazomene (500 a 428 a.C.)

Propuso que la naturaleza está constituida de partículas elementales o *spermata* (semillas). Es en estas piezas más pequeñas donde hay información del todo. Además, sugirió que existe una fuerza que pone orden en la naturaleza y es la causa del todo, a la que llamó *nous* (inteligencia) (ver Problema 1.11) (Xirau, 2010).

Todas las cosas tienen una porción de todo, pero la mente es infinita, autónoma y no está mezclada con ninguna, sino que ella sola es por si misma ... Anaxágoras de Clazomene

³Es decir, exactamente lo opuesto de Anaximandro.

1.2.9. Demócrito de Abdera (460-370 a.C.)

Siguiendo una línea de pensamiento similar a Anaxágoras, afirmó que toda materia tenía que estar constituida por partes pequeñas, indivisibles y eternas a las que llamó átomos, los cuales no pueden ser idénticos entre sí y tienen capacidad de libre movimiento en el vacío. Suponía que existe un número infinito de átomos, pero que sus posibilidades de combinación son finitas (Taylor, 2010). Precisamente por tener formas distintas, los átomos podían combinarse para componer diferentes cuerpos. Así, cuando un cuerpo muere y se desintegra, los átomos se dispersan y pueden utilizarse para reorganizarse y formar otro cuerpo, sin que esto implique alteraciones en el átomo mismo (ver Problema 1.12).

A diferencia de Aristóteles⁴ y mucho antes que Galileo o Newton, Demócrito sostenía que el movimiento de un átomo se mantiene uniforme hasta que choca con otro átomo (Hull, 1960). En otras palabras, el movimiento no necesita una causa que lo mantenga; las causas sólo son necesarias para iniciar o modificar el movimiento. De esta forma, el estado del universo en un momento dado depende sólo de sus estados previos y su futuro está determinado por el presente y no viceversa⁵. La contribución atomista de Demócrito representa la primera tendencia materialista y determinista de la historia (en la Sección 2.4 se presenta una discusión acerca de los modelos deterministas y estocásticos).

*Es arrogancia hablar de todo y no querer oír nada
Demócrito de Abdera*

1.2.10. Sócrates (469-399 a.C.)

Para este filósofo era crucial encontrar una base segura para el conocimiento y la encontró en la razón del hombre. Desarrolló el método de la dialéctica, el cual utiliza al razonamiento inductivo para acceder al conocimiento. Dicho método constaba de dos fases: la ironía y la mayéutica (Guthiere, 1972). En la primera fase, la meta era reconocer la ignorancia propia; es decir, el

⁴Aristóteles pensaba que todo cuerpo en movimiento se detiene si no hay una causa que lo mantenga en movimiento. Esta idea perduró por cerca de 2000 años.

⁵Esta idea es el fundamento del *principio de causalidad*, el cual se desarrolló de manera formal más adelante y ha tenido aplicación en ciencias exactas, naturales y sociales.

desconocimiento de la definición que se está buscando y eliminar las ideas preconcebidas. La segunda fase consistía en la búsqueda de la verdad. Esta técnica se basa en la premisa de que el verdadero conocimiento debe salir de cada individuo (ver Problema 1.13). El sistema de argumentación como vía para llegar al conocimiento fue desarrollado más tarde por Aristóteles y, posteriormente, por Francis Bacon como punto de partida del método científico, con lo que se sentaron las bases de todas las ciencias empíricas.

La admiración es la hija de la ignorancia y la madre de la ciencia
Sócrates

1.2.11. Platón (427-347 a.C.)

Rechaza la tendencia a adquirir conocimiento mediante los sentidos; más bien, propone que el conocimiento viene del razonamiento de las sensaciones. Para Platón, el conocimiento es innato, pues sostiene que en realidad nunca se aprende algo nuevo sino que se recuerda algo que ya se tenía en el espíritu, como lo ilustra con el conocido mito de la caverna (Problema 1.14). En otras palabras, para Platón el conocimiento ya se tiene antes de la experiencia (o *a priori*) y todo lo que se debe hacer es reflexionar, mediante la razón, para revelar aquello que se sabe y que los sentidos hacen olvidar (Taylor, 2011). Reconoce, como Heráclito, el continuo cambio (o devenir) del mundo. Sin embargo, para poder entenderlo es necesario contar con un objeto permanente, inmutable e independiente al que llamó *idea*. Las ideas no existen en el mundo de los sentidos, sino en la razón. De hecho, sostiene que las cosas cambiantes del mundo son sólo copias de aquellas ideas. En otras palabras, para Platón existen dos tipos de realidades: el mundo material o sensible (el cual es cambiante) y el mundo de las ideas (eterno e inmutable), siendo el primero una copia imperfecta del segundo. De manera que el conocimiento verdadero es el que se fundamenta en las ideas y no el que proviene de los sentidos.

*La mayor declaración de amor es la que no se hace;
el hombre que siente mucho, habla poco*
Platón

1.2.12. Aristóteles (384-322 a.C.)

Rechazó la teoría de Platón sobre las ideas y propuso que, para conocer es necesario definir, y para definir hay que saber clasificar conceptos. Para Aristóteles el camino al conocimiento está dado por la observación, de ahí que sus aportaciones hayan tendido tanto impacto en ciencias como la biología. Consideró que los humanos poseemos la capacidad innata de aprender de la experiencia (Méndez-González *y col.*, 2006). Esta diferencia de opinión con Platón sobre el camino para acceder al conocimiento dividió a los filósofos en dos ramas: los racionalistas (como Descartes, Kant y Leibniz), que sostienen que el conocimiento es innato y los empiristas (como Locke, Berkeley y Hume) que suponen que todo conocimiento viene de la experiencia. Estos dos enfoques persisten hasta nuestros días y no son ajenos al modelado matemático (ver discusión al final de la Sección 2.6).

Aristóteles estaba convencido de que la verdad del mundo se encontraba en esta realidad, por lo que dedicó su vida a coleccionar y clasificar muestras de flora y fauna. Para ello, elaboró un sistema jerárquico en donde introdujo los términos *género* (para clasificar algo de mayor extensión) y *especie* (algo de menor extensión). De acuerdo a este sistema, los géneros y especies son sólo abstracciones de las cosas individuales (o sustancias segundas); mientras que las sustancias primeras son una combinación de *materia* (lo que permanece a pesar de los cambios) y *forma* (lo que hace que algo sea lo que es) (Problema 1.15). Aristóteles llamó filosofía primera a la que se ocupa de los *primeros principios* de todo lo que ocurre, es decir, a encontrar el por qué de las cosas (Xirau, 2010).

Piensa como piensan los sabios, pero habla como habla la gente sencilla ... Aristóteles

1.3. Filosofía moderna

A pesar de las notables contribuciones que se dieron durante la época de la filosofía medieval, la problemática abordada era la relación entre la fe y la razón, lo cual no pertenece a los objetivos de este texto. Por ello, se continuará la revisión de aportes filosóficos al conocimiento a partir de la

filosofía moderna hasta llegar a la contemporánea. La época del Renacimiento en el siglo XIV sirve como puente entre la Edad Media y la Edad Moderna (siglo XVII). A partir del Renacimiento, el progreso de la ciencia y la filosofía ha ido en continuo avance. Para finales del siglo XV, las ideas renacentistas se habían extendido por toda Europa imponiéndose en buena medida sobre los dogmas eclesiásticos. Lo anterior fue posible gracias a los trabajos en astronomía de Copérnico, Kepler y Galileo (Hull, 1960). Al término del Renacimiento, inicia la Edad de la Razón y con ella la filosofía moderna; en esta nueva época el pensamiento se dirige hacia la relación entre la filosofía y la ciencia.

1.3.1. Francis Bacon (1561-1626)

Este filósofo propuso a la inducción basada en la observación de casos particulares para establecer leyes generales. Sostuvo que, para llegar a un conocimiento verdadero de la naturaleza, es necesaria la eliminación de cuatro ídolos: el de la caverna⁶, el del mercado⁷, el de la tribu⁸ y el del teatro⁹. Es claro que el proceder mediante la inducción no implica certidumbre, sino más bien probabilidad. Para atender a este problema Bacon propuso la precisión de las observaciones, mediante la elaboración de tablas y disposición de los casos de estudio, y el establecimiento de una ley general para la naturaleza o teoría de las formas. Bacon pensaba que existe una regularidad en los hechos naturales que lleva a leyes o formas que permiten hacer inducciones verdaderas (Urbach, 1987). La influencia y prestigio de Bacon motivaron a que una buena parte de la ciencia británica se centrara en la experimentación práctica.

La verdad surge más fácilmente del error que de la confusión
Francis Bacon

⁶La tendencia a pensar que se posee la verdad sólo por el hecho de haberlo pensado.

⁷La tendencia a convencer a otras personas de nuestro pensamiento sólo por nuestros propios prejuicios.

⁸La tendencia a tomar como verdaderos preceptos que toda la raza humana acepta.

⁹La tendencia a aceptar dogmas o filosofías impuestas.

1.3.2. René Descartes (1596-1650)

La esencia del pensamiento crítico Cartesiano es la duda metódica: *Dudar para no dudar*. Las cuatro reglas de su método son (Xirau, 2010): 1) No recibir nada por verdadero que no fuera así evidentemente; es decir, evitar precipitarse; 2) proceder con claridad y dividir cada una de las dificultades en tantas partes como sea posible; 3) conducir los pensamientos en orden, empezando por los objetos más simples y subir por grados de conocimiento a los más complejos y 4) hacer enumeraciones y revisiones generales para asegurarse de no haber omitido nada, esto incluye, por ejemplo, repetir un experimento suficientes veces para verificarlo. Descartes concluyó que, dado que la duda es un pensamiento, de lo único que no puede dudar es de su propia existencia pensante, lo cual le permitió iniciar el camino del escepticismo al conocimiento. Visto de esta forma, el conocimiento es un análisis entre dos síntesis (Méndez-González y col., 2006): *la síntesis oscura* de quien ve por primera vez un aspecto de la realidad donde el análisis consiste en entender las partes que constituyen a un conjunto y *la síntesis clara* que resulta de la re-estructuración de los elementos del objeto de estudio (Problema 1.18). Con estas reglas se explica lo que se debe hacer para encontrar la verdad, mas no necesariamente cómo hacerlo. Para ello se recurre a la teoría de la *intuición racional* y la *deducción*. La intuición racional es similar a los axiomas que se postulan en matemáticas o las hipótesis en física o biología que deben comprobarse o rechazarse con la experimentación. Una vez que se han establecido los primeros principios mediante la intuición, se pueden analizar sus consecuencias mediante el razonamiento en la deducción. Usando este método, Descartes desarrolló aportes relevantes en matemáticas y otras ciencias.

Daría todo lo que sé por la mitad de lo que ignoro
René Descartes

1.3.3. Baruch de Spinoza (1632-1677)

Se distingue de Descartes en que considera una idea verdadera como determinada y una falsa como indeterminada. Este filósofo propuso reducir toda la filosofía a una serie de axiomas, postulados, teoremas y demostraciones matemáticas.

Spinoza pensaba que las verdades filosóficas son demostrables y exactas como pueden serlo las de las matemáticas (ver Problema 1.20).

Si no quieres repetir el pasado, estúdialo ... Baruch de Spinoza

1.3.4. Gottfried Wilhelm Leibniz (1646-1716)

Para este filósofo, el ser humano es empírico en tres cuartas partes de sus acciones y el resto se debe a la razón innata. Leibniz distingue entre *verdades de hecho* (originadas de la experiencia y que son vagas e imprecisas) y *verdades de razón*, las cuales son necesarias, claras y sencillas (como las matemáticas). El conocimiento racional se basa en los principios de posibilidad (es decir, lo no contradictorio) y de razón suficiente¹⁰ (Méndez-González *y col.*, 2006). Bajo estos dos principios, el mundo no es contradictorio y será siempre interpretable mediante la razón y susceptible a ser entendido o modelado matemáticamente. Para Leibniz el universo está compuesto por sustancias simples llamadas *mónadas*, las cuales están aisladas entre sí y contienen una representación de la historia completa del universo. De esta forma, cada mente humana es una mónada y contiene en sí una representación del universo (Leibniz, 2012). Esta teoría sirvió de inspiración a científicos del siglo XX para concebir la relación del espacio y el tiempo. Cabe mencionar que, tanto Leibniz como Descartes hicieron grandes aportes a las matemáticas, lo cual influyó claramente en su pensamiento filosófico.

*Sobre las cosas que no se conocen siempre se tiene mejor opinión
Gottfried Wilhelm Leibniz*

1.3.5. John Locke (1632-1704)

Para este filósofo, todo conocimiento es de ideas; sin embargo, niega la existencia de ideas innatas como lo sugería Platón. Para Locke, la mente es similar a una hoja en blanco¹¹ donde no hay nada escrito hasta que la experiencia deja sus huellas convertidas en ideas (ver Problema 1.21). A diferencia de Leibniz, quien sostenía que las ideas innatas son el único modo

¹⁰El cual se puede resumir en la frase *No hay nada que no tenga suficiente razón.*

¹¹*Tabula rasa.*

de adquirir conocimiento no basado en la experiencia, Locke propuso que, para que algo pueda ser considerado una idea, primero debe haber estado en la mente de la persona en algún momento. Las ideas las divide en sensaciones, reflexiones y mixtas (una mezcla de las dos anteriores) (Méndez-González y col., 2006). Aunque Locke se opuso a la existencia de ideas innatas, no rechaza la idea de que el ser humano posea capacidades innatas. De hecho, la existencia de capacidades como el razonamiento son fundamentales en su explicación del mecanismo del conocimiento.

Cada uno es ortodoxo con respecto a sí mismo ... John Locke

1.3.6. George Berkeley (1685-1753)

Reduce todas las cualidades de las que hablaba Locke a las del tipo secundarias negando así la naturaleza material de las cosas. Para este filósofo *ser es ser percibido*; de esta forma, el entendimiento se da mediante abstracciones y su consideración como realidades. Berkeley sostiene que el pensamiento se reduce a series perceptivas y que cada nueva percepción recuerda a percepciones anteriores. Como estas percepciones son representaciones mentales de la realidad o ideas, no hay base para creer que no exista otra cosa que no sean esas ideas y quienes las perciben (Berkeley, 1982). Sin embargo, cada individuo tiene percepciones diferentes, lo que lleva a la posibilidad de que lo único que realmente exista es uno mismo. Sobresale de su trabajo la distinción entre el tiempo real (en el que vivimos) y el abstracto que se reduce a un mero mecanismo personal.

Y así pasa que los matemáticos de este tiempo actúan como hombres de ciencia, empleando mucho más esfuerzo en aplicar sus principios que en comprenderlos
George Berkeley

1.3.7. David Hume (1711-1776)

Su pensamiento se conoce como *idealismo escéptico* pues afirma que es imposible conocer algo que no se encuentre en la mente. Al igual que Locke, refuta la existencia de ideas innatas. Para ello, divide a los contenidos

mentales en impresiones (percepciones proporcionadas por la experiencia como sensaciones, pasiones y emociones) e ideas (copias de las impresiones, como pensamientos, reflexiones e imaginaciones) (Xirau, 2010). El problema para Hume es que, en muchas ocasiones, se tienen ideas que no tienen respaldo en las impresiones. Para atender a este problema, Hume propuso su *horquilla*, según la cual sólo hay dos tipos de enunciados: los *demostrativos*, los cuales se sabe que son ciertos independientemente de la experiencia y los *probables*, cuya verdad o falsedad sólo se puede conocer mediante experimentos (ver Problema 1.22). De esta forma, dado que ninguna impresión precede a una idea, es imposible asegurar la existencia de un mundo corpóreo más allá de las percepciones. En otras palabras, *la única realidad es la de nuestra mente*. De acuerdo a Hume no es la razón, sino una idea asociada a una impresión presente, guiada por el hábito, lo que se esconde tras las percepciones de conocimiento. Sin embargo, dichos hábitos mentales deben ser aplicados con cautela, por lo que Hume propuso una ley para el pensamiento en el *principio de asociación de ideas* (Hull, 1960). Las componentes que permiten la asociación de ideas son: semejanza, continuidad de espacio-tiempo y causalidad (ver Problema 1.23).

Cada solución da pie a una nueva pregunta ... David Hume



1.3.8. Immanuel Kant (1724-1804)

A este filósofo le molestaba la idea que en 2000 años de pensamiento filosófico no se hubieran desarrollado argumentos para probar que existe un mundo exterior. Su filosofía se conoce como *idealismo trascendental* y es, en esencia, una teoría del conocimiento. En su obra *Crítica de la razón pura* se propone establecer los fundamentos y límites del conocimiento humano. Este filósofo sitúa al conocimiento y su crítica en el centro de toda filosofía. A diferencia de sus predecesores racionalistas (los que sostienen que las ideas son innatas) y empiristas (los que sostienen que las ideas son adquiridas), Kant no se interesa por el origen del conocimiento sino por su valor y limitaciones. Propone que existen cuatro tipos de juicios

(Xirau, 2010): *a priori*¹², *a posteriori*¹³, *sintético*¹⁴ y *analítico*¹⁵, de los cuales los juicios sintéticos *a priori* son verdaderamente científicos (ver Problema 1.24). Una filosofía trascendental es, para Kant, aquella que se ocupa de los principios *a priori* de nuestra manera de conocer. Kant divide el conocimiento en intuiciones procedentes de la sensibilidad y conceptos que provienen indirectamente del entendimiento. La evidencia experimental aporta parte de nuestro conocimiento (la sensibilidad y el entendimiento) y la otra parte se conoce *a priori*. De esta manera, la estética¹⁶ trascendental¹⁷ constituye el análisis de las condiciones *a priori* de posibilidad (y no del descubrimiento) del conocimiento sensible, las cuales son las intuiciones de espacio y tiempo (Méndez-González y col., 2006). Para Kant pensar es aplicar a los fenómenos¹⁸ intuiciones claras de espacio y tiempo así como categorías¹⁹ que les dan una forma precisa mediante juicios (Smith, 2008). Para Kant el mundo se divide en fenómenos y las cosas en sí, a las cuales denominó *noúmenos*. De esta forma, cada individuo crea su versión limitada del mundo a partir de sus percepciones, pero nunca es posible experimentar el mundo *en sí*, es decir, el mundo nouménico. Se puede decir entonces que, para Kant, sólo es posible elaborar modelos de la realidad.

Con el poder viene la responsabilidad
Immanuel Kant

¹²Son independientes de la experiencia y por tanto válidos universal y necesariamente; sin embargo, pueden proceder de la experiencia, como los principios físicos.

¹³Aquellos que provienen de la experiencia y dependen de ella.

¹⁴Aquellos en los que el predicado no está contenido en el sujeto, por ejemplo, “la casa está limpia”.

¹⁵Aquellos en los que el predicado está contenido en el sujeto, por ejemplo, “un cuadrilátero tiene cuatro lados”.

¹⁶Entendida como sensibilidad.

¹⁷Todo conocimiento que se ocupa de conceptos o juicios *a priori* de la realidad.

¹⁸Todas las experiencias que se le presenten a la conciencia y son percibidas por los sentidos.

¹⁹Cantidad, cualidad, modo y relación.

1.3.9. Georg Wilhelm Friedrich Hegel (1770-1831)

Su idea fundamental es que toda la realidad (que además es única) se reduce al despliegue de la razón, pues todo es creado por ella. Sostiene que *Todo lo que es racional es real y todo lo que es real es racional*. Hegel fue un monista pues propuso que todas las cosas son aspectos de una única realidad. Sin embargo, también puede decirse que Hegel fue un idealista porque la realidad a la que se refería no es material. Para Hegel, la lógica de la realidad es la lógica dialéctica, según la cual, la verdad no surge de la identidad, sino de la contradicción, pues las cosas son y no son al mismo tiempo (Taylor, 1977). Propuso una triada dialéctica constituida por: 1) *la tesis* (el ser), 2) *la antítesis* (el no-ser) y 3) *la síntesis* (conciliación de 1 y 2, o *devenir*²⁰). De esta forma, la realidad se despliega como una serie infinita de triadas, pues cada que se alcanza una síntesis ésta puede servir como una nueva tesis y así sucesivamente²¹. O bien, en sus propias palabras: *Lo verdadero es el todo, pero el todo no es, sino la esencia consumándose en ella misma a través de su desarrollo*. Cuando Hegel defiende que las estructuras del pensamiento son dialécticas implica que surgen por el movimiento continuo de contradicción y superación, lo cual ocurre en muchas ocasiones en el desarrollo de las ciencias.

Ten el valor de equivocarte ... Georg Wilhelm Friedrich Hegel

1.4. Filosofía contemporánea

1.4.1. Auguste Comte (1798-1857)

Siguiendo los trabajos de Hume e inspirado por la generalidad de las leyes de Newton, propuso la ley de los tres estados: el teológico, el metafísico y el positivo para explicar la evolución del espíritu (Xirau, 2010). En el estado teológico el espíritu humano se explica el por qué de las cosas mediante agentes sobrenaturales y ocultos cuya intervención es arbitraria. En el estado metafísico, se continúa buscando el por qué de las cosas pero se sustituyen los agentes sobrenaturales por fuerzas arbitrarias, abstracciones (principio,

²⁰Que quiere decir pasar de un estado de no ser a un estado de ser.

²¹Las matemáticas no han logrado justificar estas operaciones que se basan en la transición, porque la transición no es de naturaleza formal, sino dialéctica.

sustancia, causas, etc.) pues lo que se pretende conocer es el sentido o esencia del universo. Por último, cuando se han superado los dos estados anteriores, el hombre se limita a observar los hechos de la experiencia para describirlos y formular las leyes que los rigen, es decir, establecer modelos experimentales o matemáticos, como se explicará en más detalle en el siguiente capítulo. En el estado positivo dominarán las ciencias, la experiencia y una visión racional del mundo (ver Problema 1.25). De esta forma, la filosofía positivista se convierte en la síntesis de las verdades científicas que están en constante progreso.

Saber para prever, a fin de poder ... Auguste Comte

1.4.2. Charles Sanders Peirce (1839-1914)

Uno de los iniciadores del pragmatismo²²; propuso que la filosofía debía ser la guía lógica de las ciencias. Dicha guía está dictada por el principio de que una idea científica será verdadera cuando sea útil y falsa cuando no lo sea. Lo cual lleva a que la verdad de una idea científica deberá ser comprobada siempre en un futuro. Sin embargo, si la verdad se sostiene de la utilidad, entonces la verdad se vuelve algo relativo. Lo cual aceptaba Peirce al sostener que hay tres cosas que nunca podremos alcanzar: la certidumbre absoluta, la exactitud absoluta y la universalidad absoluta (Peirce, 1992). Según este filósofo, pensar tiene como función crear hábitos de acción y, por consecuencia, las ideas son valiosas no sólo por el conocimiento teórico que proporcionan sino porque orientan nuestras acciones. Para Peirce, no se adquiere conocimiento por medio de la observación pasiva, sino por la acción. Más aún, el conocimiento adquirido sólo es útil en cuanto explica la realidad de manera adecuada; cuando deja de cumplir esta función, o bien cuando surge una explicación mejor, el conocimiento debe ser sustituido. Por tanto, el conocimiento, que puede ser perfectible, se diferencia claramente de los hechos, los cuales son inmutables. Esta postura filosófica, es muy similar al proceso evolutivo que han sufrido varias teorías y modelos matemáticos a lo largo de la historia.

Todo lo que la experiencia vale la pena que nos enseñe, nos lo enseña por sorpresa ... Charles Sanders Peirce

²²Aquello que tiene valor práctico.

1.4.3. William James (1842-1910)

Sostuvo que las ideas son los instrumentos con los cuales se superan las dificultades de la vida²³. Las ideas tienen el propósito de configurar la materia bruta de un mundo práctico. Una idea es, entonces, verdadera no sólo cuando se verifica en la práctica, sino cuando es útil y aporta un valor a la vida del hombre. Para James, cuando una idea no contradice los hechos conocidos y ofrece un medio para predecir la realidad con la precisión buscada, no hay razón para no considerarla cierta (James, 1995). Entonces, una idea es cierta en virtud de las acciones que se lleven a cabo en función de ella; es decir, el llevar a la práctica una idea es el proceso mediante el cual se vuelve cierta. Por ello, James decía: “*actúa como si tus actos hicieran la diferencia, . . . , la hacen*”. Sin embargo, en el proceso de actuar partiendo de una idea determinada, ésta debe justificarse continuamente mediante su utilidad al momento de incrementar el conocimiento o predecir los resultados; en otras palabras éste es un enfoque *a posteriori*. En el siguiente capítulo se ampliará la discusión acerca de los enfoques *a priori* y *a posteriori* para llevar a cabo el modelado matemático.

*Cuando debemos hacer una elección y no la haces,
ésto ya es una elección . . . William James*

1.4.4. John Dewey (1859-1952)

Continuando con el pragmatismo de Peirce y James, Dewey pensaba que la filosofía debía ser igualmente útil para la humanidad como lo es la ciencia. Para este filósofo, una idea es verdadera si demuestra ser una herramienta útil para la lucha por la vida, pues los seres humanos, a diferencia de los animales, hacen frente, con sus ideas, a los continuos cambios del mundo. En esta forma de pensar, muestra su enfoque pragmático y su influencia por la teoría de la evolución de Darwin. Según Dewey, todo conocimiento es un instrumento forjado por el hombre para adaptarse al medio. En otras palabras, un conocimiento nuevo debe surgir siempre que exista la necesidad de resolver un problema y no baste con las ideas anteriores²⁴ (Dewey, 2013).

²³ Por ello, siempre domina el que tenga las mejores ideas.

²⁴ Por ejemplo, la solución de ecuaciones diferenciales no lineales, es, hasta el momento, imposible de hacer de manera analítica. Es decir, los conocimientos matemáticos actuales

A esta forma de pensar se le conoce como instrumentalismo. Sin embargo, Dewey reconoció que nunca se podrá controlar a la naturaleza por completo ni transformarla hasta el punto de eliminar toda incertidumbre.

Cualquier nuevo avance científico ha salido de una nueva audacia de la imaginación ... John Dewey

1.4.5. Edmund Husserl (1859-1938)

Movido por su formación como matemático, Husserl buscó un fundamento para la ciencia y el conocimiento independiente de suposiciones previas, como ocurre en las matemáticas. Sostenía que la experiencia por sí misma no puede llegar a ser una ciencia pues está plagada de subjetividades. Propuso el método de la *reducción fenomenológica* en el cual se consideran todas las cosas del mundo físico como fenómenos, los cuales constituyen la base para explicar toda la realidad (Husserl, 1977). Sin embargo, el método fenomenológico es, más que explicativo, un método descriptivo. Se pretende que el sujeto que investiga²⁵ olvide las interpretaciones anteriores y vea las cosas cara a cara. Para ello, utiliza tres reducciones: 1) La reducción externa, donde se elimina la existencia del mundo más allá de los fenómenos; 2) La reducción eidética, donde se eliminan elementos de la existencia del objeto de estudio hasta quedarse con su esencia y 3) La reducción trascendental, donde se prescinde de la existencia del analista así como de sus experiencias psicológicas (ver Problema 1.26).

Lo experimentado como externo no pertenece a lo interno intencional, aunque nuestra experiencia de ello resida allí, como experiencia de lo externo
Edmund Husserl

no permiten resolver este tipo de ecuaciones de manera exacta. Sin embargo, una gran variedad de problemas de interés práctico involucran este tipo de ecuaciones, lo que ha motivado el desarrollo de soluciones numéricas, basadas en aproximaciones y cuya implementación requiere, por lo regular, programación computacional, como se explicará en el Capítulo 4.

²⁵Es decir, el analista.

1.4.6. Bertrand Russell (1872-1970)

Inició una corriente filosófica conocida como *atomismo lógico*, donde se sostiene la correspondencia entre el lenguaje y el mundo mediante frases o proposiciones que son indivisibles (atómicas). Si suponemos que el lenguaje es una forma de representar la realidad²⁶, ésta tendrá que estar constituida por acontecimientos espacio-temporales a los que se refieren las proposiciones de la gramática. Sin embargo, el lenguaje al que se refiere Russell no es el ordinario, sino el de la lógica matemática cuya clave son las funciones de verdad. Estas funciones existen cuando la verdad o falsedad de una proposición compleja puede determinarse por la veracidad de las proposiciones que la constituyen (Russell, 2010). La forma de una proposición coincide con la de los hechos, de manera que la estructura de un enunciado verdadero es equivalente a la estructura real del hecho descrito por la proposición.

Los científicos se esfuerzan por hacer posible lo imposible. Los políticos por hacer imposible lo posible
Bertrand Russell

1.4.7. Ludwig Wittgenstein (1889-1951)

Discípulo y colega de Russell, contribuyó de manera determinante en el desarrollo de la teoría pictórica del lenguaje. Su trabajo puede dividirse en términos de sus dos obras clave: el *Tractatus logico-philosophicus* (1923) y las *Investigaciones filosóficas* (1953)²⁷. La idea central del *Tractatus* es la vinculación del lenguaje con la realidad, al grado de afirmar que los límites del lenguaje propio son los límites del mundo. Esta idea viene de suponer que una buena parte de las discusiones y desacuerdos filosóficos provienen de errores básicos acerca del lenguaje que se usa para describir la realidad. El pensamiento, como una representación de la realidad²⁸, no es otra cosa que una proposición con sentido, por lo que si algo es pensable, es posible. El papel de la filosofía es, entonces, el de clarificar el pensamiento. Todo lo que esté fuera del lenguaje es precisamente aquello de lo que nada puede decirse, *i.e.*, lo místico. De esta forma, tanto el lenguaje como el mundo poseen una

²⁶ A esto se le conoce como teoría pictórica del lenguaje.

²⁷ Publicada póstumamente.

²⁸ Entendida como aquello que se puede representar con el lenguaje.

estructura lógica, pues el lenguaje está compuesto de proposiciones (ciertas o falsas), mientras que el mundo está compuesto de hechos determinados. De esta forma, las proposiciones son *figuras* de los hechos y cualquier proposición que no figure a los hechos no tiene sentido. Por tanto, el lenguaje se limita a afirmaciones sobre los hechos del mundo y los límites del lenguaje son los límites de la realidad.

La ingeniería ha sido un modelo de la física, pero ni la física, ni la religión, ni la psicología pueden reducirse a un modelo ingenieril

Ludwig Wittgenstein

1.4.8. Karl Popper (1902-1994)

Para este filósofo, el conocimiento científico funciona por medio de inducciones, lo cual consiste en partir de observaciones particulares de la realidad para elaborar principios generales. Estos principios no pueden probarse, sino sólo refutarse. Es decir, lo que hace que una teoría sea científica es que pueda ser falseable²⁹. Recientemente, Wood (2009) utilizó principios similares para establecer un conjunto de *leyes de escalamiento* para el desarrollo de modelos matemáticos en sistemas de escalas múltiples. Este tema se desarrollará con mayor detalle en el siguiente capítulo. Como puede notarse la inducción pasa de lo particular a lo general y se opone a la deducción que va de lo general a lo particular. El razonamiento deductivo es similar al usado en informática, donde el resultado de un programa depende únicamente de los comandos que se hayan introducido. Sin embargo, un razonamiento plenamente deductivo no puede, por sí mismo, utilizarse para describir la realidad. Por ello, para Popper (2002), es imposible probar que una teoría sea verdadera. De hecho, lo que le aporta el carácter de científico a una teoría es que se pueda contrastar con la realidad, con la posibilidad de que sea falsa. Desde luego, si una teoría es verificable y no puede ser falseada, no deja de ser científica.

La ciencia puede definirse como el arte de la supersimplificación sistemática

Karl Popper

²⁹El que una teoría sea falseable no necesariamente implica que sea falsa, sino que puede ser refutada con la observación

1.4.9. Thomas S. Kuhn (1922-1996)

En su libro *La estructura de las revoluciones científicas*, Kuhn (1996) plantea que la ciencia se compone de tres etapas: la pre-ciencia, en la cual no existe un paradigma; la ciencia normal, la cual se rige dentro de un determinado marco teórico, en el cual se acumulan resultados sin cuestionar los fundamentos del paradigma y la ciencia revolucionaria, en donde se dan los cambios de paradigmas. Durante el periodo de ciencia normal, si un resultado no concuerda con el paradigma, en vez de cuestionar al paradigma se cuestiona al que obtuvo el resultado, lo cual se opone claramente a la propuesta de Popper. Las revoluciones científicas se dan, según Kuhn, debido a la acumulación crítica de resultados anómalos, lo que hace necesaria la formulación de nuevas teorías que conformen un nuevo paradigma (ver Problema 1.27). Feyerabend (2010) da un paso más allá y afirmó que cuando se da una revolución científica, todos los conceptos científicos se ven alterados. Una vez superado el periodo de crisis, la ciencia normal vuelve a establecerse y el ciclo continúa.

El significado de la crisis consiste precisamente en el hecho de indicar que es el momento de renovar los instrumentos

Thomas S. Kuhn

Problemas

- 1.1 Suponga que ignora la forma del planeta y los movimientos que lleva a cabo alrededor del sol. Basándose únicamente en su experiencia de ver salir y ocultarse el sol y la luna, formule una explicación mitológica y una racional respecto al movimiento y forma de la Tierra.
- 1.2 Sin recurrir a explicaciones basadas en la termodinámica (esto incluye, cambios de entalpía, entropía, o energía interna de las moléculas), formule una explicación para los cambios de estado físico del agua de sólido a líquido y de líquido a vapor y viceversa.
- 1.3 La comunidad Pitagórica propuso varias clasificaciones de los números, entre ellas están los números cuadrados, cuyos primeros tres números son el 1, 4 y 9. Muestre que el n -ésimo número cuadrado es la suma de los n primeros números impares.
- 1.4 La comunidad Pitagórica definió los números triangulares como aquellos en los que el n -ésimo número es la suma de los n primeros números naturales. Si los primeros tres números triangulares son 1, 3 y 6, determine el cuarto y el quinto. Muestre además que dos números triangulares sucesivos forman un número cuadrado.
- 1.5 Un problema crucial que no pudo superar la comunidad Pitagórica es el siguiente: Suponga que existe una unidad contenida p veces en el lado de un cuadrado y q veces en su diagonal, donde p y q no deben ser números pares (la demostración si funciona para números pares). A partir del teorema de Pitágoras deduzca que

$$q^2 = 2p^2 \quad (1.P-1)$$

Explique por qué este resultado lleva a la conclusión de que p y q deben ser ambos números pares, lo cual contradice la premisa inicial del problema.

- 1.6 Es bien sabido que el rango de visión humana está limitado a lo que se conoce como *spectro visible* y comprende longitudes de onda que van desde 380 nm (ultravioleta) a 780 nm (infrarrojo). Sin embargo,

el espectro electromagnético es mucho más amplio pues abarca desde 10^{-14} m hasta 10^8 m. Basado en este hecho probado científicamente, ¿podría confiar completamente en la percepción de colores que le ofrecen sus ojos para describir la habitación en la que se encuentra leyendo estas líneas, si o no y por qué?

- 1.7 *Paradoja de Aquiles y la tortuga*: Suponga que Aquiles es 10 veces más veloz que una tortuga y que le dio al inicio 10 m de ventaja, de esta forma, cuando Aquiles haya recorrido los 10 primeros metros, se encontrará a 1 m de distancia de la tortuga. Cuando haya recorrido ese metro, se encontrará a 10 cm de la tortuga; y así sucesivamente, cuando haya recorrido 10 cm, la tortuga estará 1 cm adelante de Aquiles. ¿Aquiles nunca alcanzará a la tortuga?
- 1.8 *Paradoja de la flecha*: Suponga que lanza una flecha de un arco hacia un blanco específico. Ahora suponga que a cada instante de tiempo usted le puede tomar una fotografía con una cámara de alta velocidad, mediante la cual la imagen que arroja la cámara es la de una flecha fija en el espacio. De esta forma, usted tendría evidencia de que, a cada instante de tiempo, la flecha siempre está en reposo, lo que lleva a concluir que el movimiento es imposible. Refute o confirme esta afirmación con argumentos razonables.
- 1.9 A Heráclito se le suele recordar por su famosa frase: *nadie puede entrar dos veces en el mismo río ni ve dos veces a la misma persona*. Tomando literalmente esta frase y haciendo uso de argumentos científicos actuales, ¿podría usted confirmar o desmentir a este filósofo?
- 1.10 Aceptando el principio relativista de que el espacio se deforma con el tiempo, ¿podría usted afirmar que puede sostener una conversación con otra persona con la que comparte su espacio al mismo tiempo, sí o no, por qué?
- 1.11 Basado en los mecanismos de transferencia y duplicación de la información genética y en el ciclo celular, explique cómo actúa el *nous* de Anaxágoras sobre las *spermata*.
- 1.12 Explique la diferencia entre los átomos de Demócrito y los utilizados en la física moderna.

- 1.13 Según Sócrates, no es posible que una persona racional conozca algo bajo la premisa *master dixit*³⁰, sino que el conocimiento debe nacer en uno mismo con la ayuda del maestro. Usando este mismo principio explique por qué el volumen de un prisma de sección transversal constante es el producto del área de la base por su altura.
- 1.14 Lea el mito de la caverna de Platón³¹ y desarrolle un ejemplo donde, debido a un descubrimiento científico, los receptores de la información decidan asesinar a quien generó dicho conocimiento.
- 1.15 ¿Cuál es la versión actual de la materia y forma de Aristóteles?
- 1.16 Suponga que el conjunto de los números primos es finito y que N es el mayor de ellos. Considere ahora un número K que es mayor en una unidad al producto de todos los números primos, es decir,

$$K = 1 + \prod_{p=2}^{p=N} p \quad (1.P-2)$$

donde p es primo. Muestre que si se divide la ecuación anterior entre cualquier número primo p , se concluye que K es un número primo y también un número compuesto³² por lo que el conjunto de los números primos debe ser infinito como lo demostró Euclides.

- 1.17 Considere una esfera de radio R contenida en un cilindro de altura $2R$. Muestre que el volumen de la esfera es $2/3$ el volumen del cilindro y que el área de la superficie de la esfera es igual al área lateral del cilindro, las cuales son las demostraciones por las que Arquímedes se sentía más orgulloso de haber logrado.
- 1.18 Utilice el método Cartesiano de la duda metódica para desarrollar una teoría propia que explique la ocurrencia de tornados.
- 1.19 Investigue y explique la diferencia entre: axioma, postulado, hipótesis, teorema y demostración.

³⁰El maestro lo dijo.

³¹Una descripción está disponible en wikipedia.

³²Un número compuesto es aquel que no es primo y es el producto de una serie de factores primos

1.20 Calcule los resultados de las siguientes fracciones

$$a) \frac{a}{0}; \quad b) \frac{0}{a}; \quad c) \frac{0}{0}; \quad d) \frac{a}{\infty}; \quad e) \frac{\infty}{a} \quad y \quad f) \frac{\infty}{\infty}$$

donde $a \neq 0$. Discuta el concepto de un resultado determinado e indeterminado en el sentido matemático y en el de Spinoza.

- 1.21 Haga el símil de la mente humana con el CPU de una computadora. Basado en sus conocimientos de informática, aplique las ideas de Locke al tema de la inteligencia artificial.
- 1.22 El enunciado “El sol sale cada mañana” ¿es de tipo demostrativo, probable, o ninguno de los dos?
- 1.23 Espere al final de un día típico para resolver este problema. Haga un recuento de sus acciones y posteriormente utilice el principio de asociación de ideas y formule un modelo de lo que sería el día de la persona que mejor conozca. Al día siguiente contraste su modelo con las acciones de esta persona.
- 1.24 ¿Cuál es el juicio sintético *a priori* detrás del electromagnetismo?
- 1.25 Utilizando el enfoque positivista de Comte, explique la formación y coalescencia de burbujas al hacer hervir agua.
- 1.26 Utilice la reducción fenomenológica de Husserl para discutir la paradoja de Fermi³³.
- 1.27 Identifique las tres etapas de la ciencia propuestas por Kuhn, respecto a la afirmación de Copérnico de que la Tierra gira alrededor del sol.

³³Ver, por ejemplo: http://es.wikipedia.org/wiki/Paradoja_de.Fermi

Capítulo 2

Un primer vistazo al modelado

Aún hay tiempo para hacer milagros
Alexander L.

2.1. Introducción

En este capítulo se proporcionan algunos conceptos fundamentales que serán de utilidad para el resto del texto. Se comienza por definir *modelo* para así hacer una primera clasificación en *modelos experimentales* y *modelos matemáticos*. Para el caso de los modelos matemáticos, se explica la diferencia entre el modelado donde las mismas entradas producen siempre las mismas salidas (*modelo determinista*) y aquel donde lo anterior no siempre se cumple (*modelo estocástico*). Más adelante, se listan algunas preguntas fundamentales que se deben atender al plantear modelos matemáticos. Ante estas preguntas, se proponen dos alternativas que son, el modelado basado en la observación (*modelado a posteriori*) y el *modelado basado en leyes de conservación* (*modelado a priori*). En este último apartado se proporciona la deducción de las ecuaciones de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía junto con algunas relaciones auxiliares constitutivas y una breve explicación acerca de los tipos de condiciones a la frontera. Por último, se proporciona un resumen del material del capítulo, junto con problemas relacionados con el texto.

Para comprender mejor el material presentado en las secciones 2.6 y 2.7 y para poder resolver los problemas asociados a dichas secciones, es recomendable contar con conocimientos básicos de ecuaciones diferenciales y de fenómenos de transporte. Para ello, se recomienda revisar textos como los

de Zill y Wright (2012) y Bird *y col.* (2007). Además, se utilizan los teoremas general del transporte y de la divergencia, cuya deducción está disponible en textos como los de Aris (1990), Whitaker (1992) y Bird *y col.* (2007).

2.2. Algunas definiciones fundamentales

En muchos campos de la ciencia, el empleo de los términos modelo y modelado se hace de manera tan cotidiana y usual que pocas veces se reflexiona sobre su significado. Este tipo de conceptos han sido un tema de investigación intensa. La primera cuestión que se debe atender es el llegar a una definición de modelo que sea lo suficientemente satisfactoria en cuanto a simpleza y claridad para quien la use. Al lector interesado en estudiar una revisión de la evolución del término modelo y el proceso de modelado matemático se le sugieren los trabajos de Aris (1976, 1977, 1994, 1999) y Aris y Penn (1980). En este sentido, se puede entender en una forma muy general

Un modelo es la descripción de un cierto fenómeno (físico, biológico, social, psicológico, etc.) mediante una interpretación particular

De acuerdo a Herrera y Pinder (2012), existen dos tipos de modelos: los construidos físicamente y los matemáticos. Los primeros corresponden a los modelos experimentales que frecuentemente se utilizan para analizar un cierto sistema, a menudo, bajo condiciones controladas. Entonces, se puede decir que un modelo experimental es una representación de la realidad por medios físicos. Por ejemplo, el estudio del desarrollo de tumores cancerosos suele realizarse *in vitro* o *in vivo*. Un tipo de estudio *in vitro* involucra hacer crecer esferoides de células en cajas cultivo para su desarrollo (Wartenberg *y col.*, 2001). Por otro lado, en los estudios *in vivo* se suele experimentar con ratones (Carmeliet y Jain, 2000) pues comparten un alto (arriba del 95 %) porcentaje de similitud genética con el ser humano. En ambos casos, se busca representar el crecimiento tumoral en condiciones que se asemejen a las del cuerpo humano y los resultados que se obtengan tendrán un grado de incertidumbre debido, no sólo al error experimental o humano, sino además por el hecho de ser una abstracción de la realidad.

2.3. Modelado matemático

De acuerdo a Aris (1994), los modelos matemáticos pueden definirse como

Un modelo matemático es una representación en términos matemáticos de ciertos aspectos (atributos) de un sistema no-matemático

Para aclarar un poco esta definición, considere un fenómeno particular que tiene lugar en un sistema (no matemático) que se desee modelar; por ejemplo, el proceso de hervir agua en una cacerola mediante una parrilla eléctrica. Si se acepta que dicho fenómeno puede describirse mediante los atributos que lo caracterizan, entonces se puede formar un conjunto universal a partir de los *atributos*. En este ejemplo, se podrían considerar: el volumen de agua, la temperatura de la parrilla, la temperatura ambiente, la temperatura del agua, la altura sobre el nivel del mar, los materiales de la cacerola y su forma geométrica, entre muchos otros. De esta manera, un modelo matemático es una representación en términos matemáticos del subconjunto del universo de atributos que representa al fenómeno estudiado. En el caso del agua hirviendo en la cacerola, un tipo de modelo matemático sería aquel que relacione la temperatura del agua con el tiempo, la fuente de calor y la temperatura ambiente.

En este momento debe ser claro que un modelo se enfoca frecuentemente a describir sólo ciertos aspectos (atributos) de un fenómeno que se lleva a cabo en un sistema, esto involucra aceptar ciertas suposiciones y restricciones. Debe enfatizarse que son dichas suposiciones y restricciones las que definen las fronteras de aplicación de un modelo y que no se puede esperar que el modelo ofrezca resultados satisfactorios fuera de dichas fronteras (Whitaker, 1988). En otras palabras, los modelos matemáticos no sólo constan de un conjunto de ecuaciones sino también de suposiciones y restricciones que acotan sus fronteras y definen su campo de aplicación (ver Fig. 2.3-1). Un punto de vista análogo a éste es el utilizado por Herrera y Pinder (2012) donde se usa un modelado axiomático en el cual se identifica un conjunto de propiedades (axiomas) de tal forma que todas las demás propiedades sean concomitantes con ellos. De esta forma, un modelo puede ser generalizable siempre y cuando el sistema al que se aplique cumpla con el conjunto de axiomas adoptados.

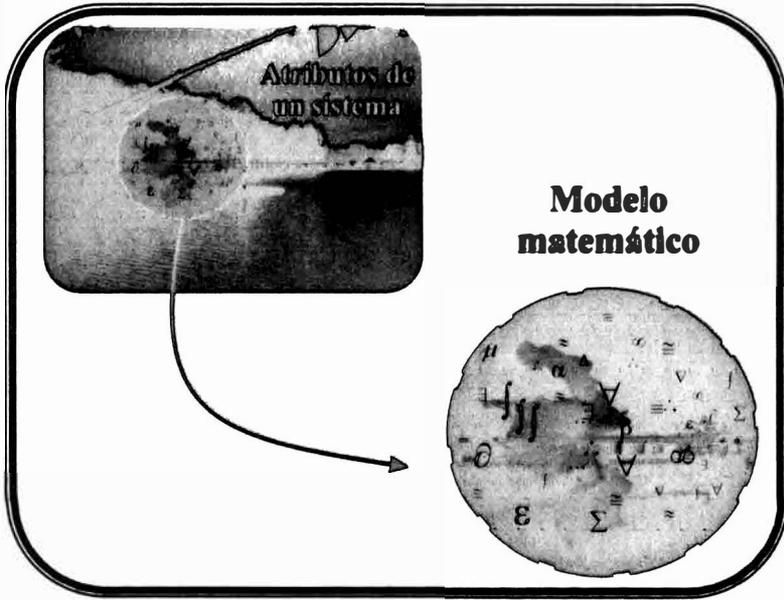


Figura 2.3-1: Esquema que muestra un modelo matemático como un subconjunto del universo de atributos de un sistema. Las líneas punteadas representan las suposiciones y restricciones.

De hecho, el grado de generalidad del modelo dependerá de la elección de los axiomas. Sin embargo, no se debe pasar por alto que una teoría nunca es definitiva, aún si reproduce de manera satisfactoria la realidad. El desarrollo de la ciencia ha mostrado en repetidas ocasiones que una teoría puede ser modificada o incluso descartada a la luz de nuevos hechos (Hull, 1960); de hecho, una de las características más importantes de la ciencia es su carácter perfectible. Probablemente el ejemplo más famoso del siglo XX acerca de esto fue el desarrollo de la mecánica cuántica que vino a modificar el paradigma Newtoniano que había sustentado la física desde el siglo XVII (al lector interesado en una excelente explicación de estos trabajos se le recomienda el texto de Hawking y Mlodinow, 2008).

Otro punto de vista respecto al modelado matemático lo proporciona Meerschaert (2013) y es el siguiente: *El modelado matemático es la liga entre las matemáticas y el resto del mundo*. Se comienza planteando una pregunta del mundo real, después se debe *traducir* esta pregunta a un lenguaje matemático para posteriormente resolver el problema formulado utilizando las herramientas (analíticas y/o numéricas) a nuestra disposición. Por último, debe hacerse el proceso inverso, es decir, *traducir* la respuesta matemática en una respuesta que cualquier persona (experta o no en matemáticas) pueda comprender y utilizar (ver, por ejemplo, el Problema 2.2). Este proceso de interpretación de la realidad a través de un proceso de traducción al lenguaje no es extraño para cualquier individuo. Desde que comenzamos a tener uso de razón, se tiene el interés natural por conocer e interactuar con el entorno, se nos enseñan formas y estructuras para hacerlo de acuerdo a varios factores como son el idioma, posición geográfica, el momento histórico, el entorno social, las necesidades correspondientes, entre otros. El lenguaje se basa en nuestra capacidad para comunicarnos por medio de signos, por lo regular lingüísticos, y nos permite abstraer, conceptualizar y comunicarnos (ver apartados sobre Russell y Wittgenstein en el capítulo anterior). De hecho, recientemente se ha descubierto que el lenguaje que usamos tiene un papel fundamental en nuestra percepción del tiempo y del espacio (Boroditsky y Gaby, 2010) y como tal es una forma de modelado.

Tanto el modelado experimental como el matemático tienen sus ventajas y desventajas; sin embargo, son complementarios. Por ejemplo, si se lleva a cabo un experimento y se demuestra que ocurre un cierto fenómeno, puede no tenerse la certeza de que se obtendrán los mismos resultados bajo otras circunstancias en el mismo sistema. Por otro lado, un modelo matemático puede, a menudo, parecer elegante y general; sin embargo, si no es capaz de reproducir evidencia experimental pierde credibilidad. En la práctica, es común encontrar grupos de trabajo que tienen más desarrollada la habilidad experimental o la matemática y en algunos casos ambas, lo cual sería lo más deseable. Aunque este texto está dedicado al modelado matemático, es crucial desarrollar habilidades para colaborar con colegas que lleven a cabo modelado experimental o incluso desarrollar habilidades experimentales propias.

2.4. Modelos deterministas y estocásticos

En este momento es pertinente discutir acerca de las diferencias entre el modelado matemático determinista¹ y estocástico². En un modelo determinista, cada variable y parámetro puede asignarse a un valor (o serie de valores) fijo, para una serie dada de condiciones (Himmelblau y Bischoff, 1968). En otras palabras,

Un modelo determinista es aquel donde las mismas entradas producen siempre las mismas salidas.

Por otro lado, en los modelos estocásticos el análisis se lleva a cabo en términos de probabilidades de ocurrencia de un evento. En otras palabras,

Un modelo estocástico es aquel donde las mismas entradas no siempre producen las mismas salidas.

Se habla de modelos estocásticos cuando se toman en cuenta los efectos aleatorios de un sistema³. Por ejemplo, mientras que en un modelo determinista se calcula la velocidad de una reacción química, en un modelo estocástico se calcula la probabilidad de que se lleve o no a cabo la reacción. Es importante remarcar que, el hecho de que los modelos estocásticos se basen en la probabilidad y estadística, no los reduce de ninguna manera a modelos empíricos (ver Sección 2.6). Más aún, en la práctica es común encontrar situaciones que contienen elementos de incertidumbre que no son superables; por ejemplo, las fluctuaciones de la bolsa de valores, el movimiento Browniano de partículas, las caminatas aleatorias, entre otros. En síntesis, la elección entre modelos deterministas y estocásticos, puede, en algunos casos ser cuestión de conveniencia⁴, pero en otros puede ser cuestión de necesidad

¹La palabra determinista se utiliza aquí en un contexto que es análogo al determinismo filosófico como el atomismo de Demócrito (ver Sección 1.2.9). Al lector interesado en una discusión filosófica acerca del determinismo se le recomienda el texto de Campbell y col. (2004).

²La palabra estocástico quiere decir *hábil de conjeturar*.

³Es decir, cuando se introduce el principio de incertidumbre.

⁴Ver, por ejemplo la Sección 7.4 en Meerschaert (2013), donde se comparan los enfoques determinista y estocástico para modelar el fenómeno de la difusión.

ante la ausencia de leyes físicas que lleven a modelos deterministas. Antes de continuar es necesario aclarar que, si bien el resto de este texto está orientado al modelado matemático bajo un enfoque determinista, esto no demerita la relevancia o necesidad del modelado estocástico. Al lector interesado en estudiar modelos estocásticos se le recomienda el texto de Himmelblau (1970).

2.5. Primeras nociones de modelado matemático

Como lo menciona Aris (1977), los modelos no surgen aislados, tanto las condiciones de modelado como el propósito (meta) para los cuales fueron planteados determinan el que sea o no apropiado un modelo. Por ello, es de especial importancia al plantear modelos el responder algunas cuestiones fundamentales como las siguientes (Basmadjian y Farnood, 2007)

- 1 *A partir del conocimiento (o concepción) que se tenga del fenómeno, identificar los atributos que lo caracterizan y determinar cuáles de ellos se van a incorporar en el modelo.*
- 2 *¿Cuáles son las leyes y relaciones en las que estará basado el modelo?*
- 3 *¿Qué tipo de ecuaciones resultan de la aplicación de estas leyes y relaciones*
- 4 *¿Cuál es el papel del tiempo, la distancia y la geometría en la formulación de un modelo?*
- 5 *¿Cuáles suposiciones y restricciones pueden emplearse para simplificar el modelo?*
- 6 *¿Qué tipo de información puede obtenerse de la solución del modelo?*

El primer punto arriba mencionado trata sobre los fundamentos con los que se cuenta para sustentar un modelo, esto puede involucrar el conocimiento de una suficiente cantidad de disciplinas como son la termodinámica, física, química, biología, entre otras. O incluso, si no se dispone de ningún antecedente científico previo, en ocasiones es conveniente recurrir a experimentos para obtener los parámetros o datos necesarios para completar el modelo. En los siguientes párrafos, se presentarán dos alternativas para el planteamiento de modelos matemáticos deterministas: el modelado basado en la observación y el basado en leyes de conservación.

2.6. Modelado basado en la observación

En este tipo de modelado, conocido también como *modelado empírico*, se infiere la expresión matemática que representa la realidad a partir de datos experimentales disponibles (Greshenfeld, 2011). El modelo puede usarse para caracterizar y clasificar datos, así como para hacer predicciones sobre nuevas mediciones. Su fundamento puede asociarse al pensamiento de Bacon (ver Sección 1.3.1). Sin embargo, no es posible afirmar que este modelo provenga de primeros principios (ver apartado sobre Aristóteles en el capítulo anterior). Para tener una visión más clara del modelado observacional se presenta a continuación un ejercicio de aproximación de funciones, donde se proponen diversos modelos en base al nivel de restricciones que se le asigne a la función.

Ejercicio de modelado basado sólo en la observación

El objetivo de este ejercicio consiste en desarrollar al menos dos modelos matemáticos que representen los datos de la Fig. 2.6-1 a partir de observaciones respecto a la forma de la distribución de datos, los cuales puede suponerse que corresponden a la distribución de una población de microorganismos en un medio de cultivo determinado; sin embargo, este tipo de distribución no es exclusiva para microorganismos. En la Fig. 2.6-1, la concentración se encuentra normalizada con respecto al valor máximo que alcanza a la mitad del tiempo adimensional τ .

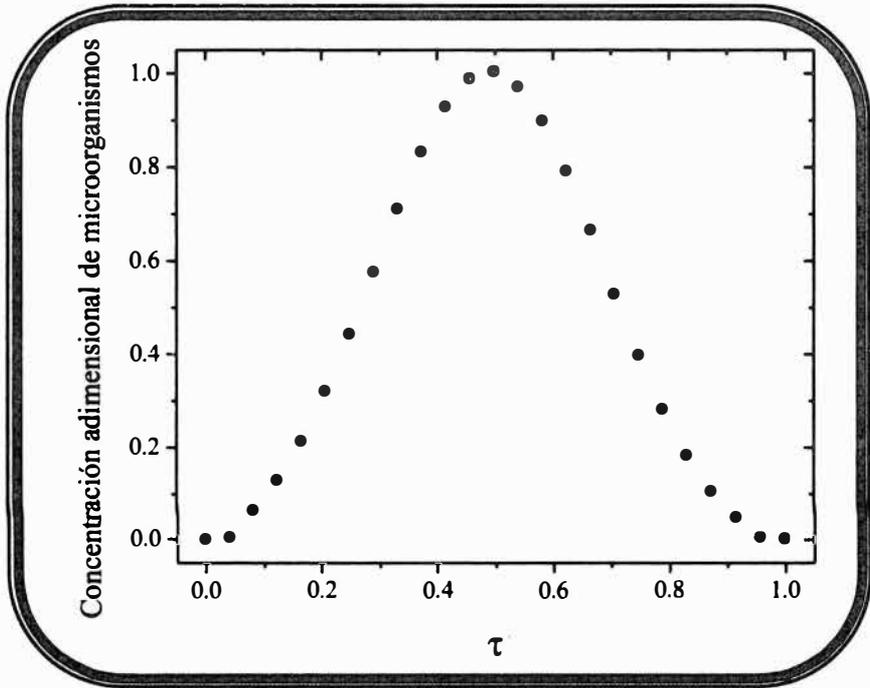


Figura 2.6-1: Ejemplo de distribución de concentración de microorganismos a lo largo de un tiempo adimensional τ .

Modelo 1

Como primera aproximación, se pueden notar tres características fundamentales en la Fig. 2.6-1: tanto en $\tau = 0$ como en $\tau = 1$ la concentración, y , es cero; además en $\tau = 0.5$ la concentración es máxima y vale la unidad. En otras palabras, el modelo matemático debe satisfacer al menos las siguientes tres restricciones

$$\text{En } \tau = 0, y = 0 \tag{2.6-1a}$$

$$\text{En } \tau = 0.5, y = 1 \tag{2.6-1b}$$

$$\text{En } \tau = 1, y = 0 \tag{2.6-1c}$$

Uno de los modelos matemáticos más sencillos es el polinomial y dado que se cuentan con tres restricciones es posible proponer el siguiente polinomio de segundo grado,

$$y = a_0 + a_1\tau + a_2\tau^2 \tag{2.6-2}$$

Para determinar las constantes a_0 , a_1 y a_2 , se utilizan las restricciones dadas por las ecs. (2.6-1), lo que da lugar al siguiente sistema de ecuaciones

$$0 = a_0 + 0a_1 + 0^2a_2 \tag{2.6-3a}$$

$$1 = a_0 + 0.5a_1 + 0.5^2a_2 \tag{2.6-3b}$$

$$0 = a_0 + a_1 + a_2 \tag{2.6-3c}$$

Cuya solución es $a_0 = 0$, $a_1 = 4$ y $a_2 = -4$. Por lo que la Ec. (2.6-2) es ahora

$$y = 4\tau(1 - \tau) \tag{2.6-4}$$

En la Fig. 2.6-2a), se muestra la comparación de los resultados presentados en la Fig. 2.6-1 con las predicciones de este modelo. Para contar con un parámetro cuantitativo de comparación, se define el porcentaje de error relativo como sigue

$$\%Error = \frac{|y_{\text{experimental}} - y_{\text{modelo}}|}{y_{\text{experimental}}} \times 100 \% \tag{2.6-5}$$

Los valores de este parámetro se grafican como función del tiempo en la Fig. 2.6-2b). Como puede notarse la comparación es únicamente aceptable

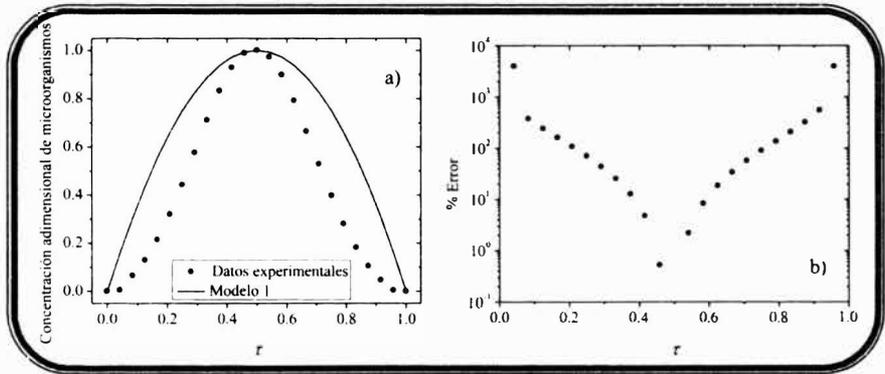


Figura 2.6-2: a) Comparación de los resultados de la Fig. 2.6-1 con los que proporciona el Modelo 1. b) Porcentaje de error del modelo respecto a los datos experimentales.

(es decir, con un porcentaje de error inferior al 10%) en los puntos cercanos a $\tau = 0.5$. Dado que el error crece hasta valores del orden de mil por ciento en dos puntos particulares no es sencillo hacer un estimado global respecto al desempeño del modelo. Para superar esta dificultad, es conveniente calcular las áreas bajo las curvas que se obtienen de los datos experimentales y del Modelo 1 (ver Problema 2.5). Las cuales son: para los datos experimentales 0.4425, mientras que para la ecuación (2.6-2) es,

$$\langle y \rangle = \int_0^1 4\tau(1-\tau) d\tau = \frac{2}{3} \approx 0.66667 \quad (2.6-6)$$

De esta forma, resulta que el porcentaje de error relativo es aproximadamente 50.5%.

Modelo 2

Las observaciones sobre la comparación del Modelo 1 con los datos experimentales sugieren analizar con más cuidado la Fig. 2.6-1 con el fin de extraer más información que ayude a mejorar el modelo. En las zonas cercanas a $\tau = 0$ y $\tau = 1$ puede notarse que los datos parecen seguir la tendencia de una

línea horizontal. Esto quiere decir que la pendiente de las rectas cercanas a estos puntos valen cero. Por lo que, haciendo uso de la definición geométrica de una derivada, se imponen las siguientes restricciones adicionales a las de las ecs. (2.6-1),

$$\text{En } \tau = 0, \quad \frac{dy}{d\tau} = 0 \quad (2.6-7a)$$

$$\text{En } \tau = 1, \quad \frac{dy}{d\tau} = 0 \quad (2.6-7b)$$

De esta forma, se cuentan con cinco restricciones para el modelo, lo que sugiere usar un polinomio de cuarto orden,

$$y = b_0 + b_1\tau + b_2\tau^2 + b_3\tau^3 + b_4\tau^4 \quad (2.6-8)$$

Cuya primera derivada es

$$\frac{dy}{d\tau} = b_1 + 2b_2\tau + 3b_3\tau^2 + 4b_4\tau^3 \quad (2.6-9)$$

Así, los coeficientes b_0, b_1, \dots, b_4 pueden determinarse a partir de la solución del siguiente sistema de ecuaciones

$$0 = b_0 + 0b_1 + 0^2b_2 + 0^3b_3 + 0^4b_4 \quad (2.6-10a)$$

$$1 = b_0 + 0.5b_1 + 0.5^2b_2 + 0.5^3b_3 + 0.5^4b_4 \quad (2.6-10b)$$

$$0 = b_0 + b_1 + b_2 + b_3 + b_4 \quad (2.6-10c)$$

$$0 = b_1 + 0(2b_2) + 0^2(3b_3) + 0^3(4b_4) \quad (2.6-10d)$$

$$0 = b_1 + 2b_2 + 3b_3 + 4b_4 \quad (2.6-10e)$$

La solución de este sistema es $b_0 = b_1 = 0, b_2 = 16, b_3 = -32, b_4 = 16$. De manera que la Ec. (2.6-8) puede expresarse como sigue:

$$y = 16\tau^2(\tau - 1)^2 \quad (2.6-11)$$

Los resultados de evaluar la Ec. (2.6-11) se muestran en la Fig. 2.6-3a). Como se puede notar, la diferencia entre los datos experimentales y la predicción del modelo ha disminuido considerablemente con respecto a lo mostrado en la Fig. 2.6-2a). De hecho, los resultados obtenidos del porcentaje de error ya no muestran de manera tan marcada el crecimiento lineal de la Fig.

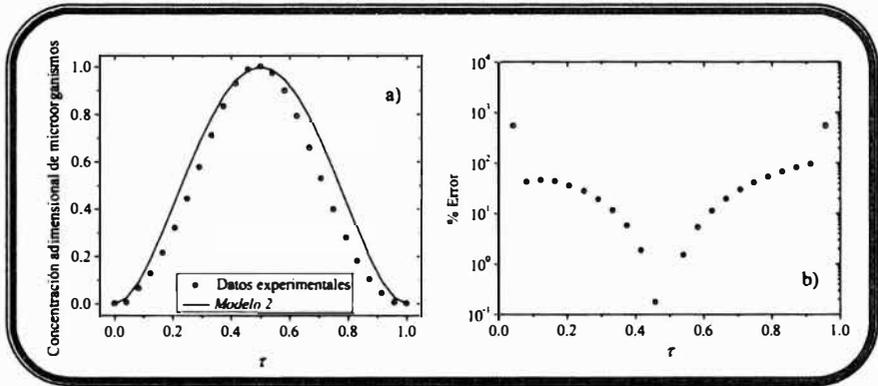


Figura 2.6-3: a) Comparación de los resultados de la Fig. 2.6-1 con los que proporciona el Modelo 2, b) Porcentaje de error del modelo respecto a los datos experimentales.

2.6-2b). Además, exceptuando los puntos extremos notados anteriormente, los valores del error son inferiores al cien por ciento. En este caso, el valor del área bajo la curva resultante de la Ec. (2.6-11) está dado por

$$\langle y \rangle = \int_0^1 16\tau^2(\tau - 1)^2 d\tau = \frac{8}{15} \approx 0.5333 \quad (2.6-12)$$

Comparando este valor con el que corresponde a los datos experimentales resulta que el error es ahora de 20.4 %, es decir, se redujo un poco más de la mitad respecto al modelo anterior. Por supuesto, si se desea reducir aún más el error se deberán utilizar modelos más sofisticados y técnicas estadísticas como mínimos cuadrados (ver, por ejemplo los Capítulos 3 y 8 de Burden y Faires, 2011). Como puede notarse, en ocasiones la observación es de gran ayuda en el planteamiento y mejoramiento de modelos (Problema 2.6). Sin embargo, no debe perderse de vista que si no se tiene un entendimiento de la situación física estudiada, el contar con uno u otro modelo que represente los datos no es suficiente. En otras palabras, aún si se encuentra una expresión matemática que represente los datos experimentales con un mínimo de error, esto no es una condición suficiente para afirmar que es la única expresión que los represente o que dicho modelo tenga sentido físicamente, aunque pueden darse

excepciones (ver Problema 2.7). Ante esto existen dos posiciones opuestas: la primera es el *principio de longitud mínima de descripción* (Rissanen, 1986) y la segunda es la *teoría de información algorítmica* (Chaitin, 1990), en la cual se busca modelar usando la totalidad de información disponible. El óptimo está claramente en medio de ambos extremos; sin embargo, encontrar dicho modelo no es necesariamente una tarea trivial. En casos en los que no se cuenta con una teoría que permita formular modelos que representen los datos experimentales, el modelado basado en la observación podría ser la mejor alternativa a seguir.

En síntesis, las ecuaciones que constituyen un modelo observacional no son necesariamente físicamente consistentes y carecen de generalidad pues, en general, son sólo aplicables a las condiciones del experimento que reproducen. El precio a pagar por su alto poder predictivo es su escasa capacidad explicativa del sistema bajo análisis⁵. Su contraparte son los modelos basados en leyes físicas⁶, a los cuales estará orientado el resto de este texto. Los modelos físicos se suelen regir por leyes de conservación como se verá en la siguiente sección. Un punto intermedio lo constituyen los *modelos conceptuales*⁷, en los cuales el sistema a estudiar se descompone en sus componentes que se analizan mediante modelos empíricos pero cuya integración se basa en principios físicos. Estos modelos involucran un alto grado de abstracción concentrándose en los aspectos de las partes o categorías propuestas que son fundamentales para la comprensión del objeto de análisis. Un ejemplo de este tipo de modelos es el modelo atómico de Bohr. Los modelos conceptuales se clasifican en aquellos que se refieren a sistemas aislados (como un átomo) y los que se refieren a grupos de sistemas (como las moléculas).

Existen algunos casos de modelos matemáticos ampliamente usados en ingeniería cuyos coeficientes pueden predecirse a partir del ajuste de datos experimentales (enfoque *a posteriori*) o bien a partir de desarrollos teóricos (enfoque *a priori*). En ambos casos es crucial contar con datos experimentales confiables para validar el modelo. Por ejemplo, para modelar la dispersión de un soluto que se transporta a través de un medio poroso se utiliza la siguiente

⁵En algunos casos se les conoce como *modelos de caja negra*.

⁶En algunos casos se les conoce como *modelos de caja blanca*.

⁷En algunos casos se les conoce como modelos de caja gris o modelos de datos.

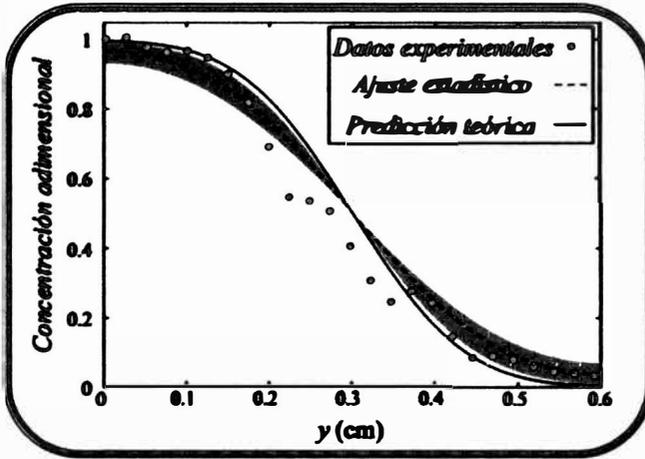


Figura 2.6-4: Comparación de los perfiles de concentración experimentales reportados por Long y Ford (2009) para un trazador inerte a 5m/s a través de un medio poroso homogéneo con las predicciones obtenidas con ajustes estadísticos y con el método del promedio volumétrico reportadas por Porter *y col.* (2010). La zona gris representa los intervalos de 98 % de confianza asociados con los ajustes estadísticos.

ecuación diferencial (ver Capítulo 3 en Whitaker, 1999)

$$\frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_\gamma \rangle^\gamma \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma = \nabla \cdot (\mathbf{D}_A^* \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma) \quad (2.6-13)$$

en donde $\langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma$ y $\langle \mathbf{v}_\gamma \rangle^\gamma$ representan la concentración del soluto y la velocidad del fluido promediadas en muestras representativas del medio poroso. El coeficiente que debe capturar los detalles esenciales de la microestructura del sistema es el coeficiente de dispersión (\mathbf{D}_A^*) el cual puede calcularse de manera teórica o bien puede considerarse como parámetro ajustable para representar datos experimentales.

En la Fig. 2.6-4 se muestra una comparación de los perfiles de concentración obtenidos experimentalmente por Long y Ford (2009) y las predicciones teóricas reportadas por Porter *y col.* (2010) utilizando los enfoques *a priori*

y *a posteriori*. En dicha figura se incluye la zona del intervalo de confianza del ajuste estadístico (región en gris). Como puede notarse, ambos enfoques reproducen de manera satisfactoria la mayoría de los datos experimentales; de hecho, las predicciones teóricas se encuentran dentro del rango del intervalo de confianza de los ajustes estadísticos. Por lo anterior, puede deducirse que, en este caso, la elección de un enfoque de modelado sobre otro es una elección al gusto del usuario pues ambas son razonablemente confiables.

2.7. Modelos basados en leyes de conservación

En ciencias básicas e ingeniería, las leyes físicas que se utilizan para describir sistemas a diversos niveles de descripción son leyes de tipo conservativas. Las cuales, en una buena parte, son leyes de conservación de masa, energía y cantidad de movimiento. Las semejanzas entre estas *leyes básicas* han sido remarcadas por varios autores (*cf.* Bird *y col.*, 2007) y se pueden resumir, en forma tal vez demasiado general, como sigue

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Tasa de} \\ \text{entrada de } \xi \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{Tasa de} \\ \text{salida de } \xi \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Tasa de} \\ \text{generación de } \xi \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{Tasa de} \\ \text{consumo de } \xi \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Tasa de} \\ \text{acumulación de } \xi \end{array} \right\} \quad (2.7-1)$$

donde ξ puede representar masa, energía o cantidad de movimiento. La aplicación de estas leyes de conservación a un sistema determinado lleva a ecuaciones que se suelen llamar *ecuaciones de balance*⁸. De esta manera, es posible desarrollar modelos matemáticos a partir de la aplicación de un balance de materia, energía o cantidad de movimiento (o incluso combinaciones de ellos) a un sistema en particular. Al estudio de los modelos resultantes de dichos balances se le conoce como *Fenómenos de transporte* (Bird *y col.*, 2007). En los siguientes párrafos se desarrollarán las ecuaciones correspondientes a la conservación de masa, cantidad de movimiento y

⁸La palabra balance se usa en el mismo sentido que en contaduría, esto es: los ingresos menos las pérdidas dan como resultado el cambio neto del capital (Herrera y Pinder, 2012).

energía. Como todo el material de este libro, la presentación es meramente introductora, al lector interesado en una descripción más detallada se le recomienda los textos de Whitaker (1983, 1992) y Bird *y col.* (2007).

2.7.1. Conservación de masa

Si se trata con sistemas no relativistas, el principio de conservación de masa puede enunciarse como sigue (Callen, 1985):

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{La razón de cambio en el tiempo} \\ \text{de la masa de un cuerpo} \end{array} \right\} = 0 \quad (2.7-2)$$

Comparando este enunciado con la ecuación de balance proporcionada anteriormente (Ec. 2.7-1), se puede concluir que no hay entradas ni salidas en el sistema y que las tasas de generación y consumo de la masa de un cuerpo se deben cancelar entre sí. Lo anterior, es otra forma de enunciar que *la masa de un cuerpo no se crea ni se destruye, sólo se transforma*.

Para expresar la Ec. (2.7-2) en lenguaje matemático, se empieza por definir la masa, m , de un cuerpo como la integral de todos los diferenciales de masa que componen al cuerpo,

$$m = \int_{\mathcal{V}_m} dm \quad (2.7-3)$$

donde \mathcal{V}_m denota el dominio en el espacio ocupado por el cuerpo y se conoce como volumen material y tiene las siguientes propiedades (Whitaker, 1992):

- Puede (o no) tener una forma que cambie continuamente con el tiempo.
- No permite intercambio de masa con el entorno.
- Cualquier punto en un volumen material se mueve a la velocidad, \mathbf{v} , del fluido que tenga contenido.

El diferencial de masa, dm está relacionado con la densidad mediante

$$dm = \rho dV \quad (2.7-4)$$

Por lo que la Ec. (2.7-3) puede expresarse como sigue,

$$m = \int_{\mathcal{V}_m} \rho \, dV \tag{2.7-5}$$

Además, la forma de representar matemáticamente a la *razón de cambio en el tiempo* de cualquier cantidad es mediante la primera derivada con respecto del tiempo. Tomando en cuenta lo anterior, es posible escribir en lenguaje matemático a la Ec. (2.7-2) como sigue,

$$\frac{dm}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_m} \rho \, dV = 0 \tag{2.7-6}$$

Para poder avanzar, es necesario intercambiar los operadores de diferenciación e integración; sin embargo, como el volumen material puede ser función del tiempo, dicho intercambio no puede hacerse de manera directa. Para ello, se recurre al teorema general del transporte (la deducción de este teorema puede encontrarse en varias referencias como en la Sección 5.1 del libro de Whitaker, 1983),

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_a} \psi \, dV = \int_{\mathcal{V}_a} \left[\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\psi \mathbf{w}) \right] \, dV \tag{2.7-7}$$

donde ψ es cualquier propiedad continua, \mathbf{w} es una velocidad arbitraria y \mathcal{V}_a es una región de integración arbitraria. Para la situación estudiada se tiene que: $\psi = \rho$, $\mathcal{V}_a = \mathcal{V}_m$ y $\mathbf{w} = \mathbf{v}$. De esta forma, la Ec. (2.7-6) toma la forma,

$$\int_{\mathcal{V}_m} \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \right] \, dV = 0 \tag{2.7-8}$$

En este momento, cabe preguntarse, ¿bajo qué condiciones es el resultado de una integral cero?, algunas posibilidades son: 1) cuando el integrando es cero, 2) cuando los límites de integración son iguales, 3) cuando se integra en un punto. Dado que el volumen del cuerpo no es un punto y sus límites son iguales, se deduce que el integrando debe ser cero; por lo tanto,

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0} \tag{2.7-9}$$

La cual se conoce como *ecuación de continuidad* y es una forma matemática de expresar que la masa de un cuerpo se conserva. El vector de velocidad \mathbf{v} en la Ec. (2.7-9) puede determinarse a partir de la ecuación de conservación de cantidad de movimiento como se verá más adelante.

Vale la pena notar que, para casos en los que la densidad no cambie en la posición ni en el tiempo⁹, la Ec. (2.7-9) se reduce a

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2.7-10)$$

Para concluir este apartado, es conveniente listar los pasos que se siguieron para obtener la ecuación de continuidad:

- 1 *Se escribió el principio de conservación en una ecuación con palabras.*
- 2 *Se tradujo la ecuación del punto anterior al lenguaje matemático.*
- 3 *Se buscó obtener una ecuación que estuviera expresada en la forma de una integral de volumen igualada a cero.*
- 4 *Al concluir que el integrando de la ecuación del punto anterior debe ser cero, se obtuvo la ecuación buscada.*

Este procedimiento se utilizará en los siguientes apartados para deducir el resto de las ecuaciones de conservación.

2.7.2. Conservación de masa de una especie

Suponga ahora que el cuerpo está compuesto por un número determinado, N , de especies químicas, cada una de ellas con una densidad, ρ_A , y velocidad, \mathbf{v}_A , distintas ($A = 1, \dots, N$). La densidad de una especie está relacionada a la densidad, ρ , de la mezcla mediante la fracción peso ω_A , de acuerdo a la expresión (Bird *y col.*, 2007)

$$\rho_A = \omega_A \rho \quad (2.7-11)$$

⁹Como es el caso de algunos fluidos y sólidos a ciertas condiciones de temperatura y presión.

De la misma forma, la velocidad del fluido en el apartado anterior, también se conoce como *velocidad promedio de masa* y puede expresarse en términos de las velocidades de las distintas especies químicas como sigue:

$$\mathbf{v} = \sum_{A=1}^{A=N} \omega_A \mathbf{v}_A \tag{2.7-12}$$

A diferencia de lo expuesto en el apartado anterior, una especie química si puede crearse o destruirse en un sistema, a partir de reacciones químicas. Entonces, una forma de expresar el balance de masa de una especie química es el siguiente:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{La razón de cambio en el tiempo} \\ \text{de la masa de una especie } A \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{La tasa de generación} \\ \text{y/o consumo de la especie } A \end{array} \right\} \tag{2.7-13}$$

Denotando a la tasa de generación y/o consumo de masa de la especie A en cualquier punto del sistema como r_A [=] $\text{kg/m}^3\text{s}$; entonces, en base a los desarrollos anteriores, es posible expresar a la Ec. (2.7-13) en lenguaje matemático como sigue:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_m} \rho_A dV = \int_{\mathcal{V}_m} r_A dV \tag{2.7-14}$$

Note que si $r_A > 0$ se genera masa y si $r_A < 0$ se consume masa. De acuerdo a Whitaker (2009b), la Ec. (2.7-14) corresponde al primer axioma del transporte de masa en sistemas multicomponentes. El segundo axioma requiere que la suma de las tasas de generación y consumo de las diversas especies químicas sea cero, es decir,

$$\sum_{A=1}^{A=N} r_A = 0 \tag{2.7-15}$$

Utilizando el teorema general del transporte en el lado izquierdo de la Ec. (2.7-14), tomando en cuenta que la velocidad \mathbf{w} es, en este caso, igual a la velocidad de cada especie \mathbf{v}_A , resulta que

$$\int_{\mathcal{V}_m} \left[\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_A \mathbf{v}_A) - r_A \right] dV = 0 \tag{2.7-16}$$

Como en el caso anterior, se deduce que la razón por la cual la integral es cero, se debe a que el integrando es cero y por tanto

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_A \mathbf{v}_A) = r_A \quad (2.7-17)$$

la cual se conoce como la ecuación de continuidad de una especie y puede utilizarse para deducir la ecuación de continuidad de una mezcla (ver Problema 2.10). Para desarrollar más este resultado, se puede descomponer a la velocidad \mathbf{v}_A en términos de la velocidad promedio de masa (o bien, la velocidad convectiva), \mathbf{v} , y la velocidad difusiva \mathbf{u}_A ,

$$\mathbf{v}_A = \mathbf{v} + \mathbf{u}_A \quad (2.7-18)$$

De manera general, el transporte por convección es el que se origina debido al movimiento global de un fluido, mientras que el transporte difusivo se da por interacciones a escala molecular (ver Problema 2.17). De esta forma, la Ec. (2.7-17) puede escribirse como sigue

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_A \mathbf{v}) + \nabla \cdot \mathbf{j}_A = r_A \quad (2.7-19)$$

donde se usó la definición de la densidad de flujo (o *flux*) difusiva en base másica (Bird y col., 2007),

$$\mathbf{j}_A = \rho_A \mathbf{u}_A \quad (2.7-20)$$

Sin embargo, en muchas aplicaciones que involucran transporte y reacción, la masa se cuantifica en términos de concentraciones molares, es decir,

$$c_A = \frac{\rho_A}{M_A} \quad (2.7-21)$$

siendo M_A el peso molecular de la especie A , el cual es una constante. De esta forma, al dividir ambos lados de la Ec. (2.7-19) por M_A , se obtiene la forma de la ecuación de continuidad para una especie química en base molar,

$$\boxed{\frac{\partial c_A}{\partial t} + \nabla \cdot (c_A \mathbf{v}) + \nabla \cdot \mathbf{J}_A = R_A} \quad (2.7-22)$$

donde $\mathbf{J}_A = \mathbf{j}_A/M_A$ y $R_A = r_A/M_A$ representan la densidad de flujo de masa y el término de generación o consumo de masa en base molar, respectivamente.

2.7.3. Conservación de cantidad de movimiento

Para deducir las ecuaciones correspondientes a este tipo de transporte, es conveniente seguir los desarrollos de Whitaker (2009a) y comenzar con la primera ley de Euler, la cual contiene a las tres leyes de la mecánica Newtoniana y puede resumirse en la siguiente ecuación con palabras:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{La razón de cambio en el tiempo de la} \\ \text{cantidad de movimiento lineal de un cuerpo} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Las fuerzas que ac-} \\ \text{tuán sobre el cuerpo} \end{array} \right\} \quad (2.7-23)$$

El cual es un balance de cantidad de movimiento lineal¹⁰; esta propiedad se define como el producto de la masa por la velocidad, de esta forma,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{La razón de cambio en el tiempo de la} \\ \text{cantidad de movimiento angular de un cuerpo} \end{array} \right\} = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_m} \rho \mathbf{v} dV \quad (2.7-24)$$

Por otro lado, las fuerzas que actúan sobre un cuerpo pueden dividirse en fuerzas volumétricas y superficiales. Denotando por \mathbf{b} a la fuerza que actúa sobre todo el cuerpo por unidad de masa y por $\mathbf{t}_{(n)}$ a la fuerza superficial por unidad de área¹¹, se tiene entonces que

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Las fuerzas que actúan} \\ \text{sobre el cuerpo} \end{array} \right\} = \int_{\mathcal{V}_m} \rho \mathbf{b} dV + \int_{\mathcal{A}_m} \mathbf{t}_{(n)} dA \quad (2.7-25)$$

El vector de esfuerzos puede escribirse en términos del tensor de esfuerzos \mathbf{T} , mediante el teorema fundamental de Cauchy (la deducción de este teorema está disponible en varias fuentes, como en el Apéndice D del trabajo de Whitaker, 2009a),

$$\mathbf{t}_{(n)} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} \quad (2.7-26)$$

donde \mathbf{n} es el vector unitario normal a la superficie del cuerpo. Con estos desarrollos, se puede expresar en lenguaje matemático la primera ley de Euler (Ec. 2.7-23) como sigue

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_m} \rho \mathbf{v} dV = \int_{\mathcal{V}_m} \rho \mathbf{b} dV + \int_{\mathcal{A}_m} \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} dA \quad (2.7-27)$$

¹⁰También conocida como *momento*.

¹¹También conocido como *vector de esfuerzos* (Whitaker, 1992).

Al igual que en los casos anteriores, se busca agrupar a todos los términos de la ecuación anterior en una sola integral de volumen. Para intercambiar diferenciación e integración en el término del lado izquierdo de la ecuación anterior, se utiliza el teorema general del transporte y se toma en cuenta la ecuación de continuidad, para así obtener (ver Problema 2.11),

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_m} \rho \mathbf{v} \, dV = \int_{\mathcal{V}_m} \rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right] \, dV \quad (2.7-28)$$

Por otro lado, para convertir la integral de superficie en el último término de la Ec. (2.7-27) a una integral de volumen, se recurre al teorema de la divergencia (ver, por ejemplo, el texto de Aris, 1990),

$$\int_{\mathcal{A}_m} \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} \, dA = \int_{\mathcal{V}_m} \nabla \cdot \mathbf{T} \, dV \quad (2.7-29)$$

Sustituyendo las ecs. (2.7-28) y (2.7-29) en la Ec. (2.7-27), resulta lo siguiente

$$\int_{\mathcal{V}_m} \left[\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) - \rho \mathbf{b} - \nabla \cdot \mathbf{T} \right] \, dV = 0 \quad (2.7-30)$$

De donde se extrae finalmente, la ecuación de conservación de cantidad de movimiento,

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = \rho \mathbf{b} + \nabla \cdot \mathbf{T} \quad (2.7-31)$$

Para los desarrollos que se presentarán más adelante, es conveniente mostrar el resultado de llevar a cabo el producto punto con el vector de velocidad en ambos lados de la ecuación anterior, el cual se puede escribir como sigue

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) \cdot \mathbf{v} = \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} + (\nabla \cdot \mathbf{T}) \cdot \mathbf{v} \quad (2.7-32)$$

Esta es la *ecuación de energía mecánica* (Bird y col., 2007) y para expresarla en una forma más conveniente, se utilizan las siguientes identidades (Problema 2.13)

$$\left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) \cdot \mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} v^2 \right) + \mathbf{v} \cdot \nabla \left(\frac{1}{2} v^2 \right) \quad (2.7-33a)$$

$$(\nabla \cdot \mathbf{T}) \cdot \mathbf{v} = \nabla \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) - \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v} \quad (2.7-33b)$$

De manera que la Ec. (2.7-32) puede escribirse como sigue,

$$\rho \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} v^2 \right) + \mathbf{v} \cdot \nabla \left(\frac{1}{2} v^2 \right) \right] = \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) - \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v} \quad (2.7-34)$$

Esta ecuación será usada en la siguiente sección para deducir la ecuación de energía térmica. Para concluir este apartado, es conveniente retomar el balance de cantidad de movimiento y considerar casos en los que la gravedad sea la principal fuerza volumétrica actuando sobre el sistema. Bajo estas circunstancias, se puede reemplazar \mathbf{b} por el vector de gravedad \mathbf{g} . Más aún, para flujos de Stokes (Aris, 1990), el tensor de esfuerzos puede descomponerse en términos de la presión termodinámica, p , y el tensor de esfuerzos viscosos $\boldsymbol{\tau}$ como sigue:

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} - \boldsymbol{\tau} \quad (2.7-35)$$

donde \mathbf{I} es el tensor identidad. Bajo estas condiciones, la Ec. (2.7-31) toma la siguiente forma,

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = -\nabla p + \rho \mathbf{g} \quad (2.7-36)$$

la cual se conoce como *ecuación de movimiento de Cauchy* (Whitaker, 1992).

2.7.4. Conservación de energía

El principio fundamental de conservación de energía es la primera ley de la termodinámica y puede enunciarse como sigue (Whitaker, 1983)

$$\begin{aligned} & \left\{ \begin{array}{l} \text{La razón de cambio en el tiempo de la} \\ \text{energía interna y cinética de un cuerpo} \end{array} \right\} \\ = & \left\{ \begin{array}{l} \text{La tasa a la cual se suministra energía} \\ \text{al cuerpo por calor y trabajo} \end{array} \right\} \\ + & \left\{ \begin{array}{l} \text{La tasa a la cual se suministra energía} \\ \text{al cuerpo por radiación} \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (2.7-37)$$

Para escribir la ecuación anterior en lenguaje matemático, se denotará a la energía interna por unidad de volumen y masa como e , mientras que la energía cinética por unidad de volumen y masa será $v^2/2$. Entonces, siguiendo un procedimiento similar al usado en los desarrollos anteriores, se puede expresar al término del lado izquierdo de la ecuación anterior como

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{La razón de cambio en el tiempo de la} \\ \text{energía interna y cinética de un cuerpo} \end{array} \right\} = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_m} \left(\rho e + \frac{1}{2} \rho v^2 \right) dV \quad (2.7-38a)$$

Por otro lado, la energía suministrada en forma de calor o por medio de radiación es recibida por la superficie del cuerpo. Por lo que si se denota por \mathbf{q} y \mathbf{q}_R a la densidad de flujo (o *flux*) de calor y de radiación hacia el cuerpo, se tiene entonces que

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{La tasa a la cual se suministra energía} \\ \text{al cuerpo por calor y radiación} \end{array} \right\} = - \int_{\mathcal{A}_m} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_R) dA \quad (2.7-38b)$$

donde el signo negativo se debe a que el vector unitario, \mathbf{n} , está dirigido hacia fuera del cuerpo, mientras que los flujos de calor van dirigidos hacia dentro del cuerpo. Como se mostró en la sección anterior, las fuerzas ejercidas sobre un cuerpo pueden ser volumétricas y superficiales, por lo que la tasa a la cual se ejerce trabajo sobre el cuerpo puede expresarse a su vez como

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{La tasa a la cual se suministra energía} \\ \text{al cuerpo por trabajo} \end{array} \right\} = \underbrace{\int_{\mathcal{A}_m} \mathbf{t}_{(n)} \cdot \mathbf{v} dA}_{\text{trabajo superficial}} + \underbrace{\int_{\mathcal{V}_m} \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} dV}_{\text{trabajo volumétrico}} \quad (2.7-38c)$$

Sustituyendo las ecs. (2.7-38) en la Ec. (2.7-37), da como resultado,

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_m} \left(\rho e + \frac{1}{2} \rho v^2 \right) dV = \int_{\mathcal{A}_m} \mathbf{n} \cdot (-\mathbf{q} - \mathbf{q}_R + \mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) dA + \int_{\mathcal{V}_m} \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} dV \quad (2.7-39)$$

donde se utilizó el teorema fundamental de Cauchy (Ec. 2.7-26). Con el fin de expresar la ecuación anterior como una integral de volumen igualada a cero, se utiliza el teorema general del transporte en el término del lado izquierdo, lo que da como resultado

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_m} \left(\rho e + \frac{1}{2} \rho v^2 \right) dV = \int_{\mathcal{V}_m} \rho \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) + \mathbf{v} \cdot \nabla \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) \right] dV \quad (2.7-40a)$$

donde, al igual que en la Sección 2.7.3, se tomó en cuenta la ecuación de continuidad.

Por otro lado, utilizando el teorema de la divergencia en el primer término en el lado derecho de la Ec. (2.7-39), da como resultado

$$\int_{\mathcal{A}_m} \mathbf{n} \cdot (-\mathbf{q} - \mathbf{q}_R + \mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) dA = \int_{\mathcal{V}_m} \nabla \cdot (-\mathbf{q} - \mathbf{q}_R + \mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) dV \quad (2.7-40b)$$

El resultado de sustituir las ecs. (2.7-40) en la Ec. (2.7-39) es la siguiente expresión,

$$\int_{\mathcal{V}_m} \left\{ \rho \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) + \mathbf{v} \cdot \nabla \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) \right] + \nabla \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_R - \mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) - \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \right\} dV = 0 \quad (2.7-41)$$

De donde se extrae la *ecuación de energía total* (Bird y col., 2007)

$$\rho \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) + \mathbf{v} \cdot \nabla \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) \right] = -\nabla \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_R) + \nabla \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) + \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \quad (2.7-42)$$

A pesar de la estructura que posee, el significado físico de la ecuación permanece intacto, pues el lado izquierdo de la ecuación anterior representa

la razón de cambio de la energía interna y cinética de un cuerpo, mientras que el primer término del lado derecho es la tasa a la cual se suministra calor y los últimos dos términos se refieren al trabajo realizado sobre el sistema. Más aún, de la ecuación de energía mecánica (Ec. 2.7-34) deducida anteriormente, se tiene que

$$\nabla \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) + \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} = \rho \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} v^2 \right) + \mathbf{v} \cdot \nabla \left(\frac{1}{2} v^2 \right) \right] + \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v} \quad (2.7-43)$$

lo que permite reducir la Ec. (2.7-42) a la siguiente expresión

$$\rho \left[\frac{\partial e}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla e \right] = -\nabla \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_R) + \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v} \quad (2.7-44)$$

la cual se conoce como la *ecuación de energía térmica*.

Al igual que en la sección anterior, para el caso de flujo de Stokes, se puede descomponer al tensor de esfuerzos como se indica en la Ec. (2.7-35) para expresar a la Ec. (2.7-44) como

$$\rho \frac{De}{Dt} = -\nabla \cdot \mathbf{q} - p \nabla \cdot \mathbf{v} - \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{q}_R \quad (2.7-45)$$

donde, para hacer la notación más breve, se utilizó la definición de la derivada material (Bird *y col.*, 2007)

$$\frac{De}{Dt} = \frac{\partial e}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla e \quad (2.7-46)$$

Usando esta derivada, la ecuación de continuidad toma la siguiente forma (Problema 2.12),

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2.7-47)$$

Con el fin de expresar al lado izquierdo de la Ec. (2.7-45) en función de la temperatura del cuerpo, se recurre a la definición de entalpía por unidad de masa (Callen, 1985):

$$h = e + \frac{p}{\rho} \quad (2.7-48)$$

Aplicando el operador de derivada material en ambos lados de la ecuación anterior da como resultado

$$\frac{Dh}{Dt} = \frac{De}{Dt} + \frac{1}{\rho} \frac{Dp}{Dt} - \frac{p}{\rho^2} \frac{D\rho}{Dt} \quad (2.7-49)$$

Despejando de la ecuación anterior el término $\frac{De}{Dt}$ y, tomando en cuenta la forma de la ecuación de continuidad dada en la Ec. (2.7-47), se obtiene el siguiente resultado

$$\frac{De}{Dt} = \frac{Dh}{Dt} - \frac{1}{\rho} \frac{Dp}{Dt} - \frac{p}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (2.7-50)$$

Sustituyendo la expresión anterior en la Ec. (2.7-45), da lugar a

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = -\nabla \cdot \mathbf{q} - \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} + \frac{Dp}{Dt} - \nabla \cdot \mathbf{q}_R \quad (2.7-51)$$

Por último, de cualquier texto de termodinámica (ver, por ejemplo Callen, 1985) se sabe que la entalpía es función de la temperatura y la presión, y dicha dependencia puede expresarse como sigue

$$\frac{Dh}{Dt} = C_p \frac{DT}{Dt} + \frac{1}{\rho} (1 - T\beta) \frac{Dp}{Dt} \quad (2.7-52)$$

donde C_p y β son la capacidad calorífica a presión constante y el coeficiente de expansión térmica, respectivamente. Sustituyendo la Ec. (2.7-52) en la Ec. (2.7-51) permite llegar a la siguiente expresión

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \Phi \quad (2.7-53)$$

Para hacer más breve esta expresión se utilizó la siguiente definición

$$\Phi = -\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} + T\beta \frac{Dp}{Dt} - \nabla \cdot \mathbf{q}_R \quad (2.7-54)$$

Como en el caso de la conservación de masa para una especie química, note que si $\Phi > 0$, existe generación de calor en el sistema y si $\Phi < 0$ el sistema tiene pérdidas de calor.

Para concluir esta sección, es conveniente resumir las ecuaciones de conservación desarrolladas en los párrafos anteriores como sigue:

Transporte de masa

$$\underbrace{\frac{\partial \rho}{\partial t}}_{\text{acumulación}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \mathbf{v})}_{\text{transporte total}} = 0 \quad (2.7-55a)$$

Transporte de una especie

$$\underbrace{\frac{\partial c_A}{\partial t}}_{\text{acumulación}} + \underbrace{\nabla \cdot (c_A \mathbf{v})}_{\text{transporte convectivo}} + \underbrace{\nabla \cdot \mathbf{J}_A}_{\text{transporte difusivo}} = \underbrace{R_A}_{\text{generación o consumo}} \quad (2.7-55b)$$

Transporte de cantidad de movimiento

$$\underbrace{\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}}_{\text{acumulación}} + \underbrace{\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}}_{\text{transporte convectivo}} + \underbrace{\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}}_{\text{transporte difusivo}} = \underbrace{-\nabla p}_{\text{fuerzas superficiales}} + \underbrace{\rho \mathbf{g}}_{\text{fuerzas volumétricas}} \quad (2.7-55c)$$

Transporte de energía

$$\underbrace{\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t}}_{\text{acumulación}} + \underbrace{\rho C_p \mathbf{v} \cdot \nabla T}_{\text{transporte convectivo}} + \underbrace{\nabla \cdot \mathbf{q}}_{\text{transporte difusivo}} = \underbrace{\Phi}_{\text{generación o consumo}} \quad (2.7-55d)$$

Como puede observarse, las ecs. (2.7-55) comparten la misma estructura. Más aún, los términos de entrada y salida se asocian con el transporte convectivo y difusivo¹². De hecho, se puede extender esta afirmación a cualquier cantidad que sea conservativa. Por ejemplo, en el siguiente capítulo se aplica una ecuación similar a la Ec. (2.7-1) para plantear un modelo matemático del amor.

2.7.5. Relaciones constitutivas auxiliares

El planteamiento de un modelo no está, por lo general, completo con el planteamiento de ecuaciones de balance, esto debido a que es deseable contar con ecuaciones que involucren una variable dependiente y una (o más) variables independientes, aunque esto no siempre es posible. Para cumplir con este objetivo se utilizan relaciones constitutivas auxiliares. Por ejemplo, las leyes de Newton, Fourier y de Fick relacionan el esfuerzo de corte, τ , la densidad de flujo difusivo de masa, \mathbf{J}_A , y la densidad de flujo conductivo de calor, \mathbf{q} , con las variables dependientes en las ecs. (2.7-55); es decir, con la velocidad \mathbf{v} , concentración, c_A y temperatura T , respectivamente y se expresan como sigue:

$$\tau = -\mu \nabla v \tag{2.7-56a}$$

$$\mathbf{q} = -k \nabla T \tag{2.7-56b}$$

$$\mathbf{J}_A = -\mathcal{D}_A \nabla c_A \tag{2.7-56c}$$

donde μ , k y \mathcal{D}_A son los coeficientes de viscosidad, conductividad térmica y de difusión molecular, respectivamente. Es interesante notar la similitud en la estructura matemática de estas expresiones a pesar de que denotan distintos aspectos físicos. Sustituyendo las ecs. (2.7-56) en los términos correspondientes de las ecs. (2.7-55) da como resultado la siguiente forma de las ecuaciones de balance:

¹²En la literatura es común llamar al término de difusión de calor como *conducción de calor* y a la difusión de transporte de cantidad de movimiento como *esfuerzos viscosos*. Sin embargo, en este texto se conservará la notación de difusión para mantener la nomenclatura lo más simple y uniforme posible.

$$\begin{array}{l} \text{Transporte de} \\ \text{cantidad de} \\ \text{movimiento} \end{array} \quad \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \mu \nabla^2 \mathbf{v} \quad (2.7-57a)$$

$$\begin{array}{l} \text{Transporte de} \\ \text{energía} \end{array} \quad \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \mathbf{v} \cdot \nabla T = k \nabla^2 T + \Phi \quad (2.7-57b)$$

$$\begin{array}{l} \text{Transporte de} \\ \text{una especie} \end{array} \quad \frac{\partial c_A}{\partial t} + \nabla \cdot (c_A \mathbf{v}) = \mathcal{D}_A \nabla^2 c_A + R_A \quad (2.7-57c)$$

note que en esta sustitución se supusieron constantes los coeficientes de viscosidad, conductividad térmica y de difusión molecular. Con las ecs. (2.7-55) es posible resolver una amplia variedad de problemas en ciencias básicas e ingeniería.

Desde luego, existen otras relaciones auxiliares para el planteamiento de modelos conservativos en ciencias e ingeniería como son: velocidades de reacción, datos de propiedades termodinámicas, relaciones para estimar coeficientes de transporte, entre muchas otras. Cabe mencionar que, por lo regular, el adoptar relaciones auxiliares involucra imponer ciertas suposiciones adicionales al modelo. En la práctica, algunas de estas *relaciones auxiliares* son empíricas y contienen coeficientes ajustables cuyos valores se determinan experimentalmente y esto suele involucrar ajustes estadísticos de datos que se obtienen a partir de los diseños experimentales. En los ejemplos y ejercicios de los capítulos siguientes se hace hincapié tanto en la aplicación de las ecuaciones de balance como de las relaciones auxiliares empleadas.

2.7.6. Sobre condiciones de frontera

Además de las relaciones auxiliares, el planteamiento de un modelo que involucra ecuaciones diferenciales no está completo hasta que se especifiquen las condiciones iniciales y a la frontera correspondientes. Una condición inicial describe el estado de un sistema al principio de un proceso. Las condiciones de frontera son también ecuaciones de balance aplicadas únicamente en las superficies del sistema. El número de condiciones de frontera (linealmente

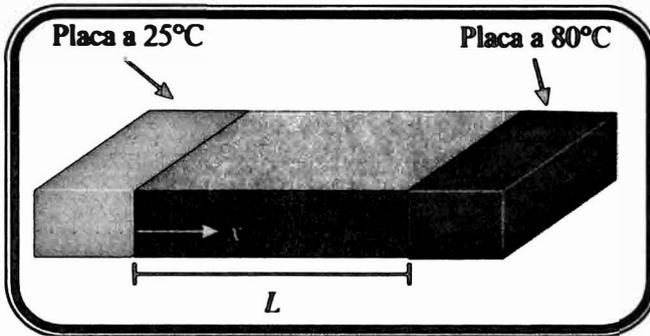


Figura 2.7-1: Esquema de una placa de largo \$L\$ en contacto con otras dos placas que se encuentran a temperaturas de \$25^{\circ}\text{C}\$ y \$80^{\circ}\text{C}\$, respectivamente.

independientes) debe igualar al orden de la ecuación diferencial¹³. Por ejemplo, para la siguiente ecuación diferencial ordinaria

$$\frac{d^2y}{dx^2} - \frac{dy}{dx} - y = f(x) \quad (2.7-58)$$

se requieren dos condiciones de frontera. Mientras que para la siguiente ecuación diferencial parcial

$$\frac{\partial y}{\partial t} + \alpha \frac{\partial y}{\partial x} = \beta \frac{\partial^2 y}{\partial z^2} \quad (2.7-59)$$

se requieren: una condición inicial, una condición de frontera en la dirección \$x\$ y dos en la dirección \$z\$.

Las condiciones de frontera se pueden presentar en tres versiones (Arfken y col., 2012):

- 1 *Condiciones tipo Dirichlet*: Se especifica el valor de la variable dependiente en alguna posición. Por ejemplo: Considere una placa de metal de largo \$L\$ que se localiza en medio de otras dos placas que se encuentran a \$25^{\circ}\text{C}\$

¹³El orden de una ecuación diferencial es igual al orden más alto de la derivada.

en un extremo ($x = 0$) y a 80°C en el otro ($x = L$) (ver Fig. 2.7-1). Esta situación se expresa de la siguiente forma:

$$\text{En } x = 0, \quad T = 25^{\circ}\text{C}$$

$$\text{En } x = L, \quad T = 80^{\circ}\text{C}$$

donde se especifica el valor de la variable dependiente, en este caso, la temperatura.

2 *Condiciones tipo Neumann*: Se especifica el valor de la derivada de la variable dependiente en alguna posición. Por ejemplo, suponga que ahora la placa del ejemplo anterior se encuentra aislada (es decir, su densidad de flujo de calor es cero) en un extremo ($x = 0$) y en el otro está expuesta a una densidad de flujo de calor constante Q (ver Fig. 2.7-2). En este caso, las condiciones de frontera son:

$$\text{En } x = 0, \quad k \frac{dT}{dx} = 0$$

$$\text{En } x = L, \quad -k \frac{dT}{dx} = Q$$

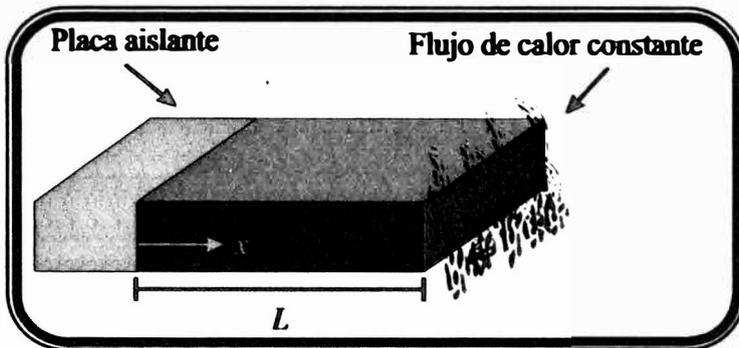


Figura 2.7-2: Esquema de una placa de largo L en contacto en un extremo con una placa aislante y en el otro con una fuente de calor constante

3 *Condiciones de frontera mixtas (o tipo Robin o de Cauchy)*: Se especifica el valor de una combinación lineal de los valores de una función y su derivada. En su forma general unidimensional se expresa como sigue:

$$\text{En } x = a, \quad \alpha f(a) + \beta \left. \frac{df}{dx} \right|_{x=a} = \gamma \quad (2.7-60)$$

donde α , β y γ son coeficientes conocidos que podrían (o no) ser funciones de la variable dependiente f . Note que, si $\beta = 0$, la Ec. (2.7-60) se reduce a una condición de frontera tipo Dirichlet; mientras que, si $\alpha = 0$, se reduce a una condición tipo Neumann.

Un ejemplo típico de condición de frontera mixta es la ley de enfriamiento de Newton (Bird *y col.*, 2007), la cual se utiliza para acoplar el transporte convectivo y difusivo en una frontera. Por ejemplo, suponga que la placa de los ejemplos anteriores está expuesta en un extremo ($x = L$) a una corriente de aire cuya temperatura es constante, T_∞ y en el otro está en contacto con una placa a temperatura constante (ver Fig. 2.7-3). En este caso, el calor se transporta de la superficie de la placa hacia dentro de ésta por difusión, mientras que de la superficie hacia afuera se transporta por convección¹⁴. Esta situación se expresa como sigue:

$$\text{En } x = L, \quad \underbrace{-k \left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=L}}_{\text{difusión}} = \underbrace{h(T|_{x=L} - T_\infty)}_{\text{convección}} \quad (2.7-61)$$

donde h es el coeficiente de transferencia de calor y es el encargado de capturar la información esencial de la transferencia de calor que ocurre cerca de la frontera. Por supuesto, la Ec. (2.7-61) puede expresarse en la misma forma que la Ec. (2.7-60) con una simple manipulación algebraica (Problema 2.19).

¹⁴En realidad el calor se transporta por convección y difusión, pero en muchas situaciones puede suponerse que la convección domina sobre la difusión.

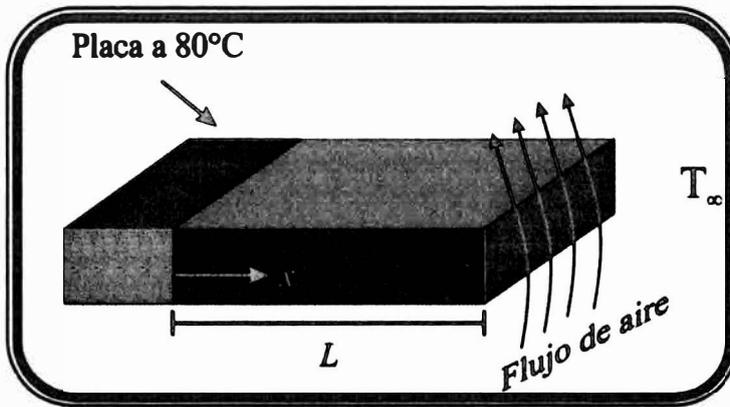


Figura 2.7-3: Esquema de una placa de largo L en contacto en un extremo con una placa a 80°C y en el otro con un flujo de aire a T_{∞} .

2.8. Resumen

Para concluir este capítulo es conveniente hacer un resumen de lo expuesto hasta el momento:

- 1 Se comenzó por presentar algunas definiciones fundamentales. De donde se propuso que un modelo es la descripción de un cierto fenómeno mediante una interpretación particular. Se hizo una primera clasificación de modelos: los experimentales y los matemáticos. Entendidos estos últimos como la representación, en términos matemáticos, de los atributos de un sistema.
- 2 Posteriormente, se estableció la distinción entre los modelos matemáticos estocásticos (basados en probabilidades) y los deterministas (basados en leyes físicas), siendo estos últimos los que se usarán en este texto.
- 3 Más adelante, se listaron algunas de las cuestiones fundamentales que debe responder un modelo matemático y se distinguió entre modelado observacional, físico y conceptual.

4 Habiendo elegido a los modelos matemáticos basados en la física del sistema como el objeto de este texto, se procedió a describir las leyes fundamentales de conservación, así como las relaciones auxiliares y condiciones de frontera que las acompañan.

Es importante mencionar que la clasificación y discusión de los diversos tipos de modelos matemáticos expuestos en este capítulo puede hacerse aún más amplia. Por ejemplo, pueden además clasificarse los modelos como lineales o no lineales de acuerdo a la estructura de las expresiones matemáticas; o bien, como dinámicos o estáticos respecto a la dependencia temporal de las variables dependientes, entre otras (Himmelblau y Bischoff, 1968). Sin embargo, se ha preferido la clasificación presentada aquí con el fin de mantener cierto grado de simpleza y generalidad.

Problemas

- 2.1 Considere el experimento simple de sumergir un objeto (digamos una pelota) en un fluido estático como el agua. Olvidando por un momento el principio de Arquímedes, lleve a cabo experimentos suficientes (al menos cada medición experimental debe hacerse por triplicado) para explicar este fenómeno; se sugiere utilizar diferentes objetos en las pruebas. Obtenga relaciones entre las dimensiones del objeto y la elevación del nivel de agua. Compare sus resultados con los que proporciona el principio de Arquímedes.
- 2.2 Si hace nueve años tenía tu edad y el doble de tu edad más la mía da 78 años, ¿Qué edades tenemos? Para resolver este problema del mundo real, se recomienda seguir estos pasos: 1. Exprese la información del problema en forma matemática (tome en cuenta que debe tener el mismo número de incógnitas que de ecuaciones); 2. Resuelva el problema algebraico y 3. Exprese el resultado de una manera comprensible para cualquier persona que no tenga sus conocimientos de matemáticas.
- 2.3 Investigue al menos tres ejemplos que puedan ser descritos actualmente sólo por medio de modelos estocásticos y tres ejemplos de situaciones físicas que puedan representarse tanto por medio de modelos estocásticos como deterministas.
- 2.4 Mencione y explique al menos dos situaciones físicas donde se presente una distribución de datos como la mostrada en la Fig. 2.6-1.
- 2.5 En el ejercicio de la Sección 2.6 se propuso como parámetro de comparación el área bajo la curva de los resultados. Explique físicamente qué representa dicha área y proponga al menos un criterio adicional para comparar los datos y el modelo.
- 2.6 Proponga una mejor aproximación que el Modelo 2, para ello puede tomar en cuenta que alrededor de $\tau = 0.5$ la derivada de y con respecto a τ es cero. Discuta acerca de la pertinencia de esta mejora.
- 2.7 El flujo de varios tipos de fluidos en tuberías obedece un perfil parabólico de velocidades como el mostrado en la Fig. P.2-1. A partir de

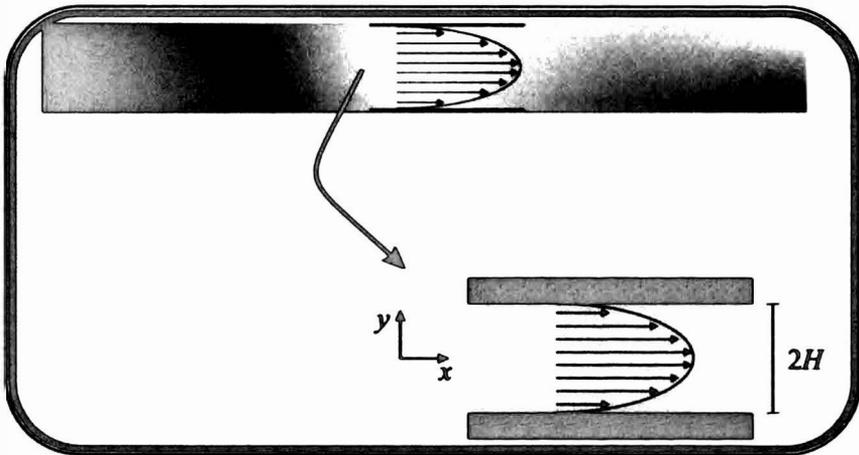


Figura P.2-1: Esquema del perfil de velocidades de un fluido Newtoniano en una tubería de sección transversal cuadrada.

la solución de las ecuaciones de transporte de cantidad de movimiento, resulta que la velocidad del fluido en la tubería satisface la siguiente expresión (Bird *y col.*, 2007):

$$v_x = v_{\text{máx}} \left(1 - \frac{y^2}{H^2} \right) \quad (2.P-1)$$

donde $v_{\text{máx}}$ es la velocidad máxima del fluido, la cual se presenta en $y = 0$, mientras que H es la mitad de la altura de la sección transversal del tubo. En este problema debe utilizar el modelado observacional para obtener la expresión anterior.

2.8 Por definición, la fracción masa, ω_A , satisface la siguiente expresión

$$\sum_{A=1}^{A=N} \omega_A = 1 \quad (2.P-2)$$

Tomando en cuenta esta propiedad, utilice la Ec. (2.7-11), para

demostrar la siguiente igualdad

$$\rho = \sum_{A=1}^{A=N} \rho_A \quad (2.P-3)$$

2.9 Utilizando las definiciones de la fracción masa y de la velocidad promedio de masa dadas en las Ecs. (2.7-11) y (2.7-12), respectivamente, deduzca la siguiente expresión

$$\rho \mathbf{v} = \sum_{A=1}^{A=N} \rho_A \mathbf{v}_A \quad (2.P-4)$$

2.10 Utilice los resultados de los dos problemas anteriores, junto con el segundo axioma del transporte de masa en sistemas multicomponentes (Ec. 2.7-15), para demostrar que puede obtenerse la ecuación de continuidad de una mezcla (Ec. 2.7-9) a partir de la suma de las ecuaciones de continuidad de todas las especies de la mezcla (Ec. 2.7-17).

2.11 Considere la siguiente ecuación

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_m} \rho \mathbf{v} dV = \int_{\mathcal{V}_m} \left[\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) \right] dV \quad (2.P-5)$$

Utilice la ecuación de continuidad (Ec. 2.7-9), para obtener el resultado dado en la Ec. (2.7-28).

2.12 Partiendo de la ecuación de continuidad (Ec. 2.7-9) y de la definición de la derivada material:

$$\frac{Dy}{Dt} = \frac{\partial y}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla y \quad (2.P-6)$$

Deduzca la Ec. (2.7-47).

2.13 Demuestre las identidades mostradas en las ecs. (2.7-33).

2.14 Considere la transferencia difusiva de masa de un soluto (especie A) en una dirección en una placa que involucra una reacción química de primer orden ($R_A = -kc_A$) en estado estacionario. En ausencia de convección, la Ec. (2.7-57c) se reduce a

$$\mathcal{D}_A \frac{d^2 c_A}{dX^2} - kc_A = 0 \quad (2.P-7)$$

Suponiendo que el dominio de la variable independiente es $X \in [0, L]$, donde L es el largo de la placa, se propone el siguiente cambio de variable

$$x = \frac{X}{L} \quad (2.P-8)$$

con el fin de volver adimensional la posición. Utilizando la regla de la cadena muestre que la ecuación diferencial puede expresarse como sigue

$$\frac{d^2 c_A}{dx^2} - \frac{kL^2}{\mathcal{D}_A} c_A = 0 \quad (2.P-9)$$

El factor kL^2/\mathcal{D}_A es una constante que relaciona la velocidad de reacción con respecto a la velocidad de transporte por difusión y se conoce como módulo de Thiele; su definición es

$$\Phi^2 = \frac{kL^2}{\mathcal{D}_A} \quad (2.P-10)$$

Por último, en base a una concentración de referencia c_0 , se define la concentración adimensional, c como

$$c = \frac{c_A}{c_0} \quad (2.P-11)$$

Muestre que la forma adimensional de la ecuación diferencial es

$$\frac{d^2 c}{dx^2} - \Phi^2 c = 0 \quad (2.P-12)$$

2.15 Retomando la ecuación resultante del problema anterior

$$\frac{d^2 c}{dx^2} - \Phi^2 c = 0 \quad (2.P-13)$$

Suponga que esta ecuación está sujeta a las siguientes condiciones de frontera

$$\text{en } x = 0, \quad c = 1 \quad (2.P-14a)$$

$$\text{en } x = 1, \quad \frac{dc}{dx} = 0 \quad (2.P-14b)$$

Muestre que la solución de este problema de valor a la frontera está dada por la siguiente expresión analítica

$$c = \frac{\cosh[\Phi(1-x)]}{\cosh(\Phi)} \quad (2.P-15)$$

2.16 En este problema se busca resolver de manera aproximada el problema anterior, para ello se propone el siguiente polinomio

$$c = a_0 + a_1 \left(\frac{x}{\delta}\right) + a_2 \left(\frac{x}{\delta}\right)^2 + a_3 \left(\frac{x}{\delta}\right)^3 + a_4 \left(\frac{x}{\delta}\right)^4 \quad (2.P-16)$$

donde δ es la distancia de penetración. Para determinar los coeficientes a_0, \dots, a_4 en la ecuación anterior se imponen las siguientes condiciones

$$x = \delta, \quad c = 0; \quad \frac{dc}{dx} = 0; \quad \frac{d^2c}{dx^2} = 0 \quad (2.P-17a)$$

$$x = 0, \quad c = 1; \quad \frac{d^2c}{dx^2} = 0 \quad (2.P-17b)$$

Para calcular el valor de δ se integra la ecuación diferencial del problema anterior desde $x = 0$ hasta $x = \delta$, el resultado es

$$-\left. \frac{dc}{dx} \right|_{x=0} - \Phi^2 \int_{x=0}^{x=\delta} c \, dx = 0 \quad (2.P-18)$$

Una vez calculados los coeficientes a_0, \dots, a_4 , sustituya la expresión aproximada de la concentración en esta última ecuación para determinar el valor de δ . Compare las expresiones aproximada y exacta y discuta acerca del rango de validez de la expresión aproximada.

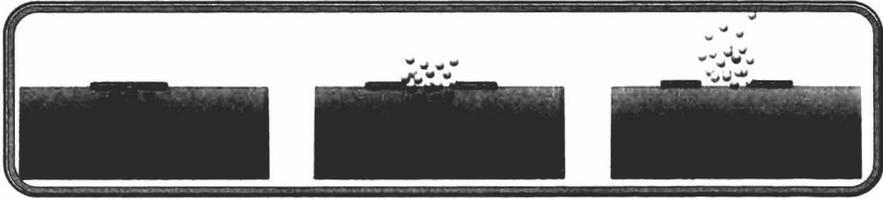


Figura P.2-2: Esquema del transporte de una persona (esfera roja) a través de un flujo de pasajeros (esferas grises) en horas pico del metro.

- 2.17 Considere el esquema de la Fig. P.2-2 donde se representa el difícil tránsito de una persona para abrirse paso entre el resto de los pasajeros de un vagón del metro y lograr salir de éste en horas pico. Asociando el flujo de personas como un continuo, describa cómo se lleva a cabo el transporte convectivo y difusivo de esta persona.
- 2.18 El coeficiente de difusión molecular \mathcal{D}_A tiene unidades de m^2/s . Al dividir ambos lados de la Ec. (2.7-57a) por la densidad, ρ , el coeficiente que multiplica al término difusivo de transporte de cantidad de movimiento es μ/ρ , el cual se conoce como *viscosidad cinemática*, ν . De forma análoga, al dividir ambos lados de la Ec. (2.7-57b) por ρC_p , el coeficiente que multiplica al término de difusión de calor es $k/\rho C_p$, el cual se conoce como *difusividad térmica*, α . Más allá de las similitudes en la nomenclatura, demuestre que los coeficientes α , ν y \mathcal{D}_A tienen las mismas unidades.
- 2.19 Demuestre que la Ec. (2.7-61) puede expresarse en la forma dada por la Ec. (2.7-60).

Capítulo 3

Planteamiento del modelo

*Todo problema, bien planteado, tiene solución,
sólo es cuestión de tiempo y talento*

3.1. Introducción

En el capítulo anterior se proporcionaron algunas definiciones y clasificaciones fundamentales sobre modelado y se presentaron las ecuaciones gobernantes para la transferencia de cantidad de movimiento, calor y masa, así como relaciones auxiliares y condiciones de frontera. El resto del material de este texto está dedicado a presentar algunas recomendaciones para el planteamiento, solución y análisis de los modelos matemáticos propuestos. En específico, este capítulo está dedicado al planteamiento del modelo. Entre los aspectos a considerar para este fin, se encuentra la cantidad de información que se desea mantener en el modelo, la cual está directamente relacionada con la complejidad que adquirirá el modelo final. En un número considerable de casos, el conservar más información lleva a una mayor complejidad del modelo a resolver. Por ello, es importante decidir acerca de la cantidad de información que potencialmente pueda proporcionar la solución del modelo en base a la necesidad que responde la formulación misma del modelo.

El material de este capítulo está organizado como sigue: Se comienza con una discusión sobre niveles de escala que se presentan en sistemas de naturaleza jerárquica; posteriormente, se presentan algunos comentarios sobre el inicio del proceso de modelado, lo que da pie a listar las máximas para el modelado matemático según Aris (1976). Por último, se presentan algunos ejemplos de aplicación donde se utilizan estas máximas. Cabe agregar

que estas recomendaciones no están restringidas al planteamiento del modelo sino también a su análisis y solución, lo cual se llevará a cabo en el siguiente capítulo.

Para una mejor comprensión del material de este capítulo, se recomienda estar familiarizado con temas de transferencia de calor, transferencia de masa, ecuaciones diferenciales y notación vectorial. Así como con conceptos como el teorema de la divergencia, análisis de ordenes de magnitud y técnicas de adimensionamiento de variables dependientes e independientes, ya que se utilizarán a lo largo del capítulo. Estos temas pueden consultarse en detalle en libros como los de Aris (1990), Bird *y col.* (2007), Slattery *y col.* (2004) y Whitaker (1992).

3.2. Niveles de escala

Una amplia variedad de sistemas de interés en ciencias básicas e ingeniería son de *naturaleza jerárquica*; esto es, los procesos que tienen lugar en un cierto nivel de escala están determinados por los procesos que se llevan a cabo en niveles de escala inferiores. En este contexto, se entiende por nivel de escala lo siguiente:

Un nivel de escala representa un rango de longitudes características donde es posible aplicar el postulado del continuo.

Para aclarar esta definición es necesario definir el postulado del continuo y lo que es una longitud característica. El postulado del continuo establece que es posible considerar propiedades como la temperatura, velocidad, concentración, etc., como funciones suaves en cada punto de un dominio dado (ver Sección 1.1 en Whitaker, 1992). Por ejemplo, considere una botella de agua potable y suponga que está interesado en conocer la temperatura del agua a distintas posiciones en la botella utilizando termopares. No es difícil inferir que las lecturas de temperatura obtenidas siempre corresponderán al agua como una sustancia, es decir, con un termopar no medirá la temperatura del vacío que se sabe que rodea la nube electrónica en cada molécula de agua. De esta forma, es fácil suponer que propiedades como la densidad y viscosidad del agua serán homogéneas en el líquido contenido en la botella.

Una longitud característica se refiere a una medida espacial que se utiliza para identificar alguna propiedad de un sistema. En el ejemplo de la botella de agua, se puede afirmar que el postulado del continuo es aplicable ya que la longitud característica del termopar es mucho mayor que la trayectoria libre media¹ de las moléculas de agua. En otras palabras, el postulado del continuo en este ejemplo es aplicable a un nivel de escala microscópico, el cual es mucho mayor que el nivel de escala molecular o atómico. En física, el nivel de escala del continuo permite establecer los campos de aplicación de la física clásica (niveles de escala superiores o iguales al continuo) y de la física moderna (niveles de escala inferiores al del continuo).

En el estudio de sistemas jerárquicos, es posible identificar un número finito de niveles de escala que permiten definir diversos continuos. Dichos niveles suelen ir desde el molecular, pasando por el nanoscópico (Slattery y col., 2004), hasta llegar, por ejemplo, a la escala de campo o industrial (Whitaker, 2009a). De esta forma, puede razonarse que lo que ocurre en una interfase a nivel microscópico pueda ser determinante en el desempeño de una planta química (ver Fig. 11 en Whitaker, 2009a). En ocasiones, el pasar de un nivel de escala a otro involucra promediar ecuaciones diferenciales parciales², que gobiernan el transporte en un nivel de escala inferior (por ejemplo, del orden de micrómetros), para obtener ecuaciones diferenciales ordinarias³ que describen el sistema en un nivel de escala superior (por ejemplo, de metros). Con este mismo proceso es posible incluso pasar de una ecuación diferencial parcial a una ecuación algebraica para describir un determinado fenómeno (ver Problema 3.2). La reducción del nivel de complejidad de los modelos matemáticos con el incremento en la escala no es exclusiva de aplicaciones ingenieriles, por ejemplo, la ecuación de Navier-Stokes para fluidos Newtonianos [Ec. (2.7-57a)], que es válida a niveles de escala microscópicos, es considerablemente más simple que la ecuación de Schrödinger a nivel molecular.

¹La trayectoria libre media es la distancia promedio que puede recorrer una molécula con respecto a las demás.

²Aquellas en las que la variable dependiente es función de más de una variable independiente.

³Aquellas en las que la variable dependiente es función de sólo una variable independiente.

De acuerdo a diversos autores (Bear y Cheng, 2010; Pinder y Gray, 2008; Bird y col., 2007; Whitaker, 1999), los modelos matemáticos en sistemas macroscópicos pueden deducirse a partir de sus contrapartes microscópicas (ver Problema 3.2). Entre las herramientas necesarias para llevar a cabo estas deducciones se encuentra el promediado y el escalamiento. Wood (2009) aclara la diferencia entre la operación matemática de *promediar* (es decir, aplicar un operador de integración) y *escalar*. Esta última se entiende como una reducción sistemática del número de grados de libertad involucrados en el modelo de transporte de la escala más pequeña.

3.2.1. Ejemplo cualitativo de escalamiento desde un edificio de la UAM-I hasta el Distrito Federal.

En la Fig. 3.2-1 se muestra un ejemplo de diversos niveles de escala en la ciudad de México. En esta figura se puede apreciar que cada nivel de escala se distingue por una longitud característica que tiene asociado un orden de magnitud determinado (ver Cuadro 3.2-1). De esta forma, la información referente a lo que ocurre, por ejemplo en el Edificio T (escala IV) puede afectar al resto de la UAM-I (escala III) y así sucesivamente, la investigación generada en la UAM-I puede repercutir en la delegación Iztapalapa (escala II), que a su vez impacta en lo que sucede en todo el Distrito Federal (escala I). Por supuesto, puede darse el caso en que la información generada en el Edificio T repercuta sobre toda la delegación Iztapalapa, o incluso sobre toda la ciudad de México. Sin embargo, al pasar de una escala a otra se debe dar un *filtrado sistemático de información*, o escalamiento (Wood, 2009). Por ejemplo, suponga que un investigador decide escribir unas notas sobre modelado en el Edificio T de la UAM-I, si éstas llegan a ser publicadas y leídas, en la UAM-I podría salir un boletín con una pequeña reseña de las notas en cuestión, el cual probablemente tendrá una extensión de una cuartilla. De esta forma, si se compara la cantidad de información de las notas que escribió este investigador con lo que aparece en el boletín, es evidente que hubo una reducción considerable de la información.

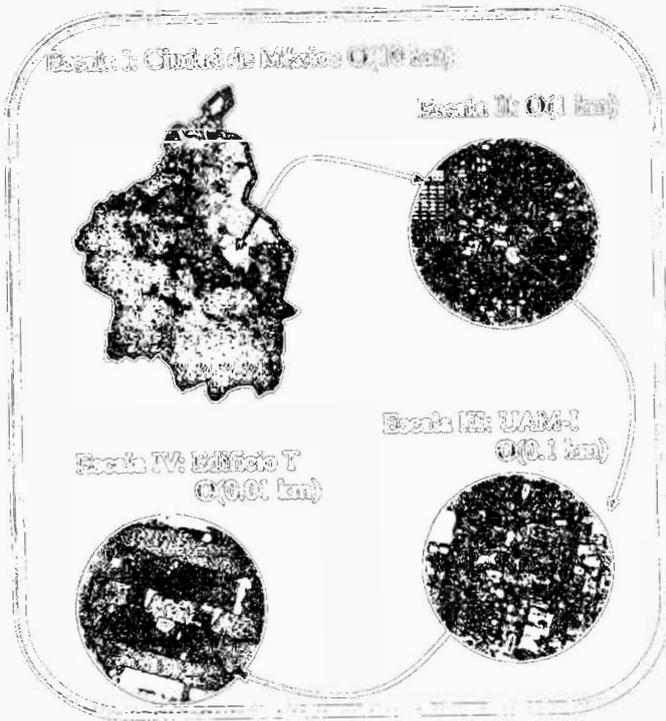


Figura 3.2-1: Ejemplo de cuatro niveles escala en la ciudad de México.

Cuadro 3.2-1a: Sobre órdenes de magnitud

Considere el siguiente ejemplo: el alto del edificio donde me encuentro escribiendo estas líneas es de aproximadamente 50 m, es decir 5×10^1 m. Entonces, decimos que el orden de magnitud de la altura del edificio es 10^1 m, es decir, se toma la última parte de nuestra cantidad en notación científica. Por supuesto, este ejemplo no se espera que sea muy bueno si, por ejemplo, la altura fuera 50 m, pero aún en este caso el resultado es 10^1 m.

Por supuesto, esta separación de niveles de escala puede utilizarse para estudiar casos más interesantes. Por ejemplo, suponga que se emiten contaminantes al ambiente en el nivel de escala III de la Fig. 3.2-1 y se desea conocer cómo estos contaminantes afectan la calidad del aire de la ciudad de México al nivel de escala I. Una forma de llevar a cabo este estudio es tomar muestras del nivel de escala III a lo largo de toda la ciudad de México y cuantificar las concentraciones de contaminantes de cada muestra, la cual sería una labor sumamente laboriosa. Más aún, el resultado final sería una cantidad promedio de todas las muestras recabadas, de entre las cuales es muy probable que exista un número considerable que aporten resultados prácticamente idénticos. Para tener una idea de cuántas muestras dan este tipo de resultados, suponga que dicha cantidad de muestras caben en el nivel de escala II. Resulta entonces más práctico eliminar los resultados redundantes y conservar sólo una muestra tomada a la escala III por cada muestra del tamaño de la escala II. De esta forma, el número de muestras a tomar es menor y se eliminó la información redundante del estudio.

3.3. Inicio del proceso de modelado

En su texto, Basmadjian y Farnood (2007) mencionan que siendo, al menos en parte, un arte, los primeros pasos del modelado no llevan a recetas generales que garanticen un resultado exitoso. Sin embargo, presentan algunas recomendaciones útiles para el principiante en el planteamiento de modelos, como son:

- Haga un esquema del sistema bajo consideración. Este paso involucra definir el sistema, lo cual es fundamental desde el punto de vista de la termodinámica. Si se involucra una ley de conservación, se deben indicar en el esquema cuáles son las principales entradas y salidas del sistema. Cabe mencionar que, al definir el sistema, también se debe(n) establecer el(los) nivel(es) de escala en los que se desea dirigir el análisis.
- Determine si el sistema se encuentra en estado *estacionario*, *transitorio* o *cuasi-estacionario*. En general, se entiende por estado estacionario cuando la respuesta de un sistema es la misma en el tiempo y por estado transitorio lo contrario (Landau y Lifshitz, 1976) (ver Problema

3.3). Sin embargo, el estado cuasiestacionario no siempre es sencillo de comprender. Para ello, considere la siguiente situación: para todos es fácil aceptar que la Tierra se mueve alrededor del sol; sin embargo, si uno se basa simplemente en su percepción propia de desplazamiento, sería raro percibir dicho movimiento. Por otro lado, si se observara todo el sistema solar durante el periodo de traslación de la Tierra es seguro que se notaría este movimiento. En otras palabras, es una cuestión de escalas: a la escala intraplanetaria el movimiento de traslación de la Tierra está en estado cuasiestacionario, mientras que a nivel interplanetario dicho movimiento es transitorio. El lector interesado acerca de la suposición de estado cuasiestacionario en la superficie de una partícula catalítica puede revisar los trabajos de Carbonell y Whitaker (1984); Whitaker (1986). En síntesis:

Un proceso se encuentra en estado estacionario cuando la dependencia temporal de sus propiedades es la misma y en estado transitorio cuando lo no es así.

Un proceso (que es transitorio) se encuentra en estado cuasiestacionario cuando la dependencia temporal de algunas de sus variables y/o propiedades puede considerarse despreciable respecto a la de otras.

- Comience con las leyes de conservación más simples y posteriormente introduzca balances adicionales y relaciones auxiliares hasta que el número de ecuaciones iguale el número de variables de estado desconocidas.

En la siguiente sección se complementan estas recomendaciones con las máximas propuestas por Aris (1976).

3.4. Las máximas para el modelado matemático según Aris (1976)

Para continuar la discusión sobre el proceso de modelado, resulta oportuno presentar las máximas sobre el modelado⁴ que propuso Aris (1976) como una manera de codificar algunos de los esfuerzos mentales por los que se debe pasar al analizar un proceso. Es importante mencionar que, al igual que las recomendaciones presentadas en la sección anterior, con estas máximas Aris no pretendió proporcionar una receta infalible para modelar cualquier situación, sino más bien proveer un marco general de pensamiento que es recomendable no perder de vista al momento de plantear un modelo matemático.

Las máximas para el modelado matemático según Aris son las siguientes:

Máxima 1. *Plantee el modelo en una forma tan elegante como sea posible.*

En este sentido, vale la pena recordar una frase de Leonardo Da Vinci: “*La simpleza es la mayor sofisticación*”, la cual puede considerarse como un corolario de un principio derivado de la filosofía escolástica que identifica a lo hermoso (*i.e.*, elegante) como la ausencia de lo superfluo. En otras palabras, un modelo elegante es aquel que cumple su propósito y nada más.

Máxima 2. *Escoja una notación que le resulte agradable, pero no se vuelva adicto a ella. Esto debido a que la notación es un vehículo de comunicación y como tal, la interpretación propia puede ofender la sensibilidad de otros o bien impedir la comunicación con otros.*

Por ejemplo, en ingeniería se usa frecuentemente el número de Reynolds, el cual se suele denotar por Re ; de manera que si al plantear el modelo se involucra este número, es altamente recomendable conservar esta notación.

⁴Tome en cuenta que estas máximas abarcan todo el proceso de modelado, es decir, son recomendaciones para el planteamiento, solución y análisis de los modelos matemáticos.

Así, cualquiera que esté familiarizado con la literatura de ingeniería y encuentre Re en el modelo, inmediatamente sabrá que el número de Reynolds está involucrado.

Máxima 3. *Vuelva las variables adimensionales, dado que esta es la única manera en que sus magnitudes tengan un significado general, pero no pierda de vista a aquellas cantidades que tengan que ser modificadas más adelante en el problema, no olvide el origen físico de cada parte.*

Para aclarar un poco este punto, es conveniente retomar el sistema mostrado en la Fig. 2.7-1 que consiste en una placa que está en contacto con otras dos placas que se encuentran a 25 y 80°C, respectivamente. Denotando las temperaturas mínima y máxima como T_m y T_M , respectivamente; lo que se busca es una expresión para la temperatura que, además de ser adimensional, siempre adquiera valores entre cero y uno, (Θ). De manera que, cuando $T = T_m$, debe cumplirse que $\Theta = 0$ y cuando $T = T_M$, debe resultar en que $\Theta = 1$. La expresión que satisface estas condiciones es la siguiente (ver Problema 3.5):

$$\Theta = \frac{T - T_m}{T_M - T_m} \quad (3.4-1)$$

Cabe mencionar que al escribir las variables en forma adimensional, no se pretende eliminar su sentido físico, sino más bien brindarles un sentido a su magnitud que sea independiente de un sistema particular de unidades. De hecho, es deseable que los valores de las variables adimensionales se encuentren acotados entre cero y la unidad, aunque esto no siempre es posible como es en el caso del tiempo (ver Problema 3.6)

Máxima 4. *Use (siempre que sea posible) límites a priori de origen físico o matemático para mantener a todas las variables en el mismo orden de magnitud, dejando que los parámetros adimensionales muestren el tamaño relativo de los diversos términos.*

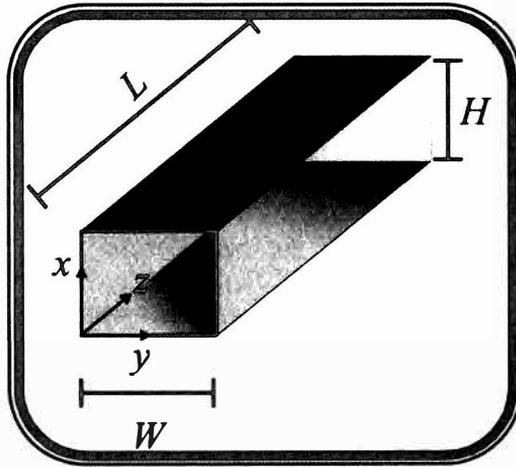


Figura 3.4-1: Esquema de una placa de sección transversal rectangular.

Para entender esta máxima, considere la transferencia difusiva de calor en tres dimensiones en una placa en estado estacionario (Fig. 3.4-1). En este caso, la Ec. (2.7-57b) se reduce a

$$k\nabla^2 T = 0 \tag{3.4-2}$$

O bien, en coordenadas Cartesianas,

$$k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) = 0 \tag{3.4-3}$$

De acuerdo al esquema en la Fig. 3.4-1, $x \in [0, H]$, $y \in [0, W]$ y $z \in [0, L]$, donde los valores de H y W son similares, es decir, tienen el mismo orden de magnitud. Escogiendo a H como longitud característica, es posible proponer las siguientes variables adimensionales,

$$X = \frac{x}{H}, Y = \frac{y}{H}, Z = \frac{z}{H} \tag{3.4-4}$$

con las cuales, la Ec. (3.4-3) toma la siguiente forma (Problema 3.7)

$$k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} \right) = 0 \quad (3.4-5)$$

En base a las definiciones dadas en la Ec. (3.4-4), se tienen los siguientes estimados de orden de magnitud

$$\frac{\partial^2 T}{\partial X^2} = \mathbf{O} \left(\frac{T}{l^2} \right) \quad (3.4-6a)$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial Y^2} = \mathbf{O} \left(\frac{T}{(W/H)^2} \right) \quad (3.4-6b)$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} = \mathbf{O} \left(\frac{T}{(L/H)^2} \right) \quad (3.4-6c)$$

Dado que $W = \mathbf{O}(H)$, los estimados en las ecs. (3.4-6a) y (3.4-6b) son equivalentes; esto es,

$$\frac{\partial^2 T}{\partial Y^2} = \mathbf{O} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial X^2} \right) \quad (3.4-7)$$

Sin embargo, del esquema de la Fig. 3.4-1, se puede deducir que

$$H \ll L \quad (3.4-8)$$

Por lo que, la Ec. (3.4-5) se reduce a

$$k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial Y^2} \right) = 0 \quad (3.4-9)$$

Máxima 5. *Piense geoméricamente. Vea cuándo pueda reducir el número de variables (incluso bajo el riesgo de resolver al principio un problema sobresimplificado), pero tenga en mente las necesidades del caso general.*

Suponga que está analizando la penetración de agua en una pelota de espuma. Al ser el dominio del sistema una esfera, el problema se debe

resolver en coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) . Sin embargo, si el transporte se da predominantemente en la dirección radial (r) , se pueden despreciar los cambios en las otras dos direcciones (θ, ϕ) . Más aún, si el problema es (física y geoméricamente) simétrico, puede resolverse en tan sólo la mitad del dominio (Problemas 3.14 y 3.15)

Máxima 6. *Use métodos cortos pero eficaces, sin llevarlos más allá de su punto de utilidad.*

Un ejemplo de esta máxima es el siguiente: Hasta el momento, no es posible, en general, resolver de manera analítica problemas que involucren ecuaciones diferenciales no lineales. Sin embargo, es posible usar métodos cortos para obtener soluciones aproximadas razonables (Valdés-Parada y col., 2006). Por ejemplo, considere el transporte difusivo de un reactivo (especie A) en una partícula catalítica en estado estacionario. A partir de la Ec. (2.7-57c) se tiene que

$$\mathcal{D}_A \nabla^2 c_A - R_A = 0 \quad (3.4-10)$$

donde el término de reacción R_A de consumo de la especie A puede ser una función (lineal o no lineal) de la concentración c_A . Por ejemplo, si esta especie es el sustrato que sirve de alimento para microorganismos, se puede usar la cinética de Michaelis-Menten (Voet y col., 2012)

$$R_A = \frac{V_{\text{máx}} c_A}{K_m + c_A} \quad (3.4-11)$$

donde $V_{\text{máx}}$ es el límite superior de rendimiento de cierta cantidad de enzimas, mientras que K_m es la llamada constante de Michaelis-Menten que representa la cantidad de sustrato necesaria para fijarse a la mitad de la concentración de enzimas disponibles. Para tratar este término, se puede proponer aproximar la expresión dada en la Ec. (3.4-11) al expandirla en series de Taylor alrededor de una concentración de referencia, c_A^*

$$R_A(c_A) = R_A(c_A^*) + \left. \frac{dR_A}{dc_A} \right|_{c_A=c_A^*} (c_A - c_A^*) + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n R_A}{dc_A^n} \right|_{c_A=c_A^*} (c_A - c_A^*)^n \quad (3.4-12)$$

y truncar dicha serie en el término lineal,

$$R_A(c_A) \approx R_A(c_A^*) + \left. \frac{dR_A}{dc_A} \right|_{c_A=c_A^*} (c_A - c_A^*) \quad (3.4-13)$$

Después de llevar a cabo las operaciones algebraicas correspondientes, este resultado se reduce a,

$$R_A(c_A) = \varphi_0 + \varphi_1 c_A \quad (3.4-14)$$

donde, por simplicidad, se definieron

$$\varphi_0 = \frac{V_{\text{máx}}(c_A^*)^2}{(K_m + c_A^*)^2}; \quad \varphi_1 = \frac{K_m V_{\text{máx}}}{(K_m + c_A^*)^2} \quad (3.4-15)$$

Al sustituir la Ec. (3.4-14) en la Ec. (3.4-10) se obtiene la siguiente ecuación diferencial lineal,

$$\mathcal{D}_A \nabla^2 c_A - \varphi_0 - \varphi_1 c_A = 0 \quad (3.4-16)$$

La cual puede resolverse analíticamente. Con este método corto es posible hacer predicciones de perfiles de concentración de una manera rápida y eficiente. Al lector interesado en conocer los alcances y limitaciones de esta técnica se le recomienda consultar el trabajo de Valdés-Parada *y col.* (2006)

Máxima 7. *Encuentre puntos críticos y determine el comportamiento del sistema cerca de ellos o bien, si ocurre algún comportamiento asintótico (de un modelo dinámico) a tiempos cortos o largos.*

Máxima 8. *Estudie casos límite y determine cómo se enlazan con problemas más simples que puedan resolverse explícitamente.*

Retomando el ejemplo de la cinética de Michaelis-Menten, una alternativa al método corto presentado arriba es considerar los siguientes casos límite

- Si $c_A \gg K_m$, entonces la Ec. (3.4-11) se reduce a

$$R_A \approx V_{\text{máx}} \quad (3.4-17)$$

la cual es una cinética de orden cero.

- Si $c_A \ll K_m$, entonces la Ec. (3.4-11) se reduce a la expresión de primer orden:

$$R_A \approx \frac{V_{m\acute{a}x}}{K_m} c_A \quad (3.4-18)$$

Ambos casos límite llevan a modelos lineales de la ecuación de balance y permiten llevar a cabo soluciones analíticas. Sin embargo, salvo que el sistema físico satisfaga alguno de estos dos extremos, el método corto descrito arriba ofrece mejores aproximaciones que estos casos extremos.

Máxima 9. *Use aproximaciones burdas ... reflexione sobre las analogías que sugieren, pero recuerde sus limitaciones.*

Por ejemplo, en la Sección 3.5.1 se propone estudiar la transferencia de calor en una cabeza humana, representando su geometría por una esfera. En el siguiente capítulo se discutirá sobre los alcances y limitaciones de dicha aproximación. Por lo pronto, puede esperarse que si existieran fuentes o sumideros de calor en alguna región localizada de la cabeza, es muy probable que una esfera no proporcione una aproximación adecuada.

Máxima 10. *Rearregle el problema. No asocie ideas fijas en lo que es conocido y lo que es desconocido. Esté preparado para trabajar con soluciones implícitas.*

Retomando el ejemplo de la partícula catalítica esférica de radio R con cinética no lineal, suponiendo que lejos de la superficie de la partícula, la concentración es constante, $c_{A\infty}$, se tiene el siguiente problema de valor a la frontera

$$\mathcal{D}_A \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dc_A}{dr} \right) = R_A \quad (3.4-19a)$$

$$\text{En } r = 0, \quad \frac{dc_A}{dr} = 0 \quad (3.4-19b)$$

$$\text{En } r = R, \quad -\mathcal{D}_A \frac{dc_A}{dr} = k_M (c_A - c_{A\infty}) \quad (3.4-19c)$$

La única fuente de este problema es $c_{A\infty}$ (ver Problema 3.16). Como se mencionó anteriormente, no es posible resolver este problema de manera analítica. En vez de recurrir a linealizaciones, en esta ocasión se buscará desarrollar una solución implícita que, tras un proceso iterativo, de lugar a la solución. La clave del método reportado por Valdés-Parada *y col.* (2007), consiste en considerar a la reacción química como un término heterogéneo en la ecuación diferencial. De esta forma, siguiendo la metodología presentada en el Apéndice A, la solución de este problema es

$$c_A(\xi) = \int_{\xi_0=0}^{\xi_0=1} R_A(c_A) G(\xi, \xi_0) \xi_0^2 d\xi_0 - Bi_M G(1, \xi_0) C_{A,\infty} \quad (3.4-20)$$

donde, $\xi = r/R$, $\xi_0 = r_0/R$, $Bi_M = k_M R/\mathcal{D}_A$ y $G(\xi, \xi_0)$ es la función de Green correspondiente a este problema, la cual está dada por la siguiente expresión, (tomada de la Tabla 2 en Valdés-Parada *y col.*, 2007)

$$G(\xi, \xi_0) = \begin{cases} 1 - \xi_0^{-1} - Bi_M^{-1}, & \xi < \xi_0 \\ 1 - \xi^{-1} - Bi_M^{-1}, & \xi > \xi_0 \end{cases} \quad (3.4-21)$$

Claramente, la solución dada en la Ec. (3.4-20) es implícita pues la concentración c_A depende de la integral de sí misma. Sin embargo, esto no le resta poder o capacidad predictiva respecto a métodos tradicionales.

Máxima 11. *De ser posible desprezice términos pequeños, pero sea cauteloso.*

Para aclarar esta máxima, es conveniente recurrir al trabajo de Whitaker (1988), donde se identifican tres niveles de simplificación. Considere la transferencia de calor de un fluido que circula a través de un tubo de radio R y largo L . Suponiendo que no hay generación de calor y que el transporte por radiación es despreciable respecto a la difusión y convección, se tiene la siguiente ecuación de balance:

$$\underbrace{\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t}}_{\text{acumulación}} + \underbrace{\rho C_p \mathbf{v} \cdot \nabla T}_{\text{convección}} = \underbrace{k \nabla^2 T}_{\text{difusión}} \quad (3.4-22)$$

Suponga que la situación física a la que se aplica esta ecuación sugiere que el calor se transporta principalmente por difusión. Lo más sencillo es arbitrariamente postular que

Nivel de simplificación I:

$$\rho C_p \mathbf{v} \cdot \nabla T = 0 \quad (3.4-23)$$

Bajo esta simplificación la Ec. (3.4-22) se reduce al resultado deseado que es:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \nabla^2 T \quad (3.4-24)$$

Sin embargo, este primer nivel de simplificación no aporta información acerca de las circunstancias en que este modelo simplificado es válido. En otras palabras, el interés está en determinar lo que se debe cumplir para que la siguiente desigualdad sea válida

Nivel de simplificación II:

$$\rho C_p \mathbf{v} \cdot \nabla T \ll k \nabla^2 T \quad (3.4-25)$$

Comparada con la Ec. (3.4-23), la desigualdad anterior informa que es posible llegar a la Ec. (3.4-24) cuando el transporte de calor por difusión sea mucho mayor que el transporte por convección. El siguiente paso es determinar lo que se debe cumplir para satisfacer la desigualdad en (3.4-25). Para ello, se estima el orden de magnitud de los términos de convección y conducción,

$$\rho C_p \mathbf{v} \cdot \nabla T = \mathbf{O} \left(\frac{\rho C_p v T}{L_{conv}} \right) \quad (3.4-26a)$$

$$k \nabla^2 T = \mathbf{O} \left(\frac{k T}{L_{dif}^2} \right) \quad (3.4-26b)$$

Siendo L_{conv} y L_{dif} las longitudes características asociadas con la convección y la difusión. En este caso, es razonable asociar la longitud de convección con el largo del tubo y la longitud de conducción con su radio. De esta forma, sustituyendo los estimados dados en las ecs. (3.4-26) en (3.4-25), se obtiene la siguiente desigualdad:

Nivel de simplificación IIIa:

$$\frac{\rho C_p v R^2}{k L} \ll 1 \quad (3.4-27)$$

Para simplificar esta ecuación, se recurre a la definición del número de Péclet

$$Pe = \frac{\rho C_p v R}{k} \quad (3.4-28)$$

De esta forma, el tercer nivel de simplificación puede reescribirse como sigue:
Nivel de simplificación IIIb:

$$Pe \frac{R}{L} \ll 1 \quad (3.4-29)$$

El cual indica que, cuando el producto del número de Péclet con la razón del radio del tubo y su largo⁵, sea mucho menor que uno es posible despreciar al transporte convectivo respecto a su contraparte conductiva. Whitaker (1988) sugiere que, en la medida de lo posible, se busque llegar hasta el tercer nivel de simplificación al establecer modelos. Esto se debe a que es éste el que informa acerca de la causa por la cual se simplifica el modelo. Esto no quiere decir que no sea válida una simplificación como la del Nivel I, ya que ésta explica la consecuencia final de las simplificaciones. Sin embargo, el contar con restricciones del tipo del Nivel III es conveniente pues ayudan a comprender el rango de aplicación del modelo.

Máxima 12. *Use conocimientos parciales y no los menosprecie.*

Por ejemplo, si se desea resolver un modelo transitorio de un sistema, es mucho más fácil resolver el mismo modelo en estado estacionario. Si bien esta solución sólo aporta un conocimiento parcial, permite conocer cuál es el límite superior (en el tiempo) al que deben llegar los resultados del modelo en estado transitorio.

Máxima 13. *Estas máximas se auto-destruirán. Haga usted sus propias máximas.*

No está de más insistir que, en la medida en que se lleven a cabo este trabajo previo a la solución del modelo, se estará en la posición de saber qué tipos de resultados nos proporcionará dicha solución. Además, cabe remarcar que las máximas anteriores proporcionan consejos tanto para el planteamiento como

⁵La cual es una relación de aspecto.

la solución de modelos, por lo que serán esenciales en el resto de este capítulo y en el siguiente.

3.5. Algunos problemas de aplicación

Para concluir este capítulo es conveniente aplicar las recomendaciones presentadas para el planteamiento de modelos a algunos casos particulares; lo cual se lleva a cabo en los siguientes párrafos. En el siguiente capítulo se abordará la solución y análisis de los modelos planteados aquí. Por lo que, por el momento, la atención se centrará en los aspectos físicos que sustentan los modelos y las suposiciones inherentes a su desarrollo. Además de estos ejemplos, en los últimos tres problemas propuestos al final de este capítulo, se presentan otras aplicaciones, donde se busca que el lector identifique las máximas utilizadas.

3.5.1. Modelado de la transferencia de calor en una cabeza humana

Como primer problema a analizar, se estudiará la transferencia de calor transitoria en una cabeza humana, incluyendo una fuente de generación de calor interna. El modelo matemático fue propuesto por Flesch (1975) y consiste en la siguiente ecuación diferencial parcial

$$\underbrace{\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t}}_{\text{acumulación de calor}} = \underbrace{\frac{k}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right)}_{\text{conducción de calor}} + \underbrace{f(T)}_{\text{fuente de generación de calor}}, \quad \forall r \in (0, R), t > 0$$

(3.5-1)

Comparando esta ecuación, con la forma más general de la ecuación de energía térmica presentada en el capítulo anterior [Ec. (2.7-57b)], pueden identificarse las siguientes suposiciones:

- 1 La geometría de la cabeza se ha concebido como una esfera de radio R (máxima 9).
- 2 Los cambios importantes de la temperatura sólo tienen lugar en la dirección radial pues se ha supuesto simetría en las direcciones angular y azimutal (máxima 5).

3 Las propiedades de la cabeza (densidad, ρ , capacidad calorífica, C_p , y conductividad térmica, k) se suponen constantes.

4 Se ha incluido una fuente de generación de calor, f , la cual es una función de la temperatura y puede originarse por distintas razones. Más adelante se presentará su expresión matemática.

La Ec. (3.5-1) está sujeta a las siguientes condiciones de frontera,

$$\text{La temperatura está definida en } 0 \leq r \leq R, \quad \forall t \quad (3.5-2a)$$

$$\text{En } r = R, \quad -k \frac{\partial T}{\partial r} = h(T - T_a), \quad \forall t \quad (3.5-2b)$$

donde h es el coeficiente de transferencia de calor y T_a es la temperatura ambiental. A primera vista, la Ec. (3.5-2a) no parece una condición de frontera pues no encaja en la clasificación de tipo Dirichlet, Neumann o mixta presentadas en la Sección 2.7.6. Más bien, esta ecuación representa una restricción que debe cumplir la temperatura en todo el dominio. Más adelante se mostrará que esta restricción es, en efecto, suficiente para determinar el valor de una de las constantes de integración. Por otro lado, la Ec. (3.5-2b) corresponde a la ley de enfriamiento de Newton presentada anteriormente.

Dado que la Ec. (3.5-1) es transitoria, para finalizar el planteamiento del modelo, es necesario contar con una condición inicial, la cual es

$$\text{Cuando } t = 0, \quad T = T_0 \quad (3.5-3)$$

siendo T_0 una constante conocida. Antes de avanzar, es conveniente notar lo siguiente:

- El modelo ha sido planteado en forma elegante pues hemos usado la información necesaria y no más (máxima 1).
- La notación ha sido consistente con la usada en los textos normalmente usados de transferencia de calor (máxima 2).

Por último, es necesario proporcionar la expresión de la fuente pues si ésta es no lineal sabemos de antemano que no será posible obtener una solución analítica exacta. Gray (1980) propuso la siguiente expresión lineal para la fuente de calor

$$f(T) = \alpha \left(1 - \frac{NT}{\alpha} \right) \quad (3.5-4)$$

donde α y N son parámetros positivos conocidos. Mientras que Anderson y Arthurs (1981) sugirieron la siguiente expresión no lineal

$$f(T) = \alpha e^{-NT/\alpha} \tag{3.5-5}$$

Esta propuesta es interesante, pues se reduce a la Ec. (3.5-4) bajo determinadas condiciones (ver Problema 3.17). En el siguiente capítulo se estudiarán los alcances y limitaciones del modelo lineal y se hará el análisis correspondiente.

3.5.2. Penetración de un derrame de petróleo en el subsuelo

Considere el sistema mostrado en la Fig. 3.5-1, donde se esquematiza un episodio de derrame de petróleo en el subsuelo (Herrera y Pinder, 2012). Inicialmente (es decir, cuando el petróleo aún no ha penetrado en el subsuelo), la película de aceite tiene un espesor h_0 el cual se supone constante a lo largo de la superficie del medio poroso (Fig. 3.5-1a). Posteriormente (para $t > 0$), el petróleo comienza a penetrar una distancia $z(t)$ en el subsuelo y el espesor de la película disminuye ($h(t) < h_0$) (Fig. 3.5-1b).

En estos casos, la principal incógnita a determinar es la profundidad a la que el petróleo penetrará en un tiempo dado. Lo anterior es crucial en la elección del tipo de operación de extracción y de remediación a aplicar.

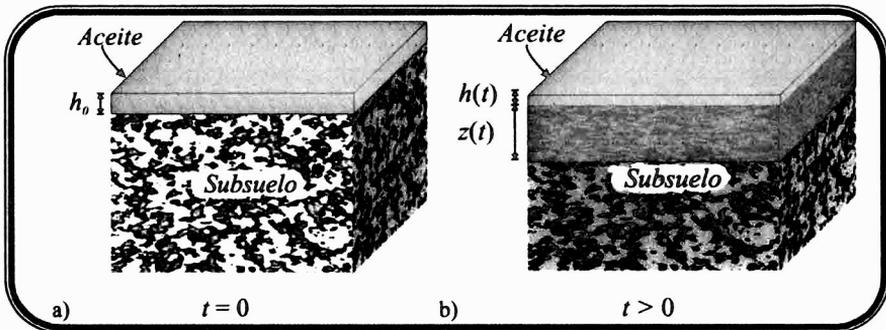


Figura 3.5-1: Esquemas de penetración de una película de aceite en el subsuelo. a) sistema al inicio, b) sistema después de un cierto tiempo.

Para comenzar con el planteamiento del problema, es conveniente utilizar la ecuación de continuidad en estado transitorio, referida al petróleo [Ec. (2.7-55a)],

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = 0 \quad (3.5-6)$$

Suponiendo que esta ecuación es válida en cada punto del sistema⁶, se define ahora un volumen material⁷, $V(t)$, que comprende el petróleo del derrame. Integrando la Ec. (3.5-6) en este volumen resulta,

$$\int_{V(t)} \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_{V(t)} \nabla \cdot \rho \mathbf{v} dV = 0 \quad (3.5-7)$$

Tomando en cuenta el teorema general del transporte,

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \psi dV = \int_{V(t)} \frac{\partial \psi}{\partial t} dV + \int_{A(t)} \mathbf{n} \cdot \psi \mathbf{w} dA \quad (3.5-8)$$

y el teorema de la divergencia,

$$\int_{V(t)} \nabla \cdot \mathbf{a} dV = \int_{A(t)} \mathbf{n} \cdot \mathbf{a} dA \quad (3.5-9)$$

La Ec. (3.5-7) puede escribirse como

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho dV + \int_{A(t)} \mathbf{n} \cdot \rho (\mathbf{v} - \mathbf{w}) dA = 0 \quad (3.5-10)$$

donde \mathbf{w} es el vector de velocidad de desplazamiento de la superficie del volumen V . En este momento es conveniente reconocer que la masa de petróleo en el derrame es

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Masa de petróleo} \\ \text{en el derrame} \end{array} \right\} = \int_{V(t)} \rho dV \quad (3.5-11)$$

⁶Esto implica suponer que hubo un proceso de promediado previo como el que se explica en el Capítulo 4 de Whitaker (1999).

⁷Es decir, aquel siempre contiene la misma cantidad de materia y puede modificar su forma a lo largo del tiempo.

Y dado que esta masa es siempre la misma en V , el primer término de la Ec. (3.5-10) es cero, por lo que ésta se reduce a,

$$\int_{A(t)} \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v} dA = \int_{A(t)} \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{w} dA \quad (3.5-12)$$

Para avanzar en el planteamiento del modelo es conveniente hacer dos suposiciones,

- 1 El desplazamiento del derrame se da principalmente en la dirección vertical.
- 2 La densidad del petróleo no cambia con el desplazamiento.

Debido a la primera suposición, es posible establecer las siguientes expresiones

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{v} = v_z; \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{w} = \frac{dz}{dt} \quad (3.5-13)$$

Y debido a la segunda suposición es posible retirar la densidad de las integrales de la Ec. (3.5-12), la cual puede expresarse ahora como sigue

$$\int_A v_z dA = \frac{dz}{dt} A \quad (3.5-14)$$

Para obtener el lado derecho de este último resultado se tomó en cuenta que el desplazamiento z no depende del área de la sección transversal. Por otro lado, puede definirse el promedio de la velocidad en el área como

$$\langle v_z \rangle = \frac{1}{A} \int_A v_z dA \quad (3.5-15)$$

De esta forma, la Ec. (3.5-14) se reduce a

$$\frac{dz}{dt} = \langle v_z \rangle \quad (3.5-16)$$

Esto concluye la aplicación de la ley de conservación de materia (para consultar una deducción alternativa ver el Problema 3.18). Sin embargo, la

velocidad de penetración $\langle v_z \rangle$ es función de la distancia de penetración z . Para determinar dicha relación se usa la ley de Darcy (la cual es, en este caso, una relación auxiliar en el planteamiento del modelo)⁸,

$$\langle v_z \rangle = \frac{K}{\varepsilon \mu} \frac{\Delta p}{z} \quad (3.5-17)$$

donde K , ε y μ denotan la permeabilidad del medio poroso, su porosidad y la viscosidad del petróleo, respectivamente. Además, el cambio de presión en el medio poroso (Δp) se puede determinar mediante la ecuación fundamental de la hidrostática como,

$$\Delta p = \rho g (z + h) \quad (3.5-18)$$

Nótese que en la ecuación anterior se consideró tanto la distancia de penetración como la altura de la película de petróleo. Sustituyendo la ecuación anterior en la Ec. (3.5-17) se obtiene la siguiente forma de la ley de Darcy

$$\langle v_z \rangle = \frac{K}{\varepsilon \mu} \rho g \frac{(z + h)}{z} \quad (3.5-19)$$

De esta forma, la Ec. (3.5-16) puede expresarse como,

$$\varepsilon \frac{dz}{dt} = \frac{K}{\mu} \rho g \frac{(z + h)}{z} \quad (3.5-20)$$

Sin embargo, como se muestra en la Fig. 3.5-1 b), tanto z como h son funciones del tiempo, el cual es la variable independiente en la Ec. (3.5-20). De manera que es deseable expresar dicha ecuación en términos de sólo una variable dependiente (z) y otra independiente (t). Para ello, conviene considerar el siguiente balance de materia,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Masa de petróleo} \\ \text{al inicio} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Masa de petróleo que} \\ \text{permanece en la película} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Masa de petróleo que} \\ \text{penetró en el subsuelo} \end{array} \right\} \quad (3.5-21)$$

⁸Para conocer su deducción a partir de la ecuación de Stokes, se recomienda revisar el Capítulo 4 de Whitaker (1999)

O bien, en términos de propiedades medibles en el sistema,

$$h_0 \rho A = h \rho A + \varepsilon z \rho A \quad (3.5-22)$$

La cual permite expresar a h en función de z como sigue,

$$h = h_0 - \varepsilon z \quad (3.5-23)$$

Sustituyendo la ecuación anterior en la Ec. (3.5-20) resulta,

$$\frac{dz}{dt} = \frac{K \rho g}{\varepsilon \mu} \left[\frac{h_0 + (1 - \varepsilon) z}{z} \right] \quad (3.5-24)$$

La cual es la ecuación que se buscaba, note que las únicas variables dependiente e independiente son z y t , respectivamente. Para completar el planteamiento del modelo se necesita proponer una condición inicial, es decir, el valor de la variable dependiente cuando el tiempo es cero. Como en este caso, el tiempo se empieza a contar cuando el aceite penetra al subsuelo, la condición inicial es

$$\text{Cuando } t = 0, \quad z = 0 \quad (3.5-25)$$

Con esto se termina el planteamiento del modelo, la solución y su análisis se presentarán en el siguiente capítulo. Por el momento, es conveniente listar algunos aspectos relevantes del modelo:

- 1 Se ha supuesto que las propiedades físicas del petróleo son constantes en espacio y tiempo y que su masa es constante en el volumen de control.
- 2 Se supuso que el movimiento del derrame es uniforme en la sección transversal, de manera que sólo cambia en la dirección vertical (máxima 5).
- 3 Para plantear la ecuación diferencial gobernante, se utilizó la versión macroscópica de la ecuación de continuidad como ecuación de balance [Ec. (3.5-16)] y las relaciones auxiliares fueron la ley de Darcy [Ec. (3.5-17)], la ecuación fundamental de la hidrostática [Ec. (3.5-18)] y un balance global de materia [Ec. (3.5-22)] (máxima 1).
- 4 La notación que se ha usado es consistente con estudios de transporte en medios porosos (Whitaker, 1999; Bear y Cheng, 2010; Herrera y Pinder, 2012) (máxima 2).

3.5.3. Destilación diferencial

La destilación diferencial (o abierta) es el tipo más simple de destilación discontinua y se suele llevar a cabo en equipos que se basan en el principio fundamental ilustrado en la Fig. (3.5-2). En esta operación el vapor que sale de la caldera de destilación (a una composición y_D) se supone que está en equilibrio con el líquido de la caldera (a una composición x_L). Por otro lado, cuando se da una condensación total se tiene que $y_D = x_D$. Por lo que sólo hay una etapa de equilibrio. En este tipo de separación la composición de la carga inicial y el destilado cambian con el tiempo, por lo que no se llega al estado estacionario.

La separación discontinua es ventajosa cuando (Treybal, 1980):

- 1 La capacidad de operación es demasiado pequeña para permitir una operación continua.
- 2 Permite destilar, en un sólo equipo, diferentes corrientes de alimentación para obtener diversos productos.
- 3 La alimentación puede contener sólidos u otros materiales que forman sólidos, aglomerados o resinas que pueden perjudicar a una columna de destilación continua.

La mayor flexibilidad de operación respecto a los equipos continuos hace que las separaciones discontinuas sean preferibles en las operaciones de recuperación de diferentes solventes o en aplicaciones de planta piloto. Para encontrar la ecuación que relaciona la cantidad del líquido en la caldera (L) con la composición del destilado (x_D), se propone la siguiente nomenclatura:

Símbolo	Significado
D	Flujo instantáneo de destilado, mol/h
$y = y_D = x_D$	Composición instantánea del destilado
L	Moles de líquido que quedan en la caldera
x_L	Composición del líquido en la caldera
0	Subíndice referente a las condiciones iniciales.

El balance total de materia en el sistema es (Problema 3.19)

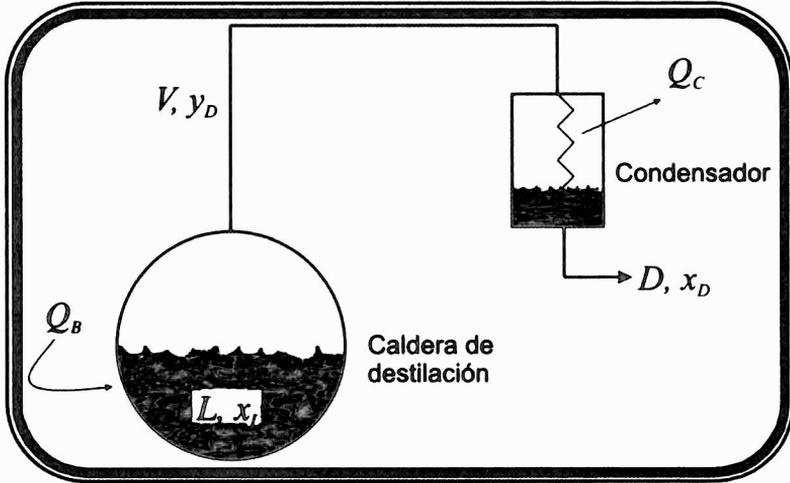


Figura 3.5-2: Esquema de destilación diferencial.

$$-D = \frac{dL}{dt} \tag{3.5-26}$$

Mientras que el balance para cualquier componente es (Problema 3.20)

$$\frac{d(Lx_L)}{dt} = -Dy_D \tag{3.5-27}$$

Desarrollando la derivada en el lado izquierdo de la ecuación anterior resulta,

$$L \frac{dx_L}{dt} + x_L \frac{dL}{dt} = -Dy_D \tag{3.5-28}$$

Sustituyendo $-D$ de la Ec. (3.5-26) en la Ec. (3.5-27) se obtiene

$$L \frac{dx_L}{dt} = (y_D - x_L) \frac{dL}{dt} \tag{3.5-29}$$

O bien,

$$\frac{dx_L}{(y_D - x_L)} = \frac{dL}{L} \tag{3.5-30}$$

Integrando desde las condiciones iniciales hasta las composiciones finales en la caldera, resulta la *ecuación de Rayleigh*

$$\int_{x_{L0}}^{x_L} \frac{d\xi_L}{(y_D - \xi_L)} = \int_{L_0}^L \frac{d\lambda}{\lambda} = \ln \left(\frac{L}{L_0} \right) \quad (3.5-31)$$

Conviene insistir que, si no hay reflujo, las composiciones y_D y x_L están en equilibrio, por lo que se puede escribir la ecuación anterior como,

$$\int_{x_0}^x \frac{d\xi}{(y - \xi)} = \ln \left(\frac{L}{L_0} \right) \quad (3.5-32)$$

Esta ecuación constituye el modelo que se desea. Cuando se conoce la relación matemática entre las composiciones en equilibrio x y y , la integral en el lado izquierdo de la Ec. (3.5-32) puede resolverse analíticamente como se muestra en los siguientes casos:

- 1 Cuando la presión es constante y los cambios de temperatura en la caldera son relativamente pequeños (cerca de la temperatura de ebullición de la mezcla), se puede usar la ley de Henry $y = Kx$ (suponiendo que K es aproximadamente constante), de manera que (Problema 3.21),

$$\frac{L}{L_0} = \left(\frac{x}{x_0} \right)^{1/(K-1)} \quad (3.5-33)$$

- 2 Si en el intervalo de operación la relación entre las composiciones de equilibrio es de tipo lineal ($y = ax + b$), la Ec. (3.5-32) da lugar a (Problema 3.22),

$$\frac{L}{L_0} = \left(\frac{(a-1)x + b}{(a-1)x_0 + b} \right)^{\frac{1}{(a-1)}} \quad (3.5-34)$$

- 3 Para una mezcla binaria, de volatilidad relativa, v_α , constante, se tiene la siguiente relación $y = v_\alpha x / [1 + (v_\alpha - 1)x]$ (Treybal, 1980), lo que da lugar a la siguiente expresión (Problema 3.23),

$$\frac{L_0}{L} = \left[\frac{x_0}{x} \left(\frac{1-x}{1-x_0} \right)^{v_\alpha} \right]^{\frac{1}{v_\alpha-1}} \quad (3.5-35)$$

Para cerrar este caso de aplicación es conveniente listar los aspectos relevantes del modelo:

- 1 Para formular el modelo se utilizó una notación que es consistente con la literatura de operaciones unitarias de transferencia de masa (Treybal, 1980) (máxima 1).
- 2 Se supuso que no existen salidas adicionales a la del condensador, es decir, no se consideraron fugas (máxima 11).
- 3 Se consideraron tres casos que permiten formular el modelo en una forma algebraica [ecs. (3.5-33)-(3.5-35)] en lugar de una forma integral [Ec. (3.5-32)] (máxima 8).
- 4 Sin embargo, si no se cuenta con una relación analítica de las composiciones del equilibrio líquido-vapor, sino que se dispone de un conjunto de datos experimentales, entonces es necesario llevar a cabo la integral de la Ec. (3.5-32) de manera numérica (máxima 10) como se verá en el siguiente capítulo.

3.5.4. Respuesta transitoria de un panel fotovoltaico

El uso de equipos de almacenamiento y aprovechamiento de energía solar han ido en aumento en las últimas décadas. Su uso va desde relojes hasta prototipos de casas enteras que pueden funcionar mediante este tipo de energía.

Los paneles fotovoltaicos (Fig. 3.5-3) funcionan, casi en su totalidad, bajo condiciones transitorias en particular en los periodos de arranque durante las primeras horas de la mañana. El objetivo es determinar la dependencia temporal de la temperatura de la superficie de un panel a lo largo de un año en el Valle de México.

El sistema consiste en una celda solar, dado que no hay convección ni generación de calor al interior de ella, la ecuación de energía térmica [Ec. (2.7-57b)] se reduce a

$$\underbrace{\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t}}_{\text{acumulación}} = \underbrace{k \nabla^2 T}_{\text{transporte difusivo}} \quad (3.5-36)$$

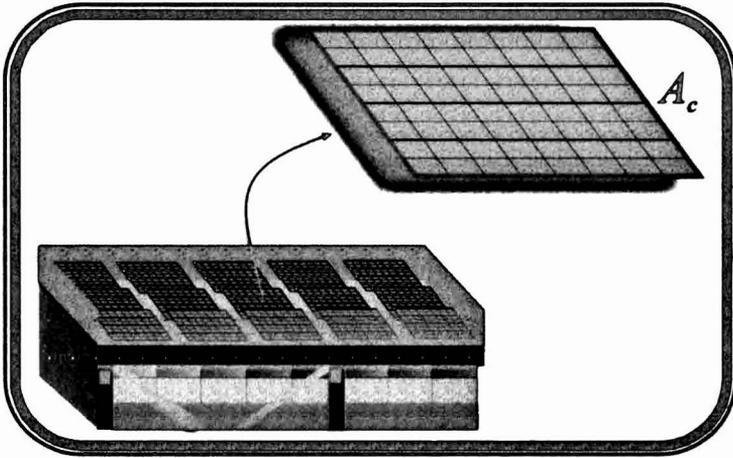


Figura 3.5-3: Esquema del panel fotovoltaico instalado en la azotea del edificio B de la UAM-Iztapalapa.

Evidentemente, la temperatura T es función de la posición y el tiempo, por lo que, para simplificar el modelo, se buscará desarrollar una expresión en la cual la temperatura sólo dependa del tiempo. Para ello se define la temperatura promedio en el volumen como,

$$\langle T \rangle = \frac{1}{V} \int_V T dV \quad (3.5-37)$$

donde V representa el volumen de la celda solar. Aplicando el operador de promediado a la Ec. (3.5-36) resulta,

$$\rho C_p \left\langle \frac{\partial T}{\partial t} \right\rangle = k \langle \nabla^2 T \rangle \quad (3.5-38)$$

Para obtener este resultado se supuso que las propiedades de la celda (densidad, capacidad calorífica y conductividad térmica) son constantes en el dominio de integración. Dirigiendo la atención al término de acumulación, dado que el volumen de promediado no cambia con el tiempo, se obtiene del

teorema general del transporte [Ec. (3.5-8)] lo siguiente,

$$\rho C_p \left\langle \frac{\partial T}{\partial t} \right\rangle = \rho C_p \frac{d}{dt} \left[\frac{1}{V} \int_V T dV \right] = \rho C_p \frac{d\langle T \rangle}{dt} \quad (3.5-39)$$

Por lo que la Ec. (3.5-38) puede escribirse como

$$\rho C_p \frac{d\langle T \rangle}{dt} = k \langle \nabla^2 T \rangle \quad (3.5-40)$$

Trabajando con el término difusivo, al utilizar el teorema de la divergencia [Ec. (3.5-9)], se obtiene el siguiente resultado (Problema 3.24),

$$\rho C_p \frac{d\langle T \rangle}{dt} = \frac{1}{V} \int_A \mathbf{n} \cdot k \nabla T dA \quad (3.5-41)$$

donde A se refiere a todas las superficies de las celdas, las cuales se pueden clasificar en dos grupos: las expuestas al sol (A_c) y las no expuestas (A_{nc}). De esta forma, la integral de superficie del lado derecho de la Ec. (3.5-41) puede dividirse en dos partes, dando lugar a la siguiente expresión,

$$\rho C_p \frac{d\langle T \rangle}{dt} = \frac{1}{V} \int_{A_c} \mathbf{n}_c \cdot k \nabla T dA + \frac{1}{V} \int_{A_{nc}} \mathbf{n}_{nc} \cdot k \nabla T dA \quad (3.5-42)$$

Para simplificar el problema se supondrá que la transferencia de calor en todas las superficies no expuestas es despreciable respecto a la que tiene lugar en la superficie expuesta (máxima 11), esto es,

$$\frac{1}{V} \int_{A_{nc}} \mathbf{n}_{nc} \cdot k \nabla T dA \ll \frac{1}{V} \int_{A_c} \mathbf{n}_c \cdot k \nabla T dA \quad (3.5-43)$$

Bajo esta suposición, que corresponde a un Nivel II de simplificación de Whitaker (1988), la Ec. (3.5-42) se reduce a

$$\rho C_p \frac{d\langle T \rangle}{dt} = \frac{1}{V} \int_{A_c} \mathbf{n}_c \cdot k \nabla T dA \quad (3.5-44)$$

En la superficie expuesta, ocurren al menos tres fenómenos relevantes de transferencia de calor:

- 1 Difusión de calor de la superficie hacia dentro de la celda, la cual se puede modelar mediante la ley de Fourier: $\mathbf{q}_d = -k\nabla T$.
- 2 Convección de calor de la superficie hacia el ambiente, el cual se encuentra a una temperatura T_A . Este tipo de transporte se ha representado mediante la ley de enfriamiento de Newton, $h(T - T_A)$, donde h es el coeficiente interfacial de transferencia de calor.
- 3 Radiación de calor del sol hacia la superficie de la celda, \mathbf{q}_r .

Haciendo un balance de calor en la superficie de la celda, se obtiene la siguiente expresión,

$$\underbrace{-\mathbf{n}_c \cdot k\nabla T}_{\text{difusión}} + \underbrace{\mathbf{n}_c \cdot \mathbf{q}_r}_{\text{radiación}} = \underbrace{h(T - T_A)}_{\text{convección}} \quad (3.5-45)$$

Sustituyendo esta expresión en el lado derecho de la Ec. (3.5-44) resulta lo siguiente,

$$\rho C_p V \frac{d\langle T \rangle}{dt} = - \int_{A_c} h(T - T_a) dA + S A_c \quad (3.5-46)$$

donde se definió la energía solar incidente por unidad de tiempo y unidad de área, S , como

$$S = \frac{1}{A_c} \int_{A_c} \mathbf{n}_c \cdot \mathbf{q}_r dA \quad (3.5-47)$$

Por último, suponiendo que la temperatura ambiente y el coeficiente de transferencia de calor no cambian en el dominio de integración, se obtiene, tras algunos pasos algebraicos (ver Problema 3.25), el siguiente resultado,

$$\rho C_p \frac{d\langle T \rangle}{dt} = -h \frac{A_c}{V} (\langle T \rangle - T_a) + S \frac{A_c}{V} \quad (3.5-48)$$

Cada uno de los términos de la expresión anterior tiene unidades de energía por unidad de tiempo. De esta forma, la tasa de entrada de calor viene del sol, la cual depende en una forma compleja de la posición del sol, la nubosidad del cielo, la inclinación del panel y desde luego del tiempo. Para completar el planteamiento del modelo, es necesario especificar la condición inicial de la temperatura. En este problema se busca llevar a cabo un análisis a lo largo de

Tabla 3.4-1: Temperatura mínima ambiental durante el año 2004 para el valle de México y energía solar disponible promedio diaria por mes.

Mes	$T_A(^{\circ}C)$	$S (\times 10^6 \text{ J/m}^2\text{día})$
Enero	7.2	17.5
Febrero	7.5	19.2
Marzo	10.6	22.2
Abril	11.1	22.5
Mayo	12.0	21.8
Junio	12.3	19.0
Julio	12.1	19.7
Agosto	12.7	19.1
Septiembre	12.6	16.6
Octubre	12.1	16.3
Noviembre	8.6	16.1
Diciembre	6.8	15.5

un año acerca de la temperatura de la placa del panel fotovoltaico. Para ello, se asignaría como tiempo inicial al mes de enero, en donde la temperatura ambiental es baja (alrededor de $7.2^{\circ}C$, ver Tabla 3.4-1).

Condición inicial:

$$t = 0, \quad \langle T \rangle = T_0 = 7.2^{\circ}C \quad (3.5-49)$$

Las ecs. (3.5-48) y (3.5-49) constituyen el modelo a estudiar. Sin embargo, tanto S como la temperatura ambiente cambian con el tiempo y es necesario conocer esta dependencia para completar el modelo.

Para ello, se reporta en la Tabla 2.4-1 el promedio de temperatura mínima ambiental para el valle de México a partir del Informe climático ambiental que emitió la Secretaría del Medio Ambiente en el año 2004 junto con la energía solar disponible promedio diaria para el valle de México.

Antes de continuar es pertinente escribir el problema en forma adimensional, para ello, se define el tiempo característico de difusión de calor en el interior de la celda como

$$t_d = \frac{\rho C_p L_c^2}{k} \quad (3.5-50)$$

donde L_c es el largo de la celda. De acuerdo a Flores-Barrios (2005) las dimensiones de un panel fotovoltaico típico son: largo = 2.024 m, ancho 0.153 m, espesor: 4×10^{-4} m. Tomando las propiedades del silicio como material de construcción del panel fotovoltaico, se tiene $\rho = 2.33 \times 10^3$ kg/m³, $C_p = 700$ J/kg °C y $k = 148$ W/ m °C. Sustituyendo estos valores en la Ec. (3.5-50) se obtiene que el tiempo característico de difusión es de aproximadamente medio día (45,145.3747 s).

Para escribir el modelo en forma adimensional, se proponen las siguientes definiciones

$$\tau = \frac{t}{t_d}; \quad \Theta = \frac{\langle T \rangle}{T_0}; \quad \Theta_a = \frac{T_a}{T_0} \quad (3.5-51)$$

Por lo que al hacer los cambios de variables correspondientes (ver Problema 3.26) el modelo es ahora,

$$\frac{d\Theta}{d\tau} = -Bi^* (\Theta - \Theta_a) + S^* \quad (3.5-52a)$$

$$\text{Condición inicial: } \tau = 0, \quad \Theta = 1 \quad (3.5-52b)$$

donde, se definió el número de Biot modificado como

$$Bi^* = \frac{hL_c}{k} \frac{A_c L_c}{V} = 708.7 \quad (3.5-53)$$

así como el coeficiente de energía solar incidente adimensional,

$$S^* = \frac{SL_c}{T_0 k} \frac{A_c L_c}{V} \quad (3.5-54)$$

Para obtener expresiones analíticas que representen las versiones adimensionales de los datos de la Tabla 3.4-1 puede utilizarse el modelado basado en la observación (ver Sección 2.6). Utilizando polinomios de tercer orden se obtienen las siguientes ecuaciones,

$$\Theta_a = 0.978 + 0.00326\tau + 5.82026 \times 10^{-7}\tau^2 - 9.25617 \times 10^{-9}\tau^3 \quad (3.5-55a)$$

$$S^* = 1.65 \times 10^8 + 5.9 \times 10^5\tau - 2.1 \times 10^3\tau^2 + 1.82\tau^3 \quad (3.5-55b)$$

La comparación entre estas expresiones y los datos experimentales se muestra en las gráficas de la Fig. 3.5-4. En ambos casos el error relativo global

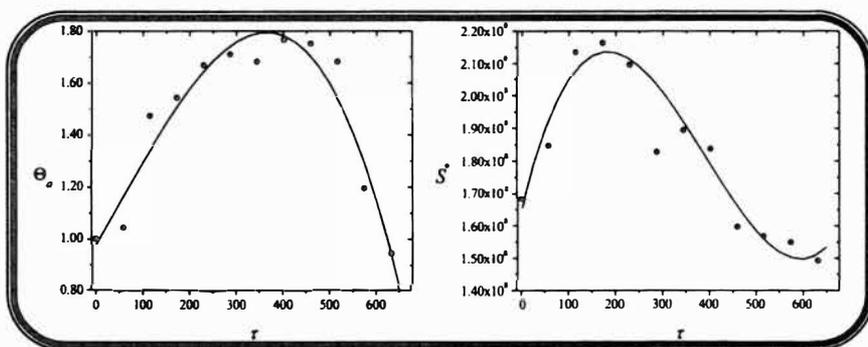


Figura 3.5-4: Comparación entre datos experimentales y modelado basado en la observación de los cambios temporales de las formas adimensionales de la temperatura ambiente y la energía solar incidente en el valle de México.

fue inferior al 10 %. Con estas expresiones se completa el planteamiento del modelo cuya solución se analizará en el siguiente capítulo. Para cerrar este ejemplo, es conveniente listar sus aspectos relevantes:

- 1 A partir de la ecuación de energía térmica (simplificada al suponer que no hay convección ni fuentes internas de generación de calor dentro de la celda), se llevó a cabo un proceso de escalamiento para llegar al modelo macroscópico.
- 2 Este proceso involucró un planteamiento elegante del modelo (máxima 1), con una notación consistente con la literatura (máxima 2) así como el hacer ciertas suposiciones que permitieron despreciar algunos términos del modelo (máxima 11).
- 3 Una vez planteado el modelo se reformuló en su forma adimensional (máxima 3).
- 4 Se dedujeron expresiones analíticas para la dependencia de los coeficientes adimensionales que complementan el modelo.

3.5.5. Modelos matemáticos del amor

En esta última sección se propone un modelo matemático para describir el proceso de enamoramiento mediante un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias en estado transitorio. El problema está basado en el trabajo de Sprot (2004) y corresponde a un modelo de tipo predador-presa. Más que pretender con este ejemplo llegar a un modelo concluyente sobre un fenómeno tan complicado como el enamoramiento, la idea es presentar un modelo sencillo que permita tener una idea de cuál será la respuesta entre dos personas, bajo ciertas condiciones.

Planteamiento del modelo

Sea $R(t)$ el amor de Romeo por Julieta y $J(t)$ el amor que siente Julieta por Romeo en el tiempo t . Suponiendo que el amor existe y que es una cantidad medible y conservativa, se puede plantear la siguiente ecuación de balance

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Tasa de} \\ \text{entrada de amor} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{Tasa de} \\ \text{salida de amor} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Acumulación} \\ \text{de amor} \end{array} \right\} \quad (3.5-56)$$

Por el momento se aplicará esta ecuación a Romeo; suponiendo que no tiene entradas adicionales por amantes, la única fuente de entrada de amor que se considerará se debe al amor que recibe de Julieta, de esta forma

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Tasa de entrada} \\ \text{de amor de Romeo} \end{array} \right\} = bJ \quad (3.5-57)$$

donde b es una constante de proporcionalidad que describe la frecuencia con la que Julieta aporta amor a Romeo. Por otro lado, suponiendo que Romeo lleva una forma de vida muy simplificada, la única fuente de pérdida de amor por Julieta se atribuye al amor propio de Romeo, entonces

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Velocidad de salida} \\ \text{de amor de Romeo} \end{array} \right\} = aR \quad (3.5-58)$$

donde a es la frecuencia con la que Romeo se ama a sí mismo. Por último, la acumulación del amor de Romeo está dada por

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Acumulación} \\ \text{de amor} \end{array} \right\} = \frac{dR}{dt} \quad (3.5-59)$$

Por lo que la ecuación de conservación de amor de Romeo es

$$\frac{dR}{dt} = bJ - aR \quad (3.5-60)$$

Análogamente, la ecuación de conservación del amor de Julieta es

$$\frac{dJ}{dt} = cR - dJ \quad (3.5-61)$$

donde c denota la frecuencia con la que Julieta recibe amor de Romeo y d es la frecuencia con la que Julieta se ama a sí misma.

Las condiciones iniciales en todos los casos a explorar son las siguientes

$$R(0) = 0.5 \quad (3.5-62a)$$

$$J(0) = 0 \quad (3.5-62b)$$

Es decir, al inicio Romeo sentía 0.5 unidades de amor por Julieta mientras que ella no guardaba, en un principio, sentimiento alguno por Romeo. Curiosamente, el sistema de ecuaciones diferenciales de las que consta el modelo son análogos a una variedad de sistemas físicos que van desde la toma de decisiones en el mercado de valores hasta los balances de calor y masa en un reactor químico. En el siguiente capítulo se mostrarán las diversas soluciones a este modelo matemático sobre el amor. Al igual que en los casos anteriores, para concluir este ejemplo es conveniente listar los aspectos relevantes del modelo:

- Se supuso que el amor es una cantidad conservativa y que obedece una ley de balance (máximas 9 y 12).
- Se utilizó una notación lo suficientemente clara y simple (máxima 2) que permita hacer modificaciones al modelo (Problema 3.27).
- El modelo se formuló en el caso límite en que sólo existen dos personas aunque esto puede modificarse (Problema 3.27a) y que las fuentes de entrada y salida de amor son sólo el que se recibe y el que se tiene por sí mismo (máxima 8).

3.6. Resumen

Este capítulo se dedicó al planteamiento de modelos matemáticos deterministas basados en ecuaciones conservativas. Para ello, se abordaron los siguientes temas:

- 1 Se definieron niveles de escala en sistemas jerárquicos. Se explicó que es posible obtener modelos en escalas superiores al promediar y aplicar ciertas suposiciones a sus contrapartes de niveles inferiores. Esta técnica se utilizó en los ejemplos del derrame de petróleo y del panel fotovoltaico.
- 2 Se proporcionaron algunas recomendaciones para dar inicio al proceso de modelado matemático como son: hacer esquemas, inferir acerca de la dinámica del sistema y establecer diferentes niveles de sofisticación del modelo.
- 3 Para complementar estas recomendaciones, se listaron las 13 máximas de Aris (1976) respecto al planteamiento y solución de modelos matemáticos. Entre estas máximas caben resaltar las siguientes: Plantear el modelo en una forma elegante y usando una notación cómoda y consistente con la literatura; plantear el problema en su forma adimensional y decidir acerca de la importancia de diversos términos en base a estimados de orden de magnitud. Además, se recomienda estudiar acerca de casos límite y utilizar representaciones geométricas sencillas pero que aporten información valiosa del sistema.
- 4 Estas máximas, junto con los conceptos de escalamiento y las ecuaciones de balance presentadas en el capítulo anterior, se utilizaron en el planteamiento de cinco casos de aplicación, los cuales dieron lugar a ecuaciones diferenciales cuya solución y análisis se presentará en el siguiente capítulo.

Problemas

- 3.1 Proponga al menos tres ejemplos de sistemas jerárquicos que involucren tres (o más) niveles de escala.
- 3.2 En este problema se busca deducir la forma macroscópica de la ecuación de continuidad dada por $\rho_1 A_1 v_1 = \rho_2 A_2 v_2$, donde ρ , A y v denotan la densidad, área y velocidad de un fluido en secciones determinadas por los subíndices 1 y 2. Para ello, considere la Ec. (2.7-55a) para un fluido cuya densidad es constante en espacio y tiempo,

$$\rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (3.P-1)$$

y siga estos pasos:

- a) Considere el esquema de la Fig. P.3-1, donde se muestra un canal de sección transversal rectangular, el cual tiene un volumen V , y aplique el siguiente operador de promediado

$$\langle \psi \rangle = \frac{1}{V} \int_V \psi \, dV \quad (3.P-2)$$

a la Ec. (3.P-1). En la definición anterior, ψ representa una propiedad microscópica cualquiera, como la velocidad del fluido.

- b) Utilice el teorema de la divergencia de Gauss

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{a} \, dV = \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot \mathbf{a} \, dA \quad (3.P-3)$$

para llegar a la siguiente expresión

$$\int_{\mathcal{A}} \rho \mathbf{n}_e \cdot \mathbf{v} \, dA + \int_{\mathcal{A}} \rho \mathbf{n}_s \cdot \mathbf{v} \, dA = 0 \quad (3.P-4)$$

Explique las suposiciones adicionales que se necesitaron para obtener este resultado.

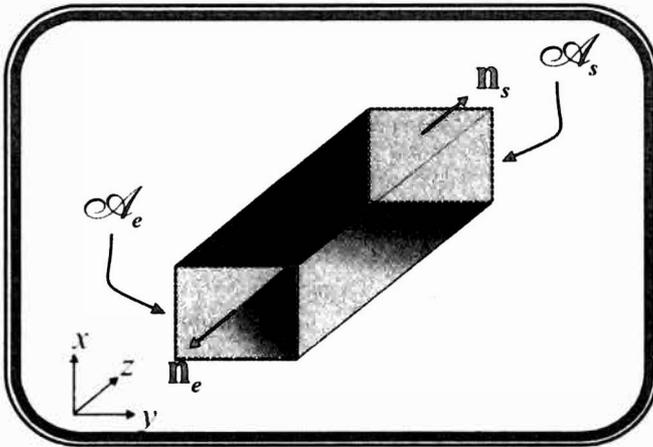


Figura P.3-1: Esquema de un canal de sección transversal rectangular ubicando las superficies de entrada (A_e) y de salida (A_s) junto con los correspondientes vectores unitarios normales a estas superficies.

c) Simplifique la Ec. (3.P-4) para obtener

$$-\rho \langle v_z \rangle_e A_e + \rho \langle v_z \rangle_s A_s = 0 \quad (3.P-5)$$

donde,

$$\langle v_z \rangle_e = \frac{1}{A_e} \int_{\mathcal{A}} v_z dA; \quad \langle v_z \rangle_s = \frac{1}{A_s} \int_{\mathcal{A}} v_z dA \quad (3.P-6)$$

d) ¿Está este resultado restringido a canales de sección transversal constante, si o no y por qué?

3.3 En la Fig. P.3-2 se muestra la evolución temporal de tres perfiles de concentración en un reactor continuo tipo tanque agitado (Fig. P.3-3) operando bajo condiciones de entrada oscilatorias obtenidos mediante soluciones analíticas y numéricas. Identifique los estados estacionario y transitorio en los tres perfiles de concentración.

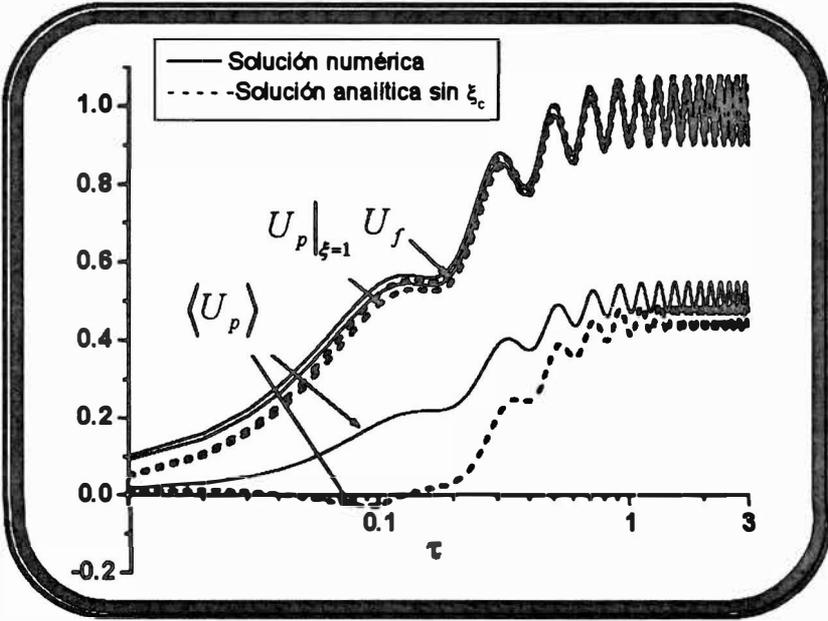


Figura P.3-2: Perfiles de concentración de un reactivo en un tanque agitado que contiene una fase fluida y partículas dispersas (tomado de Valdés-Parada, 2004). Los resultados se muestran para las predicciones analíticas y numéricas de la concentración promedio adimensional de las partículas ($\langle U_P \rangle$), en la superficie de las partículas ($U_P|_{\xi=1}$) y en la fase fluida (U_f) como función de un tiempo adimensional τ .

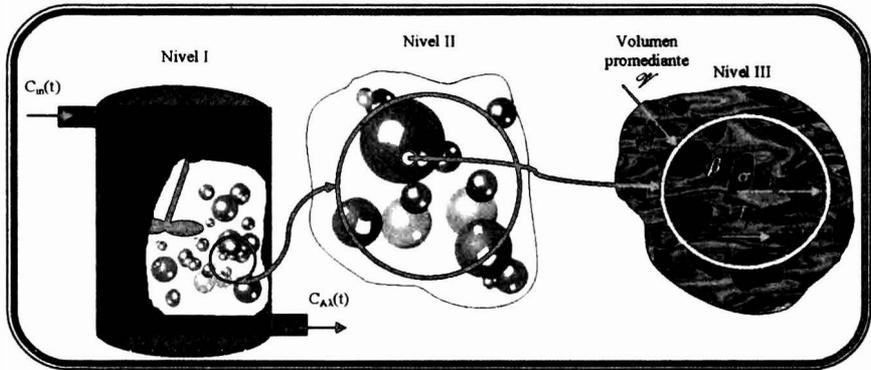


Figura P.3-3: Esquema de un reactor continuo tipo tanque agitado, detallando tres niveles de escala: macroscópico (Nivel I), interpartícula (Nivel II) e intrapartícula (Nivel III).

3.4 Considere de nuevo el sistema del problema anterior. En base a los niveles de escala mostrados en la Fig. P.3-3, responda lo siguiente:

- a) ¿Cuáles son las longitudes de escala de los tres niveles del sistema?
- b) En base al resultado del inciso anterior y a la definición de estado cuasiestacionario, ¿Es razonable proponer que el transporte en las partículas catalíticas se encuentra en estado estacionario respecto al transporte en la fase fluida, si o no y por qué?

3.5 En este problema se busca deducir la Ec. (3.4-1). Para ello, parta de la siguiente expresión lineal que relaciona a Θ con T :

$$\Theta = c_0 + c_1 T \quad (3.P-7)$$

donde c_0 y c_1 son constantes que deben determinarse a partir de las siguientes restricciones

$$\text{Cuando } T = T_m; \quad \Theta = 0 \quad (3.P-8a)$$

$$\text{Cuando } T = T_M; \quad \Theta = 1 \quad (3.P-8b)$$

Utilice estas condiciones en la Ec. (3.P-7) para así deducir la Ec. (3.4-1).

3.6 Considere la ecuación de calor aplicada a una placa de largo L ,

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2} \quad (3.P-9)$$

donde α es el coeficiente de difusividad térmica (ver Problema 2.18) y la temperatura, Θ , ya está en su forma adimensional. Escriba esta ecuación en términos de variables independientes adimensionales. *Sugerencia:* utilice el tiempo característico de difusión $t^* = L^2/\alpha$. ¿Están todas las variables adimensionales acotadas entre cero y la unidad?

3.7 Utilice la regla de la cadena para mostrar cómo se obtiene la Ec. (3.4-5) a partir de la Ec. (3.4-3). Por ejemplo, para el transporte en la dirección x se tiene,

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 T}{\partial X^2} \left(\frac{dX}{dx} \right)^2 = \frac{1}{H^2} \frac{\partial^2 T}{\partial X^2} \quad (3.P-10)$$

3.8 Considere las ecs. (2.7-57a) en estado estacionario (es decir, sin los términos de acumulación) y en ausencia de fuentes para un sistema coordenado Cartesiano bidimensional:

$$\rho v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + \rho v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} = \mu \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \right) \quad (3.P-11a)$$

$$\rho v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + \rho v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} = \mu \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} \right) \quad (3.P-11b)$$

Las cuales se complementan con la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0 \quad (3.P-12)$$

En este problema lo que se busca es expresar las ecuaciones anteriores en su forma adimensional. Para ello, considere las siguientes definiciones adimensionales.

$$U_x = \frac{v_x}{u_\infty}; \quad U_y = \frac{v_y}{u_\infty}; \quad X = \frac{x}{L}; \quad Y = \frac{y}{L} \quad (3.P-13)$$

donde u_∞ y L representan una velocidad y longitud características del sistema, respectivamente. Utilice la regla de la cadena y los cambios de variables necesarios para mostrar que las ecuaciones resultantes son las siguientes:

$$\frac{\partial U_x}{\partial X} + \frac{\partial U_y}{\partial Y} = 0 \quad (3.P-14a)$$

$$Re \left(U_x \frac{\partial U_x}{\partial X} + U_y \frac{\partial U_x}{\partial Y} \right) = \frac{\partial^2 U_x}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U_x}{\partial Y^2} \quad (3.P-14b)$$

$$Re \left(U_x \frac{\partial U_y}{\partial X} + U_y \frac{\partial U_y}{\partial Y} \right) = \frac{\partial^2 U_y}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U_y}{\partial Y^2} \quad (3.P-14c)$$

donde $Re = \rho u_\infty L / \mu$ es un número adimensional conocido como número de Reynolds que da una medida de la razón entre las fuerzas inerciales y las fuerzas viscosas.

- 3.9 Considere ahora la Ec. (2.7-57b) en estado estacionario (es decir, sin los términos de acumulación) y en ausencia de fuentes para un sistema coordenado Cartesiano bidimensional:

$$\rho C_p \left(v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) = k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad (3.P-15)$$

Utilice las definiciones dadas en la Ec. (3.P-13) junto con la siguiente

$$\Theta = \frac{T}{T_\infty} \quad (3.P-16)$$

para obtener la siguiente forma adimensional de la ecuación de transferencia de calor

$$Pe_T \left(u_x \frac{\partial \Theta}{\partial X} + U_y \frac{\partial \Theta}{\partial Y} \right) = \frac{\partial^2 \Theta}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial Y^2} \quad (3.P-17)$$

donde $Pe_T = \rho C_p u_\infty L / k$ es el número de Péclet asociado con la transferencia de calor y relaciona la velocidad de transporte de calor

por convección con su contraparte difusiva dentro del sistema. Muestre que este número adimensional puede expresarse como

$$Pe_T = Pr Re \tag{3.P-18}$$

donde $Pr = C_p \mu / k$ es el número de Prandtl y representa la razón de las difusividades cinemática ($\nu = \mu / \rho$) y térmica ($\alpha = k / \rho C_p$); es decir $Pr = \nu / \alpha$.

3.10 Considere ahora la Ec. (2.7-57c) en estado estacionario (es decir, sin los términos de acumulación) y en ausencia de fuentes para un sistema coordenado Cartesiano bidimensional:

$$v_x \frac{\partial c_A}{\partial x} + v_y \frac{\partial c_A}{\partial y} = \mathcal{D}_A \left(\frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial y^2} \right) \tag{3.P-19}$$

Utilice las definiciones dadas en la Ec. (3.P-13) junto con la siguiente

$$c = \frac{c_A}{c_\infty} \tag{3.P-20}$$

para obtener la siguiente forma adimensional de la ecuación de transporte de una especie química

$$Pe_M \left(U_x \frac{\partial c}{\partial X} + U_y \frac{\partial c}{\partial Y} \right) = \frac{\partial^2 c}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial Y^2} \tag{3.P-21}$$

donde $Pe_M = u_\infty L / \mathcal{D}_A$ es el número de Péclet asociado con la transferencia de masa y relaciona la velocidad de transporte de masa por convección con su contraparte difusiva dentro del sistema. Muestre que este número adimensional puede expresarse como

$$Pe_M = Sc Re \tag{3.P-22}$$

donde $Sc = \mu / \rho \mathcal{D}_A$ es el número de Prandtl y representa la razón de las difusividades cinemática y másica; es decir $Sc = \nu / \mathcal{D}_A$.

3.11 Considere la ley de enfriamiento de Newton para transferencia de calor dada en la Ec. (2.7-61). Muestre que la forma adimensional de esta ecuación es la siguiente

$$\text{En } X = 1, \quad - \left. \frac{d\Theta}{dX} \right|_{X=1} = Bi_T (\Theta|_{X=1} - 1) \tag{3.P-23}$$

donde $X = x/L$, $\Theta = T/T_\infty$ y $Bi_T = hL/k$ es el número de Biot asociado a la transferencia de calor, el cual representa la razón de la transferencia de calor por convección en una fase externa al sistema y por conducción en la interfase del sistema. Discuta acerca de la diferencia entre este número y el número de Péclet asociado con la transferencia de calor, Pe_T .

- 3.12 Investigue acerca del número de Nusselt y discuta la diferencia que guarda con el número de Biot presentado en el problema anterior.
- 3.13 Considere la ley de enfriamiento de Newton para la transferencia de masa aplicada a una placa de largo L ,

$$-\mathcal{D}_A \left. \frac{dc_A}{dx} \right|_{x=L} = k_M (c_A - c_{A,\infty}) \quad (3.P-24)$$

donde $k_M [=]$ m/s es el coeficiente interfacial de transferencia de masa y $c_{A\infty}$ es el valor de la concentración lejos de la superficie. En este problema debe deducir las expresiones de las variables y parámetros adimensionales que llevan a la siguiente forma de la ley de enfriamiento de Newton

$$-\left. \frac{dU_A}{dX} \right|_{X=1} = Bi_M U_A \quad (3.P-25)$$

donde Bi_M es el número de Biot asociado a la transferencia de masa. Investigue el significado del número de Sherwood y explique la diferencia que guarda con Bi_M .

- 3.14 Considere una partícula catalítica esférica, en donde tiene lugar el transporte difusivo de masa en estado estacionario. La ecuación de transporte que rige esta situación es

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \phi} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2 \sin \phi} \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\sin \phi \frac{\partial c_A}{\partial \phi} \right) = 0 \quad (3.P-26)$$

muestre que, si el transporte se da de manera simétrica en las direcciones angular, θ y azimutal, ϕ , la ecuación anterior se reduce a

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dc_A}{dr} \right) = 0 \quad (3.P-27)$$

- 3.15 Considere una placa rectangular de largo $2L$ que en sus extremos se encuentra a una misma temperatura T^* . Suponiendo que el transporte de calor se da principalmente en la dirección x , la ecuación de calor en estado transitorio es

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \tag{3.P-28}$$

Situando el origen del sistema coordenado a la mitad de la placa, las condiciones de frontera son de tipo Dirichlet

$$\text{En } x = \pm L, \quad T = T^* \tag{3.P-29}$$

En base a la simetría geométrica, puede sugerirse resolver este problema en sólo la mitad de la placa. Lo que reduce el dominio a $x \in [0, L]$; sin embargo, esto genera un problema pues no se conoce el valor de la temperatura en $x = 0$. Para superar esta situación, lleve a cabo un análisis de simetría del problema. Para ello, sustituya x por $-x$ en la ecuación diferencial y condiciones de frontera originales y si resulta que $T(-x, t) = -T(x, t)$, la temperatura es antisimétrica alrededor de este punto, mientras que si $T(-x, t) = T(x, t)$, la temperatura es simétrica alrededor de este punto.

- 3.16 Suponga que la expresión de la velocidad de reacción en la Ec. (3.4-19a) está dada por $R_A = kc_A^4$. Para probar que una ecuación es homogénea, basta con forzar a que la variable dependiente (en este caso c_A) adquiera el valor de cero. Sustituya $c_A = 0$ en las ecs. (3.4-19a)-(3.4-19c) y explique por qué $c_{A\infty}$ es el único término fuente.
- 3.17 En este problema se busca determinar las condiciones bajo las cuales las ecs. (3.5-4) y (3.5-5) son equivalentes. Para ello, considere la siguiente expansión en series de Taylor para la función exponencial

$$e^x = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{x^i}{i!} \tag{3.P-30}$$

Evalúe esta expresión para $x = -NT/\alpha$ y sustituya la expresión resultante en la Ec. (3.5-5) y proponga una simplificación del Nivel II de Whitaker (1988). Note que este tipo de análisis está en concordancia con la máxima 11.

3.18 En este problema se busca deducir de manera alterna a la presentada en el texto el balance de masa en el subsuelo. Para ello es conveniente comenzar con la expresión con palabras del balance de masa,

$$\begin{aligned} & \left\{ \begin{array}{c} \text{Tasa de} \\ \text{entrada de petróleo} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{c} \text{Tasa de} \\ \text{salida de petróleo} \end{array} \right\} \\ & - \left\{ \begin{array}{c} \text{Tasa de} \\ \text{consumo de petróleo} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} \text{Tasa de} \\ \text{producción de petróleo} \end{array} \right\} \\ & = \left\{ \begin{array}{c} \text{Tasa de cambio} \\ \text{del contenido de petróleo} \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (3.P-31)$$

El siguiente paso en el análisis consiste en expresar cada término de la Ec. (3.P-31) en función de las propiedades del sistema. Para ello, conviene recordar que cada término tiene unidades de kg/s; es decir, representa la cantidad de masa (que entra, sale, se acumula, etc.) en el sistema por unidad de tiempo (es decir, es un balance instantáneo).

Suponiendo que la densidad (ρ) del petróleo permanece constante en la posición y con el tiempo, deduzca la siguiente expresión para la tasa de entrada de petróleo

$$\left\{ \begin{array}{c} \text{Tasa de} \\ \text{entrada de petróleo} \end{array} \right\} = \rho Av_z \quad (3.P-32)$$

Por otro lado, dado que no sale, ni se consume ni se produce petróleo en el subsuelo, el lado izquierdo de la Ec. (3.P-31) se reduce a,

$$\begin{aligned} & \left\{ \begin{array}{c} \text{Tasa de} \\ \text{entrada de petróleo} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{c} \text{Tasa de} \\ \text{salida de petróleo} \end{array} \right\} \\ & - \left\{ \begin{array}{c} \text{Tasa de} \\ \text{consumo de petróleo} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} \text{Tasa de} \\ \text{producción de petróleo} \end{array} \right\} \\ & = \rho Av \end{aligned} \quad (3.P-33)$$

De manera que sólo hace falta introducir una expresión para la tasa de cambio del contenido de petróleo en el sistema para tener una forma cerrada (es decir, en términos de propiedades medibles del sistema) de la Ec. (3.P-31). Dicha cantidad es similar a la velocidad de entrada,

con la diferencia de que en vez de usar la velocidad de penetración v , se debe usar el cambio de la distancia de penetración (z) con el tiempo (es decir, el cambio de la región sombreada en la Fig. 3.5-1b). Deduzca y justifique la siguiente expresión,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Tasa de cambio} \\ \text{del contenido de petróleo} \end{array} \right\} = \rho A \frac{dz}{dt} \quad (3.P-34)$$

Y muestre cómo estos resultados llevan a la Ec. (3.5-16).

- 3.19 Deduzca los valores de cada término de la ecuación de balance general [es decir, la, Ec. (2.7-1)] aplicada al sistema de destilación abierta de la Fig. 3.5-2 y recupere la Ec. (3.5-26).
- 3.20 Repita el problema anterior aplicado al componente más volátil de la mezcla a destilar y deduzca la Ec. (3.5-27).
- 3.21 Sustituya la ley de Henry, $y = K\xi$, en la Ec. (3.5-32) y lleve a cabo la operación de integración necesaria para obtener,

$$(K - 1) \ln \left(\frac{x}{x_0} \right) = \ln \left(\frac{L}{L_0} \right) \quad (3.P-35)$$

utilice las propiedades de las funciones logarítmicas para llegar a la Ec. (3.5-33)

- 3.22 Sustituya la relación $y = a\xi + b$ (donde a y b son constantes conocidas), en la Ec. (3.5-32) y lleve a cabo la operación de integración necesaria para obtener,

$$\frac{1}{(a - 1)} \ln \left(\frac{(a - 1)x + b}{(a - 1)x_0 + b} \right) = \ln \left(\frac{L}{L_0} \right) \quad (3.P-36)$$

utilice las propiedades de las funciones logarítmicas para llegar a la Ec. (3.5-34).

- 3.23 Utilice la relación $y = v_\alpha x / [1 + (v_\alpha - 1)x]$ en la Ec. (3.5-32) para obtener,

$$\ln \left(\frac{L}{L_0} \right) = \frac{1}{(\alpha - 1)} \int_{x_0}^x \frac{[1 + (\alpha - 1)\xi] d\xi}{\xi(1 - \xi)} \quad (3.P-37)$$

Recurra al método de solución de integrales por fracciones parciales para llegar al siguiente resultado,

$$\ln\left(\frac{L}{L_0}\right) = \frac{1}{(v_\alpha - 1)} \left[\ln\left(\frac{x}{x_0}\right) - v_\alpha \ln\left(\frac{1-x}{1-x_0}\right) \right] \quad (3.P-38)$$

Por último, utilice las propiedades de las funciones logarítmicas para llegar a la Ec. (3.5-35).

- 3.24 Deduzca la Ec. (3.5-41) a partir de la Ec. (3.5-40). Para ello, se sugiere que utilice la definición del Laplaciano, así como la definición del operador de promediado dado en la Ec. (3.5-37) para obtener

$$\langle \nabla^2 T \rangle = \frac{1}{V} \int_V \nabla \cdot \nabla T \, dV \quad (3.P-39)$$

Por último, utilice el teorema de la divergencia [Ec. (3.5-9)] y sustituya el resultado en la Ec. (3.5-40) para obtener la expresión deseada.

- 3.25 Considere el término convectivo en la Ec. (3.5-46), al suponer que h y T_a son constantes en el dominio de integración, el resultado es

$$\rho C_p V \frac{d\langle T \rangle}{dt} = -h \left[\int_{A_c} T \, dA - T_a \right] + S A_c \quad (3.P-40)$$

Para poder avanzar en los desarrollos se sugiere utilizar la siguiente descomposición de la temperatura $T = \langle T \rangle + \tilde{T}$, donde \tilde{T} representan las desviaciones de la temperatura T respecto a su valor promedio, $\langle T \rangle$. Utilizando esta descomposición, explique bajo qué condiciones (de preferencia llegando al Nivel II de simplificación de Whitaker), es posible obtener el resultado que se muestra en la Ec. (3.5-48).

- 3.26 Utilice la regla de la cadena y las definiciones proporcionadas en la Ec. (3.5-51) para escribir la forma adimensional del problema dada por las ecs. (3.5-52).

3.27 Respecto al modelo matemático para el amor, realice lo siguiente:

- a) Plantee un nuevo modelo para el caso en que exista un(a) tercer(a) en discordia. Explique claramente las suposiciones, los parámetros y las condiciones iniciales adicionales.
- b) Plantee de nuevo el modelo introduciendo al menos dos fuentes adicionales de entrada y salida de amor para Romeo y Julieta. ¿Cómo describiría el cambio de dichas fuentes con el tiempo?, sea creativo; proponga funciones polinomiales, exponenciales, sinusoidales, etc.

Identifique las máximas utilizadas en las siguientes aplicaciones:

3.28 **Transporte y reacción en un reactor tanque agitado.** Considere de nuevo el reactor tipo tanque agitado mostrado en la Fig. P.3-3, en el cual se transporta una especie química (especie A) desde la fase fluida (fase- β) hacia las partículas sólidas (fase- σ) que contienen enzimas inmovilizadas, las cuales funcionan como catalizadores biológicos. Las ecuaciones que gobiernan el transporte de masa en cualquier punto de ambas fases son las siguientes (ver Ec. (2.7-57c))

$$\frac{\partial c_{A\beta}}{\partial t} + \nabla \cdot (c_{A\beta} \mathbf{v}_\beta) = \mathcal{D}_{A\beta} \nabla^2 c_{A\beta} \quad (3.P-41a)$$

$$\frac{\partial c_{A\sigma}}{\partial t} = \mathcal{D}_\sigma \nabla^2 c_{A\sigma} - R_{A\sigma} \quad (3.P-41b)$$

Note que la Ec. (3.P-41a) no incluye un término de reacción puesto que ésta sólo tiene lugar en las partículas, donde se ha supuesto que el transporte de masa se da principalmente por difusión. Para simplificar el problema se supondrá además que todas las partículas son idénticas en forma (esférica) y tamaño. Por tanto, la Ec. (3.P-41b) puede utilizarse para conocer el valor de la concentración al interior de cualquier partícula. Por otro lado, aunque la Ec. (3.P-41a) puede utilizarse para describir el transporte de masa en cualquier punto de la fase fluida, su solución, tomando en cuenta los baffles, agitador e interfases con las partículas, no resulta una labor trivial.

Para atender esta dificultad, es conveniente promediar la Ec. (3.P-41a) en todo el volumen del tanque ocupado por la fase fluida, V_β , mediante el operador

$$\langle c_{A\beta} \rangle^\beta = \frac{1}{V_\beta} \int_{V_\beta} c_{A\beta} dV \quad (3.P-42)$$

Note que el dominio de promediado es arbitrario (ver Capítulo 2). El resultado de aplicar este operador a la Ec. (3.P-41a) es la siguiente ecuación

$$\left\langle \frac{\partial c_{A\beta}}{\partial t} \right\rangle^\beta + \langle \nabla \cdot (c_{A\beta} \mathbf{v}_\beta) \rangle^\beta = \mathcal{D}_{A\beta} \langle \nabla^2 c_{A\beta} \rangle^\beta \quad (3.P-43)$$

donde se supuso que el coeficiente de difusión $\mathcal{D}_{A\beta}$ es constante. Utilizando los teoremas general del transporte (en el primer término del lado izquierdo) y de la divergencia (en el resto de los términos), se obtiene la siguiente expresión

$$\frac{d\langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{dt} + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n}_\beta \cdot [c_{A\beta} (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{w}_\beta) + \mathbf{J}_{A\beta}] dA = 0 \quad (3.P-44)$$

donde el vector \mathbf{w}_β describe el desplazamiento de la interfase de la fase- β y, de la ley de Fick se tiene que, $\mathbf{J}_{A\beta} = -\mathcal{D}_{A\beta} \nabla c_{A\beta}$. Note además que $\langle c_{A\beta} \rangle^\beta$ es sólo función del tiempo.

Para avanzar en los desarrollos, es conveniente notar que la superficie ocupada por el fluido (\mathcal{A}_β) comprende las interfases con las paredes ($\mathcal{A}_{\beta p}$), agitador ($\mathcal{A}_{\beta a}$), entradas y salidas ($\mathcal{A}_{\beta e,s}$) y con las partículas sólidas ($\mathcal{A}_{\beta \sigma}$); es decir,

$$\mathcal{A}_\beta = \mathcal{A}_{\beta p} + \mathcal{A}_{\beta a} + \mathcal{A}_{\beta e,s} + \mathcal{A}_{\beta \sigma} \quad (3.P-45)$$

Los valores de \mathbf{v}_β , \mathbf{w}_β y $\mathbf{J}_{A\beta}$ en cada interfase son:

Interfase	\mathbf{v}_β	\mathbf{w}_β	$\mathbf{n} \cdot \mathbf{J}_{A\beta}$
$\mathcal{A}_{\beta p}$	0	0	0
$\mathcal{A}_{\beta a}$	\mathbf{v}_a	\mathbf{v}_a	0
$\mathcal{A}_{\beta e,s}$	$\mathbf{v}_{e,s}$	0	0
$\mathcal{A}_{\beta \sigma}$	\mathbf{v}_σ	\mathbf{v}_σ	$-k_{\beta\sigma}(c_{A\beta\sigma} - \langle c_{A\beta} \rangle^\beta)$

donde \mathbf{v}_a , $\mathbf{v}_{e,s}$ y \mathbf{v}_σ representan las velocidades del agitador, del fluido a la entrada y salida y de las partículas; mientras que $k_{\beta\sigma}$ es el coeficiente interfacial de transferencia de masa y $c_{A\beta\sigma}$ es el valor de la concentración de la especie a en las fronteras con la fase sólida. Para simplificar el problema, se ha supuesto que todas las partículas son iguales, en forma, tamaño y velocidad de desplazamiento. Además, se ha supuesto despreciable al flux difusivo, con respecto al flux convectivo en las entradas y salidas del tanque. Bajo estas condiciones, la Ec. (3.P-44) toma la siguiente forma

$$\frac{d\langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{dt} + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta e,s}} \mathbf{n}_{\beta e,s} \cdot c_{A\beta} \mathbf{v}_{e,s} dA = \frac{A_{\beta\sigma} k_{\beta\sigma}}{V_\beta} (c_{A\beta\sigma} - \langle c_{A\beta} \rangle^\beta) \tag{3.P-46}$$

Aquí se tomó en cuenta el hecho que $c_{A\beta\sigma}$ y $\langle c_{A\beta} \rangle^\beta$ son sólo funciones del tiempo y se supuso que el coeficiente $k_{\beta\sigma}$ es constante. El término integral en la ecuación anterior puede descomponerse en las contribuciones a la entrada y salida, respectivamente:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta e,s}} \mathbf{n}_{\beta e,s} \cdot c_{A\beta} \mathbf{v}_{e,s} dA &= \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta e}} \mathbf{n}_{\beta e} \cdot c_{A,e} \mathbf{v}_e dA \\ &+ \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta s}} \mathbf{n}_{\beta s} \cdot \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \mathbf{v}_s dA \end{aligned} \tag{3.P-47}$$

donde $c_{A,e}$ es el valor de la concentración a la entrada y es una función sólo del tiempo; mientras que a la salida se supuso que el valor de la concentración corresponde al valor dentro del tanque. Dicha suposición es razonable, siempre que el agitación sea eficiente. Suponiendo que $\mathcal{A}_{\beta e} = \mathcal{A}_{\beta s} = \mathcal{A}_{e,s}$ y que el fluido se alimenta al tanque a la misma velocidad a la que sale, es decir, $\mathbf{v}_e = \mathbf{v}_s = \mathbf{v}$, la expresión anterior se reduce a

$$\frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta e,s}} \mathbf{n}_{\beta e,s} \cdot c_{A\beta} \mathbf{v}_{e,s} dA = \frac{1}{V_\beta} \left[\int_{\mathcal{A}_{e,s}} \mathbf{n}_{\beta s} \cdot \mathbf{v} dA \right] (\langle c_{A\beta} \rangle^\beta - c_{A,e}) \tag{3.P-48}$$

donde se tomó en cuenta que $\mathbf{n}_{\beta e} = -\mathbf{n}_{\beta s}$. El término entre corchetes en la ecuación anterior es el flujo volumétrico, Q . De esta forma, la Ec. (3.P-46) se escribe finalmente como sigue:

$$\varepsilon_{\beta} \frac{d\langle c_{A\beta} \rangle^{\beta}}{dt} = \frac{1}{t_R} (c_{A,e} - \langle c_{A\beta} \rangle^{\beta}) + \frac{A_{\beta\sigma} k_{\beta\sigma}}{V} (c_{A\beta\sigma} - \langle c_{A\beta} \rangle^{\beta}) \quad (3.P-49)$$

donde $\varepsilon_{\beta} = V_{\beta}/V$ representa la fracción volumétrica del fluido en el tanque, siendo V el volumen del tanque y $t_R = V/Q$ el tiempo de residencia. De esta forma, el modelo para el transporte de masa y reacción en el tanque consiste en la Ec. (3.P-49), acoplada con la Ec. (3.P-41b).

3.29 Transferencia de cantidad de movimiento en aerogeneradores.
 En la Fig. P.3-4 se presenta un esquema de la transferencia de cantidad de movimiento alrededor de un aerogenerador. En este problema se busca deducir un modelo que permita predecir, de forma aproximada,

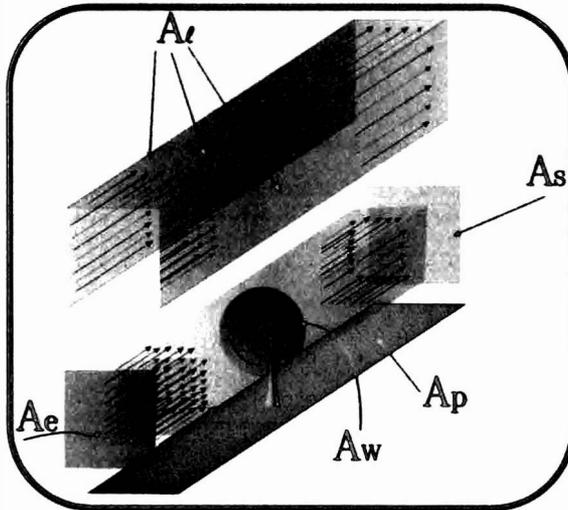


Figura P.3-4: Esquema de la transferencia de cantidad de movimiento alrededor de un aerogenerador.

la fuerza aplicada por el viento sobre las aspas del equipo. Para ello, se comienza con la ecuación de Navier-Stokes (Ec. 2.7-57a), la cual es válida, en una escala microscópica, en cualquier punto del sistema:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \mu \nabla^2 \mathbf{v} \quad (3.P-50)$$

Para simplificar el modelo, se restringirá su aplicación a situaciones de estado estacionario, lo que permite eliminar a la derivada temporal en la expresión anterior. Más aún, los estimados de orden de magnitud de los términos de transporte convectivo y difusivo son, respectivamente:

$$\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = \mathbf{O} \left(\frac{\rho v^2}{L} \right) \quad (3.P-51a)$$

$$\mu \nabla^2 \mathbf{v} = \mathbf{O} \left(\frac{\mu v}{L^2} \right) \quad (3.P-51b)$$

donde v y L representan los valores característicos de la velocidad y del sistema, respectivamente. Al comparar estos estimados, puede deducirse que, cuando se cumpla la siguiente desigualdad

$$1 \ll \frac{\rho v L}{\mu} \quad (3.P-52)$$

es posible despreciar a los esfuerzos viscosos (transporte difusivo), respecto a los esfuerzos inerciales (transporte convectivo), es decir,

$$\mu \nabla^2 \mathbf{v} \ll \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \quad (3.P-53)$$

Note que la razón $\frac{\rho v L}{\mu}$ define al número de Reynolds, Re . De manera que, cuando $Re \gg 1$, se tienen condiciones de flujo turbulento. Bajo estas condiciones, la Ec. (3.P-50) se reduce a

$$\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p + \rho \mathbf{g} \quad (3.P-54)$$

Por otro lado, el estimado de orden de magnitud de los esfuerzos volumétricos es

$$\rho \mathbf{g} = \mathbf{O}(\rho g) \quad (3.P-55)$$

La comparación de este estimado con el de los esfuerzos inerciales, lleva a proponer que, cuando se cumpla la siguiente desigualdad

$$gL \ll v^2 \quad (3.P-56)$$

es posible suponer que $\rho g \ll \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}$. De esta forma, la Ec. (3.P-54) se reduce finalmente a

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla p \quad (3.P-57)$$

Para obtener esta ecuación se supuso además que el aire es un fluido incompresible⁹, por lo que $\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v})$. Dado que se busca conocer la fuerza ejercida sobre el aerogenerador (y no en cada punto del sistema), es conveniente desarrollar un modelo macroscópico. Con este fin, se integra a la Ec. (3.P-57) en el volumen ocupado por el aire en el sistema,

$$\int_{\mathcal{V}} \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) dV = - \int_{\mathcal{V}} \nabla p dV \quad (3.P-58)$$

O bien, al usar el teorema de la divergencia,

$$\int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) dA = - \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} p dA \quad (3.P-59)$$

Más aún, si se limita la atención a estudiar la componente de la velocidad en la dirección que llevaba el aire antes y después de chocar contra el aerogenerador (dirección- z), se tiene, al hacer el producto punto en ambos lados de la ecuación anterior con el vector unitario en la dirección- z (\mathbf{e}_z):

$$\int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) \cdot \mathbf{e}_z dA = - \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z p dA \quad (3.P-60)$$

De acuerdo a la Fig. P.3-4, la superficie total del sistema, puede descomponerse en:

$$A = A_{e,s} + A_{\ell} + A_p + A_w \quad (3.P-61)$$

⁹Y, por tanto, la ecuación de continuidad se reduce a $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$.

Sin embargo, el producto $\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z = 0$ en las superficies laterales y al nivel del suelo, mientras que $\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}_z$ se supondrá igual a cero en las mismas superficies. De esta forma, la Ec. (3.P-60) toma la siguiente forma

$$\begin{aligned}
 - \int_{\mathcal{A}_e} \mathbf{n}_e \cdot (\rho \mathbf{v} v_{ze}) dA + \int_{\mathcal{A}_s} \mathbf{n}_s \cdot (\rho \mathbf{v} v_{zs}) dA + \int_{\mathcal{A}_w} \mathbf{n}_w \cdot (\rho \mathbf{v} v_{zw}) dA \\
 = \int_{\mathcal{A}_e} p_e dA - \int_{\mathcal{A}_s} p_s dA - \int_{\mathcal{A}_w} n_{wz} p_w dA \quad (3.P-62)
 \end{aligned}$$

Suponiendo, que los esfuerzos inerciales a la entrada y salida son mayores que alrededor del aerogenerador,

$$\int_{\mathcal{A}_w} \mathbf{n}_w \cdot (\rho \mathbf{v} v_{zw}) dA \ll - \int_{\mathcal{A}_e} \mathbf{n}_e \cdot (\rho \mathbf{v} v_{ze}) dA + \int_{\mathcal{A}_s} \mathbf{n}_s \cdot (\rho \mathbf{v} v_{zs}) dA \quad (3.P-63)$$

permite reducir la Ec. (3.P-62) a

$$- \rho \int_{\mathcal{A}_e} v_{ze}^2 dA + \rho \int_{\mathcal{A}_s} v_{zs}^2 dA = \int_{\mathcal{A}_e} p_e dA - \int_{\mathcal{A}_s} p_s dA - \int_{\mathcal{A}_w} n_{wz} p_w dA \quad (3.P-64)$$

note que se despreciaron los cambios espaciales de la densidad. Para expresar esta ecuación en términos de cantidades macroscópicas, se definen los siguientes operadores de promediado

$$\langle \psi \rangle^i = \frac{1}{A_i} \int_{\mathcal{A}_i} \psi dA, \quad i = e, s, w \quad (3.P-65)$$

de esta forma, se puede re-escribir la Ec. (3.P-64) como sigue

$$- \rho \langle v_{ze}^2 \rangle^e A_e + \rho \langle v_{zs}^2 \rangle^s A_s = \langle p_e \rangle^e A_e - \langle p_s \rangle^s A_s - \langle n_{wz} p_w \rangle^w A_w \quad (3.P-66)$$

Suponiendo que las áreas de entrada y salida son iguales, $A_e = A_s = A_{e,s}$ y que la presión del aire a la entrada y a la salida es la misma, resulta entonces que

$$F_z = \langle n_{wz} p_w \rangle^w A_w = \rho A_{e,s} (\langle v_{ze}^2 \rangle^e - \langle v_{zs}^2 \rangle^s) \quad (3.P-67)$$

La cual es la expresión buscada.

3.30 **Transporte de masa y reacción en tumores cancerosos.** Considere ahora el sistema mostrado en la Fig P.3-5, donde se esquematiza un tumor canceroso alimentado por vasos sanguíneos. Al conjunto de células que forman el tumor se le denotará fase- σ , mientras que los vasos sanguíneos serán la fase- β . Lo que se busca es desarrollar un modelo que describa el transporte de nutrientes (especie A) al interior del tumor.

La ecuación que describe el transporte de masa en las células del tumor es

$$\frac{\partial c_{A\sigma}}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{D}_{A\sigma} \nabla c_{A\sigma}) - R_{A\sigma} \quad (3.P-68)$$

donde $c_{A\sigma}$ y $\mathcal{D}_{A\sigma}$ representan la concentración molar de nutrientes en las células y su coeficiente de difusión molecular, respectivamente, mientras que $R_{A\sigma}$ es la tasa de consumo de nutrientes dentro de las células. Por simplicidad, se supondrá que todas las células del tumor son idénticas en edad, metabolismo, tamaño y forma. Suponiendo que el diámetro de los vasos sanguíneos es mucho menor que el de las células, pueden modelarse como una superficie sin espesor, es decir, como una interfase. Dado que los vasos sanguíneos abastecen de nutrientes a las células, se propone la siguiente condición de frontera

$$n_{\sigma\beta} \cdot (\mathcal{D}_{A\sigma} \nabla c_{A\sigma}) = k_{\sigma\beta} (c_{A\beta} - c_{A\sigma}), \quad \text{en la interfase } A_{\sigma\beta} \quad (3.P-69)$$

donde $k_{\sigma\beta}$ es el coeficiente interfacial de transferencia de masa y $c_{A\beta}$ es la concentración de nutrientes en los vasos sanguíneos.

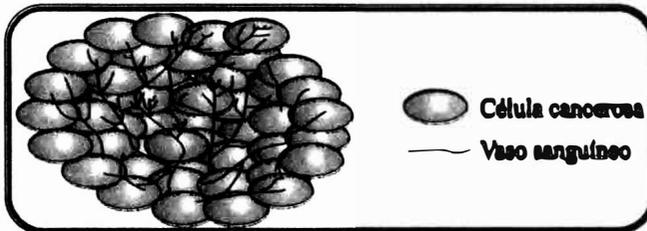


Figura P.3-5: Esquema de un tumor canceroso *in situ* en etapa angiogénica.

Para desarrollar el modelo que se busca, se utilizará el método del promedio volumétrico (Whitaker, 1999). Con este fin, se define el siguiente operador de promediado como sigue

$$\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma = \frac{1}{V_\sigma} \int_{V_\sigma} c_{A\sigma} dV \quad (3.P-70)$$

Aplicando este operador de promediado a la Ec. (3.P-68), se obtiene la siguiente expresión

$$\left\langle \frac{\partial c_{A\sigma}}{\partial t} \right\rangle^\sigma = \langle \nabla \cdot (\mathcal{D}_{A\sigma} \nabla c_{A\sigma}) \rangle^\sigma - \langle R_{A\sigma} \rangle^\sigma \quad (3.P-71)$$

Suponiendo que la colonia de células no aumenta su tamaño, es posible intercambiar diferenciación temporal e integración espacial en el primer término del lado izquierdo de la ecuación anterior, para así obtener,

$$\frac{\partial \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma}{\partial t} = \langle \nabla \cdot (\mathcal{D}_{A\sigma} \nabla c_{A\sigma}) \rangle^\sigma - \langle R_{A\sigma} \rangle^\sigma \quad (3.P-72)$$

Para intercambiar diferenciación e integración espacial, se recurre al teorema del promediado espacial (Whitaker, 1999),

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{a}_\sigma \rangle^\sigma = \nabla \cdot \langle \mathbf{a}_\sigma \rangle^\sigma + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathbf{a}_\sigma dA \quad (3.P-73)$$

Utilizando este teorema en el primer término del lado derecho de la Ec. (3.P-72), resulta lo siguiente

$$\frac{\partial \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma}{\partial t} = \nabla \cdot \langle \mathcal{D}_{A\sigma} \nabla c_{A\sigma} \rangle^\sigma + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot (\mathcal{D}_{A\sigma} \nabla c_{A\sigma}) dA - \langle R_{A\sigma} \rangle^\sigma \quad (3.P-74)$$

Utilizando la condición de frontera interfacial, (Ec. 3.P-69), en el término integral de la ecuación anterior resulta que

$$\frac{\partial \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{D}_{A\sigma} \langle \nabla c_{A\sigma} \rangle^\sigma) + \frac{k_{\sigma\beta}}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} (c_{A\beta} - c_{A\sigma}) dA - \langle R_{A\sigma} \rangle^\sigma \quad (3.P-75)$$

donde además se despreciaron los cambios espaciales de los coeficientes de difusión molecular y de transporte interfacial. Utilizando nuevamente el teorema del promediado espacial en el primer término en el lado derecho de la ecuación anterior da lugar a la siguiente expresión,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\mathcal{D}_{A\sigma} \left(\nabla \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} c_{A\sigma} dA \right) \right] \\ + \frac{k_{\sigma\beta}}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} (c_{A\beta} - c_{A\sigma}) dA - \langle R_{A\sigma} \rangle^\sigma \end{aligned} \quad (3.P-76)$$

Como se busca expresar esta ecuación únicamente en términos de la concentración promedio, se descompone la concentración en términos de su promedio intrínseco y sus desviaciones espaciales (Whitaker, 1999), esto es,

$$c_{A\sigma} = \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma + \tilde{c}_{A\sigma} \quad (3.P-77)$$

Aplicando esta descomposición en los términos integrales en la Ec. (3.P-76), da como resultado

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\mathcal{D}_{A\sigma} \left(\nabla \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma + \frac{\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} dA \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \tilde{c}_{A\sigma} dA \right) \right] \\ + \frac{k_{\sigma\beta} A_{\sigma\beta}}{V_\sigma} (c_{A\beta} - \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma) - \frac{k_{\sigma\beta}}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \tilde{c}_{A\sigma} dA - \langle R_{A\sigma} \rangle^\sigma \end{aligned} \quad (3.P-78)$$

Note que se supuso que la concentración promedio y la concentración en las vasos sanguíneos son constantes en los dominios de integración correspondientes. Por otro lado, del teorema del promediado espacial, se puede deducir que

$$\frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} dA = -\varepsilon_\sigma^{-1} \nabla \varepsilon_\sigma \quad (3.P-79)$$

donde $\varepsilon_\sigma = V_\sigma/V$ es la fracción volumétrica de la fase- σ en la región de promediado, cuyo volumen es V . Como anteriormente se hizo la suposición de que todas las células eran iguales en forma y tamaño, es razonable suponer que ε_σ sea también una constante y, por tanto, la Ec. (3.P-78) puede reducirse a

$$\frac{\partial \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\mathcal{D}_{A\sigma} \left(\nabla \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \tilde{c}_{A\sigma} dA \right) \right] + \frac{k_{\sigma\beta} A_{\sigma\beta}}{V_\sigma} (c_{A\beta} - \langle c_{A\sigma} \rangle^\gamma) - \frac{k_{\sigma\beta}}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \tilde{c}_{A\sigma} dA - \langle R_{A\sigma} \rangle^\sigma \quad (3.P-80)$$

Para simplificar más esta expresión, se adoptará la siguiente suposición, la cual es razonable en este tipo de problemas (Whitaker, 1999)

$$\frac{k_{\sigma\beta}}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \tilde{c}_{A\sigma} dA \ll \frac{k_{\sigma\beta} A_{\sigma\beta}}{V_\sigma} (c_{A\beta} - \langle c_{A\sigma} \rangle^\gamma) \quad (3.P-81)$$

Entonces, la Ec. (3.P-80) se simplifica como sigue

$$\frac{\partial \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\mathcal{D}_{A\sigma} \left(\nabla \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \tilde{c}_{A\sigma} dA \right) \right] + \frac{k_{\sigma\beta} A_{\sigma\beta}}{V_\sigma} (c_{A\beta} - \langle c_{A\sigma} \rangle^\gamma) - \langle R_{A\sigma} \rangle^\sigma \quad (3.P-82)$$

Esta ecuación incluye un término integral que contiene a las desviaciones espaciales de la concentración. Para determinarlas, es necesario plantear y resolver formalmente el problema que gobierna a $\tilde{c}_{A\sigma}$. Con este objetivo en mente, se resta la Ec. (3.P-82) a la Ec. (3.P-68), dando como resultado,

$$\frac{\partial \tilde{c}_{A\sigma}}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\mathcal{D}_{A\sigma} \left(\nabla \tilde{c}_{A\sigma} - \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \tilde{c}_{A\sigma} dA \right) \right] - \frac{k_{\sigma\beta} A_{\sigma\beta}}{V_\sigma} (c_{A\beta} - \langle c_{A\sigma} \rangle^\gamma) - \tilde{R}_{A\sigma} \quad (3.P-83)$$

Para simplificar esta expresión, se recurre a los siguientes estimados de orden de magnitud

$$\frac{\partial \tilde{c}_{A\sigma}}{\partial t} = \mathbf{O} \left(\frac{\tilde{c}_{A\sigma}}{t^*} \right) \quad (3.P-84a)$$

$$\nabla \cdot (\mathcal{D}_{A\sigma} \nabla \tilde{c}_{A\sigma}) = \mathbf{O} \left(\frac{\mathcal{D}_{A\sigma} \tilde{c}_{A\sigma}}{\ell_\sigma^2} \right) \quad (3.P-84b)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{\mathcal{D}_{A\sigma}}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \tilde{c}_{A\sigma} dA \right) = \mathbf{O} \left(\frac{\mathcal{D}_{A\sigma} \tilde{c}_{A\sigma}}{L \ell_\sigma} \right) \quad (3.P-84c)$$

En los estimados anteriores, t^* , ℓ_σ y L representan el tiempo característico del proceso, la longitud característica de una célula y la longitud característica del tumor, respectivamente. De estos estimados, puede deducirse que las siguientes suposiciones son razonables

$$\frac{\partial \tilde{c}_{A\sigma}}{\partial t} \ll \nabla \cdot (\mathcal{D}_{A\sigma} \nabla \tilde{c}_{A\sigma}) \quad (3.P-85a)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{\mathcal{D}_{A\sigma}}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \tilde{c}_{A\sigma} dA \right) \ll \nabla \cdot (\mathcal{D}_{A\sigma} \nabla \tilde{c}_{A\sigma}) \quad (3.P-85b)$$

siempre y cuando se satisfagan las siguientes restricciones,

$$\frac{\ell_\sigma^2}{\mathcal{D}_{A\sigma}} \ll t^*; \quad \ell_\sigma \ll L \quad (3.P-86)$$

Bajo estas condiciones, la Ec. (3.P-83) se reduce a

$$\mathcal{D}_{A\sigma} \nabla^2 \tilde{c}_{A\sigma} = \frac{k_{\sigma\beta} A_{\sigma\beta}}{V_\sigma} \underbrace{(c_{A\beta} - \langle c_{A\sigma} \rangle^\gamma)}_{\text{fuente}} + \tilde{R}_{A\sigma} \quad (3.P-87)$$

Esta ecuación, está sujeta a la condición de frontera interfacial que resulta de sustituir la descomposición espacial de la concentración (Ec. 3.P-77) en la Ec. (3.P-69),

$$\mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot (\mathcal{D}_{A\sigma} \nabla \tilde{c}_{A\sigma}) + \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \underbrace{(\mathcal{D}_{A\sigma} \nabla \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma)}_{\text{fuente}} = k_{\sigma\beta} \underbrace{(c_{A\beta} - \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma)}_{\text{fuente}} \quad (3.P-88)$$

En esta última expresión, se utilizó la suposición que $\tilde{c}_{A\sigma} \ll \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma$ (Whitaker, 1999). Dada la linealidad del problema, se puede escribir su solución en función de sus fuentes (ver Capítulo 4) como sigue:

$$\tilde{c}_{A\sigma} = \mathbf{b}_\sigma \cdot \nabla \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma + s_\sigma (c_{A\beta} - \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma) \quad (3.P-89)$$

Con esta expresión, es posible regresar a la Ec. (3.P-82) y expresarla como sigue

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma}{\partial t} = & \nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma) \\ & + \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mathcal{D}_{A\sigma}}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} s_\sigma dA \right) (c_{A\beta} - \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma) \right] \\ & + \frac{k_{\sigma\beta} A_{\sigma\beta}}{V_\sigma} (c_{A\beta} - \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma) - \langle R_{A\sigma} \rangle^\sigma \end{aligned} \quad (3.P-90)$$

en donde se definió el tensor de difusión efectiva, \mathbf{D} , como

$$\mathbf{D} = \mathcal{D}_{A\sigma} \left(\mathbf{I} + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \mathbf{b}_\sigma dA \right) \quad (3.P-91)$$

Para simplificar la Ec. (3.P-90) se proporcionan los siguientes estimados de orden de magnitud:

$$\begin{aligned} & \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mathcal{D}_{A\sigma}}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} s_\sigma dA \right) (c_{A\beta} - \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma) \right] \\ & = \mathbf{O} \left(\frac{\mathcal{D}_{A\sigma}}{L^2} (c_{A\beta} - \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma) \right) \end{aligned} \quad (3.P-92a)$$

$$\frac{k_{\sigma\beta} A_{\sigma\beta}}{V_\sigma} (c_{A\beta} - \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma) = \mathbf{O} \left(\frac{k_\sigma}{\ell_\sigma} (c_{A\beta} - \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma) \right) \quad (3.P-92b)$$

Al comparar los estimados proporcionados arriba, se puede deducir que, en base a la siguiente restricción de escala,

$$\frac{\mathcal{D}_{A\sigma} l_{\sigma}}{k_{\sigma} L^2} \ll 1 \quad (3.P-93)$$

es razonable suponer que

$$\nabla \cdot \left[\left(\frac{\mathcal{D}_{A\sigma}}{V_{\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} s_{\sigma} dA \right) (c_{A\beta} - \langle c_{A\sigma} \rangle^{\sigma}) \right] \ll \frac{k_{\sigma\beta} A_{\sigma\beta}}{V_{\sigma}} (c_{A\beta} - \langle c_{A\sigma} \rangle^{\sigma}) \quad (3.P-94)$$

Y, de esta forma, la Ec. (3.P-90) se reduce a su forma final,

$$\underbrace{\frac{\partial \langle c_{A\sigma} \rangle^{\sigma}}{\partial t}}_{\text{Acumulación}} = \underbrace{\nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla \langle c_{A\sigma} \rangle^{\sigma})}_{\text{Difusión}} + \underbrace{\frac{k_{\sigma\beta} A_{\sigma\beta}}{V_{\sigma}} (c_{A\beta} - \langle c_{A\sigma} \rangle^{\sigma})}_{\text{Intercambio con los vasos sanguíneos}} - \underbrace{\langle R_{A\sigma} \rangle^{\sigma}}_{\text{Consumo de nutrientes}} \quad (3.P-95)$$

Capítulo 4

Solución y análisis de los modelos

El que sea posible no necesariamente justifica que deba hacerse

4.1. Introducción

Este capítulo trata sobre la última parte del proceso de modelado que es, a menudo, la más complicada, desde el punto de vista matemático, pues concierne a la solución del modelo y al análisis de los resultados obtenidos. Es importante resaltar que la solución debe ir de la mano con el análisis, pues en ocasiones el esfuerzo para obtener la solución es tal que la presentación se limita a ser meramente descriptiva. Por ejemplo, si el resultado de un modelo es una función exponencial creciente, de poco sirve escribir en el texto que acompaña a una gráfica de la solución que ésta es una exponencial, pues dicho comportamiento es suficientemente conocido. Más bien, es relevante discutir sobre las implicaciones que este resultado tiene sobre el planteamiento original del problema.

En este capítulo se abordarán, de manera meramente introductoria, algunas de las técnicas analíticas y numéricas para resolver sistemas de ecuaciones algebraicas, ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales; así como ecuaciones en diferencias. Para ayudar en el desarrollo de los temas se aplicará, en cada caso, el concepto expuesto a la solución del problema de transferencia de calor en una cabeza humana planteado en la Sección 3.5.1.

Se partirán de modelos sencillos donde la temperatura es sólo función de una variable independiente y posteriormente se irá haciendo más sofisticado y realista el modelo junto con el análisis correspondiente de resultados. Por último, se presentarán las soluciones del resto de los modelos planteados en el capítulo anterior, junto con los análisis correspondientes.

Para una mejor comprensión del material presentado, se sugieren varias referencias a lo largo del capítulo que permitirán profundizar sobre temas específicos. Además, se recomienda contar con conocimientos básicos en álgebra lineal, cálculo integral, así como elementos básicos de programación y de uso de software para la solución de ecuaciones diferenciales parciales.

4.2. Soluciones analíticas

Las soluciones analíticas son aquellas que pueden, en principio, obtenerse con sólo papel y lápiz (suponiendo una formación suficiente en conocimientos de matemáticas). Antes del desarrollo de las computadoras digitales en el siglo pasado este tipo de modelos eran la norma en ciencias e ingeniería. Sin embargo, aún en nuestros días las soluciones analíticas siguen siendo una herramienta poderosa y extensamente usada. Ésto debido que muchos sistemas complicados pueden representarse en ocasiones mediante modelos simples que permiten llegar a una solución analítica (ver ejemplos de la Sección 3.5). Por otro lado, si el modelo original es imposible de resolver analíticamente en forma exacta, el desarrollo de soluciones analíticas aproximadas es, sin duda, una ayuda invaluable (ver Cuadro 4.2-1).

Más aún, incluso con las capacidades de cómputo actuales, es a menudo conveniente comparar las soluciones numéricas obtenidas con las que resultan de utilizar soluciones analíticas aproximadas, con el fin de evaluar la validez de la solución numérica (ver, por ejemplo, Valdés-Parada, 2004). Más aún, de acuerdo a Greshenfeld (2011) las soluciones analíticas son importantes en técnicas aproximadas que requieren de computadoras, lo cual incluye a los métodos numéricos, los cuales pueden utilizar piezas de soluciones analíticas para hacer los pasos de la solución numérica más eficiente.

Antes de comenzar a detallar sobre soluciones analíticas de algunos modelos, es conveniente mencionar que un desarrollo a fondo de las técnicas matemáticas necesarias para obtener las soluciones analíticas de los diversos modelos matemáticos en ciencias e ingeniería está fuera de los objetivos de

Cuadro 4.2-1: Una anécdota sobre el valor de una solución aproximada

A finales del siglo XIX la mecánica de fluidos estaba dividida en dos ramas: la hidrodinámica teórica y la hidráulica. La primera se sustentaba en las ecuaciones de Navier-Stokes (las cuales hasta la fecha no tienen solución analítica en su forma exacta) y la segunda se basaba en correlaciones basadas en experimentos. La hidrodinámica tenía un sustento teórico fuerte pero no podía comprobarse su utilidad dado que nadie podía resolver las ecuaciones de Navier-Stokes. Por otro lado, la hidráulica si representaba los procesos deseados pero no era generalizable pues cada correlación era diferente para cada aplicación. En 1904, Ludwig Prandtl desarrolló una metodología para resolver analíticamente, de manera aproximada, las ecuaciones de Navier-Stokes y así predecir los perfiles de velocidad de un fluido alrededor de un obstáculo. La contribución de Prandtl impactó muchos campos que van desde el flujo de fluidos en tuberías hasta la aeronáutica.

este breviario. Por ello, la descripción se dirigirá a cuatro rubros principales: solución de sistemas de ecuaciones algebraicas, solución de ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales¹ y ecuaciones en diferencias. En cada caso el desarrollo será meramente introductorio y se proporcionarán referencias útiles para profundizar en cada tema.

4.3. Solución de sistemas de ecuaciones algebraicas

Una buena parte de los modelos matemáticos (y en especial los que representan sistemas macroscópicos) se expresan en términos de ecuaciones

¹De hecho, algunos libros como el de Kreyszig (2011) utilizan este enfoque.

algebraicas. Cuando se tiene que resolver un número considerable de ecuaciones es conveniente tratar con matrices. Una matriz es un arreglo rectangular de números o funciones (llamados elementos) arreglados en m filas horizontales y n columnas verticales. Por ejemplo, una matriz de 3 filas y 3 columnas (3×3) es

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \quad (4.3-1)$$

donde a_{ij} son los elementos de la matriz \mathbf{A} ; es decir, $A = [a_{ij}]$. Si m o n es igual a 1 se trata de un vector y si $m = n = 1$ es un escalar². Por ejemplo, para el siguiente sistema lineal³ de dos ecuaciones con dos incógnitas:

$$\begin{aligned} +2x + 5y &= 2 \\ -4x + 3y &= -30 \end{aligned} \quad (4.3-2)$$

se pueden definir dos vectores, \mathbf{a} y \mathbf{b} , uno para cada lado de las igualdades:

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} +2x + 5y \\ -4x + 3y \end{bmatrix} \quad (4.3-3a)$$

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 2 \\ -30 \end{bmatrix} \quad (4.3-3b)$$

De esta forma, el sistema de ecuaciones dado en (4.3-2) puede expresarse como

$$\mathbf{a} = \mathbf{b} \quad (4.3-4)$$

Aunque esta notación es más compacta, no ayuda mucho para encontrar los valores de x y y que satisfacen las ecuaciones en (4.3-2). Para avanzar hacia la solución, es conveniente definir una matriz de coeficientes,

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 5 \\ -4 & 3 \end{bmatrix} \quad (4.3-5)$$

Así como un vector con las incógnitas,

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \quad (4.3-6)$$

²En este texto se usan negritas para matrices y vectores y cursivas para escalares.

³El sistema se llama lineal porque cada variable está elevada a la primer potencia, como en la ecuación de la recta.

De esta forma, la Ec. (4.3-4) puede escribirse como sigue

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (4.3-7)$$

Para entender la justificación de esta última igualdad es necesario conocer algunas de las reglas que obedecen las matrices como la siguiente:

El producto de una matriz $\mathbf{A} = [a_{ij}]$ de tamaño $m \times n$ con una matriz $\mathbf{B} = [b_{ij}]$ de tamaño $r \times p$ está definido sí y sólo sí $r = n$ y el resultado es una matriz $\mathbf{C} = [c_{ij}]$ de tamaño $m \times p$ cuyos elementos se calculan como $c_{ij} = \sum_{l=1}^n a_{il}b_{lj}$.

En este ejemplo, $m = n = 2$, $r = 2$ y $p = 1$, de esta forma, el resultado de multiplicar \mathbf{Ax} es un vector de 2 filas y una columna cuyos elementos son:

$$\begin{aligned} c_{11} &= \sum_{l=1}^2 a_{1l}x_{l1} = +2x + 5y \\ c_{21} &= \sum_{l=1}^2 a_{2l}x_{l1} = -4x + 3y \end{aligned} \quad (4.3-8)$$

los cuales son precisamente los componentes del vector \mathbf{a} como se muestra en la Ec. (4.3-3a).

Para resolver la ecuación matricial (4.3-7) se cuentan con diversos métodos, algunos de ellos son:

- a) Eliminación Gaussiana
- b) Eliminación Gauss-Jordan
- c) La regla de Cramer

En este texto no se explicarán estos métodos, pero se recomienda que el alumno revise textos como los de álgebra lineal de Poole (2005) y de Anton (2010), donde podrán comprender a detalle el fundamento y uso de estos métodos de solución. Por cualquiera de estos métodos se puede demostrar

que la solución de este ejemplo es $x = 6$, $y = -2$ (Problema 4.1). Antes de continuar, es crucial discutir acerca de la existencia y unicidad de soluciones. Existen tres tipos de soluciones para una ecuación tipo $ax = b$:

- 1 *Solución única si y sólo si $a \neq 0$. Si además $b = 0$, la solución es $x = 0$ y se conoce como solución trivial.*
- 2 *Un número infinito de soluciones si $a = 0$ y $b = 0$ ya que cualquier número multiplicado por cero da cero.*
- 3 *No existe solución si $a = 0$ y $b \neq 0$ ya que no hay número que multiplicado por cero no de cero.*

Este mismo conjunto de alternativas aplica a sistemas de ecuaciones. Por ejemplo, si se trata de un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas (dos rectas $y = m_1x + b_1$, $y = m_2x + b_2$), las alternativas son (Problema 4.2):

- 1 *Solución única si y sólo si las rectas se intersecan en un solo punto, es decir $m_1 \neq m_2$ y $b_1 \neq b_2$. Si este punto es el origen, la solución es la trivial $x = y = 0$.*
- 2 *Un número infinito de soluciones si las rectas son la misma, es decir $m_1 = m_2$ y $b_1 = b_2$.*
- 3 *No existe solución si las rectas son paralelas, es decir $m_1 = m_2$ y $b_1 \neq b_2$.*

Por supuesto, estos criterios se pueden extender a sistemas de ecuaciones tipo $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$. Es importante conocer y aplicar estos criterios pues no tiene caso intentar resolver un sistema de ecuaciones que de antemano se puede determinar que no tendrá solución o que ésta no será única.

Para finalizar esta sección es conveniente mencionar que, en muchas aplicaciones, es necesario resolver sistemas de ecuaciones que pueden involucrar cientos o miles de ecuaciones independientes. Este tipo de problemas requieren llevar a cabo una programación eficiente de algunos de los métodos de solución mencionados anteriormente. Cuando se aborde el tema de soluciones numéricas se retomará este punto.

4.4. Solución de ecuaciones diferenciales ordinarias

En los ejemplos planteados en la Sección 3.5 se desarrollaron los siguientes modelos,

Transferencia de calor en una cabeza humana

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + f(T); \quad \forall r \in (0, R), t > 0 \quad (4.4-1)$$

Penetración de un derrame de petróleo en el subsuelo

$$\frac{dz}{dt} = \frac{K \rho g}{\epsilon \mu} \left[\frac{h_0 + (1 - \epsilon) z}{z} \right] \quad (4.4-2)$$

Destilación diferencial

$$\frac{dx_L}{(y_D - x_L)} = \frac{dL}{L} \quad (4.4-3)$$

Panel fotovoltaico

$$\rho C_p \frac{d\langle T \rangle}{dt} = -h \frac{A_c}{V} (\langle T \rangle - T_a) + S \frac{A_c}{V} \quad (4.4-4)$$

Modelo matemático del amor

$$\frac{dR}{dt} = bJ - aR \quad (4.4-5a)$$

$$\frac{dJ}{dt} = cR - dJ \quad (4.4-5b)$$

En todos los casos sólo existe una variable dependiente, la cual es función de una sola variable independiente, excepto en el modelo para la transferencia de calor en una cabeza humana. Cuando en una ecuación diferencial, la variable dependiente es función únicamente de una variable independiente, se dice que es una *ecuación diferencial ordinaria* y cuando no es el caso, se habla de una *ecuación diferencial parcial*. El orden de una ecuación diferencial

corresponde al orden más alto de su derivada. De esta forma, una ecuación diferencial del tipo

$$\frac{dy}{dt} = ay \quad (4.4-6)$$

es una ecuación diferencial ordinaria de primer orden, siendo a una constante conocida. Como se mencionó en el Capítulo 2, para que un problema de valor inicial⁴ o a la frontera⁵ esté completamente definido es necesario contar con suficientes condiciones iniciales o de frontera. El número de estas condiciones debe ser igual al orden de la ecuación diferencial. Así, una ecuación en derivadas espaciales de segundo orden como la siguiente

$$\frac{d^2y}{dx^2} + \frac{dy}{dx} = f(x) \quad (4.4-7)$$

requiere de dos condiciones a la frontera.

Una ecuación diferencial se dice que es lineal cuando no involucra productos de la variable dependiente por sí misma o por sus derivadas. Por ejemplo, la siguiente ecuación diferencial

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 = ay \frac{dy}{dx} + y^3 \quad (4.4-8)$$

es claramente no lineal (Problema 4.3). En general, no es posible obtener soluciones analíticas de ecuaciones diferenciales no lineales, aunque pueden darse algunas excepciones. Existen diversos métodos para resolver analíticamente ecuaciones diferenciales ordinarias lineales de primer orden como son:

- a) Método de variables separables
- b) Método de ecuaciones exactas
- c) Método del factor integrante

Estos (y otros) métodos están explicados a detalle en libros especializados en ecuaciones diferenciales como el de Zill y Wright (2012) y se estudian durante las primeras semanas de un curso de ecuaciones diferenciales. Para

⁴ Aquel que sólo involucra derivadas temporales

⁵ Aquel que sólo involucra derivadas espaciales

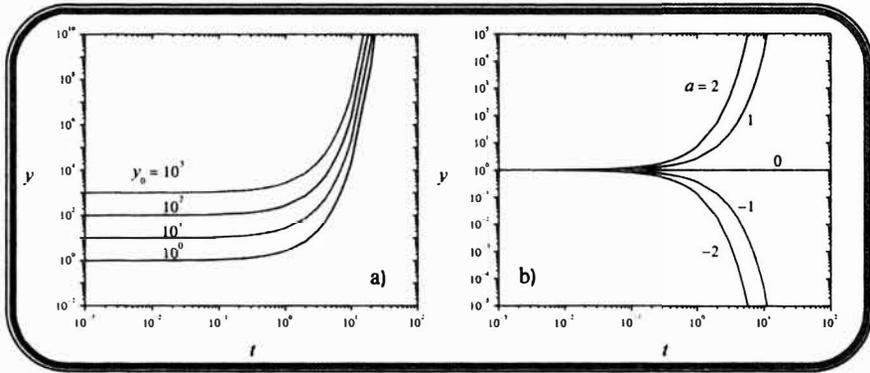


Figura 4.4-1: Evaluación de la solución dada en la Ec. (4.4-9): a) variando y_0 manteniendo $a = 1$ y b) variando a fijando $y_0 = 1$.

el caso de la Ec. (4.4-6), la solución puede obtenerse de manera directa (ver Problema 4.4) y está dada por la siguiente expresión

$$y = y_0 e^{at} \tag{4.4-9}$$

donde y_0 es el valor de la variable independiente al inicio (es decir, a $t = 0$).

Antes de hacer alguna evaluación gráfica de la solución es conveniente anticipar cuales serán los efectos de modificar los valores de y_0 y a . Por ejemplo, si y_0 se duplicara, automáticamente los valores de y también lo harían. Por otro lado, dado que a se encuentra dentro de una función exponencial, un incremento en este parámetro no se verá reflejado apreciablemente en la solución a tiempos cortos (es decir, si $t = 1$). Además, si $a > 0$ la solución crecerá exponencialmente hacia infinito, si $a = 0$ la solución será $y = y_0$ y si $a < 0$ la solución decaerá exponencialmente hacia cero.

Estas observaciones pueden confirmarse al examinar los resultados presentados en las gráficas de la Fig. 4.4-1. Como se esperaba, los cambios en la condición inicial (y_0) son más apreciables a tiempos cortos. Lo cual tiene sentido físico, pues un sistema debe ser más fuertemente afectado por su situación inicial a tiempos cortos y poco a poco deberá *olvidar*, por así decirlo, su estado inicial. Por el contrario, los cambios en el valor del parámetro a son apreciables sólo a partir de $t > 10^{-1}$. Este ejemplo es un primer acercamiento

sobre la solución y análisis de un modelo; en los párrafos siguientes se avanzará en el tipo de análisis para las soluciones de los modelos.

Hasta este momento, se han estudiado únicamente ecuaciones diferenciales de primer orden. Por lo que es oportuno extender el análisis a ecuaciones diferenciales de segundo orden. De hecho, la mayoría de los procesos de transporte en estado estacionario y en una dirección se rigen por este tipo de ecuaciones (Problema 4.5).

Con el fin de desarrollar paulatinamente el resto de los temas de este capítulo, se seguirá el ejemplo de transferencia de calor en una cabeza humana cuya complejidad se irá incrementando progresivamente. La ecuación diferencial (4.4-1) es una ecuación diferencial parcial y su solución se abordará en la siguiente sección.

Por el momento, es conveniente reducir la dimensión del problema, con el fin de obtener una ecuación diferencial ordinaria. Para lograr esto, se tienen al menos dos opciones:

- 1 Eliminar la dependencia espacial de la ecuación diferencial mediante un proceso de promediado para obtener una ecuación diferencial ordinaria de primer orden para la temperatura promedio. Este es el enfoque que se siguió en las secciones 3.5.2 y 3.5.4 para modelar el derrame de petróleo en el subsuelo y el panel fotovoltaico, respectivamente.
- 2 Tomar en cuenta la máxima 8 y restringirnos, por el momento, a condiciones de estado estacionario.

A continuación se explorará cada opción:

Alternativa 1

El primer paso para esta opción es definir un operador de promediado en coordenadas esféricas como el siguiente

$$\langle T \rangle (t) = \frac{3}{R^3} \int_{r=0}^{r=R} T(r, t) r^2 dr \tag{4.4-10}$$

Aplicando este operador a la Ec. (4.4-1) resulta lo siguiente

$$\rho C_p \left\langle \frac{\partial T}{\partial t} \right\rangle = k \left\langle \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right\rangle + \langle f(T) \rangle \tag{4.4-11}$$

aquí se supuso que los coeficientes ρ , C_p y k son constantes en el dominio de integración.

El término de acumulación puede simplificarse directamente al intercambiar diferenciación e integración, dado que los límites de integración no dependen del tiempo, entonces

$$\rho C_p \left\langle \frac{\partial T}{\partial t} \right\rangle = \rho C_p \frac{d \langle T \rangle}{dt} \quad (4.4-12)$$

Dirigiendo la atención a los términos del lado derecho de la Ec. (4.4-11) y haciendo uso de la definición del operador de promediado [Ec. (4.4-10)] se tiene, para el primer término, lo siguiente

$$\begin{aligned} k \left\langle \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right\rangle &= \frac{3k}{R^3} \int_{r=0}^{r=R} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) r^2 dr = \frac{3k}{R^3} \int_{r=0}^{r=R} d \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) \\ &= \frac{3k}{R^3} r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=0}^{r=R} = \frac{3k}{R} \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} \end{aligned} \quad (4.4-13)$$

Sustituyendo la condición de frontera en la superficie de la cabeza dada en la Ec. (3.5-2b) en la última igualdad del resultado anterior, se obtiene que

$$k \left\langle \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right\rangle = -\frac{3}{R} h (T|_{r=R} - T_a) \quad (4.4-14)$$

A pesar del progreso conseguido, no se conoce el valor de la temperatura en la superficie de la cabeza, por lo que no es posible utilizar el resultado de la Ec. (4.4-14) en su forma actual. Dado que el objetivo es contar con una ecuación diferencial en términos del promedio en la temperatura, se propone la siguiente descomposición espacial (un enfoque análogo se presenta en el Problema 3.25)

$$T(r, t) = \langle T \rangle(t) + \tilde{T}(r, t) \quad (4.4-15)$$

donde $\tilde{T}(r, t)$ representa las desviaciones espaciales de la temperatura respecto a su valor promedio. Sustituyendo la Ec. (4.4-15) en la Ec. (4.4-14) se obtiene

$$k \left\langle \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right\rangle = -\frac{3}{R} h (\langle T \rangle - T_a) \quad (4.4-16)$$

donde, como primera aproximación, se adoptó la siguiente simplificación (máxima 11)

$$\tilde{T} \Big|_{r=R} \ll \langle T \rangle \quad (4.4-17)$$

La cual corresponde a una simplificación del Nivel II sugerido por Whitaker (1988). Sin embargo, para los desarrollos que siguen es recomendable contar con una simplificación del Nivel III de Whitaker (1988). En el Problema 4.6 se buscan las restricciones de escala correspondientes.

Dirigiendo la atención a la fuente de generación de calor en la cabeza, el último término del lado derecho de la Ec. (4.4-11) puede expresarse como sigue

$$\langle f(T) \rangle = \frac{3}{R^3} \int_{r=0}^{r=R} f(T) r^2 dr \quad (4.4-18)$$

Como se mencionó en la Sección 3.5.1, se considerarán dos alternativas para expresar la generación de calor, en el caso lineal [Ec. (3.5-4)] (máxima 9), el resultado del lado derecho de la Ec. (4.4-18) es

$$\langle f(T) \rangle = \alpha \left(1 - \frac{N}{\alpha} \langle T \rangle \right) \quad (4.4-19)$$

Sustituyendo las ecs. (4.4-12), (4.4-16) y (4.4-19) en la Ec. (4.4-11) se obtiene el siguiente modelo lineal para la temperatura promedio

$$\rho C_p \frac{d\langle T \rangle}{dt} + \left(\frac{3}{R} h + N \right) \langle T \rangle = \frac{3}{R} h T_a + \alpha \quad (4.4-20)$$

Antes de iniciar con la solución de este problema, conviene recordar la máxima número 3 de Aris (1976), la cual sugiere escribir el problema en forma adimensional. A partir de lo revisado en el Capítulo 3, se proponen las siguientes definiciones para la temperatura y tiempo adimensionales,

$$\Theta = \frac{T}{T^*}; \quad \tau = \frac{t}{t^*} \quad (4.4-21)$$

donde, T^* es una temperatura de referencia definida como

$$T^* = \frac{\alpha}{N} \quad (4.4-22)$$

mientras que t^* representa el tiempo característico de difusión de calor, es decir,

$$t^* = \frac{\rho c_p R^2}{k} \quad (4.4-23)$$

Escribiendo la Ec. (4.4-20) en términos de las variables adimensionales definidas arriba, se llega a la siguiente expresión,

$$\frac{d\langle\Theta\rangle}{d\tau} + (3Bi + \Phi^2)\langle\Theta\rangle = 3Bi\Theta_a + \Phi^2 \quad (4.4-24)$$

donde $\Theta_a = T_a/T^*$, $\Phi^2 = NR^2/k$ y Bi es el número de Biot, definido como

$$Bi = \frac{hR}{k} \quad (4.4-25)$$

Este número adimensional relaciona la velocidad de transporte de calor por convección respecto a su contraparte debida a la difusión de calor en la frontera. De esta forma, si $Bi = 1$, el calor difícilmente se transfiere entre la superficie de la cabeza y el ambiente. Para resolver la Ec. (4.4-24), es necesario contar con la condición inicial para la temperatura promedio adimensional, la cual puede obtenerse de manera sencilla a partir de aplicar el operador de promediado a la Ec. (3.5-3) y dividir ambos lados de la ecuación resultante entre T^* para llegar al siguiente resultado

$$\text{Cuando } \tau = 0, \quad \langle\Theta\rangle = \Theta_0 \quad (4.4-26)$$

donde, $\Theta_0 = T_0/T^*$. La solución general de la Ec. (4.4-24) puede encontrarse por varios de los métodos mencionados anteriormente (como el del factor integrante) y se expresa como sigue (Problema 4.7)

$$\langle\Theta\rangle = \Theta_0 e^{-(3Bi+\Phi^2)\tau} + \left(\frac{3Bi\Theta_a + \Phi^2}{3Bi + \Phi^2} \right) \left(1 - e^{-(3Bi+\Phi^2)\tau} \right) \quad (4.4-27)$$

La cual se reduce a $\langle\Theta\rangle = \Theta_0$ en el límite cuando $\tau \rightarrow 0$. Simplemente observando la estructura matemática de la solución del problema, es de esperarse que la dependencia de la temperatura promedio con el tiempo sea de tipo sigmoideal. Más aún, del planteamiento del problema adimensional se sabe que el modelo tiene cuatro parámetros, que son Bi , Φ , Θ_a y Θ_0 .

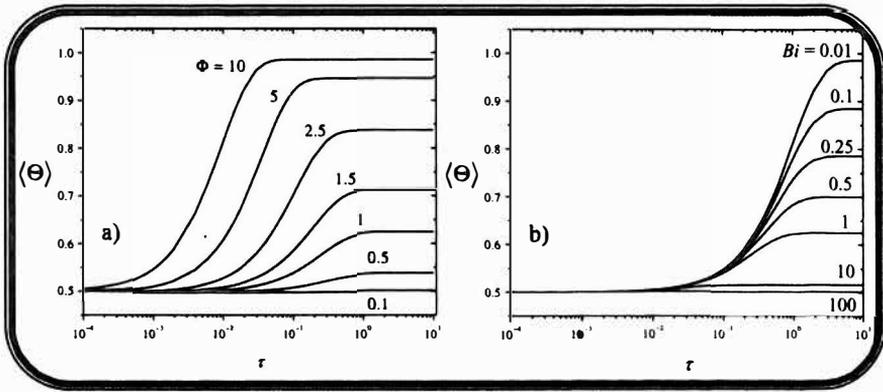


Figura 4.4-2: Evolución de la temperatura promedio adimensional utilizando el modelo de generación de calor de Gray (1980) a) como función de Φ fijando $Bi = 1$ y b) como función de Bi fijando $\Phi = 1$. En todos los cálculos se tomó $\Theta_a = 0.5$.

Para eliminar uno de estos parámetros, se supondrá arbitrariamente que la temperatura inicial es la temperatura ambiental, es decir $\Theta_0 = \Theta_a$. El número adimensional Φ está relacionado con la fuente de generación de calor, el radio de la cabeza y su conductividad térmica. Suponiendo que se trata, en todo momento de la misma cabeza⁶, este parámetro está relacionado directamente con la generación de calor, por lo que los perfiles de temperatura deben incrementarse conforme aumenta este parámetro. Esta hipótesis puede comprobarse con los resultados mostrados en la Fig. 4.4-2a), donde además puede apreciarse que la temperatura decrece con la posición, lo cual es de esperarse de acuerdo a la física del problema.

Como se mencionó anteriormente, el número de Biot relaciona el transporte convectivo externo a la cabeza con el transporte difusivo en la superficie. Suponiendo que la cabeza se encuentra más caliente que el ambiente (es decir, fijando $\Theta_a \in (0, 1)$) en cuanto mayor sea el número de Biot, más calor debe disiparse por la cabeza y por tanto los perfiles de temperatura deben disminuir; esto último se observa claramente en los resultados mostrados en

⁶Es decir, R y k están fijas.

la Fig. 4.4-2b). Es interesante notar que los efectos de la fuente son percibidos por el sistema desde tiempos cortos (del orden de $\tau = 10^{-4}$), mientras que los efectos del intercambio con el ambiente no son evidentes hasta después de $\tau = 10^{-2}$. A pesar de las suposiciones impuestas a este modelo, los resultados obtenidos han proporcionado información relevante que será de utilidad más adelante cuando se lleven a cabo cálculos más sofisticados.

Alternativa 2:

Para terminar esta sección se explorará la segunda alternativa para reducir la dimensión del sistema, esto implica llevar a cabo la solución en estado estacionario del problema lineal. El problema de valor a la frontera es el siguiente:

$$\frac{k}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dT}{dr} \right) + \alpha \left(1 - \frac{NT}{\alpha} \right) = 0, \quad \forall r \in (0, R) \quad (4.4-28a)$$

$$\text{La temperatura, } T, \text{ está definida en } 0 \leq r \leq R \quad (4.4-28b)$$

$$\text{En } r = R, \quad -k \frac{dT}{dr} = h(T - T_a) \quad (4.4-28c)$$

Al igual que en el caso anterior, antes de proceder con la solución del problema, se tomará en cuenta la máxima 3 que sugiere escribir el problema en forma adimensional. Para tener consistencia con los desarrollos anteriores, se deben conservar las mismas definiciones para los parámetros adimensionales Φ y Bi , así como para las temperaturas adimensionales Θ y Θ_a (máxima 2). Por lo que la única variable adimensional restante por definir es la posición,

$$\xi = \frac{r}{R} \quad (4.4-29)$$

Al usar en las ecs. (4.4-28) las definiciones dadas en las ecs. (4.4-21), (4.4-25) y (4.4-29) se obtiene la siguiente forma adimensional del problema de valor a la frontera

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{d\Theta}{d\xi} \right) + \Phi^2 (1 - \Theta) = 0, \quad \forall \xi \in (0, 1) \quad (4.4-30a)$$

$$\text{La temperatura, } \Theta, \text{ está definida en } 0 \leq \xi \leq 1 \quad (4.4-30b)$$

$$\text{En } \xi = 1, \quad -\frac{d\Theta}{d\xi} = Bi(\Theta - \Theta_a) \quad (4.4-30c)$$

Antes de proceder a la solución del problema, es pertinente identificar las fuentes que causan que la solución del problema no sea la trivial. Para ello, es conveniente recurrir a la definición de una ecuación homogénea:

Una ecuación diferencial, o incluso una condición inicial o a la frontera, es homogénea cuando es satisfecha por la solución trivial. Si todo un problema de valor inicial o a la frontera es homogéneo su solución es la trivial.

Al analizar la Ec. (4.4-30a), puede notarse que no es satisfecha si se toma $\Theta = 0$, debido al término $+\Phi^2$, el cual es la fuente del problema de valor a la frontera. La restricción dada en la Ec. (4.4-30b) no puede considerarse como una fuente pues ciertamente al fijar $\Theta = 0$ para todo el dominio sería satisfecha. Más aún, al analizar la Ec. (4.4-30c) se observa que el término Θ_a es responsable de que la ecuación no sea homogénea y es ésta la segunda fuente del problema de valor a la frontera. Entonces, se cuenta con una fuente volumétrica en la Ec. (4.4-30a), Φ^2 , y una fuente superficial en la Ec. (4.4-30c), Θ_a . Éstas determinarán los valores del perfil de temperatura junto con los parámetros Φ^2 y Bi .

Entre los métodos disponibles para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden se encuentran:

- a) Método de coeficientes indeterminados
- b) Método del operador diferencial
- c) Método del Wronskiano
- d) Método de variación de parámetros
- e) Método de la ecuación auxiliar
- f) Método de funciones de Green

El lector puede revisar estos métodos en libros especializados de ecuaciones diferenciales (ver, por ejemplo Zill y Wright, 2012; Boyce y DiPrima, 2012). Sin embargo, debido al uso que se le dará más adelante, se seguirá el método

de solución usando funciones de Green (ver Apéndice A). De acuerdo a este método, la solución del problema puede expresarse como sigue

$$\Theta(\xi) = - \underbrace{\int_{\xi_0=0}^{\xi_0=1} G(\xi, \xi_0) \Phi^2 \xi_0^2 d\xi_0}_{\text{influencia de la fuente volumétrica}} - \underbrace{hG(1, \xi) \Theta_a}_{\text{influencia de la fuente superficial}} \tag{4.4-31}$$

Esta estructura de la solución es conveniente pues permite apreciar claramente los papeles jugados por cada fuente del problema y no es la única forma de expresar la solución. De hecho, tras calcular la función de Green y llevar a cabo las operaciones algebraicas correspondientes, la Ec. (4.4-31) toma la forma,

$$\Theta = \left(\frac{Bi(\Theta_a - 1)}{Bi - 1 + \Phi \coth(\Phi)} \right) \frac{\sinh(\Phi\xi)}{\xi \sinh(\Phi)} + 1 \tag{4.4-32}$$

Los resultados de evaluar esta última expresión se muestran en la Fig. 4.4-3, donde se grafican los perfiles de la temperatura adimensional variando los parámetros Φ y Bi en los mismos rangos utilizados en la Fig. 4.4-2. La dependencia de los perfiles con estos parámetros está en concordancia con el análisis previo, es decir, al aumentar la fuente (incremento en Φ) los perfiles de temperatura internos se incrementan. De hecho, en cuanto mayor sea este parámetro, se origina un gradiente de temperatura más apreciable en el dominio de solución, sobre todo en las regiones cercanas a la frontera externa (ver curva para $\Phi = 10$ en la Fig. 4.4-3a). De igual forma, al incrementar el número de Biot, se permite una mejor interacción con el medio y por tanto se generan gradientes de temperatura apreciables. Sin embargo, bajo estas condiciones, la interacción con el medio conduce a una disminución de la temperatura de la cabeza. Cabe agregar que en las zonas donde existen gradientes de temperatura apreciables (relativamente altos valores de Φ y Bi) es probable que la simplificación propuesta en (4.4-17) no sea satisfactoria pues las desviaciones de la temperatura pueden llegar a ser del mismo orden que la temperatura promedio (Problema 4.7).

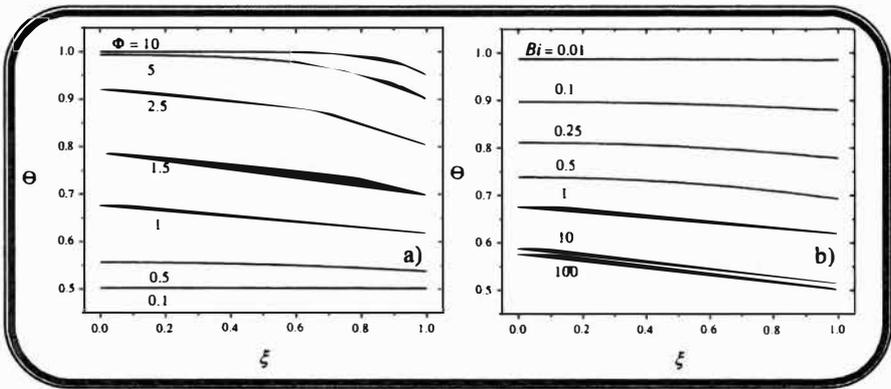


Figura 4.4-3: Perfiles de temperatura en estado estacionario utilizando el modelo de generación de calor de Gray (1980) a) como función de Φ fijando $Bi = 1$ y b) como función de Bi fijando $\Phi = 1$. En todos los cálculos se tomó $\Theta_a = 0.5$.

En esta sección se discutió acerca de problemas de valor inicial y a la frontera en una dimensión. Además, se resolvió el problema de la transferencia de calor en estado estacionario en una cabeza humana idealizada como una esfera donde el transporte se da primordialmente en la dirección radial. A pesar de la simpleza de este problema, se han aplicado varias de las máximas de Aris (1976) sugeridas en el capítulo anterior y se obtuvo información relevante acerca del sistema y su respuesta a los cambios de los parámetros que lo rigen.

4.5. Solución de ecuaciones diferenciales parciales

Cuando la variable dependiente es función de más de una variable independiente es necesario utilizar ecuaciones diferenciales parciales. Las definiciones de linealidad, homogeneidad y de orden de una ecuación diferencial siguen siendo válidas para ecuaciones parciales. En muchas aplicaciones de ciencias

e ingeniería se trata con ecuaciones parciales de segundo orden, las cuales a su vez pueden clasificarse en tres tipos:

1 Ecuaciones parabólicas: por ejemplo,

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \nabla^2 T, \quad \text{ecuación de calor} \quad (4.5-1)$$

$$\rho c_p (\mathbf{v} \cdot \nabla T) = k \nabla^2 T, \quad \text{ecuación de convección-difusión} \quad (4.5-2)$$

2 Ecuaciones elípticas: por ejemplo,

$$k \nabla^2 T = 0, \quad \text{ecuación de Laplace} \quad (4.5-3)$$

$$k \nabla^2 T = \Phi, \quad \text{ecuación de Poisson} \quad (4.5-4)$$

3 Ecuaciones hiperbólicas: por ejemplo,

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = k \nabla^2 u, \quad \text{ecuación de onda} \quad (4.5-5)$$

En el estudio de la transferencia de cantidad de movimiento, calor y masa lo más común es lidiar con ecuaciones parabólicas y elípticas. Sin embargo, las ecuaciones hiperbólicas no dejan por ello de ser relevantes y en muchos casos ayudan a tener una visión más realista de un proceso. Por ejemplo, de acuerdo al balance de masa, la ecuación que describe el transporte difusivo de la concentración de una especie, c_A , en estado estacionario es

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_A = 0 \quad (4.5-6)$$

Para relacionar la densidad de flujo difusivo de masa, \mathbf{J}_A , se utiliza la ley de Fick [Ec. (2.7-56c)], que al sustituirla en la Ec. (4.5-6) da como resultado

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = \mathcal{D}_A \nabla^2 c_A \quad (4.5-7)$$

Sin embargo, la ecuación constitutiva de Fick induce una velocidad infinita de propagación. Es decir, al existir un gradiente de concentración en una solución, se origina de manera inmediata un flujo difusivo de masa.

Para relajar esta suposición, Cattaneo (1948) propuso modificar la ley de Fick para concederle al flujo difusivo un tiempo de retardo (o adaptación) respecto al gradiente de concentración. La ecuación constitutiva de Cattaneo (1948) es la siguiente

$$t_r \frac{\partial \mathbf{J}_A}{\partial t} + \mathbf{J}_A = -\mathcal{D}_A \nabla c_A \quad (4.5-8)$$

El resultado de sustituir la Ec. (4.5-8) en la Ec. (4.5-6) es la ecuación de difusión de Cattaneo [Ec. (4.P-12)], la cual sirve para representar algunos fenómenos de difusión anómala (ver Problema 4.8).

Las ecuaciones diferenciales parciales elípticas y parabólicas satisfacen el principio del máximo, el cual se expresa a continuación como:

El valor máximo de una función que satisface una EDP elíptica o parabólica se debe encontrar en las fronteras y si estuviera en el dominio, el resultado sería una constante.

En caso de haber fuentes en la ecuación diferencial, este principio se cumple sólo cuando hay consumo. Por otro lado, si hubiera generación el principio se cumple a la inversa, es decir: *el mínimo de una función se encuentra en las fronteras y si estuviera en el dominio, el resultado sería una constante.* Los resultados de la sección anterior (ver Fig. 4.4-3) claramente cumplen este principio.

Entre los métodos de solución de ecuaciones diferenciales parciales se encuentran:

- a) Método de separación de variables
- b) Método de transformada de Laplace
- c) Método de series de Fourier
- d) Método de funciones de Green

Como en el capítulo anterior, se le recomienda al lector interesado en estudiar estos métodos a profundidad revisar texto especializados como los de Zill y Wright (2012) y Arfken y col. (2012).

Retomando el problema de transferencia de calor en una cabeza humana, en esta sección se discutirá la solución en estado transitorio del modelo lineal. En otras palabras, el interés está en el siguiente problema de valor inicial y a la frontera,

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \alpha \left(1 - \frac{NT}{\alpha} \right), \quad \forall r \in (0, R), t > 0 \quad (4.5-9a)$$

La temperatura está definida en $0 \leq r \leq R, \forall t$ (4.5-9b)

En $r = R, -k \frac{\partial T}{\partial r} = h(T - T_a), \forall t$ (4.5-9c)

Cuando $t = 0, T = T_0$ (4.5-9d)

O bien, recurriendo a las definiciones de los parámetros y variables adimensionales propuestas en la sección anterior, se tiene

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial \Theta}{\partial \xi} \right) + \Phi^2 (1 - \Theta), \quad \forall \xi \in (0, 1), \tau > 0 \quad (4.5-10a)$$

La temperatura está definida en $0 \leq \xi \leq 1, \forall \tau$ (4.5-10b)

En $\xi = 1, -\frac{\partial \Theta}{\partial \xi} = Bi(\Theta - \Theta_a), \forall \tau$ (4.5-10c)

Cuando $\tau = 0, \Theta = \Theta_0$ (4.5-10d)

En este caso se pueden identificar tres fuentes en el problema: la fuente volumétrica de generación de calor, Φ^2 , en la Ec. (4.5-10a); la fuente superficial por el intercambio de calor con el ambiente, Θ_a , en la Ec. (4.5-10c) y la condición inicial, Θ_0 , en la Ec. (4.5-10d). Utilizando el método de las funciones de Green se obtiene la siguiente solución:

$$\begin{aligned} \Theta(\xi, \tau) = & \underbrace{\int_{\tau_0=0}^{\tau_0=\tau} \int_{\xi_0=0}^{\xi_0=1} \Phi^2 G(\xi, \xi_0, \tau - \tau_0) \xi_0^2 d\xi_0 d\tau}_{\text{influencia de la fuente volumétrica}} + \underbrace{\int_{\xi_0=0}^{\xi_0=1} \Theta_0 G(\xi, \xi_0, \tau) \xi_0^2 d\xi_0}_{\text{influencia de la condición inicial}} \\ & + \underbrace{\int_{\tau_0=0}^{\tau_0=\tau} Bi \Theta_a \left. \frac{\partial G}{\partial \xi_0} \right|_{\xi_0=1} d\tau_0}_{\text{influencia de la fuente superficial}} \end{aligned} \quad (4.5-11)$$

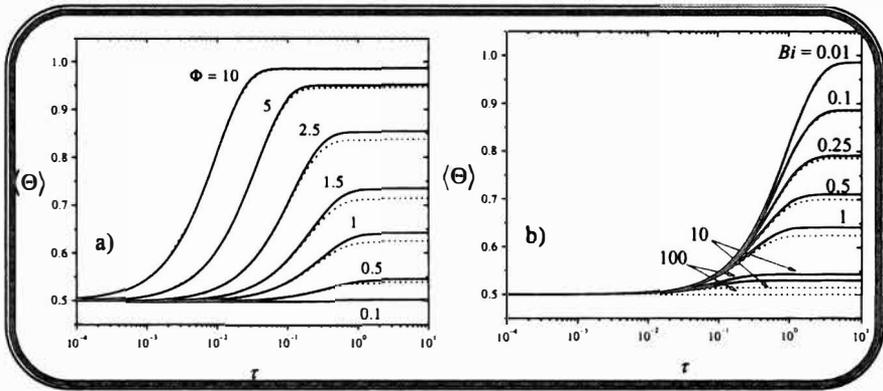


Figura 4.5-1: Comparación de las predicciones de la evolución del promedio de la temperatura utilizando el modelo exacto (línea continua) y el modelo aproximado (línea punteada) utilizando el modelo de generación de calor de Gray (1980) a) como función de Φ fijando $Bi = 1$ y b) como función de Bi fijando $\Phi = 1$. En todos los cálculos se tomó $\Theta_a = 0.5$.

La función de Green está disponible en manuales como el de Zaitsev y Polyanin (2002). Por cuestión de brevedad no se presenta la forma desarrollada de la solución para centrar la atención en el análisis de la evaluación de la solución. Para propósitos de evaluación, se estudiará sólo la evolución temporal de la temperatura promedio adimensional, $\langle \Theta \rangle$. Dado que las predicciones que se hagan de $\langle \Theta \rangle$ no involucran la suposición dada por (4.4-17) se denotará en adelante a esta solución como el modelo exacto y a la solución dada por la Ec. (4.4-27) como el modelo aproximado.

En la Fig. 4.5-1 se comparan las predicciones de la evolución de la temperatura promedio obtenidas con los modelos exacto y aproximado para los mismos rangos de valores de los parámetros Φ y Bi usados en la Fig. 4.4-2. Al variar el parámetro Φ , se observa que existe un rango de valores [$\Phi \in (0.5, 2.5)$] en los cuales los dos modelos exhiben las mayores desviaciones, sobretudo en estado estacionario (Fig. 4.5-1a). Este rango de valores representa las condiciones en las cuales la velocidad de generación de calor tiene lugar a una tasa que es comparable con la tasa de disipación de

calor, la cual es, en parte, responsable de las desviaciones de la temperatura en la superficie (Problema 4.6). Por otro lado, cuando se fija el valor de Φ y se varía el número de Biot, es claro que al aumentar este parámetro las diferencias entre los modelos se incrementan. Esto es de esperarse pues al mejorar el intercambio de calor con el exterior se generan desviaciones más apreciables de la temperatura superficial respecto al promedio como se deduce en el Problema 4.6. De manera cuantitativa puede calcularse el porcentaje de error relativo entre los modelos usando la siguiente definición:

$$\%Error = \frac{|\Theta_{exacta} - \Theta_{aproximada}|}{\Theta_{exacta}} \times 100\% \quad (4.5-12)$$

Así se calculan los porcentajes de error entre los dos modelos, los cuales no alcanzan a ser mayores del 10 %. En muchas aplicaciones prácticas el contar con este tipo de acuerdo entre dos modelos es suficiente para poder confiar en el modelo aproximado. Hasta este punto se ha analizado la formulación del modelo que conduce a una ecuación diferencial lineal y es por tanto susceptible de resolverse de manera analítica. En la siguiente sección se expondrá la solución numérica del problema no lineal. Un punto intermedio entre ambos tipos de soluciones son las soluciones analíticas implícitas (ver máxima 10). Por ejemplo, si se visualiza a la fuente como un término no homogéneo en la ecuación diferencial, se puede llegar a una solución analítica de la temperatura usando funciones de Green en términos de la fuente. Para resolver dicha ecuación es necesario recurrir a métodos iterativos; los detalles de este método pueden consultarse en el trabajo de Valdés-Parada *y col.* (2007).

4.6. Soluciones numéricas de ecuaciones diferenciales

En esta sección se discutirá brevemente acerca de las soluciones numéricas de problemas de valor inicial y a la frontera utilizando el método de diferencias finitas. Los métodos numéricos pueden aplicarse para resolver una gran variedad de problemas, no sólo aquellos relacionados con ecuaciones diferenciales (Burden y Faires, 2011). Sin embargo, por brevedad y consistencia con el material presentado anteriormente, la atención se centrará única-

mente en la solución de ecuaciones diferenciales. Las soluciones numéricas han cobrado un peso cada vez mayor en la investigación científica con el rápido desarrollo de los sistemas de cómputo actuales. Sin embargo, estas nuevas capacidades plantean de inmediato, al menos, las siguientes dos preguntas:

- 1 ¿Puede confiarse en las soluciones numéricas obtenidas?
- 2 ¿Es realmente necesario tener la solución numérica de un problema complejo cuya solución aproximada puede obtenerse analíticamente?

La primera pregunta es motivada por el uso, cada vez más extenso, de software especializado en llevar a cabo soluciones numéricas. Algunos ejemplos de lo anterior son Matlab⁷, Aspen plus⁸ y Comsol Multiphysics⁹. De hecho, el advenimiento de estas capacidades de cómputo ha motivado a replantear la manera de llevar a cabo cálculos en ciencias e ingeniería (ver, por ejemplo, Finlayson, 2012). Las amigables interfaces gráficas que estos y otros programas proporcionan al usuario podrían llevar a una falsa seguridad en sus resultados, al grado que se vuelva difícil desconfiar de la solución proporcionada. Como se mostrará más adelante, toda solución numérica tiene cierto error, el cual ciertamente puede minimizarse en algunos casos y en otros es prácticamente imposible de evitar. Una prueba que cualquier solución debe satisfacer (y que no siempre se lleva a cabo) es que satisfaga al problema con cada una de sus restricciones. Por ejemplo, la solución de un problema de valor a la frontera debe satisfacer la ecuación diferencial y las condiciones a la frontera. En ocasiones, es necesario imponer incluso restricciones adicionales a la solución para garantizar que cumplan la física del problema deseado. Con estos argumentos no se pretende demeritar el uso de software comercial, sino más bien fomentar su uso adecuado.

Para responder a la segunda pregunta planteada arriba es necesario comprender que las soluciones analíticas y numéricas no son excluyentes unas de las otras, sino complementarias. En cuanto más información se tenga acerca del comportamiento de una solución, se podrán llevar a cabo soluciones

⁷Además de servir como lenguaje de programación e interfaz de sistemas físicos, es ampliamente usado en el procesamiento digital de imágenes y en la solución de sistemas de ecuaciones matriciales.

⁸Software especializado en la simulación y diseño de procesos.

⁹Software especializado en la solución numérica de ecuaciones diferenciales tanto ordinarias como parciales.

numéricas más eficientes. Más aún, en la toma de decisiones entre distintos sistemas (donde el número de alternativas puede llegar a ser del orden de miles o millones), es muy conveniente utilizar soluciones analíticas aproximadas que ayuden a llevar a cabo los primeros procesos de eliminación. Ciertamente, cuando sólo queda un número reducido de alternativas (tres o cinco), pueden utilizarse soluciones numéricas sofisticadas para asegurar que la opción que se tome es la más conveniente. Este proceso de sofisticación y discriminación de alternativas es ampliamente usado en optimización de procesos (Edgar y col., 2001).

4.6.1. El método de diferencias finitas

Al igual que en el caso de las soluciones analíticas, el material que se presenta en esta sección es meramente introductorio, el lector interesado en un conocimiento más profundo se le recomienda el texto de Smith (2004). Para abordar el método de diferencias finitas es conveniente recordar que la solución del problema tendrá lugar en un dominio discreto, al contrario de las soluciones analíticas donde el dominio de solución es continuo. Por ejemplo, suponga que el espacio de la solución está definido en el intervalo $x \in [a, b]$, entonces debe dividirse el dominio en N puntos discretos. A cada punto le corresponderá un valor de x_i , donde $i = 1, \dots, N$. Si los puntos están igualmente espaciados puede definirse al espaciamiento entre puntos como sigue

$$\Delta x = \frac{b - a}{N - 1} \quad (4.6-1)$$

Note que la relación anterior surge de fijar $x_1 = a$ y $x_N = b$. Esto quiere decir que puede utilizarse x_i en lugar de b e i en lugar de N en la ecuación anterior, para obtener

$$x_i = a + \Delta x (i - 1) \quad (4.6-2)$$

Con esta expresión se pueden calcular todos los valores de la variable discreta x_i .

El método de diferencias finitas parte de aproximar de manera discreta las derivadas en una ecuación diferencial. Para ello, se comienza con las siguientes expansiones en series de Taylor de una función f alrededor de un punto x ,

$$f(x + \Delta x) = f(x) + \Delta x \left. \frac{df}{dx} \right|_x + \frac{\Delta x^2}{2} \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_x + O(\Delta x^3) \quad (4.6-3a)$$

$$f(x - \Delta x) = f(x) - \Delta x \left. \frac{df}{dx} \right|_x + \frac{\Delta x^2}{2} \left. \frac{d^2f}{dx^2} \right|_x + \mathbf{O}(\Delta x^3) \quad (4.6-3b)$$

Si se desprecian los términos de segundo orden en adelante, se obtienen las fórmulas de diferenciación *hacia adelante* y *hacia atrás* para la primera derivada de la función,

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} \quad (4.6-4a)$$

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x} \quad (4.6-4b)$$

donde se adoptó la notación, $f(x - \Delta x) \rightarrow f_{i-1}$, $f(x) \rightarrow f_i$ y $f(x + \Delta x) \rightarrow f_{i+1}$. Ambas fórmulas tienen un error de aproximación de orden Δx .

Otra fórmula para obtener esta derivada resulta de restar la Ec. (4.6-3b) a la Ec. (4.6-3a) y se conoce como *derivada central*,

$$\boxed{\left. \frac{df}{dx} \right|_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x}} \quad (4.6-5)$$

la cual tiene un orden de error de aproximación de Δx^2 . Al tener tres expresiones para calcular la misma cantidad, es natural preguntar cuándo se debe usar cada expresión. A primera impresión, parecería que la mejor opción es la derivada central pues involucra un menor error de aproximación. Sin embargo, su aplicación no siempre es posible (ver problemas 4.9 y 4.10).

Para deducir la fórmula de aproximación de una segunda derivada se suman las ecs. (4.6-3a) y (4.6-3b), para obtener:

$$\boxed{\left. \frac{d^2f}{dx^2} \right|_i = \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{\Delta x^2}} \quad (4.6-6)$$

la cual tiene un orden de aproximación de Δx^2 .

Retomando el modelo en estado estacionario para predecir la temperatura dentro de una cabeza humana con una fuente de generación lineal, la forma adimensional de este problema está dada por las siguientes expresiones:

$$\frac{d^2\Theta}{d\xi^2} + \frac{2}{\xi} \frac{d\Theta}{d\xi} + \Phi^2 (1 - \Theta) = 0, \quad \forall \xi \in (0, 1) \quad (4.6-7a)$$

$$\text{En } \xi = 0, \quad \frac{d\Theta}{d\xi} = 0 \quad (4.6-7b)$$

$$\text{En } \xi = 1, \quad -\frac{d\Theta}{d\xi} = Bi (\Theta - \Theta_a) \quad (4.6-7c)$$

Note que la Ec. (4.6-7b) es equivalente a la Ec. (4.5-10b) dada la simetría del sistema (máxima 5) (ver Problema 4.11).

Para escribir este problema en una forma discreta, se debe evaluar cada término en un nodo en particular, es decir

$$\left. \frac{d^2\Theta}{d\xi^2} \right|_i + \frac{2}{\xi_i} \left. \frac{d\Theta}{d\xi} \right|_i + \Phi^2 (1 - \Theta|_i) = 0, \quad \forall i \in [2, N - 1] \quad (4.6-8)$$

Usando las fórmulas dadas en las ecs. (4.6-5) y (4.6-6) en la Ec. (4.6-8) resulta el siguiente sistema de ecuaciones algebraicas,

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{\Delta\xi}{\xi_i}\right) \Theta_{i-1} - (2 + \Phi^2 \Delta\xi^2) \Theta_i + \left(1 + \frac{\Delta\xi}{\xi_i}\right) \Theta_{i+1} \\ = -\Phi^2 \Delta\xi^2, \quad \forall i \in [2, N - 1] \end{aligned} \quad (4.6-9)$$

La forma discreta de las condiciones a la frontera es,

$$\text{En } i = 1, \quad \Theta_2 - \Theta_1 = 0 \quad (4.6-10a)$$

$$-\Theta_{N-1} + (1 + Bi\Delta\xi) \Theta_N = Bi\Delta\xi \Theta_a \quad (4.6-10b)$$

De esta forma, se ha conseguido transformar el problema original de valor a la frontera a un sistema de N ecuaciones algebraicas con N incógnitas, el cual puede escribirse en forma simplificada como sigue:

$$\begin{aligned} i = 1, \quad B_1 \Theta_1 + C_1 \Theta_2 = D_1 \\ i = 2, \dots, N - 1, \quad A_i \Theta_{i-1} + B_i \Theta_i + C_i \Theta_{i+1} = D_i \\ i = N, \quad A_N \Theta_{N-1} + B_N \Theta_N = D_N \end{aligned} \quad (4.6-11)$$

donde, por conveniencia, se han usado las siguientes definiciones

$$\begin{aligned}
 B_1 &= -1, C_1 = 1, D_1 = 0 \\
 A_i &= 1 - \frac{\Delta\xi}{\xi_i}, B_i = -2 - \Phi^2 \Delta\xi^2, C_i = 1 + \frac{\Delta\xi}{\xi_i}, \\
 D_i &= -\Phi^2 \Delta\xi^2, \quad i = 2, \dots, N - 1 \\
 A_N &= -1, B_N = 1 + B_i \Delta\xi, D_N = B_i \Delta\xi \Theta_u
 \end{aligned} \tag{4.6-12}$$

El tamaño del sistema de ecuaciones depende directamente del parámetro N . Para resolver este sistema se puede recurrir a alguno de los métodos mencionados en la Sección 4.3. Sin embargo, al analizar la matriz de coeficientes se observa que se puede identificar una diagonal principal (compuesta por todos los coeficientes B) y dos diagonales arriba y debajo de ésta (coeficientes C y A , respectivamente) y el resto son ceros. A este tipo de matrices se les conoce como tridiagonales y su solución es más sencilla que la de matrices completas (Smith, 2004). Existen algoritmos numéricos eficientes para resolver este tipo de matrices con el algoritmo de Thomas. Brevemente, los pasos de este algoritmo son los siguientes (Ochoa-Tapia, 2005):

- 1 Calcule los siguientes coeficientes a partir de la información de la primera fila de la matriz de coeficientes:

$$w_1 = 1/B_1, \quad b_1 = w_1 C_1, \quad g_1 = w_1 D_1$$

- 2 Para $i = 2$ hasta $N - 1$ calcular los siguientes coeficientes:

$$w_i = \frac{1}{B_i - A_i b_{i-1}}, \quad b_i = w_i C_i, \quad g_i = w_i (D_i - A_i g_{i-1})$$

- 3 Calcular el último valor de la solución mediante la siguiente expresión:

$$\Theta_N = g_N = \frac{D_N - A_N g_{N-1}}{B_N - A_N b_{N-1}}$$

- 4 Por último, calcular el resto de los valores de la solución yendo del penúltimo valor hasta el primero, es decir, de $i = N - 1$ hasta $i = 1$, usando:

$$\Theta_i = g_i - b_i U_{i+1}$$

En el Apéndice B se proporciona el listado de un programa en Matlab que utiliza este algoritmo para resolver el problema en cuestión. En la Fig. 4.6-1 se comparan las predicciones de las soluciones analítica y numérica para diferentes números de nodos. Como era de esperarse, al incrementar el número de nodos, la solución numérica se acerca a la solución analítica. Esto se atribuye a que un incremento en N implica una disminución del $\Delta\xi$ de acuerdo a la Ec. (4.6-1), lo cual a su vez se traduce en un menor error de aproximación de las derivadas.

El método de diferencias finitas puede utilizarse para resolver una amplia variedad de problemas de valor inicial y a la frontera. Una versión más sofisticada del método de diferencias finitas es el método de elemento finito, con el cual se pueden resolver problemas con geometrías mucho más complicadas que con diferencias finitas (Becker *y col.*, 1981). De hecho, el software comercial Comsol Multiphysics utiliza esta técnica para resolver los distintos módulos que tiene programados.

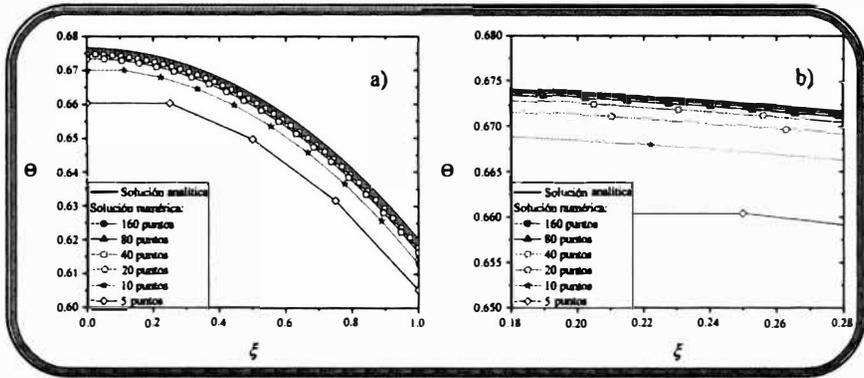


Figura 4.6-1: Perfiles de temperatura obtenidos con las soluciones analítica y numérica: a) en todo el dominio y b) acercamiento en una porción. Los parámetros del modelo fueron $\Phi = Bi = 1$ y $\Theta_a = 0.5$.

4.6.2. Solución del modelo no lineal de transferencia de calor en una cabeza humana

Retomando el problema de transferencia de calor en una cabeza humana, hasta este punto se ha resuelto únicamente el problema lineal, por lo que es momento de comparar las soluciones de los modelos lineal y no lineal. Para ello, se resolvió el siguiente problema de valor inicial y a la frontera con Comsol Multiphysics 4.3:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial \Theta}{\partial \xi} \right) + \Phi^2 e^{-\Theta}, \quad \forall \xi \in (0, 1), \tau > 0 \quad (4.6-13a)$$

$$\text{La temperatura está definida en } 0 \leq \xi \leq 1, \forall \tau \quad (4.6-13b)$$

$$\text{En } \xi = 1, \quad -\frac{\partial \Theta}{\partial \xi} = Bi (\Theta - \Theta_a), \quad \forall \tau \quad (4.6-13c)$$

$$\text{Cuando } \tau = 0, \quad \Theta = \Theta_0 \quad (4.6-13d)$$

Los resultados se presentan en la Fig. 4.6-2, donde se puede apreciar que la solución del modelo lineal sólo es adecuada cuando la tasa de generación de

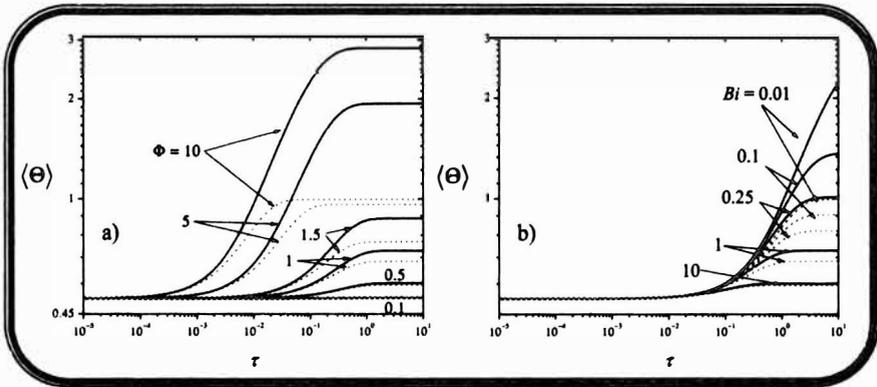


Figura 4.6-2: Comparación de las predicciones de la evolución del promedio de la temperatura utilizando el modelo de Anderson y Arthurs (1981) (línea continua) y de Gray (1980) (línea discontinua) a) como función de Φ fijando $Bi = 1$ y b) como función de Bi fijando $\Phi = 1$. En todos los cálculos se tomó $\Theta_a = 0.5$.

calor no es demasiado alta, es decir, para valores de $\Phi < 1$. Por otro lado, si la velocidad de disipación de calor en la superficie sobrepasa a la velocidad de generación, esto es, a valores elevados del número de Biot ($Bi > 10$), los efectos de la no linealidad de la fuente no son tan apreciables. Por otro lado, es interesante notar que a tiempos cortos¹⁰ el efecto de la no linealidad de la fuente no es tan apreciable debido a que el transporte está más bien regido por el efecto de la condición inicial.

Como se mencionó anteriormente, el método de elemento finito permite resolver problemas en geometrías complicadas; entonces como última parte de este análisis se resolverá el problema con fuente no lineal en el esquema de la cabeza humana mostrado en la Fig. 4.6-3. La longitud característica más larga de la figura geométrica en esta figura es su alto. Para ser consistentes con el análisis realizado en la esfera¹¹, se utilizó la mitad de esta longitud para

¹⁰Es decir, a valores de τ antes de que la solución presente un rápido crecimiento. Note que este rango de tiempos cambia con Φ , por ejemplo para $\Phi = 1$, estos valores corresponden a $\tau < 10^{-1}$

¹¹Donde se usó el radio como longitud característica para adimensionar la posición.

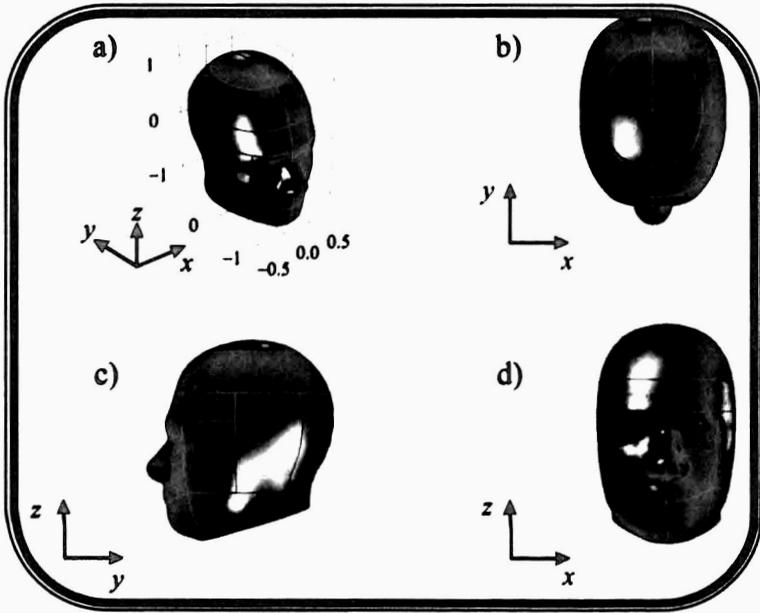


Figura 4.6-3: Vistas tri- y bidimensionales del esquema empleado para representar una cabeza humana realista.

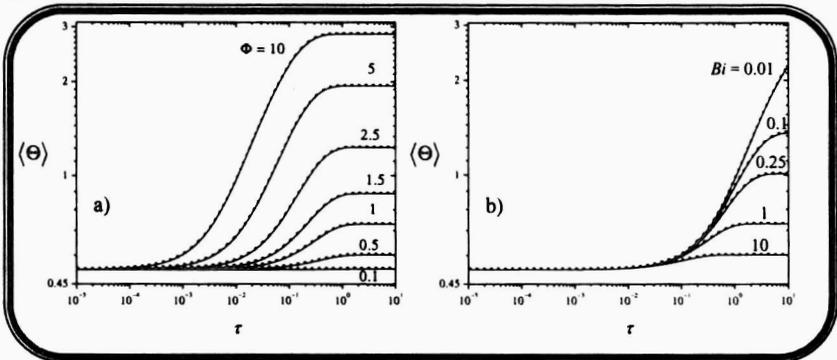


Figura 4.6-4: Perfiles de temperatura en estado estacionario tomando como fuente a) $\Phi^2 e^{-\Theta}$, b) $\Phi^2 x^2 e^{-\Theta}$, c) $\Phi^2 (x^2 + y^2) e^{-\Theta}$, d) $\Phi^2 e^{-\Theta} \ln(x^2 + y^2 + z^2)$. Los parámetros utilizados fueron $\Phi = 1$. En todos los cálculos se tomó $\Theta_a = 0.5$.

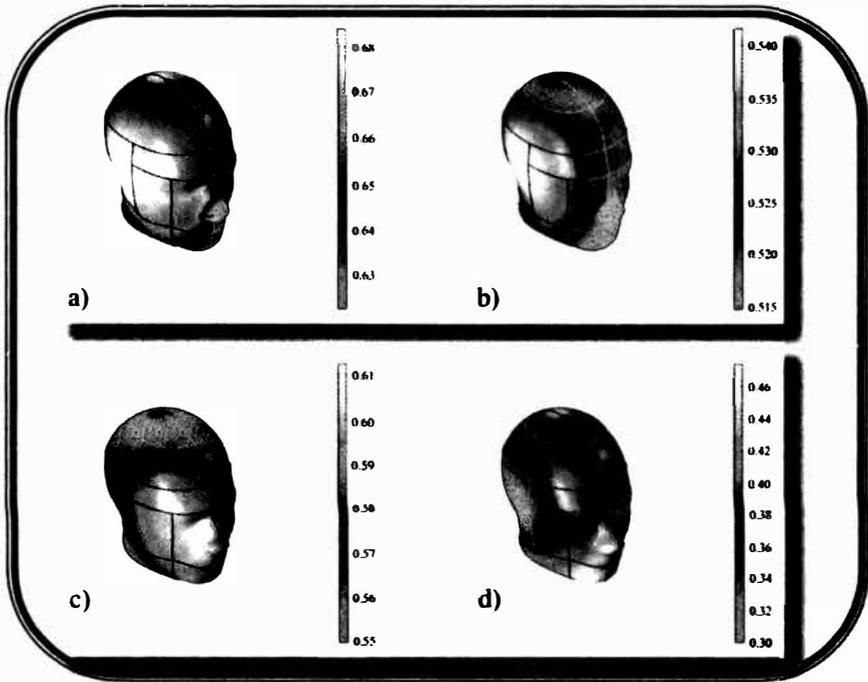


Figura 4.6-5: Comparación de las predicciones de la evolución del promedio de la temperatura utilizando una geometría realista (línea coninua) y una geometría esférica (línea punteada) utilizando el modelo de generación de calor de Anderson y Arthurs (1981) a) como función de Φ fijando $Bi = 1$ y b) como función de Bi fijando $\Phi = 1$. En todos los cálculos se tomó $\Theta_a = 0.5$.

adimensionar las tres direcciones. Los resultados de la evolución temporal de la temperatura promedio se presentan en la Fig. 4.6-4, donde además se incluyen las predicciones correspondientes a la geometría esférica.

Como puede notarse, los resultados de ambos modelos son prácticamente los mismos para los rangos de parámetros estudiados. Este resultado muestra que, para las condiciones consideradas en este estudio, es razonable representar la geometría de una cabeza humana como una esfera. Lo anterior no cierra la posibilidad de que existan casos donde la geometría juegue un papel más importante en la solución del problema. En la Fig. 4.6-5, se muestran los campos de temperatura en estado estacionario utilizando diversas fuentes. En la Fig. 4.6-5a) se observa que usando el modelo de Anderson y Arthurs (1981) la temperatura está distribuida de una manera prácticamente uniforme. Es interesante notar que, si se hace una pequeña modificación, como es multiplicar a la fuente por la posición adimensional x^2 , se consigue que exista una zona más caliente de temperatura situada en las regiones laterales (Fig. 4.6-5b) y su caso inverso se muestra en la Fig. 4.6-5d). O bien, es posible forzar a que la zona de alta temperatura se encuentre cerca del rostro, como se muestra en la Fig. 4.6-5c). En estos casos, es de esperarse que la comparación con una geometría esférica no sea tan cercana como en la Fig. 4.6-4.

4.7. Ecuaciones en diferencias

En varias aplicaciones de modelado es necesario lidiar con variables que toman valores discretos. Por ejemplo, cuando se toman mediciones experimentales de alguna variable de interés en intervalos determinados de tiempo. Para estudiar este tipo de modelos deterministas discretos, no se utilizan ecuaciones diferenciales, sino las *ecuaciones en diferencias*. Este tipo de ecuaciones se aplican en campos como la estadística, economía, ingeniería, entre muchos otros.

Para entender mejor a este tipo de ecuaciones, conviene analizar el siguiente ejemplo, el cual fue planteado originalmente por Leonardo Pisano en 1202 (ver, Sigler, 2003): *Una especie dada de conejos tarda dos meses en madurar y produce un nuevo par cada mes sucesivamente*. Suponiendo que el día del nacimiento de las nuevas crías se da el último día del segundo mes de vida de sus padres y comenzando con un par de conejos con un mes de edad en el mes 0, ¿Cuántos conejos habrá después de un año?

dos meses anteriores. Más aún, los números de pares de conejos generados en cada mes corresponden a la famosa secuencia Fibonacci¹²

$$0, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, \dots$$

la cual aparece en varios sistemas naturales y además se utiliza en informática, en matemáticas aplicadas, en la teoría de juegos, entre otras. Una regla de sucesión, como la secuencia Fibonacci, que define a los elementos de una secuencia por medio de una fórmula que involucra a algún número fijo (en este caso el número 2) de elementos predecesores, se le conoce como *relación de recurrencia* (Cull y col., 2005). De esta forma, si se denota a la secuencia como una función f , se tiene lo siguiente

$$f(0) = 0; \quad f(1) = 1 \tag{4.7-1a}$$

$$f(n + 2) = f(n + 1) + f(n) \tag{4.7-1b}$$

En este caso, los valores $f(0)$ y $f(1)$ son las condiciones iniciales y la fórmula de recurrencia es la ecuación (4.7-1b). Usando esta fórmula se tiene entonces que en el mes cero ($n = 0$), $f(2) = f(1) + f(0) = 1$ y para el mes uno ($n = 1$), $f(3) = f(2) + f(1) = 3$ y así sucesivamente; de esta forma se puede deducir que al cabo de doce meses habrá 377 pares de conejos.

Con base a lo anterior, se le llama ecuación en diferencias a una expresión del tipo:

$$F(y_{t+n}, y_{t+n-1}, y_{t+n-2}, \dots, y_{t+1}, y_t, t) = 0 \tag{4.7-2}$$

donde la variable independiente t representa el número de generaciones que han transcurrido desde una determinada condición inicial y y_t es un valor discreto de t . De esta forma, una solución de la ecuación de diferencias, es toda sucesión y que la satisfaga. Para tener más clara esta definición, se recurre al siguiente ejemplo: Suponga que cuando se creó una nueva licenciatura ingresaron 100 alumnos locales y que cada año se duplica el número de alumnos locales y además se incorporan 10 alumnos foráneos. Se desea determinar la ecuación que describe la evolución del ingreso a la licenciatura.

Para resolver este problema, se plantea primeramente la condición inicial:

$$y(0) = 100 \tag{4.7-3}$$

¹²A Leonardo Pisano también se le conoce como Fibonacci.

Denotando por y_t al número de alumnos que ingresaron en una determinada generación y por y_{t-1} a los alumnos locales que ingresaron en la generación anterior, se puede deducir la siguiente fórmula de recurrencia a partir del planteamiento del problema:

$$y_t = 2y_{t-1} + 10 \quad (4.7-4)$$

De esta forma, se obtienen los siguiente resultados:

$$\begin{aligned} y_1 &= 2(100) + 10 \\ y_2 &= 2[2(100) + 10] + 10 = 2^2(100) + 2(10) + 10 \\ y_3 &= 2^3(100) + 2^2(10) + 2(10) + 10 \\ y_4 &= 2^4(100) + 2^3(10) + 2^2(10) + 2(10) + 10 \end{aligned} \quad (4.7-5)$$

los cuales pueden resumirse en la siguiente expresión:

$$y_t = 2^t(100) + 2^{t-1}(10) + 2^{t-2}(10) + \dots + 2(10) + 10 \quad (4.7-6)$$

O bien, después de factorizar,

$$y_t = 2^t(100) + (2^{t-1} + 2^{t-2} + \dots + 2^1 + 2^0)(10) \quad (4.7-7)$$

A partir de la Ec. (4.P-23) deducida en el Problema 4.13, resulta que

$$2^{t-1} + 2^{t-2} + \dots + 2^1 + 2^0 = 2^t - 1 \quad (4.7-8)$$

Sustituyendo este resultado en la Ec. (4.7-7) se obtiene finalmente

$$y_t = 2^t(100) + (2^t - 1)10 = 2^t(110) - 10 \quad (4.7-9)$$

la cual es la solución del problema. Note que la expresión anterior, a diferencia de la dada en la Ec. (4.7-4), no requiere conocer toda la historia de las generaciones pasadas para proporcionar el resultado en un tiempo dado.

Al igual que en el caso de las ecuaciones diferenciales, pueden plantearse problemas de ecuaciones en diferencias de orden dos y superior o inclusive se puede tener más de una variable independiente. Al lector interesado en profundizar acerca de este tema se le recomiendan textos como los de Kelley y Peterson (2001), Cull y col. (2005) y Elaydi (2005).

4.8. Solución y análisis de ejemplos de aplicación

Con los desarrollos anteriores sobre soluciones analíticas y numéricas, se retomarán en esta sección el resto de los ejemplos de aplicación propuestos en la Sección 3.5. En cada caso se incluirá tanto la solución (analítica o numérica) del modelo así como una breve discusión y análisis de los resultados.

El análisis de la solución es, probablemente, el último paso que se debe cumplir antes de contrastar los resultados y conclusiones obtenidas con el resto de la comunidad científica o bien, regresar a alguno(s) de los pasos anteriores del proceso de modelado. Para ayudar un poco en esta labor que, al igual que el planteamiento del modelo, no puede ser generalizable, Basmadjian y Farnood (2007) sugieren considerar algunas de las siguientes cuestiones para ayudar en este proceso de análisis, las cuales van de la mano con algunas de las máximas presentadas en el capítulo anterior:

- De acuerdo a los parámetros definidos en el planteamiento del problema, ¿es el orden de magnitud de los resultados “razonable” o es sorprendentemente alto o bajo? Este es un punto muy sutil y se debe por tanto ser cuidadoso y prudente antes de descartar un resultado, dado que en ocasiones una comprensión incompleta del problema hace que se consideren inaceptables algunos resultados, aunque en realidad sean correctos. Y el otro lado de la moneda también es riesgoso, el hecho de haber dedicado una considerable cantidad de tiempo y esfuerzo en el planteamiento y solución del modelo no garantiza que los resultados sean correctos, ni que su interpretación sea adecuada.
- ¿Cuál es la respuesta del sistema a valores extremadamente grandes o pequeños de las variables o parámetros?¹³ La respuesta a esta pregunta debe tener relación con el análisis que se hizo previo a la solución del modelo (ver máximas 7 y 8).

¹³Nota: Para resolver esta pregunta, anteriormente se debió haber hecho un análisis de orden de magnitud de las variables del sistema, de tal manera que se tenga una idea clara de a qué se refieren adjetivos como “grande” o “pequeño” cuando se aplican a las variables y/o parámetros del modelo.

- ¿Es la solución altamente sensible a cambios pequeños de las variables o parámetros del modelo?
- ¿Muestra la solución valores extremos (máximos y/o mínimos) adicionales a los esperados en el planteamiento del problema?
- De ser posible, determine qué tan buena o mala¹⁴ es la comparación de la solución del modelo con resultados experimentales. Dichos resultados pueden ser tomados de la literatura o bien de llevar a cabo directamente los experimentos; en cualquier caso no se deben olvidar las suposiciones y restricciones del modelo que determinan sus límites de aplicabilidad.

4.8.1. Penetración de un derrame de petróleo en el subsuelo

El modelo planteado en la Sección 3.5.2 consiste en la siguiente ecuación diferencial ordinaria

$$\frac{dz}{dt} = \frac{K\rho g}{\varepsilon\mu} \left[\frac{h_0 + (1 - \varepsilon)z}{z} \right] \quad (4.8-1a)$$

donde z representa la distancia recorrida por el derrame en un tiempo t , mientras que los coeficientes K , ρ , g , μ , ε y h_0 denotan la permeabilidad [m^2], densidad [kg/m^3], gravedad [m/s^2], viscosidad del petróleo [kg/ms], porosidad del subsuelo y altura inicial del derrame, respectivamente. Note que el producto $K\rho g/\varepsilon\mu$ tiene unidades de m/s y se conoce como la conductividad hidráulica K_H (Bear y Cheng, 2010). La Ec. (4.8-1a) está sujeta a la siguiente condición inicial

$$\text{Cuando } t = 0, \quad z = 0 \quad (4.8-1b)$$

Para resolver la ecuación diferencial, es conveniente escribirla antes en su forma adimensional (máxima 3), para ello se definen las siguientes variables

$$\zeta = \frac{z}{h_0}; \quad \tau = \frac{tK_H}{h_0} \quad (4.8-2)$$

Haciendo los cambios de variables correspondientes, la versión adimensional del modelo es la siguiente (ver Problema 4.14)

¹⁴En términos de porcentaje de error.

$$\frac{d\zeta}{d\tau} = \frac{1 + (1 - \varepsilon)\zeta}{\zeta} \quad (4.8-3a)$$

$$\text{Cuando } \tau = 0, \zeta = 0 \quad (4.8-3b)$$

Cabe destacar que esta versión del problema es conveniente pues el único parámetro a especificar es la porosidad, ε , cuyos valores están comprendidos entre cero y uno, mientras que en la versión dimensional del problema es necesario especificar seis parámetros (K , ρ , g , μ , ε y h_0). Por supuesto, si fuese necesario obtener valores dimensionales de la solución del modelo puede recurrirse a las definiciones de la Ec. (4.8-2) para llevar a cabo el proceso inverso (ver Problema 4.15).

Para resolver la ecuación diferencial (4.8-3a) puede utilizarse el método de variables separables, el cual permite llegar a la siguiente expresión (Problema 4.17)

$$\tau = \frac{\zeta}{1 - \varepsilon} - \frac{\ln[1 + (1 - \varepsilon)\zeta]}{(1 - \varepsilon)^2} \quad (4.8-4)$$

Note que esta es una expresión implícita pues no es posible despejar de manera analítica a ζ en términos de τ ; sin embargo, es posible obtener soluciones analíticas aproximadas (máxima 6) (Problema 4.18). Alternativamente, es posible resolver la Ec. (4.8-4) de manera numérica. Para resolver este tipo de ecuaciones existen métodos como son: gráfico, bisección, regula-falsi, Newton-Raphson, entre otros (Burden y Faires, 2011). De ellos, uno de los métodos que proporciona una rápida convergencia es el método de Newton-Raphson, el cual se explica a continuación:

En el caso de la Ec. (4.8-4), se tiene interés en determinar los valores de ζ para valores de τ ingresados por el usuario. Para ello es conveniente definir la siguiente función,

$$f(\zeta, \tau) = \frac{\zeta}{1 - \varepsilon} - \frac{\ln[1 + (1 - \varepsilon)\zeta]}{(1 - \varepsilon)^2} - \tau \quad (4.8-5)$$

Dado que se iterará en los valores de ζ , es conveniente considerar la siguiente expansión en series de Taylor de $f(\zeta, \tau)$ alrededor de un punto fijo ζ_n :

$$f(\zeta, \tau) = f(\zeta_n, \tau) + \left. \frac{df}{d\zeta} \right|_{\zeta=\zeta_n} (\zeta - \zeta_n) + \dots \quad (4.8-6)$$

Truncando la serie en el segundo término y evaluándola en un segundo punto $\zeta = \zeta_{n+1}$, se tiene

$$f(\zeta_{n+1}, \tau) = f(\zeta_n, \tau) + \left. \frac{df}{d\zeta} \right|_{\zeta=\zeta_n} (\zeta_{n+1} - \zeta_n) \quad (4.8-7)$$

Lo que se busca es que en este nuevo punto la función valga cero, pues así se satisface la Ec. (4.8-4). De esta forma, se obtiene la siguiente expresión para ζ_{n+1} ,

$$\zeta_{n+1} = \zeta_n - \frac{f(\zeta_n, \tau)}{\left. \frac{df}{d\zeta} \right|_{\zeta=\zeta_n}} \quad (4.8-8)$$

En este caso, se tiene, al derivar la Ec. (4.8-5) respecto a ζ ,

$$\left. \frac{df}{d\zeta} \right|_{\zeta=\zeta_n} = \frac{\zeta_n}{1 + (1 - \varepsilon)\zeta_n} \quad (4.8-9)$$

El algoritmo para utilizar este método es el siguiente:

- 1 Para un valor dado de τ proponga un valor de ζ_n .
- 2 Evalúe la función definida en la Ec. (4.8-5).
- 3 Si la función es igual a cero¹⁵ entonces se termina el método, pero si éste no es el caso se continúa.
- 4 En caso de continuar se calcula el valor de la derivada de la función mediante la Ec. (4.8-9).
- 5 Se utiliza la Ec. (4.8-8) para obtener un nuevo valor de prueba ζ_{n+1} .
- 6 Regresar al paso 2 hasta conseguir que en el paso 3 se detenga el método.

Se utilizó este método para resolver numéricamente la Ec. (4.8-4) utilizando una tolerancia de 1×10^{-8} como criterio de paro. En la Fig. 4.8-1 se muestran las predicciones de la altura de penetración del petróleo en el subsuelo como función del tiempo para cuatro valores de porosidad. Como

¹⁵En la práctica no se impone que la función deba ser cero, sino que su valor sea suficientemente pequeño, por ejemplo de 1×10^{-8}

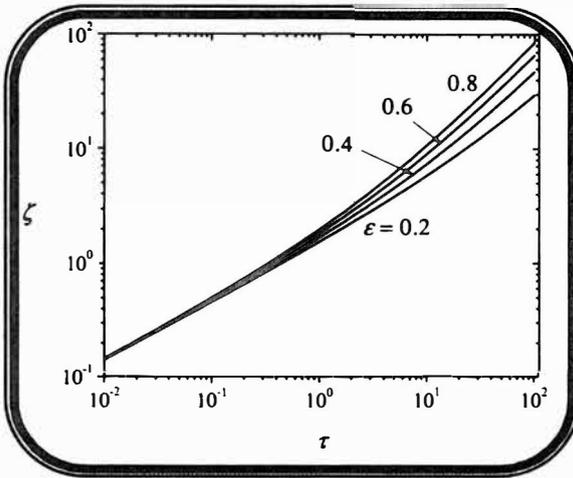


Figura 4.8-1: Evolución temporal de la profundidad de penetración como función del tiempo para diversos valores de porosidad del subsuelo.

puede notarse, a tiempos cortos ($\tau = 10^{-1}$), la influencia del tipo de subsuelo (a través de la porosidad) no es apreciable. De hecho, para estos tiempos la distancia recorrida por el derrame de petróleo es inferior a la altura inicial del derrame pues $\zeta < 1$. Por otro lado, al incrementarse el tiempo puede notarse que si el subsuelo es más poroso ($\epsilon = 0.8$), el petróleo penetra más rápidamente que en el caso en que el medio poroso es poco permeable ($\epsilon = 0.2$). De hecho, al aumentar la porosidad, los resultados tienden a depender de manera lineal con el tiempo adimensional.

A pesar del sentido físico que tienen los resultados anteriores, es importante listar algunas de las limitaciones más relevantes del modelo:

- 1 La conductividad hidráulica no cambia con la posición ni el tiempo. Esto implica que el subsuelo es homogéneo.
- 2 El avance del derrame se da primordialmente en una sola dirección. En la práctica el transporte en las otras dos direcciones puede significar un retraso considerable para el avance en la dirección vertical.

3 No se consideró la existencia de poros incomunicados ni zonas muertas al transporte (Bear y Cheng, 2010).

4 No existen condiciones para detener el frente de avance del petróleo.

De las limitantes anteriores se puede deducir que el modelo obtenido sólo puede ser confiable a etapas tempranas del transporte, cuando el desplazamiento del derrame es probablemente uno o dos órdenes de magnitud mayor que la altura inicial. Sin embargo, lo anterior no debe concebirse como un argumento para desechar este modelo. De hecho, en la práctica se tiene un especial interés por predecir el transporte de un derrame en las etapas tempranas del proceso (Bear y Cheng, 2010) (problemas 4.15 y 4.16).

4.8.2. Destilación diferencial

En la Sección 3.5.3 se dedujo la siguiente ecuación diferencial,

$$\frac{dx_L}{(y_D - x_L)} = \frac{dL}{L} \quad (4.8-10)$$

la cual, al ser integrada definitivamente da lugar a la ecuación de Rayleigh

$$\int_{x_0}^x \frac{d\xi}{(y - \xi)} = \ln \left(\frac{L}{L_0} \right) \quad (4.8-11)$$

donde las composiciones en equilibrio son x y y , mientras que L_0 y L representan la cantidad de líquido al inicio y al final en la caldera. En la Sección 3.5.3 se dedujeron expresiones para tres casos particulares en los que se dan expresiones analíticas para las relaciones de equilibrio líquido-vapor. En esta sección se aplicará una de estas expresiones en la solución de una operación particular de destilación y además se abordará otro problema en donde no existe una expresión analítica que represente los datos experimentales y que lleva a una solución numérica de la Ec. (4.8-11). Los datos para el planteamiento de estos ejercicios se tomaron de Ocón-García y Tojo-Barreiro (1971).

Ejemplo 1

Una mezcla benceno-tolueno de composición 0.4 en fracción mol se somete a destilación diferencial. Si la destilación se interrumpe cuando se ha destilado el 65% de los moles iniciales, calcule la cantidad de benceno en el destilado expresada en porcentaje del benceno contenido en la carga inicial. *Nota:* Suponga que la volatilidad relativa es constante e igual a 2.5. Además se sabe que el componente más volátil es el benceno.

Solución:

Tomando como base de cálculo $L_0 = 100$ mol y dado que se detiene la operación cuando se han separado 65 moles, entonces $L = 35$ mol. De acuerdo a la Ec. (3.5-35), se tiene que,

$$\frac{100}{35} = \left[\frac{0.4}{x} \left(\frac{1-x}{1-0.4} \right)^{2.5} \right]^{\frac{1}{1.5}} \quad (4.8-12)$$

Al igual que en el caso de la Ec. (4.8-4), esta ecuación no puede resolverse de manera analítica para encontrar el valor de x . La solución numérica de la Ec. (4.8-12) se obtiene en el Problema 4.19, donde se encuentra que sólo existe una solución real, la cual es $x = 0.1806$. Por otro lado, la concentración del destilado se calcula (a partir de la definición de fracción mol y de balances de materia global y por componente en estado estacionario) como

$$y_D = \frac{L_0 x_0 - Lx}{L_0 - L} = \frac{40 - 35(0.18)}{65} = 0.52 \quad (4.8-13)$$

Y el porcentaje de benceno en el destilado en base a la cantidad inicial es

$$\frac{40 - 35(0.18)}{40} \times 100\% = 84.1\% \quad (4.8-14)$$

En otras palabras, a pesar de que la operación se detuvo cuando se destiló el 65% de los moles iniciales, se consiguió recuperar más del 80% del benceno contenido en la mezcla inicial. Más aún, la fracción molar del benceno en el líquido disminuyó más de la mitad. Sin embargo, en algunas operaciones puede requerirse que la composición del líquido tenga una concentración de

Tabla 4.6-1. Datos de equilibrio para una mezcla acetona-agua (tomados de Ocón-García y Tojo-Barreiro, 1971)

x	y	$1/(y - x)$	x	y	$1/(y - x)$
0.25	0.390	7.14285714	0.55	0.693	6.99300699
0.30	0.448	6.75675676	0.60	0.737	7.29927007
0.35	0.502	6.57894737	0.65	0.778	7.81250000
0.40	0.555	6.4516129	0.70	0.813	8.84955752
0.45	0.603	6.53594771	0.75	0.845	10.5263158
0.50	0.649	6.7114094			

benceno inferior al 10%. En el Problema 4.20 se propone someter el líquido residual a una segunda operación de destilación diferencial para averiguar si es posible conseguir este objetivo. Desde luego, la validez de este resultado está sujeta a las suposiciones involucradas en el modelo discutidas en el capítulo anterior.

Ejemplo 2

Una solución acuosa de ácido acético de composición 0.25 mol de ácido acético se somete a destilación diferencial a 1 atm hasta que la composición del líquido residual sea 0.75 en fracción mol de ácido acético. Dado que el agua es el componente más volátil, determine la cantidad de producto destilado y su composición global. Los datos de equilibrio para esta mezcla líquido vapor se muestran en la Tabla 4.6-1.

Solución:

Dado que no se cuenta ahora con una expresión analítica de la relación de equilibrio, se puede proceder al menos de dos maneras: 1) Encontrar una expresión analítica que represente los datos de la Tabla 4.6-1 o 2) Integrar numéricamente los datos de esta tabla para calcular el lado izquierdo de la Ec. (4.8-11). La primera opción puede llevarse a cabo utilizando el modelado

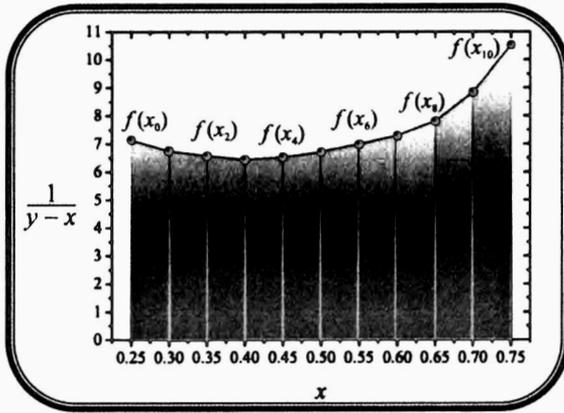


Figura 4.8-2: Trapecios para los datos de la Tabla 4.6-1.

observacional y se explora en el Problema 4.21. En los siguientes párrafos se seguirá la segunda opción. Para ello, se puede disponer de diversos métodos numéricos como son: la regla del trapecio, reglas de Simpson, cuadraturas Gaussianas, entre otros (Burden y Faires, 2011). De estos métodos, se utilizará la regla del trapecio para resolver este problema por la simplicidad que implica su aplicación.

La regla del trapecio consiste en aproximar los segmentos entre datos como líneas rectas (ver Fig. 4.8-2). Por ejemplo, para el segmento comprendido entre x_0 y x_1 se desea aproximar la siguiente integral

$$I = \int_{x=x_0}^{x=x_1} f(x) dx \tag{4.8-15}$$

Para ello, puede proponerse la siguiente ecuación lineal,

$$f(x) = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} (x - x_0) \tag{4.8-16}$$

Sustituyendo esta expresión en la Ec. (4.8-15) y llevando a cabo la integral

definida se obtiene el siguiente resultado

$$I_{1-0} = \underbrace{(x_1 - x_0)}_{\text{base}} \underbrace{\frac{f(x_0) + f(x_1)}{2}}_{\text{altura}} \quad (4.8-17)$$

Evidentemente, no es conveniente utilizar la misma función lineal para todo el intervalo comprendido entre x_0 y x_{10} . Sin embargo, es posible proponer ecuaciones lineales entre cada par de puntos y los resultados seguirán la forma dada en la Ec. (4.8-17). De esta forma, resulta la siguiente fórmula de integración (Problema 4.23)

$$I_{10-0} = \underbrace{(x_{10} - x_0)}_{\text{base}} \underbrace{\frac{f(x_0) + 2 \sum_{i=2}^{n-1} f(x_i) + f(x_{10})}{20}}_{\text{altura promedio}} \quad (4.8-18)$$

Utilizando esta fórmula se obtiene lo siguiente,

$$\int_x^{x_0} \frac{d\xi}{(y - \xi)} = 3.64 = \ln \left(\frac{L_0}{L} \right) \quad (4.8-19)$$

Tomando como base de cálculo $L_0 = 100$ mol resulta de la ecuación anterior que $L = 2.62$ mol. De esta forma, se puede calcular la composición del destilado como

$$y_D = \frac{100(0.75) - 2.62(0.25)}{100 - 2.62} = 0.76 \text{ (fracción de agua)} \quad (4.8-20)$$

Estos resultados deben analizarse cuidadosamente. Ciertamente, se ha invertido una determinada cantidad de energía para llevar a cabo la destilación de la mezcla ácido acético-agua. Sin embargo, el resultado de la operación discontinua lleva a un destilado que tiene prácticamente la misma composición que el líquido inicial¹⁶, por lo que puede deducirse que ésta no es la operación idónea para llevar a cabo la separación de esta mezcla. Para mejorar la separación se pueden incorporar operaciones de reflujo o bien utilizar otro tipo de destilación o incluso otro método de separación líquido-líquido (ver por ejemplo Ocón-García y Tojo-Barreiro, 1971; Treybal, 1980).

¹⁶El líquido inicial tenía 75 % de agua y el destilado tiene 76 % de agua.

4.8.3. Respuesta transitoria de un panel fotovoltaico

En la Sección 3.5.4 se dedujo el siguiente problema de valor inicial en su forma adimensional,

$$\frac{d\Theta}{d\tau} = -Bi^* (\Theta - \Theta_a) + S^* \quad (4.8-21a)$$

$$\text{Cuando } \tau = 0, \quad \Theta = 1 \quad (4.8-21b)$$

donde Θ y τ representan la temperatura y tiempo adimensionales, mientras que Bi^* es el número de Biot modificado con un valor de 708.7. Además, se dedujo la dependencia temporal de la temperatura ambiente adimensional, Θ_a , y la energía solar incidente adimensional, S^* de acuerdo a los siguientes polinomios,

$$\Theta_a = 0.978 + 0.00326\tau + 5.82026 \times 10^{-7}\tau^2 - 9.25617 \times 10^{-9}\tau^3 \quad (4.8-22a)$$

$$S^* = 1.65 \times 10^8 + 5.9 \times 10^5\tau - 2.1 \times 10^3\tau^2 + 1.82\tau^3 \quad (4.8-22b)$$

De estas expresiones es evidente que el producto $Bi^*\Theta_a$ es varios órdenes de magnitud inferior a S^* por lo que puede aceptarse que $Bi^*\Theta_a \ll S^*$ (máxima 11). De esta forma, la Ec. (4.8-21a) puede expresarse como sigue

$$\frac{d\Theta}{d\tau} + Bi^*\Theta = 1.65 \times 10^8 + 5.9 \times 10^5\tau - 2.1 \times 10^3\tau^2 + 1.82\tau^3 \quad (4.8-23)$$

Utilizando el método del factor integrante (Problema 4.7), la solución de esta ecuación, tomando en cuenta el orden de magnitud del número de Biot, es

$$\Theta = e^{-Bi^*\tau} + \frac{1}{Bi^*} \left[1.65 \times 10^8 \left(1 - e^{-Bi^*\tau} \right) + 5.9 \times 10^5\tau - 2.1 \times 10^3\tau^2 + 1.82\tau^3 \right] \quad (4.8-24)$$

De acuerdo a esta expresión, la temperatura adimensional debe crecer de manera exponencial con el tiempo desde un valor unitario hacia un valor aproximadamente constante. Al igual que en el caso discutido al inicio de este capítulo, el efecto de las pérdidas de calor hacia el ambiente (determinado por el número de Biot) debe apreciarse sólo a tiempos suficientemente largos. Las observaciones anteriores pueden corroborarse con los resultados presentados

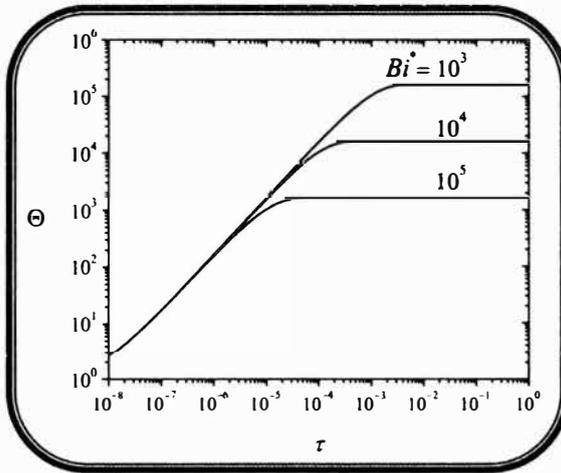


Figura 4.8-3: Evolución temporal de la temperatura adimensional de la superficie de un panel fotovoltaico para valores del número de Biot modificado cambiando en tres órdenes de magnitud.

en la Fig. 4.8-3. Como es de esperarse, conforme mejora el intercambio de calor con los alrededores (incremento en el número de Biot) la temperatura de la superficie del panel fotovoltaico disminuye. Debe recordarse que la definición del número de Biot ha sido modificada para incluir la razón de aspecto de la celda solar (ver Sección 3.5.4) y por tanto, cabe la posibilidad de considerar valores del número de Biot aún superiores a los considerados aquí. Más aún, en la práctica se previene alcanzar temperaturas tan elevadas como las reportadas en la Fig. 4.8-3 al incorporar sistemas de enfriamiento como lo reportan Harrison *y col.* (2004).

4.8.4. Modelos matemáticos del amor

En la Sección 3.5.5 se partió de modelos conservativos para representar una relación amorosa que se modela mediante las siguientes ecuaciones diferenciales ordinarias,

$$\frac{dR}{dt} = bJ - aR \tag{4.8-25a}$$

$$\frac{dJ}{dt} = cR - dJ \tag{4.8-25b}$$

donde R y J denotan el amor de Romeo y de Julieta, respectivamente; además, b representa la frecuencia con la que Julieta aporta amor a Romeo y a es la frecuencia con la que Romeo se ama a sí mismo. De la misma forma, c denota la frecuencia con la que Julieta recibe amor de Romeo y d la frecuencia con la que Julieta se ama a sí misma. Las ecs. (4.8-25) están sujetas al siguiente par de condiciones iniciales.

$$R(0) = 0.5 \tag{4.8-26a}$$

$$J(0) = 0 \tag{4.8-26b}$$

Siguiendo a Sprot (2004), como primeras evaluaciones conviene considerar el caso en que no hay pérdidas de amor o, de acuerdo a lo planteado arriba,

Tabla 4.6-2: Casos a analizar cuando $a = d = 0$.

Caso	b	c	Solución
a) Ambos aportan amor	1	1	$R(t) = 0.25e^{-t}(1 + e^{2t});$ $J(t) = 0.25e^{-t}(-1 + e^{2t})$
b) Ambos pierden amor	-1	-1	$R(t) = 0.25e^{-t}(1 + e^{2t});$ $J(t) = 0.25e^{-t}(1 - e^{2t})$
c) Romeo recibe amor y Julieta pierde amor	1	-1	$R(t) = 0.5 \cos(t);$ $J(t) = -0.25 \text{sen}(t)$
d) Romeo pierde amor y Julieta recibe amor	-1	1	$R(t) = 0.5 \cos(t);$ $J(t) = 0.5 \text{sen}(t)$

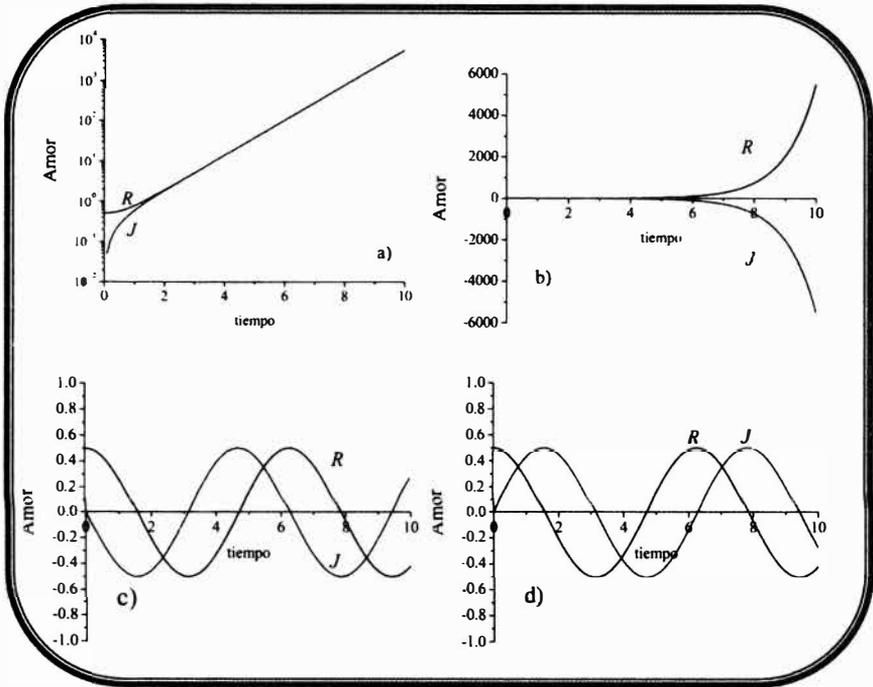


Figura 4.8-4: Evaluación de las soluciones presentadas en la Tabla 4.6-2.

ni Romeo ni Julieta sienten amor para sí mismos pero sí entre sí. Los cuatro casos a considerar se muestran en la Tabla 4.6-2, donde se incluye además la solución del sistema de ecuaciones. En la Fig. 4.8-4, se presentan las evaluaciones de las soluciones de la Tabla 4.6-2. Como se puede notar, si ambos aportan amor, la respuesta es que su amor mutuo se incrementará, por otro lado, si ambos retiran amor las soluciones divergirán. Por último si alguno de los dos aporta amor a la relación y el otro(a) retira en la misma proporción, la respuesta es oscilatoria, es decir es un constante sube y baja del amor mutuo.

Tabla 4.6-3: Casos a analizar cuando $a \neq 0$ y $d \neq 0$.

Caso	a	b	c	d
a) Ambos se aman a sí mismos el doble de lo que aman al otro(a).	1	0.5	0.5	1
b) Ambos aman al otro(a) el doble de lo que se aman a sí mismos.	0.5	1	1	0.5
c) Romeo recibe el doble del amor de Julieta de lo que él se ama a sí mismo pero Julieta recibe sólo la mitad del amor que ella siente por sí misma.	0.5	1	0.5	1
d) Romeo recibe la mitad del amor de Julieta de lo que él se ama a sí mismo mientras que Julieta se ama a sí misma la mitad del amor que recibe de Romeo	1	0.5	1	0.5

Por otro lado, cuando tanto Romeo como Julieta sienten amor propio ($a \neq 0$ y $d \neq 0$), se pueden presentar varias posibilidades de repartición de amor. Algunos ejemplos se muestran en la Tabla 4.6-3 y la evaluación de las soluciones resultantes se presenta en la Fig. 4.8-5. De acuerdo a los resultados se puede notar que, si ambos se aman a sí mismos más de lo que aman a su

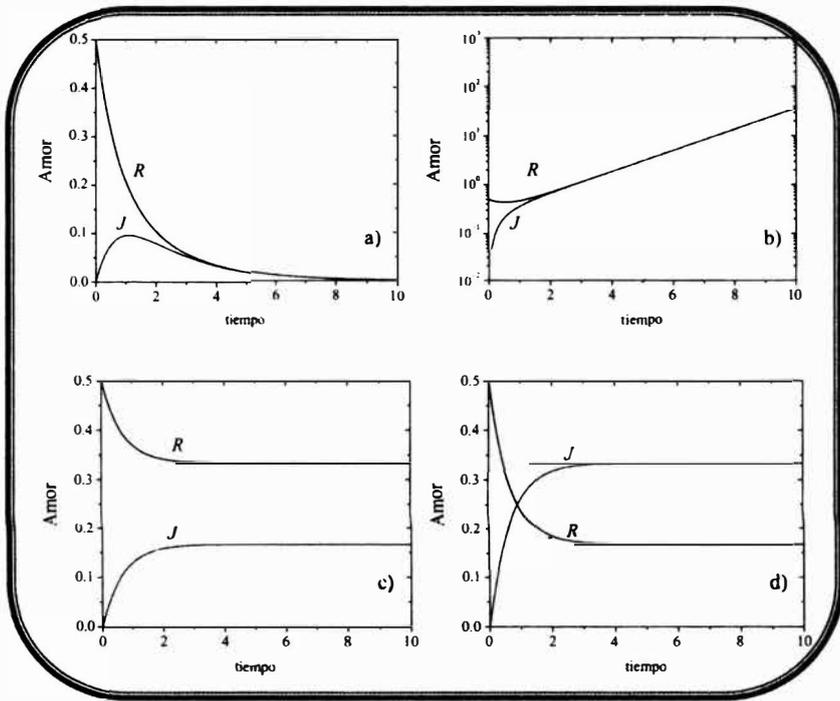


Figura 4.8-5: Evaluación de las soluciones presentadas en la Tabla 4.6-3.

pareja, eventualmente el amor de ambos llegará a cero, mientras que en el caso inverso su amor aumentará como en el caso a) de la Tabla 4.6-2. Por otro lado, si Romeo recibe el doble del amor de Julieta de lo que él se ama a sí mismo pero Julieta recibe sólo la mitad del amor que ella siente por sí misma, se llega eventualmente a un estado estacionario en el que el amor de Romeo por Julieta es mayor que el de Julieta por Romeo. Finalmente, si Romeo recibe la mitad del amor de Julieta de lo que él se ama a sí mismo mientras que Julieta se ama a sí misma la mitad del amor que recibe de Romeo, también se alcanza un estado estacionario pero en el amor de Julieta por Romeo es mayor que el amor de Romeo por Julieta.

Como se mencionó en el capítulo anterior, el propósito de este ejercicio es plantear y resolver un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que tengan una relación con un tema “fácilmente” manejable como el amor. Desde luego, este modelo es hipotético y está aún lejos de una representación realista de este proceso. Por lo que se exhorta al lector a desarrollar y experimentar modelos más sofisticados de este tema.

Como comentario final se deja la siguiente frase de Sprot (2004):

Love and happiness are wonderful, so is mathematics.

4.9. Resumen

Este capítulo estuvo dedicado a la solución y análisis de modelos matemáticos. Algunos de los puntos más relevantes discutidos aquí son los siguientes:

- 1 Se estableció la diferencia entre soluciones analíticas y numéricas y se discutió sobre las ventajas y desventajas de ambas. Se concluyó que, si el modelo a resolver así lo permite, las soluciones analítica y numérica son complementarias. Aunque esto no resta importancia a la necesidad de la comprobación experimental como se expuso en el Capítulo 2.
- 2 Entre las soluciones analíticas abordadas en este capítulo, de manera introductoria, se encuentran: solución de ecuaciones algebraicas, solución de ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales así como las ecuaciones en diferencias.
- 3 Entre las soluciones numéricas discutidas en este capítulo se incluyen: solución de ecuaciones algebraicas, solución de ecuaciones diferenciales ordinarias e integración numérica.
- 4 Para ilustrar estas soluciones se utilizaron los ejemplos de aplicación discutidos en el Capítulo 3 y, en cada caso, se acompañó la solución con su análisis y discusión.

Problemas

4.1 Resuelva, por algún método conocido por usted, el sistema de ecuaciones dado en la Ec. (4.3-2) y muestre que la solución es $x = 6$, $y = -2$.

4.2 Sin utilizar álgebra, decida si los siguientes sistemas de ecuaciones tienen solución única, un número infinito de soluciones o no tienen solución,

$$a) \begin{cases} 2x + 3y = 6 \\ 6x + 9y = 7 \end{cases}$$

$$b) \begin{cases} x + 1.5y = 3 \\ 2x + 3y = 6 \end{cases}$$

$$c) \begin{cases} 2x + 3y = 6 \\ 5x + 4y = 7 \end{cases}$$

4.3 Para cada una de las ecuaciones diferenciales siguientes, determine el orden de la ecuación diferencial e indique si es lineal o no lineal (α y β son constantes diferentes de cero):

$$a) x \frac{dy}{dx} + yx^2 = 0$$

$$b) \frac{dz}{dx} + \frac{zx}{\beta} = 0$$

$$c) \frac{d^2y}{dx^2} + \alpha y^2 = 0$$

$$d) \left(\frac{dy}{dx} + xy \right)^2 = 0$$

4.4 Para resolver la ecuación diferencial ordinaria dada en la Ec. (4.4-6), es conveniente rearrreglarla de la siguiente forma,

$$\frac{dy}{y} = a dt \tag{4.P-1}$$

Integre de manera indefinida esta expresión para obtener la siguiente solución general¹⁷

$$y = c_2 e^{at} \tag{4.P-2}$$

donde c_2 es una constante de integración. En base a la siguiente condición inicial,

$$\text{Cuando } t = 0, \quad y = y_0 \tag{4.P-3}$$

Muestre que la solución del problema está dada por la Ec. (4.4-9).

4.5 Considere las tres ecuaciones de conservación presentadas en el Capítulo 2 [ecs. (2.7-57)]. Demuestre que si el transporte de cantidad de movimiento, calor y masa se da en estado estacionario y en una sola dirección (x), dichas expresiones se reducen a ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden.

4.6 En este problema se busca deducir una restricción de escala que permita considerar despreciables las desviaciones de la temperatura respecto a su valor promedio en la superficie de la cabeza. Para ello, es necesario desarrollar la ecuación diferencial para las desviaciones de la temperatura. De acuerdo a la definición en la Ec. (4.4-15), esta expresión puede obtenerse al restar la siguiente expresión

$$\rho c_p \frac{d\langle T \rangle}{dt} + \left(\frac{3}{R} h + N \right) \langle T \rangle = \frac{3}{R} h \left(T_a - \tilde{T} \Big|_{r=R} \right) + \alpha \tag{4.P-4}$$

a la Ec. (4.4-1). El resultado debe ser

$$\rho c_p \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} = \frac{k}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \tilde{T}}{\partial r} \right) - N \tilde{T} + \frac{3}{R} h \left(\langle T \rangle + \tilde{T} \Big|_{r=R} - T_a \right) \tag{4.P-5}$$

Lleve a cabo un análisis de orden de magnitud de los términos de acumulación y difusión y demuestre que cuando se cumple la siguiente restricción temporal,

$$\frac{\rho c_p R^2}{k} \ll t \tag{4.P-6}$$

¹⁷Se le llama solución general pues está expresada en términos de una constante aún indeterminada, cuando se calcule el valor de ésta, se le llamará solución particular.

La ecuación diferencial se reduce a

$$\frac{k}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\tilde{T}}{dr} \right) - N\tilde{T} + \frac{3}{R} h \left(\langle T \rangle + \tilde{T} \Big|_{r=R} - T_a \right) = 0 \quad (4.P-7)$$

Utilice la descomposición de la temperatura [Ec. (4.4-15)] en la Ec. (3.5-2b) para mostrar que la condición de frontera para las desviaciones es

$$\text{En } r = R, \quad -k \frac{\partial \tilde{T}}{\partial r} = h \left(\langle T \rangle + \tilde{T} \Big|_{r=R} - T_a \right), \quad \forall t \quad (4.P-8)$$

Lleve a cabo un análisis de orden de magnitud en la condición de frontera y deduzca que

$$\tilde{T} \Big|_{r=R} = \mathbf{O} \left(\frac{\langle T \rangle - T_a}{Bi^{-1} + 1} \right) \quad (4.P-9)$$

donde el número de Biot está definido en la Ec. (4.4-25). ¿Para qué valores de este número adimensional es válido suponer que $\tilde{T} \Big|_{r=R} \ll \langle T \rangle$. ¿Cómo cambiaría esta condición si el análisis de orden de magnitud se hubiera llevado a cabo en la ecuación diferencial?, ¿Por qué es más adecuado llevarlo a cabo en la condición de frontera?

- 4.7 En el método del factor integrante, la atención se fija en el coeficiente que multiplica a la variable dependiente en la ecuación diferencial, γ , y se define un factor $\psi = \exp \left(\int \gamma d\tau \right)$. En el caso de la Ec. (4.4-24), demuestre que dicho factor es $\psi = e^{(3Bi + \Phi^2)\tau}$. Posteriormente, multiplique ambos lados de la Ec. (4.4-24) por el factor integrante y, a partir de la fórmula de la derivada del producto entre dos funciones, demuestre que resulta la siguiente expresión,

$$d \left[\langle \Theta \rangle e^{(3Bi + \Phi^2)\tau} \right] = [3Bi \Theta_a + \Phi^2] e^{(3Bi + \Phi^2)\tau} d\tau \quad (4.P-10)$$

Integre de manera indefinida ambos lados de la ecuación anterior para obtener

$$\langle \Theta \rangle = \frac{3Bi \Theta_a + \Phi^2}{3Bi + \Phi^2} + c_1 e^{-(3Bi + \Phi^2)\tau} \quad (4.P-11)$$

Por último, utilice la condición inicial para recuperar la Ec. (4.4-27).

- 4.8 Combine la Ec. (4.5-8) con la Ec. (4.5-6) para obtener la siguiente ecuación diferencial parcial

$$t_r \frac{\partial^2 c_A}{\partial t^2} + \frac{\partial c_A}{\partial t} = \mathcal{D}_\gamma \nabla^2 c_A \quad (4.P-12)$$

Clasifique esta ecuación en base a su orden, linealidad y estructura (parabólica, elíptica o hiperbólica). Deduzca la restricción de escala que permite reducir esta expresión a la forma resultante de utilizar la ley de Fick [Ec. (2.7-57c)].

- 4.9 Considere la siguiente condición de frontera tipo ley de enfriamiento de Newton:

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x=b} = h (f|_{x=b} - f_\infty) \quad (4.P-13)$$

Siendo $x = b$ el límite superior del dominio, mientras que h y f_∞ son constantes conocidas. Escoja de entre los tres tipos de aproximación para la primera derivada el que debe usarse en este caso, justifique claramente su elección.

- 4.10 Considere ahora la siguiente condición de frontera tipo Neumann:

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x=a} = \gamma \quad (4.P-14)$$

donde $x = a$ identifica el inicio del dominio y γ es una constante conocida. Escoja de entre los tres tipos de aproximación para la primera derivada el que debe usarse en este caso, justifique claramente su elección.

- 4.11 Considere la siguiente ecuación diferencial ordinaria para la transferencia de calor por difusión en estado estacionario en una esfera de radio R ,

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dT}{dr} \right) = 0 \quad (4.P-15)$$

La cual está sujeta a las siguientes condiciones de frontera:

$$T \text{ está definida } \forall r \quad (4.P-16)$$

$$\text{En } r = R, \quad T = T_R \quad (4.P-17)$$

Demuestre que la solución analítica que se obtiene es la misma que la que resulta al reemplazar la primera condición de frontera por la siguiente

$$\text{En } r = 0, \quad \frac{dT}{dr} = 0 \quad (4.P-18)$$

- 4.12 Suponga que un consorcio microbiano crece al triple en cada periodo de tiempo que transcurre entre dos mediciones experimentales de lo que creció en el periodo inmediatamente anterior. Muestre que la relación de recurrencia es, en este caso,

$$y_{t+2} - y_{t+1} = 3(y_{t+1} - y_t) \quad (4.P-19)$$

La cual da lugar a la siguiente ecuación en diferencias de segundo grado

$$y_{t+2} - 4y_{t+1} + 3y_t = 0 \quad (4.P-20)$$

- 4.13 Dada la siguiente serie

$$s = a + ar + ar^2 + ar^3 + \dots + ar^{n-1} \quad (4.P-21)$$

Muestre que

$$s - rs = a - ar^n \quad (4.P-22)$$

de donde se obtiene la siguiente identidad

$$s = a \frac{1 - r^n}{1 - r}, \quad \forall r \neq 1 \quad (4.P-23)$$

- 4.14 Obtenga las ecs. (4.8-3) a partir de las ecs. (4.8-1) utilizando las definiciones dadas en la Ec. (4.8-2)
- 4.15 Considere un subsuelo cuya conductividad hidráulica es de 1 m/s y su porosidad es de 0.35. Utilice el modelo de la Sección 4.8.1 para determinar el desplazamiento de un derrame de petróleo que inicialmente tenía 10 mm de altura.

- 4.16 En base a los resultados obtenidos en el problema anterior, ¿Qué estrategias de remediación escogería para atender el derrame de petróleo en el corto y largo plazo en el subsuelo?
- 4.17 Con el fin de resolver la Ec. (4.8-1a) es conveniente reorganizarla como sigue,

$$\frac{\zeta d\zeta}{h_0 + (1 - \varepsilon)\zeta} = d\tau \quad (4.P-24)$$

Note que el lado izquierdo de la ecuación anterior sólo es función de ζ , mientras que su lado derecho depende únicamente del tiempo. Cuando una ecuación diferencial puede expresarse de esta forma puede encontrarse su solución al integrar ambos lados de la igualdad. Este procedimiento se conoce como el método de variables separables.

Integre de manera indefinida ambos lados de la ecuación anterior para obtener

$$\frac{\zeta}{1 - \varepsilon} - \frac{\ln[1 + (1 - \varepsilon)\zeta]}{(1 - \varepsilon)^2} = \tau + c \quad (4.P-25)$$

donde c es una constante de integración la cual puede determinarse aplicando la condición inicial a la ecuación anterior. Lleve a cabo los pasos algebraicos correspondientes para llegar a la expresión dada en la Ec. (4.8-4).

- 4.18 En este problema se busca desarrollar una solución analítica aproximada de la Ec. (4.8-4). Para ello, deduzca condiciones bajo las cuales es posible aceptar la siguiente desigualdad

$$\frac{\ln[1 + (1 - \varepsilon)\zeta]}{(1 - \varepsilon)^2} \ll \frac{\zeta}{1 - \varepsilon} \quad (4.P-26)$$

Bajo estas circunstancias, simplifique la Ec. (4.8-4) y obtenga el resultado siguiente

$$\zeta = (1 - \varepsilon)\tau \quad (4.P-27)$$

Compare las predicciones que se obtienen con esta expresión con los resultados numéricos de la Fig. 4.8-1. Explique estas diferencias y proponga al menos una alternativa para obtener una solución analítica.

- 4.19 Utilice el Método de Newton-Raphson (Sección 4.8.1) para resolver numéricamente la Ec. (4.8-12). Fije una tolerancia de al menos 1×10^{-6} , además utilice diferentes valores iniciales de prueba y haga una gráfica de la función para mostrar que su solución es única.
- 4.20 Suponga que la mezcla de salida del Ejemplo 1 de la Sección 4.8.2 se somete a una segunda etapa de destilación diferencial y ésta se detiene cuando se han separado el 80% de los moles iniciales en el líquido. Determine si la composición del líquido residual en la caldera es o no inferior al 10% en fracción mol de benceno.
- 4.21 Proponga un polinomio de tercer grado para representar los datos de la Tabla 4.6-1 utilizando modelado observacional.
- 4.22 Utilice el resultado del problema anterior para calcular la integral del lado izquierdo de la Ec. (4.8-11) y compárelo con el obtenido numéricamente en el texto. Discuta cuál de los dos resultados es más correcto.
- 4.23 En este problema se busca deducir la fórmula de integración dada por la Ec. (4.8-18). Para ello, demuestre que se obtiene la siguiente fórmula para el segmento comprendido entre x_1 y x_2 :

$$I_{2-1} = \underbrace{(x_2 - x_1)}_{\text{base}} \underbrace{\frac{f(x_2) + f(x_1)}{2}}_{\text{altura}} \quad (4.P-28)$$

Deduzca las fórmulas para el resto de los segmentos y súmelas para obtener la Ec. (4.8-18).



Comentarios finales

En este texto se presentaron las tres etapas en que se concibió el proceso de modelado, es decir, planteamiento, solución y análisis de resultados. Por supuesto, esta es sólo una forma particular de conceptualizar este proceso y de ninguna manera se pretende decir que es la única. Más aún, el proceso de modelado, no es necesariamente lineal, sino (como a menudo ocurre en la práctica) cíclico, es decir, es posible que en alguna parte del proceso se encuentren suficientes razones para regresar a etapas anteriores. Además, el llevar a cabo modelado matemático sólo es la mitad del trabajo, la otra parte corresponde al trabajo experimental, con el cual se pueden refutar o comprobar las teorías que sustentan los modelos.

Se dedicó especial importancia a aspectos fundamentales como son: la definición y clasificación de los modelos matemáticos, las distintas posturas filosóficas para conocer la realidad, las máximas de Aris (1976) del modelado matemático, junto con los tres niveles de simplificación de Whitaker (1988). Además, se dedicó una buena parte del texto a la aplicación de estos aspectos fundamentales a diversos problemas que fueron desde el modelado de la transferencia de calor en una cabeza humana hasta modelar matemáticamente el amor entre dos personas.

Como se comentó a lo largo del texto, este trabajo no pretende ser concluyente en cuanto a proporcionar guías infalibles que garanticen el éxito en el proceso de modelado. Más bien, el objetivo fue presentar algunas sugerencias y reflexiones propias y de otros autores sobre el modelado en ciencias básicas e ingeniería. Buscando con esto proporcionar una herramienta útil para quien esté interesado en llevar a cabo actividades de modelado matemático.

Epílogo

Al terminar de escribir este texto, mis pensamientos se dirigen a la persona que está en este momento leyendo estas líneas. No puedo hacer menos que agradecerle al lector por haber aceptado embarcarse conmigo en estudiar este breviario que aporta tan sólo una visión del extenso y fascinante proceso que es tratar de representar matemáticamente algunos atributos de la realidad. A pesar de las particularidades que presenta el material¹⁸, éste posee un grado de generalidad en cuanto a las aportaciones correspondientes al planteamiento, solución y análisis de los modelos y puede extenderse a otro tipo de modelos no abordados aquí y no por ello menos importantes.

Como se mencionó en el Prefacio, este texto está orientado para estudiantes que inician o están en proceso de aprender y aplicar el modelado matemático como parte de su formación. Puedo asegurarle al lector que he dado mi mejor esfuerzo y lo seguiré dando mientras tenga lucidez mental y un ánimo insaciable por el conocimiento.

Sinceramente, muchas gracias
Francisco J. Valdés-Parada

¹⁸Como un enfoque determinista e influenciado por mi experiencia en docencia e investigación relacionada con fenómenos de transporte.

Bibliografía

- Anderson, N., Arthurs, A. (1981). Complementary extremum principles for a nonlinear model of heat conduction in the human head. *Bulletin of Mathematical Biology* **43**, 341–346.
- Anton, H. (2010). *Elementary Linear Algebra*. Wiley. décima edición.
- Arfken, G., Weber, H., Harris, F. (2012). *Mathematical Methods for Physicists*. Academic Press. séptima edición.
- Aris, R. (1976). How to get the most output of an equation without really trying. *Chemical Engineering Education* **10**, 114–124.
- Aris, R. (1977). Re, k and π : a conversation on some aspects of mathematical modeling. *Applied Mathematical Modeling* **1**, 386–394.
- Aris, R. (1990). *Vectors, Tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics*. Dover.
- Aris, R. (1994). *Mathematical Modelling Techniques*. Dover.
- Aris, R. (1999). *Mathematical Modeling, Volume 1: A Chemical Engineer's Perspective*. Academic Press.
- Aris, R., Penn, M. (1980). The mere notion of a model. *Mathematical Modeling* **1**, 1–12.
- Armstrong, K. (2006). *A Short History of Myth*. Canongate U.S.
- Basmadjian, D., Farnood, R. (2007). *The Art of Modeling in Science and Engineering with Mathematica*. Chapman & Hall. segunda edición.
- Bear, J., Cheng, A. (2010). *Modeling Groundwater Flow and Contaminant Transport*. Springer.

- Becker, E., Carey, G., Oden, J. (1981). *Finite Elements Volume 1: An Introduction*. Prentice Hall.
- Berkeley, G. (1982). *A Treatise Concerning the Principles of Human Knowledge*. Hackett Pub. Co.
- Bird, R., Stewart, W., Lightfoot, E. (2007). *Transport Phenomena*. Wiley. segunda edición.
- Boroditsky, L., Gaby, A. (2010). Remembrances of time in an australian aboriginal community. *Psychological Science* **11**, 1635–1639.
- Boyce, W., DiPrima, R. (2012). *Elementary Differential Equations*. Wiley. décima edición.
- Burden, R., Faires, J. (2011). *Numerical Analysis*. Brooks-Cole. novena edición.
- Callen, H. (1985). *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. Wiley. segunda edición.
- Campbell, J., O'Rourke, M., Shier, D. (2004). *Freedom and Determinism*. MIT press.
- Carbonell, R., Whitaker, S. (1984). Adsorption and reaction at a catalytic surface: the quasi-steady condition. *Chemical Engineering Science* **39**, 1319–1321.
- Carmeliet, P., Jain, R. (2000). Angiogenesis in cancer and other diseases. *Nature* **407**, 249–257.
- Cattaneo, C. (1948). Sulla condizione de calore. *Atti del Seminario Matematico e Fisico dell'Università di Modena* **3**, 83–101.
- Chaitin, G. (1990). *Information, Randomness and Incompleteness*. World-Scientific. segunda edición.
- Cull, P., Flahive, M., Robson, R. (2005). *Difference Equations: From Rabbits to chaos*. Springer.

- Dewey, J. (2013). *How We Think*. CreateSpace Independent Publishing Platform.
- Edgar, T., Himmelblau, D., Lasdon, L. (2001). *Optimization of Chemical Processes*. McGraw-Hill. segunda edición.
- Elaydi, S. (2005). *An Introduction to Difference Equations*. Springer. tercera edición.
- Feyerabend, P. (2010). *Against Method*. Verso. cuarta edición.
- Finlayson, B. (2012). *Introduction to Chemical Engineering Computing*. Wiley.
- Flesch, U. (1975). The distribution of heat sources in the human head: A theoretical consideration. *Journal of Theoretical Biology* **54**, 285–287.
- Flores-Barrios, C. (2005). *Evaluación Técnica y Experimental de un Colector Solar Plano Instalado en la UAM-I*. Proyecto terminal. Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.
- Gray, B. (1980). The distribution of heat sources in the human head: Theoretical considerations. *Journal of Theoretical Biology* **82**, 473–476.
- Greshenfeld, N. (2011). *The nature of mathematical modeling*. Cambridge.
- Guthiere, W. (1960). *Greek Philosophers: From Thales to Aristotle*. Harper & Row.
- Guthiere, W. (1972). *Socrates*. Cambridge University Press.
- Haberman, R. (2012). *Applied Partial Differential Equations*. Pearson. quinta edición.
- Harrison, S., Lin, Q., Mesquita, L. (2004). *Integral stagnation temperature control for solar collectors*. Reporte técnico. SESCI, Waterloo, Ontario Canada.
- Hawking, S., Mlodinow, L. (2008). *A Briefer History of Time*. Bantam.
- Herrera, I., Pinder, G. (2012). *Mathematical Modeling in Science and Engineering*. Wiley.

- Himmelblau, D. (1970). *Process Analysis by Statistical Methods*. Wiley.
- Himmelblau, D., Bischoff, K. (1968). *Process Analysis and Simulation. Deterministic Systems*. Wiley.
- Hull, L. (1960). *History and Philosophy of Science: introduction*. Longmans.
- Husserl, E. (1977). *Cartesian Meditations: An Introduction to Phenomenology*. Martinus Nijhoff Pub.
- James, W. (1995). *Pragmatism*. Dover.
- Kelley, W., Peterson, A. (2001). *Difference Equations: An Introduction with Applications*. Academic Press. segunda edición.
- Kreyszig, E. (2011). *Advanced Engineering Mathematics*. Wiley. décima edición.
- Kuhn, T. (1996). *The Structure of Scientific Revolutions*. University of Chicago Press. tercera edición.
- Landau, L., Lifshitz, E. (1976). *Mechanics*. Butterworth-Heinemann. tercera edición.
- Leibniz, G. (2012). *The Monadology*. Acheron Press.
- Long, T., Ford, R. (2009). Enhanced transverse migration of bacteria by chemotaxis in a porous t-sensor. *Environmental Science and Technology* **43**, 1546–1552.
- Marshall, J. (2013). *A Short History of Greek Philosophy*. CreateSpace Independent Publishing Platform.
- Meerschaert, M. (2013). *Mathematical Modeling*. Elsevier Academic Press. cuarta edición.
- Méndez-González, L., Velásquez-Barragán, H., Pérez-Nowaihed, L. (2006). *Filosofía*. Nueva imagen.
- Ochoa-Tapia, J. (2005). *Métodos Matemáticos Aplicados a la Ingeniería Química*. Universidad Autónoma Metropolitana.

- Ocón-García, J., Tojo-Barreiro, G. (1971). *Problemas de Ingeniería Química, Tomo I*. Aguilar.
- Peirce, C. (1992). *Reasoning and the Logic of Things*. Harvard University Press.
- Pinder, G., Gray, W. (2008). *Essentials of Multiphase Flow in Porous Media*. Wiley.
- Poole, D. (2005). *Linear Algebra: A Modern Introduction*. Brooks Cole.
- Popper, K. (2002). *The Logic of Scientific Discovery*. Routledge. segunda edición.
- Porter, M., Valdés-Parada, F., Wood, B. (2010). Comparison of theory and experiments for dispersion in homogeneous porous media. *Advances in Water Resources* **33**, 1043–1052.
- Rissanen, J. (1986). Stochastic complexity and modelling. *Annals of Statistics* **14**, 1080–1100.
- Russell, B. (2010). *The Principles of Mathematics*. Nabu Press.
- Sigler, L. (2003). *Fibonacci's Liber Abaci: A Translation into Modern English of Leonardo Pisano's Book of Calculation (Sources and Studies in the History of Mathematics and Physical Sciences)*. Springer.
- Slattery, J., Oh, E., Fu, K. (2004). Extension of continuum mechanics to the nanoscale. *Chemical Engineering Science* **59**, 4621–4635.
- Smith, G. (2004). *Numerical Solution of Partial Differential Equations*. Oxford University Press. tercera edición.
- Smith, N. (2008). *Immanuel Kant's Critique Of Pure Reason*. Blunt Press.
- Sprot, J. (2004). Dynamical models of love. *Non linear Dynamics, Psychology and Life Sciences* **8**, 303–313.
- Taylor, A. (2011). *Plato: The Man and His Work*. Dover.
- Taylor, C. (1977). *Hegel*. Cambridge University Press.

- Taylor, C. (2010). *The Atomists: Leucippus and Democritus*. University of Toronto Press.
- Treybal, R. (1980). *Mass Transfer Operations*. Mc-Graw Hill. tercera edición.
- Urbach, P. (1987). *Francis Bacon's Philosophy of Science*. Open Court Pub Co. segunda edición.
- Valdés-Parada, F. (2004). *Dinámica de reactores de dos fases con cinética aproximada*. Tesis de maestría. UAM-Iztapalapa.
- Valdés-Parada, F., Alvarez-Ramírez, J., Ochoa-Tapia, J. (2007). Análisis de problemas de transporte de masa y reacción mediante funciones de green. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* **6**, 283–294.
- Valdés-Parada, F., Alvarez-Ramírez, J., de la Rosa, J.M., Ochoa-Tapia, J. (2006). An improved short-cut method for effectiveness factor estimation. *Industrial and Engineering Chemistry Research* **45**, 1542–1547.
- Voet, D., Voet, J., Pratt, C. (2012). *Fundamentals of Biochemistry: Life at the Molecular Level*. Wiley. cuarta edición.
- Wartenberg, M., Dönmez, F., Ling, F., Acker, H., Hescheler, J., Sauer, H. (2001). Tumor-induced angiogenesis studied in confrontation cultures of multicellular tumor spheroids and emryoid bodies grown from pluripotent embryonic stem cells. *The FASEB Journal* **15**, 995–1005.
- Whitaker, S. (1983). *Fundamental principles of Heat Transfer*. Krieger.
- Whitaker, S. (1986). Transient diffusion, adsorption and reaction in porous catalysts: The reaction controlled, quasi steady catalytic surface. *Chemical Engineering Science* **41**, 3015–3022.
- Whitaker, S. (1988). Levels of simplification: The use of assumptions, restrictions and constraints in engineering analysis. *Chemical Engineering Education* **22**, 104–108.
- Whitaker, S. (1992). *Introduction to Fluid Mechanics*. Krieger.
- Whitaker, S. (1999). *The Method of Volume Averaging*. Kluwer.

- Whitaker, S. (2009a). Chemical engineering education: making connections at interfaces. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* **8**, 1–33.
- Whitaker, S. (2009b). Derivation and application of the Steffan-Maxwell equations. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* **8**, 213–243.
- Wood, B. (2009). The role of scaling laws in upscaling. *Advances in Water Resources* **32**, 723–736.
- Xirau, R. (2010). *Introducción a la Historia de la Filosofía*. UNAM.
- Zaitsev, V., Polyanin, A. (2002). *Handbook of Exact Solutions for Ordinary Differential Equations*. Chapman and Hall/CRC. segunda edición.
- Zill, D., Wright, W. (2012). *Differential Equations with Boundary Value Problems*. Brooks Cole. octava edición.

Apéndice A. Solución de ecuaciones diferenciales por funciones de Green

Considere una ecuación diferencial ordinaria y lineal de segundo orden de la forma

$$\frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dT}{dx} \right] + q(x)T = \underbrace{F(x)}_{\text{fuente volumétrica}}, \quad \forall x \in (a, b) \quad (\text{A-1a})$$

donde p y q son funciones de la posición definidas en todo el dominio. Para propósitos de esta explicación, las condiciones de frontera para esta ecuación serán de tipo Neumann y mixtas,

$$\text{En } x = a, \quad \frac{dT}{dx} = 0 \quad (\text{A-1b})$$

$$\text{En } x = b, \quad -k \frac{dT}{dx} = hT - \underbrace{hT_{\infty}}_{\text{fuente superficial}} \quad (\text{A-1c})$$

aunque el análisis es aplicable a cualquier tipo de condición de frontera. Para los desarrollos que siguen, es conveniente definir los siguientes operadores diferenciales $\mathcal{L}(u)$ y $\mathcal{L}(v)$ como

$$\mathcal{L}(u) = \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{du}{dx} \right] + q(x)u \quad (\text{A-2a})$$

$$\mathcal{L}(v) = \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dv}{dx} \right] + q(x)v \quad (\text{A-2b})$$

Siendo u y v funciones continuas definidas en el mismo dominio que T . En base a estas definiciones, el resultado de la resta $u\mathcal{L}(v) - v\mathcal{L}(u)$ está dado por

$$u\mathcal{L}(v) - v\mathcal{L}(u) = u \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dv}{dx} \right] - v \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{du}{dx} \right] \quad (\text{A-3})$$

Sin embargo, de la regla de derivada de un producto de funciones se tiene que

$$u \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dv}{dx} \right] = \frac{d}{dx} \left[up(x) \frac{dv}{dx} \right] - \left[p(x) \frac{dv}{dx} \right] \frac{du}{dx} \quad (\text{A-4a})$$

$$v \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{du}{dx} \right] = \frac{d}{dx} \left[vp(x) \frac{du}{dx} \right] - \left[p(x) \frac{du}{dx} \right] \frac{dv}{dx} \quad (\text{A-4b})$$

Por lo que el resultado en el lado derecho de la Ec. (A-3) se puede expresar como

$$u\mathcal{L}(v) - v\mathcal{L}(u) = \frac{d}{dx} \left[p(x) \left(u \frac{dv}{dx} - v \frac{du}{dx} \right) \right] \quad (\text{A-5})$$

La cual se conoce como *identidad de Lagrange*. La versión integrada de esta identidad es la *fórmula de Green* y para este caso se escribe como sigue

$$\int_{x=a}^{x=b} [u\mathcal{L}(v) - v\mathcal{L}(u)] dx = p(x) \left(u \frac{dv}{dx} - v \frac{du}{dx} \right) \Big|_{x=a}^{x=b} \quad (\text{A-6})$$

Para resolver el problema, propondremos un problema asociado al original cuya variable dependiente, G , es la función de Green. La ecuación diferencial que gobierna a la función de Green es la misma que la que gobierna a T con la diferencia que la fuente se reemplaza por una función delta de Dirac, definida como

$$\delta(x_0 - x) = \delta(x - x_0) = \begin{cases} 0, & x \neq x_0 \\ \infty, & x = x_0 \end{cases} \quad (\text{A-7})$$

Esta función cumple con la propiedad de filtración, la cual se puede expresar de la siguiente manera

$$\int_{x=a}^{x=b} f(x) \delta(x_0 - x) dx = f(x_0) \quad (\text{A-8})$$

Siempre y cuando $x_0 \in [a, b]$ y la función $f(x)$ sea continua por tramos. De esta forma, la ecuación diferencial para la función de Green es

$$\frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dG}{dx} \right] + q(x) G = \delta(x_0 - x), \quad \forall x, x_0 \in (a, b) \quad (\text{A-9a})$$

Las condiciones de frontera para esta ecuación diferencial son las versiones homogéneas de las del problema original, es decir,

$$\text{En } x = a, \quad \frac{dG}{dx} = 0 \quad (\text{A-9b})$$

$$\text{En } x = b, \quad -k \frac{dG}{dx} = hG \quad (\text{A-9c})$$

Note que la función de Green es simétrica alrededor de x_0 , es decir, $G(x - x_0) = G(x_0 - x)$. Ahora es conveniente retomar la fórmula de Green [Ec. (A-6)] y sustituir u por T y v por G para obtener

$$\int_{x=a}^{x=b} [T \mathcal{L}(G) - G(x, x_0) \mathcal{L}(T)] dx = p(x) \left(T \frac{dG}{dx} - G \frac{dT}{dx} \right) \Big|_{x=a}^{x=b} \quad (\text{A-10})$$

donde, de acuerdo a las definiciones de operadores diferenciales dadas en las ecs. (A-2)

$$\mathcal{L}(G) = \delta(x_0 - x) \quad (\text{A-11a})$$

$$\mathcal{L}(T) = F(x) \quad (\text{A-11b})$$

Sustituyendo las ecs. (A-11) en la integral del lado izquierdo de la Ec. (A-10) resulta que

$$\int_{x=a}^{x=b} [T \delta(x_0 - x) - G(x, x_0) F(x)] dx = p(x) \left(T \frac{dG}{dx} - G \frac{dT}{dx} \right) \Big|_{x=a}^{x=b} \quad (\text{A-12})$$

Sin embargo, tomando en cuenta la propiedad de filtración de la función delta de Dirac [Ec. (A-8)], el resultado anterior puede expresarse como sigue

$$T(x_0) = \int_{x=a}^{x=b} G(x, x_0) F(x) dx + p(x) \left(T \frac{dG}{dx} - G \frac{dT}{dx} \right) \Big|_{x=a}^{x=b} \quad (\text{A-13})$$

Este resultado puede simplificarse un poco más al tomar en cuenta las condiciones de frontera para G y T , de manera que

$$T(x_0) = \int_{x_0=a}^{x_0=b} G(x, x_0) F(x) dx - \frac{h}{k} p(b) G(b, x_0) T_\infty \tag{A-14}$$

Por último, haciendo el cambio de variable $x_0 \rightarrow x$ y, tomando en cuenta la propiedad de simetría de las funciones de Green, se llega a la siguiente expresión

$$T(x) = \underbrace{\int_{x_0=a}^{x_0=b} G(x, x_0) F(x_0) dx_0}_{\text{influencia de la fuente volumétrica}} - \underbrace{\frac{h}{k} p(b) G(b, x) T_\infty}_{\text{influencia de la fuente superficial}} \tag{A-15}$$

La cual es el resultado deseado; sin embargo, se encuentra expresado en términos de la función de Green, la cual, hasta este punto no ha sido determinada. Para calcular la función de Green se pueden recurrir a distintas técnicas analíticas, dependiendo de los valores de las funciones $p(x)$ y $q(x)$; al lector interesado se le recomienda consultar el manual de Zaitsev y Polyanin (2002). Por último, es necesario agregar que el método de las funciones de Green es mucho más poderoso de lo explicado en esta sección. Con este método se pueden resolver ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales tanto en estado estacionario como en estado transitorio. Una referencia recomendable para aprender más acerca de este método es el texto de Haberman (2012).

Apéndice B. Programa en Matlab para la solución de las ecs. (4.6-7)

```
clear; close all; clc;

% Parametros de entrada del programa
N= 1000; % Número de nodos
Bi = 1; % número de Biot
Fi = 1; % Numero Fi
Ta= 0.5; % Temperatura ambiente adimensional

% Cálculo de la separacion dentre nodos
delx= (1-0)/(N-1);

% Cálculo de los valores de la variable independiente
x= zeros(N,1);
for i=1:N
    x(i)= (i-1)*delx;
end

% Elementos de la matriz tridiagonal
A=zeros(N,1);
B=zeros(N,1);
C=zeros(N,1);
D=zeros(N,1);

A(1)=0;
B(1)= -1;
C(1)= 1;
D(1)= 0;
```

```

for i=2:N-1
    A(i)= 1-delx/x(i);
    B(i)= -2-Fi^2*delx^2;
    C(i)= 1+delx/x(i);
    D(i)= -Fi^2*delx^2;
end

A(N)= -1;
B(N)= 1+Bi*delx;
C(N)= 0;
D(N)= Bi*delx*Ta;

% Aquí se llama a la función del algoritmo de Thomas
TN = Thomas(N,A,B,C,D);

% Para propósitos de comparación se calcula también la solución
analítica
TA=zeros(N,1);
for i=1:N
    TA(i)=(Bi*(Ta-1)/(Bi-1+Fi/tanh(Fi))*sinh(Fi*x(i))/(x(i)*sinh(Fi))
        +1;
end

function U= Thomas(n, A, B, C, D)
w= zeros(n,1);
b= zeros(n,1);
g= zeros(n,1);

w(1)= 1/B(1);
b(1)= w(1)*C(1);
g(1)= w(1)*D(1);

for i=2:n-1;
    w(i)= 1/(B(i)-A(i)*b(i-1));
    b(i)= w(i)*C(i);
    g(i)= w(i)*(D(i)-A(i)*g(i-1));
end

g(n)= (D(n)-A(n)*g(n-1))/(B(n)-A(n)*b(n-1));

U(n)= g(n);
for i=n-1:-1:1
    U(i)= g(i)-b(i)*U(i+1);
end

```


Breviario sobre modelado matemático

Se terminó de imprimir en el mes de noviembre de 2014,
en los talleres de Diseño, Publicidad e Impresión,
1a. de Leonardo Hernández núm. 14, Col. Vicente Guerrero, C.P. 09200, México, D. F.
La edición consta de 500 ejemplares, más sobrantes para reposición.



El propósito de este breviario es proporcionar un recurso útil para modelar matemáticamente sistemas de interés en ciencias básicas e ingeniería. El material es breve e introductorio, pues su propósito es servir de apoyo en varias asignaturas que involucren la actividad de modelado. El objetivo de este material es motivar una mayor reflexión y discusión de aspectos fundamentales de modelado dentro y fuera de los salones de clase. Además de buscar que el lector conozca sobre diversos temas referentes al modelado, se desea motivar a quién que esté interesado en profundizar en algún tema específico a que consulte referencias especializadas. Por tanto, su aplicación no está restringida a una asignatura en particular. Más bien, se recomienda que este material se utilice durante las sesiones introductorias de cursos donde los alumnos se enfrenten con actividades de modelado matemático en ciencias básicas e ingeniería. Por ejemplo, el texto puede ser de ayuda en materias como Mecánica de fluidos, Transferencia de calor, Transferencia de masa, Fenómenos de transporte computacionales, Integración de procesos, Dispersión de contaminantes, Métodos matemáticos en la ingeniería de procesos, Ingeniería de reactores, Diseño de reactores biológicos, Fenómenos de transporte en procesos microbianos, entre otras. Acompañando al texto principal, se incluyen ejemplos de aplicación que van desde proponer un modelo con base en la forma de una distribución de datos hasta el desarrollo y solución de un modelo matemático para el amor.*

* Texto extraído del prefacio



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

Av. San Rafael Atlixco No. 186, Col. Vicentina

Del. Iztapalapa, C.P. 09340, México, D.F.

Tel. (01) 58 04 46 00