

# SEMINARIOS CAEDIF

Comportamiento Asintótico y Dinámica de Ecuaciones Diferenciales

Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas:  
el caso de la alta presión

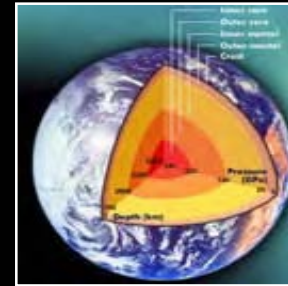


Valentín García Baonza  
Departamento de Química Física  
UCM



SEMINARIOS CAEDIF

Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas:  
el caso de la alta presión



P y T: variables naturales



Alta Presión:  
Área Interdisciplinaria

Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas:  
el caso de la alta presión

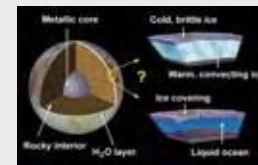
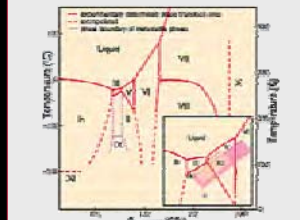
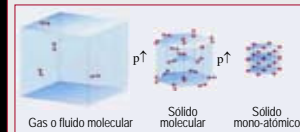
S.I.

| psi      | atms.    | <sup>3</sup> H <sub>2</sub> O | mm H <sub>2</sub> O | cm H <sub>2</sub> O | oz/in <sup>2</sup> | Kg/cm <sup>2</sup> | <sup>3</sup> Hg | mm Hg (Torr) | cmHg     | mbar   | bar      | Pa (N/m <sup>2</sup> ) | kPa    | MPa       |
|----------|----------|-------------------------------|---------------------|---------------------|--------------------|--------------------|-----------------|--------------|----------|--------|----------|------------------------|--------|-----------|
| 1        | 0.0681   | 27.71                         | 703.8               | 70.38               | 16                 | 0.0704             | 2.036           | 51.715       | 5.17     | 68.95  | 0.0689   | 6,895                  | 6.895  | 0.00689   |
| 14.7     | 1        | 407.2                         | 10,343              | 1,034.3             | 235.1              | 1.033              | 29.92           | 760          | 76       | 1013   | 1.013    | 101,325                | 101.3  | 0.1013    |
| 0.0361   | 0.00246  | 1                             | 25.4                | 2.54                | 0.5775             | 0.00254            | 0.0735          | 1.866        | 0.187    | 2.488  | 0.00249  | 248.8                  | 0.249  | 0.00025   |
| 0.001421 | 0.000097 | 0.0394                        | 1                   | 0.1                 | 0.0227             | 0.0001             | 0.00289         | 0.0735       | 0.00735  | 0.098  | 0.000098 | 9.8                    | 0.0098 | 0.00001   |
| 0.01421  | 0.000967 | 0.3937                        | 10                  | 1                   | 0.227              | 0.001              | 0.0289          | 0.735        | 0.0735   | 0.98   | 0.00098  | 98                     | 0.098  | 0.0001    |
| 0.0625   | 0.00425  | 1.732                         | 43.966              | 4.40                | 1                  | 0.0044             | 0.1273          | 3.232        | 0.3232   | 4.31   | 0.00431  | 431                    | 0.431  | 0.00043   |
| 14.22    | 0.968    | 394.1                         | 100,010             | 1,001               | 227.6              | 1                  | 28.96           | 735.6        | 73.56    | 980.7  | 0.981    | 98,067                 | 98.07  | 0.0981    |
| 0.4912   | 0.03342  | 13.61                         | 345.7               | 34.57               | 7.858              | 0.0345             | 1               | 25.4         | 2.54     | 33.86  | 0.0339   | 3,386                  | 3.386  | 0.00339   |
| 0.01934  | 0.001316 | 0.536                         | 13.61               | 1.361               | 0.310              | 0.00136            | 0.0394          | 1            | 0.1      | 1.333  | 0.001333 | 133.3                  | 0.1333 | 0.0001333 |
| 0.1934   | 0.01316  | 5.368                         | 136.1               | 13.61               | 3.10               | 0.0136             | 0.394           | 10           | 1        | 13.33  | 0.01333  | 1,333                  | 1.333  | 0.00133   |
| 0.0145   | 0.000987 | 0.4012                        | 10.21               | 1.021               | 0.2321             | 0.00102            | 0.0295          | 0.75         | 0.075    | 1      | 0.001    | 100                    | 0.1    | 0.0001    |
| 14.504   | 0.987    | 401.9                         | 10,210              | 1,021               | 232.1              | 1.02               | 29.53           | 750          | 75       | 1,000  | 1        | 100,000                | 100    | 0.1       |
| 0.000145 | 0.00001  | 0.00402                       | 0.102               | 0.0102              | 0.00232            | 0.00001            | 0.000295        | 0.00075      | 0.000075 | 0.01   | 0.00001  | 1                      | 0.001  | 0.0000001 |
| 0.14504  | 0.00987  | 4.019                         | 102.07              | 10.207              | 2.321              | 0.0102             | 0.295           | 7.5          | 0.75     | 10     | 0.01     | 1,000                  | 1      | 0.001     |
| 145.04   | 9.869    | 4019                          | 102,074             | 10,207              | 2321               | 10.2               | 295.3           | 7500         | 750      | 10,000 | 10       | 1,000,000              | 1,000  | 1         |

log (P/Pa)

Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas:  
el caso de la alta presión

SEMINARIOS CAEDIF





# Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas: el caso de la alta presión

SEMINARIOS  
CAEDIF

**Bajo Presión**

log (P/Pa)



# Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas: el caso de la alta presión

SEMINARIOS  
CAEDIF

log (P/Pa)

PE-LVP

Multianvil

DAC

LASER DRIVEN



# Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas: el caso de la alta presión

SEMINARIOS  
CAEDIF

Manómetros / Transductores

Manómetro Bourdon

Balanza de peso muerto

Fluorescencia del rubi  
(escala secundaria)

EOS, etc.

log (P/Pa)



# Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas: el caso de la alta presión

SEMINARIOS  
CAEDIF

**CONSOLIDER ALTA**

Materia a Alta Presión - MALTA

**MALTA GENERAL DATA**

Host Institution: Universidad Complutense de Madrid (UCM)  
Coordinator: Valentín García Baonza

**MALTA INSTITUTIONS AND PRINCIPAL INVESTIGATORS**

| Partner Institution                 | Abbreviation | Principal Investigator         |
|-------------------------------------|--------------|--------------------------------|
| Universidad Jaime I de Castellón    | UJI          | Andrés Borl, Juan Manuel       |
| Universidad Complutense de Madrid   | UCM          | García Baonza, Valentín        |
| Universidad Autónoma de Barcelona   | UAB          | Guarnes López, Buenaventura    |
| Universidad de La Laguna            | ULL1         | Lavín della Ventura, Víctor    |
| Universidad Politécnica de Valencia | UPV          | Manjón Herrera, Fco. Javier    |
| Universidad de La Laguna            | ULL2         | Muñoz González, Alfonso        |
| Centro de Astrobiología INTA-CSIC   | CAB          | Prieto Ballesteros, Olga       |
| Universidad de Oviedo               | UOVI         | Rico Muñoz, José Manuel        |
| Universidad de Cantabria            | UCAN         | Rodríguez González, Fernando   |
| Instituto del Frío - CSIC           | IF           | Sanz Martínez, Pedro Dimas     |
| Universidad de Valencia             | UV           | Segura García del Río, Alfredo |



Materia a Alta Presión - MALTA

SCIENTIFIC GOALS

- I. Water and life-related systems
  - a. Synthesis, properties and stability of ice clathrates
  - b. High pressure effects on aqueous solutions of supramolecular aggregates and proteins
  - c. Microbiology under extreme conditions of pressure and temperature
- II. Molecular systems: physical properties and chemical reactivity
  - a. Pressure as a probe on unsaturated NOCH systems
  - b. Pressure-induced reactivity on NOCH materials
- III. Structure, stability, and reactivity of minerals
  - a. Pressure-Temperature-Composition (PTx) diagrams and physical properties of  $ABO_3$  ( $AO-BO_3$ ),  $ABO_4$  ( $AO_2-BO_2$ ) and  $AB_2O_6$  ( $AO-B_2O_3$ ) oxides
  - b. Catalytic properties of minerals on abiotic organic synthesis

TECHNOLOGICAL GOALS

- IV. Development of new high pressure cells: anvil and large volume devices
- V. Development of new optically active materials as pressure and temperature sensors
- VI. Design of a novel laser heating system for diamond anvil cells
- VII. Implementation of diagnostic devices in high pressure industrial equipments



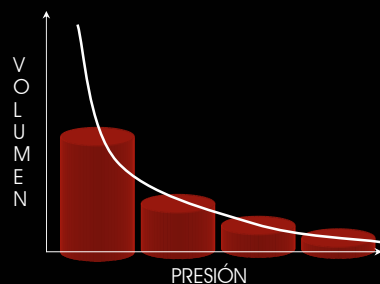
Materia a Alta Presión - MALTA

MIEMBROS DEL GRUPO DE  
INVESTIGACIÓN - UCM

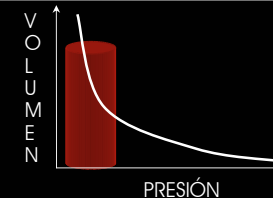
- Javier Núñez Delgado
- Mercedes Cáceres Alonso
- Mercedes Taravillo Corralo
- José Tortajada Pérez
- Elena del Corro García
- Eduardo Hidalgo
- Nubia Mendoza
- David Santamaría Pérez
- Óscar Rodríguez Montoro



$$P = \frac{F}{S} \Leftrightarrow \frac{E}{V}$$



Instituto del Frío - CSIC





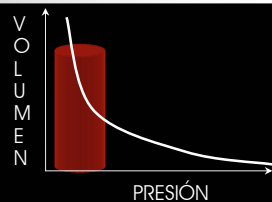


# Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas: el caso de la alta presión

SEMINARIOS  
CAEDIF

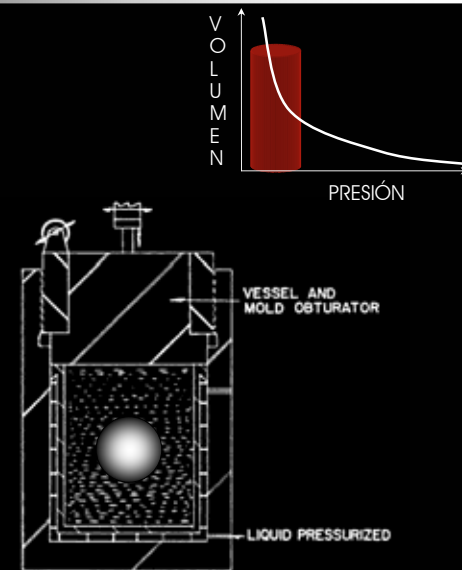
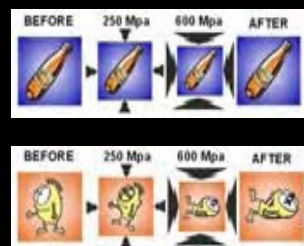
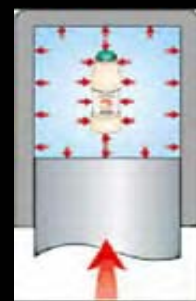


Instituto del Frío - CSIC



# Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas: el caso de la alta presión

SEMINARIOS  
CAEDIF



# Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas: el caso de la alta presión

SEMINARIOS  
CAEDIF

**PROTEÍNAS EN MICROORGANISMOS:**

Proceso térmico: 100°C 20 min

Proceso de alta presión: 100 MPa 10 min

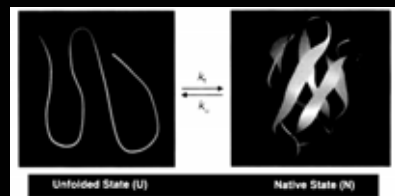
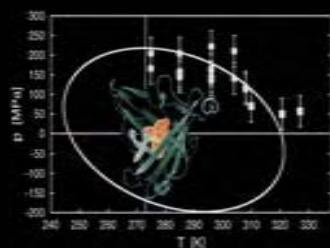
Podemos brotar por ambos, color y aroma

Proceso térmico: 100°C 20 min

Proceso de alta presión: 100 MPa 10 min

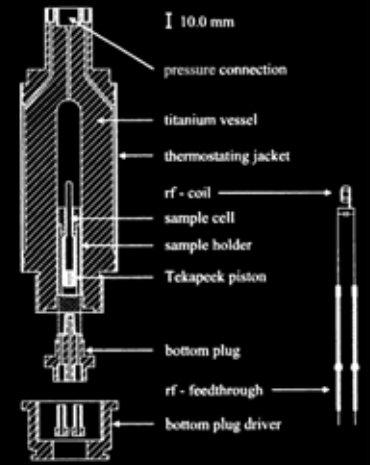
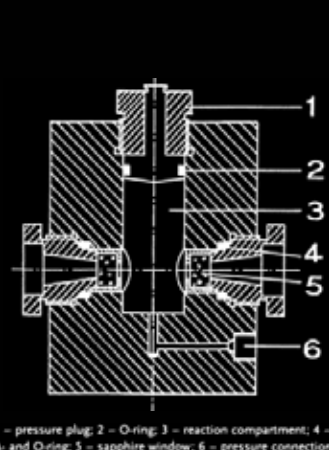
Se rompen las uniones y se forma nueva conformación que cambia el sabor

Desnaturalización de Proteínas en diferentes condiciones de P y T



# Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas: el caso de la alta presión

SEMINARIOS  
CAEDIF

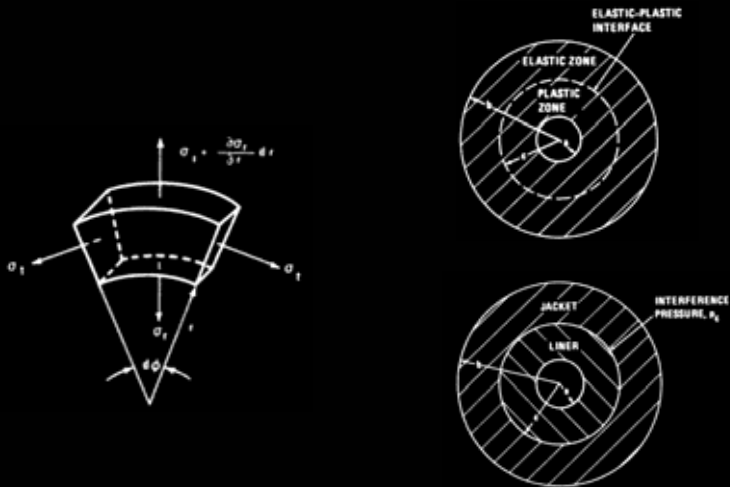


Schematic drawing of the high pressure NMR autoclave



# Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas: el caso de la alta presión

SEMINARIOS  
CADEDIF

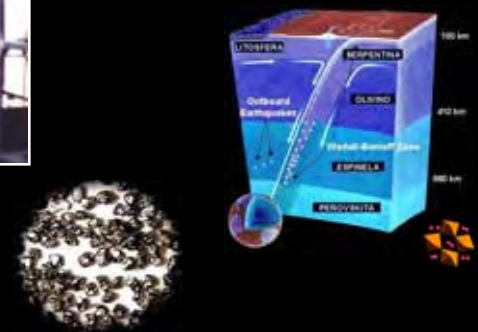
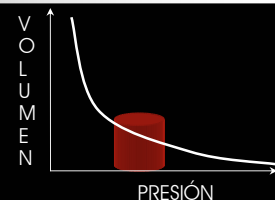


# Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas: el caso de la alta presión

SEMINARIOS  
CADEDIF



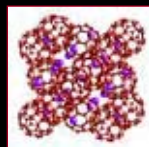
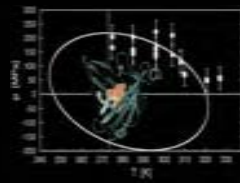
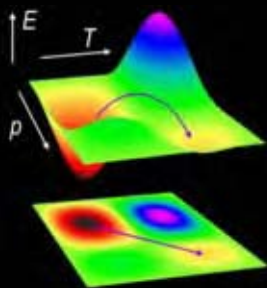
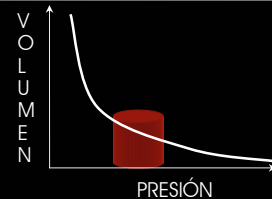
Prensa de Alta Presión  
Laboratorio Complutense  
De Altas Presiones  
M. A. Alario



# Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas: el caso de la alta presión

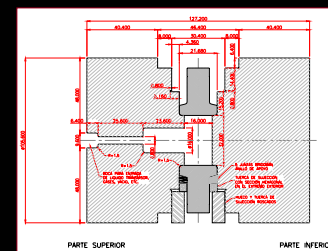
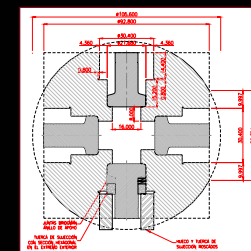
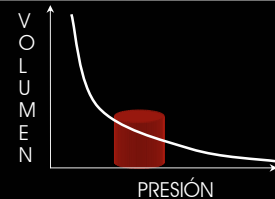
SEMINARIOS  
CADEDIF

$$\Delta V^o = - \left( \frac{RT \partial \ln K}{\partial p} \right)_T, \Delta V^* = - \left( \frac{RT \partial \ln k}{\partial p} \right)_T$$

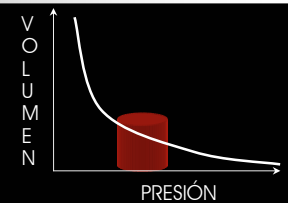


# Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas: el caso de la alta presión

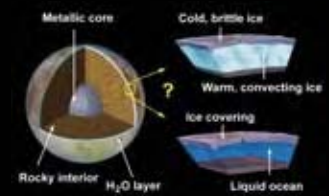
SEMINARIOS  
CADEDIF



## Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas: el caso de la alta presión

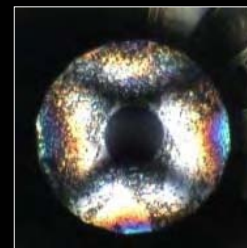
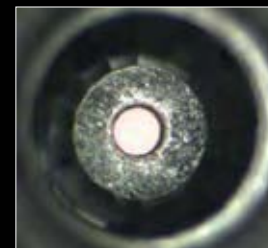
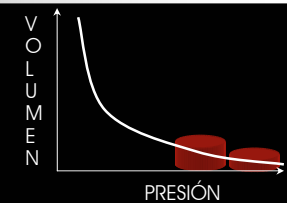


Agua/Hielos/Clatratos (Europa)      Extremófilos (Río Tinto)



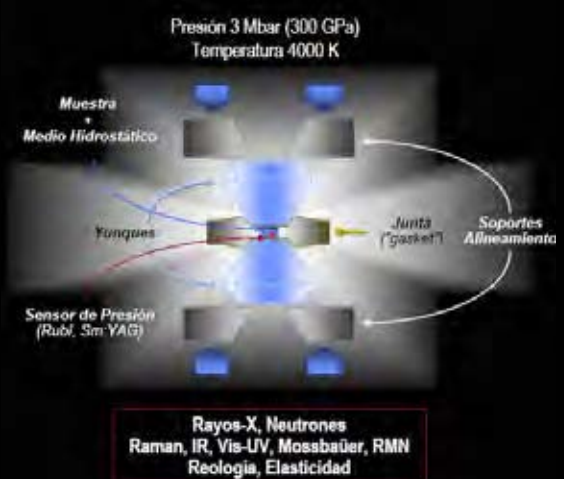
## Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas: el caso de la alta presión

### DAC (Diamond Anvil Cell)



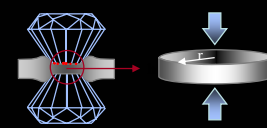
## Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas: el caso de la alta presión

### DAC (Diamond Anvil Cell)

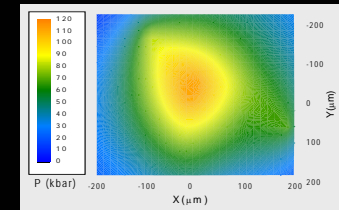


## Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas: el caso de la alta presión

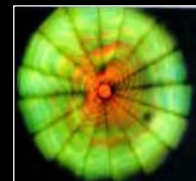
### DAC (Diamond Anvil Cell)



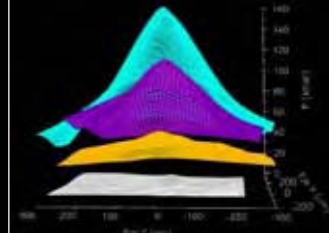
Mapa 2D de Presión (Cobre)



Distribución de Presión en el Yunque

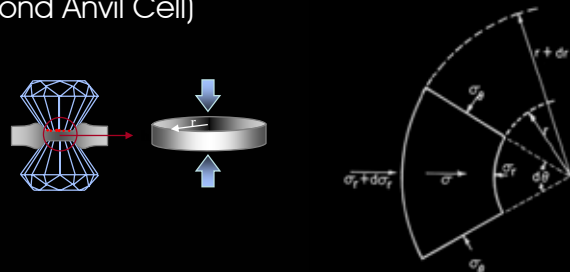


Perfiles 3D de Presión (Cobre)



Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas:  
el caso de la alta presión

DAC (Diamond Anvil Cell)



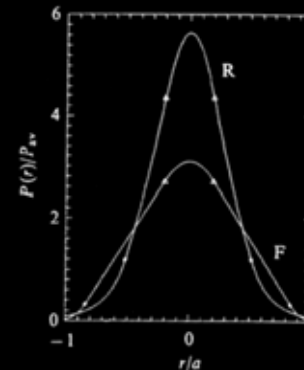
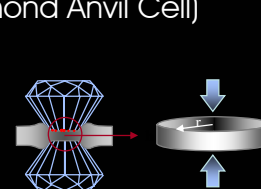
$$r h \frac{d\sigma_r}{dr} + h(\sigma_r - \sigma_\theta) + r \frac{dh}{dr} (\sigma_r - \sigma_z) + 2\tau r = 0$$

$$\sigma_r - \sigma_\theta = \sigma_0$$

Simetría radial + incompresibilidad

Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas:  
el caso de la alta presión

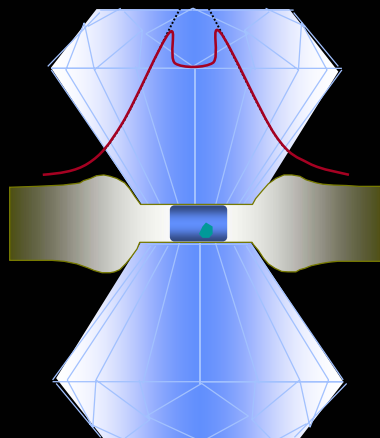
DAC (Diamond Anvil Cell)



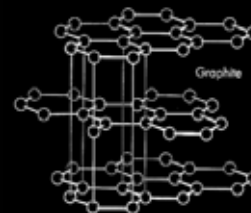
$$\frac{P(r)}{\sigma_0} = \begin{cases} \frac{P(r_c)}{\sigma_0} + \frac{r_c}{2h} \left( 1 - \frac{r^2}{r_c^2} \right) & \text{si } 0 \leq r \leq r_c \\ \frac{P(r_m)}{\sigma_0} + \frac{r_m - r}{h} & \text{si } r_c \leq r \leq r_m \\ \exp\left[\frac{2\mu(R-r)}{h}\right] - \frac{2}{3} & \text{si } r_m \leq r \leq R \end{cases}$$

Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas:  
el caso de la alta presión

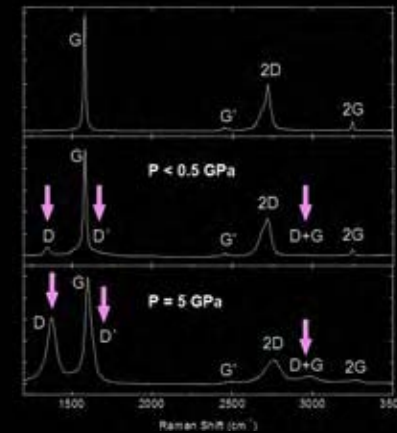
DAC (Diamond Anvil Cell)



Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas:  
el caso de la alta presión



- $\lambda = 668 \text{ \AA}$   $\lambda = 2.50 \mu\text{m}$   $\nu = 2.90 \text{ cm}^{-1}$
- $\lambda = 568 \text{ \AA}$   $\lambda = 2.46 \mu\text{m}$   $\nu = 1.90 \text{ cm}^{-1}$
- $\lambda = 468 \text{ \AA}$   $\lambda = 2.57 \mu\text{m}$   $\nu = 1.72 \text{ cm}^{-1}$
- $\lambda = 368 \text{ \AA}$   $\lambda = 4.00 \mu\text{m}$   $\nu = 1.41 \text{ cm}^{-1}$
- $\lambda = 268 \text{ \AA}$   $\lambda = 6.57 \mu\text{m}$   $\nu = 1.05 \text{ cm}^{-1}$
- $\lambda = 168 \text{ \AA}$   $\lambda = 12.00 \mu\text{m}$   $\nu = 0.52 \text{ cm}^{-1}$



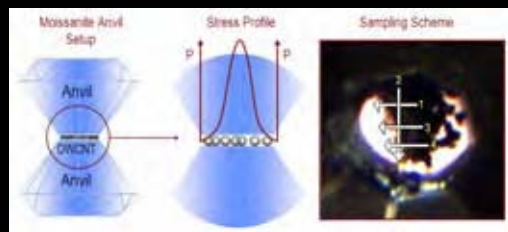
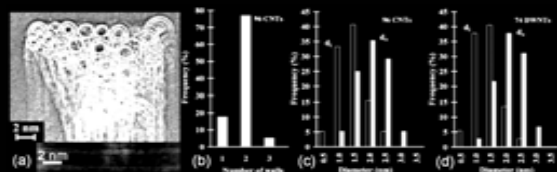




## Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas: el caso de la alta presión

SEMINARIOS  
CADEDIF

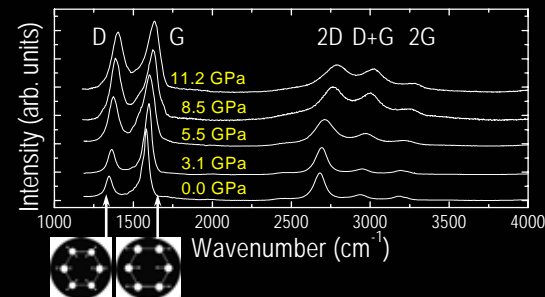
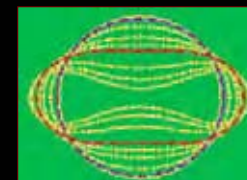
### DAC (Diamond Anvil Cell)



## Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas: el caso de la alta presión

SEMINARIOS  
CADEDIF

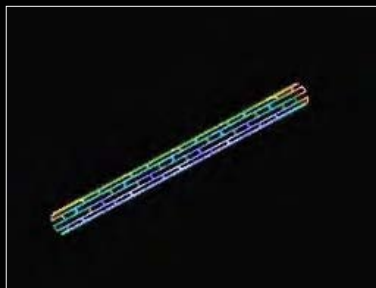
### DAC (Diamond Anvil Cell)



## Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas: el caso de la alta presión

SEMINARIOS  
CADEDIF

Los paquetes Multiphysics realizan simulaciones que involucran a diferentes modelos o fenómenos físicos simultáneos. Ejemplos: combinación cinética química/ mecánica de fluidos, elementos finitos con dinámica molecular, ... La realización de estos simulaciones normalmente involucra la solución de sistemas acoplados de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales.



## Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas: el caso de la alta presión

SEMINARIOS  
CADEDIF

### Finite Element Analysis

El método (o análisis) de elementos finitos (finite element analysis) es una técnica numérica para encontrar soluciones aproximadas de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales y de ecuaciones integrales.

**Posibilidades:** eliminación de la ecuación diferencial (steady state) o aproximando por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, que se integran numéricamente.

**Principal problema:** estabilidad numérica de la solución.

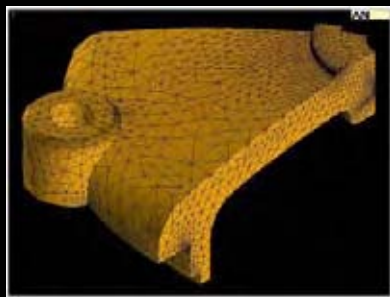
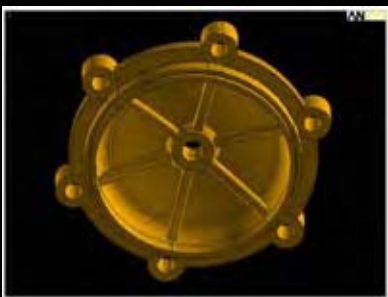
**Aplicaciones:** Diseño equipos, comportamiento mecánico, reacciones en estado sólido, transiciones de fase, ...





Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas:  
el caso de la alta presión

ANSYS



Pressure Equipment Engineering Services Inc.

www.peesi.com

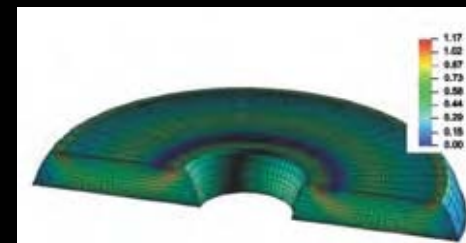
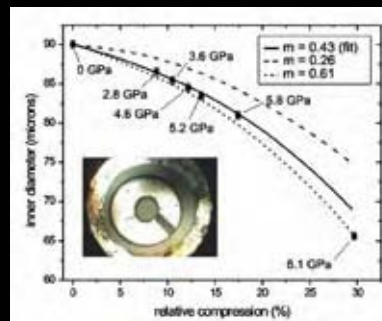


Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas:  
el caso de la alta presión

DAC (Diamond Anvil Cell)



A Lagrangian model was adopted and was executed with the code ALE3D ("arbitrary Lagrangian Eulerian mesh in 3 dimensions"). The code utilized a pressure/volume **equation of state** (in this case a Grüneisen model), and a **constitutive model** (Steinberg–Guinan). These relations were **strain-rate independent** and allowed for **strain and pressure hardening**.



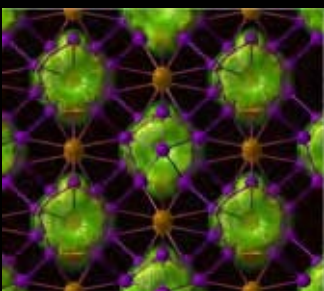
Applied Physics Letters, **85** 5188 (2004)



Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas:  
el caso de la alta presión

The New York Times (02/02/09)

Theory and Experiment Meet, and a New Form of Boron Is Found



Ionic high-pressure form of elemental boron



Nature 457, 863-867 (2009)

ab initio evolutionary crystal structure predictions



SEMINARIOS CADEDIF

Comportamiento Asintótico y Dinámica de Ecuaciones Diferenciales

Retos matemáticos en aplicaciones científico-tecnológicas:  
el caso de la alta presión



Valentín García Baonza  
Departamento de Química Física  
UCM

