



19^o
2

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

MODELO MATEMATICO DE SECADO
DE PARTICULAS ESFERICAS

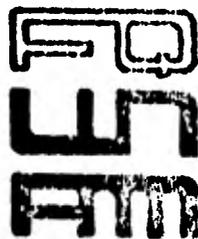
TESIS

que para obtener el titulo de
Ingeniero Quimico

Presenta

JUAN MANUEL ALFEREZ ESTRADA

México, D.F. 1982





Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

"MODELO MATEMATICO DE SECADO DE
PARTICULAS ESFERICAS"

T E S I S

JUAN MANUEL ALFEREZ ESTRADA

INGENIERO QUIMICO

1982



EXAMENES PROFESIONALES
FAC. DE QUIMICA

PRESIDENTE	<u>Roberto Andrade Cruz</u>
V O C A L	<u>Jorge Ramírez Solís</u>
SECRETARIO	<u>Rodolfo Mora Vallejo</u>
1er. SUPLENTE	<u>Mario Gonzalo Vizcarra Mendoza</u>
2do. SUPLENTE	<u>Carlos Guzmán de las Casas</u>

Sitio donde se desarrolló el Tema: FAC. DE QUIMICA UNAM

Nombre completo y firma del asesor del Tema: Jorge Ramírez Solís

Nombre completo y firma del sustentante: Juan Manuel López Estrada

I N D I C E

NOMENCLATURA	i
RESUMEN	iii
I Introducción	1
II Modelo Matemático	5
III Método de Solución	11
IV Resultados	18
V Discución	35
VI Conclusiones	44
Bibliografía	45
Apendice A	A-1
Apendice B	B-1
Apendice C	C-1
Apendice D	D-1

N O M E N C L A T U R A

- a Area de transferencia por unidad de volumen sólido (cm^2/cm^3)
- A Area de transferencia (cm^2)
- D Coeficiente de difusión (cm^2/min)
- Dp Diametro de la partícula (cm)
- h Coeficiente de transferencia de calor ($\text{cal}/\text{min. cm}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$)
- H Humedad en el sólido (Kg H₂O/Kg sol. seco)
- H° Humedad inicial (Kg H₂O/Kg sol. seco)
- H* Humedad en el equilibrio (Kg H₂O/Kg sol. seco)
- \tilde{H} Parámetro de humedad puntual en la partícula definido por -
(H - H*) / (H° - H*). Adimensional.
- $\langle \tilde{H} \rangle$ Valor promedio de \tilde{H}
- K Coeficiente de transferencia de masa (cm/min.)
- Kg Coeficiente de transferencia de masa $\frac{\text{Kg H}_2\text{O}}{\text{cm}^2 \text{ min}}$
- m m-ésimo punto experimental
- r Coordenada radial (cm)
- R Radio de la partícula (cm)

- Sh Biot. Número adimensional.
- t Tiempo (min).
- T Temperatura ($^{\circ}\text{C}$).
- Ts Temperatura de saturación ($^{\circ}\text{C}$).
- w Masa de Humedad (Kg).
- Y Humedad del aire (Kg H_2O /Kg aire seco).
- Ys Humedad de saturación del aire (Kg H_2O /Kg aire seco).
- β Parámetro adimensional del modelo definido por $\beta \cot \beta = 1 - \text{Sh}$.
- λ Calor latente (cal/Kg).
- ρ_s Densidad del sólido (Kg/cm³).
- θ Parámetro adimensional del modelo definido por tD/R^2 .

RESUMEN

Los trabajos de investigación en secado de sólidos han mostrado la existencia de tres periodos diferentes de velocidad de secado durante la operación:

1. Inicial, inestable y de corta duración,
2. velocidad de secado constante y
3. velocidad de secado decreciente.

Ninguna importancia práctica se le ha dado al primer periodo de secado debido a su corta duración. El segundo periodo ha sido explicado, estudiado y trabajado hasta ahora en forma satisfactoria. El tercer periodo ha sido objeto de arduos y tenaces estudios; así como, de diferentes especulaciones con los fenómenos que ocurren durante él. Es precisamente este último periodo, a quien está dirigida la atención del presente trabajo, cuyo objetivo es presentar un modelo matemático que lo describa satisfactoriamente. El modelo aquí planteado describe el secado llevado a cabo por el fenómeno de difusión de la humedad en el sólido.

La ecuación aquí presentada,

$$\frac{H - H^*}{H^0 - H^*} = \frac{6 \text{ Sh } e^{-\beta^2 Dt/R}}{\beta (\beta^2 + \text{Sh}(\text{Sh}-1))}$$

es solución de la segunda ley de Fick aplicada a partículas esféri-

cas en la que se han considerado las resistencias interna y externa a la transferencia de masa. Esta ecuación representa satisfactoriamente las curvas experimentales de secado, y aunque los valores obtenidos - para los coeficientes de difusión son comparables con los reportados en la literatura, el modelo no ofrece una precisión aceptable en el - estimado de dichos coeficientes.

I N T R O D U C C I O N

En forma general, por secado se entiende la eliminación de el agua contenida en un material. Sin embargo, como operación unitaria, el término se aplica no sólo a la eliminación del agua, sino también a la eliminación de cualquier líquido, debe igualmente hacerse notar que el -- término no se aplica a todos los medios de lograr dicha eliminación, - sino sólo al proceso de evaporar y remover respectivamente el líquido- y el vapor formado.

Diferentes equipos y mecanismos se han usado para realizar la opera--- ción. Perry (1) presenta una clasificación de ellos, dividiendolos en secadores directos e indirectos, dependiendo de la forma en que se proporciona el calor necesario para la evaporación de la humedad. Los -- más comunmente usados son los secadores rotatorios y los de lecho fluidizado. En ambos, la operación consiste en aplicar al sólido una co-- rriente de gas suficientemente caliente para suministrar el calor re-- querido y remover el vapor una vez que éste se ha formado.

Tres son los mecanismos importantes de transporte que se llevan a cabo durante el secado: la transferencia de calor del gas al sólido, transporte de masa del seno del sólido a la interfase sólido-gas y transporte de masa de la interfase sólido-gas al seno del gas. De la veloci-- dad de estos procesos dependerá la velocidad con que se lleve a cabo - el secado.

La experiencia ha inducido a considerar la existencia de tres periodos de velocidad durante el secado de un sólido:

1. **Periodo inicial.** En el inicio de la operación, el sólido alcanza la temperatura de bulbo húmedo correspondiente a las condiciones de operación y al sistema gas-vapor con el que se trabaja. Su duración es corta y por ello también poca es su importancia e influencia en la operación. En la práctica no se le considera.
2. **Periodo de Velocidad Constante.** Una vez que se ha alcanzado la temperatura de bulbo húmedo, se inicia el segundo periodo en el cual, la velocidad de secado se mantiene constante si las condiciones del gas utilizado se mantienen inalterables. En este periodo, se evapora solamente la humedad localizada sobre la superficie del sólido estableciéndose un equilibrio entre el calor transferido al material, y el calor consumido en la evaporación.

La masa de agua u otro líquido removida del sólido (la discusión es válida para cualquier líquido), está dada por el equilibrio dinámico de transferencia de masa y calor:

$$\frac{dw}{dt} = K_g A (Y_s - Y) = \frac{h A}{\lambda} (T - T_s) \quad (1)$$

y en términos de contenido de humedad en el sólido, se tiene:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{K_g a}{\rho_s} (Y_s - Y) = \frac{h a}{\rho_s \lambda} (T - T_s) \quad (2)$$

La velocidad de secado en este periodo de evaporación superficial depende entonces del coeficiente de transferencia de masa (o de calor) externo, del área de transferencia y de la diferencia de temperatura o humedad entre el gas de secado y la superficie húmeda del sólido.

3. **Periodo de Velocidad Decreciente.** Cuando la humedad de la película superficial ha sido evaporada, la velocidad de secado depende no solamente de los factores señalados en el párrafo anterior, sino también de la rapidez del movimiento de la humedad interna hacia la superficie externa del sólido. Este movimiento es quien impone el paso controlante de velocidad de secado, la cual decrece hasta hacerse nula si se alcanza la humedad de equilibrio del sólido correspondiente a la temperatura y humedad del gas empleado para secar.

La naturaleza del movimiento de la humedad en la fase sólida ha sido explicada a través de varias teorías, de entre las cuales, las que han sido de mayor aceptación son: la teoría de difusión, la teoría de flujo capilar y la teoría de evaporación-condensación.

La teoría de evaporación-condensación supone que el movimiento de la humedad se lleva a cabo en fase gaseosa dentro de los poros. Esta suposición es aceptable cuando existen gradientes de temperatura a través del sólido y cuando el calor se aplica por una de las caras del sólido a secar como es el caso de secado de tortas.

La teoría de flujo capilar supone que el movimiento es de la humedad

líquida a través de los poros sobre cuya superficie ocurre una atracción molecular sólido-líquido.

Kisakurek-Peck-Cakaloz (2) suponen que el mecanismo que controla el proceso de secado es el de flujo capilar y que el flujo de humedad por difusión es secundario; sin embargo, el modelo que presentan se desvía a bajas concentraciones de humedad y altas temperaturas, y creen entonces posible que sea el mecanismo de difusión quien controla el movimiento de humedad.

La teoría de difusión supone que el movimiento de la humedad a través del sólido, es debido a las diferencias de concentración que se presentan en el interior de sólido durante el secado, e identifica dichas diferencias como las fuerzas directrices para la difusión o el potencial que produce dicha difusión.

El presente trabajo presenta una solución analítica de la ecuación de difusión en la que se consideran las resistencias interna y superficial en el período de velocidad decreciente de secado. Se le aplica a datos experimentales para estimar coeficientes de difusión y de transferencia de masa y se analiza el comportamiento de los resultados ante diferentes condiciones de operación.

MODELO MATEMATICO

El modelo matemático que se presenta en este trabajo, es obtenido a través de la teoría de difusión, ésta establece que en un medio estacionario constituido por más de un componente cuyas concentraciones varían de un punto a otro en el espacio, se presenta una transferencia de masa de los puntos de alta concentración hacia los puntos de menor concentración, e indica, que el flujo de masa por unidad de -- área de transferencia es proporcional al gradiente de concentración.

La expresión matemática para este fenómeno es:

$$N = - D\bar{V}c \quad (2.1)$$

Donde:

- N = Flux de masa por difusión
- D = Coeficiente de difusión de masa
- V = Operador Nabla
- c = Concentración del componente difundiéndose

La expresión 2.1 desde el punto de vista de la teoría de difusión, es válida para un punto en el espacio.

En el proceso de secado de un sólido, la concentración de humedad en el mismo, varía con el tiempo. Igualmente los gradientes de concentración no se mantienen constantes, y el flujo entonces no es constante.

te, es decir, el secado es un proceso no estacionario. Para este tipo de procesos, la expresión de la variación de la concentración con respecto al tiempo debida al fenómeno de difusión es:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \nabla^2 c \quad (2.2)$$

expresión conocida como "Ecuación de Difusión", o "Segunda Ley de Fick". La expresión 2.1 es conocida como "Primera Ley de Fick" (3).

Las expresiones 2.1 y 2.2, son expresiones aplicables a cualquier sistema de coordenadas. En el presente trabajo, el modelo pretendido es para partículas esféricas, condición establecida para resolver la ecuación 2.2, pero que puede no ser limitante de la aplicabilidad del modelo al secado de partículas no esféricas si se considera la esfericidad (12) ó factor de disponibilidad de área (13) de dichas partículas.

La ecuación de difusión expresada para coordenadas esféricas es:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial c}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial c^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (2.3)$$

Que simplifica a:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{D}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c}{\partial r} \right) \quad (2.4)$$

para el caso de difusión exclusivamente radial.

De acuerdo a la nomenclatura que se seguirá en este trabajo, la expresión de la ecuación 2.4 es:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{D}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial H}{\partial r} \right) \quad (2.5)$$

Donde H es la concentración de humedad en el sólido.

El desarrollo de la solución presentada aquí de la ecuación 2.5 se presenta en el apéndice A.

El cambio de variable

$$U = r (H - H^*) \quad (2.6)$$

permite simplificar la ecuación 2.5 a:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = D \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \quad (2.7)$$

que es la forma más simple de la ecuación de difusión (4), y para la cual Crank (5) presenta varios métodos de solución.

En forma adimensional, la ecuación 2.7 se expresa por:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} \quad (2.8)$$

de acuerdo a la definición de las siguientes variables adimensionales:

$$\tilde{H} = \frac{H - H^*}{H^0 - H^*} \quad (2.9)$$

$$\theta = \frac{tD}{R^2} \quad (2.10)$$

$$\xi = \frac{r}{R} \quad (2.11)$$

$$\vartheta = \tilde{H} \xi \quad (2.12)$$

Es oportuno y necesario destacar que adelante solo r conserva su acepción de coordenada esférica dada por la ecuación 2.3, mientras que θ y ϑ estarán definidas por las ecuaciones 2.10 y 2.12 respectivamente.

Para la solución de la ecuación 2.8 se define el número de Biot por la relación

$$Sh = \frac{k R}{D} \quad (2.13)$$

Donde k es un coeficiente de transferencia de masa definido por

$$-D \left(\frac{\partial H}{\partial r} \right)_{r=R} = k (H - H^*) \Big|_{r=R} \quad (2.14)$$

Las ecuaciones 2.14 y 2.15 son condiciones a la frontera, y 2.16 condición inicial, condiciones que deberá satisfacer el modelo obtenido.

$$\left(\frac{\partial H}{\partial r} \right)_{r=0} = 0 \quad \text{para } t > 0 \quad 2.15$$

$$H = H^0 \quad \text{para } t = 0, \text{ y } \forall r \quad (2.16)$$

Considerando las definiciones 2.9, 2.10, 2.11, 2.12 y 2.13, las condiciones inicial y a la frontera para la solución de 2.8 son:

de 2.16 se tiene:

$$\vartheta = \xi \quad \text{para } \theta = 0 \quad (2.17)$$

de 2.15 se tiene:

$$\left(\frac{\partial (\theta / \xi)}{\partial \xi} \right)_{\xi=0} = 0 \quad \text{para } \theta > 0 \quad (2.18)$$

De 2.14 se tiene:

$$-\left(\frac{\partial(\theta/\xi)}{\partial\xi}\right)_{\xi=1} = \text{Sh}(\theta/\xi) \quad (2.19)$$

Las condiciones anteriores conducen a la solución general de 2.8 dada por:

$$\phi = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{sen}(\beta_n \xi)}{\text{sen} \beta_n} \frac{2 \text{Sh} e^{-\beta_n^2 \theta}}{(\beta_n^2 + \text{Sh}(\text{Sh}-1))} \quad (2.20)$$

Donde las β_n 's son las raíces de

$$\beta_n \cot \beta_n = 1 - \text{Sh} \quad (2.21)$$

Esta expresión permite conocer los diferentes valores de ϕ en la dirección radial mediante la variable $\xi = r/R$, así como los diferentes valores de ϕ en función del tiempo mediante la variable $\theta = (D/R^2)t$. Sin embargo, esta expresión de ϕ que da valores de humedad puntual, no es útil en la práctica donde se requiere conocer más que la distribución, el contenido total de humedad en el sólido, por lo que es más útil obtener la expresión del valor medio de \tilde{H} , dado para una partícula esférica por:

$$\langle \tilde{H} \rangle = \frac{\int_0^R 4 \pi r^2 \tilde{H} dr}{\int_0^R 4 \pi r^2 dr} \quad (2.22)$$

6

$$\langle \tilde{H} \rangle = \frac{\int_0^1 4 \pi \xi^2 \tilde{H} d\xi}{(4/3) \pi} \quad (2.23)$$

Y usando 2.12 en 2.23:

$$\langle \tilde{H} \rangle = 3 \int_0^1 \xi \phi d\xi \quad (2.24)$$

Sustituyendo 2.20 en 2.24, y resolviendo la integral se obtiene finalmente:

$$\langle \tilde{H} \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{6 \operatorname{sh}^2 \exp(-\beta_n^2 \theta)}{\beta_n^2 (\beta_n^2 + \operatorname{Sh}(\operatorname{Sh}-1))} \quad (2.25)$$

que es la expresión del modelo matemático que sirve de base para el trabajo desarrollado en los siguientes capítulos.

Conviene tener presente las consideraciones hechas aquí para obtener 2.25:

- i) La ecuación de difusión 2.2 es el punto de partida, esta ecuación considera a D (coeficiente de difusión o de difusividad) constante.
- ii) La difusión es únicamente en la dirección radial (ecuación 2.5).
- iii) Al inicio de la operación de secado, la humedad es uniforme en el sólido (ecuación 2.16).
- iv) En el centro de la partícula, la humedad es máxima durante el secado (ecuación 2.15).
- v) El flujo por unidad de área en la superficie de la partícula, es proporcional a la diferencia de la humedad en la superficie del sólido y la humedad de equilibrio (ecuación 2.14).

METODO DE SOLUCION

La ecuación 2.25 representa la curva de secado tiempo-humedad útil - para predecir el tiempo de secado cuando el coeficiente de difusión y el número de Sherwood son conocidos. En la práctica, el Ingeniero o el Químico deberá de llevar a cabo una serie de ensayos para determinar las condiciones apropiadas para realizar el secado. Es en esta etapa y después de ésta, cuando se destaca la utilidad de un modelo matemático que describa el fenómeno de secado; modelo que deberá permitir predecir el tiempo necesario a que ha de someterse el sólido a la operación de secado para que éste alcance el grado de humedad requerido ya como producto final o como producto intermedio.

La determinación de los coeficientes definidos por 2.1 y 2.14, habrá de realizarse mediante una de las técnicas de estimación de parámetros por mínimos cuadrados (6) (7), es decir, determinar el valor de los parámetros adecuados del modelo tales que el valor de

$$F = \sum_{m=1}^p (\tilde{H}_m - \langle \tilde{H} \rangle_m)^2 \quad (3.1)$$

sea mínimo.

\tilde{H}_m está dado por la ecuación 2.9 y calculado a partir de valores experimentales.

$\langle \tilde{H} \rangle$ es el modelo matemático dado por la ecuación 2.25; sustituyendo ésta, y 2.9 en 2.1 se tiene la expresión:

$$F = \sum_{m=1}^p \left(\frac{H_m - H^*}{H^o - H^*} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{6 Sh^2 \exp(-\beta n^2 \theta_m)}{\beta_n^2 (\beta_n^2 + Sh (Sh-1))} \right)^2 \quad (3.2)$$

la cual debe minimizarse bajo las siguientes restricciones:

$$\beta_n \cot(\beta_n) + Sh - 1 = 0 \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.3)$$

$$(n-1)\pi < \beta_n < n\pi \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.4)$$

Es además, condición necesaria que 2.25 sea convergente. De los datos reportados por Vizcarra (8), $Sh \ll 1$, por lo que 2.25 para su análisis, se puede simplificar a:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\beta_n^4 \exp(\beta_n^2 \theta)} \quad (3.5)$$

Ahora bien, si n aumenta, entonces β_n aumenta; por comparación como $\sum_{n=1}^{\infty} 1/n^2$ converge, entonces 3.5 converge; por lo tanto, 2.25 es también convergente. Una observación más que se obtiene usando los valores de Sh reportados por Vizcarra (8), es que se pueden despreciar en 2.25 los términos para $n \geq 2$; ello se debe a que cada elemento de la suma, es del orden de 10^{-2} veces el término anterior, es decir; el segundo término de la sumatoria es del orden de cien veces más pequeño que el primer término, el tercero es del orden de cien veces más pequeño que el segundo y así, sucesivamente. Esto permite simplificar 3.2, 3.3 y 3.4 a

$$F = \sum_{m=1}^p \left(\frac{H_m - H^*}{H^o - h^*} - \frac{6 Sh^2 \exp(-\beta^2 \theta_m)}{\beta^2 (\beta^2 + Sh(Sh-1))} \right)^2 \quad (3.6)$$

$$\beta \cot(\beta) + Sh - 1 = 0 \quad (3.7)$$

$$0 < \beta < \pi \quad (3.8)$$

Los parámetros de interés en el modelo matemático son: el coeficiente de transferencia de masa k , y el coeficiente de difusión D . Sin embargo, de los dos, solo D es uno de los parámetros apropiados a considerar como independientes durante el proceso de minimización de 3.6. El otro parámetro adecuado es β , del cual, 3.8 da y limita el intervalo de valores factibles para él. Los parámetros β , Sh y k , están relacionados entre sí, por las expresiones 2.13 y 3.7, de donde se deduce que solo uno de ellos podrá tomarse como independiente; el considerar de los tres a β como independiente, garantizará menor consumo de tiempo por la computadora, pues el seleccionar al Sh o al coeficiente k como independiente, implicaría obtener por iteraciones el valor de β utilizando la ecuación 3.7 y posteriormente, se requeriría hacer la prueba de que el valor así obtenido de β satisfaga la condición 3.8.

En conclusión, el problema es minimizar 3.6 en función de los parámetros D y β con θ_m definido de acuerdo a 2.10 por

$$\theta_m = \frac{\beta^2 n D t_m}{R^2} \quad (3.9)$$

y sujeta la minimización a las condiciones 3.7 y 3.8.

En forma general, el problema se puede expresar como:

$$\text{minimizar } f(X) \quad (3.10)$$

$$\text{sujeto a } g_k \leq x_k \leq h_k \quad K = 1, 2, \dots, m \quad (3.11)$$

$$\text{donde: } X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$$

n = Número de variables independientes

m = Número de restricciones; $m \geq n$

g_k = Límite inferior de k -ésima variable

h_k = Límite superior de la k -ésima variable

El método de solución empleado en este trabajo y que a continuación se describe, es el método "Complex" desarrollado por M.J. Box (9):

- i) En el arranque de la búsqueda del mínimo se requiere de un punto inicial $X^0 = (x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0)$ que satisfaga todas las restricciones de 3.11, es decir, X^0 debe estar en la región factible de 3.10.
- ii) El método emplea K puntos del espacio vectorial al que pertenece X , donde:

$$K \geq n+1 \quad (3.12)$$

y donde los $K-1$ puntos adicionales para la configuración inicial "complex", son obtenidos uno a uno en forma pseudoaleatoria por

$$x_i = g_i + r_i (h_i - g_i) \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3.13)$$

donde g_i y h_i son los límites de la i -ésima variable independiente, definidos por 3.11 y r_i es un número pseudo-aleatorio en el intervalo $(0,1)$; un punto así obtenido debe satisfacer las restricciones explícitas, pero no necesariamente las restricciones

implícitas $g_k \leq x_k \leq h_k$, donde $k = n + 1, \dots, m$.

- iii) Si no se cumple una restricción implícita, el punto en prueba se mueve a la mitad del intervalo entre él y el centroide del resto de los puntos. Al inicio el centroide es X^0 .
- iv) La función objetivo $f(X)$ es evaluada en cada punto.
- v) Se comparan los valores obtenidos en iv), y se determina el punto para el cual $f(X)$ es más alto; este punto se rechaza.
- vi) Se determina el centroide del resto de los puntos con:

$$x_i^C = \frac{1}{K-1} \left[\sum_{j=1}^K x_i^j - x_i^R \right] \quad (3.14)$$

donde:

- x_i^C = Valor en el centroide de la i -ésima variable independiente.
- K = Número de puntos que constituyen la configuración "complex".
- x_i^j = Valor de la i -ésima variable independiente en el j -ésimo punto.
- x_i^R = Valor de la i -ésima variable independiente en el punto rechazado.

- vii) El punto rechazado se sustituye por un punto proyectado del cen

troide a la dirección contraria del punto eliminado. La distancia del nuevo punto al centroide es α veces la distancia del punto rechazado al centroide. El nuevo punto se determina por:

$$x_i^N = \alpha (x_i^C - x_i^R) + x_i^C \quad (3.15)$$

donde:

x_i^N = i -ésima variable independiente en el nuevo punto x^N

α = Factor de reflexión.

viii) Si el nuevo punto no satisface una de las restricciones explícitas $g_k \leq x_k \leq h_k$ donde $k = 1, 2, \dots, n$, la variable cuya restricción no se cumple es redefinida por un valor factible mediante

$$x_i^N = L (1 \pm \epsilon) \quad (3.16)$$

donde:

L = Límite g_i o h_i que ha sido sobrepasado.

ϵ = Cantidad suficientemente pequeña $\epsilon \ll 1$.

ix) Si el valor de $f(x^N)$ es el más alto de la nueva configuración - "complex", se procede entonces a reducir a la mitad la distancia que hay entre este punto x^N y el centroide x^C :

$$x_i^N = \frac{1}{2} (x_i^N + x_i^C) \quad (3.17)$$

El proceso se repite desde el paso iii), hasta que la configuración "complex" se reduce esencialmente al centroide. En el apéndice B, se muestra una codificación en Fortran para la aplicación de este método.

parámetros calculados para el modelo matemático dado por

En las figuras 4.1 a 4.15, se presentan las gráficas de las curvas -
teóricas dadas por la ecuación 2.25 (despreciando los términos de -
 $n > 1$), y los puntos experimentales tomados del trabajo de Vizcarra.
Una tabulación más completa de los datos de Vizcarra se presentan en
el Apéndice C.

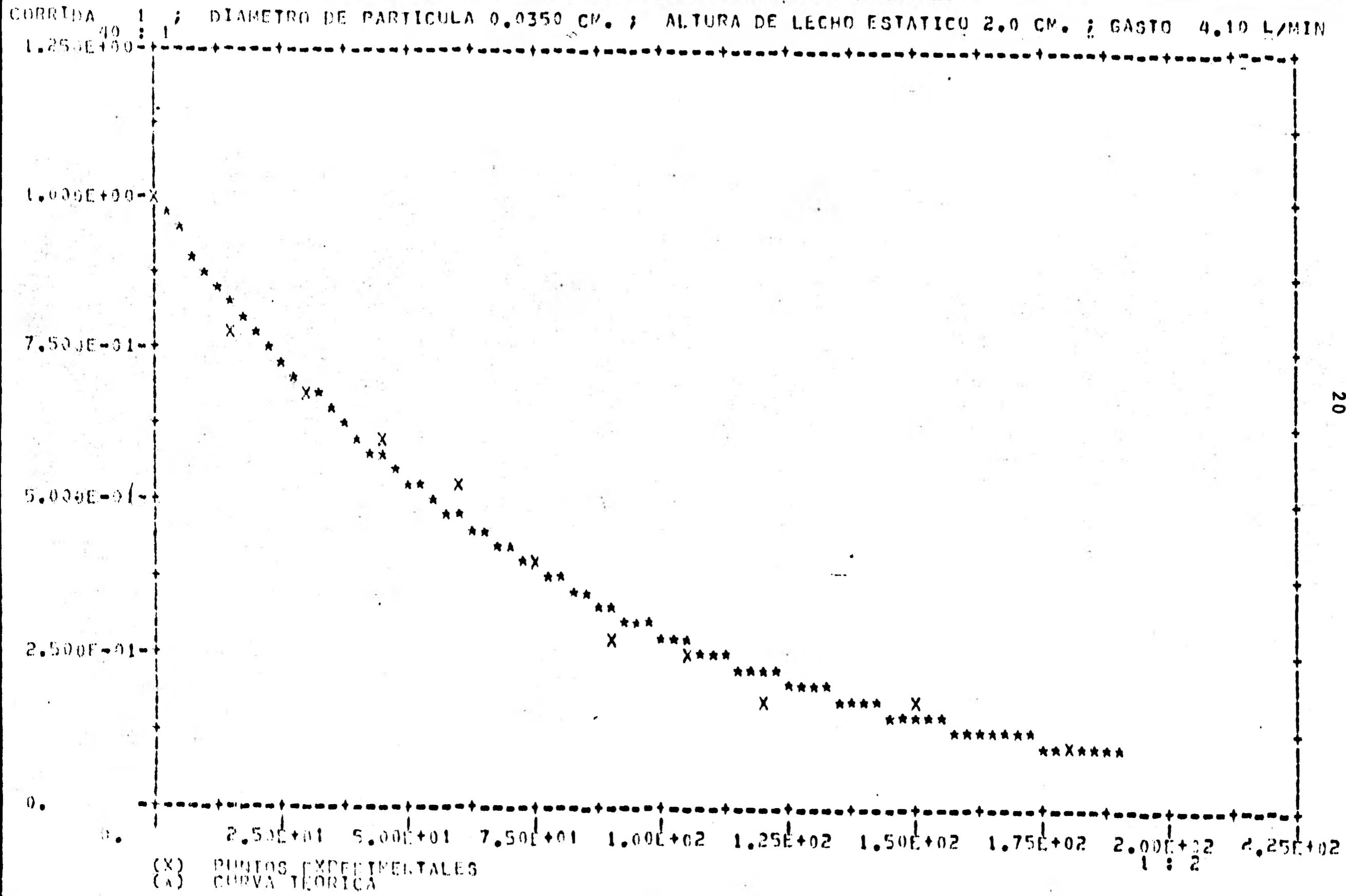
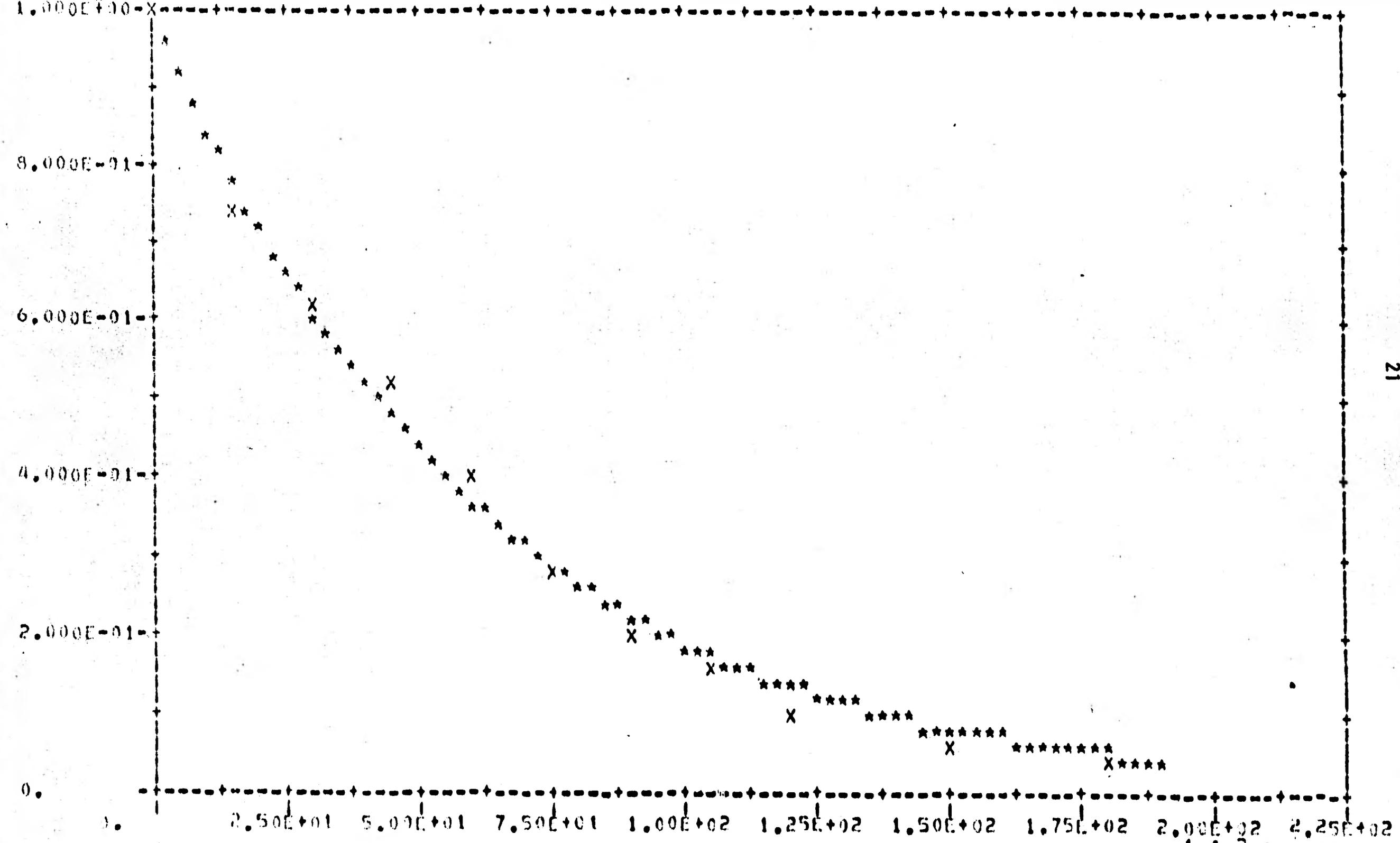


FIGURA 4.1

TIEMPO (MIN.) VS HUMEDAD ADIMENSIONAL $(H-H_E / H_1-H_E)$

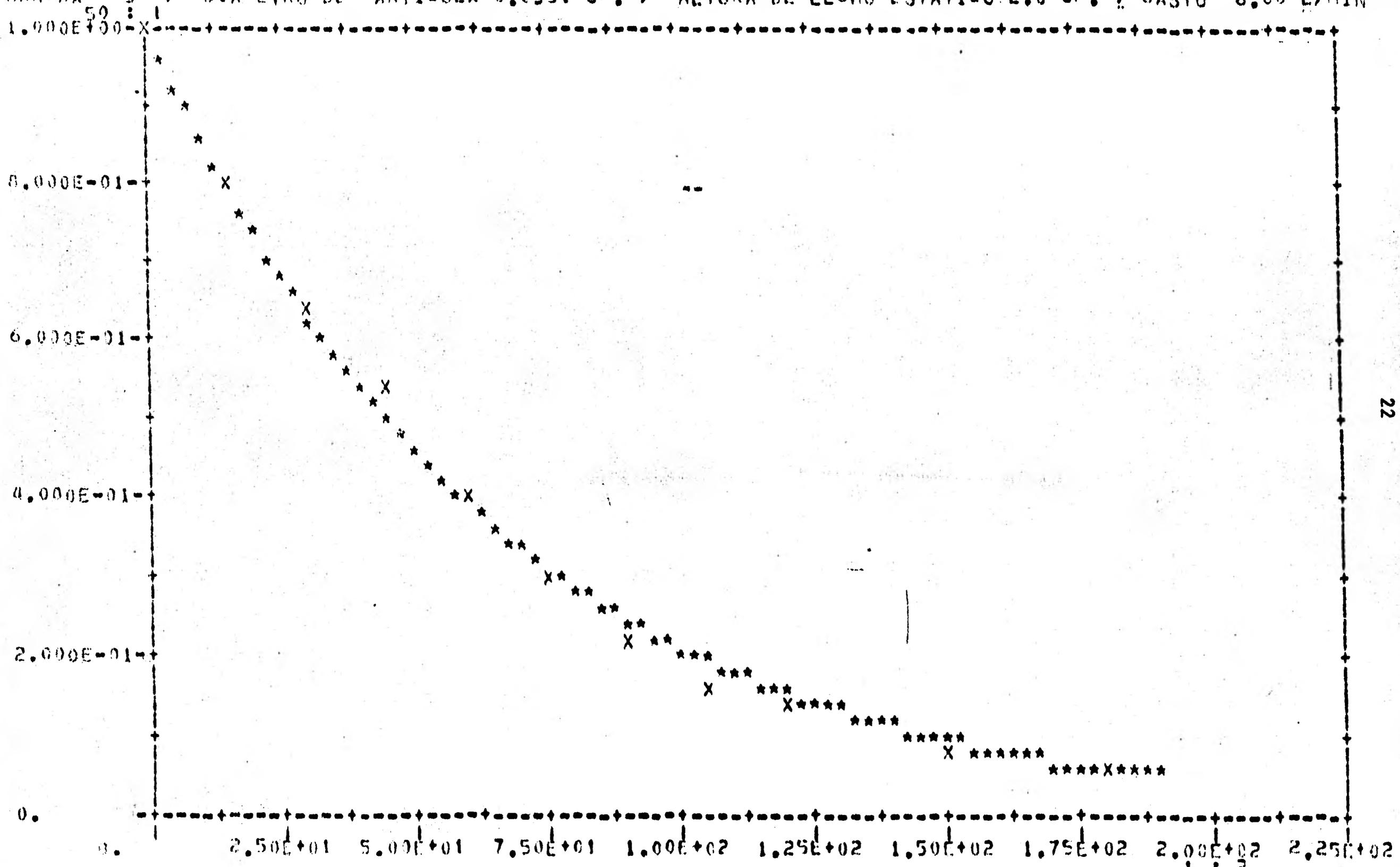
COBERTURA 2 ; DIAMETRO DE PARTICULA 0.0350 CM. ; ALTURA DE LECHO ESTADICO 2.0 CM. ; GASTO 5.40 L/MIN



(X) PUNTOS EXPERIMENTALES
 (*) CURVA TEORICA

FIGURA 4.2

CORRIDA 3 ; DIAMETRO DE PARTICULA 0.0350 CM. ; ALTURA DE LECHO ESTATICO 2.0 CM. ; GASTO 6.80 L/MIN

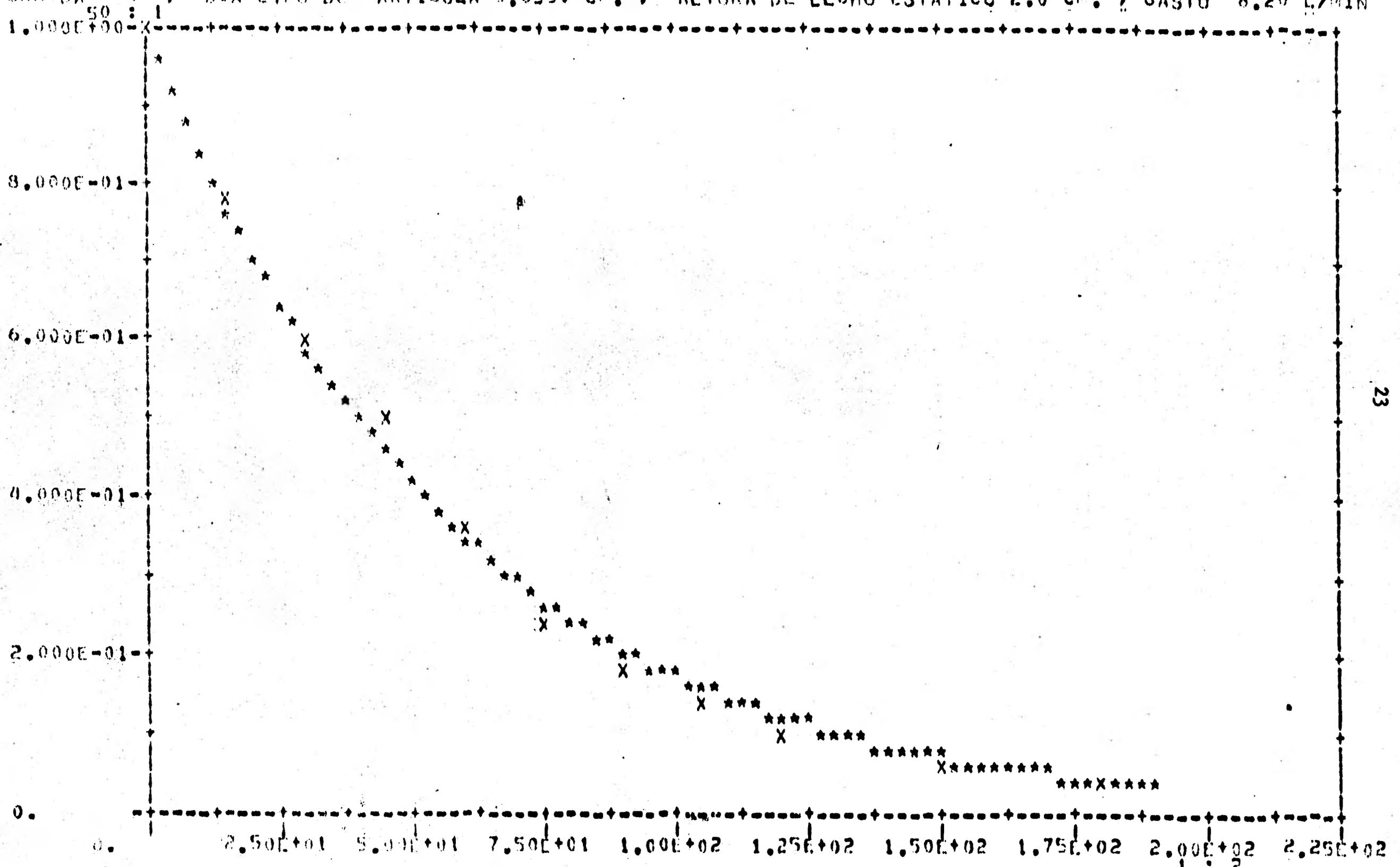


(X) PUNTOS EXPERIMENTALES
 (*) CURVA TEORICA

FIGURA 4.3

TIEMPO (MIN.) VS FUGA DIMENSIONAL (H-HE / HI-HE)

CORRIDA 4 ; DIAMETRO DE PARTICULA 0.0350 CM. ; ALTURA DE LECHO ESTADICO 2.0 CM. ; GASTO 8.20 L/MIN

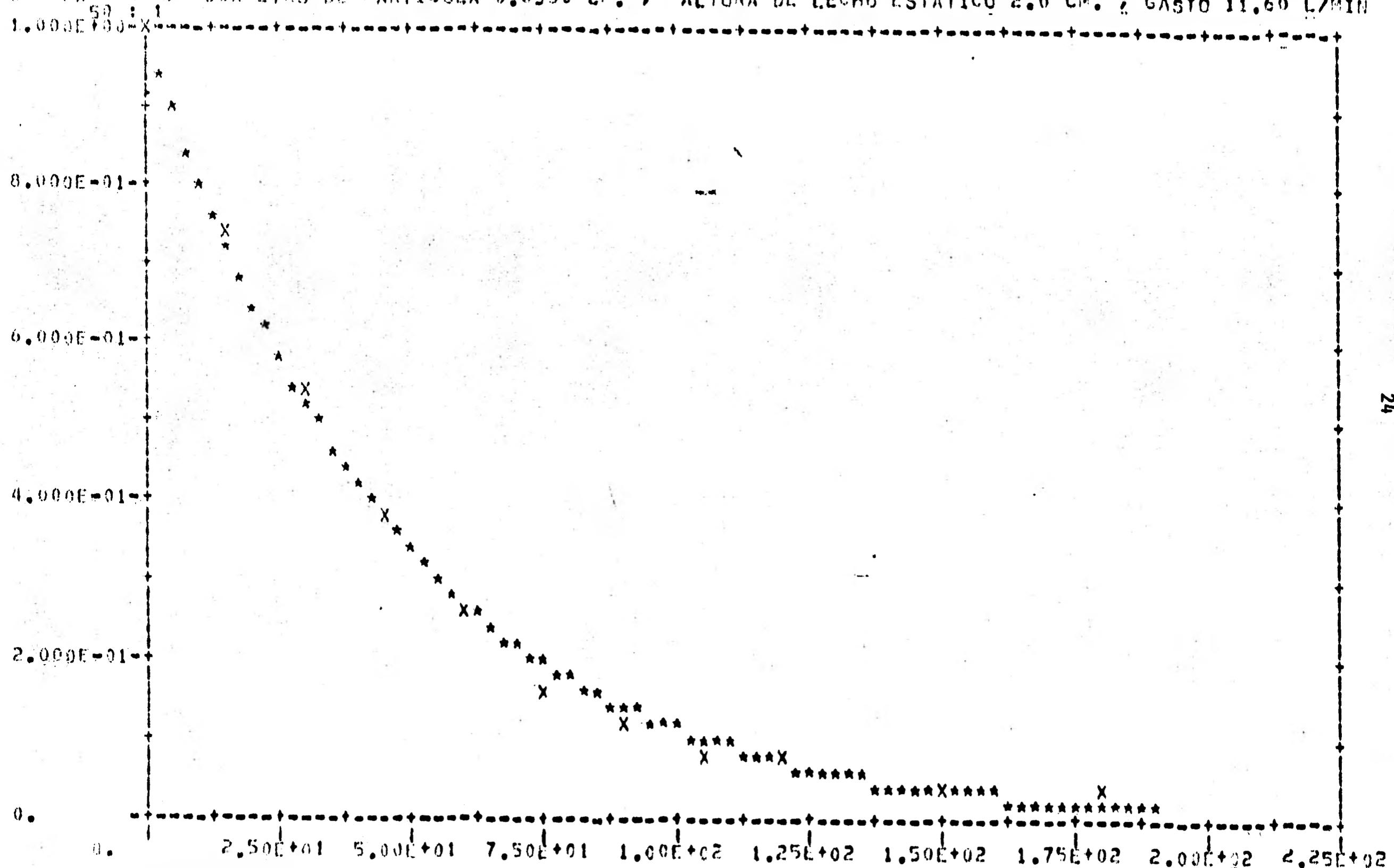


(X) PUNTOS EXPERIMENTALES
 (*) CURVA TEORICA

FIGURA 4.4

TIEMPO (MIN.) VS HUEVEDAD ADIMENSIONAL ($H-H_0 / H_1-H_0$)

CORRIDA 5 ; DIAMETRO DE PARTICULA 0.0350 CM. ; ALTURA DE LECHO ESTATICO 2.0 CM. ; GASTO 11.60 L/MIN

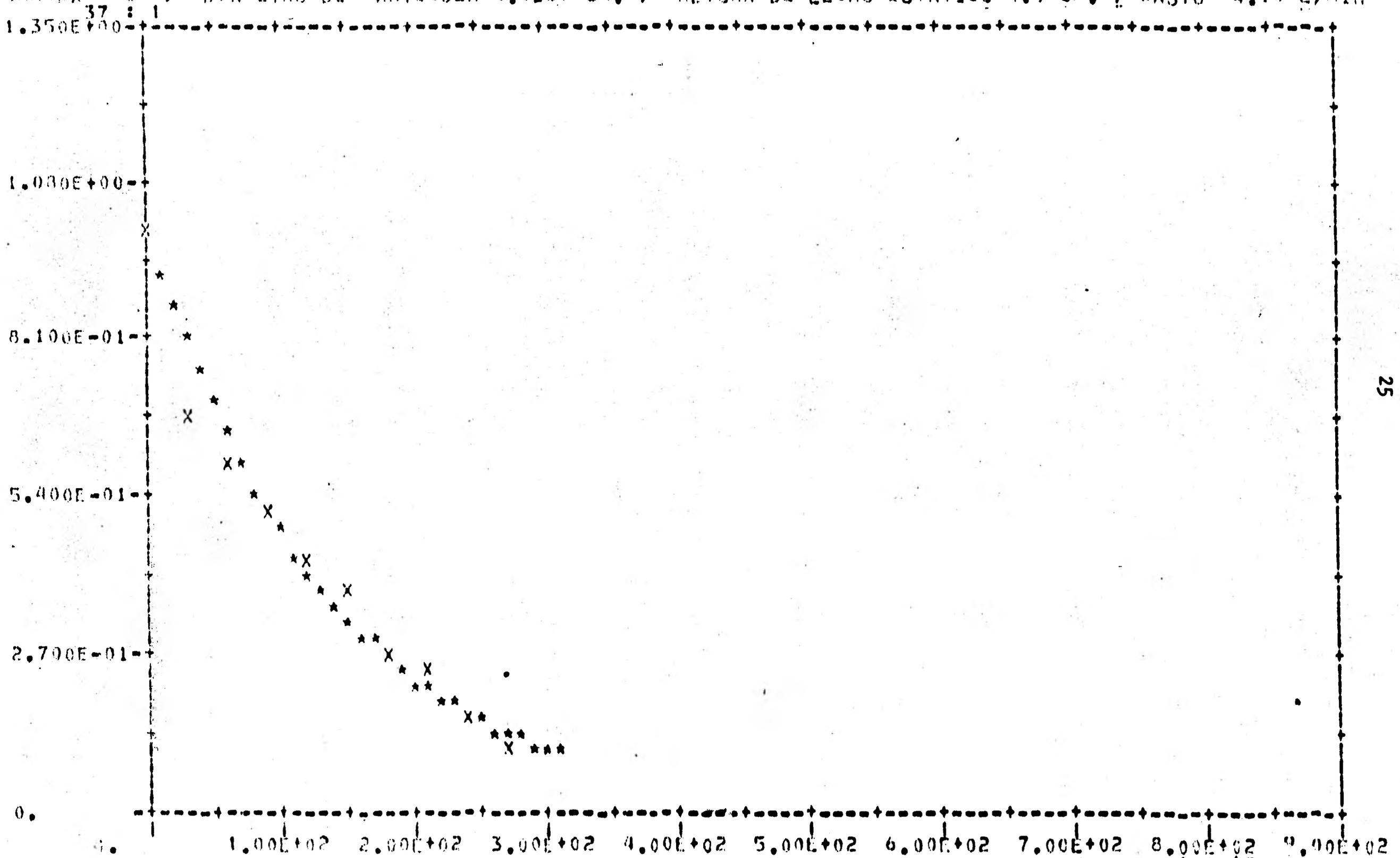


(X) PUNTOS EXPERIMENTALES
 (*) CURVA TEORICA

FIGURA 4.5

TIEMPO (MIN.) VS HUMEDAD ADIMENSIONAL (H-HE / HI-HE)

CORRIDA 6 ; DIAMETRO DE PARTICULA 0.0350 CM. ; ALTURA DE LECHO ESTATICO 4.0 CM. ; GASTO 4.10 L/MIN

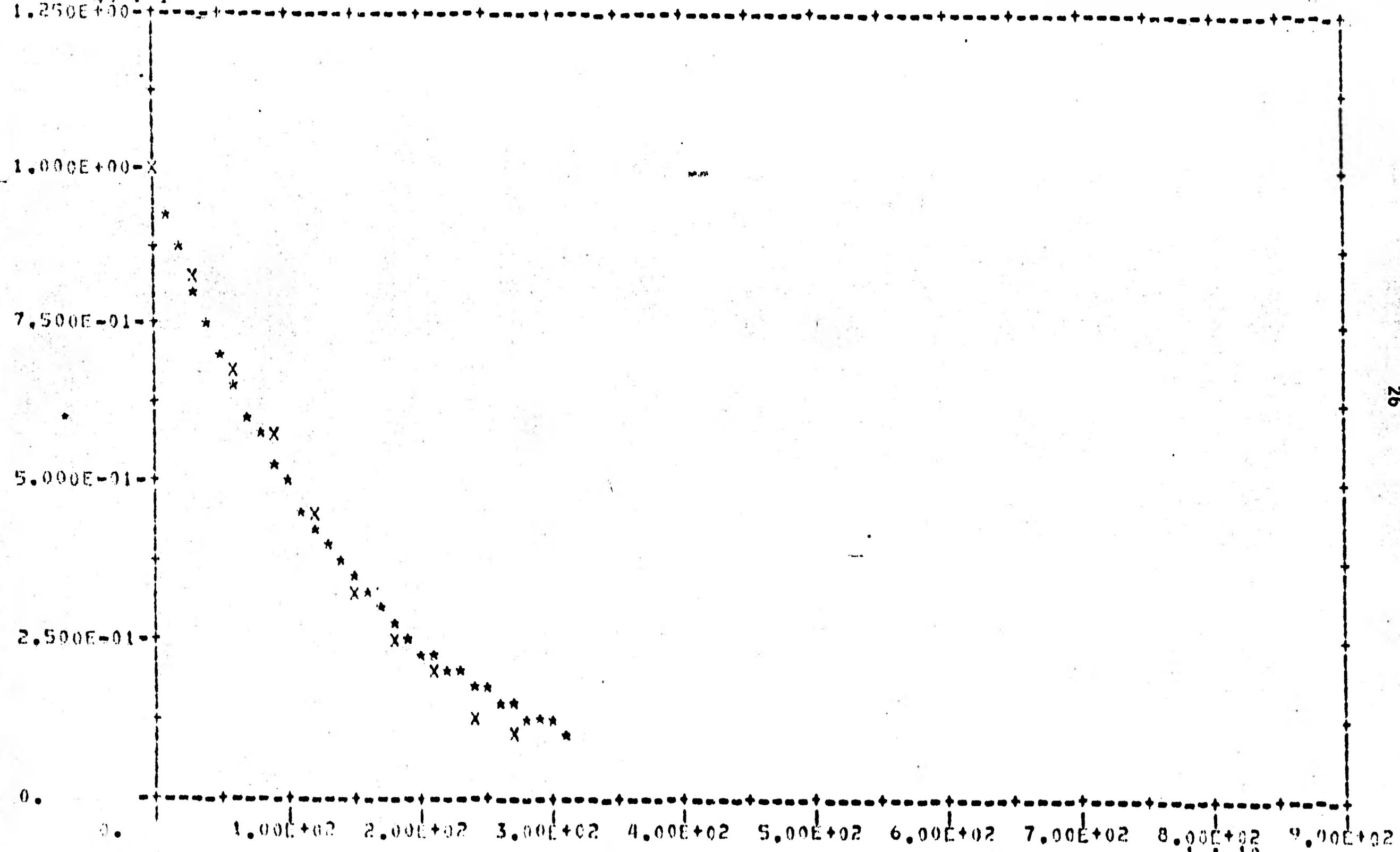


(X) PUNTOS EXPERIMENTALES
(*) CURVA TEORICA

FIGURA 4.6

TIEMPO (MIN.) VS HUMEDAD ADIMENSIONAL (H-HE / HI-HE)

CORRIDA 7 ; DIAMETRO DE PARTICULA 0.0350 CM. ; ALTURA DE LECHO ESTATICO 4.0 CM. ; GASTO 5.40 L/MIN

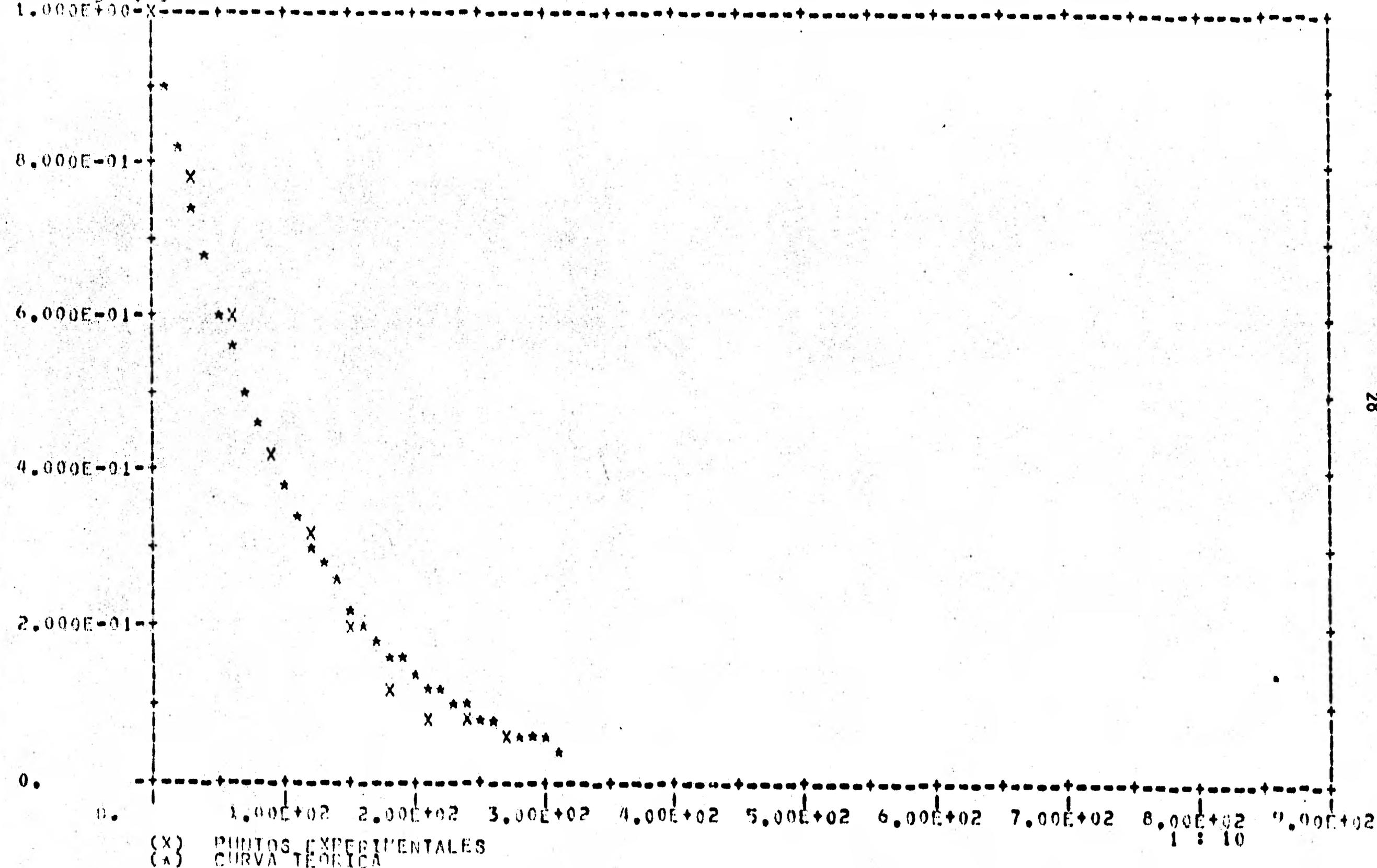


(X) PUNTOS EXPERIMENTALES
 (*) CURVA TEORICA

FIGURA 4.7

TIEMPO (MIN.) VS HUMEDAD ADIMENSIONAL $(H - H_E) / (H_I - H_E)$

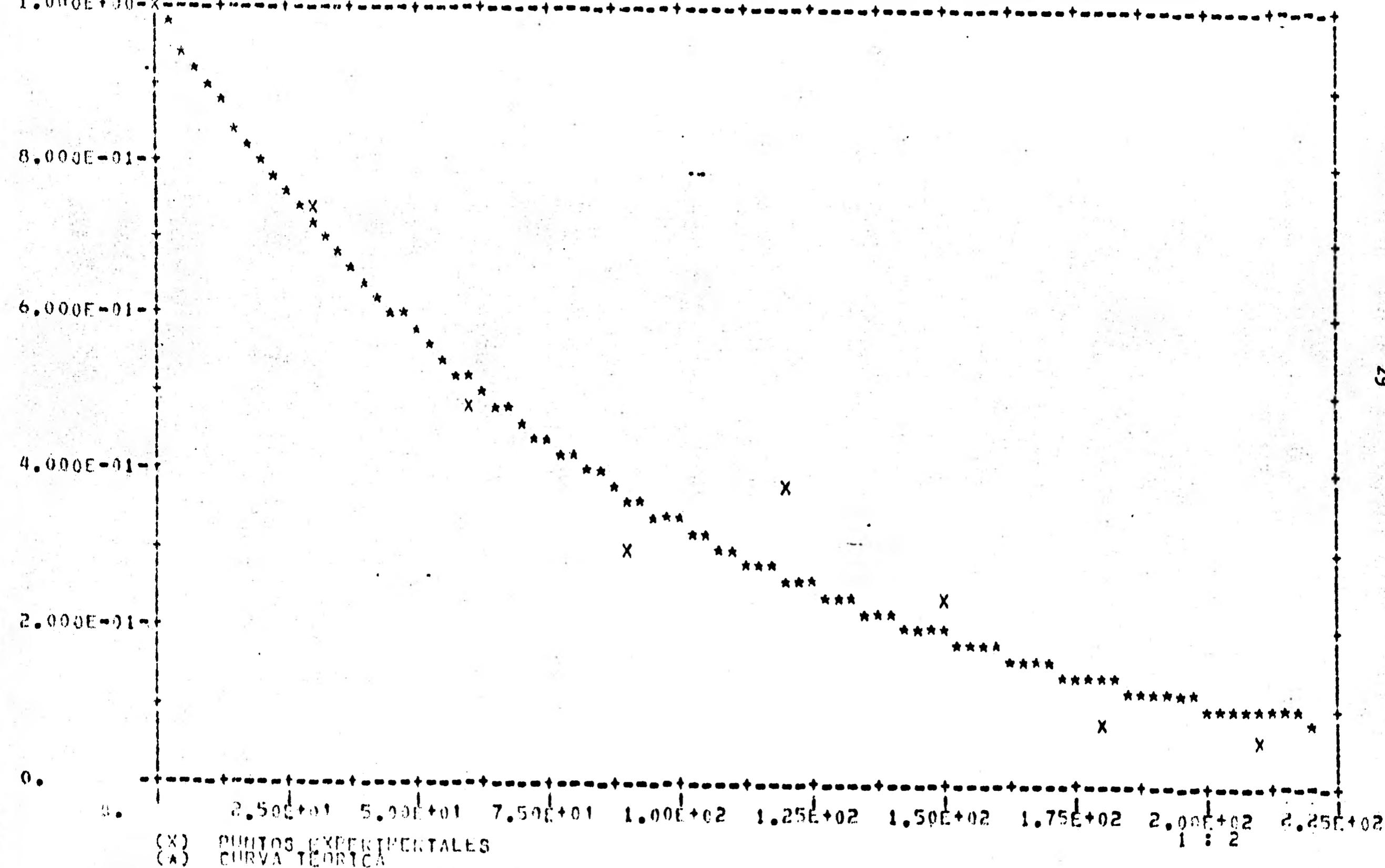
CORRIDA 50 : 1 ; DIAMETRO DE PARTICULA 0.0350 CM. ; ALTURA DE LECHO ESTATICO 4.0 CM. ; GASTO 8.20 L/MIN



(X) PUNTOS EXPERIMENTALES
 (*) CURVA TEORICA

FIGURA 4.9

CORRIDA 10 ; DIAMETRO DE PARTICULA 0.0350 CM. ; ALTURA DE LECHO ESTATICO 4.0 CM. ; GASTO 11.60 L/MIN



(X) PUNTOS EXPERIMENTALES
(*) CURVA TEORICA

FIGURA 4.10

TIEMPO (MIN.) VS HUMEDAD ADIMENSIONAL (H-HE / HI-HE)

CORRIDA 11 ; DIAMETRO DE PARTICULA 0.0350 CM. ; ALTURA DE LECHO ESTATICO 7.6 CM. ; GASTO 4.10 L/MIN

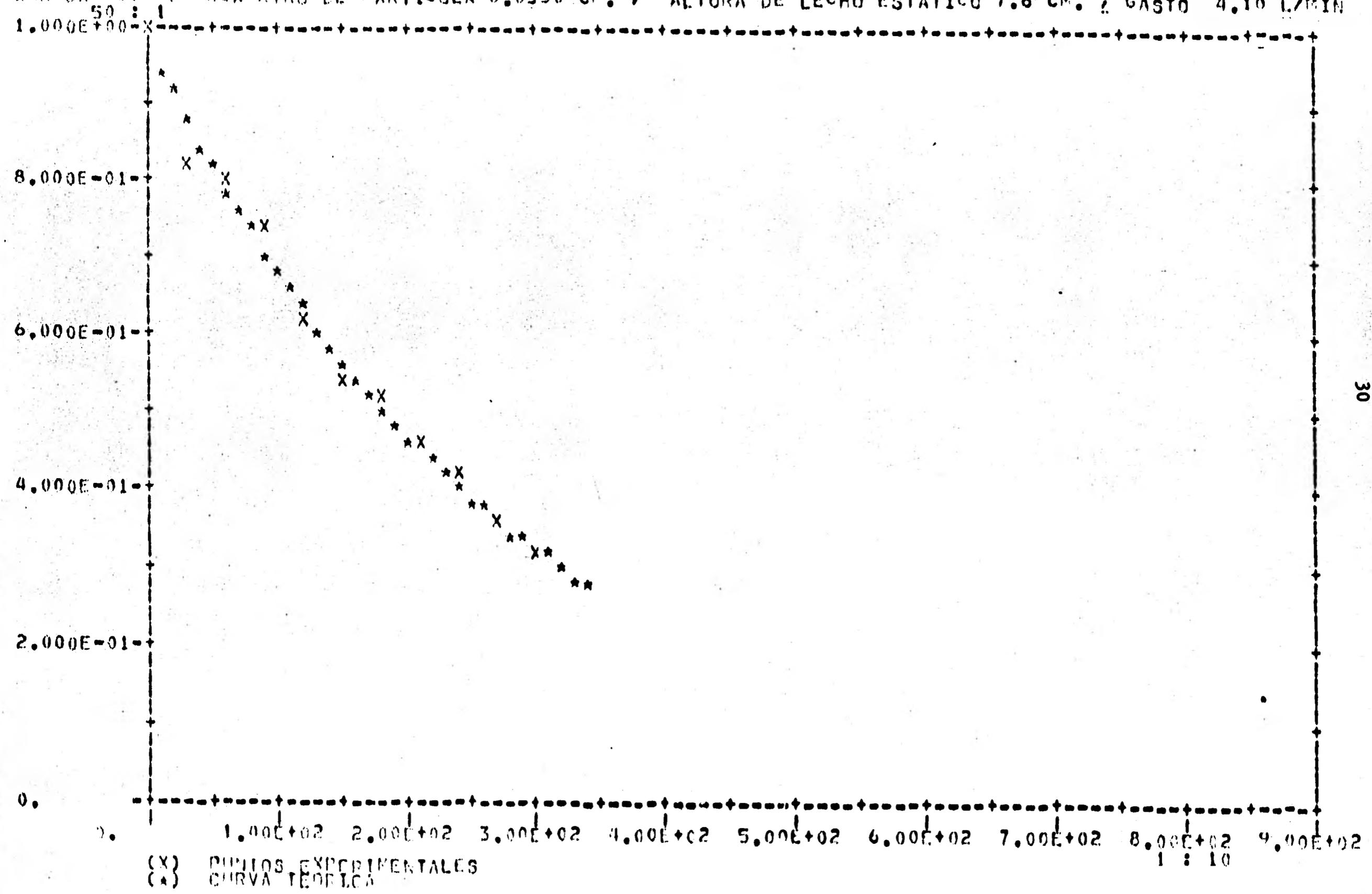
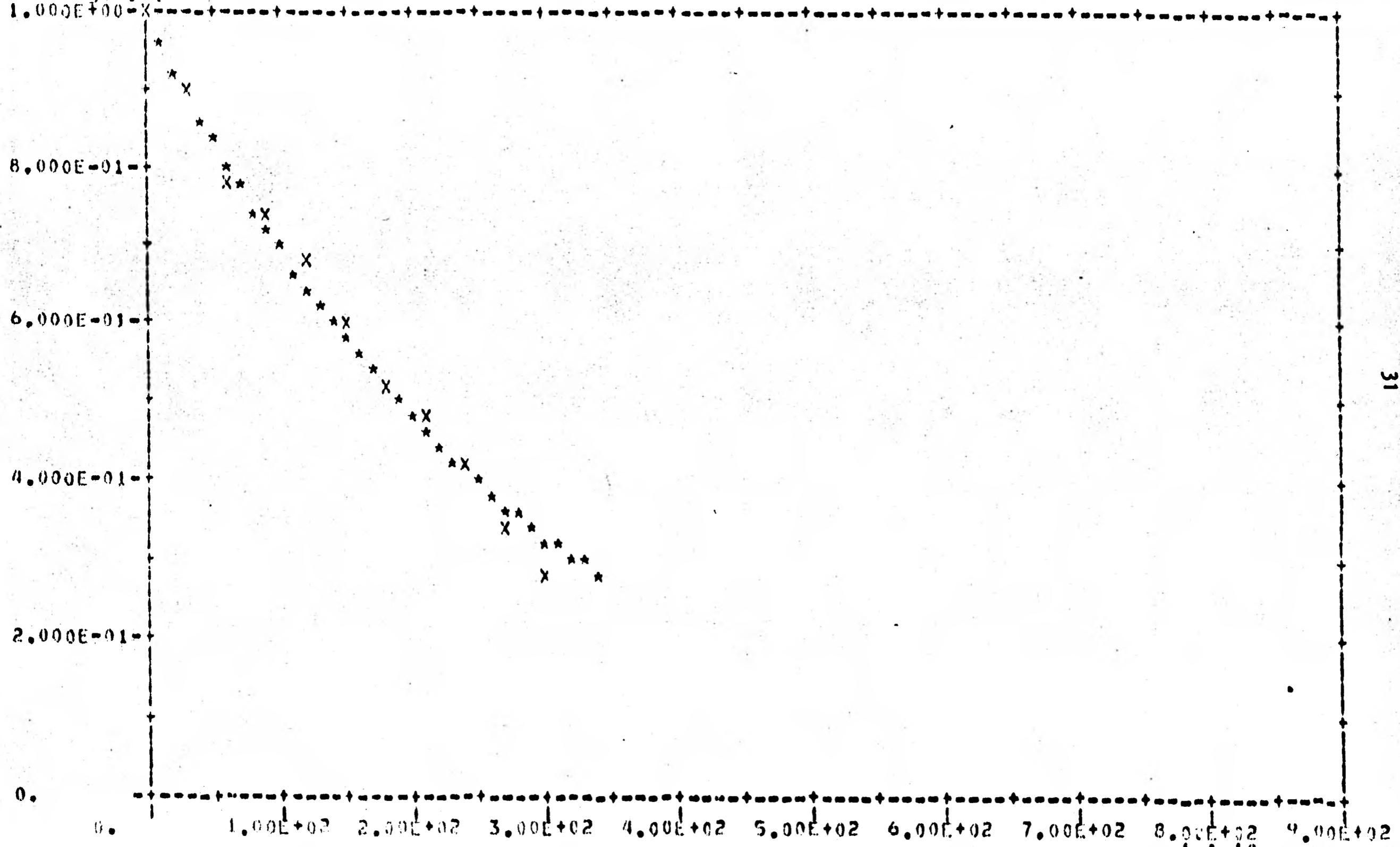


FIGURA 4.11

TIEMPO (MIN.) VS HUEVEDAD ADIMENSIONAL $(H-H_E / H_I-H_E)$

CORRIDA 12 ; DIAMETRO DE PARTICULA 0.0350 CM. ; ALTURA DE LECHO ESTATICO 7.6 CM. ; GASTO 5.40 L/MIN



(X) PUNTOS EXPERIMENTALES
 (*) CURVA TEORICA

FIGURA 4.12

TIEMPO (MIN.) VS HUMEDAD ADIMENSIONAL (H-H_E / H_I-H_E)

CORRIDA 13 ; DIAMETRO DE PARTICULA 0.0350 CM. ; ALTURA DE LECHO ESTATICO 7.6 CM. ; GASTO 6.80 L./MIN

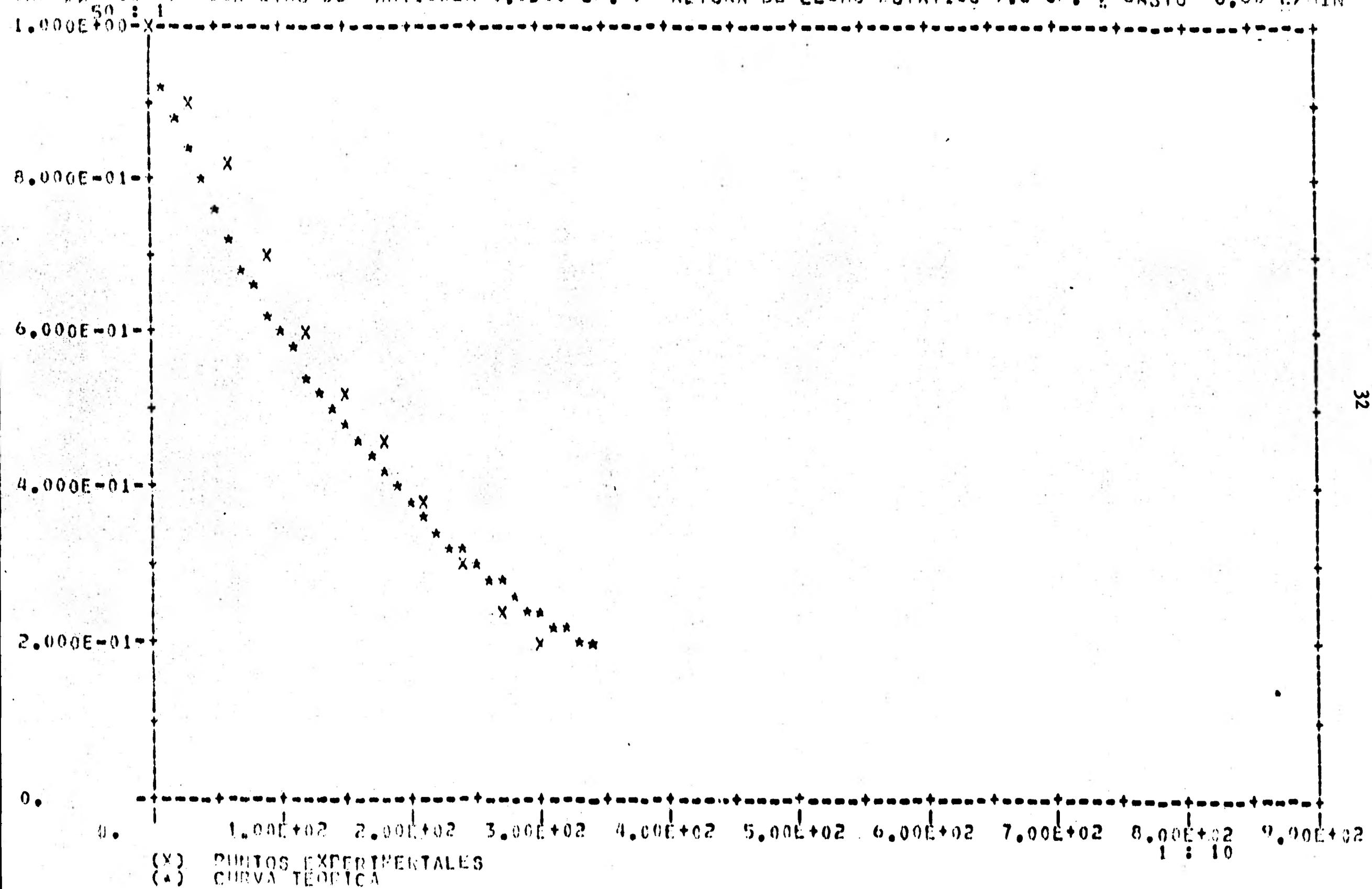


FIGURA 4.13

TIEMPO (MIN.) VS FUGA ADIMENSIONAL (H-HE / HI-HE)

CORRIDA 14 ; DIAMETRO DE PARTICULA 0.0350 CM. ; ALTURA DE LECHO ESTATICO 7.6 CM. ; GASTO 8.20 L/MIN

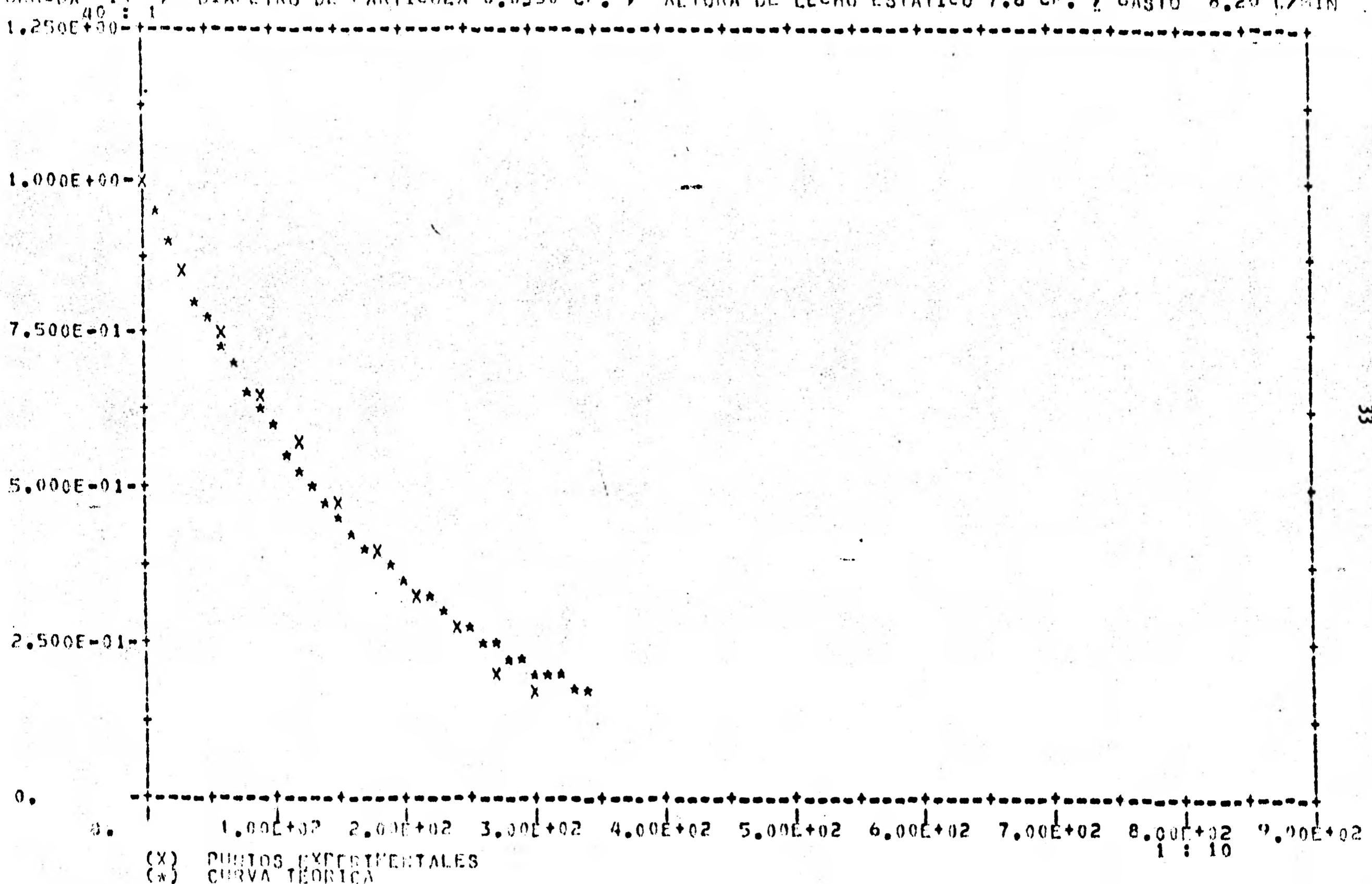


FIGURA 4.14

CORRIDA 15 ; DIAMETRO DE PARTICULA 0.0350 CM. ; ALTURA DE LECHO ESTATICO 7.6 CM. ; GASTO 11.60 L/MIN

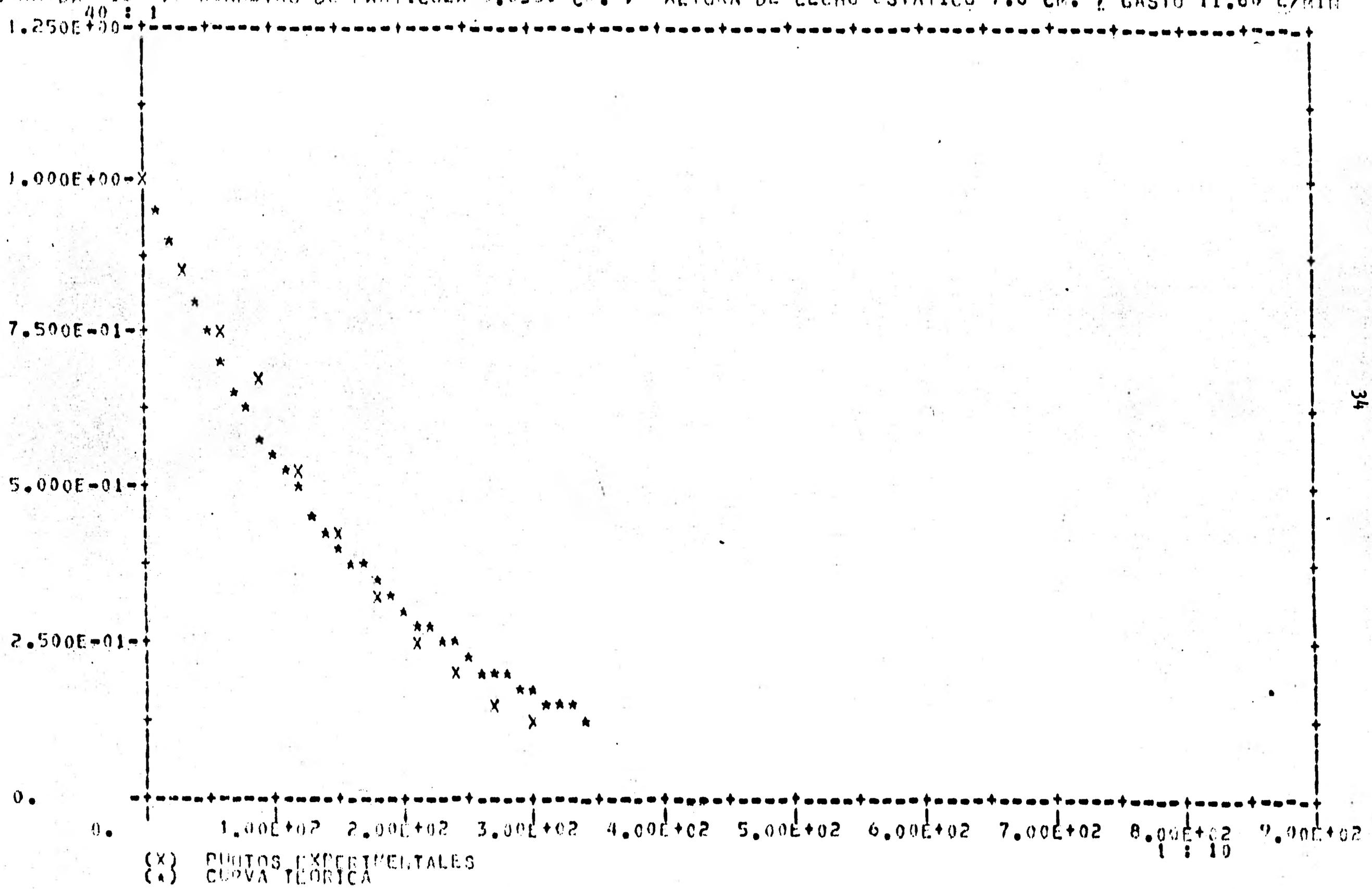


FIGURA 4.15

DISCUSION

Un análisis visual de las figuras 4.1 a 4.15, revela que el modelo matemático representa adecuadamente los puntos experimentales, un análisis estadístico muestra que el modelo es significativamente diferente (mejorando el ajuste de los puntos experimentales) al modelo precedente presentado por Vizcarra (8). Un análisis cualitativo de los resultados conduce a observar la tendencia del coeficiente de transferencia de masa a aumentar con el gasto de aire, en cambio, ninguna tendencia o interrelación del gasto con el coeficiente de difusión a excepción de las cinco primeras corridas donde se aprecia una relación directa, las tablas 5.1 a 5.3, cuyas corridas corresponden a las del capítulo anterior, muestran los coeficientes de difusión y transferencia de masa calculados indicando los diferentes gastos de operación reportados por Vizcarra (8); la figura 5.1 muestra una gráfica del coeficiente de transferencia de masa vs gasto de estas tabulaciones.

CORRIDA	GASTO l/MIN	(K) (10 ⁵)	(D) (10 ⁵)
1	4.1	7.49	1.702
2	5.4	9.85	2.455
3	6.8	9.27	2.699
4	8.2	10.35	4.401
5	11.6	12.88	5.264

TABLA 5.1 Coeficientes calculados y -
gasto de aire para $D_p=0.035\text{cm}$
y altura de cama de lecho de
2 cm. Referencia (8).

CORRIDA	GASTO l/MIN	(K) (10 ⁵)	(D) (10 ⁵)
6	4.1	4.36	1.626
7	5.4	4.25	2.346
8	6.8	5.98	1.629
9	8.2	5.86	1.393
10	11.6	6.47	5.305

TABLA 5.2 Coeficientes calculados y gasto de aire para $D_p = 0.035$ cm y altura de cama de lecho de 3.9 cm Referencia (8).

CORRIDA	GASTO l/MIN	(K) (10 ⁵)	(D) (10 ⁵)
11	4.1	2.16	5.864
12	5.4	2.16	1.839
13	6.8	2.69	4.529
14	8.2	3.05	3.532
15	11.6	3.53	1.088

TABLA 5.3 Coeficientes calculados y gasto de aire para $D_p = 0.035$ cm y altura de cama de lecho de 7.6 cm Referencia (8).

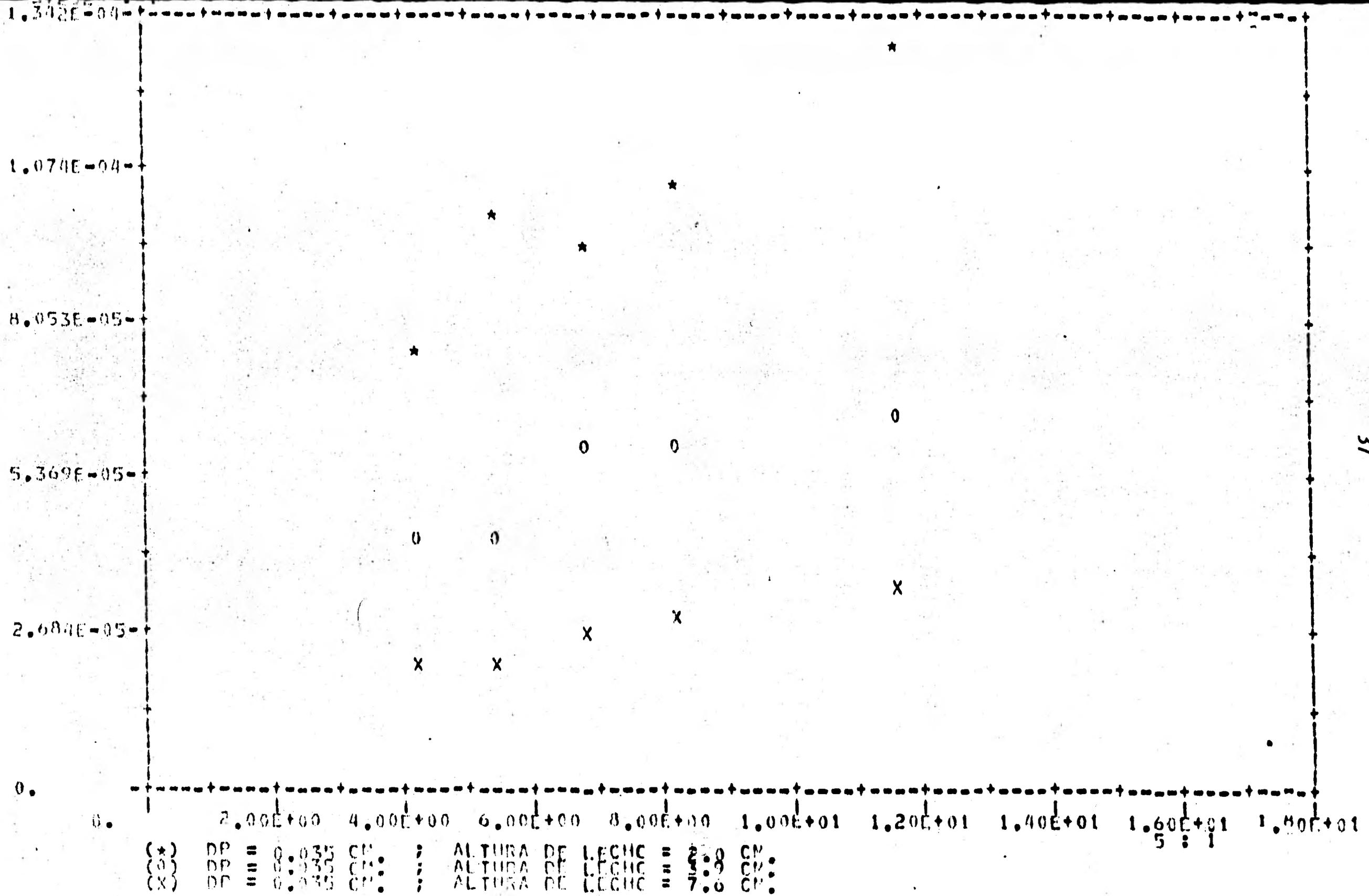


FIGURA 5.1

El análisis de las covariancias* de los coeficientes estimados, conduce a las observaciones siguientes:

Las desviaciones del coeficiente de difusión varían desde diez hasta mil veces el valor estimado de dicho coeficiente originando amplios intervalos de confianza; así como precisiones de los ordenes de cien por ciento y hasta cien mil por ciento, todo ello con el umbral usualmente aceptado de cinco por ciento. En el caso del coeficiente de transferencia de masa k , las desviaciones varían desde una décima a cien veces el valor estimado de k , originando precisiones (con 5% de umbral) del orden de diez por ciento a mil por ciento. Las tablas 5.4 y 5.5, muestran los valores de las covariancias y las precisiones de los coeficientes estimados; los mejores valores se tienen para las corridas 11 y 13, y los valores menos aceptables se tienen en la corrida 1.

La figura 5.2 muestra un mapeo típico de la ecuación 3.6, que explica por sí mismo el porque las precisiones obtenidas.

Una observación importante sobre el comportamiento requerido del modelo (primer término de la ecuación 2.25) es que a $t = 0$ debe cumplirse

$H = 1$, condición que cumplen satisfactoriamente los ajustes realizados; sin embargo, ello produce el siguiente problema:

$$H = 1 \text{ a } t = 0 \quad \text{el factor preexponencial } \frac{6 sh^2}{\beta^2 (\beta^2 + sh (sh-1))} = 1$$

* La descripción de calculo de las covariancias se presenta en el apéndice D; en las tablas 5.4 y 5.5 se presentan los resultados.

CORRIDA	COEF. D	COVAR.	% PRECISION
1	1.702×10^{-5}	6.0×10^{-4}	3.32×10^5
2	2.455×10^{-5}	1.5×10^{-4}	1.11×10^5
3	2.699×10^{-5}	5.5×10^{-9}	6.20×10^2
4	4.401×10^{-5}	7.9×10^{-7}	3.80×10^2
5	5.264×10^{-5}	4.1×10^{-7}	2.75×10^3
6	1.626×10^{-5}	1.2×10^{-7}	4.96×10^3
7	2.346×10^{-5}	3.0×10^{-9}	5.40×10^2
8	1.629×10^{-5}	1.7×10^{-9}	5.80×10^2
9	1.393×10^{-5}	1.7×10^{-4}	2.15×10^5
10	5.305×10^{-5}	5.6×10^{-5}	3.46×10^4
11	5.864×10^{-5}	2.6×10^{-9}	1.97×10^2
12	1.839×10^{-5}	4.1×10^{-6}	2.46×10^4
13	4.529×10^{-5}	8.6×10^{-10}	1.45×10^2
14	3.532×10^{-5}	1.1×10^{-8}	7.04×10^2
15	1.088×10^{-5}	4.6×10^{-9}	1.41×10^3

TABLA 5.4 Covariancias y % de precisión con umbral de 5% de los valores estimados para el coeficiente de difusión D.

CORRIDA	COEF. K	COVAR.	% PRECISION
1	7.49×10^{-5}	2.9×10^{-6}	5.14×10^3
2	9.85×10^{-5}	4.8×10^{-7}	1.59×10^3
3	9.27×10^{-5}	4.9×10^{-12}	5.40×10
4	10.35×10^{-5}	2.2×10^{-10}	3.24×10
5	12.88×10^{-5}	1.2×10^{-10}	1.92×10
6	4.36×10^{-5}	3.8×10^{-11}	3.20×10
7	4.25×10^{-5}	3.4×10^{-12}	1.00×10
8	5.98×10^{-5}	2.7×10^{-12}	6.34×10
9	5.86×10^{-5}	6.6×10^{-7}	3.20×10^3
10	6.47×10^{-5}	2.0×10^{-9}	1.69×10^2
11	2.16×10^{-5}	1.3×10^{-12}	1.19×10
12	2.16×10^{-5}	1.2×10^{-10}	1.15×10^2
13	2.69×10^{-5}	8.1×10^{-12}	2.39×10
14	3.05×10^{-5}	2.2×10^{-12}	1.10×10
15	3.53×10^{-5}	2.6×10^{-12}	1.03×10

TABLA 5.5 Covariancias y % de precisión con umbral de 5% de los valores estimados para el coeficiente de transferencia de masa k.

COEFICIENTE DE DIFUSION D

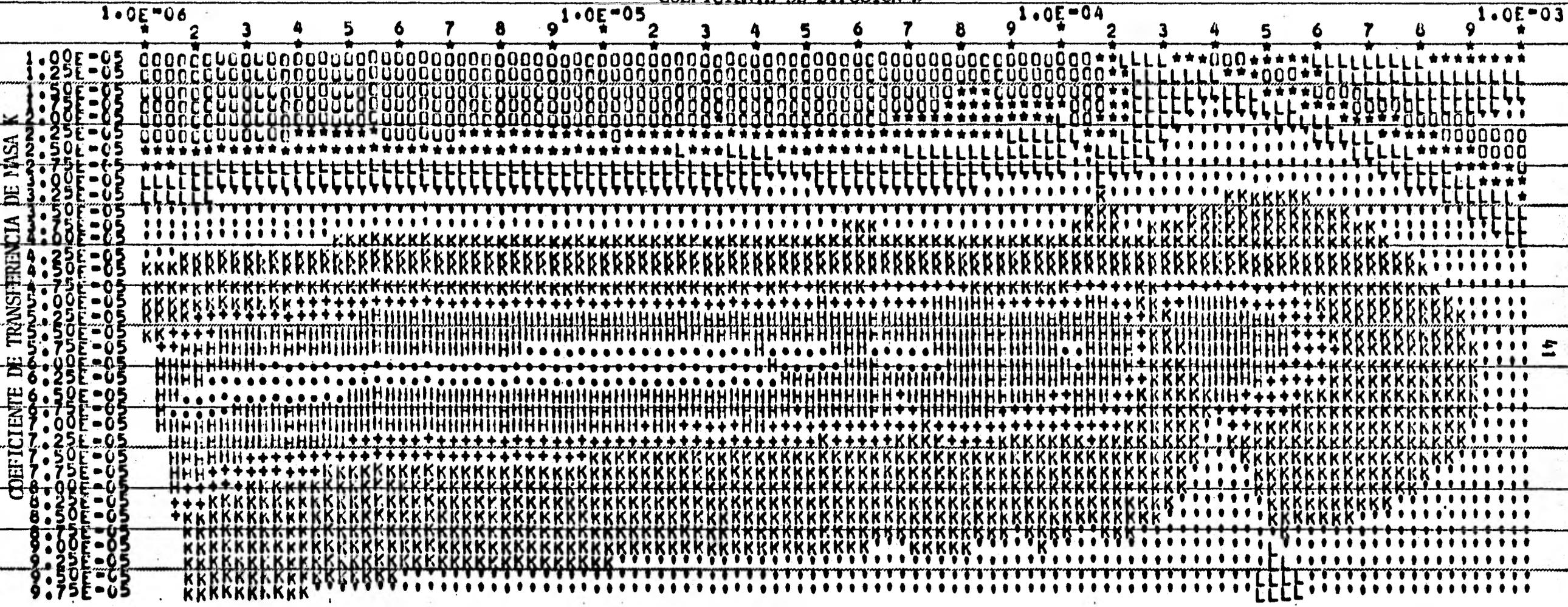


Fig. 5.2 MAPEO TIPICO DE LA ECUACION 3.6 DONDE

LA RELACION DE VALORES DE F SON:

$\bullet < H < + < K < , < L < * < O$

Simplificando practicamente el modelo a

$$\tilde{H} = e^{- (\beta^2 D t / R^2)} \quad (5.1)$$

Donde los parámetros β y D no son independientes y cuya dependencia anula cualquier confiabilidad práctica que pueda requerirse en la estimación de los valores de dichos parámetros mediante las técnicas de ajuste de curvas a partir de puntos experimentales.

Los intentos de romper esa dependencia de parámetros de ajuste mediante cambios de variables como el que a continuación se presenta a título de ejemplo, no condujeron a resultados favorables.

Sea 5.1 la ecuación a modificar y donde el valor del parámetro β es del orden de 10^{-1} , y el del parámetro D es del orden de 10^{-5} ; sea entonces:

$$x_1 = (10)^2 \beta^2 \quad \text{o} \quad \beta^2 = (10)^{-2} x_1 \quad (5.2)$$

$$x_2 = (10)^5 D \quad \text{o} \quad D = (10)^{-5} x_2 \quad (5.3)$$

Substituyendo 5.2 y 5.3 en 5.1 y sacando log. natural se tiene:

$$\ln \tilde{H} = -(10)^{-7} \frac{t}{R^2} x_1 x_2 \quad (5.4)$$

Y sea para la separación de variables

$$x_1 x_2 = \frac{1}{2} \tilde{x}_1^2 - \frac{1}{2} \tilde{x}_2^2 \quad (5.5)$$

Donde:

$$\tilde{x}_1 = \frac{1}{2} (x_1 + x_2) \quad (5.6)$$

$$\tilde{x}_2 = \frac{1}{2} (x_1 - x_2) \quad (5.7)$$

Se obtiene para 5.4 la ecuación:

$$\ln \tilde{H} = A\tilde{x}_1^2 - A\tilde{x}_2^2 \quad (5.8)$$

Donde:

$$A = -(10)^{-7} \frac{t}{2R^2} \quad (5.9)$$

La expresión 5.8 es una modificación mediante cambio de variables de la ecuación 5.1.

En contraposición al problema de la dependencia de los parámetros de ajuste cabe señalar a favor del modelo las siguientes observaciones de los resultados con él obtenidos:

La precisión del coeficiente de transferencia de masa k es aceptable y los valores obtenidos para el coeficiente de difusión D son del orden de los reportados en trabajos previos y presentados en la literatura Lequerica (10), Levenspiel-Kunii (11).

CONCLUSIONES

El modelo matemático para representar las curvas de secado de partículas esféricas presentado en este trabajo modela satisfactoriamente los puntos experimentales; sin embargo, los valores obtenidos para los parámetros de ajuste no son estadísticamente confiables por no darse una independencia de ellos entre sí. Los cambios de variables en el modelo matemático como intento para obtener la independencia de parámetros de ajuste no condujeron a resultados positivos.

Aunque la precisión y confiabilidad estadística de los valores estimados para el coeficiente de difusión son desfavorables al modelo, la comparación de los valores estimados con los reportados en la literatura resulta favorable al modelo por observarse en ellos el mismo orden de magnitud.

Por las características matemáticas del modelo señaladas anteriormente, se recomienda para su uso, fijar el orden de magnitud del coeficiente de difusión, y determinar con el modelo y datos experimentales el coeficiente de transferencia de masa.

Por otra parte, el modelo debe ser substancialmente modificado, considerando en él, las condiciones físicas y de operación del procedimiento de secado.

B I B L I O G R A F I A

- (1) Perry; "Chem. Eng. Handbook", Mc. Graw Hill
- (2) Kisakurek-Peck-Cakaloz; Canadian J. of Chem. Eng. 53, 53 , Feb (1975).
- (3) Terybal, R.E.; "Mass Transfer Operations", Mc Graw Hill (1968)
- (4) Gribben, R.J.; "Elementary Partial Differential Equations" Van Nostrand Reinhold, G. Britain (1975).
- (5) Crank; "Mathematics of Diffusion", Claredon Press Oxford (1975)
- (6) Kittrell-Mezaki-Watson; Ind. and Eng. Chem. 57, 12, 18 (1965)
- (7) Himmelblau, D.; "Process Analysis by Statistical Methods" John Wiley & Sons Inc. New York (1970).
- (8) Vizcarra, M.; Tesis de Maestría, Fac. de Química UNAM (1976)
- (9) Box, M.J.; Computer J. 8,42 (1965)
- (10) Lequerica; A.T.A. 14,3 Nov. (1974)
- (11) Levenspiel-Kunii; "Fluidization Engineering", John Wiley & Sons Inc. (1969).
- (12) Brown; "Unit Operations", John Wiley and Sons (1950)
- (13) Gupta-Thodos; Chem. Eng. Progr., 58, 7, 58 (1962)

A-1

A P E N D I C E A

DESARROLLO DE LA SOLUCION DE LA ECUACION

DE DIFUSION 2.5

La ecuación de Difusión expresada en coordenadas esféricas y considerando solo difusión radial es (Ver ecuación 2.5).

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{D}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial H}{\partial r} \right) \quad (\text{A.1})$$

Sea:

$$U = (H - H^*) r \quad (\text{A.2})$$

Entonces:

$$\frac{U}{r} = H - H^* \quad (\text{A.3})$$

Que implica:

$$\frac{\partial H}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{U}{r} \right)$$

$$\frac{\partial H}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial r} - \frac{U}{r^2} \quad (\text{A.4})$$

y

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{U}{r} \right)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial t} \quad (\text{A.5})$$

Substituyendo A.4 y A.5 en A.1

$$\frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial t} = \frac{D}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \left(\frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial r} - \frac{U}{r^2} \right) \right) \quad (\text{A.6})$$

Simplificando, aplicando el operador diferencial y simplificando:

$$\begin{aligned}\frac{\partial U}{\partial t} &= \frac{D}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial U}{\partial r} - U \right) \\ &= \frac{D}{r} \left(r \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{\partial U}{\partial r} - \frac{\partial U}{\partial r} \right)\end{aligned}$$

Se obtiene:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = D \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \quad (\text{A.7})$$

Si definimos:

$$\tilde{H} = \frac{H - H^*}{H^0 - H^*} \quad (\text{A.8})$$

$$\theta = \frac{t D}{R^2} \quad (\text{A.9})$$

$$\xi = \frac{r}{R} \quad (\text{A.10})$$

Entonces de las ecuaciones A.2 y A.8, se tiene:

$$U = \tilde{H} (H^0 - H^*) r \quad (\text{A.11})$$

Y sea:

$$\vartheta = \frac{U}{(H^0 - H^*) R} \quad (\text{A.12})$$

Entonces de acuerdo a A.10 y A.11

$$\vartheta = \tilde{H} \xi \quad (\text{A.13})$$

De la ecuación A.12 se obtiene:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = (H^{\circ} - H^{*}) R \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (\text{A.14})$$

Y

$$\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} = (H^{\circ} - H^{*}) R \frac{\partial^2 \theta}{\partial r^2} \quad (\text{A.15})$$

De la ecuación A.9 se obtiene:

$$dt = \frac{R^2}{D} d\theta \quad (\text{A.16})$$

Y de la ecuación A.10 se obtiene:

$$dr^2 = R^2 d\xi^2 \quad (\text{A.17})$$

Substituyendo A.16 en el 2º miembro de A.14

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{D}{R} (H^{\circ} - H^{*}) \frac{\partial \theta}{\partial \theta} \quad (\text{A.18})$$

Y substituyendo a A.17 en el 2º miembro de A.15

$$\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} = \frac{1}{R} (H^{\circ} - H^{*}) \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} \quad (\text{A.19})$$

Y substituyendo finalmente A.18 y A.19 en A.7 se obtiene después de simplificar

$$\frac{\partial \theta}{\partial \theta} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} \quad (\text{A.20})$$

Resolviendo por el método de separación de variables se sigue:

$$\vartheta = f(\xi) g(\theta) \quad (\text{A.21})$$

Donde f es función de ξ , y g es función θ . Substituyendo A.21 en A.20, diferenciando y reacomodando se obtiene

$$\frac{1}{g} \frac{dg}{d\theta} = \frac{1}{\xi} \frac{d^2 f}{d\xi^2} \quad (\text{A.22})$$

Donde un miembro es solo función de θ , y el otro solo de ξ , por tanto, ambos miembros deben ser igual a una constante que para los siguientes pasos se define esta constante como

$$\text{cte.} = -\beta^2 \quad (\text{A.23})$$

o

$$\frac{1}{g} \frac{dg}{d\theta} = -\beta^2 \quad (\text{A.24})$$

Cuya solución es:

$$g = e^{-\beta^2 \theta} \quad (\text{A.25})$$

y

$$\frac{1}{f} \frac{d^2 f}{d\xi^2} = -\beta^2 \quad (\text{A.26})$$

Cuya solución es:

$$f = A \text{ sen } \beta\xi + B \text{ cos } \beta\xi \quad (\text{A.27})$$

Substituyendo A.25 y A.27 en A.21 se tiene la solución de A.20

$$\vartheta = (A \operatorname{sen} \beta \xi + B \operatorname{cos} \beta \xi) e^{-\beta^2 \theta} \quad (\text{A.28})$$

La determinación de las constantes A, B y β se obtiene a partir de las siguientes condiciones a la frontera.

$$\vartheta = \xi \quad \text{a} \quad \theta = 0 \quad (\text{A.29})$$

$$\frac{\partial (\vartheta / \xi)}{\partial \xi} = 0 \quad \text{a} \quad \theta > 0 \quad \text{y} \quad \xi = 0 \quad (\text{A.30})$$

$$-\frac{\partial (\vartheta / \xi)}{\partial \xi} = \operatorname{Sh} (\vartheta / \xi) \quad \text{a} \quad \xi = 1 \quad (\text{A.31})$$

Donde:

$$\operatorname{Sh} = \frac{k R}{D} \quad (\text{A.32})$$

De acuerdo a la ecuación A.28

$$\vartheta / \xi = \frac{1}{\xi} (A \operatorname{sen} \beta \xi - B \operatorname{cos} \beta \xi) e^{-\beta^2 \theta} \quad (\text{A.33})$$

De donde:

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\vartheta / \xi)}{\partial \xi} = & \left[\frac{1}{\xi} (A \beta \operatorname{cos} \beta \xi - B \beta \operatorname{sen} \beta \xi) \right. \\ & \left. - \frac{1}{\xi^2} (A \operatorname{sen} \beta \xi + B \operatorname{cos} \beta \xi) \right] e^{-\beta^2 \theta} \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

Por condición dada en A.30

$$\frac{1}{\xi} (A \beta \operatorname{cos} \beta \xi - B \beta \operatorname{sen} \beta \xi) - \frac{1}{\xi^2} (A \operatorname{sen} \beta \xi + B \operatorname{cos} \beta \xi) = 0$$

Multiplicando por ξ^2

$$\xi (A \beta \cos \beta \xi - B \beta \operatorname{sen} \beta \xi) - (A \operatorname{sen} \beta \xi + B \cos \beta \xi) = 0$$

Y $\xi = 0$ implica

$$A \operatorname{sen} \beta \xi + B \cos \beta \xi = 0$$

6

$$B = 0 \tag{A.35}$$

Por lo tanto, A.28 se simplifica a

$$\vartheta = (A \operatorname{sen} \beta \xi) e^{-\beta^2 \vartheta} \tag{A.36}$$

Y A.34 se simplifica a

$$\frac{\partial (\vartheta / \xi)}{\partial \xi} = \frac{A}{\xi} (\beta \cos \beta \xi - \frac{1}{\xi} \operatorname{sen} \beta \xi) e^{-\beta^2 \vartheta} \tag{A.37}$$

Por condición A.31

$$-\frac{\partial (\vartheta / \xi)}{\partial \xi} = \frac{Sh}{\xi} \vartheta$$

Se obtiene sustituyendo A.37 y A.36

$$-\frac{A}{\xi} (\beta \cos \beta \xi - \frac{1}{\xi} \operatorname{sen} \beta \xi) e^{-\beta^2 \vartheta} = \frac{Sh}{\xi} (A \operatorname{sen} \beta \xi) e^{-\beta^2 \vartheta}$$

Simplificando y puesto que $\xi = 1$ se tiene:

$$\operatorname{sen} \beta - \beta \cos \beta = Sh \operatorname{sen} \beta$$

Dividiendo entre $\text{sen } \beta$ y reorganizando

$$\beta \cot \beta = 1 - \text{Sh} \quad (\text{A.38})$$

Que define el valor que debe tomar la constante β , es decir, β debe ser tal que se cumpla A.38.

La ecuación A.36 es una solución particular de ϑ , y la solución general de ϑ se obtiene por

$$\vartheta = \sum_{n=1}^{\infty} (A_n \text{sen } \beta_n \xi) e^{-\beta_n^2 \theta} \quad (\text{A.39})$$

que es la combinación lineal de las soluciones del tipo dado por la ecuación A.36.

De acuerdo a la condición A.29.

$$\xi = \vartheta \quad \text{a } \theta = 0$$

o

$$\xi = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \text{sen } \beta_n \xi \quad (\text{A.40})$$

Multiplicando ambos miembros por $\text{sen } \beta_n \xi$ e integrando de $\xi = 0$

a $\xi = 1$

$$\int_0^1 \xi \text{sen } \beta_n \xi \, d\xi = A_n \int_0^1 \text{sen}^2 \beta_n \xi \, d\xi$$

Implica

$$A_n = \frac{\int_0^1 \xi \text{sen } \beta_n \xi \, d\xi}{\int_0^1 \text{sen}^2 \beta_n \xi \, d\xi} \quad (\text{A.41})$$

Integrando por partes la integral del numerador se tiene:

$$u = \xi \Rightarrow du = d\xi$$

$$dv = \frac{1}{\beta_n} \operatorname{sen} \beta_n \xi d(\beta_n \xi) \Rightarrow v = -\frac{1}{\beta_n} \cos \beta_n \xi$$

$$\int_0^1 \xi \operatorname{sen} \beta_n \xi d\xi = -\frac{\xi}{\beta_n} \cos \beta_n \xi \Big|_0^1 + \int_0^1 \frac{1}{\beta_n} \cos \beta_n \xi d(\beta_n \xi)$$

$$\int_0^1 \xi \operatorname{sen} \beta_n \xi d\xi = -\frac{\cos \beta_n}{\beta_n} + \frac{\operatorname{sen} \beta_n}{\beta_n^2} \quad (\text{A.42})$$

Y para la integral del denominador de A.41 se tiene:

$$\int_0^1 \operatorname{sen}^2 \beta_n \xi d\xi = \frac{1}{\beta_n} \int_0^{\beta_n} \operatorname{sen}^2 u du$$

Si $u = \beta_n \xi$ entonces

$$\begin{aligned} \int_0^1 \operatorname{sen}^2 \beta_n \xi d\xi &= \frac{1}{\beta_n} \int_0^{\beta_n} \operatorname{sen}^2 u du \\ &= \frac{1}{\beta_n} \left(\frac{1}{2} u - \frac{1}{2} \operatorname{sen} u \cos u \right) \Big|_0^{\beta_n} \end{aligned}$$

$$\int_0^1 \operatorname{sen}^2 \beta_n \xi d\xi = \frac{1}{2\beta_n} (\beta_n - \operatorname{sen} \beta_n \cos \beta_n) \quad (\text{A.43})$$

Substituyendo A.42 y A.43 en A.41

$$A_n = \frac{\frac{\operatorname{sen} \beta_n}{\beta_n^2} - \frac{\cos \beta_n}{\beta_n}}{\frac{1}{2\beta_n} (\beta_n - \operatorname{sen} \beta_n \cos \beta_n)}$$

$$A_n = \frac{\frac{\text{sen } \beta_n}{\beta_n^2} (1 - \beta_n \cot \beta_n)}{\frac{1}{2\beta_n} (\beta_n - \text{sen } \beta_n \cos \beta_n)}$$

Simplificando y de acuerdo a A.38

$$A_n = \frac{2 \text{ Sh } \text{sen } \beta_n}{\beta_n (\beta_n - \text{sen } \beta_n \cos \beta_n)} \quad (\text{A.44})$$

De A.38 se deduce

$$- (\text{Sh} - 1) \text{sen } \beta_n = \beta_n \cos \beta_n$$

$$\frac{1}{\beta_n} (\text{Sh} - 1) \text{sen}^2 \beta_n = - \text{sen } \beta_n \cos \beta_n$$

Que substituyendo en A.44 conduce a

$$A_n = \frac{2 \text{ Sh } \text{sen } \beta_n}{\beta_n \left(\beta_n + \frac{1}{\beta_n} (\text{Sh} - 1) \text{sen}^2 \beta_n \right)}$$

$$A_n = \frac{2 \text{ Sh } \text{sen } \beta_n}{\beta_n \left(\frac{\text{sen}^2 \beta_n}{\beta_n} \right) \left(\frac{\beta_n^2}{\text{sen}^2 \beta_n} + (\text{Sh} - 1) \right)}$$

Simplificando

$$A_n = \frac{2 \text{ Sh}}{\text{sen } \beta_n \left(\frac{\beta_n^2}{\text{sen}^2 \beta_n} + (\text{Sh} - 1) \right)}$$

Considerando que $1/\text{sen}^2 = \text{csc}^2$ y $\text{csc}^2 = 1 + \cot^2$ se tiene

$$A_n = \frac{2 \operatorname{Sh}}{\operatorname{sen} \beta n [\beta n^2 (1 + \cot^2 \beta n) + (\operatorname{Sh} - 1)]}$$

$$A_n = \frac{2 \operatorname{Sh}}{\operatorname{sen} \beta n [\beta n^2 + (\beta n \cot \beta n)^2 + (\operatorname{Sh} - 1)]}$$

Substituyendo

$$(\beta n \cot \beta n)^2 = (1 - \operatorname{Sh})^2 = 1 - 2 \operatorname{Sh} + \operatorname{Sh}^2$$

Y reorganizando

$$A_n = \frac{2 \operatorname{Sh}}{\operatorname{sen} \beta n [\beta n^2 + \operatorname{Sh} (\operatorname{Sh} - 1)]} \quad (\text{A.45})$$

Que substituyendo en A.39 se obtiene

$$\vartheta = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\operatorname{sen} \beta n \xi}{\operatorname{sen} \beta n} \frac{2 \operatorname{Sh} e^{-\beta n^2 \theta}}{\beta n^2 + \operatorname{Sh} (\operatorname{Sh} - 1)} \quad (\text{A.46})$$

La cantidad \tilde{H} promedio de la partícula esta dada por

$$\langle \tilde{H} \rangle = \frac{\int_0^1 4\pi \xi^2 \tilde{H} d\xi}{4/3 \pi} \quad (\text{A.47})$$

o considerando A.13

$$\langle \tilde{H} \rangle = 3 \int_0^1 \xi \vartheta d\xi \quad (\text{A.48})$$

Donde substituyendo A.46 se tiene

$$\langle \tilde{H} \rangle = 3 \int_0^1 \xi \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{sen } \beta_n \xi}{\text{sen } \beta_n} \frac{2 \text{Sh } e^{-\beta_n^2 \theta}}{\beta_n^2 + \text{Sh} (\text{Sh}-1)} \right] d\xi \quad (\text{A.49})$$

Que conduce a resolver solo

$$\int_0^1 \xi \text{sen } \beta_n \xi \, d\xi$$

Cuya solución esta dada por la ecuación A.42.

$$\begin{aligned} \int_0^1 \xi \text{sen } \beta_n \xi \, d\xi &= \frac{\text{sen } \beta_n}{\beta_n^2} - \frac{\cos \beta_n}{\beta_n} \\ &= \frac{\text{sen } \beta_n}{\beta_n^2} (1 - \beta_n \cot \beta_n) \\ &= \frac{\text{sen } \beta_n}{\beta_n^2} \text{Sh} \end{aligned} \quad (\text{A.50})$$

Que substituyendo en A.49 conduce finalmente a

$$\langle \tilde{H} \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{6 \text{Sh}^2 e^{-\beta_n^2 \theta}}{\beta_n^2 [\beta_n^2 + \text{Sh} (\text{Sh}-1)]} \quad (\text{A.51})$$

A P E N D I C E "B"

OPTIMIZACION METODO COMPLEX

SE PRESENTA AQUI EL MANUAL DEL PROGRAMA PARA LA MINIMIZACION DE UNA FUNCION DE n VARIABLES INDEPENDIENTES SUJETA A m RESTRICCIONES.

PARA SU USO ADECUADO SE MUESTRA AL FINAL DE ESTE APENDICE UN EJEMPLO DE APLICACION.

INDICE DE VARIABLES (PROGRAMA)

A Arreglo matricial de los lmites de las m restricciones:

$$A = \begin{bmatrix} \text{lím. inf. 1} & \text{lím. sup. 1} \\ \vdots & \vdots \\ \text{lím. inf. n} & \text{lím. sup. n} \\ \text{lím. inf. n+1} & \text{lím. sup. n+1} \\ \vdots & \vdots \\ \text{lím. inf. m.} & \text{lím. sup. m} \end{bmatrix}$$

- ALFA** α usada en la ecuación 3.15
- E** ϵ usada en la ecuación 3.16
- F (J)** Valor de la función objetivo en el Punto j
- IT** Contador del número de iteraciones
- K** Número de vértices que forman el COMPLEX
- M** Número total de restricciones
(Explícitas + implícitas)
- N** Número de variables independientes

- NC Indicador para la impresión de resultados
- NC = 0 Durante la optimización
- NC = 1 Cuando se ha alcanzado el óptimo
- NRR Número auxiliar en el uso de la función RANDOM para
 generar números aleatorios.
- X (I, J) i-ésima variable independiente del punto j
- XC (I) i-ésima variable independiente del punto inicial X^0 o
 del centroide.
- XN1, XN2, ... Funciones definidas por las restricciones $n + 1, n + 2, \dots$

DESCRIPCION Y USO DEL PROGRAMA

El programa consta de 82 instrucciones ejecutables y definición de 5 funciones útiles para las restricciones implícitas.

Presenta comentarios suficientes para entender lo que hace en cada una de sus partes.

Requiere de las subrutinas ENT y FOBJ (proporcionadas por el usuario).

1) Subrutina ENT.

En esta subrutina deben alimentarse como datos: N, M, A, y XC. Deben también alimentarse aquí (en caso de ser requerido), los datos necesarios para el cálculo de la función objetivo, y ser transmitidos a FOBJ por medio de un COMMON.

Las siguientes líneas deben aparecer en la subrutina ENT:

```
SUBROUTINE ENT (*,N,M,A,XC)
DIMENSION A (15,2), XC (10)
.
.
.
READ (5,p,END=q) v
.
.
.
```

```

RETURN
q RETURN 1
END

```

Donde "p" y "q" son números enteros de etiquetas; "p" del FORMAT y "q" del RETURN no standard. Y "v" es la lista de variables que han de leerse cada vez que se llame a al subrutina NET.

Ventaja: Que el proceso de optimización se repetirá tantas veces como conjuntos de datos se alimenten.

2) Subrutina FOBJ.

Solo requiere que aparezcan las siguientes líneas:

```

SUBROUTINE FOBJ (X,F,N,NC)
DIMENSION X(N)

```

De ser necesario, aparecerá un COMMON en ENT y FOBJ para transmitir datos adicionales alimentados en ENT.

En FOBJ se calcula el valor de la función objetivo y se le asigna a F.

NC llega a esta subrutina con los valores:

NC = 0 Durante el proceso de optimización

NC = 1 Cuando se ha alcanzado el óptimo.

Ventaja: Permite la opción de imprimir todos los valores tomados por X y F, durante la optimización, o solo - imprimir valores correspondientes al punto óptimo.

3) Restricciones Implícitas.

Estas son las restricciones:

$$g_{n+1} \leq x_{n+1} \leq h_{n+1}$$

$$g_{n+1} \leq x_{n+1} \leq h_{n+1}$$

⋮

$$g_m \leq x_m \leq h_m$$

Donde $x_i = f_i (x_1, x_2, \dots, x_n)$ $i = n+1, n+2, \dots, m$

Los valores de g_i y h_i se alimentan dentro del arreglo A.

Las funciones f_i $i = n+1, n+2, \dots, m$

las define el usuario en las siguientes líneas del programa:

500 XN1 (X) = 0

600 XN2 (X) = 0

700 XN3 (X) = 0

800 XN4 (X) = 0

900 XN5 (X) = 0

Que son declaraciones de proposiciones FUNCTION donde X representa la lista de variables (separadas por comas) que constituyen el argumento. Y O, representa la expresión matemática.

Como ejemplo véase la línea 8 de el ejemplo de aplicación página B-16.

Para el manejo de restricciones implícitas, se requiere también modificar la sección del programa:

```
3300      JW = KV
3400  97  DO 21 NP = N1, M
3500      NN = NP - N
3600      GO TO (1,2,3,4,5), NN
3700  1  FP = XN1 (ARGUMENTO)
3800      GO TO 20
3900  2  FP = XN2 (ARGUMENTO)
4000      GO TO 20
4100  3  FP = XN3 (ARGUMENTO)
4200      GO TO 20
4300  4  FP = XN4 (ARGUMENTO)
4400      GO TO 20
4500  5  FP = XN5 (ARGUMENTO)
```

Donde KV: K-ésimo vértice. Las posibles líneas a modificar, son las número: 3700, 3900, 4100, 4300 y 4500 que tiene las etiquetas 1, 2, 3, 4 y 5 respectivamente. La palabra ARGUMENTO representa la lista de variables independientes (separadas

por comas), que han de constituir precisamente el argumento de su respectiva FUNCTION declarada en las líneas 500 a 900.

Como restricción, la notación de las variables listadas al modificar las líneas 3700, ..., 4500 debe ser:

..., X (i, JW),...

y donde el valor de i (i-ésima variable independiente) debe ser fijado por el usuario.

4) Rastreo.

Son cuatro puntos de impresión de datos en el programa con posible interés para el usuario. Sin embargo, se les consideró en general innecesarios, y por lo mismo, poco práctico el consumir tiempo haciendo pruebas de cuando y cuales ha de imprimir a voluntad del usuario.

A continuación se señalan los cuatro puntos con sus posibles - datos de impresión:

a) Prueba a restricciones implícitas.

Entre las líneas 4600 y 4700 puede ordenarse imprimir las siguientes variables:

x_{n+i}	FP
$n+i$	NP

Núm. de vértice JW

Variables independientes .. $(X(I,JW), I=1,N)$

- b) Vértices iniciales y sus respectivos valores de la función objetivo.

Entre las líneas 6600 y 6700 puede ordenarse imprimir las siguientes variables:

Núm. de Vértice J

Valor de la Función

Objetivo F (J)

Variables Independientes .. $(X(I,J), I=1,N)$

- c) Número de iteración y nuevo vértice en el proceso de optimización.

Entre las líneas 1000 y 10100 puede ordenarse imprimir:

Número de Vértice JW

Valor de la Función

Objetivo F(JW)

Variables Independientes .. $(x(I,JW), I=1,N)$

Número de Iteraciones IT

- d) Vértices del COMPLEX final y sus respectivos valores de la función objetivo, o solo valores del punto óptimo.

Entre las líneas 11600 y 11700 puede ordenarse imprimir las siguientes variables:

- COMPLEX Final: $((J, F(J), (X(I, J), I=1, N)), J=1, K)$

Con lo que imprime:

Número de Vértice J
Valor de la Función Objetivo F (J)
y Variables Independientes $(X(I, J), I=1, N)$

- Valores en el punto óptimo:

Número de iteraciones totales IT
Número del vértice óptimo JOP
Valor Optimo de Función F(JOP)
Variables independientes
del Vértice Optimo $(X(I, JOP), I=1, N)$

```

100     DIMENSION A(15,2),X(10,20),F(20),X0(10)
200C
300C     DEFINICION VARIABLES IMPLICITAS
400C
500     XN1(X)=0.
600     XN2(X)=0.
700     XN3(X)=0.
800     XN4(X)=0.
900     XN5(X)=0.
1000C
1100C    ALIMENTACION DE DATOS Y VERTICE INICIAL
1200C
1300     NRR=219
1400     ALFA=1.3
1500     E=0.000001
1600 100 CALL ENT(841,N,M,A,XC)
1700     K=2*N
1800     NC=0
1900     IT=0
2000     NI=N+1
2100     BK=K
2200     DO 99 I=1,N
2300 99  X(I,1)=XC(I)
2400C
2500C    OBTENCION DE K-1 VERTICES Y
2600C    PRUEBA A RESTRICCIONES IMPLICITAS
2700C
2800     DO 22 KV=2,K
2900     DO 98 I=1,N
3000 98  X(I,KV)=A(I,1)+RANDOM(NRR)*(A(I,2)-A(I,1))
3100     IF(N.EQ.M)GO TO 22
3200C
3300     JW=KV
3400 97  DO 21 NP=NI,M
3500     NN=NP-N
3600     GO TO(1,2,3,4,5),NN
3700 1   FP=XN1(ARGUMENTO)
3800     GO TO 20
3900 2   FP=XN2(ARGUMENTO)
4000     GO TO 20

```

```

4200 GO TO 20
4300 4 FP=XN4(ARGUMENTO)
4400 GO TO 20
4500 5 FP=XN5(ARGUMENTO)
4600 20 CONTINUE
4700 IF(A(NP,1).GT.FP.OR.A(NP,2).LT.FP)GO TO 23
4800 21 CONTINUE
4900 IF(IT.GE.1)GO TO 37
5000 22 CONTINUE
5100 GO TO 25
5200C
5300C CORRECCION POR VIOLACION A RESTRICCIONES IMPLICITAS
5400C
5500C 23 NR=0
5600 DO 24 I=1,N
5700 IF(ABS((XC(I)-X(I,JW))/(XC(I)+X(I,JW))).LE.0.0001) NR=NR+1
5800 24 X(I,JW)=(X(I,JW)+XC(I))/2.
5900 IF(NR.GE.N) GO TO 38
6000 IF(M.GT.N) GO TO 97
6100 GO TO 37
6200C
6300C CALCULO DE LA FUNCION OBJETIVO EN LOS K VERTICES
6400C
6500 25 DO 26 J=1,K
6600 CALL FOBJ,(X(1,J),F(J),N,NC)
6700 26 CONTINUE
6800 27 IT=IT+1
6900C
7000C SELECCION DEL PEOR VALOR DE LA FUNCION OBJETIVO
7100C
7200 DO 33 J=1,K
7300 IF(J.GT.1) IF(J-2)28,28,29
7400 GO TO 31
7500 28 IF(F(J).GT.F(JW)) GO TO 30
7600 GO TO 32
7700 29 IF(F(J).LT.F(JW)) IF(F(JL)-F(J))32,33,33
7800 30 JL=JW
7900 31 JW=J
8000 GO TO 33
8100 32 JL=J
8200 33 CONTINUE
8300C
8400C OBTENCION DEL CENTROIDE

```

```

8600      DO 35 I=1,N
8700      SX=0.0
8800      DO 34 J=1,K
8900 34    SX=SX+X(I,J)
9000 35    XC(I)=(SX-X(I,JW))/(BK-1.)
9100C
9200C      NUEVO VERTICE PRUEBA Y CALCULO DE LA FUNCION OBJETIVO
9300C
9400      DO 36 I=1,N
9500      X(I,JW)=ALFA*(XC(I)-X(I,JW))+XC(I)
9600      IF(X(I,JW).LT.A(I,1))X(I,JW)=A(I,1)*(1.+E)
9700 36    IF(X(I,JW).GT.A(I,2))X(I,JW)=A(I,2)*(1.-E)
9800      IF(M.GT.N) GO TO 97
9900C
10000 37   CALL FOBJ(X(I,JW),F(JW),N,NC)
10100      IF(F(JW).GE.F(JL)) GO TO 23
10200C
10300C      PRUEBA DE CONVERGENCIA
10400C
10500      DO 38 I=1,N
10600      DO 38 J=1,K
10700      IF(ABS((XC(I)-X(I,J))/(XC(I)+X(I,J))).GE.0.0001) GO TO 27
10800 38    CONTINUE
10900      NC=1
11000C
11100C      SELECCION DEL VERTICE OPTIMO Y SALIDA DE RESULTADOS
11200C
11300      DO 40 J=1,K
11400      IF(J.GT.1) IF(F(J)-F(JOP))39,40,40
11500 39    JOP=J
11600 40    CONTINUE
11700      CALL FOBJ(X(1,JOP),F(JOP),N,NC)
11800      GO TO 100
11900 41    CALL EXIT
12000      END

```

ALCANCE Y LIMITACIONES

El programa tal y como aquí se presenta, puede minimizar funciones hasta de 10 variables independientes y cero restricciones implícitas ($M = N$).

Con las modificaciones necesarias, el número de restricciones implícitas que puede manejar es de 5, o sea $M = N + 5$.

La capacidad de manejo de variables independientes y número de restricciones, puede aumentarse modificando el DIMENSION. Para hacer esto, debe tenerse en cuenta el satisfacer por lo menos las siguientes capacidades de almacenamiento de datos:

DIMENSION A (m,2), X(n,2n), F(2n), XC(n)

Donde:

n = Número de variables independientes

m = Número total de restricciones

EJEMPLO DE APLICACION:

Minimizar: $f(X) = (x_1 - 1/2)^2 + (x_2 - 1)^2$

Sujeto a: $(x_1)^2 + 2(x_2)^2 - 4 \leq 0$

SOLUCION Y CODIFICACION (EJEMPLO)

De la restricción implícita dada ($x_3 \leq 0$) se deducen las siguientes

restricciones explícitas:

$$- 2 \leq x_1 \leq 2$$

$$-\sqrt{2} \leq x_2 \leq \sqrt{2}$$

Puesto que el programa lo requiere, debemos fijar un límite inferior para x_3 . Podemos tomar cualquier valor menor o igual a menos cuatro.

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36 37 38 39 40 41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 53 54 55 56 57 58 59 60 61 62 63 64 65 66 67 68 69 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79 80

```

1 ? JOB EJEMPLO; USER=YY11/KK; CLASS=3
2 ? FAMILY DISK=PACK OTHERWISE DISK; BEGIN
3 ? COMPILE COMPLEX FORTRAN LIBRARY GO
4 ? FORTRAN FILE TAPE=COMPLEX
5 ? FORTRAN FILE NEWTAPE=EJEMPLO; DATA
6 $ SET MERGE NEW
7     XN1(X1,X2)=(X1**2)+2.*(X2**2)-4.0
8     1 FP=XN1(X(1,JW),X(2,JW))
9     SUBROUTINE ENT(*,N,M,A,XC)
10    DIMENSION A(15,2),XC(10)
11    READ(5,/,END=1) N,(XC(I),I=1,N)
12    READ(5,/) M,((A(I,J),J=1,2),I=1,M)
13    RETURN
14    1 RETURN 1
15    END
16    SUBROUTINE FOBJ(X,F,N,NC)
17    DIMENSION X(N)
18    X1=X(1) ; X2=X(2)
19    F=(X1-0.5)**2+(X2-1.0)**2
20    IF(NC.EQ.1) WRITE(6,1) X1,X2,F
21    RETURN
22    1 FORMAT(3(/),X1,"PUNTO OPTIMO :",7X,"X1 =",F8.5,5X,
23    1 "X2 =",F8.5,3(/),X,"VALOR DE LA FUNCION : F =",F8.5)
24    END
25 ? DATA FILES
26 (2, 0.0, 0.0)
27 (3, -2.0, 2.0, -1.4142, 1.4142, -5.0, 0.0)
28 ? END JOB

```

B-16

PUNTO OPTIMO: $x_1 = 0.49995$ $x_2 = 0.99999$

VALOR DE LA FUNCION: $F = 0.00000$

NOTA:

VALORES ALIMENTADOS

$$N = 2$$

$$M = 3$$

$$x^c = \begin{bmatrix} \emptyset.\emptyset \\ \emptyset.\emptyset \end{bmatrix} \quad \text{o sea } x^o = (\emptyset, \emptyset)$$

$$A = \begin{bmatrix} -2 & 2 \\ -1.4142 & 1.4142 \\ -5 & \emptyset \end{bmatrix}$$

A P E N D I C E C

TABULACION DE RESULTADOS

TIEMPO	HUM. EXP.	HUM. CALC.	H EXP.	H CALC.
0.00	0.2200	0.2200	1.0000	0.9999
15.00	0.1733	0.1837	0.7776	0.8271
30.00	0.1505	0.1537	0.6690	0.6842
45.00	0.1381	0.1288	0.6100	0.5659
60.00	0.1205	0.1083	0.5262	0.4681
75.00	0.0937	0.0913	0.3986	0.3872
90.00	0.0697	0.0773	0.2843	0.3203
105.00	0.0623	0.0656	0.2490	0.2650
120.00	0.0480	0.0560	0.1810	0.2192
150.00	0.0472	0.0415	0.1771	0.1500
180.00	0.0289	0.0315	0.0900	0.1026

VALOR DE LA FUNCION = 1,202780E - 02

X = (D = 1.702388E - 05, BETA = 4,77009E - 01, HE = 1,000001E - 02)

SH = 7,701924E - 02 K = 7,492379E - 05

CORRIDA 1

C-2

TIEMPO	HUM. EXP.	HUM. CALC.	H. EXP.	H CALC.
0.00	0.2079	0.2079	1.0000	0.9999
15.00	0.1588	0.1653	0.7455	0.7790
30.00	0.1350	0.1321	0.6221	0.6068
45.00	0.1160	0.1062	0.5236	0.4727
60.00	0.0911	0.0860	0.3945	0.3683
75.00	0.0702	0.0703	0.2862	0.2869
90.00	0.0554	0.0581	0.2094	0.2235
105.00	0.0442	0.0486	0.1514	0.1741
120.00	0.0345	0.0412	0.1011	0.1356
150.00	0.0267	0.0309	0.0607	0.0823
180.00	0.0245	0.0246	0.0492	0.0500

VALOR DE LA FUNCION = 7.007245E - 03

X = (D = 2.454601E - 05, BETA = 4.557469E - 01, HE = 1.500002E - 02)

SH = 7.021314E - 02 K = 9.848300E - 05

CORRIDA 2

TIEMPO	HUM. EXP.	HUM. CALC.	H EXP.	H CALC.
0.00	0.2324	0.2324	1.0000	0.9999
15.00	0.1858	0.1832	0.7986	0.7901
30.00	0.1480	0.1454	0.6353	0.6242
45.00	0.1245	0.1151	0.5337	0.4932
60.00	0.0958	0.0912	0.4097	0.3897
75.00	0.0716	0.0722	0.3051	0.3079
90.00	0.0514	0.0573	0.2178	0.2433
105.00	0.0387	0.0455	0.1629	0.1922
120.00	0.0315	0.0361	0.1318	0.1519
150.00	0.0208	0.0229	0.0856	0.0948
180.00	0.0140	0.0147	0.0562	0.0592

VALOR DE LA FUNCION = 4.245614E - 03

X = (D = 2.699355E - 05, BETA = 4.221303E - 01, HE = 1.000001E - 03)

SH = 6.011581E - 02

K = 9.272796E - 05

CORRIDA 3

TIEMPO	HUM. EXP.	HUM. CALC.	H EXP.	H CALC.
0.00	0.2024	0.2024	1.0000	1.0000
15.00	0.1599	0.1566	0.7847	0.7679
30.00	0.1248	0.1214	0.6069	0.5898
45.00	0.1034	0.0944	0.4985	0.4529
60.00	0.0757	0.0737	0.3582	0.3478
75.00	0.0534	0.0577	0.2452	0.2671
90.00	0.0396	0.0455	0.1753	0.2051
105.00	0.0313	0.0361	0.1332	0.1575
120.00	0.0240	0.0285	0.0963	0.1210
150.00	0.0188	0.0191	0.0699	0.0714
180.00	0.0143	0.0133	0.0471	0.0421

VALOR DE LA FUNCION = 5.359731E - 03

X = (D = 4.401266E - 05, BETA = 3.499529E - 01, HE = 5.000005E - 03)

SH = 4.115957E - 02 K = 1.035167E - 04

CORRIDA 4

TIEMPO	HUM. EXP.	HUM. CALC.	H EXP.	H CALC.
0.00	0.2030	0.2036	1.0000	1.0000
15.00	0.1501	0.1476	0.7328	0.7200
30.00	0.1126	0.1071	0.5434	0.5185
45.00	0.0806	0.0789	0.3818	0.3733
60.00	0.0561	0.0582	0.2581	0.2688
75.00	0.0384	0.0433	0.1687	0.1936
90.00	0.0281	0.0326	0.1167	0.1394
105.00	0.0220	0.0249	0.0859	0.1004
120.00	0.0189	0.0193	0.0702	0.0723
150.00	0.0148	0.0124	0.0495	0.0375
180.00	0.0125	0.0088	0.0379	0.0194

VALOR DE LA FUNCION = 2.808396E - 03

X = (D = 5.264264E - 05, BETA = 3.569009E - 01, HE = 5.000005E - 03)

SH = 4.282441E - 02 K = 1.288223E - 04

CORRIDA 5

TIEMPO	HUM EXP.	HUM. CALC.	H EXP.	H CALC.
0.00	0.2226	0.2226	1.0000	1.0000
30.00	0.1545	0.1810	0.6742	0.8010
60.00	0.1374	0.1477	0.5924	0.6416
90.00	0.1200	0.1210	0.5092	0.5139
120.00	0.1029	0.0996	0.4274	0.4116
150.00	0.0943	0.0825	0.3863	0.3297
180.00	0.0717	0.0688	0.2782	0.2641
210.00	0.0656	0.0578	0.2490	0.2115
240.00	0.0490	0.0490	0.1696	0.1694
270.00	0.0387	0.0419	0.1203	0.1357

VALOR DE LA FUNCION = 2.378037E - 02

X = (D = 1.625516E - 05, BETA = 3.733121E - 01, HE = 1.355159E - 02)

SH = 4.689138E - 02

K = 4.355582E - 05

CORRIDA 6

TIEMPO	HUM. EXP.	HUM. CALC.	H EXP.	H CALC.
0.00	0.2167	0.2167	1.0000	1.0000
30.00	0.1804	0.1749	0.8301	0.8046
60.00	0.1464	0.1414	0.6710	0.6474
90.00	0.1251	0.1143	0.5714	0.5210
120.00	0.1001	0.0926	0.4544	0.4192
150.00	0.0746	0.0751	0.3350	0.3373
180.00	0.0576	0.0610	0.2555	0.2714
210.00	0.0442	0.0497	0.1928	0.2184
240.00	0.0300	0.0406	0.1263	0.1757
270.00	0.0266	0.0332	0.1104	0.1414

VALOR DE LA FUNCION = 9.294905E - 03

X = (D = 2.345657E = 05, BETA = 3.075600E = 01, HE = 3.000003E = 03)

SH = 3.173170E = 02 K = 4.253239E = 05

CORRIDA 7

TIEMPO	HUM. EXP.	HUM. CALC.	H EXP.	H CALC.
0.00	0.2009	0.2006	1.0000	0.9999
30.00	0.1540	0.1512	0.7528	0.7382
60.00	0.1235	0.1146	0.5921	0.5450
90.00	0.0927	0.0875	0.4297	0.4023
120.00	0.0669	0.0675	0.2937	0.2970
150.00	0.0478	0.0528	0.1931	0.2193
180.00	0.0365	0.0419	0.1335	0.1619
210.00	0.0317	0.0338	0.1082	0.1195
240.00	0.0263	0.0279	0.0798	0.0882
270.00	0.0235	0.0235	0.0650	0.0651

VALOR DE LA FUNCION = 4.881940E - 03

X = (D = 1.628616E = 05, BETA = 4.361576E = 01, HE = 1.116605E - 02)

SH = 6.423018E = 02 K = 5.977505E = 05

CORRIDA 8

TIEMPO	HUM EXP.	HUM CALC.	H EXP.	H CALC.
0.00	0.2298	0.2298	1.0000	0.9999
30.00	0.1813	0.1720	0.7843	0.7428
60.00	0.1407	0.1291	0.6036	0.5519
90.00	0.1003	0.0972	0.4239	0.4100
120.00	0.0789	0.0735	0.3287	0.3046
150.00	0.0482	0.0559	0.1922	0.2263
180.00	0.0317	0.0428	0.1188	0.1681
201.00	0.0251	0.0331	0.0894	0.1249
240.00	0.0230	0.0259	0.0801	0.0928
270.00	0.0166	0.0205	0.0516	0.0689

VALOR DE LA FUNCION = 1.049111E - 02

X = (D = 1.393065E = 05, BETA = 4.666660E = 01, HE = 5.00005E = 03)

SH = 7.366866E = 02

K = 5.864299E = 05

CORRIDA 9

TIEMPO	HUM EXP.	HUM.CALC.	H EXP.	H CALC.
0.00	0.2074	0.2074	1.0000	1.0000
30.00	0.1540	0.1497	0.7387	0.7178
60.00	0.1031	0.1083	0.4897	0.5153
90.00	0.0652	0.0786	0.3043	0.3699
120.00	0.0790	0.0573	0.3718	0.2655
150.00	0.0513	0.0420	0.2363	0.1906
180.00	0.0190	0.0310	0.0783	0.1368
210.00	0.0155	0.0231	0.0612	0.0982

VALOR DE LA FUNCION = 2.358090E - 02

X = (D = 5.304675E = 05, BETA = 2.525751E = 01, HE = 3.000003E = 03)

SH = 2.135571E = 02 K = 6.473434E = 05

CORRIDA 10

43.

TIEMPO	HUM. EXP.	HUM. CALC.	H EXP.	H CALC.
0.00	0.2075	0.2075	1.0000	1.0000
30.00	0.1749	0.1884	0.8208	0.8950
60.00	0.1728	0.1713	0.8092	0.8011
90.00	0.1614	0.1560	0.7465	0.7170
120.00	0.1373	0.1423	0.6140	0.6418
150.00	0.1241	0.1301	0.5415	0.5744
180.00	0.1223	0.1191	0.5316	0.5141
210.00	0.1095	0.1093	0.4612	0.4602
240.00	0.1030	0.1005	0.4255	0.4119
270.00	0.0934	0.0927	0.3727	0.3687
300.00	0.0863	0.0856	0.3336	0.3300

VALOR DE LA FUNCION = 8.829151E - 03

X = (D = 5.864209E - 05, BETA = 1.389296E - 01, HE = 2.561643E - 02)

SH = 6.442105E - 03

K = 2.158734E - 05

CORRIDA 11

TIEMPO	HUM. EXP.	HUM. CALC.	H EXP.	H CALC.
0.00	0.2087	0.2087	1.0000	1.0000
30.00	0.1889	0.1881	0.8993	0.8952
60.00	0.1673	0.1696	0.7895	0.8014
90.00	0.1561	0.1531	0.7326	0.7175
120.00	0.1457	0.1383	0.6797	0.6423
150.00	0.1311	0.1251	0.6055	0.5750
180.00	0.1127	0.1133	0.5119	0.5148
210.00	0.1051	0.1026	0.4933	0.4608
240.00	0.0942	0.0932	0.4179	0.4126
270.00	0.0791	0.0847	0.3411	0.3693
300.00	0.0655	0.0770	0.2720	0.3307

VALOR DE LA FUNCION = 7.143813E - 03

X = (D = 1.838983E = 05, BETA = 2.478563E = 01, HE = 1.200001E = 02)

SH = 2.056194E = 02 K = 2.160746E = 05

CORRIDA 12

TIEMPO	HUM. EXP.	HUM. CALC.	H EXP.	H CALC.
0.00	0.1955	0.1955	1.0000	1.0000
30.00	0.1773	0.1718	0.9008	0.8709
60.00	0.1640	0.1512	0.8283	0.7584
90.00	0.1396	0.1332	0.6954	0.6605
120.00	0.1234	0.1175	0.6071	0.5752
150.00	0.1086	0.1039	0.5264	0.5009
180.00	0.0961	0.0921	0.4583	0.4362
210.00	0.0805	0.0817	0.3733	0.3799
240.00	0.0667	0.0727	0.2981	0.3309
270.00	0.0554	0.0645	0.2365	0.2881
300.00	0.0471	0.0580	0.1913	0.2509

.1.

VALOR DE LA FUNCION = 1.649591E - 02

X = (D = 4.529285E = 05, BETA = 1.765270E = 01, HE = 1.200001E = 02)

SH = 1.040890E = 02 K = 2.693994E = 05

CORRIDA 13

TIEMPO	HUM. EXP.	HUM. CALC.	H EXP.	H CALC.
0.00	0.2122	0.2122	1.0000	1.0000
30.00	0.1819	0.1828	0.8509	0.8552
60.00	0.1628	0.1576	0.7569	0.7314
90.00	0.1398	0.1361	0.6437	0.6255
120.00	0.1245	0.1177	0.5684	0.5350
150.00	0.1065	0.1020	0.4798	0.4575
180.00	0.0917	0.0885	0.4070	0.3913
210.00	0.0756	0.0770	0.3278	0.3347
240.00	0.0637	0.0672	0.2692	0.2862
270.00	0.0517	0.0587	0.2101	0.2448
300.00	0.0442	0.0515	0.1732	0.2093

VALOR DE LA FUNCION = 5.697930E - 03

X = (D = 3.531627E = 05, BETA = 2.126069E = 01, HE = 9.000009E = 03)

SH = 1.511283E = 02 K = 3.049879E = 05

CORRIDA 14

TIEMPO	HUM. EXP.	HUM. CALC.	H EXP.	H CALC.
0.00	0.2056	0.2056	1.0000	0.9999
30.00	0.1764	0.1725	0.8552	0.8356
60.00	0.1546	0.1448	0.7470	0.6983
90.00	0.1383	0.1216	0.6662	0.5836
120.00	0.1076	0.1023	0.5139	0.4877
150.00	0.0880	0.0862	0.4167	0.4075
180.00	0.0702	0.0727	0.3284	0.3406
210.00	0.0546	0.0614	0.2510	0.2846
240.00	0.0458	0.0519	0.2073	0.2378
270.00	0.0355	0.0441	0.1562	0.1988
300.00	0.0295	0.0375	0.1265	0.1661

VALOR DE LA FUNCION = 1.593187E - 02

X = (D = 1.088083E - 05, BETA = 4.103890E - 01, HE = 4.000004E - 03)

SH = 5.678033E - 02 K = 3.530383 - 05

CORRIDA 15

A P E N D I C E D

CALCULO DE COVARIANCIAS

Para modelos no lineales, el estimado de covariancias puede obtenerse Himmelblau (7) por

$$\text{Covar } \mathbf{b} = (\mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{X})^{-1} \frac{\mathbf{E}^T \mathbf{E}}{n-m} \quad (\text{D-1})$$

Donde:

n = Número datos exp. puntuales

m = Número de parámetros estimados

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} E_1 \\ \vdots \\ E_n \end{bmatrix} ; E_i = (\tilde{H}_{\text{exp}} - \tilde{H}_{\text{modelo}}) \quad (\text{D-2})$$

$$\tilde{H} = \tilde{H}_{\text{modelo}}$$

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \frac{\tilde{H}_1}{k} & \frac{\tilde{H}_1}{D} \\ \vdots & \vdots \\ \frac{\tilde{H}_n}{k} & \frac{\tilde{H}_n}{D} \end{bmatrix} \quad (\text{D-3})$$

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} \text{Covar K} & \text{Covar KD} \\ \text{Covar KD} & \text{Covar D} \end{bmatrix}$$

Puesto que el modelo es

$$\tilde{H} = \frac{6 \text{Sh}^2}{\beta^2 (\beta^2 + \text{Sh} (\text{Sh}-1))} e^{-\beta^2 Dt/R^2} \quad (\text{D-4})$$

Donde:

$$\beta \cot \beta = 1 - Sh \quad (D-5)$$

$$Sh = \frac{KR}{D} \quad (D-6)$$

Entonces, las derivadas parciales de D-3, se obtienen como a continuación se indica:

Substituyendo D-6 en D-4 se obtiene:

$$\tilde{H} = f(\beta, k, D) \quad (D-7)$$

Substituyendo D-6 en D-5 y reorganizando se obtiene:

$$g(\beta, k, D) = 0 \quad (D-8)$$

Diferenciando D-7

$$d\tilde{H} = \frac{\partial f}{\partial \beta} d\beta + \frac{\partial f}{\partial k} dk + \frac{\partial f}{\partial D} dD \quad (D-9)$$

Diferenciando D-8

$$dg = \frac{\partial g}{\partial \beta} d\beta + \frac{\partial g}{\partial k} dk + \frac{\partial g}{\partial D} dD \quad (D-10)$$

Despejando $d\beta$ de D-10

$$d\beta = - \frac{\left(\frac{\partial g}{\partial k}\right)}{\left(\frac{\partial g}{\partial \beta}\right)} dk - \frac{\left(\frac{\partial g}{\partial D}\right)}{\left(\frac{\partial g}{\partial \beta}\right)} dD \quad (D-11)$$

Substituyendo D-11 en D-9

$$d\tilde{H} = \left[\frac{\partial f}{\partial k} - \frac{\left(\frac{\partial g}{\partial k}\right) \left(\frac{\partial f}{\partial \beta}\right)}{\left(\frac{\partial g}{\partial \beta}\right)} \right] dk + \left[\frac{\partial f}{\partial D} - \frac{\left(\frac{\partial g}{\partial D}\right) \left(\frac{\partial f}{\partial \beta}\right)}{\left(\frac{\partial g}{\partial \beta}\right)} \right] dD \quad (D-12)$$

Si

$$\tilde{H} = \tilde{H}(k, D) \quad (D-13)$$

Entonces:

$$d\tilde{H} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial k} dk + \frac{\partial \tilde{H}}{\partial D} dD \quad (D-14)$$

Comparando D-12 con D-14

$$\frac{\partial \tilde{H}}{\partial k} = \frac{\partial f}{\partial k} - \frac{\left(\frac{\partial f}{\partial \beta}\right) \left(\frac{\partial g}{\partial k}\right)}{\left(\frac{\partial g}{\partial \beta}\right)} \quad (D-15)$$

$$\frac{\partial \tilde{H}}{\partial D} = \frac{\partial f}{\partial D} - \frac{\left(\frac{\partial f}{\partial \beta}\right) \left(\frac{\partial g}{\partial D}\right)}{\left(\frac{\partial g}{\partial \beta}\right)} \quad (D-16)$$

Que son las derivadas parciales requeridas en D-3 y que con D-15 y - D-16 pueden ser obtenidas a partir de derivadas parciales de funciones conocidas.