2/3

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

TECNICAS DE SOLUCION DE ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES APLICADAS EN INGENIERIA QUIMICA

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:

INGENIERO QUIMICO

P R E S E N T A :

MARGARITO DEMETRIO AGUILAR DOMINGUEZ

MEXICO, D. F. 1988

INDICE PAG.

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

La Ingeniería Química aplica los principios Científicos, Económicos y Sociales en el diseño de procesos y equipo de proceso, con los cuales se transforma la materia, ya sea en su composición, estado físico o contenido de energía, generando bienes económicos y sociales. En la etapa de diseño se idealiza el comportamiento de equipo mediante modelos matemáticos, cuya solución se acepta como una buena aproximación del comportamiento real y es utilizada para dimensionar el equipo.

Los modelos matemáticos más comunes en procesos químicos de contacto contínuo, son Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP) que en general, no tienen solución analítica o es muy complicado el obtener dicha solución; para facilitar la solución del problema se simplifica el modelo matemático a un nivel tal que, se puede obtener una solución analítica; sin embargo la solución así obtenida puede no representar correctamente el comportamiento del equipo. Esta problemática puede ser evitada haciendo uso de técnicas numéricas las cuales, no involucren alguna simplificación del modelo matemático del proceso de tal manera que, la solución se aproxime al comportamiento real.

El presente trabajo se ha elaborado como un apoyo didáctico, para la resolución de problemas que involucren EDP utilizando Técnicas Númericas programadas en lenguaje BASIC. El uso de computadoras evita que el usuario deba tener una formación avanzada en matemáticas para resolver problemas de interes inmediato, fortaleciendo su formación en la parte fenomenológica de la Ingeniería Química.

C A P I T U L O I I

G E N E R A L I D A D E S

GENERALIDADES SOBRE ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES

Una EDP es una regla de correspondencia, la cual relaciona una función desconocida con las derivadas parciales (respecto a dos o más variables independientes) de dicha función.
A continuación se presentan algunos aspectos importantes de éste tipo de ecuaciones.

El DOMINIO de una EDP es una región definida y delimitada, por los valores que se asignan a las variables independientes de la ecuación diferencial.

Las condiciones en la frontera e iniciales, son funciones o ecuaciones diferenciales definidas sobre el contorno del dominio de la EDP.

Considerese la siguiente EDP definida sobre el dominio "D"

$$F(x,y,U,U_x,U_{xx},U_{xy}) = 0 \quad . . . \quad (i)$$

la SOLUCION de la ecuación anterior, es cualquier función $U(x,y)$ cuyas derivadas parciales U_x, U_{xx}, U_{xy} existen en cada punto (x,y) del dominio "D" (excepto quizás en la frontera) y que al ser sustituidas en la ecuación diferencial, se cumple la identidad (i).

LINEALIDAD Y ORDEN. Se dice que una ecuación diferencial parcial es lineal, si está o se puede expresar en la forma:

$$A(x,y)U_{xx}+B(x,y)U_{xy}+C(x,y)U_{yy}+D(x,y)U_x+E(x,y)U_y+F(x,y)U = G(x,y)$$

una de las propiedades más importantes de la EDP lineales es la siguiente: "Si existe un conjunto de soluciones de la EDP, entonces una combinación lineal de éstas, tambien es una solución de la EDP".

$$U = aU_1 + bU_2 + \cdot\ \cdot\ \cdot + jU_n$$

El orden de la derivada superior de una EDP, se considera como el orden de la ecuación diferencial; por ejemplo la siguiente EDP es de orden dos:

$$U_{xx} + U_y - aU = 0$$

Clasificación. En el análisis de la mayoria de sistemas dinámicos ya sean físicos, químicos, biológicos, económicos, etc. surgen EDP las cuales contienen derivadas parciales hasta de segundo orden; debido a ésto las EDP de segundo orden son las más ampliamente estudiadas y es conveniente clasificar las EDP en términos de las de segundo orden.

Esta forma de clasificación es aceptable ya que las ecuaciones diferenciales de primer orden frecuentemente se pueden reducir a sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias y las de orden superior se estudian basandose en las técnicas existentes para las de segundo orden.

Regla del discriminante. Esta forma de clasificación se fundamenta en los operadores diferenciales siguientes:

a) Operador de Laplace o elíptico.

b) Operador de Difusión o parabólico.

c) Operador D'Alembert o hiperbólico.

El operador elíptico surge en problemas donde intervienen fuerzas conservativas, se denomina frecuentemente operador de potencial. El operador parabólico surge en problemas de difusión ya sea de masa, calor o momentum.

El operador hiperbólico surge en fenómenos de carácter ondulatorio.

La regla del discriminante, establece una ecuación generalizada (i), definiendo el discriminante de dicha ecuación por (ii) y clasifica las EDP con base en el valor de su discriminante.

$$AU_{xx} + 2BU_{xy} + CU_{yy} + DU_x + EU_y + FU + G = 0 \qquad (i)$$

$$\text{DISC.} = AC - B^2 \qquad (ii)$$

EDP	DISC.
ELIPTICA	POSITIVO
PARABOLICO	CERO
HIPERBOLICA	NEGATIVO

Es conveniente mencionar que las EDP se han clasificado con base en su comportamiento y por lo tanto una misma ecuación se puede clasificar de diversas formas; la siguiente EDP surge en la dinámica de los gases y tiene tres comportamientos:

$$yU_{xx} + U_{yy} = 0$$

Si $y > 0$ flujo subsónico . . . elíptica

Si $y = 0$ flujo sónico . . . . . parabólica

Si $y < 0$ flujo supersónico. . . hiperbólica

C A P I T U L O III

G E N E R A L I D A D E S

GENERALIDADES SOBRE MODELOS DE EDP UTILIZADOS EN ING. QUIMICA

El tratamiento matemático de los procesos químicos consta de las siguientes etapas fundamentales:

1) Expresión del proceso químico en lenguaje matemático.
2) Resolución del modelo matemático.
3) Interpretación de los resultados obtenidos.

Expresión del proceso químico en lenguaje matemático.
El análisis de los procesos químicos consiste en determinar, los cambios producidos sobre la materia al interaccionar con alguna forma de energía motriz, para proporcionar un material procesado. Para poder cuantificar dichos cambios, se asigna un conjunto de variables independientes y dependientes a las propiedades mensurables de la materia y energía, estableciendo además las relaciones existentes entre las variables y parámetros del proceso usando para esto, los siguientes principios fundamentales, los cuales se han comprobado experimentalmente.

1) Conservación de materia y energía.
2) Dirección natural de los procesos espontáneos.
3) Equilibrio fisicoquímico.
4) Cinética de las reacciones químicas.

El conjunto de relaciones así obtenidas se denomina MODELO MATEMATICO e idealiza el comportamiento real del proceso químico; se pueden formular diversos modelos matemáticos de un mismo proceso dependiendo del grado de aproximación deseado.

Conceptos fundamentales para la formulación de una EDP

En sistemas macroscópicos, la naturaleza discreta de la materia y energía, se considera como una distribución contínua a través del espacio y se representa por una función continua de la posición.

En los procesos químicos donde ocurren cambios continuos sobre la materia, ya sea en su composición como en su contenido de energía, la relación existente entre las variables independientes y dependientes de dicho proceso, deberá ser continua. El postulado anterior es suficiente para asegurar en términos matemáticos, la existencia de las derivadas parciales y de la diferencial de las variables dependientes.

Un ELEMENTO DIFERENCIAL es la fracción más pequeña de un sistema, el cual contiene una cantidad suficiente de moléculas, de tal forma que sea válido hacer promedios estadísticos.

Una propiedad puntual es un promedio estadístico de la cantidad de materia o energía de las moléculas, contenidas en un elemento diferencial. Para facilitar el tratamiento matemático, el concepto de elemento diferencial y propiedad puntual se pierde como se puede observar en la siguiente definición:

$$d = \lim_{v \to v_d} (w/v) \qquad d = \lim_{v \to 0} (w/v)$$

d densidad

v_d elemento diferencial

A continuación se presenta un problema de transferencia de calor, en el que se tratarán algunos conceptos adicionales como son: condiciones en la frontera, selección del elemento diferencial, discontinuidades y significado físico de la EDP asociada.

Un fluido viscoso es transportado por un sistema de bombeo a través de una tuberia expuesta al medio ambiente.

Se desea hacer más económico el transporte del fluido; para lograr ésto, se propone disminuir la carga de bombeo precalentando el fluido y aislando térmicamente la tuberia.
Para evaluar si éste nuevo sistema es más económico, es necesario estimar la energía térmica disipada al medio ambiente y la temperatura del fluido en la salida de la tuberia.

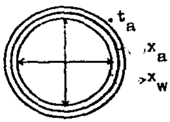
Descripción del problema.
El objetivo principal es la evaluación de las pérdidas de energía a través de la tuberia, para lo cual se impondrán las siguientes condiciones:

1) La tuberia está aislada térmicamente en forma homogénea e instalada horizontalmente.
2) La temperatura del medio ambiente es constante.
3) El régimen de flujo es laminar en estado estable.

Los resultados obtenidos solo serán una aproximación debido a que se ha idealizado el sistema. El "modelo anterior es conservativo y acepta indirectamente que el calor se transfiere por conducción, por lo tanto para cuantificar las pérdidas de energía, es suficiente aplicar un balance de energía y usar la Ley de Fourier para evaluar la velocidad de transferencia de calor en el sistema.

Análisis cualitativo preliminar. A partir de la entrada del fluido a la tuberia y durante su estancia dentro de ésta, pierde energía térmica y por lo tanto disminuye su temperatura generando una distribución de temperatura en el sistema.

Mecanismos de transferencia de calor. Las condiciones (1) y (2) impuestas al sistema real, muestran que el calor se transfiere con simetría radial (fig. 1) y en la dirección axial debido al transporte de la energía inherente al flujo del fluido y por conducción (fig. 2).



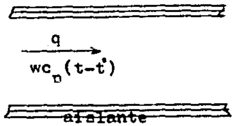
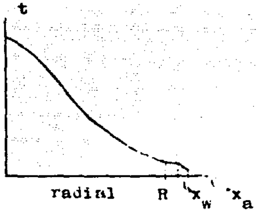
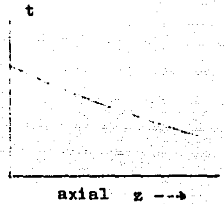


fig. 1

fig. 2



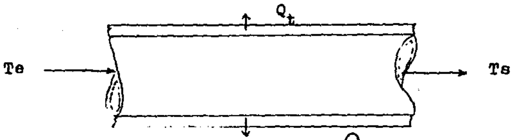


Perfiles esperados de temperatura.

Balance de energía.

La transferencia de calor en la pared de la tuberia, depende del área de transferencia, del gradiente de temperatura, de las propiedades del sistema (fluido-metal-aislante) y se manifiesta en forma <u>local</u> en cada punto de la tuberia.

Balance de energía integral.



$$Q_t = w\ Cp\ (Te - Ts) = \int q\ dA$$

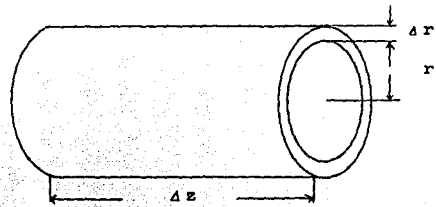
$$q = (-k\ \partial t / \partial r)_R$$

Con los datos disponibles no es posible evaluar la integral y es necesario hacer un balance diferencial de energía.

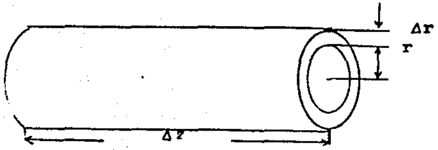
Selección del elemento diferencial. Utilizando los resultados del análisis preliminar, el elemento diferencial deberá satisfacer las siguientes condiciones:

1) En la frontera del elemento diferencial se deberá manifestar un flux de calor radial y axial.
2) Se definirá en coordenadas cilíndricas y estará orientado simétricamente (fig. 3).
3) Las dimensiones son arbitrarias, por lo tanto, son independientes.

El elemento diferencial que satisface éstas condiciones es un ánulo concéntrico.



Balance de energía diferencial.



área de transferencia		flux	
radial	$2\pi r \Delta z$	masa	$v\rho$
axial	$2\pi r \Delta r$	calor radial	$-k_r\, \partial t/\partial r$
		calor axial	$-k_z\, \partial t/\partial z$
		entalpia	$v\rho H$

entradas = salidas + acumulación

$v\rho H\ 2\pi r \Delta r)_z \qquad v\rho H\ 2\pi r\Delta r)_{z+\Delta z}$

+

$-k_r \partial t/\partial r\ 2\pi r\Delta z)_r = -k_r\partial t/\partial r\ \ 2\pi r\Delta z)_{r+\Delta r}$

+

$-k_z \partial t/\partial z\ 2\pi r\Delta r)_z = -k_z\partial t/\partial z\ \ 2\pi r\Delta r)_{z+\Delta z}$

agrupando los términos anteriores y como r z no depende de la posición, se tiene lo siguiente:

$$(v\rho Hr)_{z+\Delta z} - v\rho Hr)_z\ )/\Delta z = (k_z\ r\partial t/\partial z)_{z+\Delta z} - k_z\ r\partial t/\partial z)_z)/\Delta z + (k_r\ r\partial t/\partial r)_{r+\Delta r} - k_r\ r\partial t/\partial r)_r)/\Delta r$$

en el límite cuando Δz , $\Delta r \to 0$ los términos anteriores se definen como las derivadas parciales.

$$\partial(v\rho Hr)/\partial z = \partial(k_z\, r\partial t/\partial z)/\partial z + \partial(k_r\, r\partial t/\partial r)/\partial r$$

Condiciones adicionales.

1) El medio es isotrópico $k_r = k_z = k$
2) Las propiedades del fluido se consideran constantes.
3) La velocidad del fluido no depende de la posición axial y la entalpia se define como $H = Cp(t-t^*)$

$$v\rho Cp\, \partial t/\partial z = k(\partial^2 t/\partial z^2 + \partial^2 t/\partial r^2 + \partial t/r\partial r) \;.\;.\;. \quad (a)$$

La EDP anterior representa el comportamiento que deberá tener la temperatura en cada punto (r,z) de la tuberia (excepto en la pared), siempre y cuando el sistema real se comporte de acuerdo al modelo propuesto ".

Condiciones en la frontera. Las condiciones en la frontera, son las interacciones del sistema real con el exterior y cualquier modelo propuesto deberá satisfacerlas; en el presente problema se tienen que cumplir las siguientes:

1) El flujo de calor en cada punto de la tuberia es constante y se determina con las ecuaciones siguientes:
   $q = (-k\, \partial t/\partial r)_R)\, dA = (Tamb. - t(R,z))\, dA/Re$
2) La temperatura de entrada es homogénea $t(r,0)$ = constante

Las discontinuidades se manifiestan en las intercaras fluido-metal-aislante-medio ambiente; ésta es una de las causas principales por las que la EDP no está definida en la frontera. (ver perfil radial de temperatura).

C A P I T U L O   lV

METODOS DE SOLUCION DE EDP.

METODOS DE SOLUCION DE EDP.

La teoría de las EDP no está muy desarrollada, debido a ésto, los métodos más importantes para resolver éste tipo de ecuaciones, las transforman en sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias, transformadas integrales o sistemas lineales algebráicos. Los métodos considerados en el presente trabajo son los siguientes:

Analíticos

1.- Separación de variables.
2.- Transformada de Laplace.

Numéricos

1.- Diferencias finitas.
2.- Elemento finito.
3.- Curvas características.

SEPARACION DE VARIABLES

El método de separación de variables es aplicable a EDP lineales homogéneas cuyas condiciones en la frontera sean de la forma siguiente:

$$aU_x\ (0,t) + bU(0,t) = 0$$
$$cU_x\ (1,t) + dU(1,t) = 0$$

el método supone que la solución de la EDP es el producto de funciones de una variable independiente $U(x,t) = f(x)\ g(t)$ la cual al ser sustituida en dicha ecuación, genera un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias. Para describir el método, considerese la resolución de la ecuación de calor siguiente:

$$a^2\ U_{xx} = U_t \qquad 0 < x < 1 \quad ; \quad t > 0$$
$$U(x,0) = h(x) \qquad 0 \leq x \leq 1$$
$$U(0,t) = 0$$
$$U(1,t) = 0 \qquad t > 0$$

sea $U(x,t) = f(x)\ g(t)$ entonces

$$U_x = g(t)f'(x)$$
$$U_{xx} = g(t)f''(x)$$
$$U_t = f(x)g'(t)$$

al sustituir las derivadas parciales anteriores en la ecuación de calor, se obtienen las siguientes ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$a^2g(t)f''(x) = f(x)g'(t)$$

$$f''(x)/f(x) = g'(t)/a^2g(t)$$

derivando parcialmente respecto a "x", se tiene:

$$(f''(x)/f(x))_x = (g'(t)/a^2g(t))_x = 0$$

de lo anterior se deduce que

$$f''(x)/f(x) = g'(t)/a^2g(t) = \text{constante} = b$$

$$f''(x) - bf(x) = 0 \quad . \; . \; . \; . \; (1)$$

$$g'(t) - ba^2g(t) = 0 \quad . \; . \; . \; . \; (2)$$

el parámetro "b" puede ser nulo, real o imaginario y se selección depende de las condiciones en la frontera.

a) Sea $b = 0$ entonces las ecuaciones (1), (2) se reducen a:

$$f''(x) = 0 \quad ; \quad f(x) = d + mx$$

$$g'(t) = 0 \quad ; \quad g(t) = k$$

la solución de la ecuación de calor será entonces:

$$U(x,t) = k' + m'x$$

al aplicar las condiciones frontera

$$U(0,t) = 0 = k' \quad ; \quad k' = 0$$

$$U(1,t) = 0 = m'1 \quad ; \quad m' = 0$$

la solución es trivial $U(x,t) = 0$ y carece de significado físico.

b) Sea $b=-k^2$ entonces las ecuaciones (1) y (2) se definen:

$$f''(x) + k^2 f(x) = 0$$
$$g'(t) + k^2 a^2 g(t) = 0$$

se puede demostrar que la solución de la ecuación (1) que satisface las condiciones en la frontera son:

$$f(x) = K1 \text{ sen } n\pi x/1$$

donde $k^2 = n^2 \pi^2/1^2$

la solución de la ecuación (2) será entonces:

$$g(t) = K2 \exp(-(an\pi/1)^2 t)$$

la solución de la ecuación de calor será entonces:

$$U_n(x,t) = A_n \exp(-(an\pi/1)^2 t) \text{ sen } n\pi x/1$$

para $n = 1,2,...,$

debido a que la ecuación de calor es lineal, una combinación lineal de las soluciones anteriores, será también una solución.

$$U(x,t) = \sum_1^\infty U_n(x,t) = \sum_1^\infty A_n \exp(-(an\pi/1)^2 t) \text{ sen } n\pi x/1$$

las constantes A_n son determinadas utilizando la condición inicial.

$$U(x,0) = h(x) = \sum_1^\infty A_n \text{ sen } n\pi x/1$$

TRANSFORMADA DE LAPLACE

Uno de los métodos de gran utilidad para la resolución de ecuaciones diferenciales lineales, es el de las transformadas integrales donde una función f(t) se transforma en otra función F(s) por medio de la integral siguiente:

$$F(s) = \int_a^b K(s,t)\, f(t)\, dt$$

la función F(s) se llama la transformada de f(t) y K(s,t) el núcleo de la transformación; cuando se hace una selección apropiada de K(s,t) y de los límites de integración, en ocasiones es posible reducir el problema de f(t) en otro problema más sencillo para F(s).

Existen diversas transformaciones integrales, donde cada una de ellas es apropiada para resolver cierto tipo de ecuaciones diferenciales. A continuación se presentan las propiedades más importantes de la Transformada de Laplace y la aplicación de ésta para resolver ecuaciones diferenciales parciales lineales.

Definición: Se dice que f es una función de orden exponencial en el intervalo $[C, \infty)$ si existen constantes C y q ; C > 0 tales que $f(t) = C \exp(qt)$ para todo $t > 0$

Sean f y h funciones continuas o seccionalmente continuas de orden exponencial entonces:

a) Existe un número real "a" tal que la transformada de Laplace converge para todos los valores de $s > a$ y define una función $F(s)$ cuyo dominio es el intervalo (a,∞)

$$F(s) = L(f(t)) = \int_0^{\infty} \exp(-st)f(t)dt \quad ; \quad s > a$$

b) La solución de la ecuación $L(f(t)) = F(s)$ es única y se llama la transformada inversa de Laplace.

$$f(t) = L^{-1}(F(s))$$

c) Linealidad del operador transformada L

$$L(af(t) + bh(t)) = aL(f(t)) + bL(h(t))$$

d) $L(\exp(at)f(t)) = F(s-a)$

e) $L((-t)^k f(t)) = d^k F/ds^k$

Si $U(x,t)$; $a \leq x \leq b$ y $t > 0$ es una función de orden exponencial y bien comportada de tal forma que pueda ser intercambiado el proceso de diferenciación por el de integración, se puede demostrar:

$$L(U_x) = dQ(x,s)/dx$$

$$L(U_{xx}) = d^2Q(x,s)/dx^2$$

$$L(U_t) = -U(x,0) + sQ(x.s)$$

donde $$Q(x,s) = \int_0^{\infty} \exp(-st)U(x,t)dt$$

Considere la ecuación de calor siguiente:

$$\begin{array}{rcll} u_t & = & a^2u_{xx} & 0 < x < \infty; \quad \infty > t > 0 \\ u(x,0) & = & 0 & x > 0 \\ u(0,t) & = & 1 & t > 0 \end{array}$$

aplicando la transformada de Laplace se obtiene la ecuación diferencial ordinaria:

$$-u(x,0) + sU(x,s) = a^2d^2U(x,s)/dx^2$$

donde $$U(x,s) = \int_0^{\infty} \exp(-st)u(x,t)dt$$

la solución de la ecuación anterior es:

$$U(x,s) = A\exp(-x\sqrt{s}/a) + B\exp(x\sqrt{s}/a)$$

para encontrar los valores de las constantes A,B se usan las condiciones:

a) $U(0,s) = L(u(0,t)) = L(1) = 1/s$

b) Como $u(x,t)$ es de orden exponencial, se puede demostrar que $\lim_{s \to \infty} U(x,s) = 0$;

de esta forma, la solución se reduce a:

$$U(x,s) = \exp(-x\sqrt{s}/a)/s$$

consultando la tabla de transformadas del apéndice, se obtiene como solución de la ecuación de calor:

$$u(x,t) = \operatorname{erfc}(x/2a\sqrt{t})$$

METODOS NUMERICOS

Las ecuaciones diferenciales parciales que surgen con mayor frecuencia en problemas de Ingeniería Química son no lineales, sistemas o bien se dispone de información en forma tabulada; debido a ésto es necesario resolverlas utilizando técnicas numéricas.

En general las técnicas numéricas transforman las EDP en sistemas de ecuaciones algebráicas cuya solución, es aceptada como una buena aproximación de la solución "real" y se presenta como un conjunto de datos tabulados.

La exactitud de la solución obtenida es difícil de evaluar, sin embargo si la técnica numérica satisface los siguientes criterios de convergencia y estabilidad, la exactitud es determinada por la precisión de la computadora.

ESTABILIDAD.- Se dice que una técnica numérica es estable, cuando no se manifiesta un crecimiento del error involucrado al redondear los datos iniciales.
El error de redondeo se origina porque la aritmética realizada por la computadora, involucra números reales con solo un número finito de dígitos con el resultado de que los cálculos se hacen con representaciones aproximadas de los números verdaderos.

Crecimiento del error de redondeo. Cualquier número real pue de ser representado por:

$$y = 0.d_1d_2. . . d_kd_{k+1}. . . x10^n$$

donde los dígitos son:

$$1 \leq d_1 \leq 9 \; ; \quad 0 \leq d_k \leq 9 \; ; \quad n = 1,2,...,$$

el redondeo del número anterior consiste en truncar dicho número en k dígitos y se representa:

$$fl(y) = 0.d_1d_2. . . d_k \; x10^n$$

La aritmética simplificada de una computadora consiste en redondear los números reales, hacer la operación aritmética y redondear nuevamente el resultado; de aquí que el crecimiento del error depende de la cantidad y tipo de operaciones algebraícas realizadas.

$$(x+y)/z = fl(fl(fl(x) + fl(y))/fl(z))$$

Considerese un error inicial "e" el cual crece hasta E_n despúes de n operaciones algebraícas subsecuentes.

Si $\| E_n \| = Cne$ donde C no depende de n, se dice que el crecimiento del error es lineal.

Si $\|E_n\| = k^n e$; $k > 1$, el crecimiento del error es exponencial.

Debido a que el crecimiento de error lineal es inevitable, cualquier técnica numérica en la que ocurra éste tipo de error, se considera como estable mientras que cuando ocurre un crecimiento de error exponencial, la técnica numérica será inestable.

CONVERGENCIA. Se dice que un método de diferencia finita es convergente con respecto a la ecuación diferencial que aproxima si:

$$\lim_{h \to 0} \max \| U_i - W_i \| = 0 \quad \text{para} \quad i = 1, \ldots, N$$

donde U_i es la solución de la ecuación diferencial y W_i es la mejor aproximación de U_i.

Velocidad de convergencia. Como fué mencionado con anterioridad, el crecimiento del error aumenta de acuerdo al número de operaciones aritméticas realizadas por lo tanto, es deseable una convergencia rápida de la técnica numérica.

Si $\lim_{x \to 0} F(x) = L$ se dice que la velocidad de convergencia es de orden $O(g(x))$ si existe un número $k > 0$ independiente de x, tal que:

$\|F(x) - L\| \,/\, \|g(x)\| = k$ para $x > 0$ lo suficientemente pequeña; lo anterior se puede expresar como:

$$F(x) = L + O(g(x))$$

donde $\quad \displaystyle O(g(x)) \longrightarrow 0$
$\qquad\quad x \longrightarrow 0$

DIFERENCIAS FINITAS

El Método de Diferencias Finitas (MDF) es aplicable a la mayoria de EDP no obstante, en el presente trabajo solo se consideran aquellas ecuaciones cuyo dominio sea una región en R^2.

Fundamento. El MDF transforma la EDP y condiciones frontera e iniciales, en un sistema de ecuaciones algebraícas al reemplazar cada una de las derivadas parciales en la ecuación diferencial, por cocientes de diferencia finita.

Aproximación de las derivadas parciales. Sea $U(x,y)$ una función con derivadas parciales continuas en (x,y) y de orden "n" ; si h es un incremento de la variable "x" entonces, la serie de TAYLOR de U se define como:

$$U(x+h,y) = U(x,y) + hU_x + h^2U_{xx}/\,2 \;+ \ldots + h^n\overset{*}{U}_{x}n/n!$$

donde $\overset{*}{U}_{x}n = U_xn(\overset{*}{x},y)$; $x < \overset{*}{x} < x+h$, el término $E(h^n)=h^nU_xn/n!$ se llama error de truncamiento y tiene la siguiente propiedad:

$$\lim_{h \to 0} E(h^n) = 0$$

Considerese las series truncadas

$$U(x+h,y) = U(x,y) + hU_x + h^2U_{xx}/2 + h^3U_x3/6 + h^4\overset{*}{U}_x4/24$$

$$U(x-h,y) = U(x,y) - hU_x + h^2U_{xx}/2 - h^3U_x3/6 + h^4\overset{*}{U}_x4/24$$

al sumar las series anteriores, se obtiene una forma explícita para representar la derivada parcial de segundo orden.

$$U_{xx} = (U(x+h,y) - 2U(x,y) + U(x-h,y))/h^2 - h^2\overset{*}{U}_x4/12$$

en forma semejante se obtienen las derivadas parciales de primer orden.

$$U_x = (U(x+h,y) - U(x,y))/h - h\overset{*}{U}_{xx}/2$$

$$U_x = (U(x,y) - U(x-h,y))/h + h\overset{*}{U}_{xx}/2$$

$$U_x = (U(x+h,y) - U(x-h,y))/2h - h^2\overset{*}{U}_x3/3$$

la ultima aproximación para U_x converge más rapidamente debido al término h^2, ésta propiedad es utilizada para generar métodos eficientes de resolución de EDP. A continuación se describen los métodos Diferencia Progresiva, Regresiva y Crank-Nicolson aplicados a la ecuación de difusión.

Considerese la ecuación de difusión

$$U_t - U_{xx} = 0 \qquad 0 < x < L \;;\; 0 < t < T$$

$$U(0,t) = 0 \qquad 0 < t < T$$
$$U(L,t) = 0$$
$$U(x,0) = f(x) \qquad 0 \leq x \leq L$$

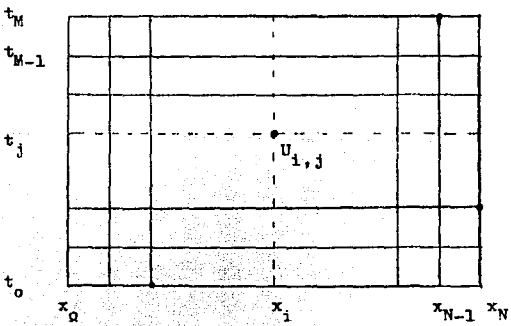
1.- Hacer una partición homogénea del dominio

$$x_o,\ x_1,\dots,x_n \;;\; x_{i+1} = x_i + h$$

$$t_o,\ t_1,\dots,t_n \;;\; t_{j+1} = t_j + k$$

donde $h = L/N$ y $k = T/M$

2.- En cada nodo $(x_i,t_j) = (i,j)$ representar las condiciones frontera e iniciales y la solución $U(x_i,t_j) = U_{i,j}$



a) El método de diferencia progresiva utiliza las aproximaciones

$$U_t = (U_{i,j+1} - U_{i,j})/k - O(k)$$

$$U_{xx} = (U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j})/h^2 - O(h^2)$$

al sustituir éstas en la ecuación diferencial se obtiene

$$(U_{i,j+1} - U_{i,j})/k - (U_{i-1} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j})/h^2 + O(h^2 + k) = 0$$

si h y k son lo suficientemente pequeños entonces $O(h^2 + k) = 0$

$$U_{i,j+1} = aU_{i-1,j} + (1 - 2a)U_{i,j} + aU_{i+1,j} \quad ; \quad a = k/h^2$$

la ecuación de recurrencia anterior está definida en cada nodo (i,j) tal que $i = 1,\ldots,N-1$; $j = 0,\ldots,M-1$. Para algun valor de "j", la ecuación anterior genera el sistema lineal

$$U_{j+1} = A\ U_j$$

donde A es la matriz tridiagonal $(a,1-2a,a)$ y U_j es el vector solución $(U_{o,j},U_{1,j},\ldots,U_{N,j})$.

Se puede demostrar (REF.1) que la matriz A es inestable para valores de $a > 1/2$ lo cual restringe el tamaño de la partición a $k/h^2 \leq 1/2$

b) El método de diferencia regresiva utiliza las aproximaciones:

$$U_t = (U_{i,j} - U_{i,j-1})/k + O(k)$$

$$U_{xx} = (U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j})/h^2 - O(h^2)$$

siguiendo el procedimiento anterior se obtiene, el sistema lineal

$$A\,U_j = U_{j-1} \qquad \text{para } j = 1,\ldots,M-1$$
$$i = 1,\ldots,N-1$$

donde A es la matriz tridiagonal (-a , 1+2a , -a) y es estable para cualquier valor de "a" (REF. 1). El método es incondicionalmente estable y tiene un orden de convergencia $O(h^2 + k)$.

c). El método de Crank-Nicolson es incondicionalmente estable y tiene un orden de convergencia $O(h^2 + k^2)$. Utiliza un promedio de las aproximaciones de diferencia progresiva en el j-ésimo paso en "t" y de diferencia regresiva en el (j+1) paso en "t".

$$U_t = ((U_{i,j+1} - U_{i,j}) + (U_{i,j+1} - U_{i,j}))/2k$$

$$U_{xx} = ((U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}) + (U_{i+1,j+1} - 2U_{i,j+1} + U_{i-1,j+1}))/2h^2$$

el sistema lineal asociado es:

$$AU_{j+1} = BU_j \qquad \text{para } j = 1,\ldots,M-1$$
$$i = 1,\ldots,N-1$$

para un valor finito de h,k el método de Crank-Nicolson aproxima mejor a la EDP debido a que $O(h^2+ k^2) < O(h^2+ k)$.

METODO DEL ELEMENTO FINITO

Algunos problemas que involucran EDP pueden ser representados por problemas variacionales equivalentes, los cuales proporcionan una alternativa útil para obtener una solución aproximada de la EDP.

A continuación se presenta un problema variacional que conduce a la ecuación de Laplace y se describirán los métodos de Rayleigh-Ritz y del Elemento Finito.

Considerese una curva cerrada $\Gamma(x,y)$ que delimita una región $A(x,y)$; sean $p(x,y)$ y $g(x,y)$ funciones definidas en A y Γ respectivamente. Se desea encontrar una función $U(x,y)$ que sea $\mathcal{C}^2$ en A y que satisface $U = g$ en Γ tal que minimice la integral siguiente:

$$I = \int_A ((U_x^2 + U_y^2)/2 - pU)\, dA$$

Sea $U = W(x,y) + e\, Q(x,y)$ una familia de funciones $\mathcal{C}^2$ donde "e" es un parámetro de ajuste; si W minimiza la integral I entonces:

$$dI/de = 0 \qquad \text{cuando } e=0$$
$$W = g \qquad \text{en } \Gamma\ (Q=0 \text{ en } \Gamma)$$

al sustituir la función U en la integral I y evaluando la derivada en e=0 se tiene lo siguiente:

$$\int_A (W_x Q_x + W_y Q_y - pQ)\, dA = 0$$

utilizando el teorema de la divergencia, la integral anterior se transforma en:

$$\int_\Gamma W_n\, Q\, ds - \int_A (W_{xx} + W_{yy} + p)\, dA = 0$$

donde W_n es la derivada normal, debido a que Q=0 en Γ se reduce a:

$$\int_A (W_{xx} + W_{yy} + p)\, Q\, dA = 0$$

como Q fué seleccionada en forma arbitraria, ésta integral es nula solamente si:

$$W_{xx} + W_{yy} + p = 0 \qquad \text{para } (x,y) \text{ en } A$$

$$w = g \qquad \text{en } \Gamma$$

" Si Γ, p , g son funciones continuas, la solución W de la EDP anterior es única y minimiza la integral I ".

Usando el procedimiento anterior, las siguientes EDP tienen asociadas las integrales I,J

$$W_{xx} + W_{yy} + p = 0 \qquad (x,y) \text{ en } A$$

$$W_n = f(s) \qquad \text{en } \Gamma$$

$$J = \int_A ((U_x^2 + U_y^2)/2 - pU)\, dA - \int_\Gamma f(s)\, ds$$

$$(pW_x)_x + (qW_y)_y + rW = f \qquad (x,y) \text{ en } A$$

$$W = g \qquad \text{en } l_i$$

$$p W_x \cos\theta 1 + q W_y \cos\theta 2 + g_1 W = g2 \qquad \text{en } l_{ii}$$

donde $l = l_i U\, l_{ii}$ es frontera

$$I = ((pU_x^2 + qU_y^2 - rU^2)/2 + fU)\, dA + (-g_2 U + g1U^2/2)\, ds$$

METODO DE RAYLEIGH-RITZ

Para describir el método se utilizará la ecuación de Laplace y su integral asociada I.

$$U_{xx} + U_{yy} = 0 \qquad \text{para } (x,y) \text{ en } A$$
$$U = f(x,y) \qquad \text{para } (x,y) \text{ en } L \text{ (frontera de } A)$$

$$I = \int_A (U_x^2 + U_y^2)/2 \, dA$$

Se propone como solución de la ecuación diferencial una combinación lineal de funciones prescritas $hj(x,y)$ con las siguientes características:

$$h(x,y) = ho(x,y) + \sum_1^n cj(x,y)$$

$$ho(x,y) = f(x,y) \qquad \text{para } (x,y) \text{ en } L$$
$$hj(x,y) = 0 \qquad \text{para } (x,y) \text{ en } L \qquad j \neq 0$$

Como $h(x,y)$ es una solución de la ecuación diferencial entonces deberá minimizar la integral I; para que se cumpla ésta condición, los parámetros cj se calculan usando el siguiente criterio:

$$\partial I/\partial cj = 0$$
$$\int_A ((ho_x + c_1 hl_x + \dots + c_n hn_x)\, hj_x + (ho_y + c_1 hl_y + \dots + c_n hn_y)\, hj_y)\, dA = 0 \qquad j = 1,2,\dots,n$$

Al evaluar las integrales anteriores, se forma un sistema de "n" ecuaciones algebraícas cuyas incognitas son los parámetros c_j.

La exactitud de la solución obtenida depende del criterio de selección de las funciones $h_j(x,y)$ y del número de éstas; cuando las funciones mencionadas son polinomios lineales, se genera una técnica numérica denominada Método del Elemento Finito (MEF) y es aplicable a EDP que posean un principio variacional.

DESCRIPCION DEL MEF.

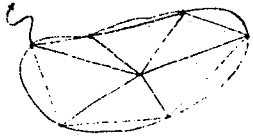
Se hace una partición del dominio de la EDP en elementos triangulares o rectangulares, asegurando que la partición forme adecuadamente la frontera del dominio; en la intersección de los triángulos (nodos) se define un polinomio segmentario con las siguientes propiedades:

$$hi(x,y) = a_i + b_i x + c_i y$$

$$h_i(E_k) = \begin{cases} 1 & i=k \\ 0 & i \neq k \end{cases}$$

$$h_i(E_k)h_j(E_p) = \begin{cases} 1 & i=k \text{ y } j=p \\ 0 & i \neq k \text{ o } j \neq p \end{cases}$$

$E_k = (x_k, y_k)$ nodo "k" de la partición.



De las propiedades anteriores se deduce que el dominio de los polinomios segmentarios hj(x,y), es el conjunto de triángulos que tengan un vértice común Ej y el dominio del producto hi(x,y) hj(x,y) es el conjunto de triángulos que tengan dos vértices comunes Ej, Ei.

Se propone como solución de la EDP una combinación lineal de los polinomios definidos en cada nodo de la partición $h(x,y) = \sum c_j h_j(x,y)$ los parámetros c_j se calculan utilizando el mismo criterio empleado en el método de Rayleigh-Ritz. El carácter discreto de los polinomios, le asigna las siguientes propiedades a la solución obtenida.

$$h(x,y) = c_r h_r(x,y) + c_s h_s(x,y) + c_t h_t(x,y)$$

para puntos (x,y) que pertenezcan al triángulo cuyos vértices sean los nodos E_r , E_s , E_t .

METODO DE LAS CARACTERISTICAS

Para describir el método de las características, se presentará a continuación la solución D'Alembert para la ecuación de onda y se analizará el fenómeno de propagación sobre las <u>curvas características</u> de dicha ecuación.

$$U_{tt} - c^2U_{xx} = 0 \qquad (1)$$

$$U(x,0) = f(x) \quad \text{restricciones} \quad (2)$$

$$U_t(x,0) = 0 \qquad (3)$$

1.- Se propone el siguiente cambio de variables.

$$z = x + c\,t \qquad\qquad y = x - c\,t$$

2.- Se considera la función $U(z,y) = U(x,t)$ una solución de la ecuación (1)

3.- Aplicando la regla de la cadena, las derivadas parciales respecto a "x" y "t" de $U(z,y)$ son:

$$U_{xx} = U_{zz} + 2U_{zy} + U_{yy}$$

$$U_{tt} = c^2(U_{zz} - 2U_{zy} + U_{yy})$$

4.- Al ser sustituidas las derivadas parciales en la ec. de onda se reduce a ésta, en la siguiente ecuación denominada "forma canónica" cuya solución se obtiene por integración sucesiva.

$$U_{zy} = 0$$

$$U_y = h(y)$$

$$U = \int h(y)\, dy + g(z) = H(y) + G(z)$$

$\underline{U(z,y)} = \underline{H(y) + G(z)}$ solución de la ec. (1)

Las funciones $H(y)$, $G(z)$ tienen que ser doblemente derivables y se obtienen usando las restricciones (2) y (3).

$$U_t = y_t\, H' + z_t\, G' = c(H' - G')$$

$$U_t(x,0) = c(H'(x) - G'(x)) = 0 \qquad \ldots (4)$$

$$U(x,0) = H(x) + G(x) = f(x)$$

$$H(x) + G(x) = f(x) \qquad \ldots (5)$$

sumando (4) , (5) y utilizando la condición inicial (2)

$$2H'(x) = f'(x) \quad ; \quad dH(x) = df(x)/2$$

$$H(y) = f(y)/2 + K$$

$$G(z) = f(z) - H(z)/2 - K$$

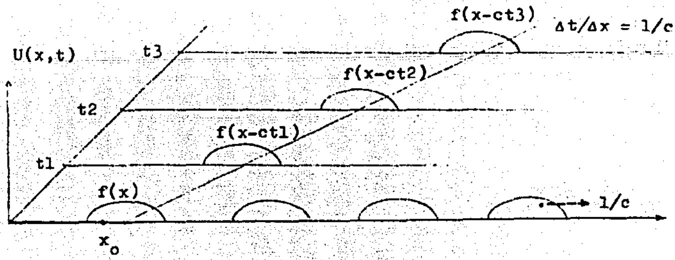
$$U(z,y) = H(y) + G(z) = (f(y) + f(z))/2$$

$$\underline{U(x,t) = (f(x - ct) + f(x + ct))/2}$$

Curvas características.

La función $f(x - ct)$ representa una configuración que se propaga sin deformación con velocidad "c"; de lo anterior se deduce que la solución de la ecuación de onda, es la suma de dos perturbaciones que se propagan sin deformación con velocidad c y en direcciones opuestas.

Considerese parte de la solución $U(x,t) = f(x-ct)/2$ que se propaga a la derecha; sea (xo,0) un punto en el plano (x,t) (ver fig. 1); para algún instante ti el punto f(xo) se desplaza hasta xo+c ti; si la velocidad de propagación es constante, la perturbación inicial f(x) se propaga sobre la familia de lineas rectas x-ct=cte , x+ct=cte.
Esta familia de curvas se denominan curvas características de la ecuación de onda.



Se resolverá a continuación una ecuación diferencial parcial más general utilizando el procedimiento anterior.

$$A(x,t)\, U_{tt} + B(x,t)\, U_{xt} + C(x,t)\, U_{xx} = 0$$

sean $z(x,t)$, $y(x,t)$ funciones continuas y dos veces derivables respecto a x,t.
Aplicando la regla de la cadena y sustituyendo las derivadas parciales en la ecuación diferencial, se tiene lo siguiente:

$$(A(zt)^2 + Bz_x z_t + C(z_x)^2)U_{zz} + (A(yt)^2 + By_t y_x + C(y_x)^2)U_{yy} +$$
$$(2Az_t y_t + Bz_t y_x + Bz_x y_t + 2cz_x y_x)U_{zy} = 0$$

Se desea encontrar las condiciones para las cuales la ecuación anterior se reduce a la forma canónica de la ec. de onda.

$$U_{zy} = 0$$

Se obtiene la ecuación anterior sólo si las funciones $z(x,t)$, $y(x,t)$ satisfacen las siguientes ecuaciones:

$$A(x,t)(z_t)^2 + B(x,t)z_x z_t + C(x,t)(z_x)^2 = 0$$
$$A(x,t)(y_t)^2 + B(x,t)y_x y_t + C(x.t)(y_x)^2 = 0$$

la solución de las ecuaciones anteriores es:

$$z_t/z_x = (-B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}\ )/2A$$
$$y_t/y_x = (-B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}\ )/2A$$

Como las curvas $z(x,t)$; $y(x,t)$ deben ser linealmente independientes y reales, sólo se consideran las soluciones:

$$z_t/z_x = dx/dt = (-B + \sqrt{B^2 - 4AC}\ )/2A$$
$$y_t/y_x = dx_i/dt = (-B - \sqrt{B^2 - 4AC}\ )/2A$$

donde $B^2 - 4AC > 0$

como $A = A(x,t)$; $B = B(x,t)$; $C = C(x,t)$ las ecuaciones anteriores son ecuaciones diferenciales ordinarias de la forma:

$$dx_i/dt = fi(t,x) \ ; \quad dx_i = \int fi(t,x)dt \qquad xi = F(t)+K$$
$$dx/dt = f(t,x) \ ; \quad dx = \int f(t,x)dt \qquad x = G(t)+CC$$

Para cada valor de K y CC se genera una curva en el plano (x,t) y al conjunto de éstas se denomina Curvas Características de la EDP.

R E S U M E N

1.- Las EDP que satisfacen la condición $B^2 - 4AC > 0$; $A \neq 0$ se les denomina ecuaciones hiperbólicas.

2.- Las ecuaciones hipertólicas pueden ser reducidas a la forma canónica de la ecuación de onda y por lo tanto se comportan de forma semejante. "Las perturbaciones iniciales se propagan sobre las curvas características. "

CURVAS CARACTERISTICAS DE EDP DE PRIMER ORDEN

Algunas EDP de primer orden, poseen curvas en el espacio solución (x , y , U) que tienen propiedades semejantes a las curvas características de las ecuaciones hiperbólicas; debido a ésto es posible utilizar el método de las características para resolver éste tipo de ecuaciones.

Considerese la siguiente ecuación:

$$f(x,y)\, U_x + g(x,y)\, U_y = h(x,y) \quad \text{para } (x,y) \text{ en "D"}$$

$$\text{si } f(x,y) \neq 0 \text{ para todo } (x,y) \text{ en } D$$

$$U_x + g(x,y)/f(x,y)\, U_y = h(x,y)/f(x,y) \quad \ldots\ldots \quad (q.1)$$

Si la solución $U(x,y)$ es continua en D, se desea encontrar la derivada total en dirección "x" sobre alguna curva $\Gamma(x,y,U) =$ cte. en el espacio solución (ver fig. 1)

$$dU/dx = U_x + (dy/dx)\, U_y$$

Como la ecuación diferencial se cumple para todo el domimio, entonces por analogía:

$$dy/dx = g(x,y)/f(x,y) \quad \ldots . \quad (q.2)$$
$$dU/dx = h(x,y)/f(x,y) \quad \ldots . \quad (q.3)$$

La ecuación (q.2) define la proyección de $\Gamma(x,y,U)$ sobre el dominio y la solución $y = F(x)$ de (q.2) se utiliza para resolver (q.3)

Las curvas $\Gamma(x,F(x)) =$ cte. se denominan características de la ecuación diferencial (q.1).

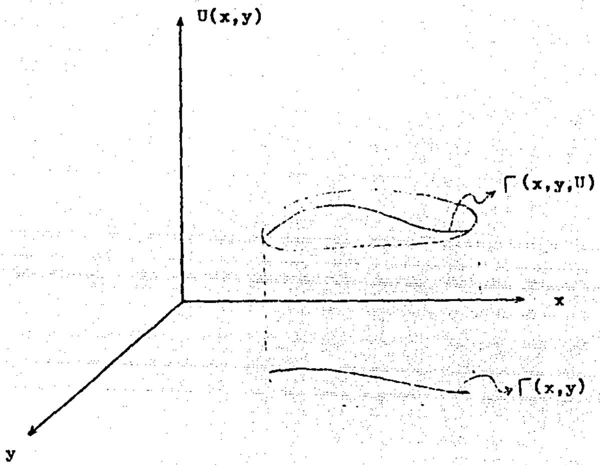
R E S U M E N

1.- La EDP de primer orden (q.1) tiene una familia de curvas características definidas por:

$$dy/dx = g(x,y)/f(x,y) \quad ; \quad y = F(x) + KK$$

2.- Al resolver la ecuación (q.1) sobre la curva característica, se reduce ésta a una ecuación diferencial ordinaria.

$$dU/dx = h(x,y(x))/f(x,y(x))$$



Proyección de la curva característica (x,y,U) sobre el plano (x,y) del dominio D (fig. 1)

C A P I T U L O   V

A L G O R I T M O # 1

Método de diferencias finitas Crank-Nicolson aplicado a la ecuación de difusión.

El sistema lineal asociado es:

$$AU_{j+1} = BU_j$$

1.- Entrada k, h, f(x), L, T
2.- $N = L/h$: $M = T/k$: $a = k/h^2$
3.- $U_{i,o} = f(x_i)$; $i = 0,\ldots,N$
4.- $j = 0$
5.- Resolver el sistema lineal para U_{j+1}
6.- $U_{o,j+1} = 0$; $U_{N,j+1} = 0$
7.- Imprimir $U_{i,j+1}$; $i = 0,\ldots,N$
8.- $U_{i,j} = U_{i,j+1}$; $i = 0,\ldots,N$
9.- $j = j + 1$
10.- si $j \leq M$ vete a (5)
11.- F I N.

Usar el método CROUT o SOR para resolver el sistema lineal.

A L G O R I T M O # 2

Método de diferencias finitas Crank-Nicolson aplicado al reactor de oxidación de SO_2. El sistema lineal asociado al reactor es:

$$A1\ t_{j+1} = B1\ t_j + RP(x,t)_1 \quad \ldots \quad (I)$$

$$A2\ x_{j+1} = B2\ x_j + RP(x,t)_2 \quad \ldots \quad (II)$$

1.- Entrada h, k, L, R, E1, E2, propiedades termodinámicas y cinéticas del sistema
2.- $N = L/h$; $M = R/k$
3.- $t_{0,i} = f(r_i)$; $x_{0,i} = 0$; $i = 0,\ldots,N$
4.- $j = 0$
5.- Suponer $t = t_j$; $x = x_j$
6.- Calcular $RP(x,t)_1$
7.- Resolver (I) y obtener t_{j+1}
8.- Calcular $RP(x,t)_2$
9.- Resolver (II) y obtener x_{j+1}
10.- Si $\|x - x_{j+1}\| < E1$ y $\|t - t_{j+1}\| < E2$ vete a (12)
11.- $x = x_{j+1}$: $t = t_{j+1}$ vete a (6)
12.- Imprimir r_i, z_j, x_i, t_i ; $i = 0,\ldots,N$
13.- $x_j = x_{j+1}$; $t_j = t_{j+1}$
14.- $j = j+1$
15.- si $j \leq M$ vete a (5)
16.- F I N.

A L G O R I T M O # 3

Método de diferencias finitas Crank-Nicolson aplicado al reactor de oxidación de o-xileno. El sistema lineal asociado al reactor es:

$$D1\ T_{j+1} = B1\ T_j + RB(X,W,T) + RC(X,W,T) \quad . . (1)$$

$$D2\ X_{j+1} = B2\ X_j + RB1(X,W,T) \quad . . (2)$$

$$D3\ W_{j+1} = B3\ W_j + RC1(X,W,T) \quad . . (3)$$

1.- Entrada h, k, L, R, E1, E2, propiedades cinéticas y termodinámicas del sistema, Xo, Wo, To

2.- $j = 0$

3.- suponer $X = Xo$: $W = Wo$: $T = To$

4.- calcular $RB(X,W,T)$: $RC(X,W,T)$

5.- resolver (1) y obtener T_{j+1}

6.- con X, W, T_{j+1} calcular $RB1(X,W,T_{j+1})$

7.- resolver (2) y obtener X_{j+1}

8.- con X_{j+1}, W, T_{j+1} calcular $RC1(X_{j+1}, W, T_{j+1}$

9.- resolver (3) y obtener W_{j+1}

10.- si $\|X_{j+1} - X\| < E1$ y $\|W_{j+1} - W\| < E1$ y $\|T_{j+1} - T\| < E2$ vete a (12)

11.- $X = X_{j+1}$: $W = W_{j+1}$: $T = T_{j+1}$ vete a (4)

12.- imprime z_j, r_i, $X_{i,j+1}$, $W_{i,j+1}$, $T_{i,j+1}$ $i = 0,\ldots,N$

13.- $X_j = X_{j+1}$: $W_j = W_{j+1}$: $T_j = T_{j+1}$

14.- $j = j+1$

15.- si $j \leq M$ vete a (3)

16.- F I N

A L G O R I T M O # 4

Aplicación del método de las características para la resolución de ecuaciones hiperbólicas cuasilineales.

$$a1\ U_{tt} + a2\ U_{xt} + a3\ U_{xx} = a4 \qquad 0 < x < L \quad ; \quad t > 0$$

donde $ai = ai(x,t,U,U_t,U_x)$

condiciones frontera e iniciales

$$U(x,0) = f(x) \qquad 0 \leq x \leq L$$

$$U_t(x,0) = g(x) \qquad 0 \leq x \leq L$$

$$U(0,t) = U(L,t) = 0 \qquad t > 0$$

se asume además que $f(x)$ es continua y

$$U_x(x,0) = f'(x) \qquad 0 \leq x \leq L$$

las curvas características de la ecuación hiperbólica son

$$a3(dt/dx)^2 - a2(dt/dx) + a1 = 0$$

si U_t y U_x son funciones continuas entonces las diferenciales $d(U_t)$; $d(U_x)$ existen y forman con la ecuación diferencial el sistema

$$\begin{aligned} a1(U_{tt}) + a2(U_{xt}) + a3(U_{xx}) &= a4 \\ 0 + dt(U_{xt}) + dx(U_{xx}) &= dU_x \\ dt(U_{tt}) + dx(U_{xt}) + 0 &= dU_t \end{aligned}$$

el determinante del sistema Ds=0 genera las curvas características por lo tanto el sistema tiene solución solo si (regla de Cramer)

$$DU_{tt} = DU_{xt} = DU_{xx} = 0$$

en particular el método utiliza

$$DU_{xt} = 0 \quad ; \quad a1\ d(U_t) + a3\ d(U_x)\ dt/dx - a4\ dt = 0$$

el presente algoritmo se genera aplicando las ecuaciones

$$dU = U_x dx + U_t dt \quad \ldots\ldots\ldots \quad (1)$$

$$m1 = (a2 + SQR(a2^2 - 4\ a1\ a3))/2\ a3 \quad .\ . \quad (2)$$

$$m2 = (a2 - SQR(a2^2 - 4\ a1\ a3))/2\ a3 \quad .\ . \quad (3)$$

$$a1\ d(U_t) + a3\ d(U_x)\ dt/dx - a4\ dt = 0\ . \quad (4)$$

considerense los puntos P,Q en el eje coordenado "x" por los cuales pasan dos curvas características que se intersectan en R(fig. 1); como las condiciones frontera e iniciales se propagan sobre las características, se utilizan éstas para calcular la solución en la intersección $U(R)$, $U_t(R)$, $U_x(R)$.

Aproximaciones sucesivas. Sea Ro la intersección de las rec- cuyas pendientes son m1(P) y m2(Q); utilizando las condiciones frontera e iniciales y aplicando las ecuaciones (1) a (4) se calculan las funciones $U(Ro)$, $U_t(Ro)$, $U_x(Ro)$. Para obtener una mejor aproximación de R, se calculan las funciones $U(R1)$, $U_t(R1)$, $U_x(R1)$ donde R1 es la intersección de las rec tas que pasan por los puntos P, Q y cuyas pendientes son $n1 = (m1(P) + m1(Ro))/2$, $n2 = (m2(Q) + m2(Ro))/2$ respectivamente. El proceso se continúa hasta que $ABS(R-R_k) < E$; en forma semejante se calculan los demás puntos de la malla (fig. 2).

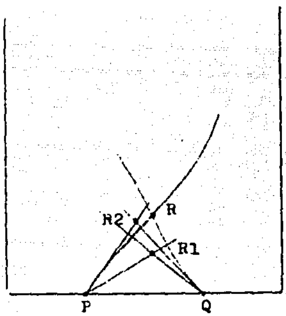


fig. 1

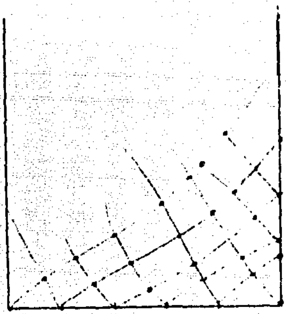


fig. 2

A L G O R I T M O # 5

El siguiente algoritmo se utiliza para resolver ecuaciones de la forma siguiente utilizando el Método del Elemento Finito.

$$(p(x,y)U_x)_x + (q(x,y)U_y)_y + r(x,y)U = f(x,y) \text{ en } D$$

condiciones en la frontera del dominio D

$$p(x,y)U_x \cos O_1 + q(x,y)U_y \cos O_2 + g_1(x,y)U = g_2(x,y) \text{ en } l_{ii}$$

$$U = g(x,y) \text{ en } l_i$$

donde $l = l_i$ union l_{ii} es la frontera del dominio D

la integral asociada I es:

$$I = {}_{D}((p(U_x)^2 + q(U_y)^2 - rU^2)/2 + fU)dx\,dy + {}_{l_{ii}}(-g_2U + g_1U^2/2)ds$$

Aplicando las ecuaciones de minimización a la integral I, y seleccionando algunos de los parámetros c_j para asegurar las condiciones en la frontera, se tiene la siguiente ecuación matricial:

$$h(x,y) = \sum_{1}^{n} c_j h_j(x,y)$$

$$c_j h_j(x,y) = g(x,y) \quad \text{en } l_i \text{ para } j = n+1,\ldots,E$$

$$\partial I(h)/\partial c_i = 0 \qquad \text{para } i = 1,2,\ldots,n$$

$$A\ C = B \qquad C = (c_i) \quad i=1,\ldots,n \text{ parámetros de ajuste}$$

$$A = (a_{ij}) \quad i=1,\ldots,n \text{ matriz principal}$$
$$j=1,\ldots,n$$

$$B = (b_i) \quad i=1,\ldots,n \text{ vector frontera}$$

$$a_{ij} = \int_D (p h_{ix} h_{jx} + q h_{iy} h_{jy} - r h_i h_j)\,dx\,dy + \int_L g_1 h_i h_j \quad ds$$

$$b_i = -\int_D f h_i \; dx\,dy + \int_L g_2 h_i \; ds - \sum_{n+1}^{E} c_k a_{ik}$$

Notación

M triángulos totales

M1 triángulos frontera

E nodos totales

W nodos frontera

N número de multiplicadores de ajuste c_j

T_i triángulo "i"

$V_i^k = (x_i^k, y_i^k)$ vértice "i" del triángulo "k"

$E_l = (E_{xl}, E_{yl})$ nodo "l"

$Q_l = (Q_{xl}, Q_{yl})$ nodo frontera "l"

A L G O R I T M O

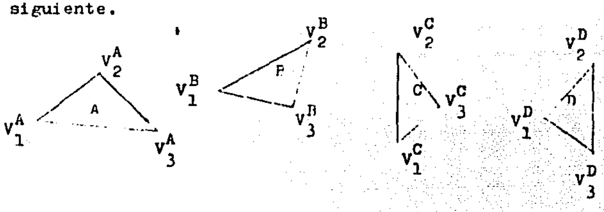
1.- Dividir el dominio "D" de la EDP en triángulos tipo TA, TB, TC, TD.

2.- Numerar los triángulos T_i de izq-der de $i=1,M1$ para los triángulos frontera y de $i=M1+1,M$ para los restantes.

3.- Numerar los nodos frontera Q_j de izq-der de $j=1,W$

4.- Numerar los nodos incógnita E_l de $l=1,N$ empezando por los internos y después con los pertenecientes a l_{ii} y de $l=N+1,E$ para los pertenecientes a l_j.

5.- Numerar los vértices de los triángulos tipo de la manera siguiente.



6.0 Cálculo de a_{ij} de $i=1,N$; $j=1,E$

6.1 si $i=j$ vete a 6.3

6.2 vete a 6.5

6.3 para cada triángulo T_k con vértice E_i

$$a_{ij} = a_{ij} + I_1 + I_2 - I_3$$

6.4 si T_k es frontera

$$a_{ij} = a_{ij} + I_4$$

6.5 para cada triángulo T_k con vértices E_i, E_j

$$a_{ij} = a_{ij} + I_1 + I_2 - I_3$$

6.6 si T_k es frontera

$$a_{ij} = a_{ij} + I_4$$

7.0 Cálculo de b_i de $i=1,N$

7.1 para cada triángulo T_k con vértice E_i

$$b_i = b_i - I_7$$

7.2 si T_k es frontera

$$b_i = b_i + I_8$$

7.3 $ac = ac + a_{ip}\, c_p$ de $p=N+1,E$

7.4 $b_i = b_i + ac$

8.0 Resolución del sistema lineal "Gauss-Jordan"

8.1 imprime c_i de $i=1,N$

8.2 imprime la solución de la EDP para cada triángulo T_k cuyos vértices sean los nodos E_r, E_s, E_t.

$$U(x,y) = c_r h_r(x,y) + c_s h_s(x,y) + c_t h_t(x,y)$$

Cálculo de las integrales dobles y de linea.

$$I_1 = \int_D ph_{ix}h_{jx}\ dx\ dy = \int_{Dh_ih_j} ph_{ix}h_{jx}\ dx\ dy$$

$$I_2 = \int_{Dh_ih_j} qh_{iy}h_{jy}\ dx\ dy$$

$$I_3 = \int_{Dh_ih_j} rh_ih_j\ dx\ dy$$

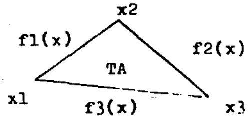
$$I_7 = \int_{Dh_i} fh_i\ dx\ dy$$

$$I_4 = \int_{l_{ii}} g_1h_ih_j\ ds = \int_{l_{ii}Dh_ih_j} g_1h_ih_j\ ds$$

$$I_8 = \int_{l_{ii}Dh_i} g_2h_i\ ds$$

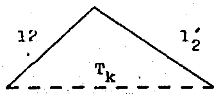
Haciendo uso de las propiedades de la integral, las integrales anteriores se calculan sumando los valores de éstas en cada triángulo del dominio Dh_i o Dh_ih_j. Debido a que el algoritmo usa triángulos tipo, el cálculo se hace de la manera siguiente:

$$\int_{TA} (\quad)\, dy\, dx = \int_{x_1}^{x_2}\int_{f_3}^{f_1} (\quad)\, dy\, dx + \int_{x_2}^{x_3}\int_{f_3}^{f_2} (\quad)\, dy\, dx$$

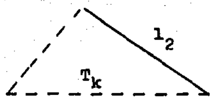


Las integrales de linea I_4, I_8 se calculan sobre la frontera del dominio Dh_i o Dh_ih_j por lo tanto, solo se consideran los triángulos frontera que formen parte del dominio mencionado. Los triángulos frontera pueden tener uno o dos lados formando parte de la frontera del dominio de la EDP por lo tanto, se deberan considerar las dos alternativas siguientes:

I)



$$\int_{l_{T_k}} (\quad) h_i h_j \, ds = \int_{l_2} (\quad) h_i h_j \, ds + \int_{l_2'} (\quad) h_i h_j \, ds$$

II) 

$$\int_{l_{T_k}} (\quad) h_i h_j \, ds = \int_{l_2} (\quad) h_i h_j \, ds$$

Cálculo de los polinomios segmentarios. Considerese algún triángulo T_k en el que uno de sus vértices es igual al nodo E_i; las constantes características del polinomio se determinan resolviendo el siguiente sistema de ecuaciones:

$$h_i(V_1^k) = 0$$
$$h_i(V_2^k) = 1$$
$$h_i(V_3^k) = 0$$

donde $E_i = V_2^k$

$$a_i + c_i \; x_1^k + d_i \; y_1^k = 0$$
$$a_i + c_i' \; x_2^k + d_i \; y_2^k = 1$$
$$a_i + c_3 \; x_3^k + d_i \; y_3^k = 0$$

donde $h_i(x,y) = a_i + c_i x + d_i y$

PROGRAMAS

1.1 OXIDACION DE DIOXIDO DE AZUFRE

1.2 OXIDACION DE O-XILENO

1.3 METODO DEL ELEMENTO FINITO

1.4 CURVAS CARACTERISTICAS

```
]LIST

10  HOME : PRINT "REACCION DE OXIDACION DE DIOXIDO DE      AZUFRE EN REACTOR TUBULAR CATALITICO"
20  VTAB 22: PRINT "PARA CONTINUAR OPRIMIR CUALQUIER TECLA": GET A$
30  HOME :
40  INPUT "QUE METODO DE SOLUCION DESEAS            G.JORDAN(1) CROUT (2) ";IX
50  REM  REACTOR CATALITICO
60  READ G,KE,CP,DB,DH,PE,PM,DP,Y0,DR,LL,TS,N,M,E1,E2: GOTO 160
70  INPUT "FLUJO MASICO G(lb/hrft^2)=";G: PRINT : INPUT "CONDUCTIVIDAD TERMICA Ke(BTU/Hrft^F)=";KE: PRINT
80  INPUT "COEF.TRANSF.CALOR U(Btu/hrft^2 F)=";U: PRINT
90  INPUT "CAPACIDAD CALORIFICA Cp(Btu/lb F)=";CP: PRINT : INPUT "DENSIDAD DE LECHO DB(lb/ft^3)=";DB: PRINT
100  INPUT "CALOR DE REACCION DH(Cal/gmol)=";DH: PRINT : INPUT "PECLET RADIAL Per=";PE: PRINT
110  INPUT "PESO MOL.MEZCLA GASEOSA PM=";PM: PRINT : INPUT "DIAM.PART.CATALITICA dp(in)=";DP: PRINT : INPUT "FRACCION MOL DIO
    XIDO AZUFRE Y0=";Y0: PRINT
120  INPUT "DIAMETRO DEL REACTOR DR(in)=";DR: PRINT : INPUT "LONGITUD DEL REACTOR L(ft)=";LL: PRINT : INPUT "TEMPERATURA DE E
    NFRIAMIENTO TS=";TS: PRINT
130  INPUT "NUM.DE PARTICION RADIAL N=";N: PRINT : INPUT "NUM. DE PARTICION AXIAL M=";M: PRINT
140  INPUT "ERROR PERMISIBLE E1=";E1: PRINT : INPUT "ERROR PERMISIBLE E2=";E2: PRINT
150  INPUT "FACTOR DE CONVERGENCIA SOR ";W: PRINT : INPUT "NUMERO DE ITERACIONES SOR ";MM: PRINT
160 C1 =  - G * CP / KE:C2 =  - DB * DH / KE:D1 =  - PE * 12 / DP:D2 = DB * PE * PM * 12 / (DP * 3 * Y0)
170 H = DR / (12 * 2 * N):K1 = LL / M:C = U * H / KE
180 A3 = 1 / (H ^ 2):A4 =  - A3
190 B3 = A3:B4 = A4
200  DEF  FN R(X) =  EXP (1.10892364 - .0339731661 * X - 5317464.55 * T ^  - 2.35)
210  DIM X(N): DIM T(N): DIM X0(N)
220  DIM T0(N): DIM X1(N): DIM T1(N)
230  DIM A(N,N + 1)
240 T(N) = TS
250  FOR I = 0 TO N
260 PR = H * I * 24 / DR: HOME : HTAB 12: PRINT "POSICION RADIAL ";PR
270  HTAB 9: INPUT "TEMPERATURA DE ENTRADA ";T0(I)
280 X0(I) = 0
290  NEXT I
300  FOR J = 0 TO M - 1
310 Q = 0
320  FOR I = 0 TO N
330 X1(I) = X0(I):T1(I) = T0(I)
340  NEXT I
350 L = 0
360  FOR I = 1 TO N - 1
370 L = L + 1
380 A1 = 1 / (H ^ 2) - 1 / (H ^ 2 * I):A2 = 1 / (H ^ 2 * I) - 2 / (H ^ 2) + 2 * C1 / K1
390 A5 = 1 / (H ^ 2 * I) + 2 / (H ^ 2) + 2 * C1 / K1:A6 =  - 1 / (H ^ 2 * I) - 1 / (H ^ 2)
400 X = X1(I) * 100
410 T = T1(I)
420 RP =  FN R(X)
430 X = X0(I) * 100:T = T0(I)
440 RP = RP +  FN R(X)
450 K =  - 1
460  FOR S = 0 TO N
470 K = K + 1
480  IF S >  = I - 1 AND S <  = I + 1 GOTO 500
490  GOTO 600
500  IF S = I - 1 GOTO 520
510  GOTO 530
520 A(L,K) = A1
530  IF S = I GOTO 550
540  GOTO 560
550 A(L,K) = A2
560  IF S = I + 1 GOTO 590
```

```
570  GOTO 600
580  IF I = N - 1 GOTO 590
590 A(L,K) = A3
600  NEXT S
610 A(L,N) = A4 * T0(I - 1) + A5 * T0(I) + A6 * T0(I + 1) - C2 * RP
620  IF I = N - 1 GOTO 640
630  GOTO 650
640 A(L,N) = A(L,N) - A3 * TS
650  NEXT I
660 A(0,0) = 1:A(0,1) =  - 1:A(0,N) = T0(0) - T0(1)
670 NS = N - 1
680  ON IZ GOSUB 1570,1810
690  FOR I = 0 TO N - 1
700 T(I) = A(I,N)
710  NEXT I
720  FOR I = 0 TO N: FOR P = 0 TO N + 1
730 A(I,P) = 0
740  NEXT P: NEXT I
750 L = 0
760  FOR I = 1 TO N - 1
770 L = L + 1
780 B1 = 1 / (H ^ 2) - 1 / (H ^ 2 * I):B2 = 1 / (H ^ 2 * I) - 2 / (H ^ 2) + 2 * D1 / X1
790 B5 = 1 / (H ^ 2 * I) + 2 / (H ^ 2) + 2 * D1 / X1:B6 =  - 1 / (H ^ 2 * I) - 1 / (H ^ 2)
800 X = X1(I) * 100
810 T = T(I)
820 RP =  FN R(X)
830 X = X0(I) * 100:T = T0(I)
840 RP = RP +  FN R(X)
850 K =  - 1
860  FOR S = 0 TO N
870 K = K + 1
880  IF S >  = I - 1 AND S <  = I + 1 GOTO 900
890  GOTO 990
900  IF S = I - 1 GOTO 920
910  GOTO 930
920 A(L,K) = B1
930  IF S = I GOTO 950
940  GOTO 960
950 A(L,K) = B2
960  IF S = I + 1 GOTO 980
970  GOTO 990
980 A(L,K) = B3
990  NEXT S
1000 A(L,N + 1) = B4 * X0(I - 1) + B5 * X0(I) + B6 * X0(I + 1) - C2 * RP
1010  NEXT I
1020 A(0,0) = 1:A(0,1) =  - 1:A(0,N + 1) = X0(0) - X0(1)
1030 A(L + 1,N - 1) = 1:A(L + 1,N) =  - 1:A(L + 1,N + 1) = X0(N - 1) - X0(N)
1040 NS = N
1050  ON IZ GOSUB 1570,1810
1060  FOR I = 0 TO N
1070 X(I) = A(I,N + 1)
1080  NEXT I
1090  IF J = 0 GOTO 1110
1100  GOTO 1120
1110 X(N) = 0
1120 X1 =  ABS (X1(0) - X(0))
1130 T1 =  ABS (T1(0) - T(0))
1140  FOR I = 1 TO N
1150 X2 =  ABS (X1(I) - X(I))
1160 T2 =  ABS (T1(I) - T(I))
```

```
1170  IF X1 > X2 GOTO 1190
1180 X1 = X2
1190  IF T1 > T2 GOTO 1210
1200 T1 = T2
1210  NEXT I
1220  IF X1 < E1 AND T1 < E2 GOTO 1240
1230  GOTO 1470
1240  HOME :PP = 2 *  INT ((J + 1) / 2) / (J + 1): IF PP < > 1 GOTO 1401: PR# 1
1250  VTAB 1: HTAB 5: PRINT "PROFUNDIDAD DE LECHO Z=";(J + 1) * K1
1260  VTAB 2: PRINT "--------------------------------------"
1270  FOR I = 0 TO N
1280 FR = H * I / (GR / 24)):X =  INT (X(I) * 10000 + .5) / 10000:T =  INT (T(I) * 10 + .5) / 10
1290  VTAB I + 3: HTAB 1: PRINT "r/r =";FR;: VTAB I + 3: HTAB 16: PRINT "X=";X;: VTAB I + 3: HTAB 22: PRINT "T=";T
1300  NEXT I
1310  VTAB N + 4: PRINT "--------------------------------------"
1360 TAV = (T(0) + T(2) + T(3) + T(5) + T(6) + T(8) + 4 * (T(1) + T(4) + T(7))) / 30 + (T(9) + T(10)) / 20
1370 XAV = (X(0) + X(2) + X(3) + X(5) + X(6) + X(8) + 4 * (X(1) + X(4) + X(7))) / 30 + (X(9) + X(10)) / 20
1380  PRINT "CONVERSION PROMEDIO=";XAV
1390  PRINT "TEMPERATURA PROMEDIO=";TAV
1400  PR# 0
1401  FOR I = 0 TO N
1402 T0(I) = T(I)
1403 X0(I) = X(I)
1404  NEXT I
1410  FOR I = 0 TO N
1420  FOR P = 0 TO N + 1
1430 A(I,P) = 0
1440  NEXT P: NEXT I
1450  NEXT J
1460  PRINT "FIN DEL PROCESO ": STOP
1470  FOR I = 0 TO N
1480 T1(I) = T(I)
1490 X1(I) = X(I)
1500  NEXT I
1510 Q = Q + 1
1520  PRINT "NUM. ITERACIONES ";Q
1530  FOR I = 0 TO N: FOR P = 0 TO N + 1
1540 A(I,P) = 0
1550  NEXT P,I
1560  GOTO 350
1570  REM  GAUSS JORDAN
1580  FOR I = 0 TO NS
1590  IF A(I,I) < > 0 GOTO 1650
1600  IF I = NS GOTO 1640
1610  FOR JJ = I + 1 TO NS
1620  IF A(JJ,I) < > 0 GOTO 1650
1630  NEXT JJ
1640  PRINT "MATRIZ SINGULAR"
1650  FOR K = I TO NS + 1
1660 Z = A(I,K):A(I,K) = A(JJ,K)
1670 A(JJ,K) = Z
1680  NEXT K
1690  FOR JJ = NS + 1 TO I STEP - 1
1700 A(I,JJ) = A(I,JJ) / A(I,I)
1710  NEXT JJ
1720  FOR K = 0 TO NS
1730  IF K = I GOTO 1770
1740  FOR JJ = NS + 1 TO I STEP - 1
1750 A(K,JJ) = A(K,JJ) - A(K,I) * A(I,JJ)
1760  NEXT JJ
1770  NEXT K
```

```
1780  NEXT I
1790  RETURN
1800  DATA 350,.216,.25,24,-22700,3.6,31,2,.125,.065,2.05,5.197,10,100,.001,.01
1810  REM  SISTEMA TRIDIAGONAL CROUT
1820 A(0,1) = A(0,1) / A(0,0)
1830  FOR I = 1 TO NS - 1
1840 A(I,I) = A(I,I) - A(I,I - 1) * A(I - 1,I)
1850 A(I,I + 1) = A(I,I + 1) / A(I,I)
1860  NEXT I
1870 A(NS,NS) = A(NS,NS) - A(NS,NS - 1) * A(NS - 1,NS)
1880 A(0,NS + 1) = A(0,NS + 1) / A(0,0)
1890  FOR I = 1 TO NS
1900 A(I,NS + 1) = (A(I,NS + 1) - A(I,I - 1) * A(I - 1,NS + 1)) / A(I,I)
1910  NEXT I
1920  FOR I = NS - 1 TO 0 STEP  - 1
1930 A(I,NS + 1) = A(I,NS + 1) - A(I,I + 1) * A(I + 1,NS + 1)
1940  NEXT I
1950  RETURN
1960  VTAB 2: PRINT "---------------------------------------"
```

```
]PRINT CHR$(15)

]PRINT CHR$(9);"132N"

]LIST

1  HOME : PRINT "OXIDACION DE O-XILENO                                                    El presente programa proporc
   iona los    perfiles radiales de conversion y tempe-ratura para un reactor tubular empacado con catalizador V05"
5  HTAB 22: PRINT "para continuar oprimir cualquier tecla"
6  REAL NA,N0,H1,H3,DP,DB,G,PM,PH,MM,AW,T0,DR,LL,CP,LR,N,M,E1,E2,E3
7  GOTO 130
10  REM  REACC. DE OXIDACION DE O-XILENO:?
20  INPUT "FRACCION MOL NA =";NA: PRINT
30  INPUT "FRACCION TOTAL N =";N0: PRINT
40  INPUT "CALOR DE REACCION H1(kcal/gmol)=";H1: PRINT
50  INPUT "CALOR DE COMBUSTION H3(kcal/gmol)=";H3: PRINT
60  INPUT "DIAMETRO DE PARTICULA dp(m)=";DP: PRINT
70  INPUT "DENSIDAD DE CATALIZADOR ob(Kg/m^3)=";DB: PRINT
80  INPUT "FLUJO MASICO G(Kg/m^2 hr)=";G: PRINT
90  INPUT "PECLET MASA RADIAL Pemr=";PM: PRINT
100  INPUT "PECLET TERMICO RADIAL Pehr=";PH: PRINT
110  INPUT "PESO MOLECULAR PROMEDIO PM=";MM: PRINT
120  INPUT "COEF.TRANSF.CALOR aw(Kcal/m^2hr C)=";AW: PRINT
130  INPUT "TEMPERATURA DE ENFRIAMIENTO T0( C)=";T0: PRINT
140  INPUT "DIAMETRO DEL REACTOR Dr(m)=";DR: PRINT
150  INPUT "LONGITUD DEL REACTOR L(m)=";LL: PRINT
160  INPUT "CAPACIDAD CALORIFICA Cp(kcal/Kg C)=";CP: PRINT
165  INPUT "DIFUSIVIDAD TERMICA lr(Kcal/m  C hr)=";LR: PRINT
170  INPUT "PARTICION RADIAL N=";N: PRINT
180  INPUT "PARTICION AXIAL M=";M: PRINT
181  INPUT "ERROR DE CONV. Ex=";E1: PRINT
182  INPUT "ERROR DE CONV. Ew=";E2: PRINT
183  INPUT "ERROR DE TEMP. Et=";E3
190  DIM X(N): DIM X1(N): DIM X0(N): DIM W(N): DIM W1(N): DIM W0(N): DIM T(N): DIM T1(N): DIM T0(N): DIM A(N,N + 1)
200 C1 = 1 / PM:C2 = 1 / PH:D1 = DB * DP * MM / (G * NA):D2 = 1000 * DB * DP *  - H1 / (G * CP):D3 = 1000 * DB * DP *  - H3 /
    (G * CP)
210 H = DR / (2 * DP * N):K1 = LL / (DP * M):A3 = 1 / (2 * H ^ 2)
220  DEF  FN R5(X) = NA * N0 * ( EXP ( - 27000 / (1.98 * (273 + T + T0)) + 19.837) * (1 - X - W) -  EXP ( - 31400 / (1.98 * (
    273 + T + T0)) + 20.86) * X)
230  DEF  FN R6(X) = NA * N0 * ( EXP ( - 31400 / (1.98 * (273 + T + T0)) + 20.86) * X +  EXP ( - 28600 / (1.98 * (273 + T + T
    0)) + 18.57) * (1 - X - W))
250  FOR J = 0 TO M - 1
260 IX = 1
270  DEF  FN A1(I) = A3 * (1 - 1 / I): DEF  FN A2(I) = A3 / I - 1 / (C1 * K1) - 2 * A3: DEF  FN A5(I) = A3 / I + 2 * A3 - 1 /
    (C1 * K1): DEF  FN A6(I) =  - A3 * (1 + 1 / I):A4 =  - A3
280  GOSUB 700
290  FOR I = 0 TO N
300 X(I) = A(I,N + 1): NEXT I
310  FOR I = 0 TO N: FOR P = 0 TO N + 1
320 A(I,P) = 0: NEXT P,I
330 IX = 2
340  GOSUB 700
350  FOR I = 0 TO N
360 W(I) = A(I,N + 1): NEXT I
370  FOR I = 0 TO N: FOR P = 0 TO N + 1
380 A(I,P) = 0: NEXT P,I
390 IX = 3
```

```
400  DEF  FN A1(I) = A3 * (1 - 1 / I): DEF  FN A2(I) = A3 / I - 1 / (C2 * X1) - 2 * A3: DEF  FN A5(I) =  - 1 / (C2 * X1) + A3
     / I + 2 * A3: DEF  FN A6(I) =  - A3 * (1 + 1 / I):A4 =  - A3
410  GOSUB 700
420  FOR I = 0 TO N
430 T(I) = A(I,N + 1): NEXT I
440  FOR I = 0 TO N: FOR P = 0 TO N + 1
450 A(I,P) = 0: NEXT P,I
460 X1 =  ABS (X1(0) - X(0)):W1 =  ABS (W1(0) - W(0)):T1 =  ABS (T1(0) - T(0))
470  FOR I = 1 TO N
480 X2 =  ABS (X1(I) - X(I)):W2 =  ABS (W1(I) - W(I)):T2 =  ABS (T1(I) - T(I))
490  IF X1 > X2 GOTO 510
500 X1 = X2
510  IF W1 > W2 GOTO 530
520 W1 = W2
530  IF T1 > T2 GOTO 550
540 T1 = T2
550  NEXT I
560  IF X1 < E1 AND W1 < E2 AND T1 < E3 GOTO 580
570  GOTO 660
580  HOME : PR# 1:PP = 5 *  INT ((J + 1) / 5) / (J + 1): IF PP <  > 1 GOTO 610: HOME : VTAB 2: PRINT "----------------------
     ----------------"
585  VTAB 1: HTAB 5: PRINT "PROFUNDIDAD DE LECHO Z="; INT (10000 * (J + 1) * K1 * DP + .5) / 10000: VTAB 3: HTAB 2: PRINT "P.
     RADIAL";: VTAB 3: HTAB 16: PRINT "CONVERSION";: VTAB 3: HTAB 23: PRINT "TEMPERATURA"
586  VTAB 4: PRINT "----------------------------------------"
590  FOR I = 0 TO N
595  VTAB I + 5: HTAB 1: PRINT I / N;: VTAB I + 5: HTAB 12: PRINT  INT (X(I) * 10000 + .5) / 10000;: VTAB I + 5: HTAB 22: PRINT
     INT (W(I) * 10000 + .5) / 10000;: VTAB I + 5: HTAB 32: PRINT  INT (T(I) * 1000 + .5) / 1000: NEXT I
600  VTAB I + 5: PRINT "----------------------------------------"
601 XAV = (X(0) + X(2) + X(3) + X(5) + X(6) + X(8) + 4 * (X(1) + X(4) + X(7))) / 30 + (X(9) + X(10)) / 20
602 WAV = (W(0) + W(2) + W(3) + W(5) + W(6) + W(8) + 4 * (W(1) + W(4) + W(7))) / 30 + (W(9) + W(10)) / 20
603 TAV = (T(0) + T(2) + T(3) + T(5) + T(6) + T(8) + 4 * (T(1) + T(4) + T(7))) / 30 + (T(9) + T(10)) / 20
604  PRINT "CONVERSION PROMEDIO XAV="; INT (XAV * 10000 + .5) / 10000: PRINT "CONVERSION PROMEDIO WAV="; INT (WAV * 10000 + .
     5) / 10000: PRINT "TEMPERATURA PROMEDIO TAV="; INT (TAV * 10 + .5) / 10
605  PR# 0
610  FOR I = 0 TO N
620 X0(I) = X(I):W0(I) = W(I):T0(I) = T(I)
630  NEXT I
640  NEXT J
650  PRINT "FIN DE PROCESO ": STOP
660  FOR I = 0 TO N
670 X1(I) = X(I):W1(I) = W(I):T1(I) = T(I)
680  NEXT I
690  GOTO 260
700  REM  MATRIZ GENERADOR
710 L = 0
720  FOR I = 1 TO N - 1
730 L = L + 1
740 A1 =  FN A1(I):A2 =  FN A2(I):A5 =  FN A5(I):A6 =  FN A6(I)
750  ON IX GOTO 760,770,780
760 X = X1(I):W = W1(I):T = T1(I): GOTO 790
770 X = X(I):W = W1(I):T = T1(I): GOTO 800
780 X = X(I):W = W(I):T = T1(I): GOTO 810
790 RB =  FN RB(X): GOTO 820
800 RC =  FN RC(X): GOTO 820
810 RB =  FN RB(X):RC =  FN RC(X)
820 X = X0(I):W = W0(I):T = T0(I)
830  ON IX GOTO 840,850,860
840 RB = (RB +  FN RB(X)) / 2: GOTO 870
850 RC = (RC +  FN RC(X)) / 2: GOTO 870
```

```
860 RB = (RB + FN RB(X)) / 2:RC = (RC + FN RC(X)) / 2
870 K = - 1
880 FOR S = 0 TO N
890 K = K + 1
900 IF S > = I - 1 AND S < = I + 1 GOTO 920
910 GOTO 1010
920 IF S = I - 1 GOTO 940
930 GOTO 950
940 A(L,K) = A1
950 IF S = I GOTO 970
960 GOTO 980
970 A(L,K) = A2
980 IF S = I + 1 GOTO 1000
990 GOTO 1010
1000 A(L,K) = A3
1010 NEXT S
1020 ON IZ GOTO 1030,1040,1050
1030 A(L,N + 1) = A4 * X0(I - 1) + A5 * X0(I) + A6 * X0(I + 1) - D1 * RB / C1: GOTO 1055
1040 A(L,N + 1) = A4 * W0(I - 1) + A5 * W0(I) + A6 * W0(I + 1) - D1 * RC / C1: GOTO 1055
1050 A(L,N + 1) = A4 * T0(I - 1) + A5 * T0(I) + A6 * T0(I + 1) - D2 * RB / C2 - D3 * RC / C2
1055 NEXT I
1060 ON IZ GOTO 1070,1080,1090
1070 A(0,0) = 1:A(0,1) = - 1:A(0,N + 1) = 0:A(L + 1,N - 1) = 1:A(L + 1,N) = - 1:A(L + 1,N + 1) = 0: GOTO 1100
1080 A(0,0) = 1:A(0,1) = - 1:A(0,N + 1) = 0:A(L + 1,N - 1) = 1:A(L + 1,N) = - 1:A(L + 1,N + 1) = 0: GOTO 1100
1090 A(0,0) = 1:A(0,1) = - 1:A(0,N + 1) = 0:A(L + 1,N - 1) = - 1:A(L + 1,N) = (1 + H * AW * DP / LR):A(L + 1,N + 1) = 0
1100 REM SISTEMA TRIDIAGONAL CROUT
1110 A(0,1) = A(0,1) / A(0,0)
1120 FOR I = 1 TO N - 1
1130 A(I,I) = A(I,I) - A(I,I - 1) * A(I - 1,I)
1140 A(I,I + 1) = A(I,I + 1) / A(I,I)
1150 NEXT I
1160 A(N,N) = A(N,N) - A(N,N - 1) * A(N - 1,N)
1170 A(0,N + 1) = A(0,N + 1) / A(0,0)
1180 FOR I = 1 TO N
1190 A(I,N + 1) = (A(I,N + 1) - A(I,I - 1) * A(I - 1,N + 1)) / A(I,I)
1200 NEXT I
1210 FOR I = N - 1 TO 0 STEP - 1
1220 A(I,N + 1) = A(I,N + 1) - A(I,I + 1) * A(I + 1,N + 1)
1230 NEXT I
1240 RETURN
1500 DATA .00324,.208,-307,-1050,.003,1320,4184,10,5.25,29.3,134,357,.025,2,.25,.67,10,500,.001,.001,.01
```

```
LIST

10  HOME : PR# 3
20  PRINT "El presente programa resuelve ecuacionesdiferenciales parciales de la forma:
                                                    (p(x,y)Ux)x + (q(x,y)Uy)y + r(x,y)U = f(x,y) : (x,y) en D"
30  PRINT : PRINT "sujeta a las condiciones frontera:": PRINT : PRINT "U(x,y)=g(x,y) : (x,y) en L1": PRINT : PRINT "p(x,y)Uxco
    s#1 + q(x,y)Uycos#2 + g1(x,y)U = g2(x,y) : (x,y) en L2"
40  INPUT "NUMERO DE TRIANGULOS N=";N
50  INPUT "NUMERO DE TRIANGULOS FRONTERA N1=";N1
60  INPUT "NUMERO DE NODOS TOTALES E=";E
70  INPUT "NUMERO DE NODOS FRONTERA M=";M
80  INPUT "NUMERO DE INCOGNITAS PARA N=";N
90  INPUT "NUMERO DE ELEMENTOS DE INTEGRACION MM=";MM
100  INPUT "NUMERO DE ELEMENTOS DE INTEGRACION NN=";NN
110  INPUT "Sea P%=1 si P(X,Y) es lineal o P%=2 si es no lineal ?P%=";P%
120  INPUT "Sea Q%=1 si Q(X,Y) es lineal o Q%=2 si es no lineal ?Q%=";Q%
130  INPUT "Sea F%=1 si F(X,Y) es lineal, F%=2 si es nula o F%=3 si es no lineal ?F%=";F%
140  INPUT "Sea G%=1 si G1(X,Y) es nula, G%=2 si es no lineal o G%=3 si es lineal ?G%=";G%
150  INPUT "Sea R%=1 si R(X,Y) es nula o R%=2 si no es nula ?R%=";R%
160  INPUT "Sea S%=1 si S1(X,Y) es nula o S%=2 si no es nula ?S%=";S%
170  DIM X(3,N): DIM Y(3,N): DIM EX(E): DIM EY(E): DIM GX(M): DIM GY(M): DIM A(N,E): DIM E(3,3): DIM B(N): DIM C(3): DIM D(3)

180  FOR I = 1 TO N
190  FOR J = 1 TO 3
200  READ X(J,I),Y(J,I)
210  NEXT J,I
220  FOR I = 1 TO E
230  READ EX(I),EY(I)
240  NEXT I
250  FOR I = 1 TO M
260  READ GX(I),GY(I)
270  NEXT I
280 E(1,1) = 1:E(2,2) = 1:E(3,3) = 1
290  FOR L = 1 TO N
300 R = 0
310  FOR P = 1 TO E
320  IF L = P GOTO 340
330  GOTO 480
340  FOR I = 1 TO N
350  FOR J = 1 TO 3
360  IF X(J,I) = EX(P) AND Y(J,I) = EY(P) GOTO 380
370  NEXT J: GOTO 470
380 K = J
390 I% = 1: GOTO 1190
400 A(L,P) = A(L,P) + I1 + I2 - I3
410  PRINT "A(";L;",";P;")=";A(L,P)
420  PRINT "I=";I
430  IF I < = N1 GOTO 450
440  GOTO 470
450 J% = 1: GOTO 2560
460 A(L,P) = A(L,P) + I4
470  NEXT I: GOTO 670
480  IF P < L GOTO 500
490  GOTO 660
500  FOR I = 1 TO N
510  FOR J = 1 TO 3
520  IF X(J,I) = EX(P) AND Y(J,I) = EY(P) GOTO 540
530  NEXT J: GOTO 650
540  FOR K = 1 TO 3
```

```
550 IF X(K,I) = EX(L) AND Y(K,I) = EY(L) GOTO 570
560 NEXT K: GOTO 650
570 IX = 1: GOTO 1190
580 A(L,P) = A(L,P) + I1 + I2 - I3
590 A(P,L) = A(L,P)
600 IF I < = N1 GOTO 620
610 GOTO 650
620 JX = 1: GOTO 2560
630 A(L,P) = A(L,P) + I4
640 A(P,L) = A(L,P)
650 NEXT I: GOTO 670
660 IF P > = N + 1 GOTO 680
670 NEXT P
680 FOR S = N + 1 TO E
690 FOR I = 1 TO N
700 FOR J = 1 TO 3
710 IF X(J,I) = EX(L) AND Y(J,I) = EY(L) GOTO 730
720 NEXT J: GOTO 820
730 FOR K = 1 TO 3
740 IF X(K,I) = EX(S) AND Y(K,I) = EY(S) GOTO 760
750 NEXT K: GOTO 820
760 IX = 2: GOTO 1190
770 A(L,S) = A(L,S) + I1 + I2 - I3
780 IF I < = N1 GOTO 800
790 GOTO 820
800 JX = 3: GOTO 2560
810 A(L,S) = A(L,S) + I4
820 NEXT I,S
830 FOR S = N + 1 TO E
840 GOTO 3030
850 B(L) = B(L) - A(L,S) * GS
860 NEXT S
870 K = 1
880 FOR I = 1 TO N
890 FOR J = 1 TO 3
900 IF X(J,I) = EX(L) AND Y(J,I) = EY(L) GOTO 920
910 NEXT J: GOTO 1000
920 K = J
930 IX = 4: GOTO 1190
940 B(L) = B(L) - I7
950 IF I < = N1 GOTO 970
960 GOTO 1000
970 JX = 4: GOTO 2560
980 B(L) = B(L) + I8
990 PRINT "B(";L;")=";B(L)
1000 NEXT I,L
1010 FOR I = 1 TO N
1020 A(I,N + 1) = B(I)
1030 NEXT I
1040 D$ = CHR$ (4)
1050 CALL 1002: PRINT D$;"OPEN DATOS"
1060 PRINT D$;"WRITE DATOS"
1070 PRINT N: PRINT E
1080 FOR I = 1 TO N: FOR J = 1 TO N + 1
1090 PRINT A(I,J)
1100 NEXT J,I
1110 FOR I = 1 TO N
1120 FOR J = 1 TO 3
1130 PRINT X(J,I);Y(J,I): NEXT J,I
```

```
1140 FOR I = 1 TO E
1150 PRINT EX,I ;E(I): NEXT I
1160 PRINT D$; "CLOSE DATOS"
1170 PRINT D$;"RUN REF 2 PARTE"
1180 STOP
1190 REM  SUBRUTINA INTEGRALES DOBLES
1200 IS = 0
1210 GOTO 2950
1220 IF X(1,I) < X(2,I) AND X(2,I) < X(3,I) GOTO 1270
1230 IF X(1,I) < X(3,I) AND X(3,I) < X(2,I) GOTO 1360
1240 IF X(1,I) = X(2,I) AND Y(3,I) > = Y(1,I) OR X(1,I) = X(2,I) AND Y(2,I) > = Y(3,I) GOTO 1450
1250 IF X(2,I) = X(3,I) AND Y(1,I) > = Y(3,I) OR X(2,I) = X(3,I) AND Y(2,I) > = Y(1,I) GOTO 1520
1260 PRINT "TRIANGULO NO DEFINI          DO ": STOP
1270 X1 = X(1,I):X2 = X(2,I):X3 = X(2,I):X4 = X(3,I)
1280 N1 = (Y(1,I) - Y(3,I)) / (X(1,I) - X(3,I))
1290 Z1 = Y(3,I) - N1 * X(3,I)
1300 N2 = (Y(2,I) - Y(1,I)) / (X(2,I) - X(1,I))
1310 Z2 = Y(1,I) - N2 * X(1,I)
1320 N3 = N1:Z3 = Z1
1330 N4 = (Y(3,I) - Y(2,I)) / (X(3,I) - X(2,I))
1340 Z4 = Y(2,I) - N4 * X(2,I)
1350 GOTO 1590
1360 X1 = X(1,I):X2 = X(3,I):X3 = X(3,I):X4 = X(2,I)
1370 N1 = (Y(1,I) - Y(3,I)) / (X(1,I) - X(3,I))
1380 Z1 = Y(3,I) - N1 * X(3,I)
1390 N2 = (Y(2,I) - Y(1,I)) / (X(2,I) - X(1,I))
1400 Z2 = Y(1,I) - N2 * X(1,I)
1410 N3 = (Y(3,I) - Y(2,I)) / (X(3,I) - X(2,I))
1420 Z3 = Y(2,I) - N3 * X(2,I)
1430 N4 = N2:Z4 = Z2
1440 GOTO 1590
1450 X3 = X(1,I):X4 = X(3,I)
1460 N3 = (Y(3,I) - Y(1,I)) / (X(3,I) - X(1,I))
1470 Z3 = Y(1,I) - N3 * X(1,I)
1480 N4 = (Y(3,I) - Y(2,I)) / (X(3,I) - X(2,I))
1490 Z4 = Y(2,I) - N4 * X(2,I)
1500 I1 = 0:I2 = 0:I3 = 0:I7 = 0
1510 GOTO 1720
1520 X3 = X(1,I):X4 = X(3,I)
1530 N3 = (Y(3,I) - Y(1,I)) / (X(3,I) - X(1,I))
1540 Z3 = Y(1,I) - N3 * X(1,I)
1550 N4 = (Y(2,I) - Y(1,I)) / (X(2,I) - X(1,I))
1560 Z4 = Y(1,I) - N4 * X(1,I)
1570 I1 = 0:I2 = 0:I3 = 0:I7 = 0
1580 GOTO 1720
1590 A = X1:B = X2
1600 C = Z1:KC = N1:D = Z2:KD = N2
1610 IF K = 0 GOTO 1630
1620 GOTO 1700
1630 N% = 1:K% = 1: ON P% GOTO 3270,1860
1640 I1 = IS
1650 N% = 2:K% = 2: ON Q% GOTO 3270,1860
1660 I2 = IS
1670 N% = 3:K% = 3: ON R% GOTO 3550,1860
1680 I3 = IS
1690 GOTO 1720
1700 N% = 4:K% = 4: ON F% GOTO 3270,3550,1860
1710 I7 = IS
1720 A = X3:B = X4
```

```
1730 C = Z3:MC = N3:D = Z4:MD = N4
1740 IF R = 0 GOTO 1760
1750 GOTO 1830
1760 M% = 1:K% = 5: ON P% GOTO 3270,1860
1770 I1 = (I1 + IS) * B1 * B2
1780 M% = 2:K% = 6: ON G% GOTO 3270,1860
1790 I2 = (I2 + IS) * C1 * C2
1800 M% = 3:K% = 7: ON R% GOTO 3550,1860
1810 I3 = I3 + IS
1820 GOTO 1850
1830 M% = 4:K% = 8: ON F% GOTO 3270,2550,1860
1840 I7 = I7 + IS
1850 ON I% GOTO 400,530,770,540
1860 REM INTEGRAL DOBLE DE SIMPSON 3/8
1870 PRINT "SSS"
1880 H = (B - A) / (6 * NN + 3)
1890 X = A + 6 * NN * H:L% = 1: GOTO 2150
1900 G1 = F
1910 X = A + (6 * NN + 1) * H:L% = 2: GOTO 2150
1920 G1 = G1 + 3 * F
1930 X = A + (6 * NN + 2) * H:L% = 3: GOTO 2150
1940 G1 = G1 + 3 * F
1950 X = A + (6 * NN + 3) * H:L% = 4: GOTO 2150
1960 G1 = G1 + F:G2 = 0
1970 FOR II = 0 TO NN - 1
1980 X = A + 6 * II * H:L% = 5: GOTO 2150
1990 G2 = G2 + F
2000 X = A + (6 * II + 1) * H:L% = 6: GOTO 2150
2010 G2 = G2 + 3 * F
2020 X = A + (6 * II + 2) * H:L% = 7: GOTO 2150
2030 G2 = G2 + 3 * F
2040 X = A + (6 * II + 3) * H:L% = 9: GOTO 2150
2050 G2 = G2 + 2 * F
2060 X = A + (6 * II + 4) * H:L% = 9: GOTO 2150
2070 G2 = G2 + 3 * F
2080 X = A + (6 * II + 5) * H:L% = 10: GOTO 2150
2090 G2 = G2 + 3 * F
2100 X = A + (6 * II + 6) * H:L% = 11: GOTO 2150
2110 G2 = G2 + F
2120 NEXT II
2130 IS = (G1 + G2) * 3 * H / 8
2140 ON M% GOTO 1540,1650,1690,1710,1770,1790,1810,1840
2150 REM INTEGRAL SIMPLE DE SIMPSON 3/8
2160 CX = C + MC * X
2170 DX = D + MD * X
2180 K1 = (DX - CX) / (6 * MM + 3)
2190 Y = CX + 6 * MM * K1:N% = 1
2200 ON N% GOTO 3100,3120,3140,3160,3180,3210
2210 F1 = UXY
2220 Y = CX + (6 * MM + 1) * K1:N% = 2
2230 ON N% GOTO 3100,3120,3140,3160,3130,3210
2240 F1 = F1 + 3 * UXY
2250 Y = CX + (6 * MM + 2) * K1:N% = 3
2260 ON N% GOTO 3100,3120,3140,3160,3180,3210
2270 F1 = F1 + 3 * UXY
2280 Y = CX + (6 * MM + 3) * K1:N% = 4
2290 ON N% GOTO 3100,3120,3140,3160,3180,3210
2300 F1 = F1 + UXY:F2 = 0
2310 FOR JJ = 0 TO MM - 1
```

```
2320 N = IX + (6 * JJ + 4) * K1: N% = 5
2330 ON N% GOTO 3100,3120,3140,3160,3180,3210
2340 F2 = F2 + UXY
2350 N = IX + (6 * JJ + 1) * K1: N% = 6
2360 ON N% GOTO 3100,3120,3140,3160,3180,3210
2370 F1 = F1 + 2 * UXY
2380 N = IX + (6 * JJ + 2) * K1: N% = 7
2390 ON N% GOTO 3100,3120,3140,3160,3180,3210
2400 F2 = F2 + 2 * UXY
2410 N = IX + (6 * JJ + 3) * K1: N% = 8
2420 ON N% GOTO 3100,3120,3140,3160,3180,3210
2430 F1 = F1 - 2 * UXY
2440 N = IX + (6 * JJ + 4) * K1: N% = 9
2450 ON N% GOTO 3100,3120,3140,3160,3180,3210
2460 F2 = F2 - 2 * UXY
2470 N = IX + (6 * JJ + 5) * K1: N% = 10
2480 ON N% GOTO 3100,3120,3140,3160,3180,3210
2490 F1 = F1 - 3 * UXY
2500 N = IX + (6 * JJ + 6) * K1: N% = 11
2510 ON N% GOTO 3100,3120,3140,3160,3180,3210
2520 F2 = F2 + UXY
2530 NEXT JJ
2540 F = (F1 + F2) * 3 * K2 / 8
2550 ON J1 GOTO 1900,1920,1940,1960,1990,2010,2030,2050,2070,2090,2110,2770,2830
2560 REM INTEGRAL DE LINEA
2570 F = 0:Q = 0
2580 FOR J1 = 1 TO W
2590 FOR J2 = 1 TO 3
2600 IF X(J2,I) = QX(J1) AND Y(J2,I) = QY(J1) GOTO 2620
2610 NEXT J2: GOTO 2650
2620 Q = Q + 1
2630 C(Q) = QX(J1)
2640 D(Q) = QY(J1)
2650 NEXT J1
2660 C = C(1) = 0
2670 D = D(1) = 0
2680 I5 = 0
2690 IF Q = 2 GOTO 2680
2700 IF R = 1 GOTO 2930
2710 N% = 5:T% = SX
2720 ZC = C(2):DC = C(3) - C(2)
2730 ZD = D(2):DD = D(3) - D(2)
2740 RO = 0
2750 NS = SQR (DC ^ 2 + DD ^ 2)
2760 L1 = 12:T% = 4: ON T% GOTO 3570,2150,3350
2770 I5 = F * NS
2780 ZC = C(1):DC = C(2) - C(1)
2790 ZD = D(1):DD = D(2) - D(1)
2800 RO = 1
2810 NS = SQR (DC ^ 2 + DD ^ 2)
2820 L1 = 13:T% = 5: ON T% GOTO 3570,2150,3390
2830 I5 = I5 + F * NS
2840 IF R = 1 GOTO 2860
2850 I4 = I5: GOTO 2870
2860 I8 = I5
2870 ON J1 GOTO 460,630,810,950
2880 IF R = 1 GOTO 2910
2890 NX = 5:T% = SX
2900 GOTO 2780
```

```
2910 N% = E:T% = 6%
2920 GOTO 2780
2930 N% = E:T% = 6%
2940 GOTO 2720
2950 REM POLINOMIOS LINEALMENTE INDEPENDIENTES
2960 D3 = X(2,I) * Y(3,I) - X(3,I) * Y(2,I) + X(1,I) * (Y(2,I) - Y(3,I)) + Y(1,I) * (X(3,I) - X(2,I))
2970 D1 = E(1,J) * (X(2,I) * Y(3,I) - X(3,I) * Y(2,I)) + X(1,I) * (E(3,J) * Y(2,I) - E(2,J) * Y(3,I)) + Y(1,I) * (E(2,J) * X(
   3,I) - E(3,J) * X(2,I))
2980 D2 = E(1,K) * (X(2,I) * Y(3,I) - X(3,I) * Y(2,I)) + X(1,I) * (E(3,K) * Y(2,I) - E(2,K) * Y(3,I)) + Y(1,I) * (E(2,K) * X(
   3,I) - E(3,K) * Y(2,I))
2990 D3 = E(2,J) * Y(3,I) - E(3,J) * Y(2,I) + E(1,J) * (Y(2,I) - Y(3,I)) + Y(1,I) * (E(3,J) - E(2,J))
3000 D4 = E(2,K) * Y(3,I) - E(3,K) * Y(2,I) + E(1,K) * (Y(2,I) - Y(3,I)) + Y(1,I) * (E(3,K) - E(2,K))
3010 D5 = X(2,I) * E(3,J) - X(3,I) * E(2,J) + X(1,I) * (E(2,J) - E(3,J)) + E(1,J) * (X(3,I) - X(2,I))
3020 D6 = X(2,I) * E(3,K) - X(3,I) * E(2,K) + X(1,I) * (E(2,K) - E(3,K)) + E(1,K) * (X(3,I) - X(2,I))
3030 A1 = D1 / DS:A2 = D2 / DS:B1 = D3 / DS:B2 = D4 / DS:C1 = D5 / DS:C2 = D6 / DS
3040 GOTO 1220
3050 DATA 0,.2,0,.4,.2,.2,.2,.2,.4,.2,.3,.1,.4,0,.4,.2,.5,.1,.5,.1,.6,.1,.6,0,0,0,0,.2,.2,.2,0,0,.2,.2,.2,0,.2,0,.2,.
   2,.3,.1,.2,0,.3,.1,.4,0,.3,.1,.4,.2,.4,0,.4,0,.5,.1,.6,0
3060 DATA .2,.2,.4,.2,.3,.1,.5,.1,.6,.1,0,.4,0,.2,0,0,.2,0,.4,0,.6,0
3070 DATA 0,.4,.2,.2,.4,.2,.5,.1,.6,.1,.6,0
3080 GS = 4
3090 GOTO 550
3100 UX1 = 1
3110 ON N% GOTO 2210,2240,2270,2300,2340,2370,2400,2430,2460,2490,2520,3440,3470,3510
3120 UX1 = 1
3130 ON N% GOTO 2210,2240,2270,2300,2340,2370,2400,2430,2460,2490,2520,3440,3470,3510
3140 UX1 = 0
3150 ON N% GOTO 2210,2240,2270,2300,2340,2370,2400,2430,2460,2490,2520,3440,3470,3510
3160 UX1 = 0
3170 ON N% GOTO 2210,2240,2270,2300,2340,2370,2400,2430,2460,2490,2520,3440,3470,3510
3180 X = Z1 + DC * Y:Y = ZD + DD * Y
3190 UX1 = 0
3200 ON N% GOTO 2210,2240,2270,2300,2340,2370,2400,2430,2460,2490,2520,3440,3470,3510
3210 X = Z1 + DC * Y:Y = ZD + DD * Y
3220 ON I GOTO 3230,3240,3230,3250
3230 UX1 = (X + Y) * (A1 + B1 * X + C1 * Y) / SQR (2): ON N% GOTO 2210,2240,2270,2300,2340,2370,2400,2430,2460,2490,2520,344
   0,3470,3510
3240 UX1 = X * (A1 + B1 * X + C1 * Y): ON N% GOTO 2210,2240,2270,2300,2340,2370,2400,2430,2460,2490,2520,3440,3470,3510
3250 IF F1 = 1 GOTO 3240
3260 UX1 = Y * (A1 + B1 * X + C1 * Y): ON N% GOTO 2210,2240,2270,2300,2340,2370,2400,2430,2460,2490,2520,3440,3470,3510
3270 REM INTEGRAL DOBLE TRAPECIO
3280 H = (B - A) / NN
3290 X = A:O% = 1: GOTO 3390
3300 G1 = F
3310 X = B:O% = 2: GOTO 3390
3320 G1 = G1 + F:G2 = 0
3330 FOR II = 1 TO NN - 1
3340 X = A + II * H:O% = 3: GOTO 3390
3350 G2 = G2 + F
3360 NEXT II
3370 Z3 = H * (G1 + 2 * G2) / 2
3380 ON K% GOTO 1640,1660,1690,1710,1770,1790,1810,1840
3390 REM INTEGRAL SIMPLE DEL TRAPECIO
3400 CX = C + MC * X
3410 DX = D + MD * X:H1 = (DX - CX) / NN
3420 Y = CX:N% = 12
3430 ON M% GOTO 3100,3120,3140,3160,3180,3210
3440 F1 = UX1
3450 Y = DX:N% = 13
```

```
3460  ON M% GOTO 3100,3120,3140,3160,3180,3210
3470 F1 = F1 + JX :F2 = 0
3480  FOR JJ = 1 TO NM - 1
3490 X = [illegible] + JJ * K1:M% = 14
3500  ON M% GOTO 3100,3120,3140,3160,3190,3210
3510 F2 = F2 + UXY
3520  NEXT JJ
3530 F = K1 * (F1 + 2 * F2) / 2
3540  ON O% GOTO 3300,3320,3350,2770,2830
3550 IS = 0
3560  GOTO 3350
3570 F = 0
3580  GOTO 3540
```

```
]PRINT CHR$(15)

]PRINT CHR$(9);"132N"

]LIST

10  REM  SOLUCION DE LA MATRIZ MEF POR GAUSS JORDAN
20 D$ =  CHR$ (4)
30  PRINT D$;"OPEN DATOS"
40  PRINT D$;"READ DATOS"
45  INPUT N: INPUT E: INPUT M
50  DIM X(3,M): DIM Y(3,M): DIM EX(E): DIM EY(E): DIM G(E): DIM A(N,N + 1)
60  FOR I = 1 TO N: FOR J = 1 TO N + 1
70  INPUT A(I,J)
80  NEXT J,I
81  FOR I = 1 TO M: FOR J = 1 TO 3: INPUT X(J,I),Y(J,I): NEXT J,I
82  FOR I = 1 TO E: INPUT EX(I),EY(I): NEXT I
90  PRINT D$;"CLOSE DATOS"
100  FOR I = 1 TO N
110  IF A(I,I) < > 0 GOTO 210
120  IF I = N GOTO 160
130  FOR J = I + 1 TO N
140  IF A(J,I) < > 0 GOTO 170
150  NEXT J
160  PRINT "MATRIZ SINGULAR": STOP
170  FOR K = I TO N + 1
180 Z = A(I,K):A(I,K) = A(J,K)
190 A(J,K) = Z
200  NEXT K
210  FOR J = N + 1 TO I STEP  - 1
220 A(I,J) = A(I,J) / A(I,I)
230  NEXT J
240  FOR K = 1 TO N
250  IF K = I GOTO 290
260  FOR J = N + 1 TO I STEP  - 1
270 A(K,J) = A(K,J) - A(K,I) * A(I,J)
280  NEXT J
290  NEXT K
300  NEXT I
310  HOME
350  FOR I = 1 TO N
360 G(I) = A(I,N + 1): NEXT I
370  FOR I = N + 1 TO E
380 G(I) = 0: NEXT I
420 D$ =  CHR$ (4)
430  PRINT D$;"OPEN MULTIPLICADORES"
440  PRINT D$;"WRITE MULTIPLICADORES"
450  PRINT N: PRINT E: PRINT M
460  FOR I = 1 TO E
470  PRINT G(I): NEXT I
471  FOR I = 1 TO M: FOR J = 1 TO 3: PRINT X(J,I);",";Y(J,I): NEXT J,I
472  FOR I = 1 TO E: PRINT EX(I);",";EY(I): NEXT I
480  PRINT D$;"CLOSE MULTIPLICADORES"
490  PRINT D$;"RUN MEF 3 PARTE"
```

```
]
]PRINT CHR$(15)

]PRINT CHR$(9)"132N"

]LIST

10  REM  MEF 3'PARTE
20 D$ =  CHR$ (4)
30  PRINT D$;"OPEN MULTIPLICADORES"
40  PRINT D$;"READ MULTIPLICADORES"
50  INPUT M: INPUT E: INPUT N: DIM X(3,M): DIM Y(3,M): DIM EX(E): DIM EY(E): DIM G(E)
60  FOR I = 1 TO E: INPUT G(I): NEXT I
70  FOR I = 1 TO M: FOR J = 1 TO 3: INPUT X(J,I),Y(J,I): NEXT J,I
80  FOR I = 1 TO E: INPUT EX(I),EY(I): NEXT I
90  PRINT D$;"CLOSE MULTIPLICADORES": HOME
91  PR# 1: VTAB 1: HTAB 2: PRINT "SOLUCION DE LA EDP ELIPTICA"
92  VTAB 2: PRINT "U(x,y) = a + bx + cy para (x,y) en Tk "
93  VTAB 3: PRINT "--------------------------------------"
94  VTAB 4: HTAB 5: PRINT "a";: VTAB 4: HTAB 16: PRINT "b";: VTAB 4: HTAB 28: PRINT "c";: VTAB 4: HTAB 35: PRINT "Tk"
95  VTAB 5: PRINT "--------------------------------------"
100 E(1,1) = 1:E(2,2) = 1:E(3,3) = 1
110 A = 0:B = 0:C = 0
120  FOR K = 1 TO M:I = K
130  FOR J = 1 TO 3
140  FOR P = 1 TO E
150  IF X(J,K) = EX(P) AND Y(J,K) = EY(P) GOTO 210
160  NEXT P,J
170  VTAB K + 6: HTAB 1: PRINT  INT (A * 100000 + .5) / 100000;: VTAB K + 6: HTAB 13: PRINT  INT (B * 100000 + .5) / 100000;:
     VTAB K + 6: HTAB 25: PRINT  INT (C * 100000 + .5) / 100000;: VTAB K + 6: HTAB 37: PRINT K
180 A = 0:B = 0:C = 0
190  NEXT K
195  VTAB K + 7: PRINT "----------------------------------------"
196  PR# 0
200  STOP
210  REM  POLINOMIOS LINEALMENTE INDEPENDIENTES
220 DS = X(2,I) * Y(3,I) - X(3,I) * Y(2,I) + X(1,I) * (Y(2,I) - Y(3,I)) + Y(1,I) * (X(3,I) - X(2,I))
230 D1 = E(1,J) * (X(2,I) * Y(3,I) - X(3,I) * Y(2,I)) + X(1,I) * (E(3,J) * Y(2,I) - E(2,J) * Y(3,I)) + Y(1,I) * (E(2,J) * X(3
    ,I) - E(3,J) * X(2,I))
240 D2 = E(2,J) * Y(3,I) - E(3,J) * Y(2,I) + E(1,J) * (Y(2,I) - Y(3,I)) + Y(1,I) * (E(3,J) - E(2,J))
250 D3 = X(2,I) * E(3,J) - X(3,I) * E(2,J) + X(1,I) * (E(2,J) - E(3,J)) + E(1,J) * (X(3,I) - X(2,I))
260 A = A + D1 * G(P) / DS:B = B + D2 * G(P) / DS:C = C + D3 * G(P) / DS: GOTO 160

]
```

```
]PRINT CHR$(15)
]PRINT CHR$(9);"132N"

]LIST

1  PR# 3: HOME : PRINT "El presente programa resuelve ecuaciones de la forma:": PRINT : PRINT "        A1(R)Uxx + A2(R)Uxy + A
   3(R)Uyy = A4(R)": PRINT : PRINT "              donde R = (x,y,U,Ux,Uy)"
2  VTAB 22: PRINT "Para continuar oprimir cualquier tecla": GET A$
10  REM  METODO DE LAS CURVAS CARACTERISTICAS
20  DEF  FN A1(X) = 1
30  DEF  FN A2(X) = 0
40  DEF  FN A3(X) =  - 1
50  DEF  FN A4(X) = 50 * 3.141516 ^ 2 * (U + T * U2)
60  DEF  FN F(X) = 0
70  DEF  FN DF(X) = 0
80  DEF  FN G(X) =  SIN (10 * 3.141516 * X)
85  HOME
100  INPUT "M=";M: INPUT "N=";N
110  INPUT "L=";L: INPUT "TN=";TN
120  INPUT "ERROR PERMITIDO E=";E
130  DIM X(1,N): DIM T(1,N): DIM U(1,N): DIM U1(1,N): DIM U2(1,N)
150 H = L / M:K = TN / N
160  FOR I = 0 TO M
170 X = I * H
180 U(0,I) =  FN F(X)
190 U1(0,I) =  FN DF(X)
200 U2(0,I) =  FN G(X)
210 X(0,I) = X:T(0,I) = 0
220  NEXT I
230 S = 0
240 S = S + 1
250  FOR I = 0 TO M - 1
260 X = X(0,I):T = T(0,I)
270 U = U(0,I):U1 = U1(0,I):U2 = U2(0,I)
280 A1 =  FN A1(X)
290 A2 =  FN A2(X)
300 A3 =  FN A3(X)
310 A4 =  FN A4(X)
320 DISC = A2 ^ 2 - 4 * A1 * A3
330  IF DISC > 0 GOTO 350
340  PRINT "ECUACION NO HIPERBOLICA"
350 M1 = (A2 +  SQR (DISC)) / (2 * A3)
360  IF M1 > 0 GOTO 400
370 M1 = (A2 -  SQR (DISC)) / (2 * A3)
380  IF M1 > 0 GOTO 400
390  PRINT "TIENE  DOS PENDIENTES CON IGUAL SIGNO ": STOP
400 X = X(0,I + 1):T = T(0,I + 1)
410 U = U(0,I + 1):U1 = U1(0,I + 1):U2 = U2(0,I + 1)
420 A5 =  FN A1(X)
430 A6 =  FN A2(X)
440 A7 =  FN A3(X)
450 A8 =  FN A4(X)
460 DISC = A6 ^ 2 - 4 * A5 * A7
470  IF DISC > 0 GOTO 490
480  PRINT "ECUACION NO HIPERBOLICA": STOP
490 M2 = (A6 +  SQR (DISC)) / (2 * A7)
500  IF M2 < 0 GOTO 540
510 M2 = (A6 -  SQR (DISC)) / (2 * A7)
520  IF M2 < 0 GOTO 540
530  PRINT " TIENE DOS PENDIENTES CON IGUAL SIGNO": STOP
```

```
540 X0 = (M1 * X(0,I) - M2 * X(0,I + 1) + T(0,I + 1) - T(0,I)) / (M1 - M2)
550 T0 = T(0,I) + M1 * (X0 - X(0,I))
560 B1 = (A1 + A5) / 2:B2 = (A2 + A6) / 2:B3 = (A3 + A7) / 2:B4 = (A4 + A8) / 2:F = 0
570 M3 = M1:M4 = M2
580 C1 = (A1 + B1) / 2:C2 = (A2 + B2) / 2:C3 = (A3 + B3) / 2:C4 = (A4 + B4) / 2:C5 = (A5 + B1) / 2:C6 = (A6 + B2) / 2
590 C7 = (A7 + B3) / 2:C8 = (A8 + B4) / 2:M1 = (M1 + M3) / 2:M2 = (M2 + M4) / 2
600 Q1 = (C4 * (T0 - T(0,I)) + C1 * U2(0,I) + C2 * M1 * U1(0,I)) / C1
610 Q2 = (C8 * (T0 - T(0,I + 1)) + C5 * U2(0,I + 1) + C7 * M2 * U1(0,I + 1)) / C5
620 Q3 = C3 * M1 / C1:Q4 = C7 * M2 / C5
630 U1 = (Q1 - Q2) / (Q3 - Q4)
640 U2 = Q1 - Q3 * U1
650 U = U(0,I) + ((U1(0,I) + U1) * (X0 - X(0,I)) + (U2(0,I) + U2) * (T0 - T(0,I) )) / 2
660 U = U + U(0,I + 1) + ((U1(0,I + 1) + U1) * (X0 - X(0,I + 1)) + (U2(0,I + 1) + U2) * (T0 - T(0,I + 1))) / 2
670 U = U / 2:R = R + 1
680 X = X0:T = T0
690 B1 = FN A1(X):B2 = FN A2(X):B3 = FN A3(X):B4 = FN A4(X)
700 DISC = B2 ^ 2 - 4 * B1 * B3
710 IF DISC > 0 GOTO 730
720 PRINT "ECUACION NO HIPERBOLICA": STOP
730 M3 = (B2 + SQR (DISC)) / (2 * B3)
740 IF M3 < 0 GOTO 750
750 M3 = (B2 - SQR (DISC)) / (2 * B3)
760 M4 = (B2 + SQR (DISC)) / (2 * B3)
770 GOTO 790
780 M4 = (B2 - SQR (DISC)) / (2 * B3)
790 IF M4 > 0 GOTO 810
800 PRINT "ECUACION CON DOS PENDIENTES DE IGUAL SIGNO": STOP
810 M1 = (M1 + M3) / 2:M2 = (M2 + M4) / 2
820 X1 = (M1 * X(0,I) - M2 * X(0,I + 1) + T(0,I + 1) - T(0,I)) / (M1 - M2)
830 T1 = T(0,I) + M1 * (X1 - X(0,I))
835 IF R = 1 THEN U = U: GOTO 560
840 IF ABS (X0 - X1) < E AND ABS (T0 - T1) < E GOTO 860
850 X0 = X1:T0 = T1:U = U: GOTO 580
860 IF ( - 1) ^ S = - 1 GOTO 900
870 X(1,I) = X1:T(1,I) = T1
880 U(1,I) = U:U1(1,I) = U1:U2(1,I) = U2
890 GOTO 920
900 X(1,I + 1) = X1:T(1,I + 1) = T1
910 U(1,I + 1) = U:U1(1,I + 1) = U1:U2(1,I + 1) = U2
920 NEXT I
930 IF ( - 1) ^ S = - 1 GOTO 970
940 X(1,M) = L:T(1,M) = T(1,M - 1)
950 U(1,M) = 0:U1(1,M) = 0:U2(1,M) = 0
960 GOTO 981
970 X(1,0) = 0:T(1,0) = T(1,1)
980 U(1,0) = 0:U1(1,0) = 0:U2(1,0) = 0
981 PR# 1: HOME : VTAB 1: PRINT "--------------------------------------"
982 VTAB 2: PRINT "SOLUCION DE LA ECUACION DIFERENCIAL P."
983 VTAB 3: PRINT "--------------------------------------"
990 FOR I = 0 TO M:I% = I: IF I > 20 THEN I% = 20
995 XAV = INT (X(1,I) * 10000 + .5) / 10000:TAV = INT (T(1,I) * 10000 + .5) / 10000:UAV = INT (U(1,I) * 10000 + .5) / 1000
    0
996 DA = INT (T(1,I) * SIN (10 * 3.141516 * X(1,I)) * 10000 + .5) / 10000
1000 VTAB I% + 4: PRINT XAV;: VTAB I% + 4: HTAB 9: PRINT TAV;: VTAB I% + 4: HTAB 19: PRINT ;UAV;: VTAB I% + 4: HTAB 29: PRINT
    DA
1020 X(0,I) = X(1,I):T(0,I) = T(1,I)
1030 U(0,I) = U(1,I):U1(0,I) = U1(1,I):U2(0,I) = U2(1,I)
1040 NEXT I
```

```
1045  FRA 0
1050  IF T(0,I - 1) > TN GOTO 1070
1060  GOTO 240
1070  INPUT "¿DESEAS CONTINUAR? ";A$
1080  IF A$ = "SI" GOTO 1060
1090  PRINT " FIN DEL CALCULO": STOP
```

¿

C A P I T U L O   V I

Utilizando los métodos numéricos previamente expuestos, a continuación se presenta la solución de los siguientes problemas:

1.- Cálculo de los perfiles radiales y axiales de conversión y temperatura en reactores catalíticos utilizando el modelo de transferencia efectiva.

2.- Cálculo de la distribución de temperatura en una placa metálica en la cual, se transfiere energía térmica en condiciones estables.

Chemical Engineering Kinetics.
J.M.Smith. 2nd Edition.

REACCION DE OXIDACION DE SO_2

Calcular el perfil de distribución de temperatura y conversión en un reactor catalítico tubular para la reacción de oxidación de SO_2; comparar los resultados obtenidos contra los datos experimentales reportados.

Condiciones experimentales.

La reacción se llevó a cabo en un reactor tubular empacado con granulos de catalizador de alúmina-platino (0.2% en peso). La temperatura del reactor fué controlada con una chaqueta externa, enfriada con glicol a su temperatura de ebullición (197°C); la presión de operación fué de 760 mm Hg.

diámetro del reactor	DR = 2.06	pulg.
diámetro granular	dp = 1/8	pulg.
densidad de empaque	db = 64	lb/ft^3

Mezcla gaseosa de alimentación.

% mol de SO_2	yo = 6.5	
% mol de aire seco	ya = 93.5	
masa velocidad	G = 350	$lb/hrft^2$

Propiedades físicas.

calor especifico(aire)	cp = 0.25	Btu/lb'F
calor de reacción	DH =-22,700	cal/gmol
Peclet radial	Pe = 9.6	
Peso molecular(mezcla)	PM = 31.2	
Conductividad efectiva	ke = 0.216	Btu/hrft'F

Velocidad de reacción global (gmol/hr g cat.)

% de conversión de SO_2

T('C)	0	10	20	30	40	50	60
197	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
350	0.0110	0.0080	0.0049	0.0031			
360	0.0175	0.0121	0.0078	0.0047	0.0027	0.0018	
380	0.0325	0.0214	0.0143	0.0094	0.0060	0.0041	
400	0.0570	0.0355	0.0239	0.0163	0.0110	0.0074	0.0048
420	0.0830	0.0518	0.0344	0.0236	0.0163	0.0110	0.0074
440	0.1080	0.0752	0.0514	0.0351	0.0236	0.0159	0.0102
460	0.1460	0.1000	0.0674	0.0466	0.0319	0.0215	0.0138
480		0.1276	0.0898	0.0642	0.0440	0.0279	0.0189
500		0.1670	0.1220	0.0895	0.0632	0.0394	0.0263

R.W.Olson,R.W.Schuler,and J.M.Smith,Chem.Eng.Progr.,46,614(1950).

Los datos anteriores se correlacionaron en el siguiente modelo matemático, utilizando el método de mínimos cuadrados.

$$RP(X,T)=\exp(1.10892364-0.0399791661X-5317464.55T^{-2.35})$$

El modelo matemático que representa el comportamiento del reactor sin considerar dispersión axial es:

$$dp(X_r/r + X_{rr})/Pe + Rp\ db\ PM/G\ yo - X_z = 0 \qquad . . . (1)$$

$$ke(T_r/r + T_{rr}) - Rp\ db\ DH - G\ cp\ T_z = 0 \qquad . . . (2)$$

condiciones frontera.

$$X(r,0) = 0$$

$$T(r,0) = f(r);\ 0 \leq r \leq R$$

$$X_r(0,z) = 0$$

$$X_r(R,z) = 0\ ; \quad 0 \leq z \leq LL$$

$$T_r(0,z) = 0$$

$$T(R,z) = 197\ {}^{\circ}C$$

Aplicando el método Crank-Nicolson, el sistema de EDP se transforma en el sistema lineal:

$$A1T_{i-1,j+1}+A2T_{i,j+1}+A3T_{i+1,j+1}=A4T_{i-1,j}+A5T_{i,j}+A6T_{i+1,j} - C2(Rp_{i,j}+Rp_{i,j+1})$$

$$T_{0,j+1}-T_{1,j+1} = T_{0,j}-T_{1,j}$$

$$T_{N,j} = 197\ {}^{\circ}C$$

para $i = 1,N-1$; $j = 0,M-1$

donde $A1 = 1/h^2 - 1/h^2 i$

$A2 = 1/h_i^2 - 2/h^2 + 2C1/k1$

$A3 = 1/h^2$

$A4 = -A3$

$A5 = 1/h^2 i + 2/h^2 + 2C1/k1$

$A6 = -1/h^2 i - 1/h^2$

$$B1X_{i-1,j+1}+B2X_{i,j+1}+B3X_{i+1,j+1} = B4X_{i-1,j}+B5X_{i,j}+B6X_{i+1,j} - D2(Rp_{i,j}+Rp_{i,j+1})$$

$$X_{0,j+1} - X_{1,j+1} = X_{0,j} - X_{1,j}$$

$$X_{N-1,j+1} - X_{N,j+1} = X_{N-1,j} - X_{N,j}$$

para $i = 1,N-1$; $j = 0,M-1$

donde

$C1 = -G\ cp/ke$ | $B1 = A1$

$DI = -Pe/dp$ | $B2 = 1/h^2 i - 2/h^2 + 2DI/k1$

$C2 = -db\ DH/ke$ | $B3 = A3$

k1 , h = tamaño de la partición | $B4 = A4$

$D2 = db\ Pe\ PM/dp\ G\ yo$ | $B5 = 1/h^2 i + 2/h^2 + 2DI/k1$

$B6 = A6$

Para j=0 las ecuaciones de recurrencia anteriores se representa por el sistema matricial:

$$AT = AoTo + Rp_1(X,T) \quad . \quad . \quad . \quad (I)$$

$$BX = BoXo + Rp_2(X,T) \quad . \quad . \quad . \quad (II)$$

donde Xo,To son datos frontera.

Selección de la partición y de los parámetros de convergencia.

Perfil radial de temperatura para una profundidad de lecho de z=0.05

N=5 ; M=100

e1=0.001 ; e2=0.1	e1=0.0001 ; e2=0.001
438.7	438.7
438.7	437.8
434.9	434.8
413.9	413.9
331.8	331.8
197.0	197.0

N=10 ; e1=0.001 ; e2=0.1

M=100	M=1000	M=2000
439.3	440.4	440.3
439.3	440.4	440.3
439.0	440.2	440.1
438.2	439.6	439.3
436.3	437.5	436.6
431.6	431.7	429.4
419.8	417.6	412.3
393.0	388.5	379.4
351.0	339.5	328.0
253.9	272.9	265.0
197.0	197.0	197.0

<u>M=100</u> ; <u>e1=0.001</u> ; <u>e2=0.1</u>

N=10	N=20
439.3	439.3
439.3	439.3
439.0	439.3
438.2	439.1
436.3	438.9
431.6	438.6
419.8	438.0
393.0	437.2
351.0	435.9
253.9	433.8
197.0	430.5
	425.2
	416.9
	403.8
	384.0
	352.4
	324.3
	262.9
	283.8
	257.2
	197.0

Utilizando los resultados anteriores, se proponen los siguientes parámetros: CON FINES DEMOSTRATIVOS

M=200 ; N=10 ; e1=0.001 ; e2=0.1

RESULTADOS. OXIDACION DE SO_2

1.0 El modelo matemático representa con buena aproximación el comportamiento del reactor, esto se puede apreciar en las tendencias presentadas en las gráficas I y II.

2.0 La conversión promedio máxima calculada fué de 32.2% y se alcanzó a una profundidad de lecho de 0.45 ft. (gráfica II).

3.0 Se obtuvo una temperatura máxima de 492.0°C en el centro del reactor y a una profundidad de lecho de 0.20 ft.

4.0 Un aumento del 7% en la conductividad efectiva, produce una disminución hasta de 4°C en las cercanias de la pared del reactor. (Ver tabla II)

5.0 Una variación del 4% en la capacidad calorífica, produce cambios de 1°C en el corazon del reactor. (ver tabla II)

6.0 El número de Peclet radial (masa), no manifiesta cambios apreciables en los perfiles de conversión. (ver tabla II)

7.0 La temperatura de la mezcla reaccionante en la entrada del reactor, es determinante en los perfiles de conversión y temperatura. (ver tabla II)

T A B L A I

z(ft)	0.05		0.10		0.15	
r/ro	x	t	x	t	x	t
0.0	0.2240	442.1	0.4134	474.8	0.5474	491.1
0.1	0.2240	442.1	0.4134	474.8	0.5474	491.1
0.2	0.2233	441.6	0.4085	471.9	0.5359	484.9
0.3	0.2211	440.1	0.3972	465.7	0.5118	472.9
0.4	0.2152	436.4	0.3744	454.0	0.4689	453.6
0.5	0.2008	428.5	0.3322	434.0	0.4003	425.4
0.6	0.1725	412.6	0.2632	402.8	0.3049	388.0
0.7	0.1242	382.9	0.1725	359.0	0.1988	343.1
0.8	0.0644	332.4	0.0890	308.2	0.1128	294.3
0.9	0.0225	268.5	0.0412	252.5	0.0625	244.7
1.0	0.0055	197.0	0.0241	197.0	0.0454	197.0

z(ft)	0.20		0.25		0.30	
r/ro	x	t	x	t	x	t
0.0	0.6337	494.2	0.6848	483.2	0.7107	468.5
0.1	0.6337	494.2	0.6848	483.2	0.7107	468.5
0.2	0.6155	483.6	0.6609	473.5	0.6825	458.4
0.3	0.5792	467.7	0.6151	455.8	0.6301	440.4
0.4	0.5199	444.1	0.5445	430.5	0.5529	415.1
0.5	0.4339	412.4	0.4491	398.1	0.4541	383.6
0.6	0.3265	373.6	0.3386	360.1	0.3455	347.5
0.7	0.2179	329.9	0.2332	318.8	0.2458	309.0
0.8	0.1338	284.5	0.1530	276.8	0.1703	270.2
0.9	0.0841	239.6	0.1049	235.7	0.1243	232.5
1.0	0.0670	197.0	0.0878	197.0	0.1073	197.0

z(ft)	0.35		0.40	
r/ro	x	t	x	t
0.0	0.7185	450.9	0.7134	432.1
0.1	0.7185	450.9	0.7134	432.1
0.2	0.6876	441.0	0.6809	422.6
0.3	0.6312	423.4	0.6230	406.0
0.4	0.5511	399.1	0.5430	383.2
0.5	0.4530	369.3	0.4483	355.5
0.6	0.34[illegible]3	335.6	0.3511	324.4
0.7	0.2563	300.1	0.2651	291.8
0.8	0.1858	264.3	0.1997	256.9
0.9	0.1422	229.6	0.1585	227.0
1.0	0.1252	197.0	0.1414	197.0

TABIA II

r/ro	cp=0.25 x	cp=0.25 t	cp=0.26 x	cp=0.26 t	
0.0	0.1132	421.4	0.1123	420.4	para z=0.025 ft
0.1	0.1132	421.4	0.1123	420.4	
0.2	0.1131	421.3	0.1122	420.3	
0.3	0.1127	421.0	0.1126	420.9	
0.4	0.1114	419.9	0.1111	419.7	
0.5	0.1070	416.1	0.1065	415.6	
0.6	0.0947	408.5	0.0939	407.6	
0.7	0.0748	391.7	0.0736	390.0	
0.8	0.0432	358.4	0.0421	355.6	
0.9	0.0171	283.4	0.0168	279.2	
1.0	0.0000	197.0	0.0000	197.0	

r/ro	ke=0.216 x	ke=0.216 t	ke=0.230 x	ke=0.230 t	
0.0	0.1132	421.4	0.1132	421.4	para z=0.025 ft
0.1	0.1132	421.4	0.1132	421.4	
0.2	0.1131	421.3	0.1131	421.3	
0.3	0.1127	421.0	0.1126	420.9	
0.4	0.1114	419.9	0.1111	419.7	
0.5	0.1070	416.1	0.1065	415.6	
0.6	0.0947	408.5	0.0939	407.6	
0.7	0.0748	391.7	0.0736	390.0	
0.8	0.0432	358.4	0.0421	355.6	
0.9	0.0171	283.4	0.0168	279.2	
1.0	0.0000	197.0	0.0000	197.0	

r/ro	Pe=9.60 x	t	Pe=10.00 x	t	
0.0	0.1132	421.4	0.1132	421.4	para z=0.025 ft
0.1	0.1132	421.4	0.1132	421.4	
0.2	0.1131	421.3	0.1131	421.3	
0.3	0.1127	421.0	0.1127	421.0	
0.4	0.1114	419.9	0.1114	419.9	
0.5	0.1070	416.1	0.1071	416.1	
0.6	0.0947	408.5	0.0949	408.5	
0.7	0.0748	391.7	0.0749	391.7	
0.8	0.0432	358.4	0.0432	358.4	
0.9	0.0171	283.4	0.0169	283.4	
1.0	0.0000	197.0	0.0000	197.0	

TABLA II (cont.)

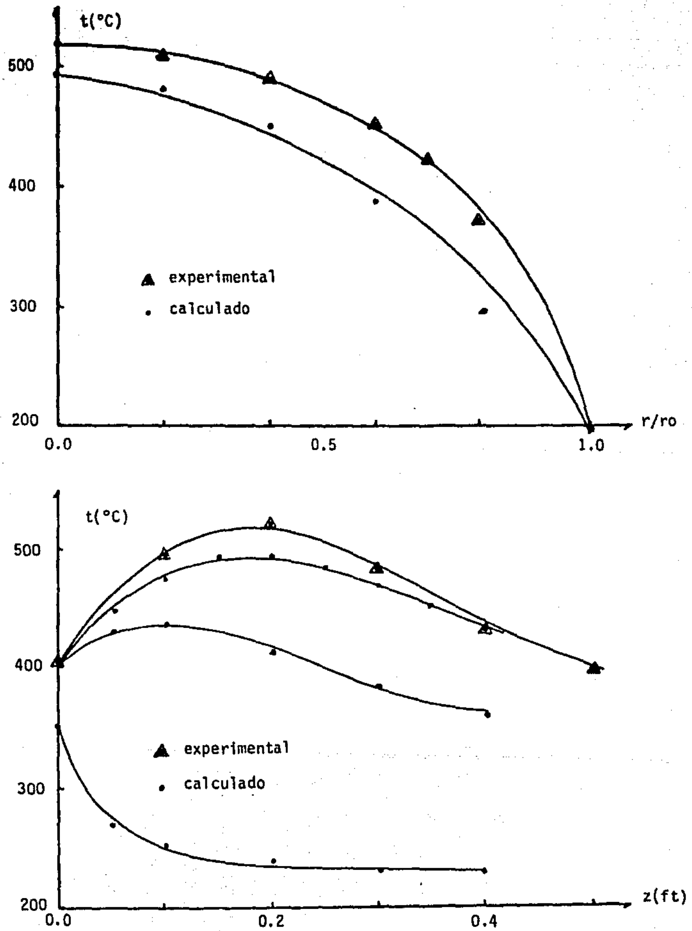
r/ro	Perfil térmico I1 x	Perfil térmico I1 t	Perfil térmico I2 x	Perfil térmico I2 t	
0.0	0.1132	421.4	0.1133	421.4	para z=0.025 ft
0.1	0.1132	421.4	0.1133	421.4	
0.2	0.1131	421.3	0.1133	421.4	
0.3	0.1127	421.0	0.1132	421.4	
0.4	0.1070	416.1	0.1124	421.2	
0.5	0.1070	416.1	0.1124	420.7	
0.6	0.0947	408.5	0.1102	418.9	
0.7	0.0746	391.7	0.1032	412.5	
0.8	0.0432	358.4	0.0850	389.1	
0.9	0.0171	283.4	0.0611	303.6	
1.0	0.0000	197.0	0.0000	197.0	

donde los perfiles térmicos en z=0 son:

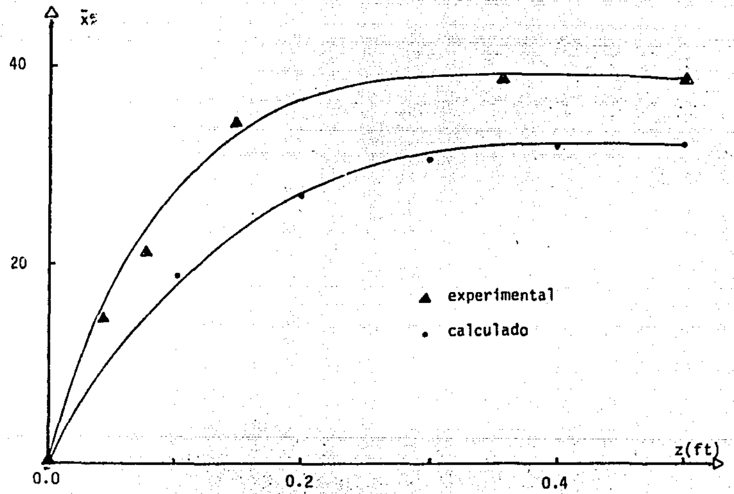
r/ro	I1	I2
0.0	400	400
0.1	400	400
0.2	400	400
0.3	400	400
0.4	400	400
0.5	400	400
0.6	395	400
0.7	390	400
0.8	375	400
0.9	350	400
1.0	197	197

T A B L A   III

z(ft)	x % conversión promedio
0.025	6.02
0.050	11.75
0.100	19.22
0.150	23.98
0.200	27.09
0.250	29.20
0.300	30.63
0.350	31.59
0.400	32.21


t(°C)
500
400
300
200
experimental
calculado
0.0
0.5
1.0
r/ro
t(°C)
500
400
300
200
experimental
calculado
0.0
0.2
0.4
z(ft)

grafica I



grafica II

Aplicación del método Crank-Nicolson para resolver el problema expuesto por G.F.Froment en el artículo

"Fixed Bed Catalytic Reactors"

Ind.Eng.Chem.Vol.59 No.2 Feb. 1967

Diseño de reactores catalíticos de lecho fijo basado en modelos de transporte efectivo.

La reacción de oxidación de o-xileno para producir anhidrido ftálico, se lleva a cabo en fase gaseosa usando V_2O_5 como catalizador, la estequiometría de la reacción es:

$$A \xrightarrow[\text{aire}]{k_1} B \xrightarrow[\text{aire}]{k_2} C$$

$$A \xrightarrow{k_3} C$$

A = o-xileno

F = anhidrido ftálico

C = bióxido y monoxido de carbono

Características de la reacción. El o-xileno es explosivo y la reacción es exotérmica.

Para poder tener control térmico sobre la reacción, se usa un reactor multitubular empacado con catalizador y enfriado por una salmuera que transfiere el calor de reacción a un generador de vapor. Se usa un exceso de aire de tal forma que la concentración de o-xileno se mantenga debajo de su límite de explosividad (1%).

La temperatura de la salmuera se mantiene constante a una temperatura To = 375°C, la transferencia de calor se manifiesta a través de la tuberia y el mecanismo es utilizado como una restricción en la frontera.

Datos característicos del sistema

Reactor

Diámetro de los tubos	d_t = 0.025 m
Número de tubos	N_t = 2500
Longitud del reactor	LL = 2 a 3 m

Propiedades físicas

Fracción mol inicial de o-xileno	NAo= 0.00924
Fracción mol inicial de aire	No = 0.208
Calor de reacción (1)	H1 = -307 Kcal/gmol
Calor de combustion (3)	H3 = -1090 Kcal/gmol
Diámetro de los gránulos de catalizador	dp = 0.003 m
Densidad de empaque del catalizador	db = 1300 Kg/m^3
Masa velocidad	G = 4684 Kg/m^2hr
No. Peclet masa radial	Pemr = 10
No. Peclet térmico radial	Pehr = 5.25
Peso molecular promedio	PM = 29.48
Coeficiente de transferencia de calor	aw = 134 Kcal/m^2hr°C
Capacidad calorífica	cp = 0.25 Kcal/Kg°C
Difusividad térmica	Lr = 0.67 Kcal/mhr°C

Cinética de la reacción. Debido al exceso de aire, la cinética se puede considerar como de pseudo primer orden.

$$RA = k1\ C_A\ C_{aire} + k3\ C_A\ C_{aire}$$

$$RB = k1\ C_A\ C_{aire} - k2\ C_B\ C_{aire}$$

$$RC = k2\ C_B\ C_{aire} + k3\ C_A\ C_{aire}$$

$$Co = C_{aire}$$
$$C_A = C_{Ao}(1-X-W)$$
$$C_B = C_{Ao}X$$

$$RA = (k1+k3)C_{Ao}Co(1-X-W)$$
$$RB = C_{Ao}\ Co(k1(1-X-W)-k2\ X)$$
$$RC = C_{Ao}\ Co(k2\ X + k3(1-X-W))$$

$$\text{In}\ k1 = -22700/1.98(T+To) + 19.837$$
$$\text{In}\ k2 = -31400/1.98(T+To) + 20.86$$
$$\text{In}\ k3 = -28600/1.98(T+To) + 18.97$$

Sin tomar en cuenta la difusión axial, el comportamiento del reactor puede ser representado por el sistema de EDP:

$$X_z = a1(X_{rr} + X_r/r) + b1\ RB \qquad (I)$$
$$W_z = a1(W_{rr} + W_r/r) + b1\ RC \qquad (II)$$
$$T_z = a2(T_{rr} + T_r/r) + b2\ RB + b3\ RC \qquad (III)$$

donde $z = z/dp$; $r = r/dp$; $T = T-To$; $R = R/dp$

$a1 = 1/Pehr$; $a2 = 1/Pemr$

$b1 = db\ dp\ \overline{PM}/G\ NAo$; $b2 = db\ dp(-H1)/G\ cp$;

$b3 = db\ dp(-H3)/G\ cp$

condiciones frontera

$$X(r,0) = 0 \ ; \ W(r,0) = 0 \ ; \ 0 \leq r \leq R$$

$$X_r(0,z) = 0 \ ; \ W_r(0,z) = 0 \ ; \ 0 \leq z \leq LL$$

$$T(R,z) = 0 \ ; \ 0 \leq z \leq LL$$

$$T_r(0,z) = 0 \ ; \ T_r(R,z) = -aw\ dp\ T/Lr \ ; \ 0 \leq z \leq LL$$

al aplicar el método de diferencias finitas Crank-Nicolson a las EDP y sus condiciones frontera se tiene:

$$C1T_{i-1,j+1}+C2T_{i,j+1}+C3T_{i+1,j+1} = C4T_{i-1,j}+C5T_{i,j}+C6T_{i+1,j} - b2R\overline{P}/a2 - b3R\overline{C}/a2$$

$$T_{0,j+1} - T_{1,j+1} = T_{0,j} - T_{i,j}$$

$$T_{N-1,j} - T_{N,j} = T_{N-1,j+1} - T_{N,j+1}(1+h\ aw\ dp/Lr)$$

donde $i = 1,\ldots,N-1$; $j = 1,\ldots,M-1$

$R\overline{B} = (RB_{i,j}+RB_{i,j+1})/2$
$C1 = 1/2h^2 - 1/2h^2 i$
$C2 = 1/2h^2 i - 1/a2\ k - 1/h^2$
$C3 = 1/h^2$
$C4 = -C3$
$C5 = -1/a2\ k + 1/2h^2 i + 1/h^2$
$C6 = -1/2h^2 - 1/2h^2 i$

para $i = 1,\ldots,N-1$ y algun valor de j, las ecuaciones anterio res generan el sistema lineal siguiente:

$$DI\ T_{j+1} = B1\ T_j + RB(X,W,T) + RC(X,W,T)$$

para la variable conversión "X" y "W" se tiene

$$A1X_{i-1,j+1}+A2X_{i,j+1}A3X_{i+1,j+1} = A4X_{i-1,j}+A5X_{i,j}+A6X_{i+1,j}-b1R\overline{F}/a1$$

$$X_{0,j+1}-X_{1,j+1} = X_{0,j}- X_{1,j}$$

donde $i = 1,\ldots,N-1$; $j = 1,\ldots,M-1$

$R\overline{B} = (RB_{i,j}+RB_{i,j+1})/2$
$A1 = 1/2h^2- 1/2h^2 i$
$A2 = 1/2h^2 i - 1/a1\ k - 1/h^2$

$A3 = 1/2h^2$

$A4 = -A3$

$A5 = -1/al\ k + 1/2h^2 i + 1/h^2$

$A6 = -1/2h^2 - 1/2h^2 i$

para $i = 1,\ldots,N-1$ y algun valor de j_n las ecuaciones anteriores generan N+1 incógnitas de la variable "X" y(N-1)+1 ecuaciones linealmente independientes por lo tanto, es necesario poner una restricción adicional para que tenga solución el sistema. En base al comportamiento típico de los reactores, se propone $X_r(R,z) = 0 \;\; ; \;\; 0 \leq z \leq LL$ (REF.2). En diferencias finitas la restricción anterior será:

$$X_{N-1,j+1} - X_{N,j+1} = X_{N-1,j} - X_{N,j}$$

El sistema lineal asociado para la variable conversión es:

$$D2\ X_{j+1} = B2\ X_j + RB1(X,W,T)$$

$$D3\ W_{j+1} = B3\ W_j + RC1(X,W,T)$$

Selección del tamaño de la partición N,M y de los errores de convergencia.

Pba. #1 z = 0.02 , M = 100 , E1 = 0.001 , E2 = 0.01

perfiles radiales de temperatura

N=5	N=10	N=15	N=20
3.153	3.166	3.168	3.168
3.153	3.166	3.168	3.168
3.098	3.156	3.164	3.166
2.959	3.139	3.157	3.162
2.613	3.109	3.146	3.157
1.742	3.063	3.132	3.150
	2.989	3.112	3.140
	2.871	3.084	3.128
	2.683	3.047	3.113
	2.385	2.996	3.094
	1.908	2.927	3.069
		2.833	3.038
		2.704	3.000
		2.529	2.951
		2.290	2.889
		1.963	2.812
			2.714
			2.591
			2.435

P R U E B A # 2

z = 0.02 , N = 10 , E1 = 0.001 , E2 = 0.01

perfiles radiales de temperatura

M = 100	M = 200	M = 500
3.166	3.183	3.183
3.166	3.183	3.183
3.156	3.175	3.175
3.139	3.159	3.158
3.109	3.128	3.127
3.063	3.075	3.073
2.989	2.987	2.984
2.871	2.846	2.842
2.683	2.628	2.623
2.385	2.304	2.301
1.908	1.843	1.840

P R U E B A # 3

z = 0.002 , N = 10 , E1 = 0.001 , E2 = 0.01

perfiles radiales de temperatura

M = 1000	M = 2000	M = 4000
0.305	0.305	0.305
0.305	0.305	0.305
0.305	0.305	0.305
0.305	0.305	0.305
0.305	0.305	0.305
0.305	0.305	0.305
0.305	0.305	0.305
0.305	0.305	0.305
0.301	0.302	0.302
0.288	0.287	0.287
0.231	0.230	0.229

P R U E B A # 4

$z = 0.002$, $N = 10$, $M = 500$

perfiles radiales de temperatura

E1 = 0.001 ; E2 = 0.01	E1 = 0.0001 ; E2 = 0.001
0.305	0.305
0.305	0.305
0.305	0.305
0.305	0.305
0.305	0.305
0.305	0.305
0.305	0.305
0.304	0.304
0.288	0.288
0.231	0.231

Resultados. La Pba#4 muestra que es adecuado el valor del error de convergencia $E1 = 0.001$; $E2 = 0.01$

La Pba#1 muestra que para fines demostrativos es posible utilizar $N = 10$ (tiempo de maquina)

la Pba#2 muestra que se deberá seleccionar $M=200$, ésta variable tiene gran influencia sobre los resultados.

Debido al consumo de tiempo máquina se propone utilizar con fines demostrativos los parámetros:

$N=10$; $M=200$; $E1=0.001$; $E2=0.01$

1.0 Los resultados obtenidos fueron comparados contra los presentados en la referencia R.3 (ver gráficas III, IV, V) y se considera que son semejantes por lo tanto, las conclusiones presentadas en dicho artículo son aplicables al presente problema.

T A B L A I V

z(m)		0.02			0.04	
r/ro	$X x 10^3$	$W x 10^4$	T	X	$W x 10^3$	T
0.0	6.0000	7.0000	3.18	0.0125	1.5000	6.45
0.1	6.0000	7.0000	3.18	0.0125	1.5000	6.45
0.2	6.0000	7.0000	3.17	0.0125	1.5000	6.40
0.3	6.0000	7.0000	3.15	0.0125	1.5000	6.30
0.4	5.9000	7.0000	3.12	0.0125	1.5000	6.16
0.5	5.9000	7.0000	3.07	0.0124	1.5000	5.94
0.6	5.9000	7.0000	2.99	0.0124	1.5000	5.65
0.7	5.9000	7.0000	2.84	0.0123	1.5000	5.26
0.8	5.9000	7.0000	2.63	0.0123	1.4000	4.74
0.9	5.9000	7.0000	2.30	0.0122	1.4000	4.09
1.0	5.9000	7.0000	1.84	0.0122	1.4000	3.27

z(m)		0.076			0.152	
r/ro	X	$W x 10^3$	T	X	$W x 10^3$	T
0.0	0.0258	3.1000	11.84	0.0585	7.0000	20.98
0.1	0.0258	3.1000	11.84	0.0588	7.2000	20.98
0.2	0.0258	3.1000	11.69	0.0586	7.1000	20.64
0.3	0.0257	3.1000	11.41	0.0582	7.1000	20.02
0.4	0.0255	3.0000	11.01	0.0577	7.0000	19.15
0.5	0.0254	3.0000	10.47	0.0572	7.0000	18.03
0.6	0.0252	3.0000	9.79	0.0566	6.9000	16.66
0.7	0.0250	3.0000	8.96	0.0560	6.8000	15.07
0.8	0.0248	2.9000	7.96	0.0556	6.7000	13.24
0.9	0.0247	2.9000	6.79	0.0553	6.7000	11.21
1.0	0.0247	2.9000	5.43	0.0553	6.7000	8.97

z(m)		0.018			0.224	
r/ro	X	$Wx10^3$	T	X	W	
0.0	0.0722	8.9000	23.75	0.0944	0.0118	27.59
0.1	0.0722	8.9000	23.75	0.0944	0.0118	27.59
0.2	0.0719	8.9000	23.35	0.0940	0.0118	27.10
0.3	0.0715	8.8000	22.63	0.0934	0.0117	26.23
0.4	0.0709	8.7000	21.61	0.0926	0.0116	25.00
0.5	0.0702	8.6000	20.30	0.0917	0.0114	23.44
0.6	0.0694	8.5000	18.73	0.0907	0.0113	21.57
0.7	0.0687	8.4000	16.90	0.0898	0.0112	19.41
0.8	0.0681	8.3000	14.82	0.0891	0.0111	16.99
0.9	0.0678	8.3000	12.53	0.0886	0.0110	14.33
1.0	0.0678	8.3000	10.02	0.0886	0.0110	11.47

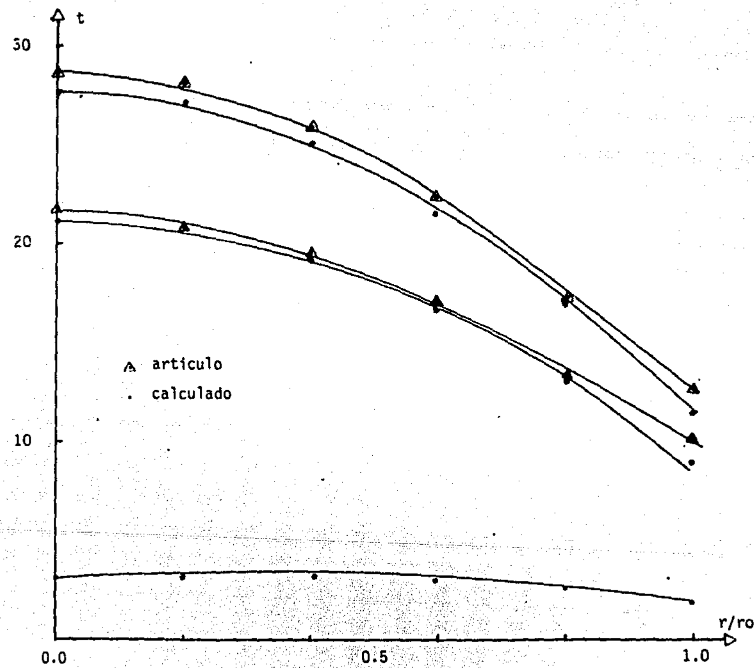
TABLA V

r/ro	$Xx10^3$	cp=0.025 $Wx10^4$	T	$Xx10^3$	cp=0.26 $Wx10^3$	T
0.0	4.7000	6.0000	2.53	4.7000	6.0000	2.43
0.1	4.7000	6.0000	2.53	4.7000	6.0000	2.43
0.2	4.7000	6.0000	2.52	4.7000	6.0000	2.42
0.3	4.7000	6.0000	2.52	4.7000	6.0000	2.41
0.4	4.7000	6.0000	2.50	4.7000	6.0000	2.40
0.5	4.7000	6.0000	2.47	4.7000	6.0000	2.37
0.6	4.7000	6.0000	2.41	4.7000	6.0000	2.32
0.7	4.7000	5.0000	2.32	4.7000	5.0000	2.22
0.8	4.7000	5.0000	2.16	4.7000	5.0000	2.07
0.9	4.7000	5.0000	1.90	4.7000	5.0000	1.83
1.0	4.7000	5.0000	1.52	4.7000	5.0000	1.46

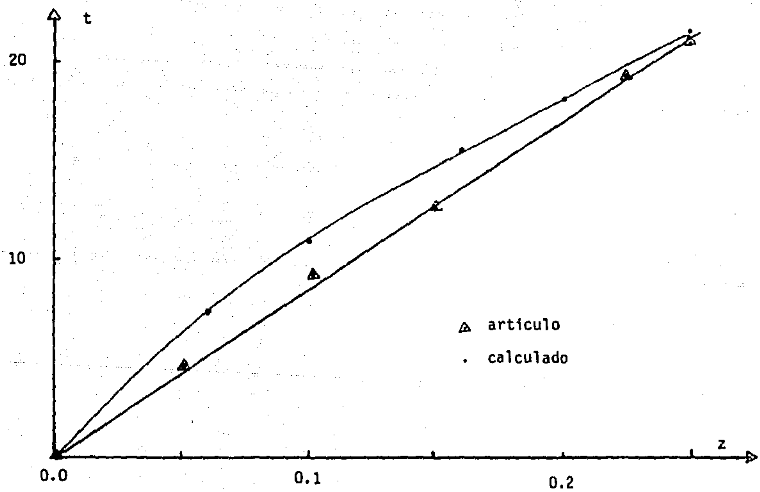
r/ro	$Xx10^3$	Phr=5.25 $Wx10^4$	T	$Xx10^3$	Phr=5.80 $Wx10^4$	T
0.0	2.3000	3.0000	1.24	2.3000	3.0000	1.24
0.1	2.3000	3.0000	1.24	2.3000	3.0000	1.24
0.2	2.3000	3.0000	1.239	2.3000	3.0000	1.24
0.3	2.3000	3.0000	1.239	2.3000	3.0000	1.239
0.4	2.3000	3.0000	1.237	2.3000	3.0000	1.238
0.5	2.3000	3.0000	1.233	2.3000	3.0000	1.235
0.6	2.3000	3.0000	1.224	2.3000	3.0000	1.227
0.7	2.3000	3.0000	1.201	2.3000	3.0000	1.207
0.8	2.3000	3.0000	1.149	2.3000	3.0000	1.158
0.9	2.3000	3.0000	1.038	2.3000	3.0000	1.050
1.0	2.3000	3.0000	0.830	2.3000	3.0000	0.840

T A B L A V I

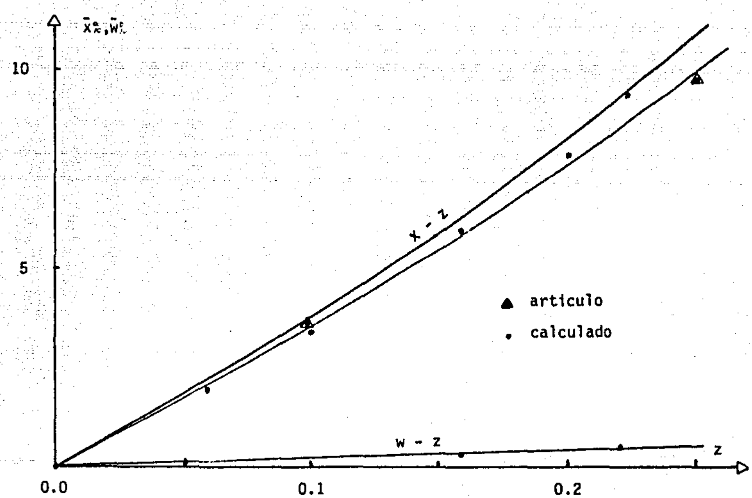
z(m)	$\bar{X}$	$\bar{W}$	$\bar{T}$
0.004	0.0011	0.0001	0.58
0.020	0.0059	0.0007	2.72
0.040	0.0123	0.0015	5.11
0.060	0.0192	0.0023	7.25
0.080	0.0266	0.0032	9.19
0.100	0.0344	0.0042	10.98
0.120	0.0425	0.0052	12.61
0.140	0.0599	0.0063	14.13
0.160	0.0691	0.0074	15.53
0.180	0.0691	0.0086	16.83
0.200	0.0786	0.0099	18.04
0.224	0.0935	0.0114	19.38



grafica III



grafica IV



grafica V

Análisis Numérico
Richard L. Burden
J. Douglas Faires
Tercera Edición

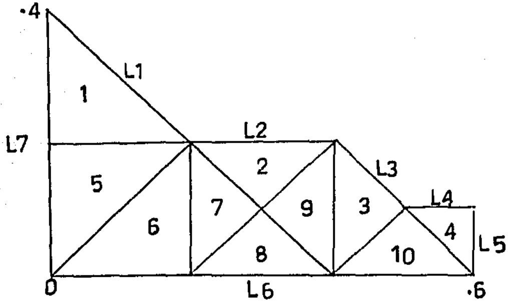
Utilizando el Método del Elemento Finito, obtener la distribución de temperatura $U(x,y)$ en una región D donde se manifiesta una transferencia de calor en régimen permanente. En estas condiciones la temperatura satisface la ecuación de Laplace

$$U_{xx}(x,y) + U_{yy}(x,y) = 0 \qquad \text{en} \quad D$$

las restricciones en la frontera son:

$$U(x,y) = 4 \quad \text{para } (x,y) \text{ en } L_6 \text{ y } (x,y) \text{ en } L_7$$
$$U_n(x,y) = x \quad \text{para } (x,y) \text{ en } L_2 \text{ y } (x,y) \text{ en } L_4$$
$$U_n(x,y) = y \quad \text{para } (x,y) \text{ en } L_5$$
$$U_n(x,y) = (x+y)/2 \quad \text{para } (x,y) \text{ en } L_1 \text{ y } (x,y) \text{ en } L_3$$

donde $U_n(x,y)$ es la derivada direccional en la dirección normal de la frontera de la región D.



DISTRIBUCION TERMICA EN UNA REGION "D"

RESULTADOS.

1.0 La solución presentada es semianalítica y consiste de la unión de planos cuyo dominio es un conjunto de elementos triangulares.

2.0 El máximo error relativo comparado contra la solución real fué, 0.15%

TAPLA VII SOLUCION DE LA EDP ELIPTICA

$U(x,y) = A + Bx + Cy$ para (x,y) en el triángulo "k"

A	B	C	k
4.00000	0.18861	0.00000	1
3.93733	0.20889	0.29306	2
3.95944	0.10139	0.39750	3
3.95467	0.07556	0.57444	4
4.00000	0.18861	0.00000	5
4.00000	0.00000	0.18861	6
3.97911	0.10444	0.18861	7
4.00000	0.00000	0.29306	8
3.95822	0.01044	0.39750	9
4.00000	0.00000	0.49889	10

TABLA VIII

x	y	Tk	U	U'	U-U'
0.1	0.25	1	4.0188	4.0250	0.0062
0.1	0.05	2	4.0094	4.0050	0.0044
0.1	0.15	5	4.0188	4.0150	0.0038
0.3	0.05	8	4.0146	4.0150	0.0004
0.3	0.15	2	4.0439	4.0450	0.0011
0.5	0.05	10	4.0249	4.0250	0.0001
0.05	0.10	5	4.0094	4.0050	0.0044
0.35	0.10	9	4.0345	4.0350	0.0005

donde $U' = xy + 4$ es la solución real

CAPITULO VII

La exactitud de los resultados calculados depende básicamente del tamaño de la partición, de las características del sistema de ecuaciones equivalente a la EDP, del método numérico utilizado para resolver dicho sistema y de la precisión de la computadora.

Aun cuando se calcule con exactitud la solución numérica de la EDP, puede no representar adecuadamente el comportamiento real del sistema físico en estudio (ver oxidación de SO_2) por lo tanto, es necesario ajustar la solución numérica con observaciones experimentales.

La computadora utilizada para desarrollar los métodos numéricos está limitada en capacidad, velocidad y precisión por lo que no fué posible hacer un análisis completo de convergencia y estabilidad del método numérico, sin embargo, la selección del tamaño de partición y de los factores de convergencia fué adecuada para obtener resultados con buena aproximación a los reportados en la literatura.

Recomendaciones para la selección y programación de los métodos numéricos.

1.0 Clasificar la ecuación diferencial según la regla del discriminante en:

Hiperbólica
Parabólica
Elíptica

2.0 Seleccionar el método numérico de acuerdo al tipo de ecuación:

METODO	ECUACION DIFERENCIAL
Diferencias Finitas	Hiperbólica, Parabólica, Elíptica.
Elemento Finito	Elíptica
Curvas Características	Hiperbólica

3.0 Método de Diferencias Finitas

3.1 Aproximar las derivadas parciales por cocientes de diferencias finitas cuyo orden de convergencia sea $O(h^n)$ para $n \geq 2$.

3.2 Verificar que el número de variables dependientes sea igual al número de ecuaciones linealmente independientes disponibles.

3.3 Ordenar cuando sea posible la matriz principal de tal forma que sea estrictamente dominante diagonalmente (apendice A)

3.4 Seleccionar el tamaño de la partición usando los criterios de convergencia, estabilidad y capacidad de la computadora

3.5 Resolver el sistema lineal utilizando alguno de los métodos presentados en el apéndice A.

3.6 Hacer pruebas de respuesta del programa al cambio de las propiedades fisicoquímicas del sistema y evaluar si es normal dicha respuesta.

4.0 Método del Elemento Finito

4.1 Obtener la integral asociada a la ecuación diferencial y restricciones en la frontera.

4.2 Seleccionar el número de triángulos en base a la capacidad de la computadora; el tamaño de la matriz principal es (E+1)(E+1) donde E es el número de nodos desconocidos.

4.3 Acomodar los triángulos frontera de tal forma que sus lados (dos máx.) sean colineales con la frontera.

4.4 Controlar el tipo de triángulos, en el programa expuesto sólo se permiten cuatro posibilidades.

4.5 Calcular las integrales dobles de funciones lineales, utilizando el método del trapecio; si la función a integrar es no lineal se puede usar el método de Simphson u otro más eficiente.

4.6 Acomodar la ecuación principal cuando sea posible de tal forma que, sea estrictamente dominante diagonalmente.

4.7 Resolver el sistema lineal utilizando el Método SOR.

4.8 Hacer pruebas de respuesta (ver Diferencias Finitas).

APENDICE A

Aspectos importantes de las técnicas iterativas para la resolución de sistemas lineales.

Definición. Una matriz A de n x m es un arreglo rectangular de elementos a_{ij} con n renglones y m columnas.

Definición. Una matriz triangular superior U de n x n tiene para cada j, los elementos

$$u_{ij} = 0 \quad \text{para cada} \quad i=j+1, j+2, \ldots, n$$

Definición. Una matriz triángular inferior L de n x n tiene para cada j, los elementos

$$l_{ij} = 0 \quad \text{para cada } i=1,2,\ldots,j-1$$

Definición. Una matriz diagonal D de n x n tiene para cada i, los elementos

$$d_{ij} = 0 \quad \text{para} \quad i \neq j$$

Definición. Una matriz A de n x n es estrictamente dominante diagonalmente siempre que:

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} |a_{ij}|$$

Definición. La transpuesta de una matriz A de $n \times m$ denotada A^t, es una matriz de $n \times m$ cuyos elementos son:

$$a^t_{ij} = a_{ji}$$

Definición. Una matriz A de $n \times n$ se llama positiva definida si

$$x^t A x > 0 \quad \text{para todo vector } x \neq 0$$

Definición. Una norma matricial en el conjunto de todas las matrices reales de $n \times n$ es una función de valores reales $\|\cdot\|$, definida en este conjunto que satisface, para todas las matrices A y B de $n \times n$ y todo número real k:

1.- $\|A\| \geq 0$,
2.- $\|A\| = 0$ si y sólo si $A = 0$
3.- $\|kA\| = |k| \, \|A\|$,
4.- $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$
5.- $\|AB\| \leq \|A\| \, \|B\|$

TEOREMA. Si $\| \cdot \|$ es cualquier norma vectorial en R^n, entonces:

$$\|A\| = \max_{\|x\| = 1} \|Ax\|$$

define una norma matricial en el conjunto de las matrices reales de $n \times n$, la cual se llama norma natural.

En general las técnicas iterativas transforman el sistema lineal $Ax = b$ en una sucesión definida por

$$x^{k+1} = T x^k + c \qquad . . . (1)$$

Teorema. Para cualquier x^0 en R^n, la sucesión definida por (1) converge a la solución única

$$x = T x + c \quad \text{si y solo si} \quad \|T\| < 1$$

Método	sistema lineal equivalente
Gauss - Seidel	$x^{k+1} = (D-L)^{-1}U\, x^k + (D-L)^{-1}b$
Jacobi	$x^{k+1} = D^{-1}(L+U)\, x^k + D^{-1}\, b$
S O R	$x^{k+1} = (D-wL)^{-1}((1-w)D + wU)\, x^k + w(D-wL)^{-1}b$ donde w es un real positivo

Teorema. Si la matriz A es estrictamente dominante diagonalmente entonces para cualquier valor de x^o, el Método de Jacobi y Gauss - Siedel convergen. La razon de convergencia depende de $\|T\|$ y por lo tanto el método que converge más rapidamente es aquel en el cual $\|T\|$ sea mínimo.

Teorema. Si $a_{ii} \neq 0$ para cada i=1,n entonces, el método SOR converge a la solución de $A x = b$ si y solo si $0 < w < 2$

Teorema. Si A es positiva definida y $0 < w < 2$ entonces el método SOR converge para cualquier elección de x^o.

TABLA DE TRANSFORMADAS

$\bar{f}(p)$		$f(t)$
$1/(p^2+1)(1-\exp(-p))$		sen t cuando $(2n=2)\pi < t < (2n-1)$ 0 cuando $(2n-1)\pi < t < 2n\pi$
$\exp(-k/p)/p$		$J_o(2\ SQR(kt))$
$\exp(-k/p)/SQR(p)$		$\cos\ (2\ SQR(kt))/SQR(\pi t)$
$\exp(k/p)/SQR(p)$		$\cosh\ (2\ SQR(kt))/SQR(\pi t)$
$\exp(-k/p)/p^{3/2}$		sen $(2\ SQR(kt))/SQR(\pi k)$
$\exp(k/p)/p^{3/2}$		senh $(2\ SQR(kt))/SQR(\pi k)$
$\exp(-k/p)/p^j$	$j > 0$	$(t/k)^{(j-1)/2} J_{j-1}(2\ SQR(kt))$
$\exp(-k\ SQR(p))/p$	$k \geqq 0$	$erfc(k/2SQR(t))$
$\exp(-kSQR(p))/SQR(p)$	$k \geqq 0$	$\exp(-k^2/4t)/SQR(\pi t)$
$\exp(k/p)/p^j$	$j > 0$	$(t/k)^{(j-1)/2} I_{j-1}(2SQR(kt))$

una tabla mas extensa puede ser consultada en la REF.7

R.1 NUMERICAL ANALYSIS
RICHARD L. BURDEN
J. DOUGLAS FAIRES
THIRD EDITION
PRINDLE, WEBER SCHMIDT
BOSTON

R.2 CHEMICAL ENGINEERING KINETICS
J.M. SMITH
SECOND EDITION
Mc GRAW-HILL

R.3 G.F. FROMENT, IND.ENG.CHEM., 59, 18(1967)
FIXED BED CATALYTIC REACTORS

R.4 PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS
THEORY AND TECHNIQUE
GEORGE F. CARRIER
CARL E. PEARSON
ACADEMIC PRESS NY. SAN FRANCISCO LONDON 1976

R.5 MATHEMATICAL METHODS IN CHEMICAL ENGINEERING
FIRST ORDER PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATION WITH
APPLICATIONS
RUTHERFORD ARIS
NEAL R. AMUNDSON
VOL. 2
PRENTICE-HALL INC.

R.6 BASIC HEAT TRANSFER
M. NECATI OZISIK
Mc GRAW-HILL

R.7 APPLIED MATHEMATICS IN CHEMICAL ENGINEERING
HAROLD S. MICKLEY
THOMAS K. SHERWOOD
CHARLES E. REED
SECOND EDITION
Mc GRAW-HILL

R.8 PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS FOR
SCIENTISTS AND ENGINEERS
STANLEY J. FARLOW
JOHN WILEY AND SONS

R.9 ADVANCED ENGINEERING MATHEMATICS
C.R. WYLIE, Jr.
SECOND EDITION
Mc GRAW-HILL