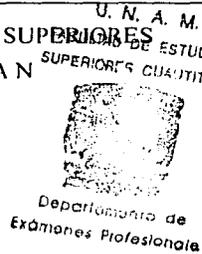




UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES DE ESTUDIOS CUAUTITLAN



SOFTWARE DIDACTICO COMO APOYO A LA CARRERA DE INGENIERIA QUIMICA

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE: INGENIERO QUIMICO PRESENTA: ERIC JACINTO MARIN RODRIGUEZ

ASESOR: I.Q. GILBERTO ATILANO AMAYA VENTURA.

CUAUTITLAN IZCALLI, EDO. DE MEXICO. 2002.

TESIS CON FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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

# PAGINACION DISCONTINUA



FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN  
 UNIDAD DE LA ADMINISTRACION ESCOLAR  
 DEPARTAMENTO DE EXAMENES PROFESIONALES

ASUNTO: VOTOS APROBATORIOS



DR. JUAN ANTONIO MONTARAZ CRESPO  
 DIRECTOR DE LA FES CUAUTITLÁN  
 P R E S E N T E

ATN: Q. Ma. del Carmen García Mijares  
 Jefe del Departamento de Exámenes  
 Profesionales de la FES Cuautitlán

Con base en el art. 28 del Reglamento General de Exámenes, nos permitimos comunicar a usted que revisamos la TESIS:

Software Didáctico como Apoyo a la  
Carrera de Ingeniería Química

que presenta el pasante: Eric Jacinto Marín Rodríguez  
 con número de cuenta: 9041994-2 para obtener el título de:  
Ingeniero Químico

Considerando que dicho trabajo reúne los requisitos necesarios para ser discutido en el EXAMEN PROFESIONAL correspondiente, otorgamos nuestro VOTO APROBATORIO.

A T E N T A M E N T E

"POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU"

Cuautitlán Izcalli, Méx. a 5 de Diciembre de 2001

PRESIDENTE	<u>I.Q. Margarita Castillo Agreda</u>	
VOCAL	<u>Q. Celestino Silva Escalona</u>	
SECRETARIO	<u>I.O. Gilberto Atilano Amaya Ventura</u>	
PRIMER-SUPLENTE	<u>M. en C. Ricardo P. Hernández García</u>	
SEGUNDO SUPLENTE	<u>I.A. Ana María Soto Bautista</u>	

A mis padres.....

Por todo su amor, comprensión y fortaleza, siempre serán mi mayor orgullo.

A mis hermanos.....

A todos, por ese gran ejemplo de lucha y dedicación además de todo el cariño que me han regalado en todo momento, saberlos cerca de mi es una bendición.

A mis amigos.....

Por compartir siempre los momentos importantes, duros, amargos y felices además de todos aquellos por lo que nuestra amistad es mas bien un estilo de vida.

A mi asesor Gilberto.....

Por todo el apoyo recibido en la elaboración de esta tesis.

A mis profesores.....

Y a todos aquellos que han contribuido a mi formación profesional.

Y especialmente a mi Chula por cuanto la Amo.

# SOFTWARE DIDÁCTICO COMO APOYO A LA CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA

<b>Introducción</b>	I
<b>Objetivos</b>	II
<b>Capítulo I. Herramientas Matemáticas</b>	
- Ajuste de Curvas	1
- Regresión Lineal	1
- Ajuste de Curvas con un Polinomio de Orden Superior	3
- Programas	5
• Regresión Lineal	5
○ Diagrama de Bloques	7
○ Listado del Programa	8
• Regresión Cuadrática	11
○ Diagrama de Bloques	14
○ Listado del Programa	16
• Regresión Cúbica	19
○ Diagrama de Bloques	22
○ Listado del Programa	24
- Método de Newton Raphson	
• Newton-Raphson versión 1	28
○ Diagrama de Bloques	29
○ Listado del Programa	30
• Newton-Raphson versión 2	30
○ Diagrama de Bloques	32
○ Listado del programa	33
- Sistema de Ecuaciones No Lineales	34
○ Listado del Programa	35

## Capítulo II Flujo de Fluidos

### Introducción

- Método de Diseño de Ductos para Flujo de Aire	39
- Método de Igualación de Fricción	39

- Evaluación de la Resistencia de Flujo	40
• Pérdidas por fricción	40
• Ecuación de Darcy, Colebrook y Altshul	41
- Factores de Rugosidad	42
- Conductos no Circulares	43
- Pérdidas Dinámicas	43
- Coeficiente Local de Pérdidas por Fricción	44
- Algoritmo Computacional para el Programa	46
- Ejemplo de ingreso de datos	48
- Diagrama de bloques	51
- Listado del Programa	

### Capítulo III Transferencia de Calor

#### Introducción

- Mecanismos de Transferencia de Calor	59
• Conducción	
• Convección	
• Radiación	
- Capacidad Calorífica	60
- Intercambiadores de Tubos y Coraza: Flujo 1-2 Contracorriente-Paralelo	60
• Elemento Tubular	61
• Tubos para Intercambiadores de Calor	61
• Espaciado de Tubos	61
• Corazas	61
• Deflectores	62
- Algoritmo computacional para el Programa	66
- Ejemplo de ingreso de datos	70
- Diagrama de Bloques	72
- Listado del Programa	

### Capítulo IV Transferencia de Masa

#### Introducción

- Destilación Continua con Rectificación	79
- Algoritmo computacional para el programa	88

- Ejemplo de ingreso de datos	90
- Diagrama de Bloques	91
- Listado del Programa	94
- Sistema de Multicomponentes	99
- Sobre las Limitaciones de las Especificaciones	99
- Componentes Claves	100
- Reflujo Total	101
- Composiciones de los Productos	102
- Localización del Plato de Alimentación	102
- Algoritmo Computacional del Programa	103
- Ejemplo de ingreso de datos	106
- Diagrama de Bloques	109
- Listado del Programa	111

## **Capítulo V Diseño de Reactores**

### **Introducción**

- Algoritmo computacional del Programa	117
- Diagrama de Bloques	122
- Listado del Programa	125

### **Conclusiones**

136

### **Bibliografía**

137

## **Introducción:**

El rápido avance de la tecnología computacional ha hecho de ella una herramienta indispensable en la formación de cualquier profesionalista, especialmente en el área de la ingeniería.

La utilización de los recursos del cómputo le dan al Ingeniero Químico la posibilidad de resolver una gran cantidad de modelos matemáticos de procesos industriales que se realizan en una industria química, evitando la necesidad de llevar a cabo una gran cantidad de cálculos manuales.

El diseño o adaptación de software como herramienta de apoyo didáctico para algunas de las asignaturas tales como la ingeniería 3, 4, 6 y 8 que cursa el estudiante de Ingeniería Química durante su formación profesional es la meta principal de este proyecto de tesis.

Se pretende que dicho software permita que el estudiante se preocupe más por los aspectos técnicos de los problemas a resolver y no tanto por realizar una gran cantidad de operaciones aritméticas para la resolución de los modelos matemáticos.

La tesis inicia con la presentación de un conjunto de herramientas matemáticas de aplicación general, es decir algoritmos de cálculo que se podrán aplicar potencialmente en la caracterización de procesos específicos dentro de la industria química.

El segundo capítulo corresponde a la resolución de un problema de mecánica de fluidos concretamente el de flujo de aire en canales rectangulares utilizando la ecuación de Bernoulli y de Colebrook.

En el tercer capítulo se desarrolla un algoritmo computacional para el dimensionamiento de un intercambiador de calor de tubo y coraza con fluido sin cambio de fase.

En el cuarto capítulo se elabora un programa para el diseño termodinámico de un sistema de destilación fraccionada de mezclas binarias por el método de McCabe-Thiele. Además de un segundo algoritmo computacional para la caracterización de la destilación de una mezcla multicomponente.

En el último capítulo se desarrolla un algoritmo para la obtención de la ruta térmica óptima y el tiempo de residencia en reactores no isotérmicos.

Cada uno de los programas será presentado en la forma mas atractiva y versátil posible, empleando desplegados gráficos en la mayoría de ellos.

Cabe señalar que el software que se presenta a continuación es didáctico y no aplica a problemas de diseño.

### **Objetivos de la tesis:**

Diseñar y adaptar una serie de programas de cómputo escritos en un lenguaje de alto nivel que sirva como apoyo didáctico a las asignaturas de ingeniería química 3, 4, 6 y 8 de la carrera de Ingeniería Química. Dichos algoritmos computacionales estarán escritos de manera tal que el alumno pueda interactuar con el programa y hacer sus propias modificaciones para resolver problemas que le permitan facilitar su aprendizaje.

Proporcionar al alumno los conceptos teóricos fundamentales en forma resumida, además de las ecuaciones características con las que se pretenden realizar cada uno de los programas.

Proveer al alumno de los listados que contengan los programas escritos así como también los diagramas de bloques que representen de una manera lógica y cronológica la forma en que cada uno de ellos realizan los cálculos para obtener los resultados que se esperan.

# **CAPÍTULO I**

## **Herramientas Matemáticas**

### **Ajuste de curvas**

#### **INTRODUCCIÓN**

Los datos que se obtienen mediante mediciones fluctúan debido principalmente a errores aleatorios del sistema de medición aplicado y a errores de precisión u observación. Cualquiera que sea la razón, es frecuente que surja la necesidad de ajustar una función a los datos de una medición. Por ejemplo, un investigador podría intentar desarrollar una fórmula empírica para el sistema en observación, o bien un economista desearía ajustar una curva a una tendencia económica actual para tratar de predecir el futuro.

Si el número de datos es igual al orden de un polinomio más uno, podemos ajustar con exactitud dicho polinomio a los datos. Sin embargo, al hacer el ajuste de una función los datos de una medición, deben utilizarse un número de datos mucho mayor que el orden del polinomio. De hecho, mientras más datos se utilicen, mejor será la precisión de la curva ajustada.

Por tanto, ¿cómo podemos ajustar una función a los puntos dados? Lo mejor que podemos hacer es considerar una función con pocos parámetros libres y determinarlos de forma que la desviación de la función con respecto a los datos sea mínima.

Dicha minimización de la desviación se puede obtener mediante el criterio de mínimos cuadrados.

#### **REGRESIÓN LINEAL**

Supongamos que deseamos encontrar una función lineal que se ajuste a los datos de la tabla 1.1 con una desviación mínima. La función lineal determinada de esta manera se denomina recta de regresión.

Para un conjunto de datos observados como el de la siguiente tabla 1.1 :

i	x	y
1	0.1	0.61
2	0.4	0.92
3	0.5	0.99
4	0.7	1.52
5	0.7	1.47
6	.09	2.03

La función lineal se expresa como :

$$g(x) = a + bx \quad (1)$$

donde a y b son constantes por determinar. La desviación de la recta con respecto a cada dato se define como

$$r_i = y_i - g(x_i) = y_i - (a + bx_i), \quad i = 1, 2, \dots, L \quad (2)$$

donde L es el número total de datos, seis en este ejemplo, mientras que a y b son constantes por determinar.

El cuadrado total de las desviaciones está dado por

$$R^2 = \sum_{i=1}^L (r_i)^2 = \sum_{i=1}^L (y_i - a - bx_i)^2 \quad (3)$$

Debido a que a y b son parámetros arbitrarios, se determinan de forma que minimicen a  $R^2$ . El mínimo de  $R^2$  se obtiene si las derivadas parciales de  $R^2$  con respecto a a y b se anulan:

$$\frac{\partial R^2}{\partial a} = -2 \sum_{i=1}^L (y_i - a - bx_i) = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial R^2}{\partial b} = -2 \sum_{i=1}^L x_i (y_i - a - bx_i) = 0 \quad (5)$$

que, después de dividir entre  $-2$ , se puede reescribir como

$$\begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} \\ A_{2,1} & A_{2,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Z_1 \\ Z_2 \end{bmatrix} \quad (6)$$

Donde

$$A_{1,1} = L$$

$$A_{1,2} = \sum x_i$$

$$Z_1 = \sum y_i$$

$$A_{2,1} = \sum x_i$$

$$A_{2,2} = \sum (x_i)^2$$

$$Z_2 = \sum x_i y_i$$

En las ecuaciones anteriores, la suma es sobre  $i$ , desde 1 hasta  $L$ . Observe que  $A_{2,1}$  es igual a  $A_{1,2}$ . La solución del sistema de ecuaciones simultáneas es:

$$a = \frac{A_{2,2}Z_1 - A_{1,2}Z_2}{d} \quad (7)$$

$$b = \frac{A_{1,1}Z_2 - A_{2,1}Z_1}{d} \quad (8)$$

Donde, el valor de  $d = A_{1,1}A_{2,2} - A_{1,2}A_{2,1}$

### AJUSTE DE CURVAS CON UN POLINOMIO DE ORDEN SUPERIOR

La regresión lineal explicada en la sección anterior funciona bien si los datos de medición son lineales intrínsecamente, o si el intervalo de las abscisas es pequeño. Sin embargo, para otros casos, se pueden obtener mejores resultados ajustando un polinomio de orden superior al conjunto de datos.

El principio de los mínimos cuadrados se puede extender para ajustar un polinomio de cualquier orden a los datos de una medición.

Primero se escribe un polinomio de orden  $N$  como

$$g(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n \quad (9)$$

La desviación de la curva de los puntos dados es

$$r_i = y_i - g(x), \quad i = 1, 2, \dots, L \quad (10)$$

donde L es el número de puntos dados. El total de los cuadrados de la desviación es el siguiente:

$$R = \sum_{i=1}^L (r_i)^2 \quad (11)$$

Hacemos iguales a cero las derivadas parciales de R con respecto a los coeficientes del polinomio para minimizar a R:

$$\frac{\partial R}{\partial a_n} = 0 \quad (12)$$

$n = 0, 1, 2, \dots, N$

o, en forma equivalente,

$$\sum_{n=0}^N \left[ \sum_{i=1}^L x_i^{n+k} \right] a_n = \sum_{i=1}^L x_i^k y_i, \quad \text{para } k = 0, 1, 2, \dots, N \quad (13)$$

que se puede escribir en forma más explícita como:

$$\begin{bmatrix} L & \sum x_i & \sum x_i^2 & \dots & \sum x_i^N \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \dots & \sum x_i^{N+1} \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 & \dots & \sum x_i^{N+2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum x_i^N & \sum x_i^{N+1} & \sum x_i^{N+2} & \dots & \sum x_i^{2N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \\ \sum x_i^2 y_i \\ \dots \\ \sum x_i^N y_i \end{bmatrix} \quad (14)$$

Los coeficientes  $a_n$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots, N$  se determinan resolviendo la ecuación (14) en forma simultánea (mediante eliminación Gaussiana o descomposición L-U).

Las ecuaciones lineales que surgen en el ajuste de curvas son con frecuencia mal condicionadas cuando los coeficientes de las ecuaciones lineales se convierten en una mezcla de números muy grandes con cifras muy pequeñas. Esta diseminación se intensifica cuando aumentan tanto el rango de valores de x en los puntos dados y el orden del polinomio. Por lo tanto, es recomendable utilizar la doble precisión para resolver las ecuaciones lineales.

## PROGRAMAS.

Una vez que se han desarrollado los aspectos teóricos de los procedimientos de ajuste polinomial por el criterio de mínimos cuadrados; presentamos una serie de algoritmos con lo que se ejemplifica ese tipo de cálculos.

### Regresión Lineal

Uno de los ajustes funcionales a los que se recurre con mayor frecuencia es la regresión lineal por minimización del cuadrado del error. Casi todas las calculadoras personales realiza este tipo de ajuste, el objetivo de presentar aquí un programa de cómputo en lenguaje Q Basic es que se visualice la semejanza con los ajustes parabólicos y cúbicos, como podrá observarse en los diagramas de bloques.

El programa REGLIN1 se diseñó de tal forma que sea interactivo con el estudiante siendo este también de fácil manejo, ya que el ingreso de los datos se hace de forma simple en los campos adecuados, en este programa se obtiene la regresión lineal de una serie de puntos dados como datos. Ejecutándolo, se obtiene como resultado los valores de las variables  $M$  y  $B$  ajustados por mínimos cuadrados y además expresadas en una clásica ecuación de línea recta de la forma  $Y = MX + B$ , obteniendo con ella la función de la línea recta, siendo ésta una excelente herramienta para la elaboración de un programa aplicado a la ingeniería o en el caso en el cual sea necesario un ajuste de puntos a una función lineal definida, para su fácil manejo; además el programa está diseñado para mostrar de forma gráfica los resultados pudiendo también colocar letreros a los ejes  $x$ ,  $y$  y nombre o título a la gráfica obtenida y poder realizar, si así lo desea el usuario, una regresión logarítmica a los datos tomando en cuenta que para llevar acabo ésta se necesita de números positivos para su realización.

La forma en que se ingresa a este y a los demás programas es de la siguiente manera:

- 1.- Introducir el disco que contiene el software en el drive de 3 1/2
- 2.- Seleccionar el icono de QBasic
- 3.- Oprimir Esc como indica el cuadro de diálogo para acceder al interprete QBasic
- 4.- Seleccionar de la barra de herramientas "Archivo" y abrir
- 5.- Seleccionar del cuadro de diálogo la opción "A" que refiere al disco de 3 1/2
- 6.- Una vez teniendo los programas existentes en el disco, seleccionar REGLIN1 y abrirlo.

Ejemplo de ingreso de datos.

### INTRODUCIR TODOS LOS VALORES DE X Y Y ACOMODÁNDOLOS EN VECTORES ARÍTMÉTICOS

El numero de puntos se especifican en la instrucción 10 del listado del programa.

En el campo del programa en donde se encuentra la instrucción 50 se escriben los valores correspondientes al eje X

```
50 READ X(I): DATA 1,2,3,4,5,6,7,8,9,10
```

Para el caso de los datos del eje Y se hacen en el campo 62

```
62 READ Y(I): DATA 1,3,7,10,13,15,19,22,25,27
```

Siendo los datos proporcionados X: 1,2,3,4,5,6,7,8,9,10

Y: 1,3,7,10,13,15,19,22,25,27

Obtenidos, por ejemplo, de una experimentación de laboratorio

La forma de correr el programa será con la tecla F5 o siguiendo la ruta

1.- Ejecutar

2.- Iniciar

Cuando se ejecuta REGLIN1 aparece el siguiente mensaje:

ESTE PROGRAMA GRAFICA PARES DE VALORES X,Y EN LOS CUATRO CUADRANTES Y REALIZA UNA REGRESIÓN LINEAL, OBTENIENDO LOS PARÁMETROS DE LA MEJOR LÍNEA RECTA AJUSTABLE POR MÍNIMOS CUADRADOS.

XMIN=1 XMAX=10 YMIN=1 YMAX=27

El último renglón indica que se han comparado todos los valores de X e Y y determinado los extremos.

En seguida se le pregunta al usuario por el intervalo de graficación, además, se le pide que teclee consecuentemente las X y las Y máximas y mínimas a graficar.

INTERVALOS DE X e Y QUE DESEA GRAFICAR

XMINGRAF=1

XMAXGRAF=10

YMINGRAF=1

YMAXGRAF=27

Introducir escala de X=?1

Introducir escala de Y=?1

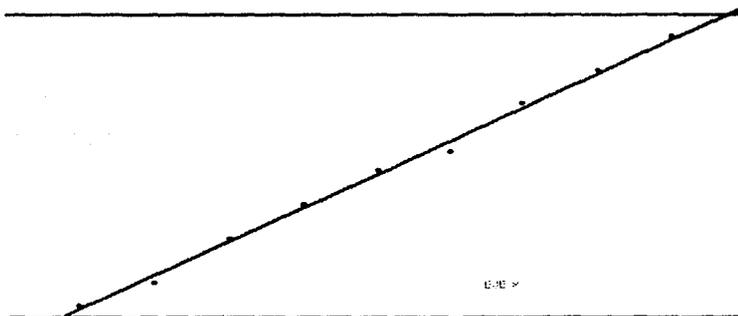
La escala se selecciona según la naturaleza de los puntos ingresados o a la necesidad del usuario.

Los resultados se muestran gráficamente y con los valores de las variables correspondientes en el extremo superior derecho.

Y

M = 22.981818  
B = 2.2  
R = 0.9997413

Y  
X

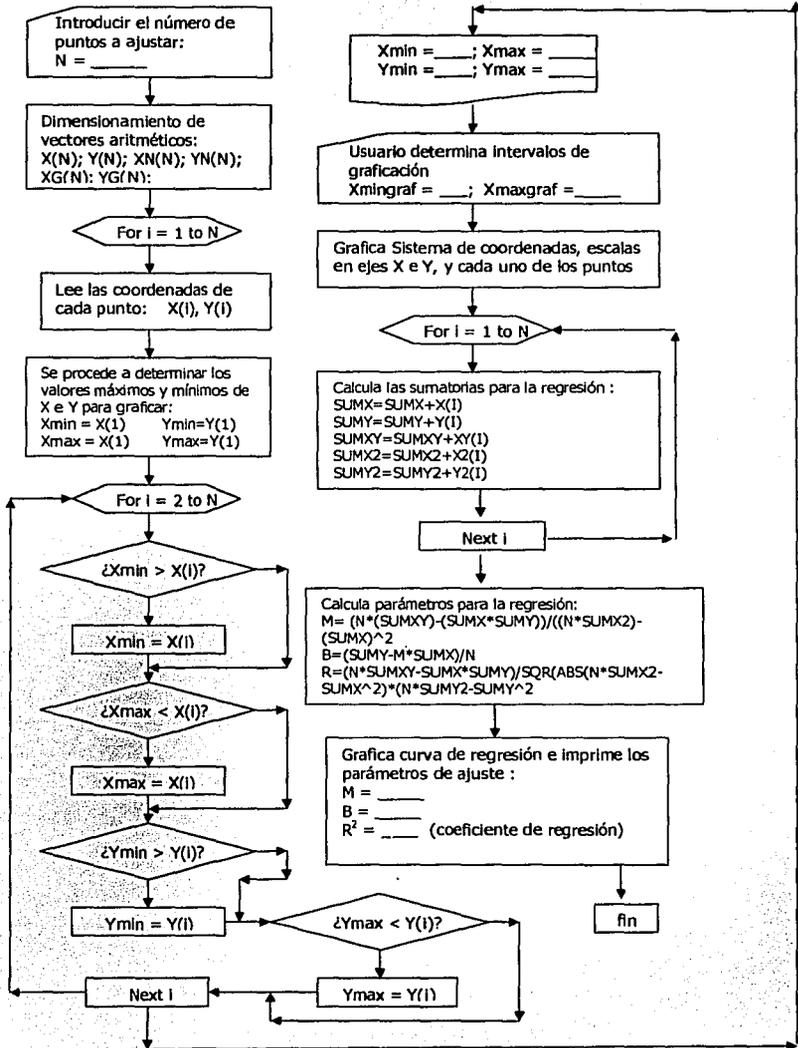


Por lo que la expresión característica de esta recta es

$$y = 22.981818x + 2.2$$

Siendo esta ecuación de fácil manejo para la elaboración de un programa de computo aplicado a la Ingeniería.

## Diagrama de Bloques



## Listado del Programa

5 KEY OFF

6 PRINT "ESTE PROGRAMA GRAFICA PARES DE VALORES X,Y EN LOS CUATRO CUADRANTES, Y REALIZA UNA REGRESIÓN LINEAL, OBTENIENDO LOS PARÁMETROS DE LA MEJOR RECTA AJUSTABLE POR MÍNIMOS CUADRADOS"

7 PRINT "UNA VEZ GRAFICADOS LOS PUNTOS, EL USUARIO PUEDE DECIDIR SI CONVIENE REALIZAR LA REGRESIÓN LOGARÍTMICA, ROMPIENDO EL BREAK CON LA TECLA F5 (cont), CLARO QUE PARA ESTO ES NECESARIO";

8 PRINT "QUE TODOS LOS VALORES TANTO DE X COMO DE Y SEAN POSITIVOS"

9 PRINT : PRINT : PRINT : PRINT "TECLEE LOS DATOS"

10 N = 10

20 DIM X(N), Y(N), XN(N), YN(N)

30 REM INTRODUCIR TODOS LOS VALORES DE X E Y Y ACOMODARLOS EN VECTORES ARITMÉTICOS

40 FOR I = 1 TO N

50 READ X(I): DATA 1,2,3,4,5,6,7,8,9,10

60 NEXT I

61 FOR I = 1 TO N

62 READ Y(I): DATA 1,3,7,10,13,15,19,22,25,27

63 NEXT I

70 REM OBTENCION DE VALORES EXTREMOS

80 XMIN = X(1): XMAX = X(1): YMIN = Y(1): YMAX = Y(1)

90 FOR I = 2 TO N

100 IF XMIN > X(I) THEN XMIN = X(I)

110 IF XMAX < X(I) THEN XMAX = X(I)

120 IF YMIN > Y(I) THEN YMIN = Y(I)

130 IF YMAX < Y(I) THEN YMAX = Y(I)

140 NEXT I: PRINT "XMIN="; XMIN; "XMAX="; XMAX; "YMIN="; YMIN; "YMAX="; YMAX

150 REM UNA VEZ OBTENIDOS LOS VALORES EXTREMOS USUARIO DECIDE INTERVALO DE GRAFICACION

160 PRINT "INTERVALO DE X E Y QUE DESEAS GRAFICAR"

170 PRINT "XMINGRAF="; : INPUT XMINGRAF

180 PRINT "XMAXGRAF="; : INPUT XMAXGRAF

190 PRINT "YMINGRAF="; : INPUT YMINGRAF

200 PRINT "YMAXGRAF="; : INPUT YMAXGRAF

210 PRINT "INTRODUCIR ESCALA DE X="; : INPUT SCALEX

220 PRINT "INTRODUCIR ESCALA DE Y="; : INPUT SCALEY

221 INPUT "LETRERO PARA EL EJE X="; X\$

222 INPUT "LETRERO EJE Y="; Y\$

223 INPUT "TITULO DE LA GRAFICA"; TITULO\$

230 SCREEN 2, , 0, 0

240 CLS

```
250 LINE (60, 40)-(60, 199)
260 LINE (60, 40)-(639, 40)
270 LINE (60, 199)-(639, 199)
280 LINE (639, 40)-(639, 199)
290 IF XMINGRAF > 0 THEN XMINGRAF = 0
300 IF XMAXGRAF < 0 THEN XMAXGRAF = 0
310 IF YMINGRAF > 0 THEN YMINGRAF = 0
320 IF YMAXGRAF < 0 THEN YMAXGRAF = 0
330 PASX = XMAXGRAF + ABS(XMINGRAF)
340 PASY = YMAXGRAF + ABS(YMINGRAF)
350 EJEY = 60 + (639 - 60) / PASX * ABS(XMINGRAF)
360 EJEX = 40 + (199 - 40) / PASY * YMAXGRAF
370 LINE (EJEY, 40)-(EJEY, 199)
380 LINE (60, EJEX)-(639, EJEX)
390 REM NORMALIZACION DE ESCALA
400 NY = INT(PASY / SCALEY)
401 NX = INT(PASX / SCALEX)
402 IF L = 1 GOTO 403 ELSE 420
403 DIM DIVLOGX(NX), DIVLOGY(NY)
404 DIVLOGX(1) = 60: DIVLOGY(1) = 199
405 FOR I = 2 TO NX
406 DIVLOGX(I) = DIVLOGX(I - 1) + SCALEX * (639 - 60) / PASX
407 LINE (DIVLOGX(I), EJEX - 2)-(DIVLOGX(I), EJEX + 2)
408 LINE (DIVLOGX(I), 40)-(DIVLOGX(I), 42)
409 LINE (DIVLOGX(I), 197)-(DIVLOGX(I), 199)
410 NEXT I
411 FOR J = 2 TO NY
412 DIVLOGY(J) = DIVLOGY(J - 1) - SCALEY * (199 - 40) / PASY
413 LINE (EJEY - 3, DIVLOGY(J))-(EJEY + 3, DIVLOGY(J))
414 LINE (60, DIVLOGY(J))-(63, DIVLOGY(J))
415 LINE (636, DIVLOGY(J))-(639, DIVLOGY(J))
416 NEXT J
417 GOTO 520
420 DIM DIVX(NX), DIVY(NY)
423 DIVX(1) = 60: DIVY(1) = 199
440 FOR I = 2 TO NX
440 DIVX(I) = DIVX(I - 1) + SCALEX * (639 - 60) / PASX
460 LINE (DIVX(I), EJEX - 2)-(DIVX(I), EJEX + 2)
```

```

461 LINE (DIVX(I), 40)-(DIVX(I), 42)
462 LINE (DIVX(I), 197)-(DIVX(I), 199)
470 NEXT I
480 FOR J = 2 TO NY
490 DIVY(J) = DIVY(J - 1) - SCALEY * (199 - 40) / PASY
500 LINE (EJEY - 3, DIVY(J))-(EJEY + 3, DIVY(J))
501 LINE (60, DIVY(J))-(63, DIVY(J))
502 LINE (636, DIVY(J))-(639, DIVY(J))
510 NEXT J
520 FOR I = 1 TO N
530 XN(I) = X(I) * (639 - 60) / PASX + EJEY
540 YN(I) = -Y(I) * (199 - 40) / PASY + EJEX
550 PSET (XN(I) - 1, YN(I) + 1)
551 PSET (XN(I) - 1, YN(I))
552 PSET (XN(I) - 1, YN(I) - 1)
553 PSET (XN(I), YN(I) + 1)
554 PSET (XN(I), YN(I))
555 PSET (XN(I), YN(I) - 1)
556 PSET (XN(I) + 1, YN(I) + 1)
557 PSET (XN(I) + 1, YN(I))
558 PSET (XN(I) + 1, YN(I) - 1)
560 NEXT I
570 REM ***** REGRESIÓN LINEAL *****
580 FOR I = 1 TO N
590 XY(I) = X(I) * Y(I)
600 X2(I) = X(I) ^ 2
610 Y2(I) = Y(I) ^ 2
620 NEXT I
630 I = 0: SUMX = 0: SUMY = 0: SUMXY = 0: SUMX2 = 0: SUMY2 = 0
640 I = I + 1
650 SUMX = SUMX + X(I): SUMY = SUMY + Y(I): SUMXY = SUMXY + XY(I): SUMX2 = SUMX2 + X2(I): SUMY2 = SUMY2
+ Y2(I)
660 IF I < N GOTO 640
670 M = (N * (SUMXY) - (SUMX * SUMY)) / ((N * SUMX2) - (SUMX) ^ 2)
680 B = (SUMY - M * SUMX) / N
690 R = (N * SUMXY - SUMX * SUMY) / SQR(ABS(N * SUMX2 - SUMX ^ 2) * (N * SUMY2 - SUMY ^ 2))
700 LOCATE 1, 65: PRINT "M="; M
710 LOCATE 2, 65: PRINT "B="; B

```

```

720 LOCATE 3, 65: PRINT "R="; R
721 LOCATE 23, 50: PRINT "EJE X="; X$
723 LOCATE 13, 1: PRINT "E": LOCATE 14, 1: PRINT "J": LOCATE 15, 1: PRINT "E": LOCATE 17, 1: PRINT "Y"
730 YCALXMNG = XMINGRAF * M + B
740 YCALXMNG = XMAXGRAF * M + B
750 YCALXMNG = -YCALXMNG * (199 - 40) / PASY + EJEX
760 YCALXMNG = -YCALXMNG * (199 - 40) / PASY + EJEX
770 XMINGRAF = XMINGRAF * (639 - 60) / PASX + EJEX
780 XMAXGRAF = XMAXGRAF * (639 - 60) / PASX + EJEX
790 LINE (XMINGRAF, YCALXMNG)-(XMAXGRAF, YCALXMNG)
791 LOCATE 1, 1: PRINT "GRÁFICA:"
792 LOCATE 1, 10: PRINT TITULO$
DO
LOOP WHILE INKEY$ = ""
795 CLS
800 REM REGRESIÓN LOGARÍTMICA
805 PRINT "REGRESIÓN LOGARÍTMICA"
810 PRINT "DESEAS HACER REGRESIÓN LOGARÍTMICA? (1=SI,0= NO)"; : INPUT L
812 IF L = 0 GOTO 850 ELSE 815
815 FOR I = 1 TO N
820 X(I) = LOG(X(I)) / 2.3
830 Y(I) = LOG(Y(I)) / 2.3
835 NEXT I
840 GOTO 70
850 END

```

### Regresión Cuadrática

El programa REGCUAD1 es de fácil manejo y de fácil interacción con él, ya que el ingreso de los datos se hace de forma simple en los campos adecuados. Con este programa se obtiene la regresión cuadrática de una serie de puntos dados como datos u obtenidos como resultado de experimentación. Ejecutándolo, se obtiene como resultado los valores de los parámetros A, B, y C ajustados por mínimos cuadrados, correspondientes a una clásica ecuación cuadrática de la forma  $AX^2 + BX + C$ .

La función cuadrática obtenida mediante este ajuste puede utilizarse posteriormente en diversas aplicaciones de ingeniería como veremos más tarde a lo largo de este trabajo.

El ingreso al programa es de la misma forma que el anterior y se siguen los mismos pasos, cambiando solo el paso 6 en el que se selecciona la opción REGCUAD1.

Ejemplo de ingreso de datos.

Introducir todos los valores de x y acomodándolos en vectores aritméticos en el campo del programa en donde se encuentra la instrucción 9 se escriben los valores correspondientes al eje X

```
9 READ X(I): DATA 1,2,3,4,5,6,7,8,9,10
```

Para el caso de los datos del eje Y se hacen en el campo 12

```
12 READ Y(I): DATA 25,18,9,4,1,3,8,17,23,35
```

Siendo los datos proporcionados X 1,2,3,4,5,6,7,8,9,10

Y 25,18,9,4,1,3,8,17,23,35

Obtenidos de una experimentación de laboratorio

La forma de correr el programa sera con la tecla F5 o siguiendo la ruta

1.- Ejecutar

2.- Iniciar

Después de introducir los datos se le pide al usuario que tecleen los parámetros de graficación, esto se hace igual que con REGLIN1 el cual fue explicado con anterioridad.

ESTE PROGRAMA GRAFICA PARES DE VALORES X,Y EN LOS CUATRO CUADRANTES Y REALIZA UNA REGRESIÓN CUADRÁTICA, OBTENIENDO LOS PARÁMETROS DE LA MEJOR PARÁBOLA CUADRÁTICA AJUSTABLE POR MÍNIMOS CUADRADOS.

```
XMIN=1 XMAX=10 YMIN=1 YMAX=35
```

```
INTERVALOS DE X e Y QUE DESEA GRAFICAR
```

```
XMINGRAF=1
```

```
XMAXGRAF=10
```

```
YMINGRAF=1
```

```
YMAXGRAF=35
```

Introducir escala de X=?1

Introducir escala de Y=?1

La escala se selecciona según la naturaleza de los puntos ingresados o en función a la necesidad del usuario.

Los resultados se muestran en la parte superior derecha del gráfico de salida del programa en el cual, también se observan los puntos graficados en la escala correspondiente.

La ecuación característica de esta curva será:

$$y = 1.3787X^2 - 14.08182X + 38.6667$$

siendo esta ecuación la que describe la curva y pudiendo con ella obtener los valores de "y" tantos y como sean necesarios en iteraciones de un programa de cómputo aplicados a ingeniería, por ejemplo, en la lectura de diagramas en los cuales se presenta un comportamiento parabólico, es posible obtener la ecuación de este diagrama y desde el mismo programa con la ayuda de la ecuación obtenida con REGCUAD1 calcular la variable sin la necesidad de acudir de una forma repetitiva a la consulta de dichos diagramas.

## Salida del Programa

```
1 0.000000  
B 11 8.111  
3 0.000000
```

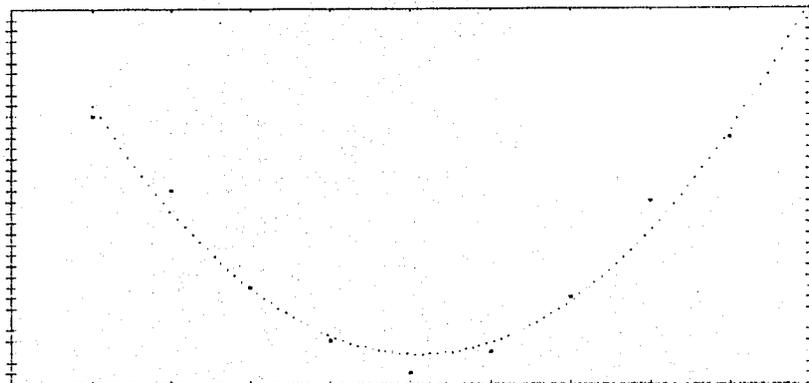
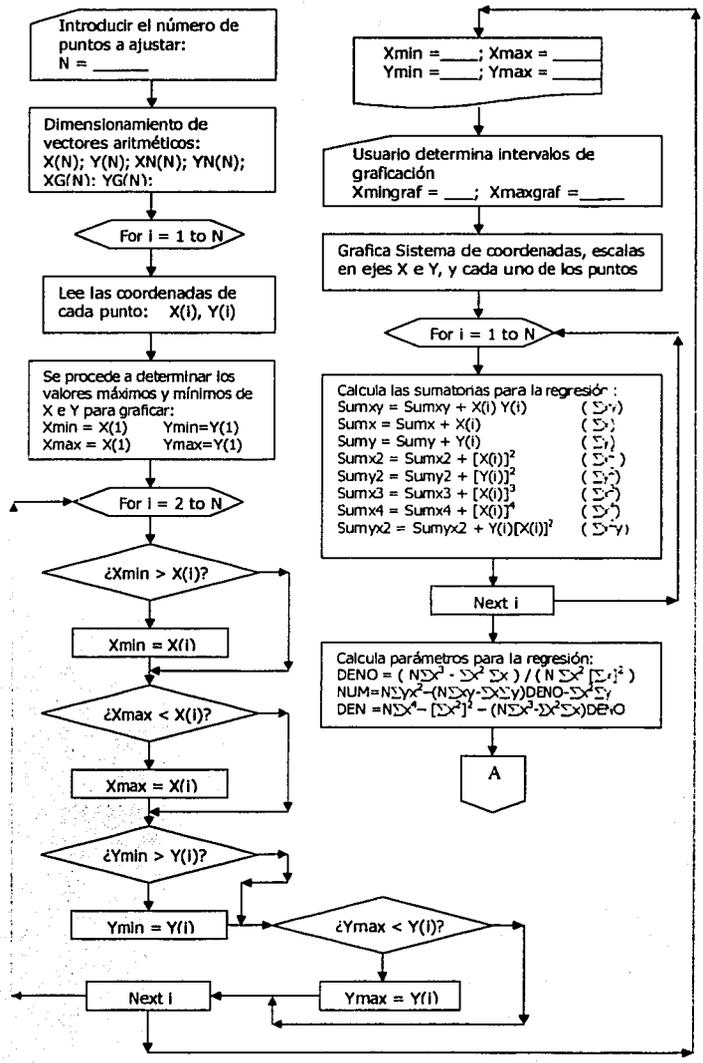
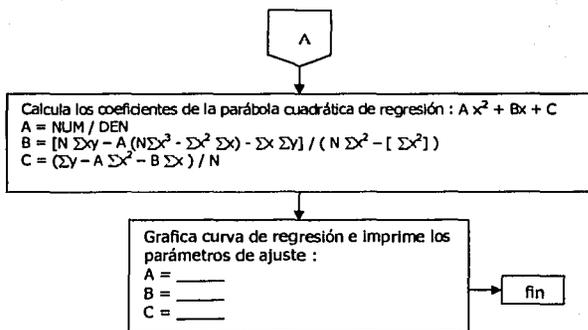


Diagrama de Bloques





Listado del Programa.

```

1 SCREEN 12
2 PRINT "ESTE PROGRAMA GRAFICA PARES DE VALORES X,Y EN LOS CUATRO CUADRANTES,"
3 PRINT " Y REALIZA UNA REGRESIÓN CUADRÁTICA, OBTENIENDO LOS PARÁMETROS DE LA MEJOR"
4 PRINT " PARÁBOLA CUADRÁTICA AJUSTABLE POR MÍNIMOS CUADRADOS"
5 N = 10
6 DIM X(N), Y(N), XN(N), YN(N), XG(100), YG(100), XGN(100), YGN(100)
7 REM INTRODUCIR TODOS LOS VALORES DE x e y Y ACOMODARLOS EN VECTORES ARITMÉTICOS
8 FOR I = 1 TO N
9 READ X(I): DATA 1,2,3,4,5,6,7,8,9,10
10 NEXT I
11 FOR I = 1 TO N
12 READ Y(I): DATA 25,18,9,4,1,3,8,17,23,35
13 NEXT I
14 REM OBTENCION DE VALORES EXTREMOS
14 XMIN = X(1): XMAX = X(1): YMIN = Y(1): YMAX = Y(1)
15 FOR I = 2 TO N
16 IF XMIN > X(I) THEN XMIN = X(I)
17 IF XMAX < X(I) THEN XMAX = X(I)
18 IF YMIN > Y(I) THEN YMIN = Y(I)
19 IF YMAX < Y(I) THEN YMAX = Y(I)
20 NEXT I: PRINT "XMIN="; XMIN; "XMAX="; XMAX; "YMIN="; YMIN; "YMAX="; YMAX
21 REM UNA VEZ OBTENIDOS LOS VALORES EXTREMOS USUARIO DECIDE INTERVALO DE GRAFICACION
22 PRINT "INTERVALO DE X E Y QUE DESEAS GRAFICAR"
23 PRINT "XMINGRAF="; : INPUT XMINGRAF
24 PRINT "XMAXGRAF="; : INPUT XMAXGRAF
25 PRINT "YMINGRAF="; : INPUT YMINGRAF
26 PRINT "YMAXGRAF="; : INPUT YMAXGRAF
27 PRINT "INTRODUCIR ESCALA DE X="; : INPUT SCALEX
28 PRINT "INTRODUCIR ESCALA DE Y="; : INPUT SCALEY
29 SCREEN 12
30 LINE (0, 0)-(640, 480), 15, BF
31 IZQ = 60: DER = 600: ARR = 80: ABA = 420
32 COLOR 3
33 LINE (IZQ, ARR)-(IZQ, ABA)
34 LINE (IZQ, ARR)-(DER, ARR)
35 LINE (IZQ, ABA)-(DER, ABA)
36 LINE (DER, ARR)-(DER, ABA)

```

```

37 IF XMINGRAF > 0 THEN XMINGRAF = 0
38 IF XMAXGRAF < 0 THEN XMAXGRAF = 0
39 IF YMINGRAF > 0 THEN YMINGRAF = 0
40 IF YMAXGRAF < 0 THEN YMAXGRAF = 0
41 PASX = XMAXGRAF + ABS(XMINGRAF)
42 PASY = YMAXGRAF + ABS(YMINGRAF)
43 EJEX = IZQ + (DER - IZQ) / PASX * ABS(XMINGRAF)
44 EJEX = ARR + (ABA - ARR) / PASY * YMAXGRAF
45 LINE (EJEX, ARR)-(EJEX, ABA)
46 LINE (IZQ, EJEX)-(DER, EJEX)
47 REM normalizacion de escala
48 NY = INT(PASY / SCALEY)
49 NX = INT(PASX / SCALEX)
50 IF L = 1 GOTO 403 ELSE 420
403 DIM DIVLOGX(NX), DIVLOGY(NY)
51 DIVLOGX(1) = IZQ: DIVLOGY(1) = ABA
52 FOR I = 2 TO NX
53 DIVLOGX(I) = DIVLOGX(I - 1) + SCALEX * (DER - IZQ) / PASX
54 LINE (DIVLOGX(I), EJEX - 2)-(DIVLOGX(I), EJEX + 2)
55 LINE (DIVLOGX(I), ARR)-(DIVLOGX(I), ARR + 2)
56 LINE (DIVLOGX(I), ABA - 2)-(DIVLOGX(I), ABA)
57 NEXT I
58 FOR J = 2 TO NY
59 DIVLOGY(J) = DIVLOGY(J - 1) - SCALEY * (ABA - ARR) / PASY
60 LINE (EJEX - 3, DIVLOGY(J))-(EJEX + 3, DIVLOGY(J))
61 LINE (IZQ, DIVLOGY(J))-(IZQ + 3, DIVLOGY(J))
62 LINE (DER - 3, DIVLOGY(J))-(DER, DIVLOGY(J))
63 NEXT J
64 GOTO 520
420 DIM DIVX(NX), DIVY(NY)
65 DIVX(1) = IZQ: DIVY(1) = ABA
66 FOR I = 2 TO NX
67 DIVX(I) = DIVX(I - 1) + SCALEX * (DER - IZQ) / PASX
68 LINE (DIVX(I), EJEX - 2)-(DIVX(I), EJEX + 2)
69 LINE (DIVX(I), ARR)-(DIVX(I), ARR + 2)
71 LINE (DIVX(I), ABA - 2)-(DIVX(I), ABA)
72 NEXT I
73 FOR J = 2 TO NY

```

```

74 DIVY(J) = DIVY(J - 1) - SCALEY * (ABA - ARR) / PASY
75 LINE (EJEY - 3, DIVY(J))-(EJEY + 3, DIVY(J))
76 LINE (IZQ, DIVY(J))-(IZQ + 3, DIVY(J))
77 LINE (DER - 3, DIVY(J))-(DER, DIVY(J))
78 NEXT J
520 FOR I = 1 TO N
79 XN(I) = X(I) * (DER - IZQ) / PASX + EJEY
80 YN(I) = -Y(I) * (ABA - ARR) / PASY + EJEX
81 PSET (XN(I) - 1, YN(I) + 1)
82 PSET (XN(I) - 1, YN(I))
83 PSET (XN(I) - 1, YN(I) - 1)
84 PSET (XN(I), YN(I) + 1)
85 PSET (XN(I), YN(I))
86 PSET (XN(I), YN(I) - 1)
87 PSET (XN(I) + 1, YN(I) + 1)
88 PSET (XN(I) + 1, YN(I))
89 PSET (XN(I) + 1, YN(I) - 1)
90 NEXT I
91 REM ***** REGRESIÓN CUADRÁTICA *****
92 FOR I = 1 TO N
93 SUMXY = SUMXY + X(I) * Y(I)
94 SUMX = SUMX + X(I)
95 SUMY = SUMY + Y(I)
96 SUMX2 = SUMX2 + X(I) ^ 2
97 sumy2 = sumy2 + Y(I) ^ 2
98 SUMX3 = SUMX3 + X(I) ^ 3
99 SUMX4 = SUMX4 + X(I) ^ 4
100 SUMYX2 = SUMYX2 + Y(I) * X(I) ^ 2
101 NEXT I
102 DENO = (N * SUMX3 - SUMX2 * SUMX) / (N * SUMX2 - SUMX ^ 2)
103 NUM = N * SUMYX2 - (N * SUMXY - SUMX * SUMY) * DENO - SUMX2 * SUMY
104 DEN = N * SUMX4 - SUMX2 ^ 2 - (N * SUMX3 - SUMX2 * SUMX) * DENO
105 A = NUM / DEN
106 B = (N * SUMXY - A * (N * SUMX3 - SUMX2 * SUMX) - SUMX * SUMY) / (N * SUMX2 - SUMX ^ 2)
107 C = (SUMY - A * SUMX2 - B * SUMX) / N
108 COLOR 14
109 LOCATE 1, 65: PRINT "A="; A
110 LOCATE 2, 65: PRINT "B="; B

```

```

111 LOCATE 3, 65: PRINT "C="; C
112 DELTAX = (XMAX - XMIN) / 100
113 FOR I = 1 TO 100
114 XG(I) = XMIN + (I - 1) * DELTAX
115 YG(I) = A * XG(I) ^ 2 + B * XG(I) + C
116 XGN(I) = XG(I) * (DER - IZQ) / PASX + EJJEY
117 YGN(I) = -YG(I) * (ABA - ARR) / PASY + EJEX
118 PSET (XGN(I), YGN(I)), 4
119 NEXT I
120 DO
121 LOOP WHILE INKEY$ = ""
122 CLS
123 REM REGRESIÓN LOGARÍTMICA
124 PRINT "REGRESIÓN LOGARÍTMICA"
125 PRINT "DESEAS HACER REGRESIÓN LOGARÍTMICA? (1=SI,0= NO)"; : INPUT L
812 IF L = 0 GOTO 850 ELSE 815
815 FOR I = 1 TO N
126 X(I) = LOG(X(I)) / 2.3
127 Y(I) = LOG(Y(I)) / 2.3
128 NEXT I
129 GOTO 70
850 END

```

### Regresión Cúbica

El programa REGCUB1 fue diseñado como el anterior para su fácil manejo, ya que el ingreso de los datos se hace de forma simple en los campos adecuados, en este programa se obtiene la regresión cúbica de una serie de puntos dados como datos u obtenidos como resultado de experimentación. Ejecutándolo, se obtiene como resultado los valores de los parámetros A, B, C, y D ajustados por mínimos cuadrados para una clásica ecuación cúbica de la forma  $AX^3 + BX^2 + CX + D$ . Obteniéndose con ella la función de la curva siendo esta una excelente herramienta como subrutina para la elaboración de programas aplicados a la ingeniería o en los casos en que sea necesario un ajuste de puntos a una función definida para su fácil manejo; además el programa esta diseñado para mostrar de forma gráfica los resultados obtenidos.

El ingreso al programa es de la forma acostumbrada aplicando en el paso 6 la opción REGCUB1.

Ejemplo de ingreso de datos.

INTRODUCIR TODOS LOS VALORES DE X y Y ACOMODÁNDOLOS EN VECTORES ARITMÉTICOS

En el campo del programa en donde se encuentra la instrucción 9 se escriben los valores correspondientes al eje X

```
9 READ X(I): DATA 0.1,.2,.3,.4,.5,.6,.7,.8,.9,1
```

Para el caso de los datos del eje Y se hacen en e campo 12

12 READ Y(I): DATA 0,0.12,0.25,0.38,0.54,0.69,0.82,0.89,0.97,1

Siendo los datos proporcionados X: 0.1,,2,,3,4,,5,,6,,7,,8,,9,1

Y: 0,0.12,0.25,0.38,0.54,0.69,0.82,0.89,0.97,1

Obtenidos de una experimentación de laboratorio

La forma de correr el programa será con la tecla F5 o siguiendo la ruta

1.- Ejecutar

2.- Iniciar

ESTE PROGRAMA GRAFICA PARES DE VALORES X,Y EN LOS CUATRO CUADRANTES Y REALIZA UNA REGRESIÓN CÚBICA, OBTENIENDO LOS PARÁMETROS DE LA MEJOR PARÁBOLA CÚBICA AJUSTABLE POR MÍNIMOS CUADRADOS.

XMIN=0.1 XMAX=1 YMIN=0 YMAX=1

INTERVALOS DE X e Y QUE DESEA GRAFICAR

XMINGRAF=0.1

XMAXGRAF=1

YMINGRAF=0

YMAXGRAF=1

Introducir escala de X=?0.1

Introducir escala de Y=?0.1

La escala se selecciona según la naturaleza de los puntos ingresados o a la necesidad del usuario.

Los resultados se muestran en la parte superior derecha del gráfico de salida del programa en el cual, también se observan los puntos graficados en la escala correspondiente.

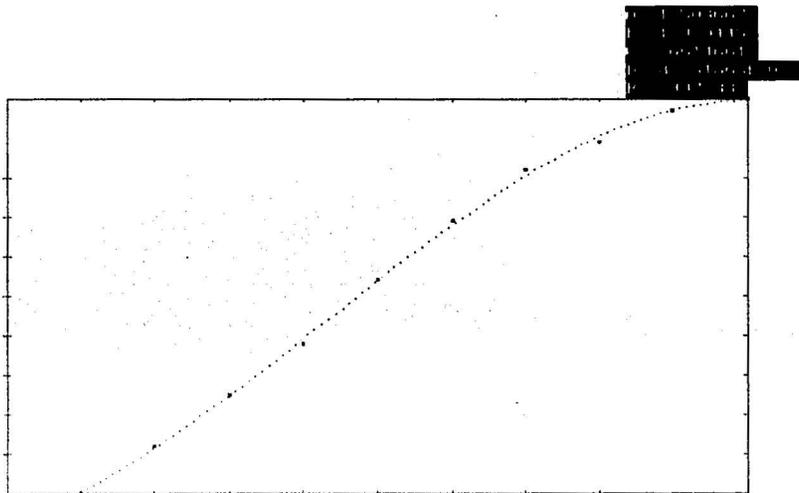
La ecuación característica de esta curva será:

$$y = -1.5036X^3 + 1.9204X^2 + 0.6614X - 8.2318E-02$$

Con un coeficiente de regresión R= .997233

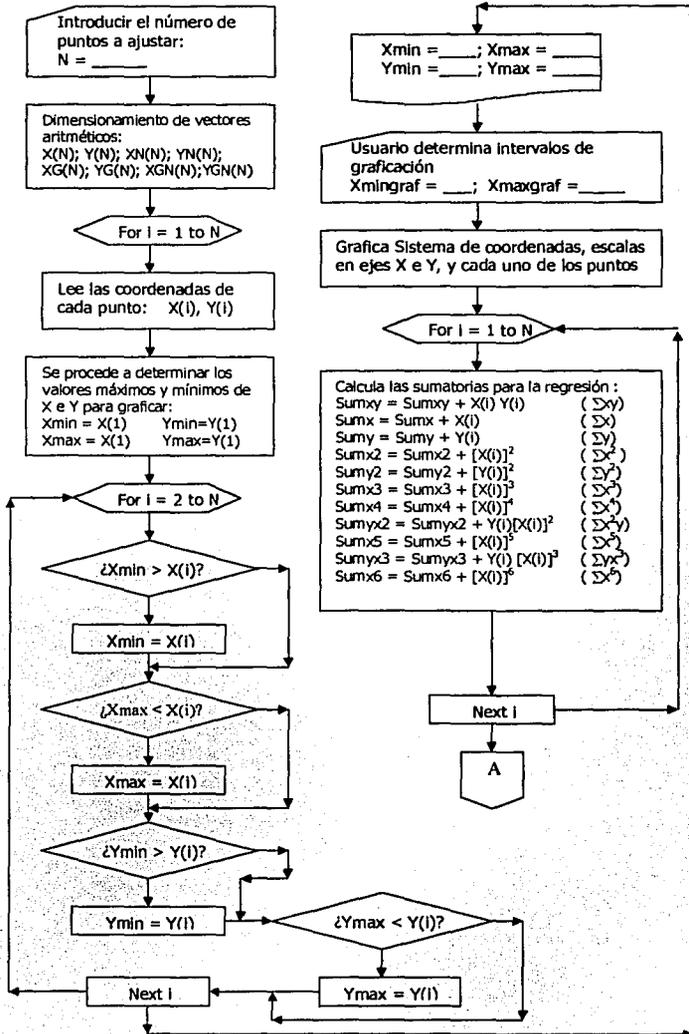
Siendo la anterior ecuación la que describa a la curva, un ejemplo sencillo de aplicación de este programa de computo es la caracterización de una curva de equilibrio para la destilación de una mezcla binaria por el método grafico de Mc Cabe Thiele, en el cual se tienen una serie de puntos de fracción mol de vapor y líquido los cuales pueden ser ajustados por mínimos cuadrados y aplicárseles una regresión cúbica para conocer la ecuación característica de esta curva y poder así hacer un programa para calcular los platos teóricos por el método antes mencionado, siendo de mas utilidad la expresión algebraica que los puntos en sí.

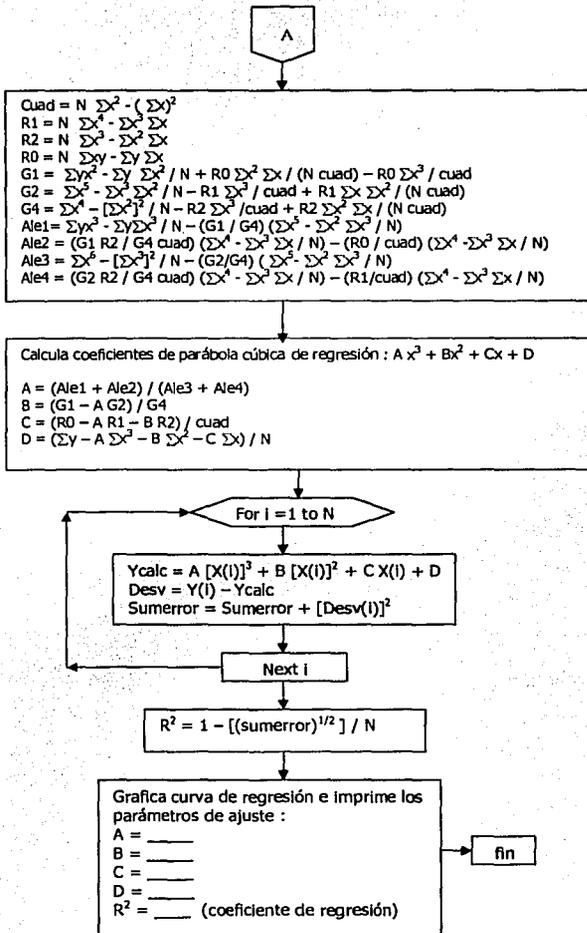
La salida del programa se presenta de la siguiente manera:



Pre: **non cualquier de la y condimo**

## Diagrama de Bloques





Listado del Programa.

```

1 SCREEN 12
2 PRINT "ESTE PROGRAMA GRAFICA PARES DE VALORES X,Y EN LOS CUATRO CUADRANTES,"
3 PRINT " Y REALIZA UNA REGRESIÓN CÚBICA, OBTENIENDO LOS PARÁMETROS DE LA MEJOR"
4 PRINT " PARÁBOLA CÚBICA AJUSTABLE POR MÍNIMOS CUADRADOS"
5 n = 10
6 DIM x(n), y(n), XN(n), YN(n), XG(100), YG(100), XGN(100), YGN(100), desv(n)
7 REM INTRODUCIR TODOS LOS VALORES DE X E Y Y ACOMODARLOS EN VECTORES ARITMÉTICOS
8 FOR i = 1 TO n
9 READ x(i): DATA 0.1,,2,,3,,4,,5,,6,,7,,8,,9,1
10 NEXT i
11 FOR i = 1 TO n
12 READ y(i): DATA 0,0.12,0.25,0.38,0.54,0.69,0.82,0.89,0.97,1
13 NEXT i
70 REM OBTENCION DE VALORES EXTREMOS
14 XMIN = x(1): XMAX = x(1): YMIN = y(1): YMAX = y(1)
15 FOR i = 2 TO n
16 IF XMIN > x(i) THEN XMIN = x(i)
17 IF XMAX < x(i) THEN XMAX = x(i)
18 IF YMIN > y(i) THEN YMIN = y(i)
19 IF YMAX < y(i) THEN YMAX = y(i)
20 NEXT i: PRINT "XMIN="; XMIN; "XMAX="; XMAX; "YMIN="; YMIN; "YMAX="; YMAX
21 REM UNA VEZ OBTENIDOS LOS VALORES EXTREMOS USUARIO DECIDE INTERVALO DE GRAFICACION
22 PRINT "INTERVALO DE X E Y QUE DESEAS GRAFICAR"
23 PRINT "XMINGRAF="; : INPUT XMINGRAF
24 PRINT "XMAXGRAF="; : INPUT XMAXGRAF
25 PRINT "YMINGRAF="; : INPUT YMINGRAF
26 PRINT "YMAXGRAF="; : INPUT YMAXGRAF
27 PRINT "introducir escala de x="; : INPUT SCALEX
28 PRINT "introducir escala de y="; : INPUT SCALEY
29 SCREEN 12
30 LINE (0, 0)-(640, 480), 15, BF
31 IZQ = 60: DER = 600: ARR = 80: ABA = 420
32 COLOR 3
33 LINE (IZQ, ARR)-(IZQ, ABA)
34 LINE (IZQ, ARR)-(DER, ARR)
35 LINE (IZQ, ABA)-(DER, ABA)
36 LINE (DER, ARR)-(DER, ABA)

```

```

37 IF XMINGRAF > 0 THEN XMINGRAF = 0
38 IF XMAXGRAF < 0 THEN XMAXGRAF = 0
39 IF YMINGRAF > 0 THEN YMINGRAF = 0
40 IF YMAXGRAF < 0 THEN YMAXGRAF = 0
41 PASX = XMAXGRAF + ABS(XMINGRAF)
42 PASY = YMAXGRAF + ABS(YMINGRAF)
43 EJEY = IZQ + (DER - IZQ) / PASX * ABS(XMINGRAF)
44 EJEX = ARR + (ABA - ARR) / PASY * YMAXGRAF
45 LINE (EJEY, ARR)-(EJEY, ABA)
46 LINE (IZQ, EJEX)-(DER, EJEX)
47 REM NORMALIZACIÓN DE ESCALA
48 NY = INT(PASY / SCALEY)
49 NX = INT(PASX / SCALEX)
50 IF L = 1 GOTO 403 ELSE 420
403 DIM DIVLOGX(NX), DIVLOGY(NY)
51 DIVLOGX(1) = IZQ: DIVLOGY(1) = ABA
52 FOR i = 2 TO NX
53 DIVLOGX(i) = DIVLOGX(i - 1) + SCALEX * (DER - IZQ) / PASX
54 LINE (DIVLOGX(i), EJEX - 2)-(DIVLOGX(i), EJEX + 2)
55 LINE (DIVLOGX(i), ARR)-(DIVLOGX(i), ARR + 2)
56 LINE (DIVLOGX(i), ABA - 2)-(DIVLOGX(i), ABA)
57 NEXT i
58 FOR J = 2 TO NY
59 DIVLOGY(J) = DIVLOGY(J - 1) - SCALEY * (ABA - ARR) / PASY
60 LINE (EJEY - 3, DIVLOGY(J))-(EJEY + 3, DIVLOGY(J))
61 LINE (IZQ, DIVLOGY(J))-(IZQ + 3, DIVLOGY(J))
62 LINE (DER - 3, DIVLOGY(J))-(DER, DIVLOGY(J))
63 NEXT J
64 GOTO 520
420 DIM DIVX(NX), DIVY(NY)
65 DIVX(1) = IZQ: DIVY(1) = ABA
66 FOR i = 2 TO NX
67 DIVX(i) = DIVX(i - 1) + SCALEX * (DER - IZQ) / PASX
68 LINE (DIVX(i), EJEX - 2)-(DIVX(i), EJEX + 2)
69 LINE (DIVX(i), ARR)-(DIVX(i), ARR + 2)
71 LINE (DIVX(i), ABA - 2)-(DIVX(i), ABA)
72 NEXT i
73 FOR J = 2 TO NY

```

```

74 DIVY(J) = DIVY(J - 1) - SCALEY * (ABA - ARR) / PASY
75 LINE (EJEY - 3, DIVY(J))-(EJEY + 3, DIVY(J))
76 LINE (IZQ, DIVY(J))-(IZQ + 3, DIVY(J))
77 LINE (DER - 3, DIVY(J))-(DER, DIVY(J))
78 NEXT J
520 FOR i = 1 TO n
79 XN(i) = x(i) * (DER - IZQ) / PASX + EJEY
80 YN(i) = -y(i) * (ABA - ARR) / PASY + EJEY
81 PSET (XN(i) - 1, YN(i) + 1)
82 PSET (XN(i) - 1, YN(i))
83 PSET (XN(i) - 1, YN(i) - 1)
84 PSET (XN(i), YN(i) + 1)
85 PSET (XN(i), YN(i))
86 PSET (XN(i), YN(i) - 1)
87 PSET (XN(i) + 1, YN(i) + 1)
88 PSET (XN(i) + 1, YN(i))
89 PSET (XN(i) + 1, YN(i) - 1)
90 NEXT i
91 REM ***** REGRESIÓN CÚBICA *****
92 FOR i = 1 TO n
93 sumyx = sumyx + x(i) * y(i)
94 sumx = sumx + x(i)
95 sumy = sumy + y(i)
96 sumx2 = sumx2 + x(i) ^ 2
97 sumy2 = sumy2 + y(i) ^ 2
98 sumx3 = sumx3 + x(i) ^ 3
99 sumx4 = sumx4 + x(i) ^ 4
100 sumyx2 = sumyx2 + y(i) * x(i) ^ 2
101 sumx5 = sumx5 + x(i) ^ 5
102 sumyx3 = sumyx3 + y(i) * x(i) ^ 3
103 sumx6 = sumx6 + x(i) ^ 6
104 NEXT i
105 cuad = n * sumx2 - sumx ^ 2
106 r1 = n * sumx4 - sumx3 * sumx
107 r2 = n * sumx3 - sumx2 * sumx
108 ro = n * sumyx - sumy * sumx
109 g1 = sumyx2 - sumy * sumx2 / n + ro / n / cuad * sumx2 * sumx - ro / cuad * sumx3
110 g2 = sumx5 - sumx3 * sumx2 / n - r1 * sumx3 / cuad + r1 / n / cuad * sumx * sumx2

```

```

111 g4 = sumx4 - sumx2 ^ 2 / n - r2 * sumx3 / cuad + r2 / n / cuad * sumx * sumx2
112 ale1 = sumyx3 - sumy * sumx3 / n - g1 / g4 * (sumx5 - sumx2 * sumx3 / n)
113 ale2 = g1 * r2 / g4 / cuad * (sumx4 - sumx3 * sumx / n) - ro / cuad * (sumx4 - sumx3 * sumx / n)
114 ale3 = sumx6 - sumx3 ^ 2 / n - g2 / g4 * (sumx5 - sumx2 * sumx3 / n)
115 ale4 = g2 / g4 * r2 / cuad * (sumx4 - sumx3 * sumx / n) - r1 / cuad * (sumx4 - sumx3 * sumx / n)
116 a = (ale1 + ale2) / (ale3 + ale4)
117 b = (g1 - a * g2) / g4
118 c = (ro - a * r1 - b * r2) / cuad
119 d = (sumy - a * sumx3 - b * sumx2 - c * sumx) / n
120 FOR i = 1 TO n:
121 ycalc = a * x(i) ^ 3 + b * x(i) ^ 2 + c * x(i) + d
122 desv(i) = y(i) - ycalc
123 sumerror = sumerror + desv(i) ^ 2
124 NEXT i
125 regret = 1 - (sumerror) ^ (1 / 2) / n
126 COLOR 14
127 LOCATE 1, 65: PRINT "A="; a
128 LOCATE 2, 65: PRINT "B="; b
129 LOCATE 3, 65: PRINT "C="; c
130 LOCATE 4, 65: PRINT "D="; d
131 LOCATE 5, 65: PRINT "R="; regret
132 DELTAX = (XMAX - XMIN) / 100
133 FOR i = 1 TO 100
134 XG(i) = XMIN + (i - 1) * DELTAX
135 YG(i) = a * XG(i) ^ 3 + b * XG(i) ^ 2 + c * XG(i) + d
136 XGN(i) = XG(i) * (DER - IZQ) / PASX + EJJEY
137 YGN(i) = -YG(i) * (ABA - ARR) / PASY + EJEX
138 PSET (XGN(i), YGN(i)), 4
139 NEXT i
140 END
141 DO
142 LOOP WHILE INKEY$ = ""
143 CLS
144 REM REGRESIÓN LOGARÍTMICA
145 PRINT "REGRESIÓN LOGARÍTMICA"
146 PRINT "DESEAS HACER REGRESIÓN LOGARÍTMICA? (1=SI,0= NO)"; : INPUT L
812 IF L = 0 GOTO 850 ELSE 815
815 FOR i = 1 TO n

```

147 x(i) = LOG(x(i)) / 2.3

148 y(i) = LOG(y(i)) / 2.3

149 NEXT i

150 GOTO 70

850 END

### Método de Newton-Raphson

El método numérico más popular para hallar las raíces de una ecuación trascendente es el de Newton-Raphson. Se basa en el uso de la primera derivada de la función, lográndose aproximaciones sucesivas mediante el procedimiento que se explica a continuación. Este no es un método incondicionalmente convergente, depende mucho de la suposición inicial y de la naturaleza de la función.

Dada la función  $f(x)=0$  donde no es posible el despeje de la variable  $X$  ( función trascendente ), se siguen los siguientes pasos.

1.- Se supone un valor inicial de la variable  $X$  ( $X_0$ )

2.- Se calcula la Función  $f(X)$

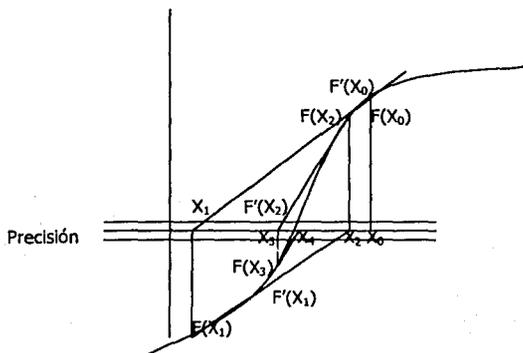
3.- Se compara el valor de  $f(X)$  con una precisión previamente establecida si  $|f(X)| \leq$  precisión, ir a 6, si no continuar con los pasos sucesivos.

4.- Se calcula la primera derivada  $\left(\frac{df}{dx}\right)_x$

5.- Se traza la línea tangente a la función en el punto  $(X, f(X))$  y se prolonga hasta intersección con las abscisas, obteniéndose una nueva  $X$  y con esto repetir el paso 2

6.- El procedimiento ha convergido y se tiene la raíz  $X$  y la precisión  $|f(X)|$

Este procedimiento es iterativo como se puede observar en la figura.



Su acceso es del mismo modo que en los anteriores, solo que en este caso se selecciona el programa NEWTRAP. En el programa (NEWTRAP) versión 1 el usuario puede ingresar la ecuación en la instrucción 4 con su respectiva primera derivada en el campo 5 como se muestra en el listado del programa; después de haber definido estos parámetros se procede a correr el programa oprimiendo la tecla F5 o siguiendo la ruta.

1.- ejecutar

2.- iniciar

Después de haber hecho lo anterior se obtienen los resultados de la ejecución del programa, observando que se logra la convergencia a la solución de la ecuación propuesta en unas cuantas iteraciones.

El ejemplo que será utilizado para ilustrar este programa es:

$$f' = 1.7327X^3 - 3.5245X^2 + 2.782X + 0.2427$$

Con su respectiva primera derivada

$$f'' = 3 * 1.7237X^2 - (2 * 3.5245X) + 2.782$$

Resultados del programa Newton Raphson

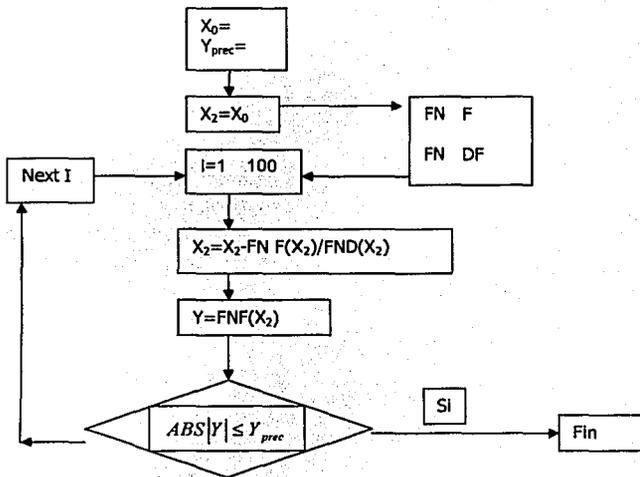
x2= .857735 y=-3.910929E-02

x2= .9275585 y= 5.143835E-03

x2= .9203734 y= 6.632107E-05

x2= .9202783 y= 1.848978E-08

Diagrama de bloques



Listado del programa

```

1 CLS
2 x0 = .5
3 x2 = x0
4 DEF fnf (x2) = 1.7327 * x2 * x2 * x2 - 3.5245 * x2 * x2 + 2.782 * x2 + .02427 - .95
5 DEF fnd (x2) = 3 * 1.7327 * x2 * x2 - 2 * 3.5245 * x2 + 2.782
6 FOR i = 1 TO 100
7 x2 = x2 - fnf(x2) / fnd(x2)
8 y = fnf(x2)
9 PRINT "x2="; x2; "y="; y
10 IF ABS(y) < .000001 THEN 30
11 NEXT i
30 PRINT "fin"

```

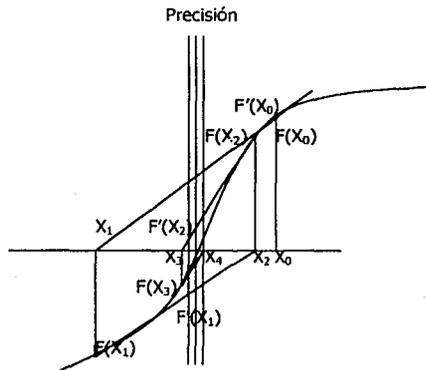
Ecuaciones no lineales

Este programa (NONLIN) es otra versión del método de Newton-Raphson en donde se utiliza la primera derivada para obtener las raíces de una función no lineal, se puede ingresar la función en la instrucción 300. El programa sugiere el ingreso de algunos datos tales como suposición inicial, factor de regulación, máximo número de iteraciones, error relativo y un tamaño de paso usado para calcular la primera derivada.

El factor de regulación se usa para ayudar a mejorar la convergencia del valor que se obtiene en cada iteración y, en parte, para impedir que se presenten problemas de no convergencia del método.

La precisión en esta segunda versión es en base a la composición de los valores en X en lugar de Y que corresponde a la versión 1 descrita con anterioridad.

Este procedimiento es iterativo como se puede observar en la figura.



El ejemplo usado para ilustrar el programa es la solución para la ecuación polinomial siguiente, que se ingresa en el campo 300 del listado del programa.

$$F = 1 + 3X^2 - 5X^3$$

Para manipular el programa el acceso es por la misma ruta que los anteriores seleccionando aquí NONLIN

La forma de correr el programa será con la tecla F5 o siguiendo la ruta

- 1.- Ejecutar
- 2.- Iniciar

Ejemplo de ingreso de datos para el programa.

raíces de ecuaciones no lineales

suposición inicial=? **1**

factor de regulación(0-1.0)=? **.25**

max no. de iteraciones=? **100**

error relativo=? **.000001**

tamaño de paso=? **.0001**

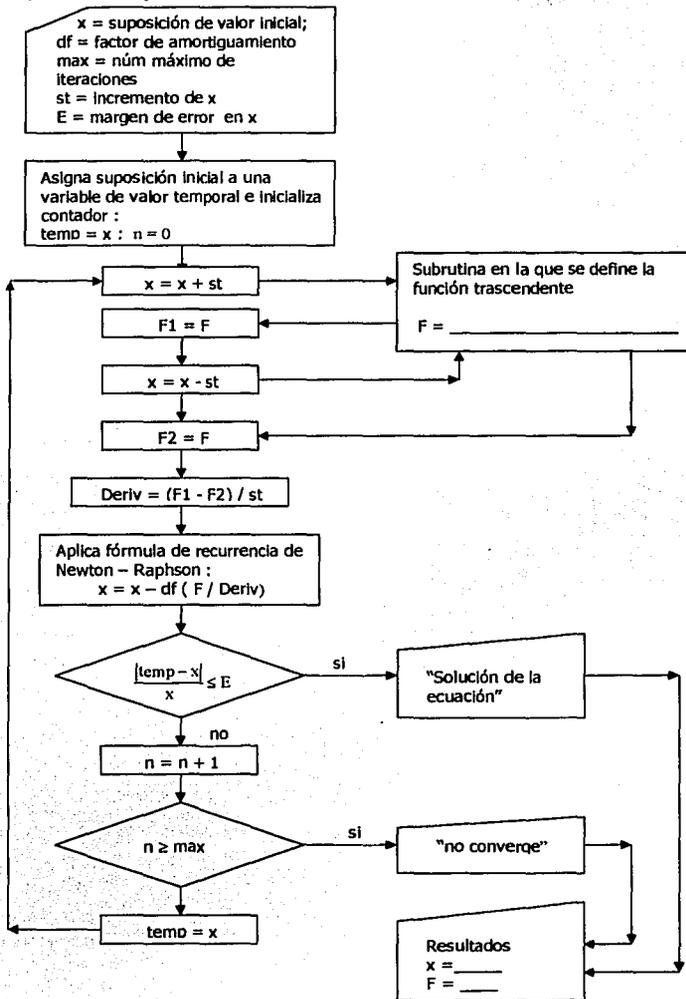
Resultado

solución para el sistema

**x= .8664247 f=-1.907145E-05**

Presione cualquier tecla y continúe

## Diagrama de Bloques



Listado del programa

```

10 CLS
20 PRINT "RAÍCES DE ECUACIONES NO LINEALES"
30 INPUT "SUPOSICIÓN INICIAL="; x
40 INPUT "FACTOR DE AMORTIGUAMIENTO(0-1.0)="; df
50 INPUT "NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES="; max
60 INPUT "ERROR RELATIVO="; E
70 INPUT "TAMAÑO DE PASO="; st
80 CLS
90 PRINT "*****PROGRAMA EN EJECUCIÓN*****"
100 temp = x: n = 0
110 x = x + st
120 GOSUB 290
130 f1 = f
140 x = x - st
150 GOSUB 290
160 f2 = f
170 deriv = (f1 - f2) / st
180 x = x - df * f / deriv
190 IF ABS((temp - x) / x) <= E THEN 250
200 n = n + 1
210 IF n >= max THEN 230
220 temp = x: GOTO 110
230 CLS
240 PRINT "NO CONVERGE": GOTO 270
250 CLS
260 PRINT "SOLUCION DEL SISTEMA"
270 PRINT "x="; x, "f="; f
280 END
290 REM-ADICIONA LA FUNCION AQUI.....USA LA FORMA a+bx+c2+dx3..etc
300 f = 1 + 3 * x * x - 5 * x * x * x
310 RETURN

```

Sistema de ecuaciones no lineales.

NOLINEAL es un programa que se usa para resolver una ecuación no lineal sencilla o un sistema de ecuaciones no lineales. El programa es capaz de resolver hasta 20 ecuaciones simultaneas no lineales. Resuelve las ecuaciones utilizando un método de Newton-Raphson en el cual se calculan las derivadas parciales numéricamente. La mejor manera de explicar el programa es mediante un ejemplo.

Siguiendo la ruta acostumbrada, ingresar al programa nolineal.

Problema: Resolver las 2 ecuaciones definidas como:

$$F1 = x^2 + y^2 - 3$$

$$F2 = 2x + y$$

Solución: empezando en la línea 1010 introducir las ecuaciones de manera siguiente:

$$1010 F(1) = x(1)^2 + x(2)^2 - 3$$

$$1020 F(2) = 2 * x(1) + x(2)$$

ahora teclee RUN e introduzca los datos siguientes:

- 1.- Número de ecuaciones
- 2.- Suposición inicial
- 3.- Factor de amortiguamiento
- 4.- Máximo número de iteraciones
- 5.- Tolerancia del error

después de 23 iteraciones las respuestas son

$$X = -0.776155$$

$$Y = 1.55229$$

Ejemplo de ingreso de datos

Escribe el numero de ecuaciones? **2**

Escribe el máximo número de iteraciones? **100**

Escribe el factor de amortiguamiento de 0-1? **.5**

Escribe la tolerancia del error de (.001-.0005)? **.0001**

Escribe la suposición inicial para encontrar la variable? **X1=-1**

**X2=1**

Solución para el sistema:

$$X = -0.776155 \quad F1 = .0120425$$

$$Y = 1.55229 \quad F2 = -6.27041E-05$$

Termina ejecución del programa.

NOLINEAL resuelve sistema de ecuaciones no lineales llenando una matriz jacobiana con los valores de las derivadas parciales en  $X_k$  y  $Y_k$ , invirtiendo la matriz y multiplicándola por la matriz vectorial de la función.

La solución de este sistema lineal de ecuaciones es  $\Delta X_k$  y  $\Delta Y_k$ . La siguiente iteración mejorara los valores supuestos de  $X_k$  y  $Y_k$  a los que se les denomina  $X_{k+1} = X_k + \Delta X_k$  y  $Y_{k+1} = Y_k + \Delta Y_k$ . La notación matemática para un sistema bidimensional será:

$$F(x,y)=0$$

$$G(x,y)=0$$

$$\Delta X_k \frac{\partial f}{\partial x}(X_k, Y_k) + \Delta Y_k \frac{\partial f}{\partial y}(X_k, Y_k) = -f(X_k, Y_k)$$

$$\Delta X_k \frac{\partial g}{\partial x}(X_k, Y_k) + \Delta Y_k \frac{\partial g}{\partial y}(X_k, Y_k) = -g(X_k, Y_k)$$

este es un sistema de ecuaciones lineales de la forma

$$a_1 x_1 + b_1 x_2 = c_1$$

$$a_2 x_1 + b_2 x_2 = c_2$$

Las ecuaciones se resuelven para  $\Delta X_k$  y  $\Delta Y_k$  y se añade al valor real de es  $X_k$  y  $Y_k$  para tener la siguiente aproximación  $X_{k+1}$ ,  $Y_{k+1}$ . El procedimiento se repite hasta que la diferencia entre las iteración actual y previa sobre todas las variables sea menor que las tolerancias de error deseadas.

NOLINEAL calcula las derivadas parciales numéricamente y resuelve el sistema de ecuaciones lineales usando un método modificado de eliminación gaussiana, evitando procedimientos de inversión matricial que consuman tiempo.

Listado del programa.

CLS

5 DIM x(20), f(20), a(20, 21), f1(20), f2(20)

10 PRINT "ecuaciones simultáneas no lineales"

20 INPUT "escribe el número de ecuaciones "; n

30 INPUT "escribe el número máximo de iteraciones"; n1

35 INPUT "escribe el factor de regulación (0 a 1) = "; d2

37 INPUT "escribe la tolerancia del error (0.0001 a 0.0005) ="; e1

40 CLS : c = 0

50 PRINT "escribe la suposición inicial para cada variable :"

60 FOR i = 1 TO n

70 PRINT "x"; i; "=";

80 INPUT x(i)

90 NEXT i

100 CLS

105 REM "llena la matriz jacobiana con derivadas parciales"

110 FOR c1 = 1 TO n1

```
115 temp = c
120 FOR i = 1 TO n
130 d1 = .001 * x(i)
140 x(i) = x(i) + d1
150 FOR k = 1 TO n
160 GOSUB 1000
170 f1(k) = f(k)
180 NEXT k
190 x(i) = x(i) + 2 * d1
200 FOR k = 1 TO n
210 GOSUB 1000
220 f2(k) = f(k)
230 a(k, i) = (f2(k) - f1(k)) / (2 * d1)
240 NEXT k
250 x(i) = x(i) - d1
260 NEXT i
270 GOSUB 1000
275 REM
276 REM
280 FOR i = 1 TO n
290 a(i, n + 1) = -f(i)
300 NEXT i
310 FOR j = 1 TO n
320 FOR i = j TO n
330 IF a(i, j) <> 0 THEN 370
340 NEXT i
350 PRINT "no hay solución unica"
360 GOTO 670
370 FOR k = 1 TO n + 1
380 x = a(j, k)
390 a(j, k) = a(i, k)
400 a(i, k) = x
410 NEXT k
420 y = 1 / a(j, j)
430 FOR k = 1 TO n + 1
440 a(j, k) = y * a(j, k)
450 NEXT k
460 FOR i = 1 TO n
```

```
470 IF i = j THEN 520
480 y = -a(i, j)
490 FOR k = 1 TO n + 1
500 a(i, k) = a(i, k) + y * a(i, k)
510 NEXT k
520 NEXT i
530 NEXT j
540 FOR l = 1 TO n
550 x(l) = x(l) + d2 * a(l, n + 1)
560 NEXT l
565 c = 0
570 FOR i = 1 TO n
580 c = c + x(i)
590 NEXT i
600 IF ABS((temp - c) / c) <= e1 THEN 630
610 NEXT c1
615 GOSUB 1000
620 PRINT "sistema no convergió": GOTO 640
630 CLS : PRINT "solución del sistema"
635 GOSUB 1000
640 FOR i = 1 TO n
650 PRINT "x"; i; "="; x(i); TAB(20); "f"; i; "="; f(i)
660 NEXT i
670 PRINT "termina ejecución del programa"
680 END
1000 REM teclee aquí el sistema de ecuaciones
1001 REM use la forma f(1) = a*x(1)+b*x(2)^3 + etc
PRINT "numero de iteraciones"; c1
1010 f(1) = x(1) ^ 2 + x(2) ^ 2 - 3
1020 f(2) = 2 * x(1) + x(2)
1050 RETURN
```

## CAPÍTULO II

### Flujo de fluidos

#### INTRODUCCIÓN

Uno de los problemas más frecuentes a resolver dentro del área de la Ingeniería Química es el del dimensionamiento de sistemas de conducción de fluidos. En la mayoría de las industrias en las que se manejan fluidos, el transporte de dichas sustancias de un punto a otro dentro del sistema de procesamiento se realiza mediante la impulsión del fluido por medio de un elemento motriz a través de un conducto cerrado. La ecuación de Navier-Stokes y su modificación para flujo turbulento, conocida como ecuación de Reynolds rigen la dinámica del fluido para cualquier configuración de flujo. Sin embargo la resolución de dichas ecuaciones diferenciales son muy difíciles de obtener y normalmente solo es posible lograrlo en situaciones muy simplificadas. Y una red de flujo no lo es.

La alternativa es recurrir a un balance de energía sobre el movimiento del fluido. El principio de conservación de energía desarrollado para un fluido se conoce como ecuación de balance de energía mecánica de Bernoulli.

$$\frac{\Delta v^2}{2} + \frac{\Delta P}{\rho} + g\Delta z - (H_{fs} = \sum f_i \frac{\Delta v^2}{2}) = 0 \quad (1)$$

La sumatoria en esta expresión se realiza para todos los accesorios y la longitud de tramo recto. El factor  $f_i$  es el coeficiente de fricción para cada accesorio. Los ingenieros británicos de principios de siglo desarrollaron los experimentos que les permitieron evaluar dichos coeficientes para los diferentes tipos de accesorios y sus resultados están disponibles en forma de tablas y gráficos en la literatura técnica de dominio público. En cuanto a longitudes de tramo recto, se dispone del popular diagrama de Moody que corresponde al resumen de los datos experimentales que permiten evaluar el coeficiente de fricción en tramos rectos de tubería en función del número de Reynolds y el coeficiente de rugosidad adimensional. Además de dicho diagrama se dispone de la ecuación de Colebrook, una ecuación en la que  $f$  se encuentra involucrada en forma implícita, y que por lo tanto requiere de algún método numérico para su evaluación, y que veremos un poco más adelante.

Finalmente, si la ecuación anterior se multiplica por el flujo másico del fluido ( $m$ ), es factible la igualación a la potencia del elemento motriz ( $W$ ) que se utilice para mover al fluido, en caso de existir, por supuesto.

$$m \left[ \frac{\Delta v^2}{2} + \frac{\Delta P}{\rho} + g\Delta z - (H_n = \sum f_i \frac{\Delta v^2}{2}) \right] = \dot{W} \quad (2)$$

Esta es la ecuación de balance de energía mecánica de "Bernoulli" en honor al pionero en la investigación teórica en este campo. Aplicaremos este modelo matemático en el dimensionamiento de una red de flujo de fluidos. Tomaremos en cuenta el caso del flujo de aire en un sistema de ventilación a manera de ejemplo.

### Métodos de Diseño de Conductos para Flujo de Aire

El problema del flujo de aire a través de conductos domésticos e industriales es un poco específico, y se han desarrollado algunos métodos particulares para el dimensionamiento de tales sistemas de conducción, todos basados, por supuesto, en la aplicación de la ecuación de energía mecánica de Bernoulli. Los métodos de diseño de conductos para los sistemas de acondicionamiento de aire y ventilación, que se encuentran reportados en la literatura técnica, son el de igualación de fricción, el de recuperación estática y el método T. Los dos primeros son métodos en los que no se realiza una optimización, mientras que el último es un procedimiento de optimización práctica desarrollado por R. J. Tsal, H. F. Bels y R. Mangel en su artículo "Diseño de conductos de aire por el método T. Parte I: Teoría de optimización, y parte II: Procedimiento de cálculo y análisis económico", publicado en 1989 en ASHRAE Transactions 94 (2): 76 - 89.

Para asegurar que los sistemas de conducción sean acústicamente aceptables, se debe analizar la generación de ruido y la posibilidad de implementar atenuadores en casos en que sea necesario. En este trabajo no consideraremos el procedimiento de asegurar la aceptabilidad acústica del flujo de aire, ya que trabajaremos en un intervalo de velocidades subsónicas.

### Método de Igualación de fricción.

En este método los conductos se dimensionan para una pérdida de presión constante por unidad de longitud. El área sombreada de la carta de fricción específica para el aire en la figura 5 del Handbook ASHRAE que se especificó con anterioridad, es el intervalo sugerido de combinaciones de coeficientes de fricción y velocidades de aire, en base a criterios heurísticos. Cuando el costo de energía es alto y el costo de instalación del conducto es bajo, se prefiere un bajo coeficiente de fricción por resultar más económico. Para costos bajos de energía y altos costos del sistema de conducción, los coeficientes de fricción más altos que caen dentro de la zona sombreada resultan más adecuados. Después del dimensionamiento inicial, se procede a calcular la pérdida de presión total para todas las secciones del conducto y posteriormente a redimensionar cada una de las secciones para balancear las pérdidas de presión en cada convergencia.

Existen otros métodos que se pueden encontrar en la bibliografía como por ejemplo el método de recuperación estática y el método T.

## EVALUACIÓN DE LA RESISTENCIA AL FLUJO

Las caídas de presión en el conducto corresponden a la transformación irreversible de energía mecánica en calor. Los dos tipos de caídas de presión incluyen las pérdidas por fricción y las pérdidas dinámicas.

### Pérdidas por Fricción.

Las pérdidas de presión friccionantes son debido a la viscosidad del fluido y resultan del intercambio de momentum entre moléculas que fluyen en régimen laminar y partículas que se mueven a diferentes velocidades en flujo turbulento. Estas pérdidas por fricción ocurren a lo largo de la longitud entera del conducto.

### Ecuaciones de Darcy, Colebrook y Altshul.

Para el flujo de fluidos en ductos, las pérdidas de presión por efectos friccionantes pueden calcularse mediante la ecuación de Darcy:

$$\Delta P_{fr} = f (12L / D_h ) \rho_{din} \quad (3)$$

donde:

$\Delta P_{fr}$  = pérdidas por fricción en términos de la presión total.

$f$  = coeficiente de fricción, adimensional.

$L$  = longitud del conducto, ft.

$D_h$  = diámetro hidráulico, in.

$\rho_{din}$  = presión dinámica. =  $\rho v^2 / 2$

Dentro de la región de flujo en régimen laminar (números de Reynolds menores a 2000), el factor de fricción es solamente función del número de Reynolds ( $f = 64/Re$ ). Para flujo turbulento, el factor de fricción depende además de la rugosidad de la superficie del conducto y de las protuberancias internas provocadas por deformaciones del tubo que se presentan en sitios específicos tales como uniones. La tradicional carta de Moody describe el comportamiento para conductos de sección transversal circular. Para conductos hidráulicamente suaves, nuevamente el factor de fricción depende únicamente del número de Reynolds, pero la dependencia es marcadamente diferente a la del flujo en régimen laminar. En general, para superficies no suaves, el factor de fricción depende de la rugosidad y del número de Reynolds, sin embargo, para un nivel de rugosidad más allá de un número de Reynolds suficientemente grande, el factor de fricción se hace independiente del número de Reynolds, esto corresponde a una condición de flujo considerada como completamente rugosa. Entre los límites de flujo hidráulicamente suave y completamente rugoso, existe una zona de transición rugosa donde el factor de fricción depende de ambos parámetros. Es esta zona turbulenta transicionalmente

rugosa, donde ocurren la mayoría de los casos de flujo de aire, tanto en aplicaciones de acondicionamiento de aire como ventilación, el factor de fricción se puede calcular mediante la ecuación de Colebrook (1938-1939).

$$\frac{1}{f} = -2 \log \left[ \frac{12\varepsilon}{3.7D_h} + \frac{2.51}{Re\sqrt{f}} \right] \quad (4)$$

donde  $\varepsilon$  = factor de rugosidad absoluta del material, en ft.

Re = número de Reynolds, adimensional.

$D_h$  = diámetro hidráulico, en in.

Debido a que esta ecuación no puede ser resuelta explícitamente para  $f$ , se utilizan técnicas iterativas. En este trabajo se emplea el método numérico de Newton-Raphson, que se explica en la sección de herramientas matemáticas.

En 1963 los ingenieros soviéticos Altshul y Kiselev, desarrollaron una fórmula simplificada para el cálculo del coeficiente de fricción, modificada en 1989 por el norteamericano Tsal, dicha ecuación es:

$$f = 0.11 (\varepsilon / Re + 68 / Re)^{1/4} \quad (5)$$

si  $f \geq 0.018$ ;  $f = f$

si  $f < 0.018$ ;  $f = 0.85 f + 0.0028$ .

Los valores del factor de fricción obtenidos mediante la ecuación modificada de Altshul dan un error menor al 1.6 % respecto al modelo matemático de Colebrook.

### Factores de rugosidad.

Los factores de rugosidad absoluta para los materiales más comunes en la construcción de conductos de aire, que se utilizan en las ecuaciones de Colebrook o Altshul, se listan en la tabla siguiente. Los factores de rugosidad para otros materiales se pueden encontrar en el manual de Idelchik (1986). Idelchik resume los factores de rugosidad para 80 materiales, incluyendo: (1) tuberías metálicas; (2) conductos de concreto y cemento; y (3) madera, plywood y vidrio.

Factores de rugosidad de conductos de aire		
Material del conducto	categoría de rugosidad	rugosidad absoluta ft.
• acero al carbón limpio (Moody, 1944)	suave	0.00015
• Tubería de PVC (Swim, 1982)		0.0003 - 0.00015

• Aluminio (Hutchinson, 1953)		0.00015 - 0.0002
• Acero galvanizado con forjado longitudinal, juntas de 4 ft (Griggs, 1987)		0.00016 - 0.00032
• Acero galvanizado con forjado espiral, juntas de 12 ft y 1, 2 o 3 ribetes, (Jones, 1979 y Griggs, 1987)	medio suave	0.00018 - 0.00038
• Acero galvanizado con forjado longitudinal, juntas de 2.5 ft (Wright, 1945)	promedio	0.0005
• ducto de fibra de vidrio (Swim, 1978)	medio rugoso	0.0003
• ducto metálico flexible	rugoso	0.004 - 0.007
• concreto (Moody, 1944)		0.001 - 0.01

### Conductos no Circulares.

Un análisis del flujo de flujo de momentum puede relacionar el esfuerzo cortante promedio en la pared con la caída de presión por unidad de longitud para flujo turbulento plenamente desarrollado en un conducto de forma geométrica arbitraria pero de sección transversal uniforme. Al combinar los resultados con el factor de fricción de Darcy, se obtiene la ecuación siguiente:

$$D_h = 4 A / P \quad (6)$$

donde  $D_h$  = diámetro hidráulico, in

$A$  = área del conducto, in<sup>2</sup>

$P$  = perímetro de la sección transversal.

Para la mayoría de los propósitos prácticos, los conductos redondos, cuadrados y rectangulares probados por Huebscher (1948) exhiben idénticas resistencias al flujo a iguales velocidades medias, confirmando el concepto de diámetro hidráulico. Gracias a ello Huebscher pudo desarrollar la relación entre conductos rectangulares y circulares que comúnmente se usa para determinar las caídas de presión mediante las cartas de fricción o la ecuación de Colebrook:

$$D_e = 1.30 \frac{(ab)^{0.625}}{(a+b)^{0.250}} \quad (7)$$

donde

$D_e$  = diámetro equivalente del conducto, in

$a$  = alto del canal, in

$b$  = ancho del canal, in

Nótese que con esta definición, la velocidad media en un conducto rectangular es menor que en un conducto circular de diámetro equivalente.

### Pérdidas Dinámicas.

Las pérdidas dinámicas resultan de las perturbaciones al flujo provocadas por accesorios, cambios de dirección o de área de la corriente de aire. Dichos accesorios incluyen entradas, salidas, transiciones y uniones. Idelchik (1986) discute los parámetros que afectan la resistencia al flujo debido a accesorios y presenta los coeficientes de pérdida tanto en forma de curvas como de ecuaciones, en este conjunto de graficas se presentan los resultados de los experimentos realizados para determinar los coeficientes de caída de presión de diferentes accesorios en función de sus propiedades geométricas. A las curvas que son parte del manual "Fundamentals Handbook ASHRAE" se le aplico un ajuste cúbico por mínimos cuadrados mediante el programa REGCUB1 y se obtuvieron las ecuaciones que se aplican al programa con las que se pretende ejemplificar el presente capítulo.

### Coefficiente Local de Pérdidas por Fricción.

El coeficiente adimensional de pérdidas por fricción (también denominado coeficiente de fricción) se usa para cuantificar la caída de presión en el accesorio, debido a que este coeficiente tiene el mismo valor en corrientes dinámicamente semejantes, es decir, corrientes con restricciones geométricas semejantes, iguales números de Reynolds e iguales valores de otros parámetros necesarios para similitud dinámica.

El coeficiente de resistencia al flujo representa el cociente de la pérdida de presión total en el accesorio entre la presión dinámica:

$$C = \Delta p_t / [\rho (v / 1097)^2] = \Delta p_t / p_{din} \quad (8)$$

donde  $C$  = coeficiente de pérdida local o coeficiente de fricción, adimensional

$\Delta p_t$  = caída de presión total, in de agua

$\rho$  = densidad, lb / ft<sup>3</sup>

$v$  = velocidad, ft / min

$p_{din}$  = presión dinámica, in de agua

### Algoritmo Computacional para el Programa.

El problema del dimensionamiento mecánico de un sistema de ventilación requiere de explorar una amplia gama de posibilidades en cuanto a las dimensiones del canal, las velocidades con las que debe fluir el aire, el tipo de accesorios, y las características de funcionamiento del elemento motriz. De todas esas posibilidades algunas resultan mejores que otras desde el punto de vista económico. La suma de los costos de inversión más los costos de operación deben ajustarse al valor más bajo posible para hacer factible el proyecto y llevar a cabo la construcción del sistema. Lo adecuado sería llegar al valor mínimo posible, es decir, lograr la plena optimización. Sin embargo, es tan complejo el problema, implicando un conjunto muy amplio de variables, que el desarrollo de las matemáticas para obtener una función objetivo (el costo total) a minimizar, se convierte en un problema muy difícil. Quizá la aplicación de métodos de optimización heurísticos, pudiera conducir a ese óptimo. Probablemente el método de algoritmos genéticos pudiese dar buenos resultados, sin embargo, su implementación requiere de tiempo para estudiar los fundamentos y aplicarlos en la resolución de este problema específico.

En nuestra situación, sin embargo, no podemos dejar a un lado el problema, y a pesar de que una búsqueda exhaustiva de las mejores características del sistema de ventilación para minimizar costos, no sea la solución más adecuada desde el punto de vista científico, procederemos a desarrollar un algoritmo de cómputo en lenguaje Qbasic que nos ayude a realizar rápidamente una gran cantidad de cálculos para diferentes opciones del sistema de ventilación.

Normalmente en los libros de texto de Mecánica de Fluidos podemos encontrar algunos bosquejos de este tipo de algoritmos computacionales, especialmente aplicados a la resolución de la ecuación de Bernoulli en conductos cerrados. Sin embargo dichos algoritmos corresponden a programas de cómputo interactivos, es decir, el usuario debe estar interactuando con el programa durante su ejecución, teniendo que recurrir a gráficas y tablas para introducir cada una de las variables que se requieran en el dimensionamiento del sistema. Y entonces surgen una serie de problemas, uno de los más importantes es el del error de estimación visual que puede cometerse cuando se tiene que leer algún valor en una gráfica, por ejemplo el de un coeficiente de fricción o una velocidad recomendada. Con la finalidad de disminuir el efecto de ese error visual y de llevar a cabo los cálculos más rápidamente, sin tener que estar recurriendo a las gráficas, sería conveniente convertir en ecuaciones las curvas representadas en dichas gráficas. Para ello existen varios métodos, siendo los más populares el de regresión polinomial por mínimos cuadrados y el ajuste mediante polinomios de Legendre.

En el algoritmo de cómputo que se presenta en este trabajo de tesis profesional se utilizan las ecuaciones resultantes de los ajustes polinomiales por el criterio de mínimos cuadrados, que dieron resultados altamente eficientes en el ajuste de las curvas de factores de fricción para los diferentes accesorios. Esta subrutina se presentó en la sección correspondiente a herramientas matemáticas, ya que no es conveniente introducirla dentro del algoritmo computacional para el diseño del sistema de ventilación.

Además, durante el diseño del sistema, resulta necesario leer el factor de fricción para tramo recto o tener alguna forma de evaluarlo. Para evitar el error visual en la lectura, se resolvió la Ecuación de Colebrook, que como ya se ha mencionado es una ecuación trascendente de la que no se puede despejar  $f$ . La aplicación del método de Newton-Raphson resultó muy eficiente en la solución de la ecuación de Colebrook, pues con menos de una decena de iteraciones se llega al valor buscado con un error prácticamente nulo.

El programa de cómputo que se presenta en este capítulo es flexible y puede ser adaptado fácilmente al dimensionamiento de diferentes configuraciones geométricas de los canales de ventilación.

La aplicación del método de igualación de fricción requiere que se vayan adaptando las áreas de dichas ventilas ; para ello en VENTILAR se consideró un ancho constante y una altura variable al irse incrementando el flujo volumétrico del aire. En el programa , para cada sección se especifica el mismo tipo de accesorios, que son:

- Una entrada con rejillas
- Una unión de flujos
- Un aumento de área transversal

Se determinan los coeficientes de fricción y se asegura que la caída de presión sea virtualmente la misma en cada tramo. El ciclo for-next que ajusta la altura permite mantener las pérdidas en cada tramo prácticamente constante, dentro de un pequeño porcentaje de variación, como puede constatarse al comparar los datos de salida.

Luego se calculan las caídas de presión en el tramo vertical y en la salida por el tejado, para posteriormente sumar todas las pérdidas por fricción del sistema y multiplicarlas por el flujo másico.

Finalmente se suman los incrementos de energía potencial y cinética para obtener la potencia del motor del sistema de ventilación.

Las variables que pueden ser modificadas al ejecutar el programa son:

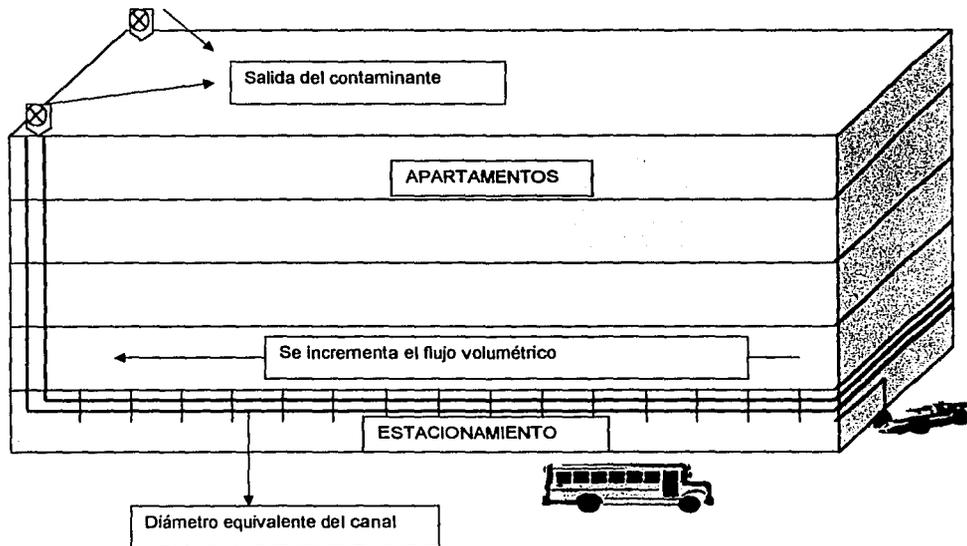
- En el campo 1 el flujo volumétrico del aire a evacuar, que es función del volumen del recinto a ventilar y de la cantidad de vehículos que circulan  $QT$ .
- En el campo 2 el número total de ventilas  $N$ .
- En el campo 3 la velocidad de succión en el tramo de sección transversal más pequeño  $V$ , esto en base a criterios heurísticos. Dicha velocidad se elige a partir del diagrama de la figura 5 del "Fundamentals Handbook ASHRAE"
- En el campo 4 la longitud del tramo recto horizontal  $LTR$
- En el campo 5 el tramo recto horizontal sobran hacia el ramal del tramo vertical  $L_{SOBRA}$
- En el campo 6 la longitud del tramo recto vertical  $ALTURA$

Las anteriores no son todas las consideraciones que pueden ser cambiadas, pero son las que mas repercuen en los resultados del diseño de un sistema de ventilación que se considera en este problema.

El programa VENTILAR permite llevar a cabo el dimencionamiento de un sistema de ventilación para el nivel de sótano de un edificio de estacionamientos, siguiendo las normas vigentes para la renovación del aire ambiental de un recinto cerrado en el que los vehículos que circulan en él producen alta concentración de contaminantes. La topología de la red

de flujo es sencilla, consta de dos canales rectos gemelos horizontales de sección transversal rectangular a los que se les adaptan varias ventanas con rejilla para la succión del aire, y que tiene acoplado en uno de sus extremos una sección vertical mediante la cual el aire sube hasta rebasar la altura del edificio y finalmente ser expulsado por el tejado hacia la atmósfera. En la base del tramo vertical de cada canal se coloca el ventilador cuya potencia se determina resolviendo la ecuación de balance de energía mecánica de Bernoulli, que son los cálculos que realiza el programa VENTILAR.

Un diagrama sencillo que nos muestra la forma en que el recinto cerrado es ventilado puede ser de la manera siguiente:



Se selecciona el programa VENTILAR es de la misma manera que los anteriores.

Ejemplo de ingreso de datos.

El Programa esta diseñado para calcular, recalcular y diseñar un sistema de ventilación en un recinto cerrado, las medidas que se han tomado en cuenta para ejemplificar el programa son las siguientes:

Largo del recinto 8 metros

Altura hasta tejado 20 metros

Flujo volumétrico total 28467.205 FT<sup>3</sup> / min

Numero de rejillas o ventanas de ventilación 8

Las propiedades del aire son a condiciones standard densidad = 0.75 Lb / Ft<sup>3</sup> viscosidad = 1.2169E-05 Lb / Ft seg

El criterio de velocidad será según la carta de fricción de la figura 5 del Fundamentals Handbook ASHRAE Charpeter 32 y es de 2200 Ft / min.

El ingreso de datos sera de la manera siguiente:

En el campo 1 QT = 28467.205

En el campo 2 N = 8

En la sección de "Propiedades del aire en condiciones standard"

RHO es la densidad = 0.75

VISC = 1.2169E-05

En el campo 3 V = 2200

En el campo 4 LTR = 8

En el campo 6 ALTURA = 20

El programa se ejecuta con la tecla F5 o siguiendo las instrucciones

1.- Ejecutar

2.- Iniciar

Los resultados que se obtienen son:

Caída de presión en tramo recto horizontal total = 0.2638424

Caída de presión total en entrada con rejilla = 1.578255

Caída de presión total en expansiones de area = 0.128931

Caída de presión en tramo recto vertical = 1.971029

DELTAP sobrante horizontal = 1.206894

DELTAP codo en cuatro partes = 7.2360E-02

DELTAP en tramo vertical = 8.045962E-02

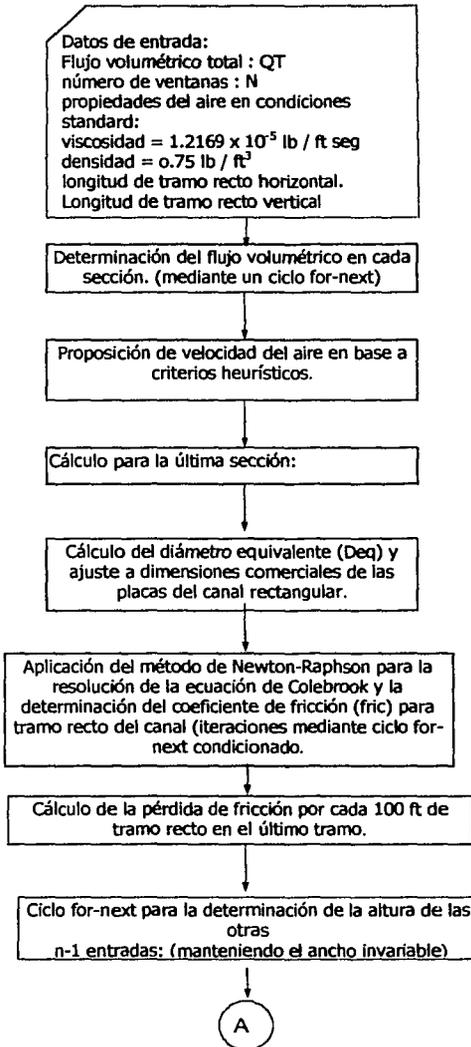
DELTAP en la salida del tejado = 0.3254154

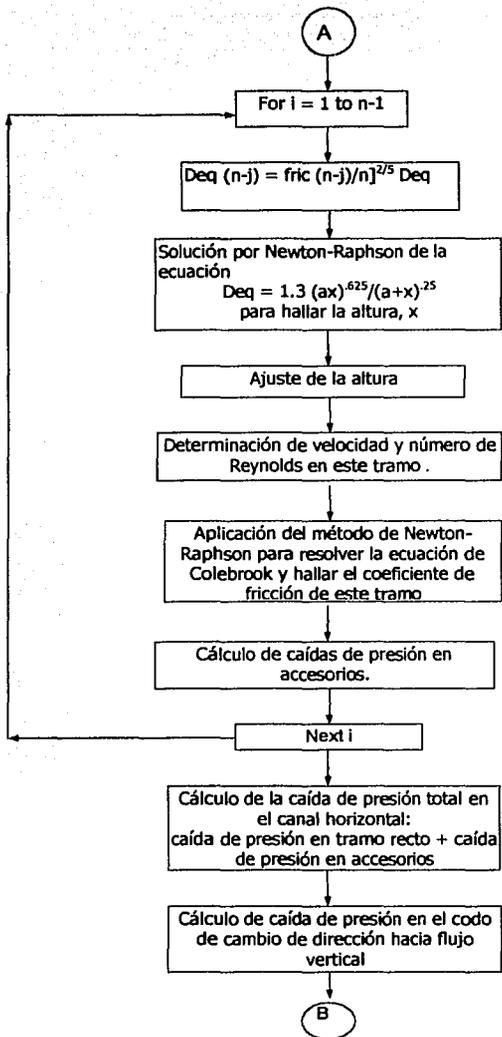
Caída de presión por variación de la energía cinética = 7.479218E-02

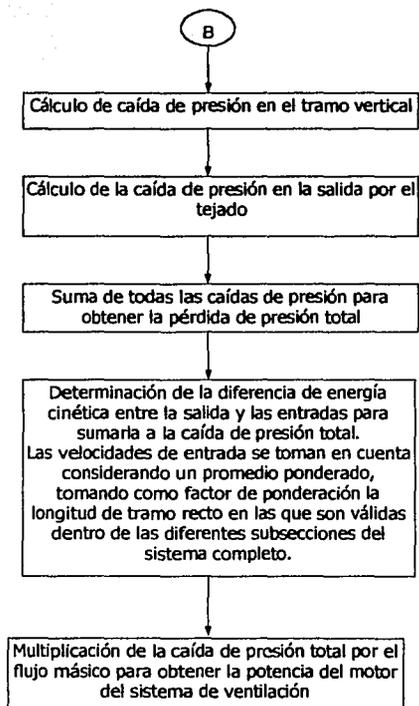
Caída de presión total en el sistema de ventilación = 3.730951 pulgadas de agua.

Ya una vez teniendo la caída de presión total y el flujo volumetrico total se puede seleccionaal el sistema motriz de ventilación con la ayuda de las graficas  $\Delta P$  vs Q que proporcionan los proveedores, escogiendo la curva de eficiencia según al usuario convenga.

## Diagrama de Bloques







A continuación se despliega el listado de instrucciones computacionales escritas para QBasic, con el cual se podrá obtener la caída de presión total en un sistema de ventilación adecuado para un recinto cerrado.

### Listado del Programa

Ventilación

CLS

SCREEN 12

FRIC = 1

'INPUT "flujo volumétrico total="; qt

'INPUT "Número de entradas="; N

1 QT = 28467.205#

2 N = 8

DELTAQ = QT / N

' \* \* \* \* flujo en cada sección \* \* \* \*

FOR I = 1 TO N

Q(I) = Q(I - 1) + DELTAQ

PRINT "Q("; I; ")="; Q(I); "FT^3/MIN"

NEXT I

' \* \* \* \* PROPIEDADES DEL AIRE EN CONDICIONES STANDARD \* \* \* \*

RHO = .075 '(LB/FT^3)

VISC = 1.2169E-05 '[LB/(FT SEG)]

PRINT "RHO="; RHO, "VISC="; VISC

' \* \* \* \* VELOCIDAD PROPUESTA (CRITERIO DE VELOCIDADES RECOMENDADAS A PARTIR \*

' \* \* \* \* DEL ÁREA SOMBRADA DE LA CARTA DE FRICCIÓN DEL HANDBOOK ASHRAE \* \* \* \* \*

3 V = 2200 '(FT/MIN)

V = V / 60 '(FT/SEG)

' \* \* \* \* CALCULO PARA LA ÚLTIMA SECCIÓN \* \* \* \*

Q = Q(N) '(FT^3/MIN)

PRINT "Q="; Q

Q = Q / 60 '(FT^3/SEG)

' \* \* \* \* CÁLCULO DEL DIÁMETRO EQUIVALENTE Y AJUSTE A UN DIÁMETRO NOMINAL

DEQ = SQR(4 / 3.1416 \* Q / V)

COLOR 13

PRINT "DEQ="; DEQ; "FT"

DEQM = DEQ \* .3048 'DEQ EN METROS

' PARA DUCTO CUADRADO

DNOM = DEQM / 1.09317

```

PRINT "DNOM="; DNOM; "M"
' * * * AJUSTE
IF DNOM > .38 AND DNOM < .42 THEN DNOMA = .4 ELSE
IF DNOM > .42 AND DNOM < .46 THEN DNOMA = .44 ELSE
IF DNOM > .46 AND DNOM < .525 THEN DNOMA = .48 ELSE
IF DNOM > .525 AND DNOM < .575 THEN DNOMA = .55 ELSE
IF DNOM > .575 AND DNOM < .625 THEN DNOMA = .6 ELSE
IF DNOM > .625 AND DNOM < .675 THEN DNOMA = .65 ELSE
IF DNOM > .675 AND DNOM < .725 THEN DNOMA = .7 ELSE
IF DNOM > .725 AND DNOM < .775 THEN DNOMA = .75 ELSE
IF DNOM > .775 AND DNOM < .825 THEN DNOMA = .8 ELSE
IF DNOM > .825 AND DNOM < .875 THEN DNOMA = .85 ELSE
IF DNOM > .875 AND DNOM < .925 THEN DNOMA = .9 ELSE
IF DNOM > .925 AND DNOM < .975 THEN DNOMA = .95 ELSE
IF DNOM > .975 AND DNOM < 1.025 THEN DNOMA = 1 ELSE
IF DNOM > 1.025 AND DNOM < 1.075 THEN DNOMA = 1.05 ELSE
IF DNOM > 1.075 AND DNOM < 1.125 THEN DNOMA = 1.1 ELSE
IF DNOM > 1.125 AND DNOM < 1.175 THEN DNOMA = 1.15 ELSE
IF DNOM > 1.175 AND DNOM < 1.225 THEN DNOMA = 1.2 ELSE
IF DNOM > 1.225 AND DNOM < 1.275 THEN DNOMA = 1.25 ELSE
IF DNOM > 1.275 AND DNOM < 1.325 THEN DNOMA = 1.3 ELSE
IF DNOM > 1.325 AND DNOM < 1.375 THEN DNOMA = 1.35 ELSE
PRINT "DNOM AJUSTADO="; DNOMA
' DIÁMETRO EQUIVALENTE CORREGIDO
DEQCM = DNOMA * 1.09317 ' (M)
DEQC = DEQCM / .3048 ' (FT)
PRINT "DIÁMETRO EQUIVALENTE CORREGIDO =" ; DEQC
' * * * * CÁLCULO DEL NÚMERO DE REYNOLDS * * *
RE = DEQC * V * RHO / VISC
COLOR 11
PRINT "REYNOLDS="; RE
'NEWTON RAPHSON PARA RESOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE COLEBROOK
PRINT " * * EVALUACIÓN DEL FACTOR DE FRICCIÓN MEDIANTE EL MCTODO DE NEWTON-RAPHSON"
E = .00015; DH = DEQC
COLOR 7
X0 = .001; X = X0
DEF FNF (X) = 1 / SQR(X) + 2 / 2.3 * LOG(12 * E / 3.7 / DH + 2.51 / RE / SQR(X))
DEF FND (X) = -1 / 2 / X / SQR(X) * (1 + 2.51 * 2.3 / RE / (12 * E / 3.7 / DH + 2.51 / RE / SQR(X)))

```

```

FOR I = 1 TO 100
X = X - FNF(X) / FND(X)
Y = FNF(X)
'PRINT "iteración = "; I
'PRINT "X="; X, "Y="; Y
IF ABS(Y) < .0000001 THEN 30
NEXT I
30 COLOR 14:
PRINT "FIN DE CONVERGENCIA"
COLOR 7
YGIL = -2 / 2.3 * LOG(12 * E / 3.7 / DH + 2.51 / RE / SQR(X))
YALE = 1 / SQR(X)
PRINT "x="; X
PRINT "yale="; YALE, "ygil="; YGIL
COLOR 14
'***** EL VALOR DEL FACTOR DE FRICCIÓN ES F = X *****
F = X
PRINT "F="; F
'*** CÁLCULO DE LA PÉRDIDA DE FRICCIÓN POR 100 FT DE TRAMO RECTO ***
DELTAP = F * 100 / DEQC * (60 * V / 4005) ^ 2
PRINT "DELTAP="; DELTAP; "IN DE AGUA POR CADA 100 FT DE TRAMO RECTO"
A = DNOMA
DEF FNF3 (X) = 1.3 * (A * X) ^ .625 / (A + X) ^ .25 - DECK
DEF FND3 (X) = 1.3 * (.625 * A * (A * X) ^ (-.375) / (A + X) ^ .25 - (A * X) ^ .625 / 4 / (A + X) ^ 1.25)
'***** CICLO PARA DETERMINAR LA ALTURA EN LAS OTRAS 7 ENTRADAS
DECK = 0
FOR J = 1 TO N - 1
DEQ(N - J) = (FRIC * (N - J) / N) ^ (2 / 5) * DEQCM
DECK = DEQ(N - J)
PRINT "DECK="; DECK
V(N - J) = 60 * V * ((N - J) / 8) ^ .2
'*** CÁLCULO DE LA ALTURA Y AJUSTE A UNA ALTURA COMERCIAL
X0 = .1: X = X0
A = DNOMA
FOR I = 1 TO 100
X = X - FNF3(X) / FND3(X)
Y = FNF3(X)
" PRINT "iteración = "; I

```

```
" PRINT "X="; X, "Y="; Y
IF ABS(Y) < .0000001 THEN 330
NEXT I
330 COLOR 3:
PRINT "FIN DE CONVERGENCIA"
COLOR 7
YGIL = 1.3 * (A * X) ^ .625 / (A + X) ^ .25
YALE = DECK
PRINT "x="; X, "A="; A
PRINT "CONV="; YALE / YGIL
B2 = X
B2(N - J) = X
COLOR 14
' * * * AJUSTE DE LA ALTURA
IF B2 > .175 AND B2 < .225 THEN B2A = .2 ELSE
IF B2 > .225 AND B2 < .275 THEN B2A = .3 ELSE
IF B2 > .275 AND B2 < .325 THEN B2A = .3 ELSE
IF B2 > .325 AND B2 < .375 THEN B2A = .35 ELSE
IF B2 > .375 AND B2 < .42 THEN B2A = .4 ELSE
IF B2 > .42 AND B2 < .46 THEN B2A = .44 ELSE
IF B2 > .46 AND B2 < .525 THEN B2A = .48 ELSE
IF B2 > .525 AND B2 < .575 THEN B2A = .55 ELSE
IF B2 > .575 AND B2 < .625 THEN B2A = .6 ELSE
IF B2 > .625 AND B2 < .675 THEN B2A = .65 ELSE
IF B2 > .675 AND B2 < .725 THEN B2A = .7 ELSE
IF B2 > .725 AND B2 < .775 THEN B2A = .75 ELSE
IF B2 > .775 AND B2 < .825 THEN B2A = .8 ELSE
IF B2 > .825 AND B2 < .875 THEN B2A = .85 ELSE
IF B2 > .875 AND B2 < .925 THEN B2A = .9 ELSE
IF B2 > .925 AND B2 < .975 THEN B2A = .95 ELSE
IF B2 > .975 AND B2 < 1.025 THEN B2A = 1 ELSE
IF B2 > 1.025 AND B2 < 1.075 THEN B2A = 1.05 ELSE
IF B2 > 1.075 AND B2 < 1.125 THEN B2A = 1.1 ELSE
IF B2 > 1.125 AND B2 < 1.175 THEN B2A = 1.15 ELSE
IF B2 > 1.175 AND B2 < 1.225 THEN B2A = 1.2 ELSE
IF B2 > 1.225 AND B2 < 1.275 THEN B2A = 1.25 ELSE
IF B2 > 1.275 AND B2 < 1.325 THEN B2A = 1.3 ELSE
IF B2 > 1.325 AND B2 < 1.375 THEN B2A = 1.35 ELSE
```

```

B2A(N - J) = B2A
PRINT "B2A"; N - J; "="; B2A
DEQCM(N - J) = 1.3 * (B2A(N - J) * A) ^ .625 / (B2A(N - J) + A) ^ .25
DEQC(N - J) = DEQCM(N - J) / .3048 'FT
REY = DEQC(N - J) * V(N - J) * RHO / VISC
COLOR 15:
PRINT "DEQC"; N - J; DEQC(N - J); "M", "VELOCIDAD="; V(N - J), "REY="; REY
'NEWTON RAPHSON PARA RESOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE COLEBROOK
' * * EVALUACIÓN DEL FACTOR DE FRICCIÓN MEDIANTE EL MÓTODO DE NEWTON-RAPHSON"
E = .00015: DH = DEQC(N - J): RE = REY
COLOR 7
X0 = .001: X = X0
FOR I = 1 TO 100
X = X - FNF(X) / FND(X)
Y = FNF(X)
'PRINT "iteración = "; I
'PRINT "X="; X, "Y="; Y
IF ABS(Y) < .0000001 THEN 430
NEXT I
430 COLOR 14:
PRINT "FIN DE CONVERGENCIA"
COLOR 7
YGIL = -2 / 2.3 * LOG(12 * E / 3.7 / DH + 2.51 / RE / SQR(X))
YALE = 1 / SQR(X)
F(N - J) = X
PRINT "CONV="; YALE / YGIL
IF YALE / YGIL <> 1 THEN BEEP
PRINT "F="; X
NEXT J
COLOR 14
CLS
DELTAP(N) = DELTAP: DEQCM(N) = DEQCM: V(N) = V * 60: F(N) = F: DEQC(N) = DEQC
COLOR 12
FOR K = 1 TO N
COLOR K + 1
PRINT "DEQC"; K; "="; DEQCM(K); "M", "VELOC="; V(K), "F="; F(K)
PRINT "ANCHO="; A, "ALTURA="; B2A(K)

```

```

*** CÁLCULO DE LA PÉRDIDA DE FRICCIÓN POR 100 FT DE TRAMO RECTO **
DELTAP(K) = F(K) * 100 / DEQC(K) * (V(K) / 4005) ^ 2
PRINT "DELTAP="; DELTAP(K); "IN DE AGUA POR CADA 100 FT DE TRAMO RECTO"
NEXT K
COLOR 14
COLOR 14
'CÁLCULO DE CAIDA DE PRESIÓN EN ACCESORIOS
FOR I = 1 TO N
** 1 ENTRADA CON REJILLA
*** X TOMA EL VALOR DE LA PROPORCIÓN (ÁREA LIBRE DE LA REJILLA/ÁREA TOTAL DEL DUCTO
X = .7
FRICC = -124.2235 * X ^ 3 + 226.4388 * X ^ 2 - 142.0429 * X + 31.53279
DELTAP1(I) = FRICC * (V(I) / 4005) ^ 2
PRINT "DELTAP1"; "(I; I; I)"; DELTAP1(I),
PRINT "V"; I; "="; V(I) / X / 60
*** UNA TEE PARA LA CONFLUENCIAS DE FLUJOS DESPUES DE LA REJILLA ***
FRICCN = .6
DELTAP4(I) = FRICCN * (V(I) / 4005) ^ 2
PRINT "DELTAP4(I; I; I)"; DELTAP4(I)
NEXT I
LONGDIV = .3
FOR I = 1 TO N - 1
ALFA = ATN((-DEQCM(I) + DEQCM(I + 1)) / LONGDIV) * 180 / 3.1416
COEFI(I) = DEQCM(I) / DEQCM(I + 1)
PRINT "COEF"; I; "="; COEFI(I), "ANGULO="; ALFA,
X = COEFI(I)
PEND = -1.845511E-02 * X ^ 3 + 1.567823E-02 * X ^ 2 - 3.355194E-02 * X + 3.620012E-02
FRICC2(I) = PEND * ALFA
DELTAP2(I) = FRICC2(I) * (V(I) / 4005) ^ 2
PRINT "DELTAP2"; I; "="; DELTAP2(I)
NEXT I
CLS
*** DETERMINACIÓN DE LA CAÍDA DE PRESIÓN TOTAL
' SUMA DE CAÍDAS DE PRESIÓN POR TRAMO RECTO Y ACCESORIOS EN CADA SECCIÓN
4 LTR = 8 'METROS
FOR I = 1 TO N
DELTAPTR(I) = DELTAP(I) * LTR / .3048 / 100

```

```

SUM1 = SUM1 + DELTAPTR(I)
SUM2 = SUM2 + DELTAP1(I) + DELTAP4(I)
SUM3 = SUM3 + DELTAP2(I)
SUMTOT(I) = DELTAPTR(I) + DELTAP1(I) + DELTAP2(I)
COLOR 15: PRINT "SUMTOT"; I, "=", SUMTOT(I)
COLOR 14
NEXT I
PRINT "CAÍDA DE PRESIÓN EN TRAMO RECTO HORIZONTAL TOTAL="; SUM1
PRINT "CAÍDA DE PRESIÓN TOTAL EN ENTRADA CON REJILLA="; SUM2
PRINT "CAÍDA DE PRESIÓN TOTAL EN EXPANSIONES DE AREA="; SUM3
SUMT = SUM1 + SUM2 + SUM3
PRINT "CAÍDA DE PRESIÓN EN TRAMO RECTO HORIZONTAL="; SUMT
' CAÍDA DE PRESIÓN EN EL SOBRENTE DE TRAMO HORIZONTAL, RAMAL HACIA EL TRAMO VERTICAL
5 LSOBRA = 3 'METROS
DELTAPSH = LSOBRA * DELTAP(N) / .3048
PRINT "DELTAP SOBRENTE HORIZONTAL="; DELTAPSH
' CODO DE 90° EN CUATRO PARTES (R/D=X=1)
X = 1
FRICC3 = -.8976004 * X ^ 3 + 2.2549 * X ^ 2 - 2.067112 * X + .9496198
DELTAPC = FRICC3 * (V(N) / 4005) ^ 2
PRINT "DELTAP EN CODO EN CUATRO PARTES="; DELTAPC
' * * * CAÍDA DE PRESIÓN EN TRAMO VERTICAL:
6 ALTURA = 20
DELTAPTV = DELTAP(N) * ALTURA / .3048 / 100
PRINT "DELTAP EN TRAMO VERTICAL="; DELTAPTV
' CAÍDA DE PRESIÓN EN LA SALIDA POR EL TEJADO
FRICC4 = -8.222072 * X ^ 3 + 22.13085 * X ^ 2 - 20.10327 * X + 7.272936
DELTAPST = FRICC4 * (V(N) / 4005) ^ 2
PRINT "DELTAP EN LA SALIDA POR EL TEJADO="; DELTAPST
DELTAPG = DELTAPST + DELTAPTV + DELTAPC + DELTAPSH + SUMT
COLOR 3
' * * * DELTA DE ENERGÍA CINÉTICA * * * *
' * * * VELOCIDAD DE ENTRADA PROMEDIO
FOR I = 1 TO N
VSUM = V(I) + VSUM
NEXT I
VPROM = VSUM / N
ECINENT = (VPROM / 4005) ^ 2

```

ECINSAL = (V(N) / 4005) ^ 2

DIFEC = ECINSAL - ECINENT

PRINT "CAÍDA DE PRESIÓN POR VARIACIÓN DE LA ENERGÍA CINÉTICA ="; DIFEC

DELTAPG = DELTAPG + DIFEC

PRINT "CAÍDA DE PRESIÓN TOTAL EN EL SISTEMA DE VENTILACIÓN="; DELTAPG; "PULGADAS DE AGUA"

## **CAPÍTULO III**

### **Transferencia de Calor**

#### **INTRODUCCIÓN**

El calor se define como la transferencia de energía de un cuerpo o sistema a otro, debido a una diferencia de temperaturas entre dichos cuerpos o sistemas. El calor fluye espontáneamente de un sistema de alta temperatura a uno de menor temperatura.

Si se desea transferir calor de un sistema de baja temperatura o otro de mayor temperatura se tendrá que adicionar trabajo, tal y como lo indica la segunda ley de la termodinámica.

En toda la industria de procesamiento de materiales es necesario calentar o enfriar sustancias, ya sea para preservarlas o para cambiar el estado físico o químico de las mismas; debido a ello la transferencia de energía en forma de calor es una operación frecuentemente utilizada en todas las fases del trabajo ingenieril.

#### **MECANISMOS DE TRANSFERENCIA DE CALOR**

Hay tres formas diferentes en las que el calor puede pasar de la fuente al receptor, aun cuando muchas de las aplicaciones en la ingeniería son combinaciones de dos o tres. Estas son, conducción, convección y radiación.

**Conducción** El fenómeno de transferencia de calor por conducción es un proceso de propagación de energía en un medio sólido o gaseoso mediante comunicación molecular interna o entre cuerpos a distintas temperaturas. La conducción es la transferencia de calor a través de un material fijo. La dirección del flujo de calor es la de gradiente del temperatura.

**Convección.** La convección es la transferencia de calor entre partes relativamente calientes y frías de un fluido por medio de mezcla. Supóngase que un recipiente con un líquido se coloca sobre una llama caliente. El líquido que se encuentra en el fondo del recipiente se calienta y se vuelve menos denso que antes, debido a su expansión térmica.

El líquido adyacente al fondo también es menos denso que la porción superior fría y asciende a través de ella. La transferencia de calor desde el fondo del recipiente por ascenso de corrientes calientes y hundimiento de corrientes frías se conoce como convección natural o convección libre. Si se produce cualquiera otra corriente, tal como la provocada por un agitador, el proceso es de convección forzada

**Radiación.** La radiación involucra la transferencia de energía radiante desde una fuente a un receptor por efecto de resonancia electromagnética. Parte de la energía se absorbe por el receptor, parte es transmitida y otra parte es reflejada por él.

### **CAPACIDAD CALORÍFICA.**

La capacidad calorífica de los cuerpos está en función de su estado de agregación y de la temperatura. Normalmente se usan ajustes polinomiales para expresar la dependencia del  $C_p$  en la temperatura, a ese tipo de modelos se les conoce como ecuaciones viriales. En los gases la capacidad calorífica a presión constante se representa por:

$$C_p = a + bT + cT^2 \quad (1)$$

en donde :

$C_p$  = capacidad calorífica molar a presión constante en Kcal/Kmol<sup>o</sup>k.

a, b, c, = constantes específicas de cada sustancia.

T = temperatura <sup>o</sup>K.

### **INTERCAMBIADORES DE TUBO Y CORAZA: FLUJO 1-2 CONTRACORRIENTE-PARALELO**

**El elemento tubular.** La satisfacción de muchas demandas industriales requiere el uso de un gran número de horquillas de doble tubo. Estas consumen considerable área superficial así como presentan un número considerable de puntos en los cuales puede haber fugas. Cuando se requieren superficies grandes de transferencia de calor, pueden ser mejor obtenidas por medio de equipo de tubo y coraza.

El equipo de tubo y coraza involucra la expansión de un tubo en un espejo y la formación de un sello que no fuga bajo condiciones razonables de operación. En el espejo se perfora un orificio cuyo diámetro es apenas mayor que el diámetro exterior del tubo. Se coloca el tubo dentro del orificio, y se inserta un rolador en el final del tubo. El rolador es un mandril rotatorio que tiene conicidad pequeña. Es capaz de exceder el límite elástico del metal del tubo y transformarlo a una condición semiplástica, de manera que se escurra hasta las hendeduras y forme así un sello perfecto. El rolado de los tubos es un arte, ya que el tubo puede dañarse si se rola hasta adelgazarlo demasiado, de manera que el sello tiene poca resistencia estructural.

En algunos usos industriales es deseable instalar tubos en el espejo, de manera que puedan ser fácilmente removidos. En la práctica, los tubos se empaquetan en el espejo mediante casquillos, y usando anillos de metal suave como empaques.

**Tubos para intercambiadores de calor.** Los tubos para intercambiadores de calor también se conoce como tubos para condensador y no deberán confundirse con tubos de acero u otro tipo de tubería obtenida por extrusión a tamaños normales de tubería de hierro. El diámetro exterior de los tubos para condensador o intercambiador de calor, es el diámetro exterior real en pulgadas dentro de tolerancias muy estrictas. Estos tubos para intercambiador se encuentran disponibles en varios metales, los que incluyen acero, cobre, admiralty, metal Muntz, latón, 70-30 cobre-níquel, aluminio-bronce, aluminio y aceros inoxidables. Se pueden obtener en diferentes grosores de pared, definidos por el calibrador Birmingham para alambre, que en la práctica se refiere como el calibrador BWG del tubo.

**Espaciado de los tubos.** Los orificios para los tubos no pueden taladrarse muy cerca uno de otro, ya que una franja demasiado estrecha de metal entre los tubos adyacentes, debilita estructuralmente el cabezal de tubos o espejo.

La distancia más corta entre dos orificios adyacentes es el claro o ligadura, y éstos a la fecha, son casi estándar.

Los tubos se colocan en arreglos ya sea triangulares o cuadrados. La ventaja del espaciado cuadrado es que los tubos son accesibles para limpieza externa y tienen pequeña caída de presión cuando el fluido fluye en la dirección indicada.

El espaciado de los tubos  $P_t$  es la distancia menor de centro a centro en tubos adyacentes. Los espaciados más comunes para arreglos cuadrados son de 3/4 plg DE en un espaciado cuadrado de 1 plg y de 1 plg DE en un espaciado en cuadro de 1 1/4 plg. Para arreglos triangulares éstos son, de 3/4 plg DE en espaciado triangular de 15/16 plg, 3/4 plg DE en un arreglo triangular de 1 plg, y 1 plg DE en un arreglo triangular 11/4 plg. Si los tubos se separan suficientemente, es posible dejar los pasajes indicados para limpieza.

**Corazas.** Las corazas hasta de 12 plg de diámetro IPS se fabrican de tubo de acero, Sobre 12 e incluyendo 24 plg el diámetro exterior real y el diámetro nominal del tubo son los mismos. El grueso estándar para corazas con diámetros interiores de 12 a 24 plg inclusive, es de 3/8 plg, lo que es satisfactorio para presiones de operación por el lado de la coraza hasta de 300 lb/plg. Se pueden obtener mayores grosores para presiones superiores. Las corazas mayores de 24 plg de diámetro se fabrican rotando placa de acero.

**Deflectores.** Es claro que se logran coeficientes de transferencia de calor más altos cuando el líquido se mantiene en estado de turbulencia. Para inducir turbulencia fuera de los tubos, es costumbre emplear deflectores que hacen que el líquido fluya a través de la coraza a ángulos rectos con el eje de los tubos. Esto causa considerable turbulencia aun cuando por la coraza fluya una cantidad pequeña de líquido. La distancia centro a centro entre los deflectores se llama **espacio de deflectores**. Puesto que los deflectores pueden espaciarse ya sea muy junto o muy separado, la masa velocidad no depende enteramente del diámetro de la coraza. Usualmente el espaciado de los deflectores no es mayor que una distancia igual al diámetro interior de la coraza, o menor que una distancia igual a un quinto del diámetro interior de la coraza. Los deflectores se mantienen firmemente mediante espaciadores, que consisten de un pasador atornillado en el cabezal de tubos o espejo y un cierto número de trozos de tubo que forman hombreras entre deflectores adyacentes.

Hay varios tipos de deflectores que se emplean en los intercambiadores de calor, pero los más comunes son los deflectores segmentados. Los deflectores segmentados son hojas de metal perforadas cuyas alturas son generalmente un 75% del diámetro interior de la coraza. Estos se conocen como deflectores con 25% de corte y serán usados a través de esta tesis, aun cuando otros deflectores fraccionales se empleen también en la industria. Una recopilación excelente de la influencia del corte de los deflectores en el coeficiente de transferencia de calor ha sido presentada por Donohue. Pueden ser arreglados, como se muestra, para flujo "arriba y abajo" o pueden ser rotados 90° para un flujo "lado con lado", este último es deseable cuando a través de la coraza fluye una mezcla de líquido y gas. Es el espaciado del deflector y no el 25% de su corte, el que determina, como se mostrará después, la velocidad efectiva del fluido en la coraza.

Otros tipos de deflectores son el de Disco y corona y el deflector de orificio . Aún cuando algunas veces se emplean otros tipos, no son de importancia general.

### Algoritmo computacional para el Programa

EXCHANGE es un programa computacional para el dimensionamiento de intercambiadores de calor del tipo tubos y coraza en donde no existe cambio de fase. Es importante mencionar que EXCHANGE no es un programa de diseño si no únicamente de calculo de variables importantes en un intercambiador del tipo antes mencionado. Este programa es interactivo ya que permite el cambio de parámetros con facilidad y hacer un recálculo de los resultados basados en la nueva información que le proporcione el usuario en el momento de la ejecución, leídos simultáneamente de graficas.

El programa está diseñado para calcular coeficientes de transferencia de calor, caídas de presión, factores de aproximación de temperatura para varios pasos por tubos y multipasos por el lado de la coraza

El cálculo del área de transferencia de calor se basa en el diámetro externo (OD) de la tubería.

La caída de presión por el lado de coraza y el coeficiente de transferencia de calor asume segmentos de baffles con un 25% de corte de baffle.

La información proveniente del programa EXCHANGE tiende a ser conservadora y su factor de seguridad es de 10 - 15% .

Ecuaciones usadas para el programa Exchange.

Lado de tubos.

Área

$$A1 = \left[ \pi (ID/12)^2 \times NT / 4 \right] / N \quad (2)$$

Gasto Másico

$$G1 = W1 / A1 \quad (3)$$

Reynolds

$$R1 = (ID / 12) * G1 / (V1 * 2.42) \quad (4)$$

Prandtl

$$P1 = C1 * V1 * 2.42 / K1 \quad (5)$$

Coefficiente Convectivo

$$H1 = .027 K1 * ID / 12 * R1^{0.8} * P1^{0.333} \quad (6)$$

Factor de Incrustación

$$F1 = 0.048 / (144 * R1^{0.2}) \quad (7)$$

Velocidad Total

$$VT = W1 / (D1 * A1 * 3600) \quad (8)$$

Caídas de Presión

Tubos

$$\Delta P_1 = F1 * L * N (G1 / 3600)^2 / (64.4 * D1 * ID / 12) \quad (9)$$

Coraza

$$\Delta P_2 = 4 * N * VT^2 * D1 / (64.4 * 144) \quad (10)$$

Total

$$\Delta P_T = [\Delta P_1 + \Delta P_2] * NS \quad (11)$$

Lado de Coraza

Pitch Cuadrado

$$DE = (4 / P^2 - \pi * OD^2 / 4) / (\pi * OD * 12) \quad (12)$$

Pitch Triangular

$$DE = (0.43 * P^2 - 0.5\pi * OD^2 / 4) * 4 / (\pi * OD * 12 / 2) \quad (13)$$

Área

$$AS = DS * C * B / (P * 144) \quad (14)$$

Gasto Másico

$$GS = W2 / AS \quad (15)$$

Velocidad

$$VS = W2 / (AS * D2 * 3600) \quad (16)$$

Reynolds

$$R2 = DE * GS / (V2 * 2.42) \quad (17)$$

Prandtl

$$P2 = C2 * VS * 2.42 / K2 \quad (18)$$

## Coeficiente Convectivo

$$H2 = 0.36K2 / DE * R^{0.55} * P2^{0.333} \quad (19)$$

$$\text{if } R2 > 500, F2 = 0.009287 * R2^{-0.15977}$$

$$\text{if } R2 > 500, F2 = 0.77338 * R2^{0.8774}$$

$$PS = [F2 * (GS / 3600)^2 * DS / 12 * (NB + L)] * NS / (64.4 * DE * D2) \quad (20)$$

## Coeficientes de Transferencia de Calor

$$U = 1 / (1 / H1 + 1 / H2 + FT + FS) \quad (21)$$

## LMTD

$$LMTD = ABS\{[(T3 - T2) - (T4 - T1)] / \ln[(T3 - T2) / (T4 - T1)]\} \quad (22)$$

## Factor de Aproximación

$$S = (T2 - T1) / (T3 - T1) \quad (23)$$

$$R = (T3 - T4) / (T2 - T1) \quad (24)$$

$$X = [(R * S - 1) / (S - 1)]^{1/NS} \quad (25)$$

$$PX = (1 - X) / (R - X) \quad (26)$$

$$X1 = \text{sqr}(R^2 + 1) \quad (27)$$

$$X2 = \ln\{(1 - PX) / (1 - R * PX)\} \quad (28)$$

$$X3 = 2 / PX - 1 - R + X1 \quad (29)$$

$$X4 = 2 / PX - 1 - R - X1 \quad (30)$$

$$X5 = \ln(X3 / X4) \quad (31)$$

$$FC = X1 * X2 / [(R - 1) * X5] \quad (32)$$

Carga Térmica

$$Q = W1 * C1 * ABS(T1 - T2) \quad (33)$$

Transferencia de Calor

$$Q1 = A2 * U * LMTD * FC \quad (34)$$

$$A2 = OD / 12 * \Pi * NT * NS * L \quad (35)$$

Se selecciona el programa EXCHANGE de la misma forma que los anteriores.

Ejemplo de ingreso de datos.

El programa se ejecuta con la tecla F5 o siguiendo las instrucciones siguientes:

- 1.- Ejecutar
- 2.- Iniciar

En donde se ingresaran los siguientes datos.

Escriba el nombre del problema? **Intercambiador de tubos y coraza**

No. De Tubos, ID, OD, Pitch? **102,,680,,75,1.0**

Pitch Cuadrado(C) Triangular(T)? **T**

Longitud de tubos, No de pasos? **10,2**

Nombre del fluido , Factor de incrustación? **Agua,,0005**

Temp. de entrada, Temp. de salida, calor específico? **85,100,1**

Viscosidad, Densidad? **1,62.3**

Conductividad térmica? **.345**

Flujo másico? **100000**

No de pasos por la coraza, diámetro de la coraza? **1,12**

No de baffles, espaciamiento entre baffles? **30,4**

Nombre del fluido, factor de incrustación? **Aceite,,001**

Temp. de entrada, Temp. de salida, calor específico? **300,150,0.5**

Viscosidad, Densidad? **2.50,45.0**

Conductividad térmica? **.065**

Flujo másico? **20000**

Quieres hacer algún cambio(S/N)? **N**

Los resultados que se obtienen serán los siguientes.

Sistema	Intercambiador de Tubos y Coraza	
Area de la unidad	200.255	
Número de pasos por la coraza	1	
Número de pasos por los tubos	2	
Número de tubos/unidad	102	
Pitch	Triangular (T)	
Cociente de diámetro interior a exterior ID/OD	.68/.75	
Lado del flujo	Tubos	Coraza
Fluido	Agua	Aceite
(lbs/hr)	100000	20000
Conductividad Térmica	.345	.065
Calor Específico	1	.5
Densidad	62.3	45
Viscosidad (CP)	1	2.5
Temp. de Entrada	85	300
Temp de Salida	100	150
Velocidad(ft/seg)	3.46689	1.48148
Caída de Presión(PSI)	.838282	2.1591
Num. de Prandtl	7.01449	46.5385
Num. de Reynolds	18207.2	2347.56
(h-Btu/hr-ft <sup>2</sup> -f)	804.876	101.466
Factor de Fricción	5E-04	1E-3
Coefficiente Global	79.3779	
LMTD	120.114	
LMTD Corregida	116.708	
Factor de Aproximación	.971638	
Carga Térmica	1.5E+06	
Diámetro de la Coraza (IN)	12	
Londitud de Tubos (FT)	10	
Transferencia de Calor	1.85537E+06	
Espaciamiento entre Baffles	4	
No de Baffles	30	

De manera comparativa se hacen los cálculos empleando un diferente fluido de transferencia de tal forma que el alumno pueda formar sus propios criterios al comparar ambos resultados.

Partiendo del hecho que el intercambiador es el mismo en diseño y lo único que se cambia es el fluido en la coraza es decir el fluido que enfría. Entonces al correr el programa escribimos.

Escriba el nombre del problema? **Intercambiador de tubos y coraza comparativo**

No. De Tubos, ID, OD, Pitch? **102,.680,.75,1.0**

Pitch Cuadrado(C) Triangular(T)? **T**

Longitud de tubos, No de pasos? **10,2**

Nombre del fluido , Factor de incrustación? **Agua,.0005**

Temp. de entrada, Temp. de salida, calor específico? **85,100,1**

Viscosidad, Densidad? **1,62.3**

Conductividad térmica? **.345**

Flujo másico? **100000**

No de pasos por la coraza, diámetro de la coraza? **1,12**

No de baffles, espaciamento entre baffles? **30,4**

Nombre del fluido, factor de incrustación? **Aceite 30W40,.0016**

Temp. de entrada, Temp. de salida, calor específico? **300,150,0.53**

Viscosidad, Densidad? **2.30,48.0**

Conductividad térmica? **.072**

Flujo másico? **20000**

Quieres hacer algún cambio(S/N)? **N**

Los resultados que se obtienen serán los siguientes:

Sistema	Intercambiador de Tubos y Coraza	
Área de la unidad	200.255	
Número de pasos por la coraza	1	
Número de pasos por los tubos	2	
Número de tubos/unidad	102	
Pitch	Triangular (T)	
Cociente de diámetro interior a exterior ID/OD	.68/.75	
Lado del flujo	Tubos	Coraza
Fluido	Agua	Aceite 30w40
(lbs/hr)	100000	20000
Conductividad Térmica	.345	.072

Calor Específico	1	.53
Densidad	62.3	48
Viscosidad (CP)	1	2.3
Temp. de Entrada	85	300
Temp de Salida	100	150
Velocidad(ft/seg)	3.46689	1.38847
Caída de Presión(PSI)	.838282	1.9978
Núm. de Prandtl	7.01449	40.9719
Núm. de Reynolds	18207.2	2551.125
(h-Btu/hr-ft <sup>2</sup> -f)	804.876	112.7799
Factor de Fricción	5E-04	1.6E-3
Coefficiente Global	81.90509	
LMTD	120.114	
LMTD Corregida	116.708	
Factor de Aproximacion	.971638	
Carga Térmica	1.5E+06	
Diámetro de la Coraza (IN)	12	
Longitud de Tubos (FT)	10	
Transferencia de Calor	1.914336+06	
Espaciamiento entre Baffles	4	
No de Baffles	30	

Una vez teniendo los resultados de ambos ejercicios podemos observar que las variables de:

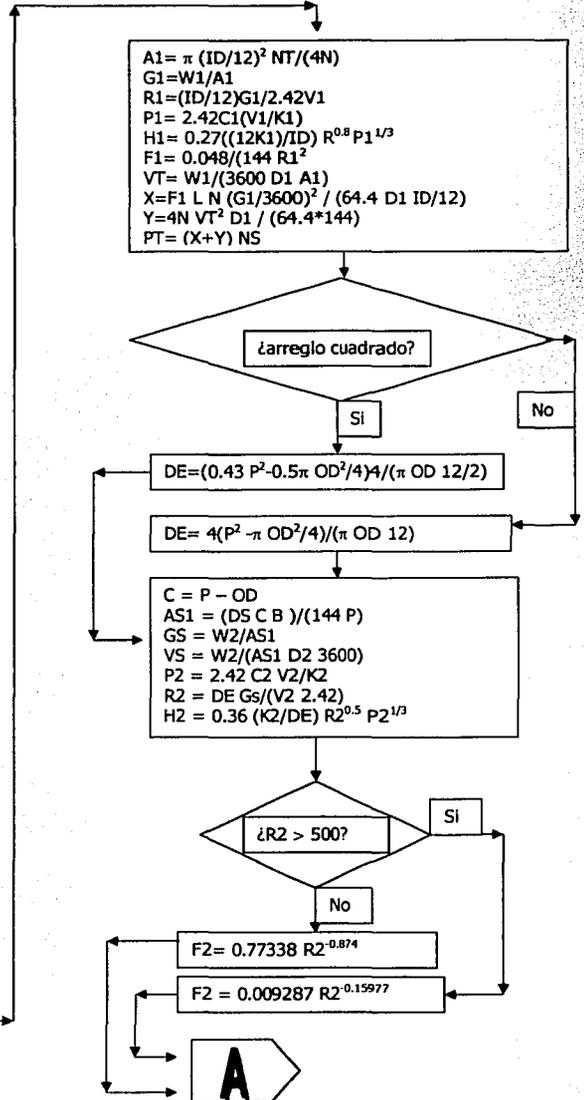
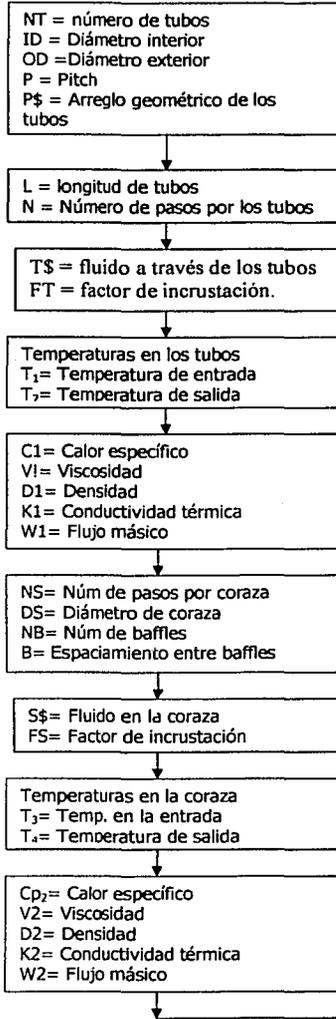
- Velocidad
- Caídas de presión de ambos lados
- Números de Prandtl
- Números de Reynolds
- Coeficiente global
- Transferencia total

Son variables de importancia que podrían tener repercusión en la selección del fluido de transferencia, es en donde, el alumno puede visualizar de una manera rápida y sin tener que recalcular el problema, cual de los fluidos elegir sin temor a equivocarse.

Del mismo modo se pueden hacer diferentes pruebas cambiando fluidos, temperaturas de entrada y/o de salida, espaciamiento de baffles, pitch, diámetros tanto de tubos como de coraza, longitud de tubos, pasos en tubos y también en coraza ... etc siendo el programa de gran ayuda para disminuir el tiempo que el alumno tarda en formar sus criterios y a su vez facilite su aprendizaje.

En cuanto a las limitantes del programa están en base a la congruencia de los datos, ya que la falta de ello provocará que el sistema se interrumpa, enviando al usuario a la instrucción donde se cometió el error.

## Diagrama de Bloques





$$PS = F2(GS/3600)^2 (DS/12)(NB+1)NS/(64.4 DE D2)$$

$$V = 1/(1/H1 + 1/H2+FT+FS)$$

¿N = 1?

Si

No

$$S = (T_2 - T_1) / (T_3 - T_4)$$

$$R = (T_3 - T_4) / (T_2 - T_1)$$

¿R=1

Si

$$R = 1.00001$$

No

$$X = ((RS-1)/(S-1))^{1/NS}$$

$$PX = (1-x)/(R-x)$$

$$X1 = \sqrt{R^2 + 1}$$

$$X2 = \ln((1-PX)/(1-R PX))$$

$$X3 = 2/PX - 1 - R + X1$$

$$X4 = 2/PX - 1 - R - X1$$

$$X5 = \ln(X3/X4)$$

$$FC = X1 X2 / ((R-1)X5)$$

$$LMTD = (ABS(T_3 - T_2) - (T_4 - T_1)) / \ln((T_3 - T_2) / (T_4 - T_1))$$

¿N=1?

Si

$$FC = 1$$

No

$$Q = W1 C1 ABS(T_1 - T_2)$$

$$A2 = (OD/12)\pi NT NS L$$

Impresión de Resultados

## Listado del Programa

```

10 CLS : PI = 3.1416
20 PRINT "INTERCAMBIADORES DE CALOR DE TUBOS Y CORAZA"
30 PRINT "TIPO DE INTERCAMBIADOR A EVALUAR:"
40 PRINT "1. A CONTRACORRIENTE CON CONVECCIÓN FORZADA"
50 PRINT "2. SIN CAMBIO DE FASE"
60 INPUT "TÍTULO DEL PROBLEMA"; TITULO$
70 GOSUB 700
80 GOSUB 760
90 GOSUB 790
100 GOSUB 820
110 GOSUB 850
120 GOSUB 890
130 GOSUB 930
140 GOSUB 960
150 GOSUB 990
160 GOSUB 1020
170 GOSUB 1050
180 GOSUB 1080
190 GOSUB 1120
200 GOSUB 1150
210 GOSUB 1180
220 CLS
230 INPUT "DESEA HACER ALGÚN CAMBIO(S/N)"; A$
240 IF A$ = "S" THEN GOSUB 1540
250 A1 = PI * (ID / 12) ^ 2 * NT / 4 / N
260 G1 = W1 / A1
270 R1 = (ID / 12) * G1 / (V1 * 2.42)
280 P1 = C1 * 2.42 * V1 / K1
290 H1 = .027 * K1 * 12 / ID * R1 ^ .8 * P1 ^ .333
300 F1 = .048 / (144 * R1 ^ .2)
310 VT = W1 / (D1 * A1 * 3600)
320 X = F1 * L * N * (G1 / 3600) ^ 2 / (64.4 * D1 * ID / 12)
330 Y = 4 * N * VT ^ 2 * D1 / (64.4 * 144)
340 PT = (X + Y) * NS
350 IF P$ = "S" THEN 380
360 DE = (.43 * P ^ 2 - .5 * PI * OD ^ 2 / 4) * 4 / (PI * OD * 12 / 2)

```

```

370 GOTO 400
380 DE = 4 * (P ^ 2 - PI * OD ^ 2 / 4) / (PI * OD * 12)
390 REM
400 C = P - OD
410 AS1 = (DS * C * B) / (P * 144)
420 GS = W2 / AS1; VS = W2 / (AS1 * D2 * 3600)
430 P2 = C2 * 2.42 * V2 / K2
440 R2 = DE * GS / (V2 * 2.42)
450 H2 = .36 * K2 / DE * R2 ^ .55 * P2 ^ .333
460 IF R2 > 500 THEN 490
470 F2 = .77338 * R2 ^ -.8774
480 GOTO 500
490 F2 = .009287 * R2 ^ -.15977
500 REM
510 PS = (F2 * (GS / 3600) ^ 2 * DS / 12 * (NB + 1)) * NS / (64.4 * DE * D2)
520 U = 1 / (1 / H1 + 1 / H2 + FT + FS)
530 IF N = 1 THEN 650
540 S = (T2 - T1) / (T3 - T1)
550 R = (T3 - T4) / (T2 - T1)
560 IF R = 1 THEN R = 1.00001
570 X = ((R * S - 1) / (S - 1)) ^ (1 / NS)
580 PX = (1 - X) / (R - X)
590 X1 = SQR(R ^ 2 + 1)
600 X2 = LOG((1 - PX) / (1 - R * PX))
610 X3 = 2 / PX - 1 - R + X1
620 X4 = 2 / PX - 1 - R - X1
630 X5 = LOG(X3 / X4)
640 FC = X1 * X2 / ((R - 1) * X5)
650 LMTD = ABS(((T3 - T2) - (T4 - T1)) / LOG((T3 - T2) / (T4 - T1)))
660 IF N = 1 THEN FC = 1
670 Q = W1 * C1 * ABS(T1 - T2)
680 A2 = OD / 12 * PI * NT * NS * L
690 GOTO 1210
700 CLS
710 PRINT "NUM DE TUBOS="; NT
720 PRINT "PROPORCIÓN DE DIÁMETROS INTERIOR Y EXTERIOR DE LOS TUBOS,ID/OD:"; ID; "/" ; OD
730 PRINT "PITCH(IN)="; P
740 INPUT "NUM DE TUBOS,ID,OD,PITCH"; NT, ID, OD, P

```

```
750 CLS : RETURN
760 CLS : IF P$ = "C" THEN PRINT "PITCH = CUADRADO" ELSE PRINT "PITCH=TRIANGULAR"
770 INPUT "CUADRADO(C) OR TRIANGULAR (T) PITCH"; P$
780 CLS : RETURN
790 CLS : PRINT "LONGITUD DEL TUBO(FT)="; L: PRINT "NUMERO DE PASOS="; N
800 INPUT "LONGITUD DEL TUBO, No. OF PASOS"; L, N
810 CLS : RETURN
820 CLS : PRINT "FLUIDO EN EL TUBO:"; T$: PRINT "FACTOR DE INCRUSTACIÓN="; FT
830 INPUT "NOMBRE DEL FLUIDO, FACTOR DE INCRUSTACIÓN"; T$, FT
840 CLS : RETURN
850 CLS : PRINT "TEMPERATURA DE ENTRADA (F)="; T1: PRINT "TEMP DE SALIDA (F)="; T2
860 PRINT "CALOR ESPECÍFICO(BTU/LB-F)="; C1
870 INPUT "TEMPERATURA DE ENTRADA, TEMP DE SALIDA, CALOR ESPECÍFICO"; T1, T2, C1
880 CLS : RETURN
890 CLS : PRINT "VISCOSIDAD (CP)="; V1
900 PRINT "DENSIDAD (LB/FT3)="; D1
910 INPUT "VISCOSIDAD, DENSIDAD"; V1, D1
920 CLS : RETURN
930 CLS : PRINT "CONDUCTIVIDAD TERMICA (BTU/FT-HR-F)="; K1
940 INPUT " CONDUCTIVIDAD TÉRMICA"; K1
950 CLS : RETURN
960 CLS : PRINT "FLUJO MÁSIICO (LB/HR)="; W1

970 INPUT "FLUJO MASICO"; W1
980 CLS : RETURN
990 CLS : PRINT "PASOS POR LA CORAZA="; NS: PRINT "DIÁMETRO DE LA CORAZA (INCHES)="; DS
1000 INPUT "NUM DE PASOS POR LA CORAZA, DIÁMETRO INTERIOR DE LA CORAZA"; NS, DS
1010 CLS : RETURN
1020 CLS : PRINT "No. OF BAFLESS="; NB: PRINT "ESPACIAMIENTO ENTRE BAFFLES (INCHES)="; B
1030 INPUT "No. OF BAFFLES, ESPACIAMIENTO ENTRE BAFFLES "; NB, B
1040 CLS : RETURN
1050 CLS : PRINT " FLUIDO EN LA CORAZA:"; S$: PRINT "FACTOR DE INCRUSTACIÓN ="; FS
1060 INPUT "NOMBRE DEL FLUIDO, FACTOR DE INCRUSTACIÓN"; S$, FS
1070 CLS : RETURN
1080 CLS : PRINT "TEMP DE ENTRADA (F)="; T3: PRINT "TEMP DE SALIDA (F)="; T4
1090 PRINT "CALOR ESPECÍFICO (BTU/LB-F)="; C2
1100 INPUT " TEMP DE ENTRADA, TEMP DE SALIDA, CALOR ESPECÍFICO"; T3, T4, C2
1110 CLS : RETURN
```

```
1120 CLS : PRINT "VISCOSIDAD(CP)="; V2: PRINT "DENSIDAD(LB/FT3)="; D2
1130 INPUT "VISCOSIDAD,DENSIDAD"; V2, D2
1140 CLS : RETURN
1150 CLS : PRINT "CONDUCTIVIDAD TÉRMICA (BTU/LB-HR-F)="; K2
1160 INPUT "CONDUCTIVIDAD TÉRMICA"; K2
1170 CLS : RETURN
1180 CLS : PRINT "FLUJO MUSICO (LB/HR)="; W2
1190 INPUT "FLUJO MASICO"; W2
1200 CLS : RETURN
1210 X$ = " "
1220 PRINT "SISTEMA:"; TÍTULO$
1230 PRINT "ÁREA DE LA UNIDAD ="; A2; TAB(30); "NÚM DE PASOS EN LA CORAZA:"; NS
1240 PRINT "NÚM DE TUBOS/UNIDAD="; NT * NS; TAB(30); "NÚMERO DE PASOS EN LOS TUBOS="; N
1250 PRINT "COCIENTE DE DIÁMETRO INTERIOR A EXTERIOR DE LOS TUBOS ID/OD"; ID; "/" ; OD; TAB(30); "PITCH =
"; P; " (" ; P$; ")"
1260 PRINT TAB(20); "LADO DE LOS TUBOS"; TAB(40); "LADO DE LA CORAZA"
1270 PRINT "FLUIDO"; TAB(20); T$; TAB(40); S$
1280 PRINT "LBS/HR"; TAB(20); W1; TAB(40); W2
1290 PRINT "CONDUCTIVIDAD TÉRMICA"; TAB(20); K1; TAB(40); K2
1300 PRINT "CALOR ESPECIFICO"; TAB(20); C1; TAB(40); C2
1310 PRINT "DENSIDAD"; TAB(20); D1; TAB(40); D2
1320 PRINT "VISCOSIDAD(CP)"; TAB(20); V1; TAB(40); V2
1330 PRINT "TEMPERATURA DE ENTRADA(F)"; TAB(20); T1; TAB(40); T3
1340 PRINT "TEMPERATURA DE SALIDA(F)"; TAB(20); T2; TAB(40); T4
1350 IF X$ = "S" THEN RETURN
1360 PRINT "VELOCIDAD(FT / SEC)"; TAB(20); VT; TAB(40); VS
1370 PRINT "CAÍDA DE PRESIÓN(PSI)"; TAB(20); PT; TAB(40); PS
1380 INPUT Z$
1390 CLS
1395 PRINT "NUM DE PRANDTL "; TAB(20); P1; TAB(40); P2
1400 PRINT "NM DE REYNOLDS"; TAB(20); R1; TAB(40); R2
1410 PRINT "h-(BTU/hr-ft2-F)"; TAB(20); H1; TAB(40); H2
1420 PRINT "FACTOR DE INCRUSTACIÓN"; TAB(20); FT; TAB(40); FS
1430 PRINT
1440 PRINT "COEFICIENTE GLOBAL="; U; TAB(30); "LMTD="; LMTD
1450 PRINT "FACTOR DE APROXIMACIÓN ="; FC; TAB(30); "LMTD CORREGIDA="; LMTD * FC
1460 PRINT "CARGA TÉRMICA="; Q; TAB(30); "CALOR TRANSFERIDO="; U * A2 * LMTD * FC
1470 PRINT "DIÁMETRO DE CORAZA(IN)="; DS; TAB(30); "ESPACIAMIENTO ENTRE BAFFLES(IN)="; B
```

```
1480 PRINT "LONGITUD DEL TUBO(FT)="; L; TAB(30); "No. DE BAFFLES="; NB
1490 INPUT Z$: CLS
1500 INPUT "DESEA HACER ALGÚN CAMBIO (S/N)?"; A$:
1510 IF A$ = "S" THEN GOSUB 1540: GOTO 250
1520 PRINT "FIN DE LA EJECUCIÓN DEL PROGRAMA"
1530 END
1540 CLS : INPUT "CAMBIOS EN EL LADO DE LA CORAZA (1) O LADO DE LOS TUBOS (2), O 0 PARA FINALIZAR"; Z
1550 IF Z = 0 THEN RETURN
1560 ON Z GOSUB 1580, 1730
1570 GOTO 1540
1580 CLS
1590 PRINT "DATOS DEL LADO DE LA CORAZA"
1600 PRINT
1610 PRINT "1. No PASOS EN LA CORAZA , DIÁMETRO INTERIOR"
1620 PRINT "2. No DE BAFFLES, ESPACIAMIENTO ENTRE BAFFLES"
1630 PRINT "3. NOMBRE DEL FLUIDO, FACTOR DE INCRUSTACIÓN"
1640 PRINT "4. TEMP(ENTRADA), TEMP (SALIDA),CALOR ESPECÍFICO"
1650 PRINT "5. VISCOSIDAD, DENSIDAD"
1660 PRINT "6. CONDUCTIVIDAD TÉRMICA"
1670 PRINT "7. FLUJO MÁSCICO"
1680 PRINT
1690 INPUT " ¿CUÁL VARIABLE DESEA CAMBIAR(0-7)?, 0 PARA REGRESAR"; Z1
1700 IF Z1 = 0 THEN RETURN
1710 ON Z1 GOSUB 990, 1020, 1050, 1080, 1120, 1150, 1180
1720 GOTO 1580
1730 CLS
1740 PRINT " DATOS DEL LADO DE LOS TUBOS"
1750 PRINT
1760 PRINT "1. NUM DE TUBOS POR CORAZA, DIÁMETRO INTERNO, DIÁMETRO EXTERNO ,PITCH"
1770 PRINT "2. PITCH CUADRADO O TRIANGULAR"
1780 PRINT "3. LONGITUD DEL TUBO, NUM DE PASOS"
1790 PRINT "4. NOMBRE DEL FLUIDO, FACTOR DE INCRUSTACIÓN"
1800 PRINT "5. TEMP(ENTRADA), TEMP(SALIDA),CALOR ESPECÍFICO"
1810 PRINT "6. VISCOSIDAD, DENSIDAD"
1820 PRINT "7. CONDUCTIVIDAD TÉRMICA"
1830 PRINT "8. FLUJO MÁSCICO"
1840 PRINT
1850 INPUT "QUE VARIABLE DESEA CAMBIAR(0-8),0 PARA TERMINAR"; Z3
```

1860 IF Z3 = 0 THEN RETURN

1870 ON Z3 GOSUB 700, 760, 790, 820, 850, 890, 930, 960

1880 GOTO 1730

## **CAPÍTULO IV**

### **Transferencia de Masa**

#### **INTRODUCCIÓN**

La destilación es un proceso de separación de suma importancia en la ingeniería química, es uno de los procesos más empleados en la industria de transformación. Es por eso que el estudio de la destilación, es necesario en la formación del Ingeniero Químico, consecuentemente uno de los objetivos primordiales de este trabajo, es que los alumnos tengan a su disposición en forma resumida y de manera didáctica, el conocimiento y aplicación de la ingeniería química en el proceso de destilación.

El objetivo de la destilación es la separación de los componentes de una mezcla, por vaporización parcial de la misma y la recuperación por separado del vapor y el residuo, lugares donde se obtienen los productos deseados. El principio de la destilación se basa fundamentalmente en la diferencia de los puntos de ebullición de los componentes a separar. Los constituyentes más volátil de la mezcla original se obtienen en la mayor concentración en el vapor, y los menos volátiles en concentración más grande en el residuo líquido

En el presente capítulo se presentan los conceptos y un método gráfico que se requiere para la resolución matemática de los problemas de destilación. Siendo así el objetivo principal de este capítulo el de proporcionar las herramientas necesarias para la resolución de algunos problemas.

## DESTILACIÓN CONTINUA CON RECTIFICACIÓN.

La destilación de equilibrio (flash) se usa generalmente para la separación de mezclas cuyos componentes tienen gran diferencia en sus puntos de ebullición. Este tipo de destilación no es adecuado para la separación de componentes que tienen volatilidad similar, esto porque tanto el vapor condensado como el líquido residual arrastra una gran cantidad de impurezas.

Mediante numerosas redestilaciones sucesivas se pueden obtener pequeñas cantidades de los componentes puros. Estas redestilaciones se llevan a efecto en las llamadas columnas de rectificación.

La operación de rectificación, consiste en circular en contracorriente el vapor de una mezcla con el condensador procedente del mismo vapor.

Destilación continua con rectificación

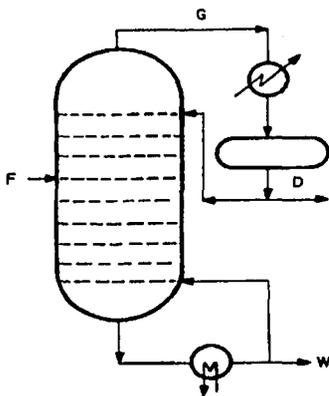


Fig 4-1

### BALANCE DE MATERIA.

A) En la columna:

$$\text{Balance total: } F = D + W \quad (1)$$

$$\text{Balance del componente más volátil: } FZ_F = DX_D + WX_W \quad (2)$$

ESTA TESIS NO SALE  
DE LA BIBLIOTECA

B) Sección del condensador:

$$\text{Balance total: } G = L + D \quad (3)$$

$$\text{La relación de reflujo externo está dada por: } R = \frac{L}{D} \quad (4)$$

$$\text{Relacionando 3 y 4: } G = D(R + 1) \quad (5)$$

BALANCE DE CALOR.

A) En la columna.

$$FZ_F + Q_B = Q_C + DH_D + WH_W + Q_P \quad (6)$$

B) Sección del condensado

$$Q_C = GH_C - (L+D)H_D \quad (7)$$

Si sustituimos (3) en (7) obtenemos:

$$Q_C = G(H_G - H_D) \quad (8)$$

Las unidades de los términos de las ecuaciones son:

F, D, W moles/tiempo.

Z<sub>F</sub>, X<sub>D</sub>, y X<sub>W</sub> son las fracciones mol en alimentación, destilado y residuo respectivamente.

H<sub>G</sub>, H<sub>D</sub>, H<sub>W</sub>, H<sub>F</sub>, son las entalpías del efluente del domo, del destilado, del residuo y de la alimentación respectivamente Kcal/Kg, BTU/lbmol.

Q<sub>B</sub>, Q<sub>C</sub>, y Q<sub>P</sub> son los calores correspondientes al que se suministra al rehervidor, el que se quita en el condensado y el calor perdido respectivamente.

Considerando soluciones binarias la alimentación puede entrar:

1. - En fase líquida a una temperatura menor que la de ebullición o sea, líquido subenfriado
2. - En fase líquida a su temperatura de ebullición.
3. - Como mezcla líquido / gas.

4. - En fase vapor a su temperatura de saturación.
5. - En fase vapor a una temperatura mayor que la de saturación, esto es, vapor sobrecalentado.

Plato teórico: Es aquel del cual sale un vapor en equilibrio con el líquido que sale del mismo plato.

Para calcular el número de platos teóricos de una columna de rectificación seguiremos el método de Mc-Cabe y Thiele.

No de platos reales = No de platos Teóricos / Eficiencia

#### SECCIÓN DE ENRIQUECIMIENTO.

Balance total de materia:

$$G = L + D \quad (9)$$

$$R = \frac{L}{D} \quad (10)$$

Sustituye L de (10) en (9)

$$G = D (R + 1) \quad (11)$$

Balance del material volátil:

$$GY_{n+1} = LX_n + DX_D \quad (12)$$

$$Y_{n+1} = \frac{LX_n + DX_D}{G} = \frac{L}{GD} X_n + \frac{D}{G} X_D \quad (13)$$

Línea de operación de la sección de rectificación.

De acuerdo a (4)  $L = RD$ .....(4')

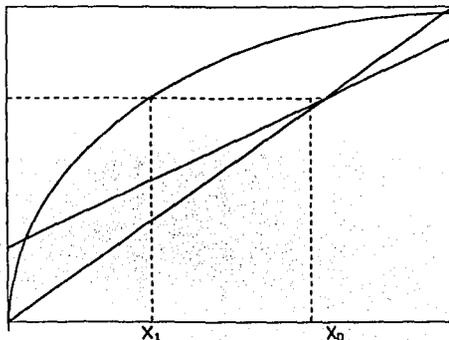
Sustituyendo (4') y (11) en (13) obtenemos:

$$Y_{n+1} = \frac{R}{R+1} X_n + \frac{X_D}{R+1} \quad \text{..... línea de operación de rectificación.} \quad (14)$$

$$\text{Pendiente} = \frac{L}{G} = \frac{R}{R+1} \quad (15)$$

$$\text{Ordenada al origen} = \frac{D}{G} X_D = \frac{X_D}{R+1} \quad (16)$$

La siguiente figura muestra gráficamente la curva de operación de la sección de rectificación



SECCIÓN DE AGOTAMIENTO.

L es diferente de L'

G es diferente de G'

L' y G' varían de acuerdo a la alimentación.

Balance total de material:

$$L' = G' + W \quad (17)$$

Balance del componente más volátil.

$$L'X_m = G'Y_{m+1} + WX_w \quad (18)$$

$$Y_{m+1} = \frac{L'X}{G'} - \frac{W}{G'} X_w \quad (19)$$

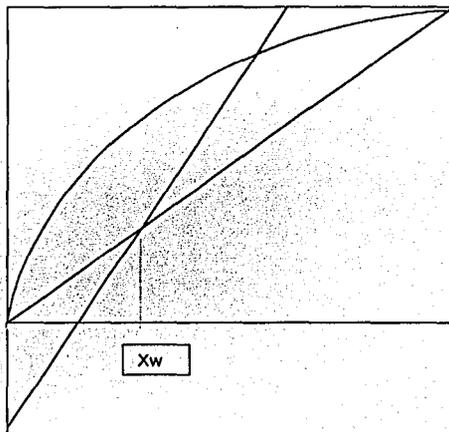
Ecuación de la línea de operación de la sección de agotamiento.

Como  $G' = L' - W$

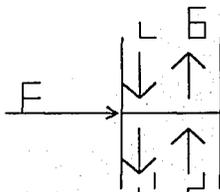
$$\text{Pendiente} = \frac{L}{G} = -\frac{L}{L'-W} \quad (20)$$

$$\text{Ordenada al origen} = -\frac{W_x}{G} = -\frac{WX_w}{L'-W} \quad (21)$$

La siguiente figura muestra gráficamente la línea de operación de la sección de agotamiento



PLATO DE ALIMENTACIÓN;



$F$  = alimentación, moles / tiempo.

$G_F$  = moles de vapor en la alimentación.

$Y_F$  = fracción mol del componente más volátil en la fase vapor de la alimentación.

$X_F$  = Fracción mol del componente más volátil en la fase líquida.

$Z_F$  = Fracción mol. En la alimentación

$H_{L,F}$  = entalpía de la fase líquida de la alimentación.

$H_F$  = entalpía de la alimentación.

Para los casos en que la alimentación sea líquido saturado:

$$F = L_F \quad (22)$$

Si la alimentación es vapor saturado o sobrecalentado:

$$F = G_F \quad (23)$$

Si la alimentación consta de las fases líquido-vapor:

$L$  = moles que fluyen de plato a plato en la sección de rectificación.

$H_L$  = entalpía en la corriente  $L$  (líquido saturado).

$H_G$  = entalpía de la corriente  $G$  (vapor saturado).

$G$  = moles de vapor que fluyen de plato a plato en la sección de enriquecimiento.

$L'$  = moles del líquido que fluyen de plato a plato en la sección de agotamiento.

$H_{L'}$  = entalpía en la corriente  $L'$

$G'$  = moles de vapor que fluyen de plato a plato en la sección de agotamiento.

$H_{G'}$  = entalpía en la corriente  $G'$

Si la alimentación es líquido saturado:

$$L' = L + F \quad (24)$$

$$G' = G \quad (25)$$

Si la alimentación es vapor saturado:

$$G = G' + F \quad (26)$$

$$L = L' \quad (27)$$

**BALANCE DE MATERIA:**

Balance Total:

$$F + L + G' = L' + G \quad (28)$$

**BALANCE DE ENERGÍA:**

$$FH_F + LH_L + G'H_G = L'H_L + GH_G \quad (29)$$

Considerando que  $H_L = H_{L'}$ ,  $H_G = H_{G'}$  ya que las variaciones de la temperatura y la composición entre plato y plato son mínimas.

$$FH_F + LH_L + G'H_G = L'H_L + GH_G \quad (30)$$

Reagrupando (30)

$$FH_F + (G' - G) H_G = (L' - L) H_L \quad (31)$$

de (28) obtenemos:

$$G' - G = (L' - L) - F \quad (32)$$

Sustituyendo (32) en (31) y reagrupando obtenemos:

$$\frac{L' - L}{F} = \frac{H_G - H_F}{H_G - H_L} \quad (33)$$

$$\frac{H_G - H_F}{H_G - H_L} = q \quad (34)$$

Siendo  $q$  el calor necesario para llevar la entalpía de la alimentación hasta la entalpía correspondiente a su vapor saturado, dividido entre el calor latente de vaporización.

Las ecuaciones de las líneas de operación de la sección de rectificación y de agotamiento son:

$$Y = \frac{L}{G} X + \frac{D}{G} X_D \quad (35)$$

$$Y = \frac{L'}{G'} X - \frac{W}{G'} X_W \quad (36)$$

Multiplicando (35) por G y (36) por G':

$$GY = LX + DX_D \quad (37)$$

$$G'Y = L'X - WX_W \quad (38)$$

Restando (37) de (38)

$$G'Y - GY = (L'X - WX_W) - (LX + DX_D) \quad (39)$$

Reagrupando:

$$(G' - G)Y = (L' - L)X - (WX_W + DX_D) \quad (40)$$

siendo:

$$\frac{L' - L}{G} = \frac{H_G - H_F}{H_G - H_L} = q \quad (41)$$

q = al calor necesario para llevar la entalpía de la alimentación hasta la entalpía correspondiente a un vapor saturado dividido entre el calor latente de vaporización.

de (41) Obtenemos:

$$L' - L = Fq \quad (42)$$

Sustituyendo (42) en (32) y reagrupando:

$$G' - G = (q - 1)F \quad (43)$$

Sustituyendo (42) y (43) en (40) obtenemos:

$$(q-1)Y = qX - Z_F \quad (44)$$

Despejando Y de (44):

$$Y = \frac{q}{q-1} X - \frac{Z_F}{q-1} \quad \text{Ecuación correspondiente a la línea del plato de alimentación.} \quad (45)$$

$$\text{Pendiente} = \frac{q}{q-1} \quad (46)$$

$$\text{Ordenada al origen} = \frac{Z_F}{q-1} \quad (47)$$

F(mol/hr)	G <sub>F</sub>	L <sub>F</sub>	H <sub>GF</sub>	H <sub>LF</sub>	H <sub>F</sub>	$q = \frac{H_G - H_F}{H_G - H}$	$m = \frac{q}{q-1}$
Liq. no saturado	0	F	0	H <sub>F</sub>	H <sub>F</sub> < H <sub>L</sub>	q > 1	m > 1
Liq. Sat.	0	F	0	H <sub>F</sub>	H <sub>F</sub> = H <sub>L</sub>	1	∞
Vapor-liq.	G <sub>F</sub>	L <sub>F</sub>	H <sub>GF</sub>	H <sub>FL</sub>	H <sub>L</sub> < H <sub>F</sub> < H <sub>G</sub>	0 < q < 1	m < 0
Vapor Saturado	F	0	H <sub>F</sub>	0	H <sub>F</sub> = H <sub>G</sub>	0	0
Vapor sobre calentado	F	0	H <sub>F</sub>	0	H <sub>F</sub> > H <sub>G</sub>	q < 0	

Para encontrar el número de platos teóricos se grafican las líneas de operación de la sección de agotamiento y la del plato de alimentación. Estas gráficas se deben de realizar en el diagrama de equilibrio del sistema que se trate, después se procede a construir la escalera y encontramos el número de platos teóricos para un problema determinado.

## Algoritmo computacional para el programa

El programa THIELER2 es un método de McCabe-Thiele para la determinación del número de etapas teóricas en una destilación binaria.

El diseño termodinámico del proceso de destilación fraccionada de una mezcla binaria puede llevarse a cabo en forma gráfica debido a que:

- Las composiciones en las fases líquida y vapor pueden ser descritas en términos de las fracciones molares de un solo componente, y representadas en los ejes ( $x$ ,  $y$ ) de una gráfica bidimensional.
- Las características de las ecuaciones lineales involucradas en la descripción de las líneas de operación, la línea de alimentación y el trazado de etapas facilita su representación en la gráfica bidimensional.

El método gráfico desarrollado por McCabe y Thiele en la década de los 50 es bastante sencillo de implementar tanto en cálculos manuales como en un algoritmo computacional. A continuación se describe la forma en que opera el algoritmo de cómputo que se presenta en esta tesis:

- El primer paso consiste en el **trazado de la curva de equilibrio**. Para ello se introducen los datos del equilibrio termodinámico del sistema binario de interés y se grafican en la pantalla del monitor. El programa para graficación bidimensional de funciones normalizadas fue bastante útil para el cumplimiento de este objetivo. Paralelamente se procedió a hallar los parámetros de una curva de ajuste. El programa de **regresión cúbica** que fue comentado en las herramientas matemáticas demostró ser bastante eficiente para todos los casos considerados. Este ajuste polinomial es necesario debido a que en los cálculos posteriores se requiere de una expresión matemática que represente a la curva de equilibrio.
- El segundo paso es la **ubicación del punto de alimentación**. De acuerdo a los datos de entrada para la ejecución del programa, se dibuja un punto en la gráfica ( $x, y$ ), tomando la  $z_F$ , es decir la fracción molar de la alimentación, y ubicándola sobre la recta de  $45^\circ$ .
- El tercer paso consiste en el **trazado de la línea de alimentación**. De acuerdo a las cantidades relativas de vapor y líquido en la alimentación, y partiendo del punto  $z_F$  dibujado sobre la diagonal de  $45^\circ$ , se traza una línea con pendiente  $-L_F/V_F$ .
- El siguiente paso es la **ubicación de la composición** del destilado,  $x_D$ , sobre la recta de  $45^\circ$ , en base a los datos que introduzca el usuario.
- El quinto paso es el **trazado de la línea de operación de la sección de enriquecimiento**, *Lose*. Para ello se tomó en cuenta una relación de reflujo de operación igual a 1.2 veces la relación de reflujo mínima, según el criterio heurístico reportado en el artículo de Fenske y Gilliland. Esta línea de operación es una recta con los siguientes parámetros:

Pendiente =  $R/(R+1)$ . Ordenada al origen =

- En el sexto paso el programa **calcula el punto de intersección de la línea de alimentación y la Lose**, en una serie de cálculos sencillos, ya que únicamente se determinan los valores de  $x$  e  $y$  donde las ecuaciones de las dos rectas coinciden:
- El paso número siete es el **trazado de la línea de operación de la sección de agotamiento, Losa**. Simplemente se une el punto de intersección de la línea de alimentación y de la Lose con la composición de fondos,  $x_b$  previamente ubicada sobre la recta de  $45^\circ$ .
- El octavo paso consiste en un ciclo de operaciones mediante las cuales **se trazan progresivamente y de manera iterativa, las etapas ideales del proceso de destilación**, empezando con una recta horizontal que va desde  $x_b$  sobre la recta de  $45^\circ$  hasta la intersección con la curva de equilibrio, seguida por una línea vertical trazada desde este punto hasta intersección con la Lose, y continuando de esta manera, yendo a la curva de equilibrio y a la Lose sucesivamente, hasta que se alcanzan las coordenadas en que el trazado de las líneas verticales obligan a pasar de la curva de equilibrio a la Losa en lugar de la Lose, y terminando una vez que la  $x_b$  ha sido alcanzada o rebasada.
- En el noveno paso **se determina el número de etapas** mediante el conteo del número de ciclos necesarios para alcanzar o rebasar  $x_b$ . Además el programa calcula la fracción de etapa teórica en caso de no terminar la construcción de las etapas en el punto exacto de  $x_b$ .
- Finalmente **se dibuja la torre de destilación con sus correspondientes etapas y la ubicación del plato de alimentación**. Esta subrutina de despliegado gráfico de los resultados permite visualizar con exactitud la ubicación del plato teórico de alimentación.

Para utilizar THIELER2 es necesario realizar la secuencia de pasos que con anterioridad se han hecho en los demás programas.

La manera en que el usuario puede interactuar con el programa es cambiando las composiciones de alimentación, destilado y fondos en el campo 6 del listado del programa, correspondiendo de la manera siguiente:

$X_b$  = Composición en fracción mol de los fondos

$X_D$  = Composición en fracción mol del destilado

$Z_F$  = Composición en fracción mol de la alimentación

El resultado se verá reflejado en el número de platos en el gráfico en la salida del programa; además del plato de alimentación que también se encuentra representado en el gráfico.

Existe la alternativa de cambiar la curva de equilibrio, siendo esta una curva característica de las mezclas binarias.

La manera en que la presente tesis propone hacer la caracterización de esta curva es realizando una regresión cúbica y un ajuste por mínimos cuadrados a la serie de puntos que tenemos como datos, dando como resultado una expresión algebraica, esto se puede lograr utilizando el programa REGCUB1 explicado en el capítulo 1 de este trabajo. Los campos para ingresar esta expresión algebraica son el 33, 58, 64 y 94 además de la primera derivada correspondiente a esta ecuación que se ingresa en el campo 89 del listado del programa, con esto se asegura que la descripción de la curva de equilibrio será de la mezcla binaria a la que el programa se refiere.

Otra variante por cambiar en el programa es el porcentaje de fase líquida y gaseosa en la corriente de alimentación, solo que esta se encuentra limitada por la naturaleza de la curva de equilibrio debido al trazado gráfico entre ellas.

En THIELER2 no se han tomado en cuenta la corriente de líquido saturados por lo que al hacer esta consideración el programa no efectuara los cálculos, enviando una señalización de división entre cero por lo que habrá que tomar en cuenta que la variable  $V_f$  establecidos en el campo 8 del listado del programa tendrá que ser diferente de cero.

Ejemplo de ingreso de datos

Tomando como referencia una destilación en la cual se requiere tener una composición de destilado  $X_D = .99$  y teniendo como alimentación una mezcla líquido-gas en una proporción del 50% con una  $Z_f = .45$  y por ultimo una composición de fondos  $X_B = .05$  calcular el numero de platos teóricos sabiendo que la ecuación que describe la curva de equilibrio esta dada por  $y = 1.7327X^3 - 3.5245X^2 + 2.782X + 0.2427$

Ingreso de datos

En el campo 6 XD = .99: ZF = .45: XB = .05

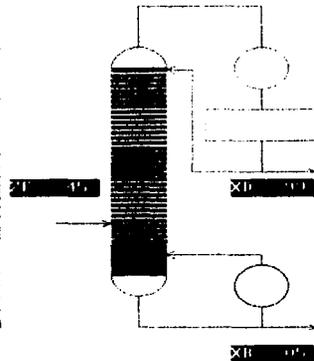
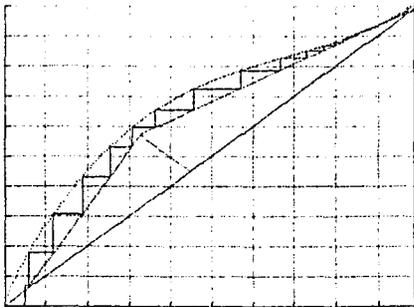
En el campo 8 LF = .5: VF = .5

En los campos 33, 58, 64 y 94 los valores de la ecuación característica de la curva ( cada mezcla binaria tiene su ecuación característica)  $1.7327X^3 - 3.5245X^2 + 2.782X + 0.2427$

En el campo 95 se ingresa la primera derivada de la ecuación anterior, siendo esta  $(3*1.7327X^2) - (2*3.5245X) + 2.782$

Nota: en los campos anteriores (33, 58, 64, 94 y 95) se modifican únicamente los valores, las variables se dejan tal y como aparecen originalmente en el programa, sin cambiarles de nombre.

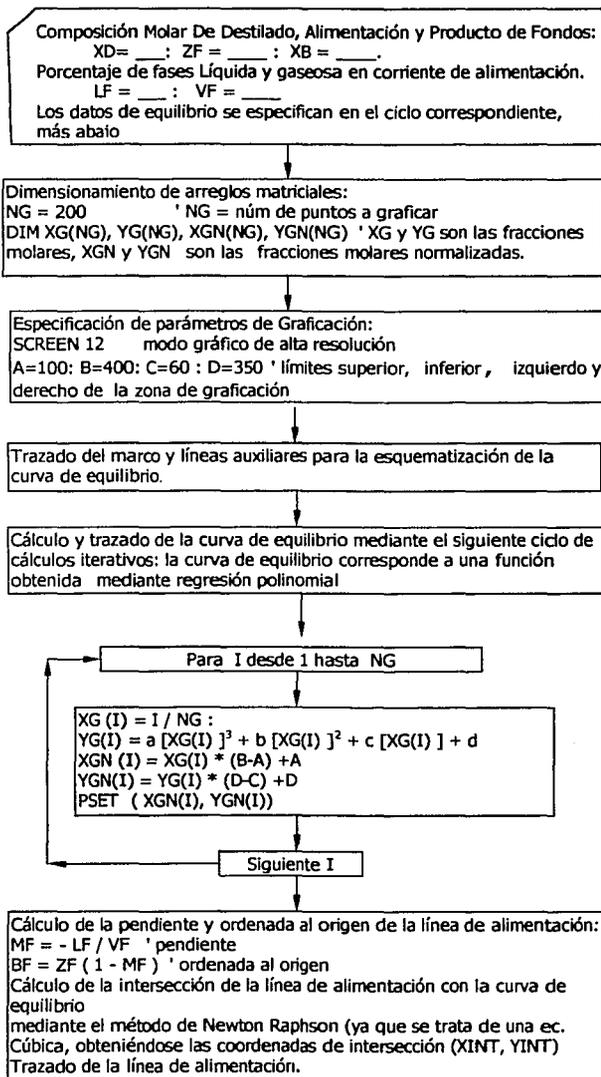
Los resultados se presentan de la siguiente manera.



NUMERO DE ETAPAS TOTALES: 11.22299

Presiones cualquier: tes la q. continue

## Diagrama de Bloques

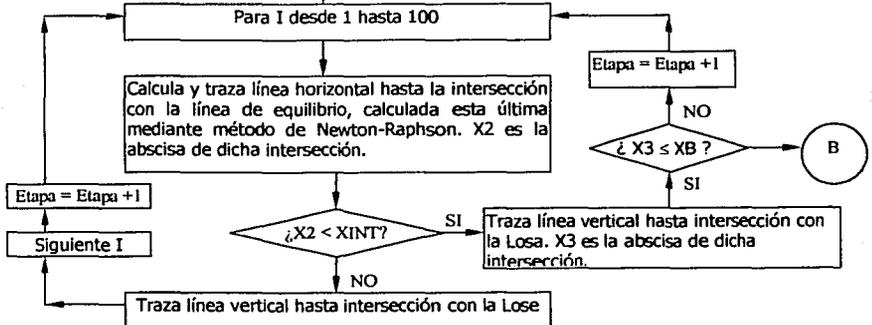


Cálculo y trazado de la línea de reflujo mínimo.  
 $MMIN = (XD - YINT) / (XD - XINT)$  'pendiente de la línea de reflujo mínimo  
 $BMIN = XD (1 - MMIN)$  'ordenada al origen de la línea de reflujo mínimo  
 $RMIN = BMIN / (1 - MMIN)$  'reflujo mínimo.  
 $LINE (XD * (B - A) + A, D - (D - C) * XD) - (Xint * (B - A) + A, D - (D - C) * YINT), 11$  Trazado con la instrucción line

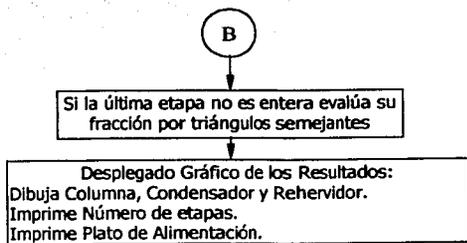
Cálculo y Trazado de la Línea de Operación de la Sección de Enriquecimiento  
 $ROP = 0.8 RMIN$  Criterio heurístico: reflujo de operación = .8 reflujo mínimo.  
 $BE = ROP (1 + ROP)$  Ordenada al origen de la Lose.  
 $ME = (XD - BE) / XD$  Pendiente de la Lose.  
 $XINT = (BE - BF) / (MF - ME)$  Coordenadas de la intersección de la lose con la línea de alimentación.  
 $YINT = ME * XINT + BE$  de alimentación.  
 $LINE (ZF * (B - A) + A, D - (D - C) * ZF) - (Xint * (B - A) + A, D - (D - C) * YINT), 3$   
 Acortamiento de la línea de Alimentación.  
 $LINE (XD * (B - A) + A, D - (D - C) * XD) - (Xint * (B - A) + A, D - (D - C) * YINT), 3$   
 Trazado de la línea de operación de sección de enriquecimiento (Lose)

Cálculo y Trazado de la Línea de Operación de la Sección de Agotamiento  
 $BB = YINT - MB * XINT$  Ordenada al origen de la Losa  
 $MB = (YINT - XB) / (XINT - XB)$  Pendiente de la Losa.  
 $LINE (XB * (B - A) + A, D - (D - C) * XB) - (Xint * (B - A) + A, D - (D - C) * YINT), 3$   
 Trazado de la línea de operación de sección de agotamiento (Losa)

Cálculo y trazado del Número de Etapas Mediante el siguiente ciclo:



**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**



## Listado del programa

```

1 EI' PROGRAMA PARA DETERMINACIÓN DE ETAPAS DE EQUILIBRIO EN UNA DESTILACIÓN
2 'FRACCIONADA DE UNA MEZCLA BINARIA
3 'INICIANDO EL PROYECTO DE TESIS
4 SCREEN 12
5 XD = .99: ZF = .45: XB = .05
6 'PORCENTAJE DE FASES EN LA CORRIENTE DE ALIMENTACIÓN
7 LF = .5: VF = .5
8 ' LA CURVA DE EQUILIBRIO CORRESPONDE A UNA FUNCIÓN Y= X^(N)
9 NG = 200: N = 1 / 2 'NP=NÚM DE PUNTOS
10 DIM XG(NG), YG(NG), YGN(NG), XGN(NG)
11 LINE (1, 1)-(640, 480), 15, BF
12 A = 100: B = 400: C = 60: D = 350
13 DELTAX = (B - A) / 10
14 DELTAY = (D - C) / 10
15 LINE (A, C)-(A, D), 3
16 LINE (A, D)-(B, D), 3
17 LINE (A, D)-(B, C), 8
18 FOR J = 1 TO 10
19 LINE (J * DELTAX + A, D - 5)-(J * DELTAX + A, D), 4
20 LINE (A, DELTAY * (J - 1) + C)-(A + 5, DELTAY * (J - 1) + C), 4
21 LINE (J * DELTAX + A, D - 5)-(J * DELTAX + A, C), 10
22 LINE (B, DELTAY * (J - 1) + C)-(A + 5, DELTAY * (J - 1) + C), 10
23 NEXT J
24 'TRAZADO DE LA CURVA DE EQUILIBRIO
25 FOR i = 1 TO NG
26 XG(i) = i / NG
27 YG(i) = 1.7327 * XG(i) * XG(i) * XG(i) - 3.5245 * XG(i) * XG(i) + 2.782 * XG(i) + .02427
28 XGN(i) = XG(i) * (B - A) + A
29 YGN(i) = -YG(i) * (D - C) + D
30 PSET (XGN(i), YGN(i)), 4
31 NEXT i
32 FOR i = 1 TO (NP - 1) / 2
33 PRINT "I="; i
34 B1 = Y(2 * i) - Y(2 * i - 1) * (X(2 * i) / X(2 * i - 1)) ^ 2 - (Y(2 * i) - Y(2 * i + 1) * (X(2 * i) / X(2 * i + 1)) ^ 2) * (1 -
35 (X(2 * i) / X(2 * i - 1)) ^ 2) / (1 - (X(2 * i + 1)) ^ 2)

```

```

44 B2 = x(2 * i) - x(2 * i) ^ 2 / x(2 * i - 1) - (x(2 * i) - x(2 * i) ^ 2 / x(2 * i + 1)) * (1 - (x(2 * i) / x(2 * i - 1)) ^ 2) / (1 -
45 (x(2 * i) / x(2 * i + 1)) ^ 2)
46 C(i) = (y(2 * i) - y(2 * i + 1) * (x(2 * i) / x(2 * i + 1)) ^ 2 - B(i) * (x(2 * i) - x(2 * i) ^ 2 / x(2 * i + 1)) / (1 - x(2 * i) /
47 x(2 * i + 1) ^ 2))
48 A(i) = (y(2 * i) - B(i) * x(2 * i) - C(i)) / x(2 * i) ^ 2
49 PRINT "A"; i; A(i), "B"; i; B(i), "C"; i; C(i)
51 NEXT i
52 MF = -LF / VF
53 BF = ZF * (1 - MF)
54 'NEWTON RAPHSON
56 DX = .1
57 x = ZF
5 x = x - DX
58 y = 1.7327 * x * x * x - 3.5245 * x * x + 2.782 * x + .02427 - MF * x - BF
59 'PRINT "Y=";Y
61 IF ABS(y) > .00001 THEN 10 ELSE 20
10 IF y > 0 THEN 5
62 x = x + DX; DX = DX / 10; GOTO 5
63 x = ZF + DX
115 GOTO 5
20 Xint = x
64 Yint = 1.7327 * Xint * Xint * Xint - 3.5245 * Xint * Xint + 2.782 * Xint + .02427
65 'PRINT "XINT="; XINT;"YINT="; YINT
66 'LINEA DE ALIMENTACIÓN
67 LINE (ZF * (B - A) + A, D - (D - C) * ZF)-(Xint * (B - A) + A, D - (D - C) * YINT), 11
68 'LINEA DE REFLUJO MINIMO
69 MMIN = (XD - YINT) / (XD - Xint)
70 BMIN = XD * (1 - MMIN)
71 RMIN = BMIN / (1 - BMIN)
72 LINE (XD * (B - A) + A, D - (D - C) * XD)-(Xint * (B - A) + A, D - (D - C) * YINT), 11
73 'LINEA DE OPERACIÓN DE LA SECCION DE ENRIQUECIMIENTO
74 ROP = RMIN * .8
75 BE = ROP / (1 + ROP)
76 'PRINT "BE=";BE;"BMIN=";BMIN
77 ME = (XD - BE) / XD
78 Xint = (BE - BF) / (MF - ME)
79 YINT = ME * Xint + BE
80 MB = (YINT - XB) / (Xint - XB)

```

```

81 BB = YINT - MB * Xint
82 'PRINT "XINT=";XINT;"YINT="; YINT
83 'LINEA DE ALIMENTACIÓN REAL
84 LINE (ZF * (B - A) + A, D - (D - C) * ZF)-(Xint * (B - A) + A, D - (D - C) * YINT), 3
85 'LOSE REAL
86 LINE (XD * (B - A) + A, D - (D - C) * XD)-(Xint * (B - A) + A, D - (D - C) * YINT), 3
87 'LOSA REAL
88 LINE (XB * (B - A) + A, D - (D - C) * XB)-(Xint * (B - A) + A, D - (D - C) * YINT), 3
89 'TRAZADO DE ETAPAS
90 'SECCIÓN DE ENRIQUECIMIENTO
91 X1 = XD: y1 = XD
27 ' MÉTODO DE NEWTON-RAPHSON
92 x0 = .5
93 x2 = x0
94 DEF fnf (x2) = 1.7327 * x2 * x2 * x2 - 3.5245 * x2 * x2 + 2.782 * x2 + .02427 - y1
95 DEF fnd (x2) = 3 * 1.7327 * x2 * x2 - 2 * 3.5245 * x2 + 2.782
96 FOR I = 1 TO 100
97 x2 = x2 - fnf(x2) / fnd(x2)
98 y2 = fnf(x2)
99 LOCATE 1, 1: 'PRINT "x2="; x2; "y2="; y2
100 'DO
101 'LOOP WHILE INKEY$ = ""
102 IF ABS(y2) < .000001 THEN 28
103 NEXT I
28 y2 = ME * x2 + BB
104 LINE (X1 * (B - A) + A, D - (D - C) * y1)-(x2 * (B - A) + A, D - (D - C) * y1), 3
105 LINE (x2 * (B - A) + A, D - (D - C) * y1)-(x2 * (B - A) + A, D - (D - C) * y2), 3
106 CUENT1 = CUENT1 + 1
107 IF x2 > Xint THEN 30 ELSE 40
30 X1 = x2: y1 = y2
108 GOTO 27
40 ' SECCIÓN DE AGOTAMIENTO
109 y2 = MB * x2 + BB
110 LINE (x2 * (B - A) + A, D - (D - C) * y1)-(x2 * (B - A) + A, D - (D - C) * y2), 3
50 X1 = x2: y1 = y2
111 'MÉTODO DE NEWTON
112 x0 = 0!
113 x2 = x0

```

```

114 FOR i = 1 TO 100
115 x2 = x2 - fnf(x2) / fnd(x2)
116 y2 = fnf(x2)
117 'PRINT "x2="; x2; "y2="; y2
118 IF ABS(y2) < .000001 THEN 35
119 NEXT i
35 y2 = MB * x2 + BB
120 CONT2 = CONT2 + 1
121 IF x2 > XB THEN 55 ELSE 60
55 LINE (X1 * (B - A) + A, D - (D - C) * y1)-(x2 * (B - A) + A, D - (D - C) * y1), 3
122 LINE (x2 * (B - A) + A, D - (D - C) * y1)-(x2 * (B - A) + A, D - (D - C) * y2), 3
123 GOTO 50
60 LINE (X1 * (B - A) + A, D - (D - C) * y1)-(XB * (B - A) + A, D - (D - C) * y1), 4
124 LINE (XB * (B - A) + A, D - (D - C) * y1)-(XB * (B - A) + A, D - (D - C) * XB), 4
125 FRACCN = (XB - X1) / (x2 - X1)
126 NETAPAS = CUENT1 + CONT2 + FRACCN
127 NET = INT(NETAPAS - 1)
128 CIRCLE (500, 100), 20, 3, FF
129 LINE (480, 100)-(520, 300), 3, BF
130 CIRCLE (500, 300), 20, 3, FF
131 DELTA = INT(200 / (NET + 2))
132 FOR i = 1 TO NET'DIBUJA ETAPAS
133 LINE (480, 100 + i * DELTA)-(520, 100 + i * DELTA)
134 NEXT i
135 'DIBUJA LÍNEA DE ALIMENTACIÓN
136 LINE (440, 100 + CUENT1 * DELTA)-(480, 100 + CUENT1 * DELTA), 4
137 LINE (474, 100 + CUENT1 * DELTA - 3)-(480, 100 + CUENT1 * DELTA), 4
138 LINE (474, 100 + CUENT1 * DELTA + 3)-(480, 100 + CUENT1 * DELTA), 4
139 'DIBUJA CONDENSADOR
140 LINE (500, 80)-(500, 40), 9
141 LINE -(590, 40), 9: LINE -(590, 80), 9
142 CIRCLE (590, 100), 20, 9
143 LINE (590, 120)-(590, 140), 9
144 LINE (550, 140)-(630, 170), 13, B
145 LINE (590, 170)-(590, 200), 9
146 LINE -(540, 200), 9: LINE -(540, 97 + DELTA), 9: LINE -(520, 97 + DELTA), 9
147 LINE -(526, 94 + DELTA), 9: LINE (520, 97 + DELTA)-(526, 100 + DELTA), 9
148 LINE (590, 200)-(630, 200), 9

```

149 LINE -(624, 203), 9: LINE (624, 197)-(630, 200), 9  
150 'DIBUJA REHERVIDOR  
151 LINE (500, 320)-(500, 350), 9: LINE -(590, 350), 9: LINE -(590, 330), 9  
152 LINE (590, 350)-(630, 350), 9  
153 LINE (624, 353)-(630, 350), 9: LINE (624, 347)-(630, 350), 9  
154 CIRCLE (590, 310), 20, 4  
155 LINE (590, 290)-(590, 280), 9: LINE -(520, 280), 9  
156 LINE -(526, 283), 9: LINE (520, 280)-(526, 277), 9  
157 LINE (XB \* (B - A) + A, D - XB \* (D - C))-(XB \* (B - A) + A, D), 1  
158 LINE (XD \* (B - A) + A, D - XD \* (D - C))-(XD \* (B - A) + A, D), 1  
159 LINE (ZF \* (B - A) + A, D - XF \* (D - C))-(XF \* (B - A) + A, D), 1  
160 'TITULOS  
161 LOCATE 1, 2: 'PRINT "DESTILACIÓN FRACCIONADA DE UNA MEZCLA BINARIA POR EL MÉTODO DE MC CABE-  
THIELE"  
162 LOCATE 24, 72: PRINT "XB="; XB  
163 LOCATE 14, 52: PRINT "ZF="; ZF  
164 LOCATE 14, 72: PRINT "XD="; XD  
165 LOCATE 26, 1: PRINT "NÚMERO DE ETAPAS TOTALES="; CUENT1 + CONT2 + FRACCN - 1  
166 'LOCATE 27, 1: PRINT "PLATO DE ALIMENTACIÓN="; CUENT1

## SISTEMAS DE MULTICOMPONENTES

### INTRODUCCIÓN

Muchas de las destilaciones en la industria consisten en la separación de dos o más de dos componentes.

No obstante que los principios establecidos para soluciones binarias se aplican generalmente a estas destilaciones, se presentan nuevos problemas de diseño que requieren consideración especial.

Los principios generales de diseño de los fraccionadores de multicomponentes son los mismos en muchos aspectos que aquellos para sistemas binarios, la escasez de adecuados datos en el equilibrio vapor-líquido impone severas restricciones a su aplicación. Estos datos se necesitan especialmente para líquidos no ideales; debe acentuarse el peligro de tratar nuevos diseños sin los datos adecuados de equilibrio o sin los estudios en planta piloto para estas soluciones. Un serio problema que aún no se resuelve es el de no disponer de métodos adecuados para calcular la eficiencia de los platos en los sistemas de multicomponentes.

Puesto que los cálculos del diseño implican métodos prolongados al tanteo, las computadoras de alta velocidad se emplean con mucha frecuencia, sin embargo, excepto en casos extraordinarios, los cálculos pueden realizarse manualmente, lo cual tal vez sea necesario cuando sólo se van a hacer unos diseños.

El procedimiento de diseño más seguro es el de Thiele y Geddes. Este método supone que, para una alimentación dada, se conocen desde el principio el número de platos, la posición del plato de alimentación, la relación líquido/vapor y la temperatura en cada plato; en consecuencia, se procede a calcular el producto destilado y el residuo resultante. Por supuesto, en la mayoría de los casos, al principio de los cálculos se desconocen las cantidades necesarias. El esquema que se señala aquí empieza por obtener, con un mínimo de pruebas, la información necesaria para utilizar el método Thiele-Geddes, que entonces proporciona el diseño final.

Se han elaborado técnicas de computación de alta velocidad mediante la agrupación de ecuaciones en etapas en el equilibrio y resolviendo iterativamente por etapa, con base en el método de Lewis y Matheson y el de Thiele y Geddes. Hace poco se preparó, especialmente para alimentación múltiple, un esquema para agrupar las ecuaciones para cada componente.

#### Sobre las limitaciones de las especificaciones

Inicialmente se va a suponer que ya se establecieron al menos las siguientes especificaciones:

- 1.- Temperatura, presión, composición y flujo de la alimentación.
- 2.- Presión de la destilación (con frecuencia fijada por la temperatura del agua disponible de enfriamiento, con la cual debe poderse condensar el vapor destilado para proporcionar el reflujo).
- 3.- La alimentación se va a introducir en el plato que tenga como resultado el número total menor de platos (localización óptima del plato de alimentación).
- 4.- Pérdidas de calor (aun si se supone que son cero).

En estas condiciones, se ha demostrado que sólo le quedan al diseñador tres puntos adicionales que puede especificar. Escogidos los tres, todas las demás características del fraccionador quedan fijas. El diseñador sólo puede calcular cuales serán; arbitrariamente puede asignarles valores provisionales, con el fin de realizar los cálculos por prueba y error y verificarlos posteriormente. De la siguiente lista pueden escogerse los tres puntos; cada uno de los puntos cuenta por uno:

- 1.- Número total de platos.
- 2.- Relación de reflujo.
- 3.- Relación del rehervidor, o sea, proporción entre el vapor producido por el rehervidor y el residuo separado.
- 4.- Concentración de un componente en un producto (puede escogerse un máximo de dos).
- 5.- Relación entre el flujo de un componente en el destilado y el flujo del mismo componente en el residuo, o "separación" del componente (puede escogerse un máximo de dos).
- 6.- Relación entre el destilado total y el residuo total.

A continuación se supondrá que ya se especificó la relación de reflujo y la separación de dos componentes. Son fáciles de hacer las modificaciones de los procedimientos para otros casos. Evidentemente, con más de dos componentes en la alimentación, no se conocen ni las composiciones completas ni flujos de cualquiera de los productos.

### Componentes clave

Conviene, al principio, listar los componentes de la alimentación siguiendo el orden de su volatilidad relativa. A los componentes más volátiles se les llama "ligeros" y a los menos volátiles "pesados". Con frecuencia habrá un componente, el componente clave ligero, que está presente en el residuo en cantidades importantes, mientras que los componentes más ligeros que el clave ligero se encuentran en pequeñas cantidades. Si todos los componentes tienen concentraciones importantes en el residuo, entonces el más volátil es el clave ligero. En forma similar, en el destilado habrá de ordinario una cantidad importante de un componente, el componente clave pesado; por el contrario, los componentes más pesados que el clave pesado están presentes sólo en pequeñas cantidades. Si en el destilado hay concentraciones importantes de todos los componentes, entonces el menos volátil es el clave pesado.

La dificultad de la separación, medida por el número de platos que se requieren para una relación de reflujo dada, está determinada por las concentraciones de los componentes clave en los productos. Por lo tanto es importante establecer cuáles son los componentes clave; éstos pueden ser o no aquellos cuyas separaciones se han especificado.

Las volatilidades relativas siempre pueden especificarse con respecto al clave pesado

$$\alpha = \frac{m_l}{m_{hk}} \quad (1)$$

en donde  $j$  representa cualquier componente y  $hk$  el clave pesado. Entonces,  $\alpha_{hk} = 1$  las  $\alpha$  para los componentes más ligeros que el clave pesado son mayores 1, y para los componentes más pesados son menores que 1.

### Reflujo total

Las composiciones del producto cambian con la relación de reflujo; los cálculos en el reflujo total ayudarán a decidir las composiciones finales.

La ecuación de Fenske no está limitada a mezclas binarias y puede aplicarse a los componentes clave para determinar el número mínimo de platos,

$$N_m + 1 = \frac{\log[(x_{hD}D/x_{hB}D)(x_{hW}W/x_{hW}W)]}{\log \alpha_{h,av}} \quad (2)$$

en donde  $N_m + 1$  es el número total de etapas ideales incluyendo el rehervidor (y un condensador parcial si se toma en cuenta su capacidad de fraccionamiento).

Entonces, la ecuación puede aplicarse para determinar la distribución de otros componentes en el reflujo total,

$$\frac{x_{j,D}D}{x_{j,W}W} = \alpha_{j,av}^{N_m+1} \frac{x_{j,D}D}{x_{j,W}W} \quad (3)$$

La  $\alpha$  promedio es la media geométrica de los valores en el punto de rocío del destilado y el punto de burbuja del residuo, que puede requerir varias pruebas antes de que pueda calcularse. Winn sugiere un método para reducir el número necesario de pruebas.

Una vez obtenidas  $N_m$  y  $R_m$ , se puede hacer referencia a cualquiera de las diferentes correlaciones empíricas para calcular el número de platos en la relación de reflujo  $R$ . Sin embargo, estas correlaciones pueden ser poco seguras; particularmente si la mayoría de los platos se entran en la sección de agotamiento de la torre. Una relación que es exacta para mezclas binarias y que puede aplicarse a sistemas de multicomponentes proporciona mejores resultados en este caso.

El resultado de esta estimación puede ser una base razonable para proceder directamente con el método de Thiele y Geddes.

### Composicion de los productos

Para los componentes entre los componentes clave, se puede obtener una estimación razonable de sus distribuciones en la relación de reflujo  $R$  mediante una interpolación lineal de  $x_{j,D}$  entre  $R_m$  y el reflujo total, de acuerdo con  $R / (R+1)$ .

Para los componentes más ligeros que el clave ligero y más pesados que el pesado, es mejor en este momento suponer que no se distribuyen, a menos exista una clara indicación de distribución importante en el reflujo total y a menos que  $R$  sea muy grande. Aun cantidades muy pequeñas de los componentes ligeros en el residuo o de los componentes pesados en el destilado modifican enormemente los cálculos.

### Localización del plato de alimentación

Al igual que con mezclas binarias, el cambio de la sección enriquecedora a la sección de agotamiento debe hacerse tan pronto como se haya obtenido el mayor enriquecimiento. Esto, finalmente, sólo puede determinarse mediante pruebas en los cálculos de Thiele-Geddes; mientras tanto se requiere algún tipo de guía. A continuación se supone  $L/G$  constante, se desprecia la interferencia de componentes diferentes a los clave y se supone que el plato de alimentación óptimo ocurre en la intersección de las líneas de operación de los componentes clave.

Omitiendo la designación del número del plato, la línea de operación para la sección de enriquecimiento, puede escribirse para cada uno de los componentes clave

$$x_{ik} = y_{ik} \frac{G}{L} - \frac{D}{L} x_{iKD} \quad (4)$$

$$x_{hk} = y_{hk} \frac{G}{L} - \frac{D}{L} x_{hKD} \quad (5)$$

Eliminando  $L$  se tiene

$$y_{ik} = \frac{x_{ik}}{x_{hk}} \left( y_{hk} - \frac{D}{G} x_{hKD} \right) + \frac{D}{G} x_{iKD} \quad (6)$$

En forma similar, la ecuación para la sección de agotamiento da

$$y_{ik} = \frac{x_{ik}}{x_{hk}} \left( y_{hk} + \frac{W}{G} x_{hKW} \right) - \frac{W}{G} x_{iKW} \quad (7)$$

En la intersección con la línea de operación,  $y_{hk}$  de la ecuación 6 y de la 7 son iguales, como lo son  $y_{hk}$  y  $x_{hk} / x_{hk}$ . Entonces, igualando los lados derechos de las dos expresiones da

$$\left(\frac{x_{hk}}{x_{hk}}\right)_{intersección} = \frac{Wx_{hkW} / \bar{G} + Dx_{hkD} / G}{Wx_{hkW} / \bar{G} + Dx_{hkD} / G} \quad (8)$$

Combinando las ecuaciones para el clave ligero da

$$\frac{W}{G} x_{hkW} + \frac{D}{G} x_{hkD} = \frac{GFz_{hkF} - DF(1-q)x_{hkD}}{[G - F(1-q)]G} \quad (9)$$

y se obtiene un resultado similar para el clave pesado. Sustituyendo ecuaciones en la ecuación (8), con  $G/D = R + 1$ ,

$$\left(\frac{x_{hk}}{x_{hk}}\right)_{intersección} = \frac{z_{hkF} - x_{hkD}(1-q)/(R+1)}{z_{hkF} - x_{hkD}(1-q)/(R+1)} \quad (10)$$

De acuerdo con el tratamiento de las mezclas binarias, se recordará que el de alimentación  $f$  es el paso más alto sobre la línea de operación de la sección de agotamiento y que el paso de alimentación raramente coincide exactamente con la intersección de la línea de operación. Entonces, la localización del plato de alimentación está dada por

$$\left(\frac{x_{hk}}{x_{hk}}\right)_{f-1} \geq \left(\frac{x_{hk}}{x_{hk}}\right)_{intersección} \geq \left(\frac{x_{hk}}{x_{hk}}\right)_f \quad (11)$$

Se ha propuesto un método para escoger el plato de alimentación; se basa en reducir al mínimo la irreversibilidad resultante (o en aumentar la entropía). Finalmente, la mejor localización del plato de alimentación se obtiene mediante los cálculos de Thiele-Geddes.

### Algoritmo Computacional del Programa

DMULT es un método corto para el diseño de Torres de Destilación de Multicomponentes. El programa se basó en el método de FUEM que se encuentra en la cuarta y quinta edición del Perry's Chemical Engineer's Handbook.

Este programa requiere que le sean suministrados algunos datos tales como las constantes de Antoine para las ecuaciones de presión de vapor de cada componente.

Siendo las ecuaciones de la forma.

$$\log P = [-0.2485 * A1/T(k) + B1] \quad (12)$$

$$\log P = \log P(\text{base}10) \quad (13)$$

$$P = \text{mmHg}$$

De forma acostumbrada se ingresa a DMULT para manipular el programa desde el disco de 3 1/2 .

Los datos son ingresados al programa en la línea 9000 en el siguiente orden:

9000 DATA NAME,A1,B1

Las constantes se encuentran disponibles en el Handbook of Chemistry and Physics, o bien también pueden ser calculadas si la presión de vapor en un punto y el calor de vaporización son conocidos. La constante A1 es el calor de vaporización (cal/mol) en la ecuación de Antoine

Cada componente debe ser ingresado a la memoria de manera separada, posteriormente el programa preguntara alguna información de la manera siguiente:

- 1.- Número de Componentes
- 2.- Nombre del clave ligero (LK) y del clave pesado (HK)
- 3.- Composición en la alimentación (% mol)
- 4.- Puntos de ebullición estimados en alimentación, destilados y fondos (°C)
- 5.- Porcentaje de recuperación del LK y HK
- 6.- presión del sistema (ATM)
- 7.- R/Rm; ie; 1.25\*Rm
- 8.- Q evaluado en la alimentación

El programa calcula los siguientes parámetros:

- 1.- Composición del destilado
- 2.- Composición de fondos
- 3.- Temperatura de domo y fondos
- 4.- Etapas mínimas , reflujo mínimo

5.- Etapas actuales

6.- Localización del plato de alimentación

7.- Volatilidades relativas en la alimentación, destilado y fondos.

La computadora deberá hacer los cálculos con las siguientes ecuaciones.

Número total de etapas ideales

$$Nm = \ln[(D_{LK} / D_{HK}) * (B_{HK} / B_{LK})] / \ln(K_{LK}) \quad (14)$$

Composición en domos

$$D_i = (D_{LK} / B_{HK} * z_i * K_i^{NM}) * [1 + (D_{LK} / B_{HK}) K_i^{NM}] \quad (15)$$

Composición en fondos

$$B_i = Zz_i - D_i ; y_i = P_i / D ; x_i = B_i / B \quad (16)$$

Punto de rocío del destilado (T1)

$$P_D^* = Pt / \sum_{i=1}^N y_i K_i \quad (17)$$

Punto de burbuja de fondos (T2)

$$P_B^* = Pt / \sum_{i=1}^N x_i K_i \quad (18)$$

Punto de burbuja en la alimentación

$$P_Z^* = Pt / \sum_{i=1}^N z_i K_i \quad (19)$$

Promedio geométrico de la constante de equilibrio

$$K_g = (K_1 * K_2 * K_3)^{1/3} \quad (20)$$

Ecuación de Underwood

$$Rm + 1 = \sum_{i=1}^N z_i K_i / (K_i - \theta) \quad (21)$$

$$1 - q = \sum_{i=1}^N K_i z_i / (K_i - \theta) \quad (22)$$

Correlación de Guilliland

$$(N - Nm) / (N + 1) = 0.75 - 0.75 [(R - Rm) / (R + 1)]^{0.5668} \quad (23)$$

Ecuación de Antoine para presión parcial de cada componente i

$$P_i^* = (-0.2185 * A_i / T + B_i), \text{ donde } T = ^\circ\text{K} \quad (24)$$

Localización del plato de alimentación

$$\left( \frac{M}{P} \right) = \left[ \left( \frac{B}{D} \right) \left( \frac{Z_{HK}}{Z_{LK}} \right) \left( \frac{B_{LK}}{D_{HK}} \right)^2 \right]^{0.206} \quad (25)$$

Ejemplo de ingreso de datos.

En el ejemplo del programa, se considera un sistema compuesto por  $\text{SiCl}_4$ ,  $\text{SiHCl}_3$  (TCS),  $\text{CH}_3\text{SiCl}_3$  (MTCS), y  $\text{CH}_4\text{Cl}_2\text{Si}$  (MEH). Rectifica una corriente de alimentación que contiene 10% (mol%)  $\text{SiCl}_4$ , 10% TCS, 10% MTCS

Y 70% de MEH co 1 ATM de presión. Deberá de recuperarse 90% del TCS (LK) en la cabeza total y ))% del  $\text{SiCl}_4$  (HK) en los fondos.

Para ejecutar el programa de debe tener contemplada la información antes mencionada para el correcto funcionamiento del programa.

El programa se ejecuta con la tecla F5 o siguiendo la ruta

- 1.- Ejecutar
- 2.- Iniciar

El programa empieza a recaudar la información de manera siguiente.

Escriba el título del problema? **Destilación de Silano**

Escriba el número de componentes? **4**

Composición en la alimentación (Decimal)

SICL4=? **.10**

TCS=? **.10**

MTCS=? **.10**

MEH=? **.70**

Escribe el nombre del clave ligero? **TCS**

% de Recuperación del clave ligero- (Decimal)=? **.90**

Escribe el nombre del clave pesado? **SICL4**

% de Recuperación del clave pesado- (Decimal)=? **.99**

Escribe la relacion de reflujo \* reflujo minimo=? **1.50** (heurístico)

Escribe el valor de Q en la alimentación=? **1** (diferente de cero para evitar indeterminaciones)

Escribe los moles por hora en la alimentación=? **100**

Escribe la presión en la columna (ATM)=? **1**

Escriba las temperaturas estimadas (°C)

Destilado=? **35**

Punto de burbuja en la alimentación=? **45**

Fondos=? **55**

Los resultados que se obtendrán de estos datos son los siguientes:

Identificación del problema: Destilación de Silano

Composición en la Alimentación.

Componente	%mol	Volatilidad Relativa
SICL4	.1	1
TCS	.1	2.48586
MTCS	.1	0.724751
MEH	.7	1.76574

% de Recuperación del clave ligero= 90 LK = TCS

% de Recuperación del clave pesado = 99 HK = SICL4

Min L/D = 1.29543 Etapas mínimas = 7.45902

R/RM = 1.5 Actual L/D = 1.94315

Etapas requeridas = 14.8926 Número de plato de alimentación = 11.029 (0 = TOP)

	Destilado		Fondos	
Componente	Moles	XD	Moles	XB
SICL4	.100001	2.63327E-3	9.9	0.159615

TCS	9	0.236993	1	0.0161227
MTCS	9.14071E-3	2.40699E-4	9.99086	0.16108
MEH	28.866	0.760133	41.1334	0.663182
Totales	37.9758		62.0242	

Temperatura en domos = 37.3743

Presión (ATM) = 1

Temperatura de alimentación = 41.3279

Valor de Q = 1

Temperatura en fondos = 44.1499

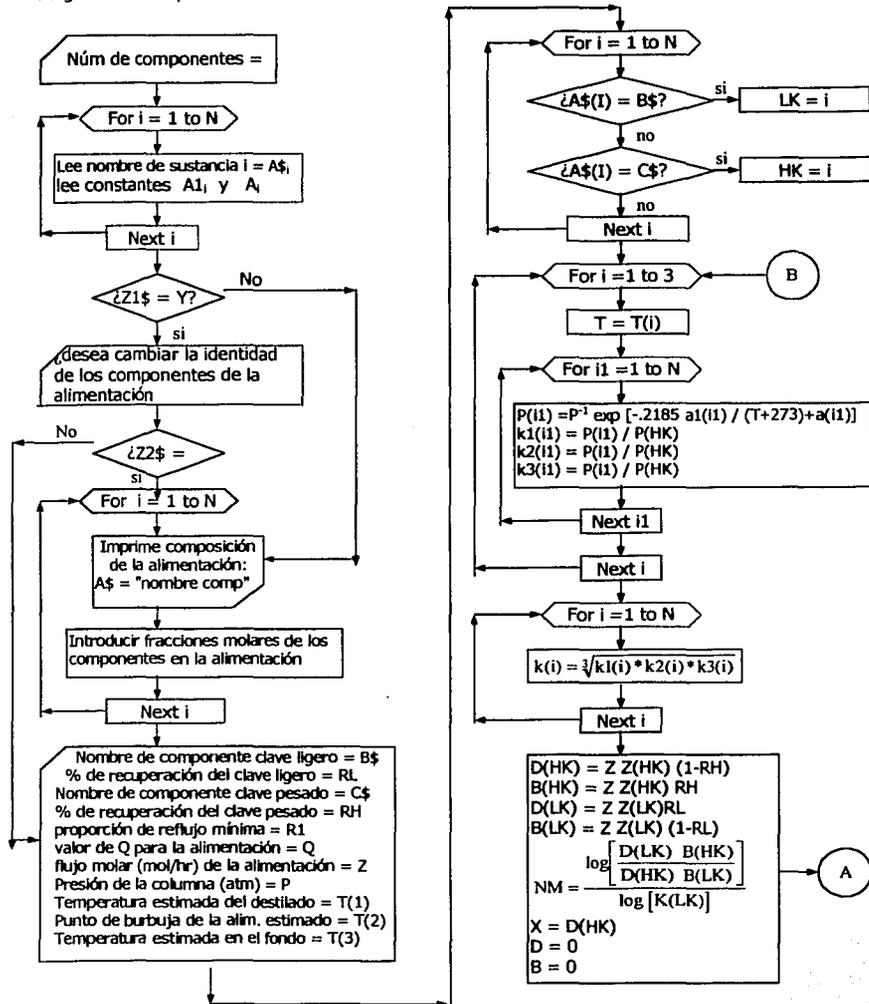
Al finalizar el programa hará la pregunta

Quieres cambiar las condiciones de la columna?, con el fin de hacer un recalcu o para corregir un error mientras se ingresaron los datos.

El programa es flexible a cualquier mezcla de multicomponentes siempre y cuando se cuente con la información termodinámica que el programa requiere para llevar a cabo los cálculos.

Con el programa el alumno puede realizar una gran cantidad de suposiciones y obtener los resultados de una manera rápida, con esto se apoya al usuario para la formación de criterios y aprovechar tiempo efectivo en el entendimiento del fenómeno a observar.

Diagrama de Bloques.





**Listado del programa**

## Destilación de Multicomponentes

```
10 DIM A$(10), B(10), D(10), K(10), P(10), Z(10), X(10), Y(10), T(3), K1(10), K2(10), A(10), A1(10), K3(10)
20 CLS
30 PRINT "DESTILACIÓN DE MULTICOMPONENTES"
40 INPUT "ESCRIBA EL NOMBRE DEL PROBLEMA:"; TITL$
50 CLS
60 INPUT "ESCRIBA EL NÚMERO DE COMPONENTES"; N
70 FOR I = 1 TO N
80 READ A$(I), A1(I), A(I)
90 NEXT I
92 IF Z1$ = "Y" THEN 94 ELSE 98
94 INPUT "DESEA CAMBIAR LA COMPOSICIÓN DE ALIMENTACIÓN (Y/N)"; Z2$
96 IF Z2$ = "N" THEN 160
98 PRINT "COMPOSICIÓN DE ALIMENTACIÓN (DECIMAL)"
100 FOR I = 1 TO N
102 PRINT A$(I); "=";
103 INPUT Z(I)
104 NEXT I
106 CLS
160 INPUT "ESCRIBA EL NOMBRE DEL CLAVE LIGERO"; B$
170 INPUT "%RECUPERACIÓN DEL CLAVE LIGERO-(DECIMAL)="; RL
175 CLS
180 INPUT "ESCRIBE EL NOMBRE DEL CLAVE PESADO"; C$
190 INPUT "% RECUPERACIÓN DEL CLAVE PESADO-(DECIMAL)="; RH
195 CLS
200 INPUT "ESCRIBA EL VALOR DEL REFLUJO MÍNIMO *MINREFLUX ="; R1
210 INPUT "ESCRIBA EL VALOR DE Q EN LA ALIMENTACIÓN ="; Q
220 INPUT "ESCRIBA LOS MOLES POR HORA EN LA ALIMENTACIÓN="; Z
230 INPUT "ESCRIBA LA PRESIÓN EN LA COLUMNA (ATM)="; P
240 CLS
250 PRINT "ESCRIBA LA TEMPERATURA ESTIMADA(C)"
260 INPUT "DESTILADO="; T(1)
270 INPUT "PUNTO DE BURBUJA EN LA ALIMENTACIÓN="; T(2)
280 INPUT "FONDOS="; T(3)
290 CLS
```

```
300 FOR I = 1 TO N
310 IF A$(I) = B$ THEN LK = I
320 IF A$(I) = C$ THEN HK = I
330 NEXT I
340 FOR I = 1 TO 3
350 T = T(I)
360 GOSUB 3000
370 ON I GOSUB 4000, 5000, 6000
380 NEXT I
390 FOR I = 1 TO N
400 K(I) = (K1(I) * K2(I) * K3(I)) ^ (1 / 3)
410 NEXT I
440 D(HK) = Z * Z(HK) * (1 - RH)
450 B(HK) = Z * Z(HK) * RH
460 D(LK) = Z * Z(LK) * RL
470 B(LK) = Z * Z(LK) * (1 - RL)
480 NM = LOG((D(LK) / D(HK)) / B(LK) * B(HK)) / LOG(K(LK))
490 X = D(HK) / B(HK): D = O: B = 0
500 FOR I = 1 TO N
510 Y = K(I) ^ NM
520 D(I) = (X * Y * Z * Z(I)) / (1 + X * Y)
530 D = D + D(I)
540 B(I) = Z * Z(I) - D(I)
550 B = B + B(I)
560 NEXT I: X1 = O: Y1 = 0: Z1 = 0
570 FOR I = 1 TO N
580 Y(I) = D(I) / D
590 Y1 = Y1 + Y(I) * K(I)
600 X(I) = B(I) / B
610 X1 = X1 + X(I) * K(I)
620 Z1 = Z1 + Z(I) * K(I)
630 NEXT I
640 GOSUB 7000
650 IF ABS(T(3) - T3) <= .005 THEN 690
670 T(1) = T1: T(2) = T2: T(3) = T3
680 GOTO 340
690 X0 = (K(LK) + 1) / 2
700 C = 1 - Q: TEMP = X0
```

```

710 F1 = 0: F2 = 0
720 FOR I = 1 TO N
730 F1 = F1 + (K(I) * Z(I)) / (K(I) - X0)
740 NEXT I
745 F1 = F1 - C
750 X0 = X0 + .0001
760 FOR I = 1 TO N
770 F2 = F2 + (K(I) * Z(I)) / (K(I) - X0)
780 NEXT I
785 F2 = F2 - C
790 X0 = X0 - .0001
800 DERV = (F2 - F1) / .0001
810 X0 = X0 - .1 * F1 / DERV
820 IF ABS((TEMP - X0) / X0) <= .001 THEN 850
830 TEMP = X0
840 GOTO 710
850 C1 = 0
860 FOR I = 1 TO N
870 C1 = C1 + K(I) * Y(I) / (K(I) - X0)
880 NEXT I
890 RM = C1 - 1
900 R = RM * R1
910 GOSUB 8000
920 N1 = ((B / D) * (Z(HK) / Z(LK)) * (B(LK) / D(HK)) ^ 2) ^ .206
930 N3 = N2 / (N1 + 1): NF = N2 - N3
940 PRINT "PROBLEMA ID: "; TITLE$
950 PRINT
960 PRINT "COMPOSICIÓN DE ALIMENTACIÓN"
970 PRINT "COMPONENTES", "MOLES%", "VOLATILIDAD RELATIVA"
980 FOR I = 1 TO N
990 PRINT A$(I), Z(I), K(I)
1000 NEXT I
1005 PRINT "% RECUPERACIÓN DEL CLAVE LIGERO="; RL * 100; "   LK="; A$(LK)
1007 PRINT "%RECUPERACIÓN DEL CLAVE PESADO="; RH * 100; "   HK="; A$(HK)
1030 PRINT "MIN.L/D="; RM; TAB(30); "MIN. ETAPAS="; NM
1040 PRINT "R/RM="; R1; TAB(30); "ACTUAL L/D="; R
1050 PRINT "REQ D ETAPAS="; N2; TAB(30); "PLATO DE ALIMENTACIÓN NO.:"; NF; "(0=TOP)"
1060 INPUT Z$

```

```
1065 CLS
1070 PRINT TAB(12); "DESTILADO"; TAB(42); "FONDOS"
1080 PRINT "COMPOSICION"; TAB(12); "MOLES"; TAB(31); "XD"; TAB(41); "MOLES"; TAB(51); "XB"
1090 FOR I = 1 TO N
1100 PRINT A$(I); TAB(12); D(I); TAB(27); Y(I); TAB(39); B(I); TAB(49); X(I)
1110 NEXT I
1115 PRINT "_____ "
1120 PRINT "TOTALES"; TAB(12); D; TAB(39); B
1130 IF N > S THEN INPUT Z$: CLS
1135 PRINT
1140 PRINT "TOP TEMP="; T1; TAB(30); "PRESIONES(ATM)="; P
1150 PRINT "TEMPERATURA DE ALIMENTACIÓN="; T2; TAB(30); "Q VALUE="; Q
1160 PRINT "TEMPERATURA DE FONDOS="; T3
1165 INPUT Z$
1170 CLS
1180 INPUT "QUIERES CAMBIAR LAS CONDICIONES DE LA COLUMNA (Y/N) "; Z1$
1190 IF Z1$ = "Y" THEN CLS : GOTO 92
1200 PRINT "EJECUCIÓN DEL PROGRAMA TERMINADO"
1210 END

3000 FOR I1 = 1 TO N
3010 P(I1) = EXP((-2.185 * A1(I1) / (T + 273.15) + A(I1)) * 2.303) / 760
3020 NEXT I1
3030 RETURN

4000 FOR I1 = 1 TO N
4010 K1(I1) = P(I1) / P(HK)
4020 NEXT I1
4030 RETURN

5000 FOR I1 = 1 TO N
5010 K2(I1) = P(I1) / P(HK)
5020 NEXT I1
5030 RETURN

6000 FOR I1 = 1 TO N
6010 K3(I1) = P(I1) / P(HK)
6020 NEXT I1
6030 RETURN

7000 P2 = P / Y1
7010 GOSUB 7900
7020 T1 = T0
```

7030 P2 = P / Z1

7040 GOSUB 7900

7050 T2 = T0

7060 P2 = P / X1

7070 GOSUB 7900

7080 T3 = T0

7090 RETURN

7900 T0 = (-.2185 \* A1(HK)) / (LOG(P2 \* 760) / 2.303 - A(HK)) - 273.15

7910 RETURN

8000 X2 = .75 - .75 \* ((R - RM) / (R + 1)) ^ .5668

8010 N2 = (1 + NM) / (1 - X2)

8020 RETURN

9000 DATA SICL4,7581.6,7.93122

9010 DATA TCS,6878.2,7.83744

9020 DATA MTCS,7450,7.69968

9030 DATA MEH,7011.1,7.78121

## CAPÍTULO V

### Diseño de Reactores

#### INTRODUCCIÓN.

La cinética química y el diseño de reactores son áreas del conocimiento fundamentales para la producción industrial de casi todas las sustancias químicas. En la ingeniería de la cinética química convergen la mayoría de los conocimientos que un estudiante de ingeniería química ha adquirido durante su formación profesional, y es precisamente su habilidad para el diseño de reactores químicos lo que marca su diferencia respecto a los demás ingenieros. Para lograr el diseño de un reactor químico es necesario utilizar los conocimientos a cerca de como realizar balances de materia y energía, como tomar en cuenta las propiedades termodinámicas de reactivos, productos y sustancias catalizadoras, tener un pleno dominio de los fenómenos de transporte de calor, difusión másica y dinámica de fluidos, así como de los fenómenos de superficie que ocurren en las reacciones heterogéneas.

Las reacciones químicas exhiben una amplia gama de comportamientos desde el punto de vista cinético. Es tan frecuente encontrar reacciones que proceden en un solo paso (reacciones elementales) como aquellas en las que el mecanismo es más complejo, procediendo mediante una serie de pasos en serie y/o paralelo (reacciones múltiples). Por lo tanto los modelos matemáticos que caracterizan dicha cinética pueden ser desde simples modelos de potencia hasta polinomios algo difíciles de manipular algebraicamente.

Los dispositivos en los que se pueden llevar a cabo una reacción química pueden ser de muy diversas geometrías y operar bajo condiciones marcadamente diferentes. La reacción puede llevarse a cabo en una fase homogénea o involucrar la existencia de varias fases dentro del sistema reaccionante. El flujo de los reactivos en fase fluida puede ser laminar o turbulento y normalmente la distribución de tiempos de residencia también es un factor que hay que tomar en cuenta.

El objetivo de la ingeniería de las reacciones químicas es proponer modelos cuantitativos que permitan ejercer un control completo sobre la cinética y el diseño de los reactores químicos y eventualmente lograr una optimización en la operación de dichos aparatos que finalmente tienen efecto sobre la economía del proceso global.

En esta sección daremos un ejemplo de la aplicación de la ingeniería de la cinética química, que corresponde al diseño de reactores ideales donde se lleve a cabo una reacción elemental en régimen no isotérmico y estado estacionario.

En el programa construye en un diagrama  $X_A$  vs  $T$ , la curva de equilibrio de la reacción reversible de primer orden de la forma  $A \leftrightarrow B$ . Traza varias curvas isocinéticas y une los máximos de esas curvas para obtener la "ruta térmica óptima". Dicha ruta es la progresión de temperaturas que debe seguirse a lo largo de un reactor de flujo en pistón, para operar en cada conversión a la máxima velocidad posible y consecuentemente minimizar el tamaño de reactor. Para una conversión de entrada en la alimentación y una conversión a la salida en el producto, el programa calcula el volumen del PFR que sigue la ruta térmica óptima. Luego traza, para la misma conversión de salida e intersectando la ruta óptima, una línea recta de pendiente  $C_p / -\Delta H_R$ , que corresponde a la línea de operación adiabática. Mediante el trazado de dicha línea es posible determinar el volumen de reactores adiabáticos, tanto CSTR como PFR. Para ello se construye la grafica de  $-1/r_A$  vs  $X_A$  y se determina el área bajo la curva entre las conversiones de entrada y salida, para obtener el volumen del reactor de flujo pistón adiabático.

Los parámetros termodinámicos y cinéticos así como las propiedades de los reactivos y productos pueden modificarse accediendo a las instrucciones respectivas en el listado del programa que se proporciona en paginas posteriores.

Un desarrollo detallado de la teoría se puede encontrar en el libro Ingeniería de las Reacciones Química de Levenspiel, aquí solamente presentamos el programa para el dimensionamiento de los reactores, correspondientes al caso del ejemplo 8.19 planteado en la 2ª edición 7ª Reimpresión 1998 de la obra citada.

### Algoritmo Computacional del programa.

A continuación se describe el algoritmo computacional para el diseño de reactores ideales no isotérmicos en los que se lleva a cabo una reacción exotérmica reversible de primer orden unimolecular.

Paso 1.- Se especifican los parámetros cinéticos y termodinámicos, que corresponden a los coeficientes cinéticos de la reacción en sentido directo e inverso a temperatura ambiente, la energía de activación, las capacidades caloríficas de las especies involucradas y la constante de equilibrio  $A \leftrightarrow R$ .

Paso 2.- Se define la conversión a la entrada y a la salida del reactor, el flujo molar de la corriente de entrada, así como la temperatura mínima permisible bajo la cual ha de operar el sistema.

Paso 3.- Se definen los valores de la temperatura con los cuales se realizarán los cálculos

Paso 4.- Se calcula la constante de equilibrio a las diferentes temperaturas definidas en el paso precedente, y al mismo tiempo se calculan las conversiones al equilibrio para cada temperatura.

Paso 5.- Se establecen los parámetros de graficación y se dibuja la curva de equilibrio en un diagrama conversión vs temperatura.

Paso 6.- Se trazan las curvas isocinéticas, cada una de ellas corresponde al lugar geométrico en el diagrama  $X_A$  vs  $T$  donde la velocidad de reacción toma un valor constante. Para trazar estas curvas se recurre a la ecuación.

$$X_A = \frac{-r_A - K_{10}e^{-E_{ACT1}/RT}}{(K_{10}e^{-E_{ACT1}/RT} + K_{20}e^{-E_{ACT2}/RT})} \quad (1)$$

$K_{10}$  = Coeficiente cinético preexponencial de la reacción directa a temperatura ambiente

$K_{20}$  = Coeficiente cinético preexponencial de la reacción inversa temperatura ambiente

$E_{ACT1}$  = Energía de Activación 1 de la reacción directa

$E_{ACT2}$  = Energía de Activación 2 de la reacción inversa

Paso 7.- Se traza la ruta térmica óptima, uniendo los máximos de las curvas isocinéticas, esto se lleva a cabo considerando todos los valores de  $X_A$  y  $T$  en la curva y eligiendo por comparación el punto más alto. La otra opción era derivar la ecuación (1) e igualar a cero, pero el tiempo de cálculo no es restrictivo y el algoritmo de comparación mostró ser eficiente.

Paso 8.- En un diagrama  $(-1 / r_A)$  vs  $X_A$  se dibuja la curva de operación correspondiente a la ruta térmica óptima, esto se consigue recuperando los pares de valores de  $-r_A$ ,  $X_A$  de la ruta térmica óptima del diagrama anterior.

Paso 9.- Mediante un ajuste polinomial (cúbico) se suaviza la línea de operación de la ruta térmica óptima y se calcula el área bajo la curva del diagrama  $(-1 / r_A)$  vs  $X_A$  lo cual nos da el volumen del reactor de flujo en pistón que opera bajo la ruta térmica óptima. El volumen de dicho reactor es el mínimo.

Paso 10.- Se dibuja el reactor de flujo en pistón correspondiente a la ruta térmica óptima y se imprime su volumen; simultáneamente, se calcula el volumen de reactor de mezcla que trabaje a la temperatura de salida leída sobre la ruta térmica óptima, esto da el valor de la velocidad de la reacción a la salida, y el volumen del CSTR corresponde al área del rectángulo con base  $X_A$  a la salida y altura  $(-1 / r_A)$  a la salida. También se representa esquemáticamente el CSTR.

Paso 11.- Se traza la recta de procesamiento adiabático sobre la curva  $(-1 / r_A)$  vs  $X_A$ , partiendo del punto de salida de  $X_A$  y su correspondiente valor de velocidad y temperatura, y haciendo uso de la pendiente calculada a partir del balance de energía térmica, correspondiente a la 201

La intersección con el eje de las abscisas ( $X_A=0$ ) permite evaluar la temperatura de entrada al reactor CSTR con temperatura de salida de ruta térmica óptima y un balance sencillo da la posibilidad de evaluar el consumo de servicios de enfriamiento o calentamiento previos a su entrada al reactor si su temperatura es mayor o menor que la ambiental. También se realizan los cálculos para determinar el consumo de servicios auxiliares que requiere la corriente de salida del reactor.

Paso 12.- Se considera la operación de reactores PFR adiabáticos, El primero de ellos corresponde al que tiene ruta de procesamiento correspondiente a la línea de operación adiabática trazada en el paso anterior. Nuevamente se van leyendo los valores de conversión y velocidad de reacción al desplazarse sobre dicha recta y se grafican dichos puntos en el diagrama ( $-1 / r_A$ ) vs  $X_A$  para clacular, mediante el área bajo la curva, el volumen del PFR adiabático.

Paso 13.- Se dibuja el PFR adiabático y se imprime su volumen así como el consumo de servicios auxiliares que demanda para preparar los reactivos previo a su entrada al reactor y acondicionar los productos a la salida.

Paso 14.- Se pasa a otra pantalla donde, en el proceso de optimización del funcionamiento de reactores PFR adiabáticos, se ensayan diferentes rectas de operación en el diagrama ( $-1 / r_A$ ) vs  $X_A$ , calculándose sus volúmenes y consumo de servicios auxiliares, obteniéndose una serie de datos que permiten al usuario elegir las mejores condiciones de procesamiento adiabático. Este proceso de búsqueda exhaustivo es el único que se ensayó ya que la implementación de otro método de optimización requiere de pasos mas elaborados. Los resultados se presentan en forma gráfica en un diagrama Volumen de reactor vs Temperatura de entrada.

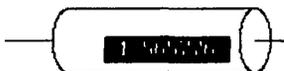
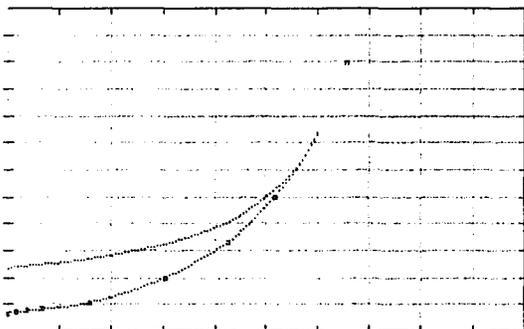
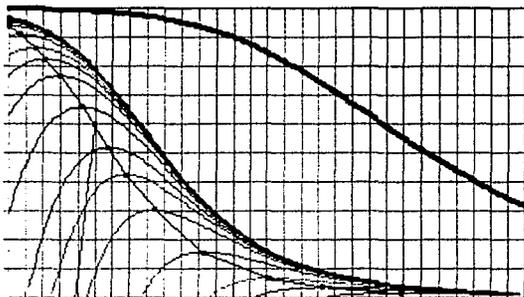
Para utilizar PROB819 es necesario realizar la secuencia de pasos que con anterioridad se han realizado en los anteriores programas.

Para la ejecución del programa en otros casos se pueden cambiar directamente en el listado del programa que también se proporciona en la presente tesis las siguientes variables.

- $E_{ACT}$  en la dirección directa e inversa, las variables en el programa son B y F respectivamente ubicados en el campo 1
- Coeficientes cinéticos preexponenciales del modelo de Arrhenius, las variables en el programa son A y D también en el campo 1
- En el campo 2 se ubica el número de puntos a graficar N, este puede ser modificado por el usuario según sea necesario.
- $X_{REQ} = X_{SALIDA}$  Composición de salida en el campo 3
- Temperatura mínima a la que puede operar el reactor  $T_{MINPER}$  = Temperatura mínima permisible, ubicado en el campo 4

Es necesario señalar que PROB819 se ajusta al ejemplo 8.19 del Levenspiel y cualquier manipulación del programa se deberá hacer con previo conocimiento del problema.

Los resultados del programa se proporcionan de la manera siguiente.

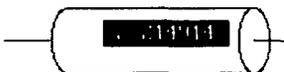


VALORES DE PER PARA  
RUTA TERMINO OPTIMO  
CON TEMP Max PERMISIBLE



4.422293

VAL. DE CSTR P/TEMP OPTIMO



VALORES DE PER PARA  
PROCESO ADIABATICO

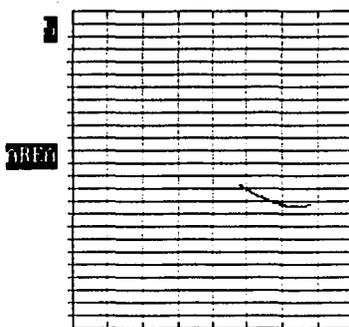
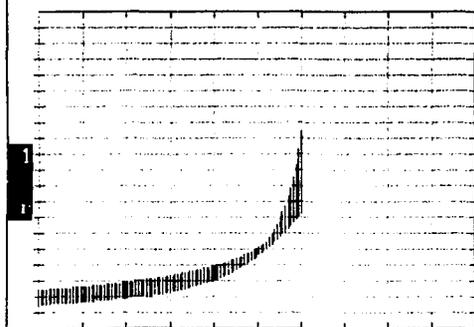
T ADIAB SALIDA 41.00001  
T ADIAB ENTRADA 83.20001

## CARACTERIZACIÓN DEL REACTOR POR ADIÓSITOS A DIFERENTES TEMPERATURAS DE OPERACIÓN

TOP: 03/0000

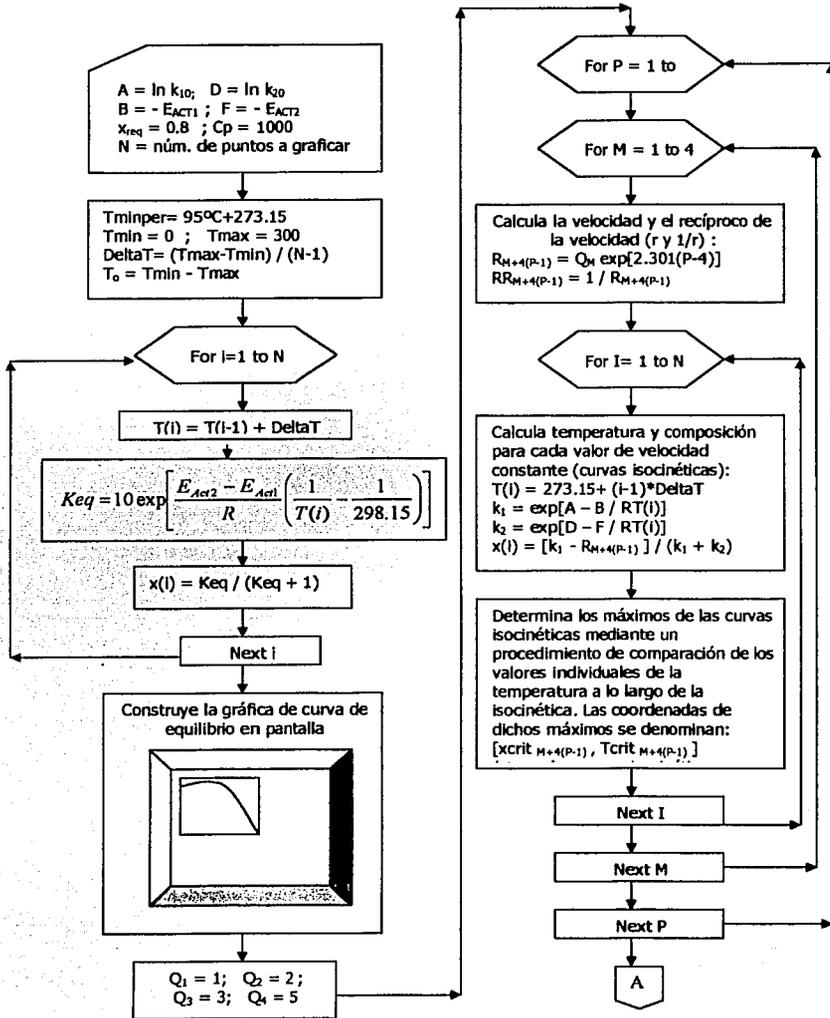
AREA DEL REACTOR

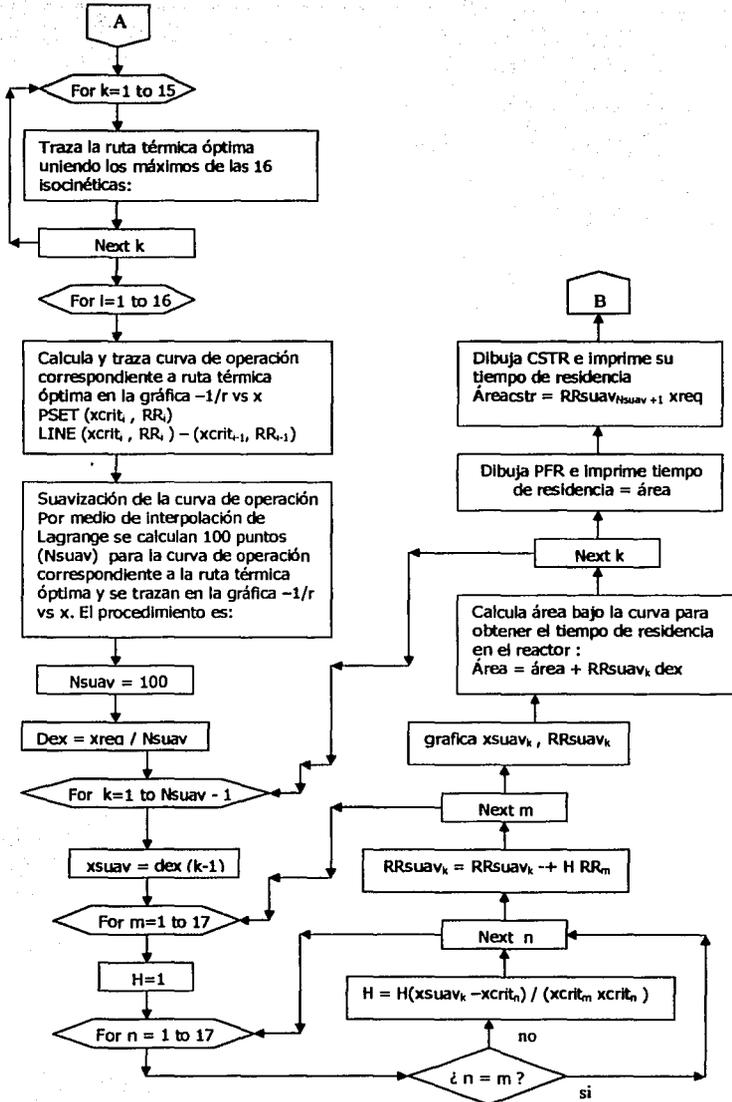
1.0000

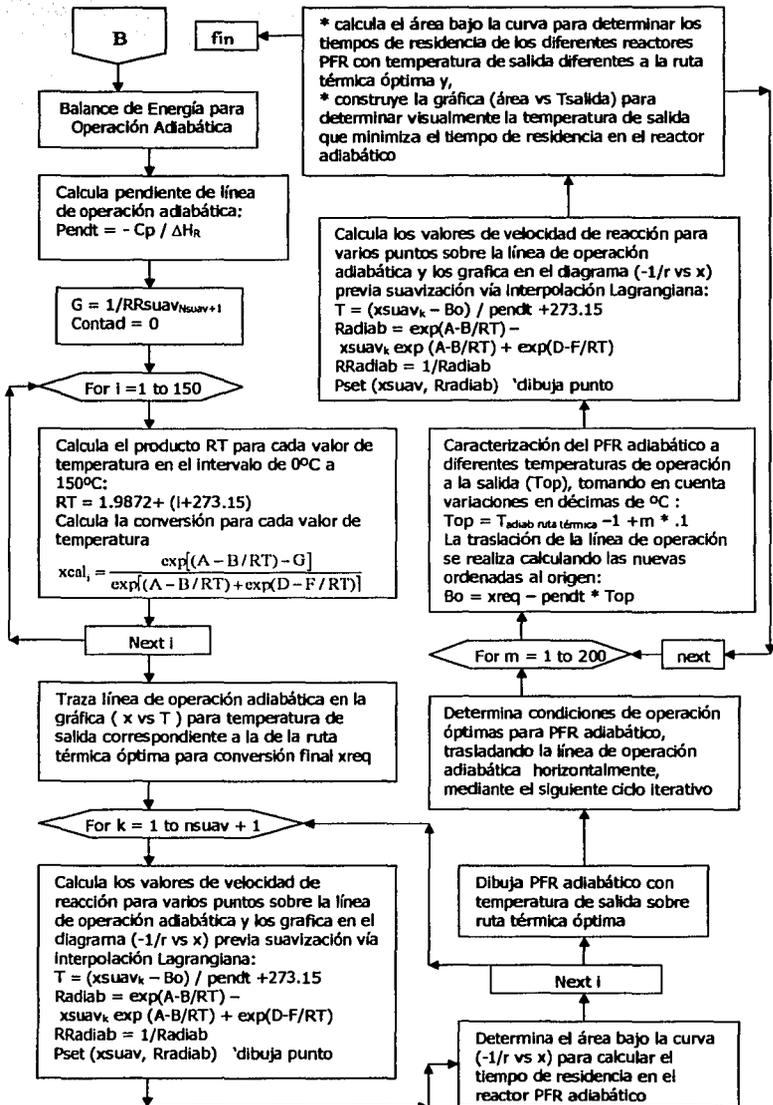


Presione cualquier tecla para continuar

## Diagrama de Bloques







## Listado del programa

'PROBLEMA 8.19 DEL LEVENSPIEL(INGENIERIA DE LAS REACCIONES QUIMICAS)

'DETERMINACIÓN DE LA RUTA TERMICA OPTIMA PARA LA REACCION REVERSIBLE A=B

SCREEN 12

' \* \* \* \* ESPECIFICACIÓN DE PARAMETROS CINETICOS

1 A = 6.9: B = 4800: D = 18.02: F = 12800

2 N = 200

3 XREQ = .6 'CONVERSIÓN A LA SALIDA DEL REACTOR

CP = 1000

DIM T(N), X(N), TN(N), XN(N), R(17), RR(17), xncrit(17), tncrit(16), tcrit(16), XCRIT(17)

4 TMINPER = 95 + 275

TMIN = 0: TMAX = 300

DELTAT = (TMAX - TMIN) / (N - 1)

T(0) = TMIN - DELTAT

FOR I = 1 TO N

T(I) = T(I - 1) + DELTAT

K = 300 \* EXP((F-B) / 1.9872 \* (1 / (T(I) + 273.15) - 1 / 298.15))

'PRINT "K="; K,

X(I) = K / (K + 1)

'PRINT T(I), X(I)

NEXT I

XMIN = 0: XMAX = 1

TMINGRAF = 0: TMAXGRAF = 300

XMINGRAF = 0: XMAXGRAF = 1

SCALET = 10: SCALEX = .1

SCREEN 12

AG = 20: CG = 20: DG = 350: BG = 200

CLS

LINE (0, 0)-(600, 440), 15, BF

LINE (CG, AG)-(CG, BG), 4

LINE (CG, AG)-(DG, AG), 4

LINE (CG, BG)-(DG, BG), 4

LINE (DG, AG)-(DG, BG), 4

PAST = TMAXGRAF + ABS(TMINGRAF)

PASX = XMAXGRAF + ABS(XMINGRAF)

EJET = CG + (DG - CG) / PAST \* ABS(TMINGRAF)

```

EJEX = AG + (BG - AG) / PASX * XMAXGRAF
LINE (EJET, AG)-(EJET, BG), 7
LINE (CG, EJEX)-(DG, EJEX), 7
REM NORMALIZACION DE ESCALA
NX = INT(PASX / SCALEX)
NT = INT(PAST / SCALET)
DIM DIVT(NT), DIVX(NX)
DIVT(1) = CG: DIVX(1) = BG
FOR I = 2 TO NT
DIVT(I) = DIVT(I - 1) + SCALET * (DG - CG) / PAST
LINE (DIVT(I), EJEX - 2)-(DIVT(I), EJEX + 2), 3
LINE (DIVT(I), AG)-(DIVT(I), BG), 10
LINE (DIVT(I), AG)-(DIVT(I), AG + 3), 3
LINE (DIVT(I), BG - 3)-(DIVT(I), BG), 3
NEXT I
LINE (CG, AG + SCALEX * (BG - AG) / PASX)-(DG, AG + SCALEX * (BG - AG) / PASX), 10
FOR J = 2 TO NX
DIVX(J) = DIVX(J - 1) - SCALEX * (BG - AG) / PASX
LINE (CG, DIVX(J))-(DG, DIVX(J)), 10
LINE (EJET - 3, DIVX(J))-(EJET + 3, DIVX(J)), 9
LINE (CG, DIVX(J))-(CG + 3, DIVX(J)), 9
LINE (DG - 3, DIVX(J))-(DG, DIVX(J)), 9
NEXT J
COLOR 4
FOR I = 1 TO N
TN(I) = T(I) * (DG - CG) / PAST + EJET
XN(I) = -X(I) * (BG - AG) / PASX + EJEX
PSET (TN(I) - 1, XN(I) + 1), 2
PSET (TN(I) - 1, XN(I)), 2
PSET (TN(I) - 1, XN(I) - 1), 2
PSET (TN(I), XN(I) + 1), 2
PSET (TN(I), XN(I)), 2
PSET (TN(I), XN(I) - 1), 2
PSET (TN(I) + 1, XN(I) + 1), 2
PSET (TN(I) + 1, XN(I)), 2
PSET (TN(I) + 1, XN(I) - 1), 2
NEXT I
FOR J = 1 TO N - 1

```

```

LINE (TN(J), XN(J))-(TN(J + 1), XN(J + 1)), 4
NEXT J
COLOR 11
'LOCATE 27, 10: PRINT "T="; TMINGRAF: LOCATE 25, 4: PRINT "X="; XMINGRAF
'LOCATE 3, 4: PRINT "X="; XMAXGRAF: LOCATE 27, 63: PRINT "T="; TMAXGRAF: LOCATE 1, 1
Q(1) = 1: Q(2) = 2: Q(3) = 3: Q(4) = 5
FOR P = 1 TO 4
FOR M = 1 TO 4
R(M + (P - 1) * 4) = Q(M) * EXP(2.301 * (P - 4))
RR(M + (P - 1) * 4) = 1 / R(M + (P - 1) * 4)
CONTAR = 0
FOR I = 1 TO N
T(I) = 273.15 + (I - 1) * DELTAT
'PRINT "t"; I; T(I),
X1 = EXP(A - B / 1.9872 / T(I))
X2 = EXP(D - F / 1.9872 / T(I))
X(I) = (X1 - R(M + (P - 1) * 4)) / (X1 + X2)
'PRINT "X"; I; "="; X(I)
TN(I) = (T(I) - 273.15) * (DG - CG) / PAST + EJET
XN(I) = -X(I) * (BG - AG) / PASX + EJEX
'PRINT "TN="; TN(I), "XN="; XN(I)
'PSET (TN(I), XN(I)), 14
IF XN(I) > XN(I - 1) AND I > 1 THEN
contar = contar + 1
IF contar = 1 AND I > 1 THEN
xncrit(M + (P - 1) * 4) = XN(I - 1)
tncrit(M + (P - 1) * 4) = TN(I - 1)
tcrit(M + (P - 1) * 4) = T(I - 1)
XCRT(M + (P - 1) * 4) = X(I - 1)
PSET (tncrit(M + (P - 1) * 4) - 1, xncrit(M + (P - 1) * 4) - 1), 4
PSET (tncrit(M + (P - 1) * 4) - 1, xncrit(M + (P - 1) * 4)), 4
PSET (tncrit(M + (P - 1) * 4) - 1, xncrit(M + (P - 1) * 4) + 1), 4
PSET (tncrit(M + (P - 1) * 4), xncrit(M + (P - 1) * 4) - 1), 4
PSET (tncrit(M + (P - 1) * 4), xncrit(M + (P - 1) * 4)), 4
PSET (tncrit(M + (P - 1) * 4), xncrit(M + (P - 1) * 4) + 1), 4
PSET (tncrit(M + (P - 1) * 4) + 1, xncrit(M + (P - 1) * 4) - 1), 4
PSET (tncrit(M + (P - 1) * 4) + 1, xncrit(M + (P - 1) * 4)), 4
PSET (tncrit(M + (P - 1) * 4) + 1, xncrit(M + (P - 1) * 4) + 1), 4

```

```

ELSE
END IF
ELSE
END IF
NEXT I
FOR J = 2 TO N - 2
IF X(J - 1) > 0 AND X(J - 1) < 1 THEN
LINE (TN(J), XN(J))-(TN(J - 1), XN(J - 1)), INT(M + (P - 1) * 4) / 2
ELSE
END IF
NEXT J
NEXT M
NEXT P
FOR K = 1 TO 15
LINE (tncrit(K), xncrit(K))-(tncrit(K + 1), xncrit(K + 1)), 4
'PRINT "Xcrit"; k; Xcrit(k); "r="; r(k)
NEXT K
DIM X1(17), X1N(17), RN(17)
AG1 = 220: CG1 = 20: DG1 = 350: BG1 = 420
LINE (CG1, AG1)-(CG1, BG1), 4
LINE (CG1, AG1)-(DG1, AG1), 4
LINE (CG1, BG1)-(DG1, BG1), 4
LINE (DG1, AG1)-(DG1, BG1), 4
PASR = 12
PASX1 = 1
SCALEX1 = .1
SCALER = 1
EJEX1 = CG1 + (DG1 - CG1) / PASX1 * 0
EJER = AG1 + (BG1 - AG1) / PASR * 12
LINE (EJEX1, AG1)-(EJEX1, BG1), 7
LINE (CG1, EJER)-(DG1, EJER), 7
REM normalizacion de escala
NX1 = INT(PASX1 / SCALEX1) + 1
NR = INT(PASR / SCALER)
DIM DIVR(NR), DIVX1(NX1)
DIVR(1) = BG1: DIVX1(1) = CG1
FOR I = 2 TO NX1
DIVX1(I) = DIVX1(I - 1) + SCALEX1 * (DG1 - CG1) / PASX1

```

```

LINE (DIVX1(I), EJER - 2)-(DIVX1(I), EJER + 2), 11
LINE (DIVX1(I), AG1)-(DIVX1(I), BG1), 11
LINE (DIVX1(I), AG1)-(DIVX1(I), AG1 + 3), 4
LINE (DIVX1(I), BG1 - 3)-(DIVX1(I), BG1), 4
NEXT I
LINE (CG1, AG1 + SCALER * (BG1 - AG1) / PASR)-(DG1, AG1 + SCALER * (BG1 - AG1) / PASR), 10
FOR J = 2 TO NR
DIVR(J) = DIVR(J - 1) - SCALER * (BG1 - AG1) / PASR
LINE (CG1, DIVR(J))-(DG1, DIVR(J)), 11
LINE (EJEX1 - 3, DIVR(J))-(EJEX1 + 3, DIVR(J)), 9
LINE (CG1, DIVR(J))-(CG1 + 3, DIVR(J)), 9
LINE (DG1 - 3, DIVR(J))-(DG1, DIVR(J)), 9
NEXT J
FOR I = 1 TO 16
IF tcrit(I) > TMINPER THEN
R(I) = -XCRIT(I) * (EXP(A - B / 1.9872 / TMINPER) + EXP(D - F / 1.9872 / TMINPER)) + EXP(A - B / 1.9872 / TMINPER)
ELSE
END IF
NEXT I
R(17) = EXP(A - B / 1.9872 / TMINPER)
COLOR 4
FOR I = 9 TO 17
'PRINT "XCRIT="; XCRIT(I); "1/R"; 1 / R(I),
X1N(I) = XCRIT(I) * (DG1 - CG1) / PASX1 + EJEX1
RR(I) = 1 / R(I)
RN(I) = -RR(I) * (BG1 - AG1) / PASR + EJER
'PRINT "RN"; RN(I)
PSET (X1N(I) - 1, RN(I) + 1), 2
PSET (X1N(I) - 1, RN(I)), 2
PSET (X1N(I) - 1, RN(I) - 1), 2
PSET (X1N(I), RN(I) + 1), 2
PSET (X1N(I), RN(I)), 2
PSET (X1N(I), RN(I) - 1), 2
PSET (X1N(I) + 1, RN(I) + 1), 2
PSET (X1N(I) + 1, RN(I)), 2
PSET (X1N(I) + 1, RN(I) - 1), 2
NEXT I
FOR J = 9 TO 16

```

LINE (X1N(J), RN(J))-(X1N(J + 1), RN(J + 1)), 14

NEXT J

'SUAVIZACIÓN DE LA CURVA DE OPERACIÓN:

NSUAV = 100

DIM XSUAV(NSUAV + 1), RRSUAV(NSUAV + 1)

DEX = XREQ / NSUAV

FOR K = 1 TO NSUAV + 1

XSUAV(K) = DEX \* (K - 1)

FOR J = 8 TO 17

H = 1

FOR N = 8 TO 17

IF N = J THEN GOTO 27

H = H \* (XSUAV(K) - XCRIT(N)) / (XCRIT(J) - XCRIT(N))

27 NEXT N

RRSUAV(K) = RRSUAV(K) + H \* RR(J)

NEXT J

RRSUAVN = -RRSUAV(K) \* (BG1 - AG1) / PASR + EJER

XSUAVN = XSUAV(K) \* (DG1 - CG1) / PASX1 + EJEX1

PSET (XSUAVN, RRSUAVN), 8

IF K > 1 THEN

AREA = AREA + RRSUAV(K) \* DEX

ELSE

END IF

NEXT K

DIBUJA PFR

CIRCLE (400, 50), 20, 4, 90 \* 3.1416 / 180, 270 \* 3.1416 / 180, 2

CIRCLE (520, 50), 20, 4, , , 2

LINE (360, 50)-(390, 50), 12

LINE (520, 50)-(540, 50), 12

LINE (400, 30)-(520, 30), 4

LINE (400, 70)-(520, 70), 4

COLOR 14

LOCATE 6, 50: PRINT "VOLUMEN DE PFR PARA": LOCATE 7, 50: PRINT "RUTA TERMICA ÓPTIMA"

LOCATE 8, 48: PRINT "CON TEMP MAX PERMISIBLE"

LOCATE 4, 54: PRINT AREA

'DIBUJA CSTR

CIRCLE (460, 200), 30, 3, 225 \* 3.1416 / 180, 315 \* 3.1416 / 180

LINE (438, 180)-(438, 220), 9

```

LINE (482, 180)-(482, 220), 9
LINE (482, 180)-(438, 180), 9
LINE (439, 181)-(481, 219), 3, BF
LINE (460, 150)-(460, 180), 4
LINE (460, 230)-(460, 237), 4: LINE (460, 237)-(490, 237), 4
COLOR 15: LOCATE 16, 47: PRINT "VOL. DE CSTR P/TEMP ÓPTIMA"
AREA1 = RRSUAV(NSUAV + 1) * XREQ
COLOR 15
LOCATE 13, 62: PRINT AREA1
'BALANCE DE ENERGÍA PARA OPERACIÓN ADIABÁTICA
PENDT = CP / 18000
G = 1 / RRSUAV(NSUAV + 1)
CONTAD = 0
DIM XCAL(150)
FOR I = 1 TO 150
  RT = (I + 273.15) * 1.9872
  XCAL(I) = (EXP(A - B / RT) - G) / (EXP(A - B / RT) + EXP(D - F / RT))
  TEMP = RT / 1.9872 - 273.15
  IF I >= 2 THEN
    IF XCAL(I) < XCAL(I - 1) AND CONTAD = 0 THEN
      'PRINT "XCAL="; XCAL(I), "XREQ="; XREQ, "TEMP="; TEMP
      TADIAB = TEMP
      CONTAD = CONTAD + 1
    ELSE
      END IF
    ELSE
      END IF
  NEXT I
  TADIABN = TADIAB - 1
  TADIABN = TADIABN * (DG - CG) / PAST + EJET
  XREQN = -XREQ * (BG - AG) / PASX + EJEX
  COLOR 2
  PSET (TADIABN, XREQN + 1)
  PSET (TADIABN, XREQN)
  PSET (TADIABN, XREQN - 1)
  PSET (TADIABN + 1, XREQN + 1)
  PSET (TADIABN + 1, XREQN)
  PSET (TADIABN + 1, XREQN - 1)

```

```

PSET (TADIABN - 1, XREQN + 1)
PSET (TADIABN - 1, XREQN)
PSET (TADIABN - 1, XREQN - 1)
T0 = TADIAB - XREQ / PENDT
COLOR 15
LOCATE 25, 48: PRINT "T ADIAB SALIDA="; (TADIAB)
LOCATE 26, 46: PRINT "T ADIAB ENTRADA="; T0
TON = T0 * (DG - CG) / PAST + EJET
LINE (TADIABN, XREQN)-(TON, EJET), 2
B0 = XREQ - PENDT * TADIAB
FOR K = 1 TO NSUAV + 1
T = ((XSUAV(K) - B0) / PENDT + 273.15)
RT = 1.9872 * T
RADIAB = EXP(A - B / RT) - XSUAV(K) * (EXP(A - B / RT) + EXP(D - F / RT))
RRADIAB = 1 / RADIAB
RRADIABN = -RRADIAB * (BG1 - AG1) / PASR + EJER
XSUAVN = XSUAV(K) * (DG1 - CG1) / PASX1 + EJEX1
PSET (XSUAVN, RRADIABN), 4
IF K > 1 THEN
AREA2 = AREA2 + RRADIAB * DEX
ELSE
END IF
NEXT K
'DIBUJA PFR ADIAB
CIRCLE (400, 300), 20, 4, 90 * 3.1416 / 180, 270 * 3.1416 / 180, 2
CIRCLE (520, 300), 20, 4, , , 2
LINE (360, 300)-(390, 300), 12
LINE (520, 300)-(540, 300), 12
LINE (400, 280)-(520, 280), 4
LINE (400, 320)-(520, 320), 4
COLOR 14
LOCATE 22, 50: PRINT "VOLUMEN DE PFR PARA": LOCATE 23, 50: PRINT "PROCESO ADIABATICO"
LOCATE 19, 54: PRINT AREA2
DO
LOOP WHILE INKEY$ = ""
'DETERMINACIÒN DE CONDICIONES DE OPERACIÒN ÓPTIMAS PARA PFR ADIABATICO
CLS
LINE (1, 1)-(600, 440), 15, BF

```

AG2 = 220: CG2 = 20: DG2 = 300: BG2 = 420

LINE (CG2, AG2)-(CG2, BG2), 4

LINE (CG2, AG2)-(DG2, AG2), 4

LINE (CG2, BG2)-(DG2, BG2), 4

LINE (DG2, AG2)-(DG2, BG2), 4

PASR2 = 20

PASX2 = 1

SCALEX2 = .1

SCALER2 = 1

EJEX2 = CG2 + (DG2 - CG2) / PASX2 \* 0

EJER2 = AG2 + (BG2 - AG2) / PASR2 \* 20

LINE (EJEX2, AG2)-(EJEX2, BG2), 7

LINE (CG2, EJER2)-(DG2, EJER2), 7

REM normalizacion de escala

NX2 = INT(PASX2 / SCALEX2) + 1

NR2 = INT(PASR2 / SCALER2)

DIM DIVR2(NR2), DIVX2(NX2)

DIVR2(1) = BG2: DIVX2(1) = CG2

FOR I = 2 TO NX2

  DIVX2(I) = DIVX2(I - 1) + SCALEX2 \* (DG2 - CG2) / PASX2

  LINE (DIVX2(I), EJER2 - 2)-(DIVX2(I), EJER2 + 2), 11

  LINE (DIVX2(I), AG2)-(DIVX2(I), BG2), 11

  LINE (DIVX2(I), AG2)-(DIVX2(I), AG2 + 3), 4

  LINE (DIVX2(I), BG2 - 3)-(DIVX2(I), BG2), 4

NEXT I

LINE (CG2, AG2 + SCALER2 \* (BG2 - AG2) / PASR2)-(DG2, AG2 + SCALER2 \* (BG2 - AG2) / PASR2), 10

FOR J = 2 TO NR2

  DIVR2(J) = DIVR2(J - 1) - SCALER2 \* (BG2 - AG2) / PASR2

  LINE (CG2, DIVR2(J))-(DG2, DIVR2(J)), 11

  LINE (EJEX2 - 3, DIVR2(J))-(EJEX2 + 3, DIVR2(J)), 9

  LINE (CG2, DIVR2(J))-(CG2 + 3, DIVR2(J)), 9

  LINE (DG2 - 3, DIVR2(J))-(DG2, DIVR2(J)), 9

NEXT J

AG4 = 220: CG4 = 370: DG4 = 550: BG4 = 420

LINE (CG4, AG4)-(CG4, BG4), 4

LINE (CG4, AG4)-(DG4, AG4), 4

LINE (CG4, BG4)-(DG4, BG4), 4

LINE (DG4, AG4)-(DG4, BG4), 4

```

PASTOP = 80
PASX4 = 5
SCALEX4 = .2
SCALETOP = 10
EJETOP = CG4 + (DG4 - CG4) / PASTOP * 0
EJEX4 = AG4 + (BG4 - AG4) / PASX4 * 5
LINE (EJETOP, AG4)-(EJETOP, BG4), 4
LINE (CG4, EJEX4)-(DG4, EJEX4), 4
NTOP = INT(PASTOP / SCALETOP) + 1
NX4 = INT(PASX4 / SCALEX4)
DIM DIVTOP(NTOP), DIVX4(NX4)
DIVX4(1) = BG4: DIVTOP(1) = CG4
FOR I = 2 TO NTOP
  DIVTOP(I) = DIVTOP(I - 1) + SCALETOP * (DG4 - CG4) / PASTOP
LINE (DIVTOP(I), EJEX4 - 2)-(DIVTOP(I), EJEX4 + 2), 11
LINE (DIVTOP(I), AG4)-(DIVTOP(I), BG4), 11
LINE (DIVTOP(I), AG4)-(DIVTOP(I), AG4 + 3), 4
LINE (DIVTOP(I), BG4 - 3)-(DIVTOP(I), BG4), 4
NEXT I
LINE (CG4, AG4 + SCALEX4 * (BG4 - AG4) / PASX4)-(DG4, AG4 + SCALEX4 * (BG4 - AG4) / PASX4), 4
FOR W = 2 TO NX4
  DIVX4(W) = DIVX4(W - 1) - SCALEX4 * (BG4 - AG4) / PASX4
LINE (CG4, DIVX4(W))-(DG4, DIVX4(W)), 4
LINE (EJETOP - 3, DIVX4(W))-(EJETOP + 3, DIVX4(W)), 9
LINE (CG4, DIVX4(W))-(CG4 + 3, DIVX4(W)), 9
LINE (DG4 - 3, DIVX4(W))-(DG4, DIVX4(W)), 9
NEXT W
LOCATE 1, 1: PRINT "CARACTERIZACIÓN DE REACTOR PFR ADIABÁTICO A DIFERENTES TEMPERATURAS DE
OPERACIÓN"

LOCATE 5, 1: PRINT "AREA DEL REACTOR "
LOCATE 20, 1: PRINT " 1"
LOCATE 21, 1: PRINT "... "
LOCATE 22, 1: PRINT " r"
LOCATE 28, 17: PRINT "CONVERSIÓN"
LOCATE 20, 42: PRINT "AREA"
LOCATE 15, 45: PRINT "5"
LOCATE 28, 53: PRINT "TEMPERATURA"

```

```
LOCATE 28, 47: PRINT "0": LOCATE 28, 70: PRINT "80"
FOR J = 1 TO 200
AREA3 = 0
TOP = TADIAB - 1 + J * .1
B0 = XREQ - PENDT * TOP
LOCATE 4, 1: PRINT "TOP="; TOP
FOR K = 1 TO NSUAV + 1
T = ((XSUAV(K) - B0) / PENDT + 273.15)
RT = 1.9872 * T
RADIAB = EXP(A - B / RT) - XSUAV(K) * (EXP(A - B / RT) + EXP(D - F / RT))
RRADIAB = 1 / RADIAB
RRADIABN = -RRADIAB * (BG2 - AG2) / PASR2 + EJER2
XSUAVN = XSUAV(K) * (DG2 - CG2) / PASX2 + EJEX2
PSET (XSUAVN, RRADIABN), 4
IF K > 1 THEN
AREA3 = AREA3 + RRADIAB * DEX
ELSE
END IF
NEXT K
TOPN = (T - 273.15) * 180 / 80 + 370
AREAN = -AREA3 * 200 / 5 + 420
'LOCATE 4, 1: PRINT "T="; T, "TOPN"; TOPN, "AREAN="; AREAN
PSET (TOPN, AREAN), 4
B0 = 0
'DO
'LOOP WHILE INKEY$ = ""
LOCATE 6, 1: PRINT AREA3
NEXT J
END
```

## **Conclusiones.**

Se concluye que el software como apoyo didáctico puede ser de gran utilidad en la formación profesional del Ingeniero Químico, disminuyendo el tiempo efectivo en la formación de sus criterios y aumentando la destreza en la resolución de problemas de ingeniería

Se concluye también que proveer al alumno con las ecuaciones características que se utilizaron en la elaboración de los programas, es de vital importancia, debido a que al cursar cada una de las materias que se han contemplado en esta tesis, el usuario puede verificar la autenticidad de estas, así como también hacer uso de ellas para efectos de resolución de problemas en clase.

Los Diagramas de Bloques cumplen la función de mostrar de una manera grafica la forma en que el programa realiza la toma de decisiones por sí solo ; concluyendo así, que el Diagrama de Bloques familiariza al usuario con la forma en que se puede diseñar un programa de cómputo

De igual forma el acercar al alumno a un lenguaje sencillo de programación, que pueda ser utilizado para crear sus propias herramientas de aprendizaje fue uno de los objetivos de esta tesis, concluyendo de esta forma , que el Listado de los Programas proporciona al usuario el lenguaje de programación útil para diseñar nuevos algoritmos.

Por último, se concluye también, que al ejemplificar cada uno de los algoritmos en la presente tesis, se apoya de una manera directa y objetiva al alumno para poder interactuar con los programas.

**Bibliografía.**

CURTIS F. Gerald , PATRICK O: Wheatley

Análisis Numérico con Aplicaciones

Editorial Pearson Educación 6ª Edición

Pgs.174-178

DONALD O. Kern.

Procesos de Transferencia de Calor

Compañía Editorial Continental, S.A de C.V México

Pgs, 14-16, 43-45, 85-88, 157-184

ROBERT E. Treybal

Operaciones de Transferencia de Masa

Editorial Mc Graw-Hill

Pgs, 478-490

OCTAVE Levenspiel

Ingeniería de las Reacciones Químicas

Editorial Reverté

Pgs, 240-249

INSTITUTO MEXICANO DEL PETROLEO

Destilación

Edición Preliminar PEMEX.

Pgs, 22-28, 31-41

DENNOS Wright

Basic Programs for Chemical Engineers

Editorial Van Nostrand Reinhold N.Y

Pgs, 18-20, 26-45, 96-107

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**