



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUIMICA

"MODELO DE TRANSPORTE DE MASA PARA
TUBERÍAS ENTERRADAS Y OTROS
PROBLEMAS"

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
INGENIERA QUIMICA METALURGICA
P R E S E N T A :
ESPERANZA GABRIELA PEÑA CRUZ



MÉXICO, D.F. EXAMENES PROFESIONALES
FACULTAD DE QUIMICA

2005

0350262



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.

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el contenido de mi trabajo recopilación.

NOMBRE: Peña Cruz
Esperanza Gabriela

FECHA: 23/Nov/2005

FIRMA: [Firma]

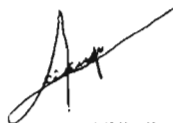
JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE	PROF.	JOSÉ BERNARDO HERNÁNDEZ MORALES
VOCAL	PROF.	VÍCTOR JORGE CORTÉS SUÁREZ
SECRETARIO	PROF.	JOSÉ ANTONIO BARRERA GODÍNEZ
1 ^{ER} SUPLENTE	PROF.	GERARDO ARÁMBURO PÉREZ
2 ^{DO} SUPLENTE	PROF.	ARTURO ALEJANDRO SÁNCHEZ SANTIAGO

SITIO EN DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

EDIFICIO D, FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM.

ASESOR DEL TEMA:



DR. JOSÉ ANTONIO BARRERA GODÍNEZ

SUSTENTANTE:



ESPERANZA GABRIELA PEÑA CRUZ

A Dios, por ese soplo en mi nariz aliento de vida que ha permanecido a lo largo de los años y que durará hasta que él lo decida.

A mis padres; Benjamín y Guadalupe, por educarme en los valores y no dejarme llevar por las cosas banales.

A mis hermanos; Diana, Rafa y Grace, por crecer a mi lado y ser parte de mi caminar por este mundo.

A Rodrigo, por demostrarme que las cosas imposibles no existen. Y cuando este caballo blanco corra libre por el campo, a lo lejos, podrá escuchar su canto.

A la familia de Rodrigo, por estar siempre pendiente de mi bienestar y abrirme las puertas de su hogar.

A mis amigos y compañeros que he tenido a lo largo de mis estudios, por brindarme su amistad y compañía a lo largo de este tiempo.

A todos los profesores, por transmitir mucho o poco la sabiduría que poseen, reconociendo que no son los únicos responsables de mi aprendizaje.

A la Facultad de Química, amada por pocos y temida por muchos.

A la Universidad Nacional Autónoma de México, La Máxima Casa de Estudios, por forjarme como persona pensante porque ha sido mi segunda casa desde iniciación universitaria hasta ahora.

ÍNDICE

NOTACIÓN.....	1
INTRODUCCIÓN.....	4
Carburización de barras cilíndricas de acero.....	4
Corrosión de ductos o tuberías enterradas.....	5
La difusión de cloruros o agentes despasivantes en columnas de concreto.....	7
Dispersión de la contaminación emanada a partir de otras fuentes.....	8
Fuga de material que se transporta mediante una tubería.....	9
Lixiviación en columnas.....	10
Sinterización de cerámicos.....	11
Difusión del oxígeno y del dióxido de carbono en la sangre.....	12
REVISIÓN DE LA LITERATURA.....	15
Solución del modelo.....	15
Método de solución.....	15
Diagrama de flujo.....	17
Algoritmo computacional.....	18
Implementación del modelo en la computadora.....	19
I.- DESARROLLO DEL MODELO.....	20
I.1.- Proceso a modelar.....	20
I.2.- Sistema.....	21
I.3.- Mecanismos participantes.....	22
I.4.- Ecuaciones de fenómenos de transporte aplicables al proceso.....	22
I.4.1.- Dinámica de fluidos.....	22
I.4.1.1.- Ecuación de continuidad del fluido.....	22
I.4.2.- Transporte de masa.....	23
I.4.2.1.- Ecuación de continuidad del componente.....	23
I.4.2.2.- 1° Ley de Fick.....	24
I.4.2.3.- 2° Ley de Fick.....	25
I.4.2.4.- ecuación de Nernst-Planck.....	25
I.5.- Modelo a resolver.....	27
I.5.1.- Sistema a modelar.....	27
I.5.2.- Simplificaciones y suposiciones.....	28
I.5.3.- Condición inicial.....	32
I.5.4.- Condiciones de frontera.....	32
I.6.- Solución del modelo.....	35
I.6.1.- Obtención de las ecuaciones nodales.....	36
I.6.2.- Diagrama de flujo del programa.....	40
I.6.3.- Algoritmo computacional.....	40
I.6.4.- Implementación del modelo en la computadora.....	41

II.- PROGRAMA DE CÓMPUTO.....	42
III.1.- Descripción del programa de cómputo.....	42
II.2.- Subrutinas y/o procedimientos.....	44
III. VALIDACIÓN.....	47
III.1.- Validación del método numérico.....	47
III.2.- Verificación del simulador para diversos casos particulares.....	49
III.2.1.- Sistema aislado.....	49
III.3.- Validación usando datos experimentales disponibles en la literatura.....	50
IV.- RESULTADOS.....	55
IV.1.- Solución analítica.....	55
IV.2.- Sistema aislado.....	56
IV.3.- Valores experimentales de carburización.....	57
IV.4.- Proceso de difusión de iones cloruro en estructuras de concreto.....	59
V.- CONCLUSIONES.....	61
REFERENCIAS.....	62
BIBLIOGRAFÍA.....	65
APÉNDICE A.....	68
Ecuaciones de diferencias finitas.....	68
APÉNDICE B.....	73
Diagrama de flujo del programa.....	73
APÉNDICE C.....	79
Algoritmo computacional.....	79
Datos de entrada y de salida.....	89
APÉNDICE D.....	92
Tabla de variables utilizadas por el programa.....	92
APÉNDICE E.....	94
Detalle de subrutinas y/o procedimientos.....	94

LISTA DE FIGURAS

Figura. 1. Localización del defecto en una tubería.....	21
Figura. 2. Corte transversal de la tubería y del sistema.....	21
Figura. 3. Esquema del sistema a modelar. Se muestra un rectángulo en el plano $r-z$	27
Figura. 4. Esquema en el que se indican las diferentes fronteras en el sistema.....	33
Figura. 5. Malla en la que se indica la numeración utilizada en este problema.....	37
Figura. 6. Malla en la que se representa la numeración utilizada en el simulador.....	38
Figura. 7. Pantalla inicial del Simulador.....	42
Figura. 8. Pantalla modificada para una Nueva prueba.....	43
Figura. 9. Muestra la ruta en la que se van a guardar los resultados.....	43
Figura 10. Diagrama de la actividad del sistema Fe-C [30].....	53
Figura 11. Comparación de la solución con el método analítico y el método numérico.....	55
Figura 12. Representación gráfica de la concentración con respecto al tiempo en un sistema aislado.....	56
Figura 13. Gráfica que compara los valores experimentales con los del simulador a 1440 s.....	57
Figura 14. Representación de los resultados obtenidos por el Simulador GP-16.....	58
Figura 15. Perfiles de concentración de los iones cloruro en estructura de concreto reforzado, calculadas por medio del Simulador GP-16.....	59
Figura 16. Comparación de los resultados de la Referencia 31 y los resultados del Simulador GP-16.....	60

LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Valores introducidos al GP-16 para hacer la validación del método numérico.....	48
Tabla 2 Datos introducidos al Simulador GP-16 para un sistema aislado [29].....	50
Tabla 3. Datos introducidos al Simulador GP-16 para un proceso de carburización [29].....	52
Tabla 4. Datos introducidos al Simulador GP-16, para un sistema en el que la difusión de cloruros dentro de estructuras de concreto daña la estructura metálica [31].....	54
Tabla 5. Resultados obtenidos con un $Fo=0.4$ y $1/Bi=0.1$, [28].....	55

NOTACIÓN

A_c	:	Acumulación
AE	:	Área externa [cm^2]
AI	:	Área interna [cm^2]
AT	:	Área de la tapa [cm^2]
C_A	:	Concentración molar del componente A [$\frac{g \text{ mol}}{cm^3}$]
C_{A_b}	:	Concentración molar del componente A en el seno del fluido
$C_{A_{Rm}}$:	Concentración molar del componente A cuando $r = r_{Rm}$
C_B	:	Concentración del componente B [$\frac{g \text{ mol}}{cm^3}$]
C_D	:	Concentración del componente D [$\frac{g \text{ mol de } D}{cm^3}$]
C_i	:	Concentración inicial conocida [$\frac{g \text{ mol}}{cm^3}$]
$C_{i,j}$:	Concentración del nodo (i, j)
$C_{i+1,j}$:	Concentración del nodo derecho $(i + 1, j)$
$C_{i-1,j}$:	Concentración del nodo izquierdo $(i - 1, j)$
$C_{i,j+1}$:	Concentración del nodo superior $(i, j + 1)$
$C_{i,j-1}$:	Concentración del nodo inferior $(i, j - 1)$
$C_{i,j}^*$:	Concentración futura o nueva del nodo (i, j)
C_n	:	Concentración futura [$\frac{g \text{ mol}}{cm^3}$]
C_S	:	Concentración de reactante conocida [$\frac{g \text{ mol}}{cm^3}$]
C_V	:	Concentración pasada [$\frac{g \text{ mol}}{cm^3}$]
D_A	:	Coefficiente de difusión [$\frac{cm^2}{seg}$]
Do	:	Factor de frecuencia para el coeficiente de difusión [$\frac{cm^2}{seg}$]
E	:	Entrada

EDP	:	Ecuación diferencial parcial
G	:	Generación
G_n	:	Solución del método de separación de variables dependiente de z
H	:	Constante de integración
i	:	Subíndice que indica coordenada en la dirección z
j	:	Subíndice que indica coordenada en la dirección r
J_{Ax}^C	:	Flux másico del componente "A" debido a los gradientes de concentración
J_A^E	:	Flux másico del componente "A" debido a los gradientes de fuerzas externas
J_A^p	:	Flux másico del componente "A" debido a los gradientes de presión
J_A^T	:	Flux másico del componente "A" debido a los gradientes de temperatura
K_A	:	Coefficiente del transporte de masa $\left[\frac{cm}{seg} \right]$
k_A	:	Componente de migración del coeficiente de difusión
k_B	:	Constante de Boltzman
K_r	:	Coefficiente de la velocidad de reacción $\left[\frac{cm^3}{(g\ mol\ de\ D)\ seg} \right]$
K_S	:	Constante de la velocidad de reacción en la superficie $\left[\frac{cm^3\ cm}{(g\ mol\ de\ B)\ seg} \right]$
L	:	Longitud del tubo $[cm]$
M	:	Número de nodos en la dirección r
N	:	Número de nodos en la dirección z
n_A	:	Flux másico $\left[\frac{g-mol}{cm^2\ seg} \right]$
N_A	:	Flux molar (flujo por unidad de área) $\left[\frac{molev}{cm^2\ seg} \right]$
N_A^*	:	Flux constante del componente "A"
Q	:	Energía de activación para el coeficiente de activación $\left[\frac{J}{g\ mol} \right]$

R	:	Constante universal de los gases $[8.314 \frac{J}{g \text{ mol } K}]$
R_A	:	Reacción química homogénea
R'_A	:	Reacción química heterogénea
R_{ex}	:	Radio externo del sistema $[cm]$
R_{in}	:	Radio interno del sistema $[cm]$
T	:	Temperatura $[^{\circ}C]$
V	:	Volumen $[cm^3]$
z_D	:	Número de nodos dañados
ρ_A	:	Concentración másica del componente A $[\frac{g \text{ mol}}{cm^3}]$
v	:	Velocidad del centro de masa
v_r	:	Componente de la velocidad del fluido en la dirección r
$w_A^{(E)}$:	Difusión eléctrica
Δr	:	Incremento en la dirección r $[cm]$
Δt	:	Incremento de tiempo $[min]$
Δz	:	Incremento en la dirección z $[cm]$
Φ	:	Potencial eléctrico
$\frac{\partial C_A}{\partial t}$:	Variación de la concentración del componente "A" con respecto al tiempo
$\frac{\partial C_A}{\partial x}$:	Variación de la concentración del componente "A" en la dirección x
$\frac{\partial T}{\partial t}$:	Variación de la temperatura con respecto al tiempo

INTRODUCCIÓN

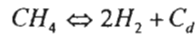
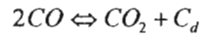
Durante el ejercicio de su profesión, un Ingeniero Químico Metalúrgico podría enfrentar problemas de naturaleza muy diversa y que aparentemente son muy distintos. Por ejemplo, los siguientes problemas pertenecen al campo de acción del Ingeniero Químico Metalúrgico.

Carburización de barras cilíndricas de acero.

La industria de los tratamientos termoquímicos tiene un gran porcentaje de participación económica en la industria metalúrgica, por lo cual su importancia es muy elevada. Para mejorar las propiedades mecánicas y / o metalúrgicas de las barras cilíndricas de acero, se hace uso de uno de los tratamientos termoquímicos. Entre los más conocidos se tiene a la carburización, que se caracteriza por ser un proceso difusional, así como también lo son la borización, el nitrurado y el aluminizado entre otros.

La carburización es un proceso que consiste en introducir carbono a la superficie de una pieza de acero con el fin de aumentar su resistencia al desgaste. El mecanismo por el cual se transporta el carbono hacia el interior de la pieza es la difusión. Este proceso inicia con la elevación de la temperatura del acero hasta que se asegura que la fase estable es la austenita, ya que en esta fase, la solubilidad de carbono en hierro aumenta significativamente. Enseguida, la pieza de acero se pone en contacto con una atmósfera cuyo contenido de carbono es elevado en comparación con el contenido en el acero. Al transcurrir el tiempo, el carbono difunde cada vez más hacia dentro de la pieza, disminuyendo paulatinamente el gradiente de concentración. A una distancia finita por debajo de la superficie del metal, los efectos del alto contenido de carbono superficial son evidentes al generarse cambios en las propiedades superficiales de la pieza. A la distancia en que esto ocurre se le denomina espesor de capa carburada. En dicho proceso, la concentración de carbono en la superficie del acero es controlada por la relación

P_{CO}/P_{CO_2} en la atmósfera y la solubilidad del carbono en el acero. Los hornos en los que se lleva a cabo este proceso son el tipo batch y el continuo. Las principales reacciones heterogéneas generadoras de carbón en dicho proceso son:



La temperatura más común que se utiliza para el proceso de carburización es de 930 °C aproximadamente. En el estudio del proceso de carburización, generalmente se considera que el mecanismo controlante es la de difusión del carbono, desde la superficie del acero hacia el seno del mismo [1]. Se debe señalar que en muchos casos no solo ocurre la difusión aisladamente sino que también puede presentarse la reacción química de precipitación de carburos [2]. La gran importancia económica de este proceso impulsa a entender y precisar este tipo de fenómenos. Esto se ve reflejado en el abundante desarrollo y avance de software disponible para la descripción y control de los procesos de carburización. Un gran número de los procesos industriales englobados en estas líneas se pueden considerar como fenómenos de difusión acompañados de reacción en coordenadas cilíndricas.

Corrosión de ductos o tuberías enterradas.

Las tuberías enterradas de acero son usadas para la transportación de aceite, gas e hidrocarburos, entre otros fluidos, ya que son ampliamente utilizadas en las industrias química y petrolera. Estas estructuras metálicas se colocan bajo tierra para liberar el espacio sobre el suelo y preservar las condiciones ambientales lo mejor posible. Sin embargo, el ambiente bajo tierra es generalmente agresivo para las estructuras descubiertas de acero. Esta agresividad la generan las especies iónicas que existen en este medio. Por lo que frecuentemente las tuberías se protegen del ataque del medio

mediante la incorporación de una barrera física (o recubrimiento) entre el metal y el sólido. Las técnicas más comunes de prevención a la corrosión usadas para aislar estructuras de acero, de la interacción con especies químicas, son las aplicaciones de capas de pinturas o revestimientos poliméricos. Otras formas de protegerlos son mediante ánodos de sacrificio, protección catódica y / o por corriente impresa entre otros. Sin embargo, frecuentemente esta protección no es suficiente y la tubería se torna vulnerable al ambiente (suelo) cuando el sistema de protección no actúa apropiadamente. Los defectos puntuales, las picaduras o grietas en la película protectora del tubo, suelen ser causados por defectos en el recubrimiento al momento de la aplicación de las cintas o por daño mecánico generado durante la instalación. De hecho "la corrosión en grietas debajo de películas es un problema común en las tuberías de acero enterradas" [3]. La presencia de una picadura implica la destrucción del tubo y por consiguiente los componentes químicos que constituyen la pared del tubo se pueden dispersar al medio que lo rodea. Aunado a esta problemática la mayoría de los métodos existentes para la determinación de la corrosión externa están basados exclusivamente en conceptos electroquímicos, puesto que las estructuras enterradas no son fáciles de inspeccionar bajo condiciones de operación, se usa una técnica de inspección puntual en la línea para estabilizar e integrar procedimientos útiles para generar criterios de análisis de riesgos. El indicador de vida útil de la estructura metálica bajo condiciones de operación es de suma importancia para conservar en buen estado estas estructuras. Inclusive, la meta de muchos trabajos es mostrar cómo las mediciones mediante una técnica electroquímica se incorporan con modelos determinísticos y los resultados experimentales conducentes a la estimación de la vida útil de tuberías expuestas a diferentes ambientes corrosivos [4]. Sin embargo, esta preocupación no se ve satisfactoriamente resuelta puesto que no se consideran con precisión los fenómenos de transporte de masa involucrados ni las reacciones químicas presentes, los cuales suelen controlar la corrosión localizada [5]. La deficiente integración de los fenómenos

difusionales, las cinéticas químicas y la electroquímica limitan actualmente la cuantificación de los procesos de corrosión localizada. La descripción o cuantificación del avance de este tipo de corrosión se complica con el tiempo, al ocurrir la dispersión al medio de los productos de corrosión, consumirse los agentes agresivos o al infiltrarse al medio los componentes químicos que originalmente se transportaban en el ducto. La aparición y/o destrucción de especies químicas, y obviamente sus respectivos transportes en el medio circundante complican su formulación matemática y limitan la integración del conocimiento que permitiría cuantificar la vida útil de estas tuberías. Esto también da lugar a problemas metalúrgicos en los que la difusión con reacción química en coordenadas cilíndricas es un problema matemático subyacente.

La difusión de cloruros o agentes despasivantes en columnas de concreto.

La corrosión de estructuras de concreto reforzadas con acero es otro problema muy frecuente en el ámbito metalúrgico. Los costos atribuidos a las pérdidas que sufre la sociedad por consecuencia de la corrosión de las estructuras de concreto son muy elevados. En este caso ocurre una difusión de algún ión agresivo a través del concreto desde el exterior hasta la varilla de acero. La difusión del cloruro y el ataque del sulfuro son dos fenómenos principales en el deterioro asociado con la difusión iónica. Además, en cualquier lugar del mundo, el suelo y el agua contienen la suficiente cantidad de cloruros y de sulfuros para deteriorar las estructuras de concreto [6]. Muchos de los resultados del análisis de la deterioración del concreto en ambientes marinos muestran la notable participación de la difusión de iones. La corrosión inducida por el cloruro suele causar un daño significativo a las estructuras de concreto reforzado resultando una reparación muy costosa [7]. La vida útil de las estructuras se ve incrementada en el orden en el que se satisfacen las cualidades mecánicas requeridas para el diseño de estas estructuras. Aún a pesar de esto, existe una pequeña difusividad de iones nocivos en el concreto. Por estas razones, el desarrollo de concretos de alto rendimiento con capacidad

de resistir la difusión de cloruros y el ataque de los sulfuros ha sido un tópico de investigación por muchos años. Esta capacidad de fijación de iones nocivos se logra mediante reacciones químicas en el seno del concreto que con dichos iones, forman compuestos del cloruro o el sulfuro, y que son altamente insolubles. Los resultados experimentales realizados indican que la modificación de la mezcla del mineral decrece gradualmente la rapidez de la difusión de los iones [8]. Ha habido esfuerzos incipientes en cuanto a la modelación matemática de este proceso. En estos esfuerzos se ha reconocido que frecuentemente se trata de difusión en coordenadas cilíndricas acompañadas de reacción homogénea en el seno del concreto y con reacción heterogénea o superficial en la intercara varilla-concreto con o sin dispersión de los productos de corrosión

Dispersión de la contaminación emanada a partir de otras fuentes.

La actividad minera produce prosperidad en las zonas donde se lleva a cabo, pero indudablemente tiene un impacto ambiental. La minería frecuentemente involucra mover mucho material estéril o muy pobre y depositarlos en montes o barracas en las cercanías de las minas, debido a que el transporte es caro. El procesamiento del mineral produce aguas de lavado que también deben almacenarse en condiciones que no afecten el drenaje local y no haya escapes o filtración de sustancias perjudiciales [9]. Sin embargo, estos jales suelen estar expuestos a la lluvia y/o humedad que contribuye a la liberación de los elementos tóxicos y/o valiosos los cuales pueden migrar al suelo y eventualmente contaminar los mantos acuíferos. La modelación de estos fenómenos puede contribuir a su control y/o prevención. Similarmente, durante la combustión del carbón, se genera una gran variedad de residuos, los cuales comúnmente se almacenan en tiraderos. Debido a la lluvia y a otros factores ambientales suele ocurrir que los elementos tóxicos y o valiosos que contienen estos residuos sean lixiviados y transportados hacia el subsuelo causando con esto una contaminación de la vegetación,

el agua y el aire. Con miras a cuantificar y prevenir estos problemas se han construido modelos del transporte de los contaminantes emanados de las cenizas de la combustión del carbón. Este modelo considera el transporte difusivo, convectivo, la adsorción y la reacción en ausencia de la precipitación homogénea de los elementos liberados de los residuos de la combustión [10]. Con estos problemas se pone de manifiesto una vez más la necesidad de contar con simuladores que permitan predecir el transporte de contaminantes en sistemas con geometría cilíndrica.

Fuga de material que se transporta mediante una tubería.

Estudios recientes muestran que los índices de accidentes en tuberías son muy elevados ya sea por la falta de mantenimiento de éstas o por la mala selección del material de construcción. La fuga de material que se transporta mediante una tubería produce una dispersión de algún componente químico o petrolero hacia el suelo, el agua o el aire causando generalmente un gran problema de contaminación y de pérdidas económicas para la planta o proceso en cuestión. Orazem y colaboradores [11] estudiaron y modelaron la corrosión externa en tuberías enterradas y tuvieron una contribución notable al incorporar, en el modelado matemático las reacciones químicas que pueden ocurrir en los defectos. Sin embargo, ignoraron que los componentes disueltos o emanados a partir de una picadura o grieta en las tubería contribuyen a alterar el transporte de masa de estos u otros componentes y por lo tanto la corrosión en el sistema. En un modelo reciente desarrollado por Kennelley [12] se ha tratado de modelar la presencia de defectos puntuales mediante la solución de la ecuación de Laplace, para el campo de potenciales alrededor del tubo. Sin embargo, las principales limitaciones de este modelo es que no predice el campo de potenciales a partir de los fenómenos que los originan como las reacciones químicas en el suelo, el crecimiento de capas de productos y el cambio en las propiedades del suelo en las inmediaciones del defecto, entre otros.

Estos efectos deben modelarse porque definitivamente modifican a la distribución del campo eléctrico en un sistema [13].

Lixiviación en columnas.

En general, en una lixiviación en columna, una cantidad conocida del material se coloca en el recipiente que posee una geometría cilíndrica y se hace correr agua o una solución acuosa, a través de los sólidos. También se puede agregar por la parte superior de ésta y se permite que drene con el tiempo. Periódicamente, se recolectan muestras de solución del lixivante o de la porción sobrenadante, las cuales se analizan químicamente. También, se pueden instalar ventanas de muestreo a intervalos, a lo largo de la altura de la columna, para muestreo intermedio [14]. En los procesos de lixiviación, por ejemplo, de minerales de cobre en pilas, las soluciones de lixiviación son continuamente recirculadas entre la etapa de extracción por solvente y la etapa de ataque del mineral, por lo cual se produce una progresiva acumulación de iones disueltos, siendo en general su concentración en la operación en estado estacionario bastante alta. La concentración de especies disueltas en una solución de lixiviación depende de la composición del mineral, en particular su ganga, del pH de la solución lixivante, de su temperatura y del régimen de lixiviación utilizado. Los factores enumerados deben necesariamente condicionar la solución lixivante, al establecerse una relación, ya sea de equilibrio o de balance dinámico, entre la alimentación del mineral y la solución. De esta forma se buscará definir adecuadamente los parámetros de diseño sobre la base del conocimiento disponible acerca de las soluciones de lixiviación utilizadas en planta y las características que en ellas se logran de acuerdo a la constitución de la ganga. El estudio que se desarrolla en la referencia [15] contempla la especificación de experimentos para la obtención de parámetros cinéticos y el desarrollo de metodologías de cálculo que, incluidas en un modelo, permitan la simulación del comportamiento de las soluciones en un circuito cerrado que incluye lixiviación en una pila dinámica y extracción por

solventes para la recuperación del cobre. El trabajo desarrollado en la referencia [16] resalta la importancia y las necesidades requeridas para un buen análisis de los mecanismos involucrados. El modelo del proceso que ocurre en un montón de lixiviado se hace en dos fases. La primera es simular la difusión de la solución a través de las partículas, esta fase consiste en dos modelos, el primero para la difusión entre las partículas (modelo de partícula) y el otro para la difusión y el movimiento de la solución entre las partículas (modelo del lecho). Estos dos modelos están acoplados debido a la igualdad del potencial en la superficie de la partícula (intercambio de partículas y el lecho) y el flux másico en la superficie de la partícula. La segunda fase del modelo simula: (a) el movimiento y la difusión del reactivo en el lecho y en las partículas, (b) la reacción química del reactivo con los reactantes, (c) la difusión radial de las especies del disolvente en la partícula y (d) el movimiento vertical de los productos de reacción a través del lecho. Todo lo anterior describe el proceso de lixiviación en columnas, el desarrollo y la necesidad de nuevos modelos que ayuden a comprender y predecir el comportamiento en general y detallado del proceso tomando en cuenta a todos los diferentes fenómenos que están involucrados.

Sinterización de cerámicos.

La sinterización es el método para la fabricación de piezas a partir de polvos cerámicos o metálicos sometidos a una temperatura por debajo de su punto de fusión. Esto se logra con base en la adhesión entre partículas. El polvo se compacta en un molde con la forma deseada, que puede o no tener geometría cilíndrica, y luego se mantiene caliente por un tiempo necesario para que se forme un objeto sólido. La sinterización en algunos casos está controlado por el proceso de difusión. Los movimientos de masa que ocurren durante la sinterización conducen a la reducción parcial o total de la porosidad que existe entre las partículas, seguida del transporte de materia debido a la difusión, evaporación y la condensación entre otros mecanismos. En la etapa final los átomos del

metal se mueven a lo largo de las fronteras de los cristales entre los poros internos, distribuyéndose la masa por el volumen interno y las paredes lisas del objeto. La mayoría, si no todos los metales pueden ser sinterizados. Se puede obtener mejoras en las propiedades del material obteniéndolo por el proceso de sinterización. En el futuro deben de aplicarse nuevas técnicas para la sinterización de compuestos cerámicos, por ejemplo: sinterización de compuestos cerámicos de espesor delgado, el laminado metal-cerámico y dispositivos para geometrías complicadas además de la típica geometría cilíndrica.

Difusión del oxígeno y del dióxido de carbono en la sangre.

August Krogh nació en Greena (Dinamarca) en 1874. Estudió Zoología en la Universidad de Copenhague, en la cual obtuvo la licenciatura en 1899. En 1906 realizó junto con su esposa, María, importantes estudios sobre la presión del oxígeno y del dióxido de carbono en la sangre, revelando importantes conclusiones de la fisiología respiratoria. Por estos trabajos le fue concedido el Premio Nobel en el año 1920. En los años anteriores, existían dos hipótesis sobre el aporte e intercambio de oxígeno al organismo: una se basaba en la creencia de una secreción de oxígeno; la otra, en que el intercambio gaseoso tenía lugar por una difusión del oxígeno a través de las paredes pulmonares. Los estudios e investigaciones de Krogh sobre la respiración en los animales, y las observaciones realizadas durante su expedición a Groenlandia sobre la presión de oxígeno y dióxido carbónico en las aguas naturales, aclararon definitivamente este enigma. El primer obstáculo que tuvo que salvar el investigador danés fue determinar las presiones de oxígeno y de dióxido de carbono en la sangre. Esto lo resolvió con la invención de un aparato que denominó micronómetro. A partir de aquí pudo concluir que existía una difusión gaseosa por medio de los alveolos pulmonares. Estas conclusiones le sirvieron para investigar en qué condiciones se realizaba el aporte de oxígeno necesario para mantener vivos los tejidos del organismo. Realizó modelos sobre la difusión del oxígeno

en los tejidos orgánicos y en los tejidos musculares. La regulación motora de los capilares es fundamental para el mantenimiento de la vida, ya que la extensa red capilar de los pulmones pone en contacto la sangre circulante con los alvéolos pulmonares, y a través de las paredes de estos alvéolos y de las paredes de los capilares tiene lugar el intercambio del oxígeno y del dióxido de carbono. Los trabajos de August Krogh sirvieron para conocer exactamente los mecanismos más íntimos de la regulación capilar [17].

Los procesos anteriores tienen varias características en común:

- Son problemas de transporte de masa, en los cuales su solución matemática ha sido limitada, ya que no hay soluciones analíticas disponibles.
- La geometría del sistema suele ser cilíndrica. Esta característica aparentemente ha generado una variedad de simplificaciones matemáticas para enfrentar esta complicación. Cabe señalar que muchos de estos problemas tienen simetría radial de manera que el flux en la dirección tangencial se puede descartar.
- Estos problemas de transporte de masa presentan en su dominio la participación de reacciones químicas tanto heterogéneas como homogéneas. Estas reacciones suelen ser de diversa índole: de adsorción-desorción, intercambio iónico, ácido-base, complejación etc. La presencia de la reacción química, cuya velocidad se puede concebir como una función de la concentración de la especie que se transporta, contribuye a limitar la disponibilidad de las soluciones matemáticas analíticas a estos problemas y fuerza el uso de técnicas aproximadas.
- La información requerida es el conocimiento del grado de dispersión de una sustancia, es decir su concentración, como una función del tiempo y la posición.

- La solución de estos problemas, hoy en día, necesariamente involucra la aplicación de técnicas numéricas que al menos proporcionen una solución aproximada a los mismos.

Objetivo del trabajo

Desarrollar un modelo matemático para resolver problemas de difusión aplicando la técnica de las diferencias finitas.

Para alcanzar este objetivo se plantea realizar las actividades siguientes:

- 1.- Desarrollo de un modelo matemático generalizado.
- 2.- Solución por medio del método de diferencias finitas explícito del modelo generalizándose así un simulador del proceso de difusión con reacción química.
- 3.- Validación del simulador con una solución analítica.
- 4.- Verificación del simulador para diversos casos extremos.
- 5.- Validación usando datos experimentales disponibles en la literatura.

REVISIÓN DE LA LITERATURA

Solución del modelo

Es claro que no existe solución analítica para la ecuación de difusión con reacción, con coeficiente de difusión variable, con condiciones de frontera no homogéneas y en coordenadas cilíndricas. Por lo que en este caso para obtener la solución de este problema es recomendable hacer uso de un método numérico aproximado tal como: el método de diferencias finitas. Entre las técnicas de diferencias finitas se encuentran: Método explícito, Método implícito y el Método de Crack Nicholson (técnica implícita). Estas técnicas numéricas se basan en la conversión de las derivadas en expresiones algebraicas para encontrar la solución de un determinado problema o sistema [18].

Método de solución

El Método de Diferencias Finitas permite obtener una solución aproximada de las ecuaciones diferenciales y tomar en cuenta las condiciones de frontera y la condición inicial que marcarán el punto de partida en la solución del problema. Un esquema *explícito* es aquel en el que la variable para la cual se desea resolver el problema se puede escribir explícitamente y por lo tanto puede ser evaluado en término de otras cantidades ya conocidas [20]. El método explícito, considera valores de propiedad conocidos a priori para evaluarla a un instante de tiempo futuro en cualquier posición i, j . Estos nuevos valores de propiedad (concentración, temperatura) sirven como entrada a un cálculo posterior, y así sucesivamente hasta que se alcance el tiempo final al cual se desea conocer el valor de la propiedad de transporte en cada posición. Este método presenta un inconveniente que reside en la elección del intervalo de tiempo que se usará durante el cálculo de propiedad (concentración, temperatura) [19].

El sistema se discretiza en un número variable de puntos formando una malla o matriz de forma rectangular. Estos puntos son conocidos como nodos y se supone poseen toda la

masa del componente realmente contenida en el volumen asociado. La aplicación del Método de Diferencias Finitas sobre el sistema dará como resultado conocer el valor de la función incógnita en cada uno de esos nodos. El número y disposición de los mismos depende de la exactitud que se desea en las soluciones. Entre mayor sea el número considerado de nodos, la solución aproximada será más precisa. La estabilidad numérica de un método se refiere al crecimiento inestable o decaimiento estable de los errores en las operaciones aritméticas necesarias para resolver las ecuaciones de diferencias finitas. Cada vez que se realice una iteración se generará un error de redondeo por la computadora, y su magnitud dependerá de cuántas operaciones realice por iteración y del número de iteraciones necesarias para que la solución numérica converja [19].

El método involucra dividir el sólido en un número de volúmenes, cada uno asociado con un nodo. Este método aproxima la función incógnita en cada nodo por su desarrollo en serie de Taylor [20, 21]. Para obtener las ecuaciones nodales se aplica un balance de masa en cada uno de ellos [ecuación 37]. Esto resulta en una ecuación algebraica cuya solución permite obtener la concentración de cada nodo en términos de las concentraciones de los nodos vecinos. El resultado de la técnica de diferencias finitas es un conjunto de n ecuaciones algebraicas, una por cada nodo en el sólido.

Criterio de estabilidad

El criterio de estabilidad indica el valor mínimo que puede ser utilizado para que exista estabilidad numérica de la solución de las ecuaciones y no haya problemas de que alguno de los denominadores sea cero, es un límite bajo el cual las ecuaciones dan resultados coherentes. Si no se cumple este criterio, la solución de la ecuación es inestable, por lo tanto, el criterio de estabilidad es una desigualdad que se debe cumplir para ciertos intervalos de números en los cuales las ecuaciones se comportan. Con este criterio se garantiza que las ecuaciones de diferencias finitas converjan a la solución aproximada.

Errores de redondeo computacional

Cualquier solución numérica, incluyendo algunas veces una solución analítica exacta a una ecuación diferencial parcial (EDP), puede ser afectada debido al número finito de dígitos en las operaciones aritméticas. Estos errores se denominan de redondeo y aparecen debido a las aproximaciones que se hacen en cada cálculo sucesivo dentro de cualquier esquema numérico de solución [20].

Errores de discretización

Por otro lado, los errores de discretización son causados por el reemplazo de un problema continuo por uno discreto y se define como la diferencia entre la solución exacta de la EDP y la solución exacta de la aproximación de diferencias finitas. Este error disminuye al incrementar el número de nodos en el sistema [20].

Errores de truncación

Considerando estos errores, se sabe que el método explícito es adecuado, sin embargo, para garantizar que este método sea convergente hacia la solución exacta, se debe aplicar el criterio de estabilidad [20].

Diagrama de flujo

Un diagrama de flujo es la representación gráfica de un algoritmo. También se puede decir que es la representación detallada en forma gráfica de cómo deben realizarse los pasos en la computadora para producir resultados. Se desarrollan antes de empezar a codificar el programa de manera que se tenga una visión de conjunto de las operaciones que se van a ejecutar, puntos de ramificación, etc. Esta representación gráfica se da cuando varios símbolos (que indican diferentes procesos en la computadora), se

relacionan entre sí mediante flechas que indican el orden en el que se deben de ejecutar los procesos. Los símbolos utilizados han sido normalizados por el instituto norteamericano de normalización (ANSI Normalization of Symbols American Institute). Su correcta construcción es sumamente importante porque, a partir del mismo se escribe un programa en algún Lenguaje de Programación. Si el Diagrama de Flujo está completo y correcto, el paso del mismo a un Lenguaje de Programación es relativamente simple y directo [23-25, 27].

Algoritmo computacional

Un algoritmo es un conjunto finito de instrucciones o pasos que sirven para ejecutar una tarea o resolver un problema. La palabra algoritmo se deriva de la traducción al latín de la palabra árabe alkhwarizmi, nombre de un matemático y astrónomo árabe que escribió un tratado sobre manipulación de números y ecuaciones en el siglo IX [26]. De un modo más formal, un algoritmo es una secuencia finita de instrucciones realizables, precisas y finitas, cuya ejecución conduce a una resolución de un problema. Las características más relevantes de los algoritmos son:

- **Finito:** un algoritmo debe siempre terminar después de un número finito de pasos.
- **Definido:** cada paso de un algoritmo debe ser definido en forma precisa, estableciendo las acciones que van a efectuarse clara y rigurosamente en cada caso.
- **Entradas:** el algoritmo tiene una o más entradas, es decir, cantidades que se introducen inicialmente al algoritmo antes de su ejecución.
- **Salidas:** un algoritmo tiene una o más salidas, es decir, cantidades que tienen una relación específica respecto a las entradas.
- **Efectivo:** significa que todas las operaciones al ser realizadas en el algoritmo, deben de ser lo suficientemente básicas de modo que puedan en

principio ser llevadas a cabo en forma exacta y en un período de tiempo finito.

En la práctica, para evaluar un buen algoritmo se considera el tiempo que requiere su ejecución, esto puede ser expresado en términos del número de veces que se ejecuta cada paso. Gracias a la capacidad para comunicar los pensamientos mediante algoritmos, se pueden construir máquinas cuyo comportamiento simula, en alguna medida, la inteligencia. El nivel de inteligencia que simula la máquina está limitado por la inteligencia que podamos comunicarle por medio de algoritmos [27].

Implementación del modelo en la computadora

Visual Basic es uno de los primeros lenguajes de programación que incorporan un verdadero entorno WYSIWYG (lo que ve es lo que obtiene). Un programa de Windows ofrece un alto grado de interacción con el usuario ya que utiliza los elementos gráficos que forman los objetos que ve el usuario en su ventana.

L- DESARROLLO DEL MODELO

En este capítulo se presentan los pasos seguidos para la elaboración de un modelo matemático que simula uno de los diferentes casos mencionados en la introducción.

11.- Proceso a modelar

De acuerdo a los objetivos ya establecidos se desea obtener un modelo aplicable a distintos procesos los cuales tienen características comunes y que se engloban a continuación.

El proceso a modelar incluye la existencia de un defecto (provocado por agentes externos) sobre la superficie o a través de la pared en un ducto o tubería inmersa (enterrada) en diferentes electrolitos. En particular se analiza una tubería enterrada. El electrolito, la tierra o subsuelo es el sistema el cual contiene especies, iónicas o moleculares, y éstas son las que interactúan con la tubería, estructura metálica. Este análisis, no proyecta las causas que originaron dicho defecto, sino busca conocer el transporte de los elementos que interactúan en el sistema; es decir, el modelo se enfoca solamente a la parte externa del tubo y el medio que lo rodea. La Figura 1, muestra el esquema general del sistema. En una zona del ducto, se localiza un defecto, del cual se conocen dimensiones, posición y propiedades específicas que lo describen. Además se cuenta con una descripción cuantitativa de los fenómenos que en él ocurren o se generan, por ejemplo, reacciones químicas.

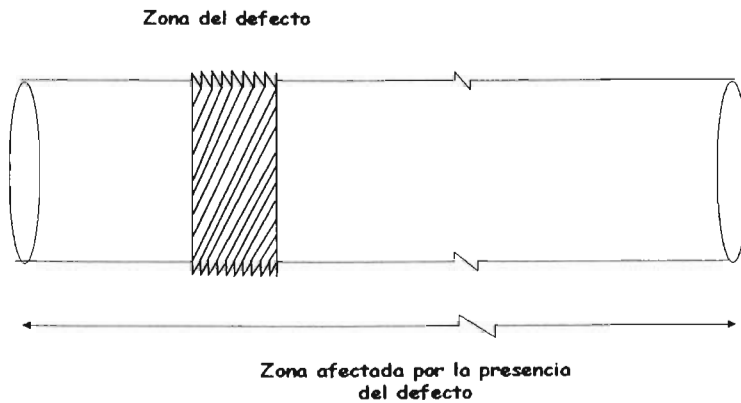


Figura. 1. Localización del defecto en una tubería.

1.2.- Sistema

Para un mejor análisis y entendimiento del sistema, en la Figura 2 se presenta una vista de un corte del mismo. En la figura se puede distinguir la zona que compone el sistema: un cilindro hueco que rodea al ducto o tubería.

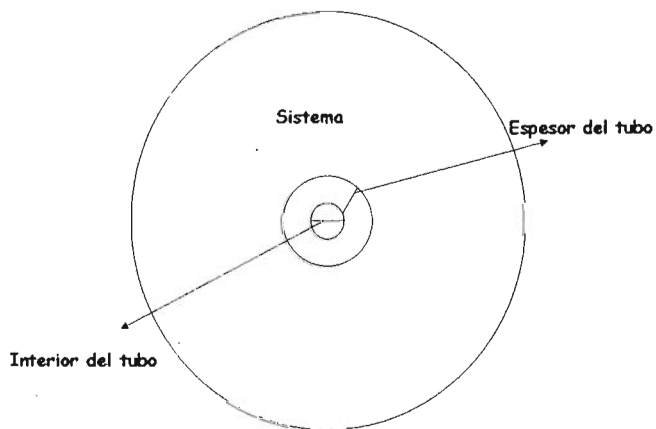


Figura. 2. Corte transversal de la tubería y del sistema.

L3.- Mecanismos participantes

Los mecanismos de transporte de masa que podrían estar involucrados en el sistema analizado son: convección, reacción química y difusión. La convección involucra la difusión acompañada de movimiento del fluido. La reacción química "genera" masa o "consume" masa. La difusión involucra el movimiento de especies a distancias atómicas o moleculares; este mecanismo se presenta esencialmente en sólidos. El mecanismo de difusión puede estudiarse bajo dos enfoques: atomístico y fenomenológico. El enfoque atomístico estudia los mecanismos de difusión al nivel de la estructura cristalina, su propósito es encontrar las relaciones entre la difusividad y la microestructura y se considera que la difusión ocurre al darse un desplazamiento de diferentes partículas (átomos, iones, moléculas), es decir, a nivel atómico. El enfoque fenomenológico estudia con qué rapidez se transporta el soluto dentro del solvente sólido y cómo se puede expresar esa rapidez en función de parámetros que sean medibles. Este es el enfoque que se aplicará en este trabajo.

L4.- Ecuaciones de fenómenos de transporte aplicables al proceso

A continuación se mencionan algunas ecuaciones de fenómenos de transporte que pueden ser utilizadas para modelar los procesos metalúrgicos.

L4.1.- Dinámica de fluidos

L4.1.1.- Ecuación de continuidad del fluido

La ecuación de continuidad representa un balance de masa que requiere la velocidad de acumulación de la masa dentro de un volumen de control en el fluido que es la diferencia entre la velocidad de masa que entra y la que sale en ese volumen.

En notación corta, la ecuación de continuidad es:

$$\nabla \cdot \nu = \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad 1$$

Donde ν = velocidad del fluido y como es un vector, posee magnitud, dirección y sentido.

La ecuación de continuidad para el fluido en coordenadas cilíndricas se escribe:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho_r \nu_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}(\rho_\theta \nu_\theta) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho_z \nu_z) = 0 \quad 2$$

Donde ρ corresponde a la concentración másica del fluido en cuestión y los subíndices a las concentraciones en esas direcciones, ν_r corresponde a la componente en la dirección r , ν_θ corresponde a la componente en la dirección θ y ν_z corresponde a la componente en la dirección z .

Esta ecuación junto con las ecuaciones de movimiento y energía permiten discernir el comportamiento del fluido mediante la cuantificación de las distribuciones de sus velocidades.

14.2.- Transporte de masa

14.21.- Ecuación de continuidad del componente

La ecuación más general que describe el transporte de masa en el sistema es la ecuación de continuidad del componente. Por lo tanto, se parte de la aplicación de la ecuación de continuidad para un componente "A" en coordenadas cilíndricas y en unidades molares

$\left[\frac{\text{g mol}}{\text{cm}^3} \right]$.

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r N_{A_r}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}(N_{A_\theta}) + \frac{\partial}{\partial z}(N_{A_z}) \right) = R_A \quad 3$$

Donde $\frac{\partial C_A}{\partial t}$ es la variación de la concentración del componente "A" con respecto al tiempo, $\frac{\partial}{\partial r}(rN_A)$ es la variación del flux del componente "A" en la dirección r y lo correspondiente en la dirección θ, z , R_A es la reacción homogénea.

14.2.2- 1ª Ley de Fick

Difusión debida a un gradiente de concentraciones:

Las moléculas que se encuentran en solución no están estáticas, si no más bien se encuentran en constante movimiento y como resultado de ese movimiento existen colisiones entre las moléculas vecinas. En la región de mayor concentración, las colisiones son más probables que en la región de menor concentración por lo que se genera un gradiente de colisiones:

$$j_A^{(c)} = \rho_A w_A^{(c)} = -D_A \nabla \rho_A \quad 4$$

Donde $j_A^{(c)}$ representa el flux másico del componente "A" debido a los gradientes de concentración, ρ_A es la concentración másica del componente "A", $w_A^{(c)}$ es la velocidad de difusión ordinaria respecto al centro másico del sistema y D_A es el coeficiente de difusión. Esta es la 1ª Ley de Fick generalizada.

En una dirección, esta ecuación describe la rapidez de transferencia de soluto a través de una superficie Δ la expresión matemática de esta ley es:

$$J_{A_x}^c = -D_A \frac{\partial C_A}{\partial x} \quad 5$$

Donde $J_{A_x}^c$ es la densidad de transporte de partículas, es decir, el número efectivo de partículas que atraviesan en la unidad de tiempo un área unitaria perpendicular a la dirección en la que tiene lugar la difusión. Esta ecuación difusiva representa exclusivamente el flux de soluto debido al gradiente de concentración en la dirección x .

D_A es la difusividad del soluto en el solvente y $\frac{\partial C_A}{\partial x}$ es el gradiente de la concentración de soluto en la dirección de x . Esta ley permite determinar o modelar el transporte unidireccional de un componente en estado estacionario.

14.2.3.- 2ª Ley de Fick

Si se considera el transporte puramente difusivo (sin reacción), y debido solamente a gradientes de concentración en estado inestable, es necesario recurrir a la 2ª ley de Fick. La segunda ley de Fick, describe la variación de la concentración de la sustancia que difunde en el espacio y en el tiempo.

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_A \left[\frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_A}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 C_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right] \quad 6$$

La suposición de que no hay movimiento del fluido restringe su aplicabilidad a la difusión en sólidos o líquidos estacionarios y a sistemas binarios de gases o líquidos. Tampoco considera reacciones homogéneas por lo que su uso también es muy restringido.

14.2.4.- Ecuación de Nernst-Planck

La ecuación de Nernst-Planck permite tomar en cuenta al gradiente de concentración y una diferencia de potencial eléctrico que pueden hacer que los iones se muevan de un lado al otro en una solución.

$$N_A = -D \nabla i - \frac{G}{e} \nabla V = -D \left(\nabla i + \frac{i e}{k_B T} \right) \nabla V \quad 7$$

En esta expresión se usó la relación de Einstein, $G = \frac{i e^2 D}{k_B T}$ donde k_B es la constante de Boltzmann y T la temperatura. La relación de Einstein conecta la conductividad con el coeficiente de difusión. Esta ecuación permite incorporar el efecto del campo eléctrico en la evaluación de un transporte puramente difusivo.

Una expresión aún más general para calcular el flux de una sustancia debe incluir los efectos de otros factores.

Así, cuando los iones están en solución, ocurren tres mecanismos de movimiento: movimiento browniano, movimiento debido a un campo eléctrico y la difusión debida a un gradiente de concentraciones.

Movimiento debido a un campo eléctrico:

El transporte de carga es acelerado por la atracción eléctrica debida a un campo eléctrico. Después de cada colisión la velocidad disminuye y la recuperación de la aceleración es lenta debida a la atracción del transporte de carga y al campo eléctrico:

$$j_A^{(E)} = \rho_A w_A^{(E)} = -\rho_A k_A \nabla \Phi \quad 8$$

Donde $j_A^{(E)}$ representa el flux másico del componente "A" debido a los gradientes de las fuerzas externas, ρ_A es la concentración másica del componente "A", $w_A^{(E)}$ es la difusión eléctrica; velocidad de migración del componente "A", k_A es la migración del coeficiente de difusión (movilidad) y Φ es el potencial eléctrico.

Dado que el flux másico puede incluir componentes, debido a los gradientes de concentración, presión, temperatura y fuerzas externas, la ecuación representativa es:

$$N_A = j_A^{(C)} + j_A^{(\rho)} + j_A^{(T)} + j_A^{(E)} \quad 9$$

Donde N_A representa el flux molar del componente "A" respecto a un sistema de referencia fijo.

Esta expresión del flux es la que se debe sustituir en la ecuación de continuidad del componente [ecuación 3, en la página 23] para cuantificar su transporte.

L5.- Modelo a resolver

L5.1.- Sistema a modelar

Lo que interesa obtener es la variación de la concentración y los gradientes de concentración a diferentes tiempos y con diferentes condiciones a la frontera, por lo que se adopta una percepción microscópica. Se considera una geometría de sistema consistente de un cilindro hueco que cubre un tubo y que contiene parte de un defecto puntual o en una zona y cuya manifestación es angular y axialmente simétrica de manera que angularmente no se presentan gradientes atribuibles a este defecto. Este sistema puede representarse por el plano mostrado en la Figura 3. Dicho plano representa una proyección del sistema en r - z y corresponde con el sistema real debido a que el eje de simetría lo genera. Este tipo de sistemas se conoce como axi-simétrico.

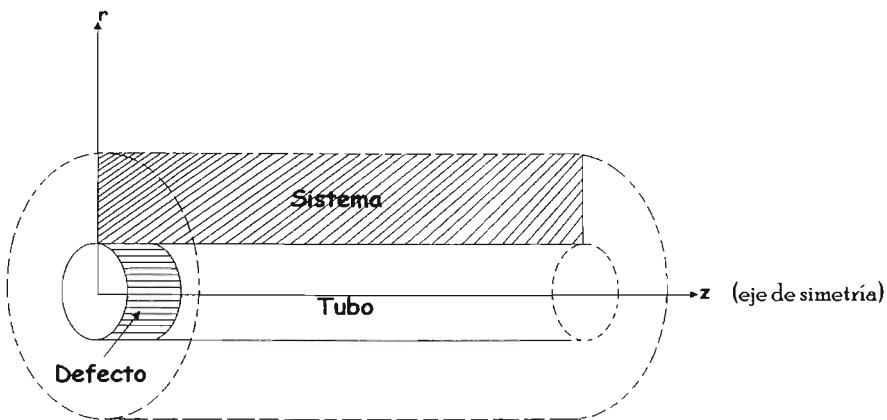


Figura. 3. Esquema del sistema a modelar. Se muestra un rectángulo en el plano r - z .

15.2.- Simplificaciones y suposiciones

A continuación se describen las simplificaciones y suposiciones utilizadas para acotar el problema.

1.- Sistema sin agitación

No se considera el término por convección (o movimiento del fluido) ya que en el estudio planteado no se cuenta con un fluido, sino que es una difusión en sólido. Sin embargo, es posible estimar con menor precisión el problema convectivo utilizando coeficientes de difusión modificados para tomar en cuenta este fenómeno.

2.- Campo eléctrico y térmico

No se considera el término asociado al transporte debido a la presencia de un campo eléctrico ni térmico ya que éstos campos no se consideran, porque no se está modelando el transporte de calor ni el transporte de masa de iones asociado a un campo eléctrico (pero pueden ser incluidos para otro análisis más completo), por lo que la ecuación se reescribe como:

$$N_A = J_A^C \quad 10$$

Por lo tanto la ecuación de Nernst-Planck se simplifica a:

$$N_{Ar} = -D_A \frac{\partial C_A}{\partial r} \quad 11$$

$$N_{Az} = -D_A \frac{\partial C_A}{\partial z} \quad 12$$

3.- Simetría del defecto

Por la forma del defecto, un anillo y la simetría del defecto, el sistema es radial. Por lo tanto, $\frac{dN_A}{d\theta} = 0$, i. e. no se considera flujo en la dirección θ , por lo que la ecuación de continuidad queda:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left(-\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D_A \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(D_A \frac{\partial C_A}{\partial z} \right) \right) = R_A \quad 13$$

Donde ya han sido sustituidas las ecuaciones 11 y 12.

4.- Coeficiente de difusión variable

El coeficiente de difusión es función de la temperatura; de acuerdo a:

$$D_A = D_0 \exp\left[\frac{-Q}{RT}\right] \quad 14$$

Esta ecuación es conocida como la ecuación de Arrhenius.

Si el coeficiente de difusión no solo depende de la temperatura sino también es dependiente de la concentración $D = f(C)$, entonces la expresión 14 se puede reescribir como:

$$D_A = D_0 \exp\left[\frac{-Q}{RT}\right] f(C) \quad 15$$

Cabe señalar que para que esta ecuación sea utilizada en el simulador, el usuario debe de añadir el término de la dependencia de la concentración en Private Sub Label12_Click() localizada en el código de la "Forma 3" llamada "Propiedades y parámetros". La lógica utilizada en el modelo para considerar los coeficientes de difusión se muestra como:

$$D_{A-B-D} \rightarrow D_{A-sistema} \rightarrow D \begin{cases} \nearrow D_0 \exp\left(\frac{-Q}{RT}\right) \\ \searrow D_0 \exp\left(\frac{-Q}{RT}\right) f(C) \end{cases}$$

5.- Estado inestable

Es un problema en estado inestable por lo que la concentración del componente "A" en todo el sistema varía con el tiempo.

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} \neq 0 \quad 16$$

6.- Reacción química homogénea en el sistema

Existe reacción química homogénea del componente "A" con otro componente "D" que se tiene en el sistema.



que da origen a un término de generación o consumo de componente "A".

$$R_A = -K_r C_A C_D \quad 18$$

Donde K_r es la constante de la velocidad de reacción homogénea por unidad de volumen y C_D es la concentración del componente D. Esta reacción permite considerar una precipitación, adsorción o fijación de "A" o inclusive un intercambio iónico.

7.- El defecto

En cuanto a su extensión en la dirección "z", el defecto que se desea considerar puede ser puntual, una zona o toda la superficie que contacta al tubo. Es decir su localización es sobre la superficie interior del sistema cilindro hueco. Por lo tanto, tiene una longitud variable desde un punto hasta lo largo del sistema. En esta zona los fenómenos que ocurren se pueden manifestar como:

a) Reacción química heterogénea

Puede ocurrir una reacción química heterogénea la cual es del tipo:



Donde "A" es el componente que se transporta y "B" que es otro componente que estaría en la zona de reacción.

b) Flux convectivo.

También es posible que en este defecto se tenga una entrada o salida del mismo componente "A" y que el flux al cual ocurre este transporte se pueda expresar como un flux convectivo. También debiera ser posible definir este flux como una constante, N_A' cuyo signo indicaría si entra o sale del sistema.

c) Concentración conocida "A".

Otro de los casos que se podría presentar en el defecto, es la de una concentración conocida y constante que rodea esa zona. Esto puede ocurrir cuando se tiene una fase, en dicho lugar, que tiene una elevada y constante actividad de "A" o que de alguna manera fija su concentración a un valor conocido.

8.- Propiedades del sólido

Se considera un sistema mucho más grande que la zona afectada por el defecto para obtener una perspectiva más amplia del comportamiento del transporte de masa del componente en cuestión.

9.- Fronteras aisladas

La frontera lateral izquierda del sistema [en $z = 0, r_{rim} < r < r_{rex}$] (ver Figura 4, en la página 36) se ha ubicado a la mitad de la longitud del defecto, por lo que representa un plano de simetría respecto a "z". Por lo tanto se puede considerar como una frontera aislada por lo que no entra ni sale ningún tipo de fluido. De forma parecida, la frontera horizontal inferior [en $z_D < z < L, r = r_{rim}$] se comporta similarmente ya que en esta región la superficie exterior del tubo no reacciona, ni tiene fuga (puesto que se encuentra fuera de la distancia dañada) y se comporta como una pared aislante para el transporte de "A".

10.- Fronteras de concentración conocida

En la frontera lateral derecha del sistema [en $z = L, r_{Rin} \leq r \leq r_{Re.x}$] existe una concentración conocida y constante, lo cual puede ocurrir cuando se tiene una fase, que posee una elevada y constante actividad de "A" o que de alguna manera fija su concentración a un valor conocido. Similarmente la frontera horizontal superior [en $0 \leq z \leq L, r = r_{Re.x}$] se encuentra representada por una concentración conocida.

15.3.- Condición inicial

Se puede establecer que al inicio, todo el sistema tiene una concentración conocida, es decir que en el estado inicial el sistema está completamente definido. Por lo que se considera la concentración inicial de acuerdo al problema que se quiere simular, por ejemplo, se tiene en el sistema (electrolito) una concentración de cloruros que avanza hacia la estructura metálica, entonces esa se toma como la concentración inicial.

C.I

$$r_{Rin} \leq r \leq r_{Re.x}$$

$$0 \leq z \leq L$$

$$C(r, z, 0) = C_{inicial conocida} = C_i \quad 20$$

15.4.- Condiciones de frontera

La Figura 4 esquematiza al sistema y a las diferentes condiciones de frontera con las que se ha realizado este estudio.

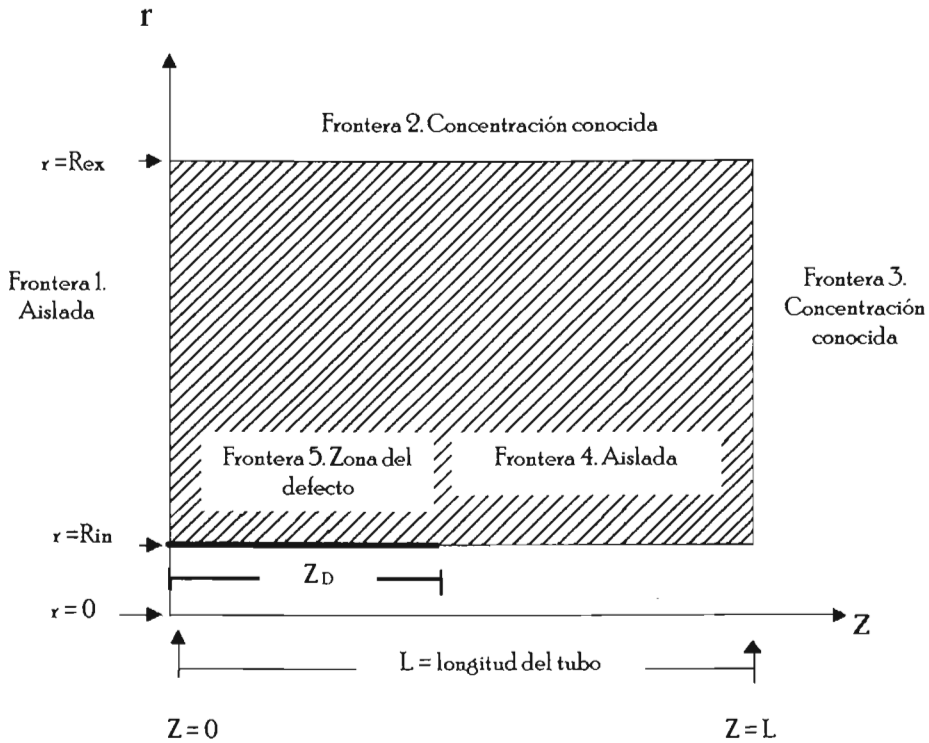


Figura. 4. Esquema en el que se indican las diferentes fronteras en el sistema.

Frontera 1: Superficie sellada o aislada.

Esta frontera está localizada en el plano de simetría que divide al defecto simétricamente y define toda una superficie aislada por la cual no ocurre ningún tipo de transporte. Esta condición se aplica basándose en la condición de simetría en la dirección z que se da a la mitad de la zona del defecto.

C. F. 1

$$r_{Rin} < r < r_{ReX}$$

$$z = 0$$

$$N_A = J_A = 0$$

21

Por lo tanto

$$J_A = -D_A \frac{\partial C_A}{\partial z} = -\frac{\partial C_A}{\partial z} = 0 \quad 22$$

Frontera 2: Concentración constante.

Asumiendo que se considerará un sistema mucho más grande que la zona afectada por el defecto, se puede aplicar esta suposición. Aunque este modelo puede ser fácilmente modificado para incorporar otras condiciones en esta frontera. La frontera 2, está definida por una concentración de reactante conocida.

C. F. 2.

$$r = r_{Re.x}$$

$$0 \leq z \leq L$$

$$C(r, z, t) = C_{conocida} = C_S \quad 23$$

Frontera 3: Concentración constante.

Al igual que la frontera 2, se define una frontera de concentración de reactante conocida utilizando los mismos argumentos anteriores.

C. F. 3.

$$r_{Rin} \leq r \leq r_{Re.x}$$

$$z = L$$

$$C(r, z, t) = C_{conocida} = C_S \quad 24$$

Frontera 4: Frontera aislada.

Frontera está definida para $z > z_D$. Al estar en contacto con el tubo se tiene una condición de aislamiento ya que en esta región el tubo no reacciona o no tiene fuga.

C. F. 4.

$$r = r_{Rin}$$

$$z_D < z < L$$

$$-\frac{\partial C_A}{\partial z} = 0 \quad 25$$

Frontera 5: Zona de reacción, defecto o fuga.

En esta parte del sistema se modela una superficie de extensión variable (z_D) en la cual pueden ocurrir diferentes fenómenos.

C.F.5.

$$r = r_{Rin}$$

$$0 \leq z \leq z_D$$

a) Una reacción química heterogénea

$$R'_A = -K_S C_{A_{Rin}} C_B \quad 26$$

K_S es la constante de la velocidad de reacción en la superficie y C_B es la concentración del componente "B".

b) Un flux conocido, N'_A ó

$$N'_A = -K_A (C_{A_b} - C_{A_{Rin}}) \quad 27$$

Donde K_A es el coeficiente de transporte de masa de la especie "A", C_{A_b} es la concentración del componente "A" en el seno del fluido y $C_{A_{Rin}}$ es la concentración del componente "A" cuando $r = r_{Rin}$.

c) Una concentración conocida

$$C(r_{Rin}, z, t) = C_{conocida} = C_{A_{Rin}} \quad 28$$

Se hace la aclaración de que en la superficie, cuando $r = r_{Rin}$, para los tres diferentes tipos de frontera, la concentración es la misma.

16.- Solución del modelo

En este trabajo se ha elegido utilizar el método de diferencias finitas de modo explícito (ver ecuaciones 33-37) para resolver la ecuación 13 página 29, con sus condiciones a la

frontera (ecuaciones 22-28). La razón por la que se utiliza esta técnica es que resulta ser práctica al desarrollar y generar las ecuaciones de los nodos característicos y por su "sencilla" aplicación en la programación.

16.1.- Obtención de las ecuaciones nodales

Balance general:

La técnica seguida en este trabajo se basa en realizar un balance molar del componente "A" en cada uno de los nodos. El balance se expresa como:

$$\text{Entrada} + \text{Generación} = \text{Salida} + \text{Acumulación} \quad 29$$

Después, cada uno de los fluxes que entran al volumen del nodo se define en términos de diferencias finitas, en vez de derivadas. Así las entradas a un nodo se pueden expresar como:

$$E = -A \left[D_A \left(\frac{dC_A}{dr} \right) \right] - A \left[D_A \left(\frac{dC_A}{dz} \right) \right] \quad 30$$

Pero expresada en términos de diferencias finitas, donde A es el área, D_A es el coeficiente de difusión del componente "A".

La generación dentro de un nodo se puede deber a una reacción química homogénea $A + D \rightarrow \text{productos}$ (ecuación 17) cuya velocidad se puede expresar como:

$$G = R_A V \Rightarrow G = -K_r C_A C_D V \quad 31$$

Donde K_r es la constante de velocidad de reacción.

La acumulación de "A" en el volumen se calcula a partir de la variación de las moles de "A" respecto al tiempo

$$Ac = \frac{d(\text{moles de } A)}{d(\text{tiempo})} = \frac{d(V C_A)}{dt} = V_A \frac{dC_A}{dt} \quad 32$$

Discretización

Uno de los primeros pasos o etapas para establecer un esquema de diferencias finitas para la resolución de una ecuación diferencial parcial (EDP) es el reemplazo del dominio continuo del problema original por una malla o red de nodos con volumen, tal y como se muestra en la Figura 5.

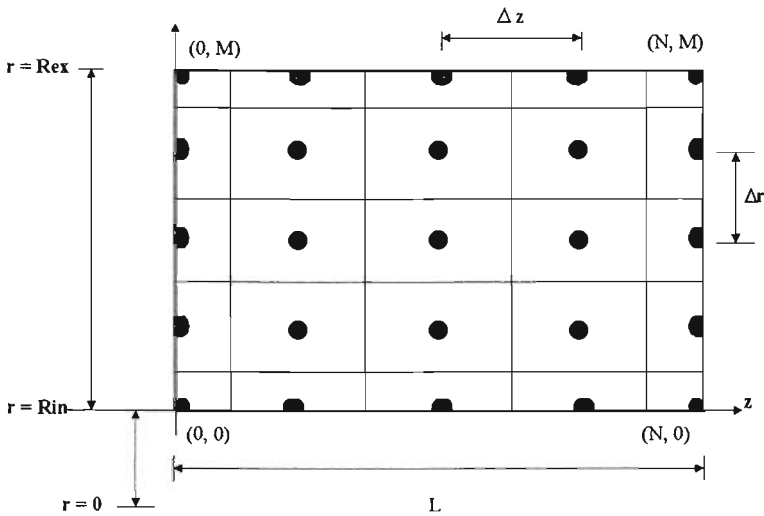


Figura. 5. Malla en la que se indica la numeración utilizada en este problema.

A continuación se muestra el desarrollo detallado de la ecuación en diferencias finitas para un nodo general i, j representativo de todos los nodos internos.

Nodos internos

En un nodo interno (i, j) , para el cual $0 < i < N$ y $0 < j < M$ y aplicando el balance señalado en la ecuación 29 de la página 36, se obtiene:

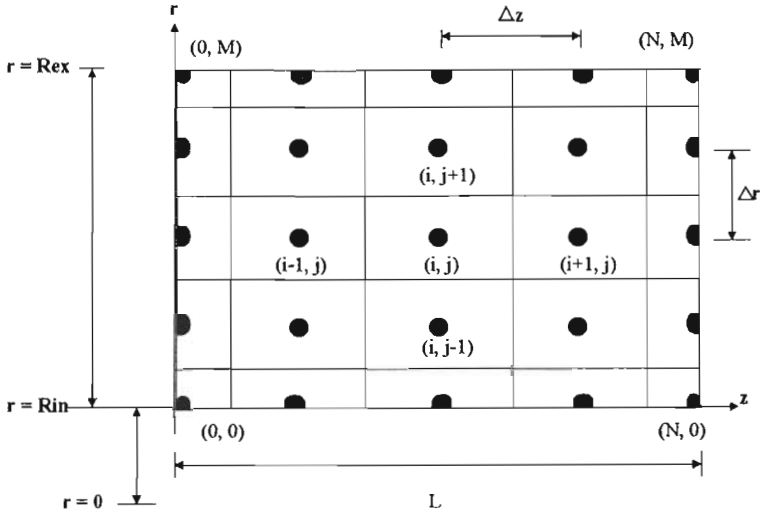


Figura. 6. Malla en la que se representa la numeración utilizada en el simulador.

$$\begin{aligned}
 & -\frac{D_A (C_{i,j} - C_{i+1,j}) AT_{i,j}}{\Delta z} - \frac{D_A (C_{i,j} - C_{i-1,j}) AT_{i,j}}{\Delta z} - \frac{D_A (C_{i,j} - C_{i,j-1}) AI_{i,j}}{\Delta r} \\
 & - \frac{D_A (C_{i,j} - C_{i,j+1}) AE_{i,j}}{\Delta r} - K_r C_{i,j} C_D V_{i,j} = V_{i,j} \left(\frac{C_{i,j}^* - C_{i,j}}{\Delta t} \right)
 \end{aligned} \quad 33$$

Donde la notación utilizada se menciona en la sección llamada Notación localizada en la página 1.

Dividiendo la expresión anterior entre el volumen se tiene:

$$\begin{aligned}
 & -\frac{D_A (C_{i,j} - C_{i+1,j}) AT_{i,j}}{\Delta z V_{i,j}} - \frac{D_A (C_{i,j} - C_{i-1,j}) AT_{i,j}}{\Delta z V_{i,j}} - \frac{D_A (C_{i,j} - C_{i,j-1}) AI_{i,j}}{\Delta r V_{i,j}} \\
 & - \frac{D_A (C_{i,j} - C_{i,j+1}) AE_{i,j}}{\Delta r V_{i,j}} - K_r C_{i,j} C_D = \left(\frac{C_{i,j}^* - C_{i,j}}{\Delta t} \right)
 \end{aligned} \quad 34$$

De igual forma, multiplicando la expresión por Δt , se tiene:

$$\begin{aligned} & -\frac{D_A (C_{i,j} - C_{i+1,j}) AT_{i,j} \Delta t}{\Delta z V_{i,j}} - \frac{D_A (C_{i,j} - C_{i-1,j}) AT_{i,j} \Delta t}{\Delta z V_{i,j}} - \frac{D_A (C_{i,j} - C_{i,j-1}) AI_{i,j} \Delta t}{\Delta r V_{i,j}} \\ & - \frac{D_A (C_{i,j} - C_{i,j+1}) AE_{i,j} \Delta t}{\Delta r V_{i,j}} - K_r C_{i,j} C_D \Delta t + C_{i,j} = C^*_{i,j} \end{aligned} \quad 35$$

Desarrollando los paréntesis se tiene:

$$\begin{aligned} & -\frac{D_A AT_{i,j} \Delta t}{\Delta z V_{i,j}} C_{i,j} + \frac{D_A AT_{i,j} \Delta t}{\Delta z V_{i,j}} C_{i+1,j} - \frac{D_A AT_{i,j} \Delta t}{\Delta z V_{i,j}} C_{i,j} + \frac{D_A AT_{i,j} \Delta t}{\Delta z V_{i,j}} C_{i-1,j} \\ & - \frac{D_A AI_{i,j} \Delta t}{\Delta r V_{i,j}} C_{i,j} + \frac{D_A AI_{i,j} \Delta t}{\Delta r V_{i,j}} C_{i,j-1} - \frac{D_A AE_{i,j} \Delta t}{\Delta r V_{i,j}} C_{i,j} + \frac{D_A AE_{i,j} \Delta t}{\Delta r V_{i,j}} C_{i,j+1} \\ & - K_r C_{i,j} C_D \Delta t + C_{i,j} = C^*_{i,j} \end{aligned} \quad 36$$

Reordenando términos se llega a:

$$\begin{aligned} C^*_{i,j} = & \frac{D_A AT_{i,j} \Delta t}{\Delta z V_{i,j}} C_{i+1,j} + \left[1 - \frac{2 D_A AT_{i,j} \Delta t}{\Delta z V_{i,j}} - \frac{D_A AI_{i,j} \Delta t}{\Delta r V_{i,j}} - \frac{D_A AE_{i,j} \Delta t}{\Delta r V_{i,j}} - K_r C_D \Delta t \right] C_{i,j} \\ & + \frac{D_A AT_{i,j} \Delta t}{\Delta z V_{i,j}} C_{i-1,j} + \frac{D_A AI_{i,j} \Delta t}{\Delta r V_{i,j}} C_{i,j-1} + \frac{D_A AE_{i,j} \Delta t}{\Delta r V_{i,j}} C_{i,j+1} \end{aligned} \quad 37$$

Mediante esta expresión se puede comprender por qué se denomina método explícito al utilizado en este trabajo. Se observa que la concentración nueva queda explícitamente definida en función de parámetros y propiedades previas.

Criterio de Estabilidad

Siguiendo la metodología convencional, se obtiene el criterio de estabilidad y se desarrolla la ecuación correspondiente, para calcular el Δt crítico para el Nodo (i, j)

$$0 \leq 1 - \frac{2 D_A AT_{i,j} \Delta t}{\Delta z V_{i,j}} - \frac{D_A AI_{i,j} \Delta t}{\Delta r V_{i,j}} - \frac{D_A AE_{i,j} \Delta t}{\Delta r V_{i,j}} - K_r C_D \Delta t \quad 38$$

$$-1 \leq -\frac{2D_A AT_{i,j} \Delta t}{\Delta z V_{i,j}} - \frac{D_A AI_{i,j} \Delta t}{\Delta r V_{i,j}} - \frac{D_A AE_{i,j} \Delta t}{\Delta r V_{i,j}} - K_r C_D \Delta t \quad 39$$

$$-1 \leq \Delta t \left(-\frac{2D_A AT_{i,j}}{\Delta z V_{i,j}} - \frac{D_A AI_{i,j}}{\Delta r V_{i,j}} - \frac{D_A AE_{i,j}}{\Delta r V_{i,j}} - K_r C_D \right) \quad 40$$

$$\frac{-1}{-\frac{2D_A AT_{i,j}}{\Delta z V_{i,j}} - \frac{D_A AI_{i,j}}{\Delta r V_{i,j}} - \frac{D_A AE_{i,j}}{\Delta r V_{i,j}} - K_r C_D} \leq \Delta t \quad 41$$

$$\Delta t \leq \frac{1}{\frac{2D_A AT_{i,j}}{\Delta z V_{i,j}} + \frac{D_A AI_{i,j}}{\Delta r V_{i,j}} + \frac{D_A AE_{i,j}}{\Delta r V_{i,j}} + K_r C_D} \quad 42$$

Otras ecuaciones nodales

Siguiendo esta metodología, se desarrollaron las ecuaciones nodales restantes incluyendo sus respectivos criterios de estabildades. El desarrollo de las ecuaciones características correspondientes a los nodos restantes se presentan en el Apéndice A en la página 68.

16.2.- Diagrama de flujo del programa

El diagrama de flujo desarrollado y utilizado en la programación del simulador que representa uno de los procesos mencionados en la introducción, se presenta en el Apéndice B en la página 73. En el que se observa la representación del algoritmo gráficamente.

16.3.- Algoritmo computacional

El algoritmo computacional, desarrollado para la resolución de uno de los procesos ya mencionados es un conjunto finito de instrucciones en el que se describen cada una de las

partes que constituyen al simulador así como el manejo del mismo explicando detalladamente las operaciones realizadas, las rutinas y las subrutinas del simulador, se muestra en el Apéndice C localizado en la página 79.

I6.4.- Implementación del modelo en la computadora

El lenguaje de programación utilizado para el desarrollo del simulador, es Visual Basic 6.0. Este paquete es amigable para cualquier tipo de usuario que esté relacionado con el manejo de Windows ya que utiliza los elementos gráficos que forman los objetos que ve el usuario en la ventana.

II.- PROGRAMA DE CÓMPUTO

III.- Descripción del programa de cómputo

El programa de cómputo desarrollado tiene como fin, el proporcionar una herramienta rápida, confiable y completa para el cálculo de una propiedad extensiva, como es en este caso la concentración, utilizando el método de diferencias finitas, para piezas cilíndricas y en dos dimensiones. La versatilidad de este programa radica en su uso sencillo, que puede ser utilizado para cualquier tipo de material, que puede utilizar un buen número de nodos (para que el error que el método de diferencias finitas posee sea menor) la rapidez con la que se obtienen los resultados sea aceptable en una computadora personal.

La Figura 7 muestra la pantalla con la que da inicio el Simulador GP-16. Esta pantalla muestra un menú, en el que se le da elegir al usuario la opción de realizar una nueva prueba, abrir un archivo ya existente, cambiar ruta en la que se guarda la información en un archivo .txt y la de salir del Simulador sin hacer ninguna prueba.

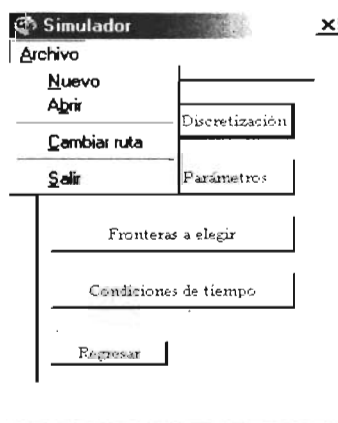


Figura. 7. Pantalla inicial del Simulador.

Al seleccionar el menú Nuevo, la pantalla muestra una imagen del sistema para que el usuario ingrese los datos que se piden y los botones deshabilitados en la Figura 7 ya pueden ser utilizados uno por uno. La Figura 8 muestra la pantalla ampliada.

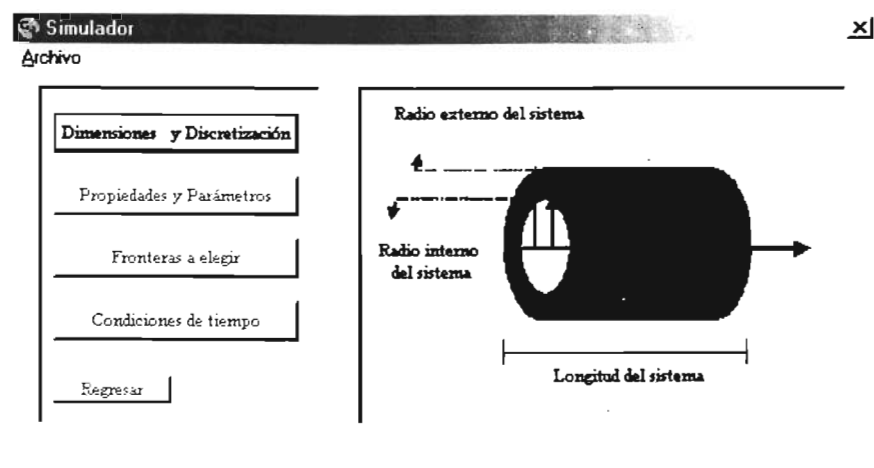


Figura. 8. Pantalla modificada para una Nueva prueba.

En el caso en que el usuario desee abrir una prueba ya existente entonces inmediatamente las herramientas de Windows despliegan una ventana en donde el usuario buscará el archivo de la prueba que desea.

Automáticamente el Simulador guarda los resultados desde donde se corre el programa, por ello, el usuario tiene la opción de cambiar esa ruta o dejar la que se tiene por default, tal y como lo muestra la Figura 9.

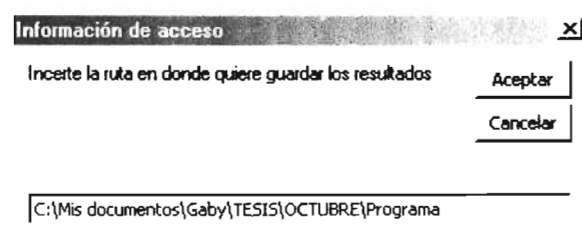


Figura. 9. Muestra la ruta en la que se van a guardar los resultados.

El llenado de las formas sigue una secuencia preestablecida hasta que se llega a la última forma llamada “Condiciones de tiempo” en donde se encuentra un botón con la opción de guardar toda la información anterior. Si el usuario selecciona “Guardar” entonces se despliega una ventana en donde el usuario pueda introducir la ruta y el nombre del archivo de datos. Los archivos del “Simulador GP-16” se guardan con la extensión “.dasim”.

II.2.- Subrutinas y /o procedimientos

En el código de la Forma 1, correspondiente a la ventana llamada “Simulador”, se encuentran las instrucciones que deben de realizarse al seleccionar los botones contenidos en dicha forma para activarse o desactivarse dependiendo de lo que el usuario desee. También se encuentran las dimensiones de la ventana, las subrutinas que contiene el Menú: Abrir, Cambiar ruta, Nuevo y Salir.

El código correspondiente a la ventana “Dimensiones y discretización” (Forma2), contiene la reverificación de que todas las casillas se encuentren llenas, así como los mensajes necesarios para que el usuario esté enterado, la salida de datos requeridos para la siguiente ventana, y por último la verificación de que el usuario solo digite las teclas permitidas. En esta parte es llamada la subrutina “ayv” que se encuentra en el Módulo 1.

En el código de la ventana “Propiedades y parámetros” (Forma 3), está la verificación de uno de los datos solicitados junto con los mensajes correspondientes si el usuario llegara a tener algún ‘problema de dedo’. Se hace el llamado a la subrutina “defecto” localizada en el Módulo 1, así como también la verificación de que todas las casillas se encuentren bien llenadas y el cálculo correspondiente al coeficiente de difusión cuando se tienen los datos para ingresarlos a la ecuación de Arrhenius.

En la ventana "Fronteras a elegir" (Forma4), el código se basa en la comprobación de las casillas y en la salida de una variable necesaria para la siguiente forma, en esta parte se llama a la subrutina "cdts" que se encuentra en el Módulo 2.

En la ventana "Condiciones de tiempo" (Forma 5), se encuentra el código correspondiente al Menú Guardar, a la visualización y tamaño de la malla tanto para ingresar los tiempos para los que se quieren ver resultados y la de los resultados de las concentraciones. Se vuelven a verificar todas las casillas junto con los mensajes necesarios y se llama a la subrutina "calculo" localizada en el Módulo 2. Por último, contiene el código para guardar las concentraciones calculadas en un archivo.

El código que contiene el Módulo 1 se divide en las subrutinas "ayv", "defecto", "Teclado", "Unodos" y "Teclado2". La subrutina "ayv" calcula las áreas y los volúmenes de los cilindros discretizados, así como las indicaciones para guardar los resultados en un archivo. "defecto" contiene el cálculo de los números de nodos dañados. En la subrutina "Teclado" se encuentran algunas restricciones sobre los caracteres que contiene el teclado. "Unodos" se refiere a que solo son válidos los caracteres "a" y "b" de todo el teclado; con ello se activan las banderas correspondientes al tipo de frontera que se eligió. La subrutina "Teclado2" restringe los caracteres, donde solo permite del 0-9, la tecla borrar y la tecla enter.

En el Módulo 2, se encuentran los códigos correspondientes a la subrutina "cdts" y "calculo". En la subrutina "cdts", se encuentra el cálculo del mínimo de todos los criterios de estabilidad de las ecuaciones y la selección de éste, así como también el código para guardar todos los criterios de estabilidad en un archivo. El código de la subrutina "calculo", contiene el cálculo de las nuevas concentraciones y el código para guardar los resultados en un archivo.

Las imágenes y la explicación del uso del simulador, se explican en el Apéndice D ubicado en la página 92.

Algunas de las subrutinas más importantes del Simulador, como lo son; “ayv”, “defecto”, “cdts” y “calculo” se encuentran en el Apéndice E en la página 94.

III.- VALIDACIÓN

III.1.- Validación del método numérico

En esta sección, la validación se hace respecto a la solución analítica de la ecuación de continuidad para un componente, en una dimensión. Como el transporte de masa tiene su analogía con el transporte de energía, se ocupan los parámetros correspondientes a un problema de energía ya que dicha solución se reporta gráficamente. Por lo que tanto en el Simulador como en la solución analítica se incluyen las condiciones elegidas. Para realizar lo anterior, se selecciona un $Bi=10$ y un $Fo=0.4$ con estos valores se calculan los demás parámetros necesarios para el Simulador GP-16 y la solución analítica. Aquí se

usa un $Fo = \frac{D t}{Rc^2}$ y $Bi = \frac{k Rc}{D}$.

Donde Fo corresponde al número de Fourier y Bi al número de Biot respectivamente. D es el coeficiente de difusión, t es el tiempo, Rc es el radio externo del cilindro y k es el coeficiente de transferencia de masa.

Se realizan pequeñas modificaciones en las condiciones de frontera para que el simulador pueda modelar la misma situación que la validación con la solución analítica reportada en tablas [28].

La Tabla 1 indica los valores introducidos al simulador para hacer la validación del método numérico con la solución analítica.

Radio externo del sistema	10 <i>cm</i>
Radio interno del sistema	0 <i>cm</i>
Longitud del sistema	100 <i>cm</i>
Nodos en la dirección radial (M)	20
Nodos en la dirección de z (N)	100
Distancia del defecto	10 <i>cm</i>
Concentración inicial	0
Coefficiente de difusión	1 $\frac{cm^2}{seg}$
Reacción química homogénea	No
Frontera	a
Concentración en la superficie	1 $\frac{g\ mol}{cm^3}$
Coefficiente del transporte de masa	1 $\frac{cm}{seg}$
Concentración del componente	1 $\frac{g\ mol}{cm^3}$
Incremento del tiempo	0.001 <i>min</i>
Tiempos de resultado	1
1º tiempo	0.666 <i>min</i>

Tabla 1. Valores introducidos al GP-16 para hacer la validación del método numérico.

La validación también se hizo para un mismo valor de Bi y un $Fo=1$. Lo primero que se hace al seleccionar el valor de los dos números adimensionales es obtener el tiempo necesario para un $Fo=0.4$, este tiempo, es el introducido al simulador para ver resultados. El valor de 0.4 se lee en la tabla número 4.15 [28] y al cruzar con la curva de $\frac{1}{Bi} = 0.1$ se obtiene la temperatura adimensional de 0.15, posteriormente, en la tabla 4.16 [28] se obtienen los valores de las temperaturas adimensionales a diferentes posiciones en el cilindro, con esto se va construyendo una tabla de posición v.s. temperatura (concentración adimensional), de igual forma los resultados obtenidos por el Simulador GP-16 son reportados en la Tabla 5.

III.2.- Verificación del simulador para diversos casos particulares

III.2.1.- Sistema aislado

Para hacer la verificación del Simulador, se presentan diversos casos específicos en los que se compruebe que el programa calcula y muestra los resultados esperados, es decir, resultados que estén de acuerdo al conocimiento establecido por los diferentes procesos.

Uno de estos casos es el denominado “sistema aislado”, el cual se logra cambiando las condiciones de frontera, para definir las como fronteras aisladas. Dado que también se aplica una generación nula, se espera que la concentración del sistema no cambie con el tiempo.

Se introducen los datos necesarios para simular un sistema aislado, con el fin de observar y verificar que el simulador predice a un tiempo finito de aproximadamente 1 año con un incremento de tiempo de 120 minutos, la estabilidad de las ecuaciones puesto que la concentración inicial no cambia con el paso del tiempo.

Los datos introducidos por el simulador se expresan en la Tabla 2, en la que se presenta una generación de masa nula, así como también la ausencia de una reacción química heterogénea, con un incremento de tiempo de cada 2 horas hasta simular 1 año:

Radio externo del sistema	5 <i>cm</i>
Radio interno del sistema	0.1 <i>cm</i>
Longitud del sistema	20 <i>cm</i>
Nodos en la dirección radial (M)	50
Nodos en la dirección de z (N)	50
Distancia del defecto	19 <i>cm</i>
Concentración inicial	0.22 %
Coefficiente de difusión	8.43E-8 $\frac{cm^2}{seg}$
Reacción química homogénea	No
Frontera	b
Concentración en la superficie	0.22 %
Constante de la velocidad de reacción en la superficie	0
Concentración del componente B	0
Incremento del tiempo	120 <i>min</i>
Tiempos de resultado	1
1º tiempo	525600 <i>min</i>

Tabla 2 Datos introducidos al Simulador GP-16 para un sistema aislado [29].

III.3.- Validación usando datos experimentales disponibles en la literatura

Para validar los resultados que calcula el Simulador GP-16, es preciso comparar estos valores con los datos experimentales encontrados en la literatura; el artículo seleccionado para la validación se encuentra en la referencia [29]. Este artículo presenta un proceso de carburización, en el cual se toman muestras del acero SAE 8620H de 10 x 40 x 60 mm, las cuales son introducidas en tres diferentes hornos con diferentes gases carburantes a una temperatura de 1173 K y durante 7200, 14400 y 21600 segundos, dentro de los hornos se encuentra un chip con el que se va midiendo la distancia de penetración del carbón. Los resultados son reportados en gráficas de Concentración de C [% en peso] vs. Distancia de penetración [mm].

Ahora el sistema no se encuentra fuera de la tubería como en el caso general que simula el programa, sino que como el proceso es de carburización, lo que se necesita observar es la entrada del carbono en el acero, por ello el sistema cambia para simular la difusión del carbono en el acero, como se puede observar, en el artículo se utilizaron piezas rectangulares de 10 x 40 x 60 mm, pero el simulador trabaja con geometría cilíndrica, así que se eligió la medida de 0.5 mm como el radio externo del cilindro y 0 como el radio interno del cilindro.

Los datos con los que se realizaron los experimentos del artículo son los mismos que se introdujeron al Simulador GP-16, por lo que se tuvieron que tomar las mismas condiciones de frontera del artículo y del Simulador GP-16 en el que se simule un proceso de carburización.

Los datos introducidos y calculados por el simulador GP-16 se encuentran reportados en la Tabla 3, en este caso como el artículo no menciona nada sobre una generación de materia ni la existencia de una reacción heterogénea, ambas se consideran nulas. El incremento de tiempo es de 2.4 segundos hasta un tiempo de 2, 4 y 6 horas:

Radio externo del sistema	0.5 <i>cm</i>
Radio interno del sistema	0 <i>cm</i>
Longitud del sistema	6 <i>cm</i>
Nodos en la dirección radial (M)	500
Nodos en la dirección de <i>z</i> (N)	5
Distancia del defecto	4 <i>cm</i>
Concentración inicial	0.22 %
Factor de frecuencia para el coeficiente de difusión	0.4469 $\frac{cm^2}{seg}$
Energía de activación para el coeficiente de activación	151000 $\frac{J}{g\ mol}$
Temperatura	900 °C
Reacción química homogénea	No
Frontera	a
Concentración en la superficie	1.2116 %
Coefficiente del transporte de masa	0
Concentración del componente	0
Incremento del tiempo	0.04 <i>min</i>
Tiempos de resultado	3
1º tiempo	120 <i>min</i>
2º tiempo	240 <i>min</i>
3º tiempo	360 <i>min</i>

Tabla 3. Datos introducidos al Simulador GP-16 para un proceso de carburización [29].

Con respecto al valor de la concentración en la superficie, el artículo no utiliza ese dato, pero para el Simulador GP-16, es indispensable, por lo que se toma un valor de la actividad del carbono de 1 [$a_c = 1$] y se busca la fracción másica del carbono en la Figura 10 de la referencia [30], para que con ese dato se pueda calcular el valor de esa concentración en % en peso puesto que el artículo maneja esa unidad para las concentraciones.

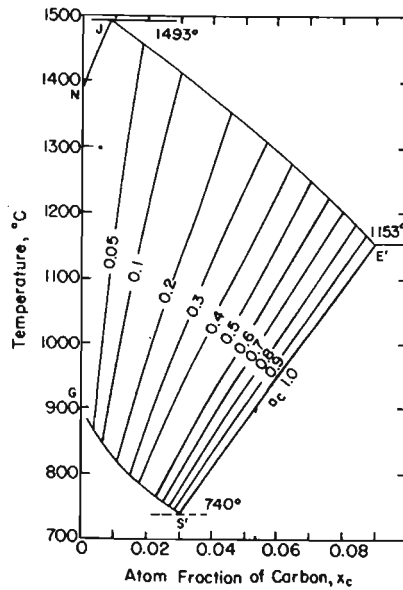


Figura 10. Diagrama de la actividad del sistema Fe-C [30].

A continuación se presentan los datos introducidos al Simulador GP-16 para hacer el estudio del proceso de corrosión en estructuras de concreto por efecto de los iones cloruro. La Tabla 4 contiene los datos que son introducidos en el Simulador GP-16, para obtener el perfil de concentraciones del ión cloruro y una concentración superficial conocida. Con un incremento de tiempo de 1 día y los tiempos de resultados de 2, 5, 10 y 18 meses.

Radio externo del sistema	0.038 <i>m</i>
Radio interno del sistema	0.005 <i>m</i>
Longitud del sistema	0.15 <i>m</i>
Nodos en la dirección radial (M)	60
Nodos en la dirección de z (N)	5
Distancia del defecto	0.11 <i>m</i>
Concentración inicial	0.045 $\frac{mol}{m^3}$
Coefficiente de difusión	9E-11 $\frac{m^2}{seg}$
Reacción química homogénea	No
Frontera	a
Concentración en la superficie	0.18 $\frac{mol}{m^3}$
Coefficiente del transporte de masa	0
Concentración del componente	0
Incremento del tiempo	1440 <i>min</i>
Tiempos de resultado	4
1º tiempo	21600 <i>min</i>
2º tiempo	43200 <i>min</i>
3º tiempo	86400 <i>min</i>
4º tiempo	237600 <i>min</i>

Tabla 4. Datos introducidos al Simulador GP-16, para un sistema en el que la difusión de cloruros dentro de estructuras de concreto daña la estructura metálica [31].

Estos datos son introducidos al Simulador GP-16, para observar la difusión de los iones cloruro a través de la estructura de concreto y determinar en qué tiempo el ión cloruro llega a la varilla para comenzar una corrosión localizada.

IV.- RESULTADOS

IV.1.- Solución analítica

La Tabla 5, muestra los resultados obtenidos en la solución analítica y los calculados por el Simulador GP-16.

Distancia de solución analítica	Concentración adimensional de solución analítica	Distancia de método numérico	Concentración adimensional de método numérico
0	0.8500	0	0.8575
0.2	0.8575	0.2	0.8579
0.4	0.8770	0.4	0.8698
0.6	0.9070	0.6	0.9104
0.8	0.9445	0.8	0.9463
0.9	0.9625	0.9	0.9650
1.0	0.9820	1.0	0.9831

Tabla 5. Resultados obtenidos con un $Fo=0.4$ y $1/Bi=0.1$, [28].

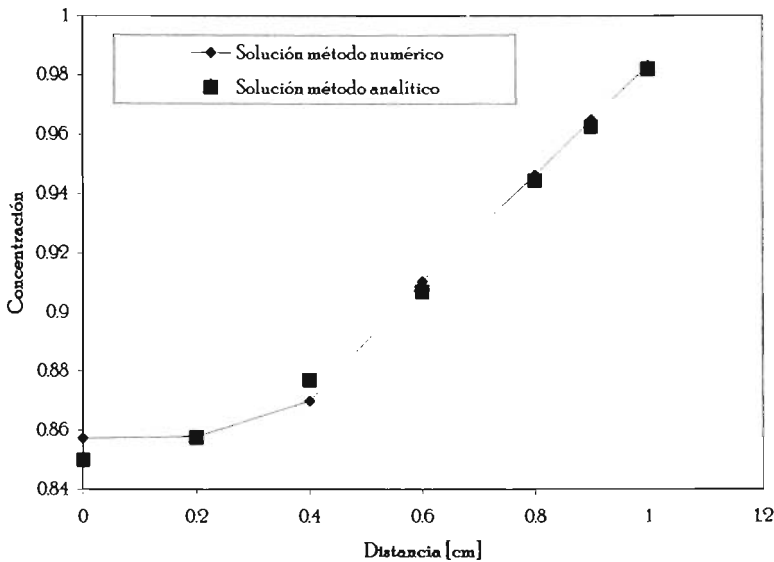


Figura 11. Comparación de la solución con el método analítico y el método numérico.

La Figura 11 muestra los resultados obtenidos de la solución analítica con los resultados obtenidos en el Simulador GP-16. En esta figura se logra observar el comportamiento similar que existe entre los dos métodos.

IV.2.- Sistema aislado

La siguiente gráfica representa la prueba realizada por el Simulador GP-16 en un sistema completamente aislado.

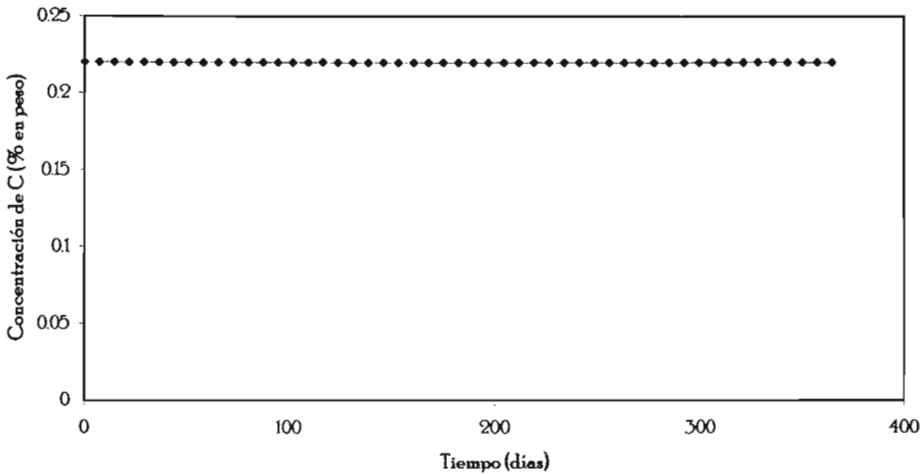


Figura 12. Representación gráfica de la concentración con respecto al tiempo en un sistema aislado.

En la Figura 12 se observa que la concentración no varía con el transcurso del tiempo en sistemas aislados, lo que indica que los resultados obtenidos fueron los esperados; al transcurrir el tiempo, la concentración inicial del sistema, no varió. Aunque solo se muestra la concentración de un punto, lo mismo ocurrió para todos los puntos, en la gráfica se muestran los resultados obtenidos en la dirección “r”.

La concentración se mantuvo constante lo que indica, que el desarrollo de las ecuaciones en diferencias finitas se encuentran bien establecidas, el número de nodos y el tiempo por el que transcurrió la prueba, demuestran que el Simulador GP-16 es rápido y preciso al calcular.

IV.3.- Valores experimentales de carburización

Los resultados experimentales reportados por la referencia [29] están presentados en gráficas. En dichas gráficas se presentan las diferentes curvas experimentales de la Concentración del carbono vs. Distancia de penetración a 1173 K y a los tres diferentes tiempos: 7200, 14400 y 21600 segundos (2, 4 y 6 horas) [29].

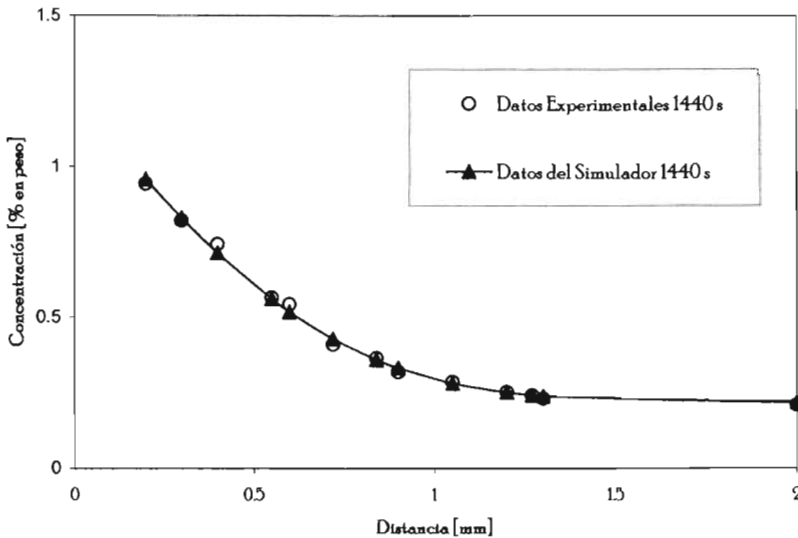


Figura 13. Gráfica que compara los valores experimentales con los del simulador a 1440 s.

La Figura 13 representa gráficamente los resultados experimentales con los resultados del Simulador GP-16, por lo que se observa una clara semejanza entre estos dos

procedimiento. El perfil de concentración del carbono en ambos casos coincide existiendo un pequeño margen de error entre los puntos.

A continuación se presenta la gráfica generada por el Simulador GP-16 con las mismas condiciones de frontera y datos con los que se realizaron los experimentos de la referencia [29].

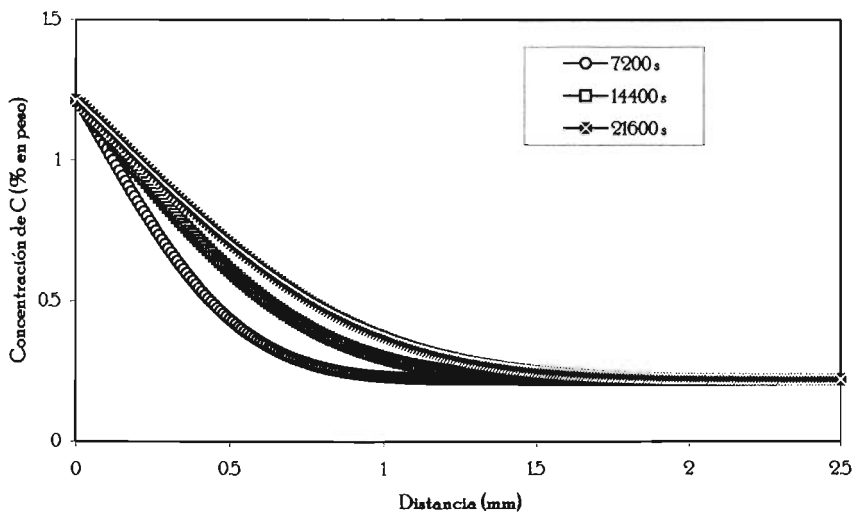


Figura 14. Representación de los resultados obtenidos por el Simulador GP-16.

Se aclara que en el Simulador GP-16, los cálculos se hicieron para 500 nodos en la dirección "r" con un espaciamiento de 0.01 mm, por tal razón los puntos están muy cerca unos de otros y se pueden llegar a ver un poco encimados.

En esta gráfica se puede observar el tiempo en que el cloruro penetró completamente el concreto y llegó a la zona donde se encuentra la varilla, por ejemplo, de 15 días a 1 mes el comportamiento de los iones cloruro es mas o menos parecido entre ellos, para un tiempo de 2 meses, se puede observar que el avance de los cloruros es mucho más notorio y peligroso para que la estructura presente fallas del tipo de corrosión localizada. Pero para un tiempo de 55 meses, se observa que la concentración de iones cloruro empieza a rebasar el valor crítico de 0.05, que se sabe empíricamente induce la corrosión del acero. De esta manera se comprueba la utilidad del simulador al modelar satisfactoriamente la difusión de cloruros en concretos.

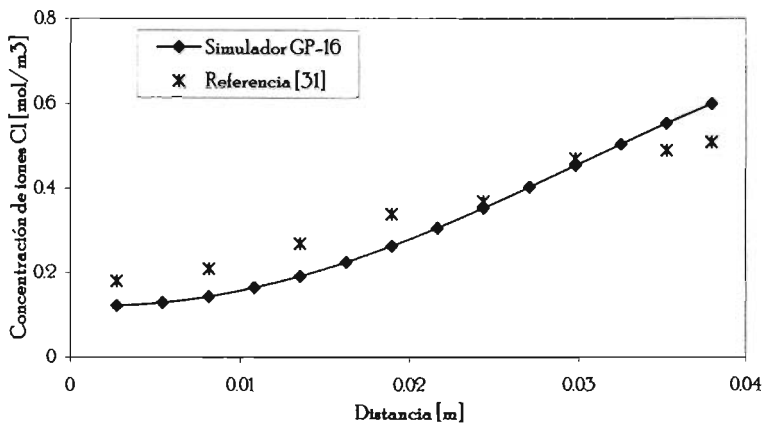


Figura 16. Comparación de los resultados de la Referencia 31 y los resultados del Simulador GP-16.

De la gráfica se deduce que los resultados obtenidos mediante el Simulador GP-16 se encuentran dentro de las predicciones de otro modelo como es el caso de la referencia 31.

V.-CONCLUSIONES

El desarrollo de un modelo matemático generalizado, como es el que se presenta en este trabajo, da la oportunidad de simular diversos casos para los cuales solo hay que modificar un poco las fronteras necesarias para simular el proceso deseado, obteniendo así los resultados esperados.

El trabajo desarrollado representa una generalización de diversos procesos metalúrgicos, siendo muy útil ya que muchas de las veces a los modelos comerciales no se les pueden hacer modificaciones para simular otro tipo de casos o simplemente no se consideran muchas de las posibilidades que pueden presentarse en dichos procesos.

Los cálculos que obtiene el Simulador GP-16, comparados con gráficas y tablas publicadas en la literatura, demuestran la certeza que el simulador tiene en todos los procesos que realiza, para el despliegue de los resultados que proporciona.

En cualquier proceso que se quiera analizar, el simulador dará resultados para que la interpretación de los mismos sea más clara, ya que pueden obtenerse gráficas de concentración del elemento que se difunde contra tiempo o con respecto a la distancia de penetración del mismo.

En el caso de la corrosión localizada por efecto de los cloruros en estructuras de concreto, lo importante es tener la información necesaria para predecir la vida útil de estas y el simulador GP-16, predice satisfactoriamente en qué tiempo han llegado los iones cloruro a dañar la varilla recubierta de concreto.

REFERENCIAS

- [1]- C. A. Stickels. "Analytical models for the gas carburizing process". Metallurgical Transactions B. Vol. 20B, pp. 535-546. Agosto 1989.
- [2]- eProcessView-an internet portal that lets you observe, analyze and manage your thermal processes remotel y.htm
- [3]- F. Gan, Z-W Sun, G. Sabde y D. T. Chin. "Cathodic protection to mitigate external corrosion of underground steel pipe beneath disbonded coating". Corrosion. Vol. 50, No. 10, pp. 804-816. Octubre 1994.
- [4]- H. Castaneda, J. Alamilla y R. Pérez. "Life prediction estimation of an underground pipeline using alternate current impedance and reliability analysis". Corrosion. Vol. 60, No. 5, pp. 429-436. Mayo 2004.
- [5]- M. N. Gimerfarb. "Cathodic and anodic protection". pp. 2011. Feb 1990.
- [6]- P.K. Metha. "Effect of fly ash composition on sulfate resistance of cement." ACI Materials Journal 83(6). pp. 994-1000. Noviembre - Diciembre 1986.
- [7]- N.S, Berke, D.W. Pfeifer y T.G. Weil. "Protection against chloride-induced corrosion." Concrete International 10(12). pp. 45-55. Diciembre 1988.
- [8]- H. Xingyang, Ch. Yimin, M Baoguo, L. Yongxin, Z. Hongtao y Z. Wensheng. "Studies on small ionic diffusivity concrete". International Workshop on Sustainable Development and Concrete Technology. China Building Materials Academy, Beijing, 100024, PRC. Wuhan University of Technology, Wuhan, 430070, PRC. 2001. pp. 319-331.
- [9]- Gestión y conservación del suelo. Lección 4. Contaminación del suelo. Contaminantes específicos. Otros contaminantes.

- [10]- E. Mehnert y B. Hensel. "Coal combustion by products and contaminant transport in groundwater". Proceedings of the coal combustion by products associated with coal mining interactive forum. Southern Illinois University Carbondale. Oct 29-31, 1996.
- [11]- M. E. Orazem, J. M. Esteban, K. J. Kennelly y R. M. Degerstedt. "Mathematical models for cathodic protection of an underground pipeline with coating holidays. Part 2. Case Studies of parallel anode cathodic protection systems". *Corrosion* Vol. 53, No. 6. pp 427-436. June 1997.
- [12]- K. J. Kennelly, L. Bone y M. E. Orazem. "Current and potential distribution on a coated pipeline with holidays. Part 1. Model and experimental verification". *Corrosion*. Vol. 49. No. 3. pp 199-210. Marzo 1993.
- [13]- M. N. Gimerfarb. "Cathodic and anodic protection". pp. 20 11. Feb 1990.
- [14]- Guía ambiental para el manejo de drenaje ácido de minas.
- [15]- G. E. Meruane y T. Vargas. "Criterios de diseño del circuito de soluciones en la lixiviación bacteriana de sulfuros de cobre en pilas".
- [16]- G. A. Sheikhzadeh, M. A. Mehrabian, S.H. Mansouri y A. Sarrafi. "Computational modeling of unsaturated flow of liquid in heap leaching—using the results of column tests to calibrate the model". *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 48. 2005. pp.279-292. Agosto 2004.
- [17]- Especiales Diario Médico. <http://medicine.4t.com/nobel1920.html>
- [18]- Eberhard Zeidler. "Monotone Operators". Part II. Springer. 1986.
- [19]- B. E. Torres Campos. "Aplicación de un modelo de transferencia de masa al proceso de carburización". Facultad de Química. UNAM. 1995.
- [20]- C. Espinoza y Y. Niño. "Métodos de diferencias finitas". CI 71D Modelación numérica en ingeniería hidráulica y ambiental. 2001.

- [21].- M. N. Özsisik. "Heat conduction". A Wiley-Interscience Publication. 1980.
- [22].- E. R. G. Eckert y Robert M. Drake, JR. "Analysis of heat and mass transfer". McGraw-Hill Book Company. 1972.
- [23].- Sociedad latinoamericana para la calidad. 2000.
- [24].- <http://www.gestiopolis.com/recursos/documentos/fulldocs/ger/diagflu.htm>
- [25].- http://enciclopedia.us.es/index.php/Diagrama_de_flujo
- [26].- L. Peralta Murua. "Análisis de lenguaje". Instituto Tecnológico. pp. 1-19. 2001.
- [27].- <http://www.monografias.com/trabajos15/algoritmos/algoritmos.shtml>
- [28].- H. S. Carslaw y J. C. Jaeger. "Conduction of Heat in solids". Second Edition. Clarendon Press Oxford. 1984.
- [29].- H. Jiménez, M. H. Stara y E. S. Puchi. "Mathematical modeling of carburizing process of a SAE 8620H steel. Surface and Coating Technology 1999.
- [30].- Y. K. Rao. Stoichiometry and thermodynamics of metallurgical processes. Cambridge University Press. 1985.
- [31].- V. Ayala Roman. "Modelo matemático para predecir la distribución de potenciales eléctricos en estructuras metálicas embebidas en concreto y sumergidas en agua de mar". Facultad de Química. Tesis de Maestría. UNAM. 1996.

BIBLIOGRAFÍA

- A. S. Roy. "A perspective on electrochemical transport phenomena".
- A. M. Hassanein, G. K. Glass y N. R. Buenfeld. "A mathematical model for electrochemical removal of chloride from concrete structures". *Corrosion. ProQuest Science Journals*. Abril 1998.
- B. S. Bokshtein. "Difusión en metales". Editorial Mir. Moscú. 1978.
- C. Espinoza y Y. Niño. "Métodos de diferencias finitas". *CI 71D Modelación numérica en ingeniería hidráulica y ambiental*. 2001.
- D. R. Gaskell. "An introduction to transport phenomena in materials engineering". Macmillan Publishing Company (New York). 1992.
- E. R. G. Eckert y R. M. Drake, JR. "Analysis of heat and mass transfer". McGraw-Hill Book Company. 1972.
- E. Mehnert y B. R. Hensel. "Coal combustion by-products and contaminant transport in groundwater".
- F. Brichau y J. Deconinck. "A numerical model for cathodic protection of buried pipes". *Corrosion Science*. Vol. 50, No. 1. 1994.
- G. A. Sheikhzadeh, M. A. Mehrabian, S. H. Mansouri y A. Sarrafi. "Computational modeling of unsaturated flow of liquid in heap leaching—using the results of column tests to calibrate the model". *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2005.
- Greg Perry. "Aprendiendo visual basic 6 en 21 días". Prentice Hall. Addison Wesley Longman. 1999.

- H. Castañeda y M. Urquidí-Macdonald. "Detecting external failures in coated, buried pipelines: theoretical model and experimental verification". *Corrosion*. Vol. 60, No. 6, pp. 538-547. Junio 2004.
- He Xingyang, Ch. Yimin, M. Baoguo, L. Yongxin, Z. Hongtao y Z. Wensheng. Studies on small ionic diffusivity concrete. *Internacional workshop on sustainable development and concrete technology*. 2001.
- L. P. Murua. "Análisis de lenguaje". Instituto Tecnológico. pp.1-19.
- *Metals Handbook ASM Vol. 2. Heat Treating, Cleaning and Finishing*. 8ª Edition.
- M.-T. Liang y S.-M. Lin. "Modeling the transport of multiple corrosive chemicals in concrete structures: Synergetic effect study". *Cement and concrete research* 33. 2003.
- N. M. Ryzhov y M. Yu Semenov. "Determination of the coefficient of carbon diffusion for calculating nonisothermal regimes of high-temperature ion nitrocarburizing". *Metal Science and Heat Treatment*. Vol. 42. Nos. 5-6. 2000.
- O. Amiri, A. Ait-Mokhtar, P. Dumargue y G. Touchard. "Electrochemical modeling of chlorides migration in cement based materials. Part II: Experimental study-calculation of chlorides flux". *Electrochimica Acta* 46. 2001.
- P. Jacquet, D. R. Rousse, G. Bernard y M. Lambertin. "A novel technique to monitor carburizing processes". *Materials Chemistry and Physics*, Volume 77, Issue 2, Pages 542-551. 15 Junio 2003.
- Translation of the AIST (Advanced Industrial Science and Technology) "Development of Sintering Equipment Using Centrifugal Force". Press release on the 2 February, 2004.

BIBLIOGRAFIA

- T. Murakami, H. Fukuyama y K. Nagata. "Mechanisms of carburization and melting of iron by CO gas". *ISIJ International*. Vol. 41, No. 5. 2001.
- Y. Sasaki, R. Asano y K. Ishii. "The effect of the liquid Fe-C phase on the kinetics in the carburization of iron by CO at 1523 K". *ISIJ International*. Vol. 41, No. 3. 2001.

APÉNDICE A

Ecuaciones de diferencias finitas

Este apéndice contiene todas las ecuaciones que describen al sistema en estudio en la forma de diferencias finitas, según el diagrama mostrado en la Fig. 6 de la página 40.

Esquinas

Superior izquierda $(0, M)$

$$C^*_{0, M} = C_S$$

Superior derecha (N, M)

$$C^*_{N, M} = C_S$$

Inferior derecha $(N, 0)$

$$C^*_{N, 0} = C_S$$

Inferior izquierda $(0, 0)$

$$C^*_{0, 0} = \frac{D_A AT_{0,0} \Delta t}{\Delta z V_{0,0}} C_{1,0}$$

$$\begin{aligned}
 & + \left[1 - \frac{D_A AT_{0,0} \Delta t}{\Delta z V_{0,0}} - \frac{D_A AE_{0,0} \Delta t}{\Delta r V_{0,0}} - K_r C_D \Delta t - \frac{K_S C_B AI_{0,0} \Delta t}{V_{0,0}} - \frac{K AI_{0,0} \Delta t}{V_{0,0}} \right] C_{0,0} \\
 & + \frac{K C_E AI_{0,0} \Delta t}{V_{0,0}} + \frac{D_A AE_{0,0} \Delta t}{\Delta r V_{0,0}} C_{0,1}
 \end{aligned}$$

Criterio de estabilidad

$$\frac{1}{\frac{D_A AT_{0,0}}{\Delta z V_{0,0}} + \frac{D_A AE_{0,0}}{\Delta r V_{0,0}} + K_r C_D + \frac{K_S C_B AI_{0,0}}{V_{0,0}} + \frac{K AI_{0,0}}{V_{0,0}}} \geq \Delta t$$

Horizontales

Superior (i, M)

$$C_{i,M}^* = C_S$$

Inferior ($i, 0$) nodos afectados por el defecto

$$C_{i,0}^* = \frac{D_A AT_{i,0} \Delta t}{\Delta z V_{i,0}} C_{i+1,0}$$

$$+ \left[1 - \frac{2 D_A AT_{i,0} \Delta t}{\Delta z V_{i,0}} - \frac{D_A AE_{i,0} \Delta t}{\Delta r V_{i,0}} - K_r C_D \Delta t - \frac{K_S C_B AI_{i,0} \Delta t}{V_{i,0}} - \frac{K AI_{i,0} \Delta t}{V_{i,0}} \right] C_{i,0}$$

$$+ \frac{K C_E AI_{i,0} \Delta t}{V_{i,0}} + \frac{D_A AT_{i,0} \Delta t}{\Delta z V_{i,0}} C_{i-1,0} + \frac{D_A AE_{i,0} \Delta t}{\Delta r V_{i,0}} C_{i,1}$$

Criterio de estabilidad

$$\frac{1}{\frac{2 D_A AT_{i,0}}{\Delta z V_{i,0}} + \frac{D_A AE_{i,0}}{\Delta r V_{i,0}} + K_r C_D + \frac{K_S C_B AI_{i,0}}{V_{i,0}} + \frac{K AI_{i,0}}{V_{i,0}}} \geq \Delta t$$

Inferior ($i, 0$) nodos no afectados por el defecto

$$C_{i,0}^* = \frac{D_A AT_{i,0} \Delta t}{\Delta z V_{i,0}} C_{i+1,0}$$

$$\begin{aligned}
 & + \left[1 - \frac{2 D_A A T_{i,0} \Delta t}{\Delta z V_{i,0}} - \frac{D_A A E_{i,0} \Delta t}{\Delta r V_{i,0}} - K_r C_D \Delta t \right] C_{i,0} \\
 & + \frac{D_A A T_{i,0} \Delta t}{\Delta z V_{i,0}} C_{i-1,0} + \frac{D_A A E_{i,0} \Delta t}{\Delta r V_{i,0}} C_{i,1}
 \end{aligned}$$

Criterio de estabilidad

$$\frac{1}{\frac{2 D_A A T_{i,0} \Delta t}{\Delta z V_{i,0}} + \frac{D_A A E_{i,0} \Delta t}{\Delta r V_{i,0}} + K_r C_D} \geq \Delta t$$

Verticales

Izquierda $(0,j)$

$$C^*_{0,j} = \frac{D_A A T_{0,j} \Delta t}{\Delta z V_{0,j}} C_{1,j}$$

$$+ \left[1 - \frac{D_A A T_{0,j} \Delta t}{\Delta z V_{0,j}} - \frac{D_A A I_{0,j} \Delta t}{\Delta r V_{0,j}} - \frac{D_A A E_{0,j} \Delta t}{\Delta r V_{0,j}} - K_r C_D \Delta t \right] C_{0,j}$$

$$+ \frac{D_A AI_{0,j} \Delta t}{\Delta r V_{0,j}} C_{0,j-1} + \frac{D_A AE_{0,j} \Delta t}{\Delta r V_{0,j}} C_{0,j+1}$$

Criterio de Estabilidad

$$\frac{1}{\frac{D_A AT_{0,j}}{\Delta z V_{0,j}} + \frac{D_A AI_{0,j}}{\Delta r V_{0,j}} + \frac{D_A AE_{0,j}}{\Delta r V_{0,j}} + K_r C_D} \geq \Delta t$$

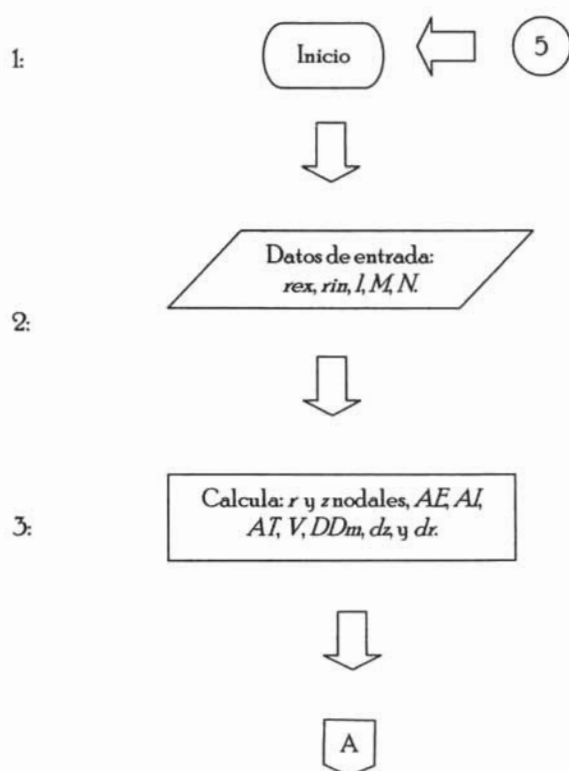
Derecha (N,j)

$$C^*_{N,j} = C_S$$

APÉNDICE B

Diagrama de flujo del programa

Diagrama de flujo para el Simulador desarrollado en este trabajo.



A



4:

Imprime las áreas y los volúmenes en un archivo. Muestra en pantalla DD_m y dz



5:

Datos de entrada: DD .



6:

Calcula: ND ,
 ED , FND .

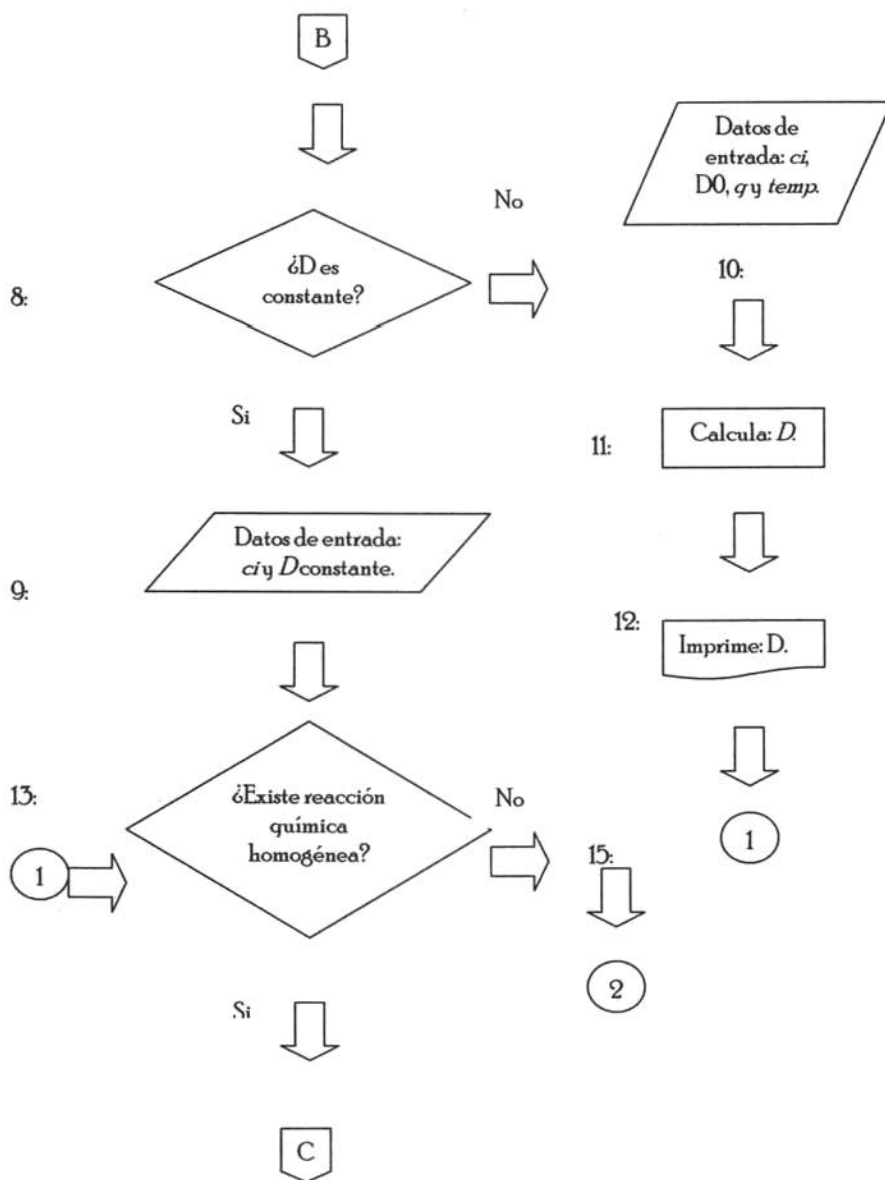


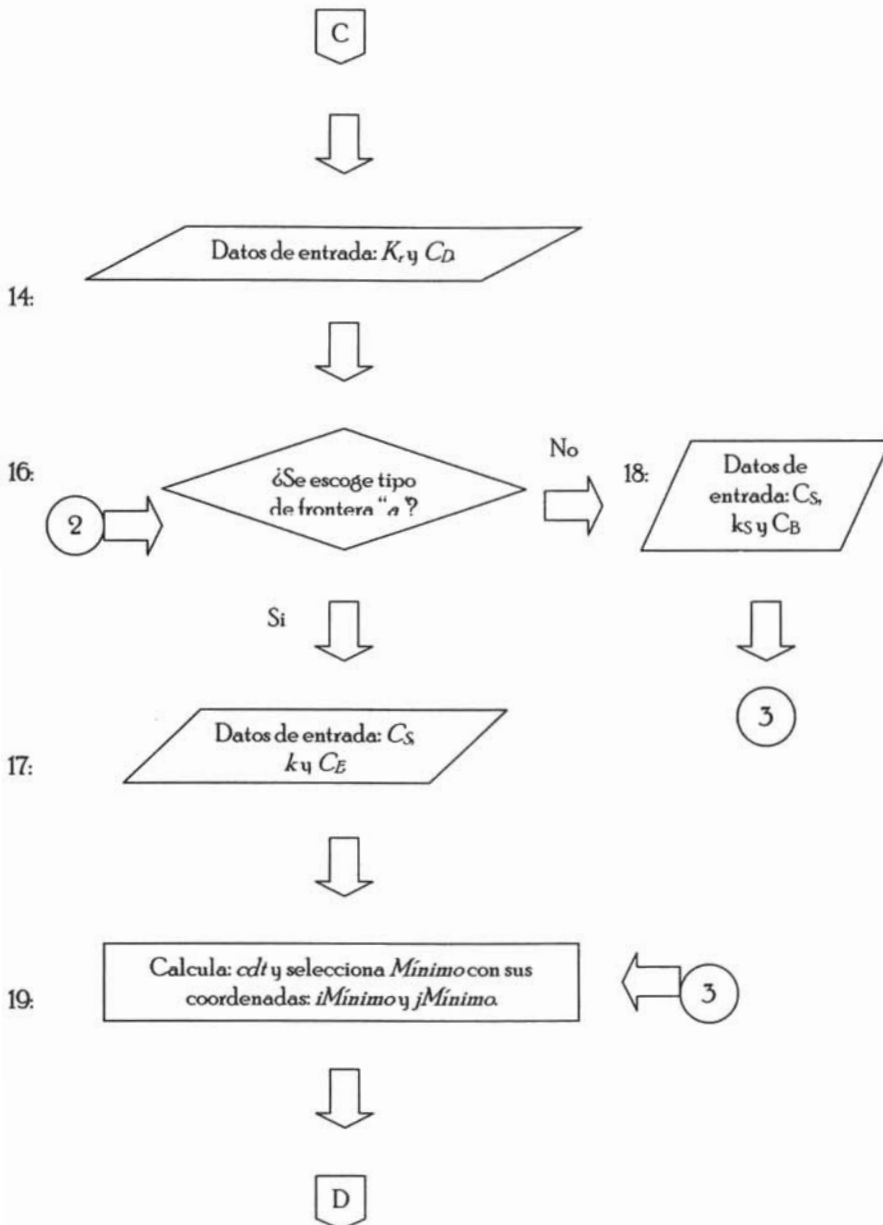
7:

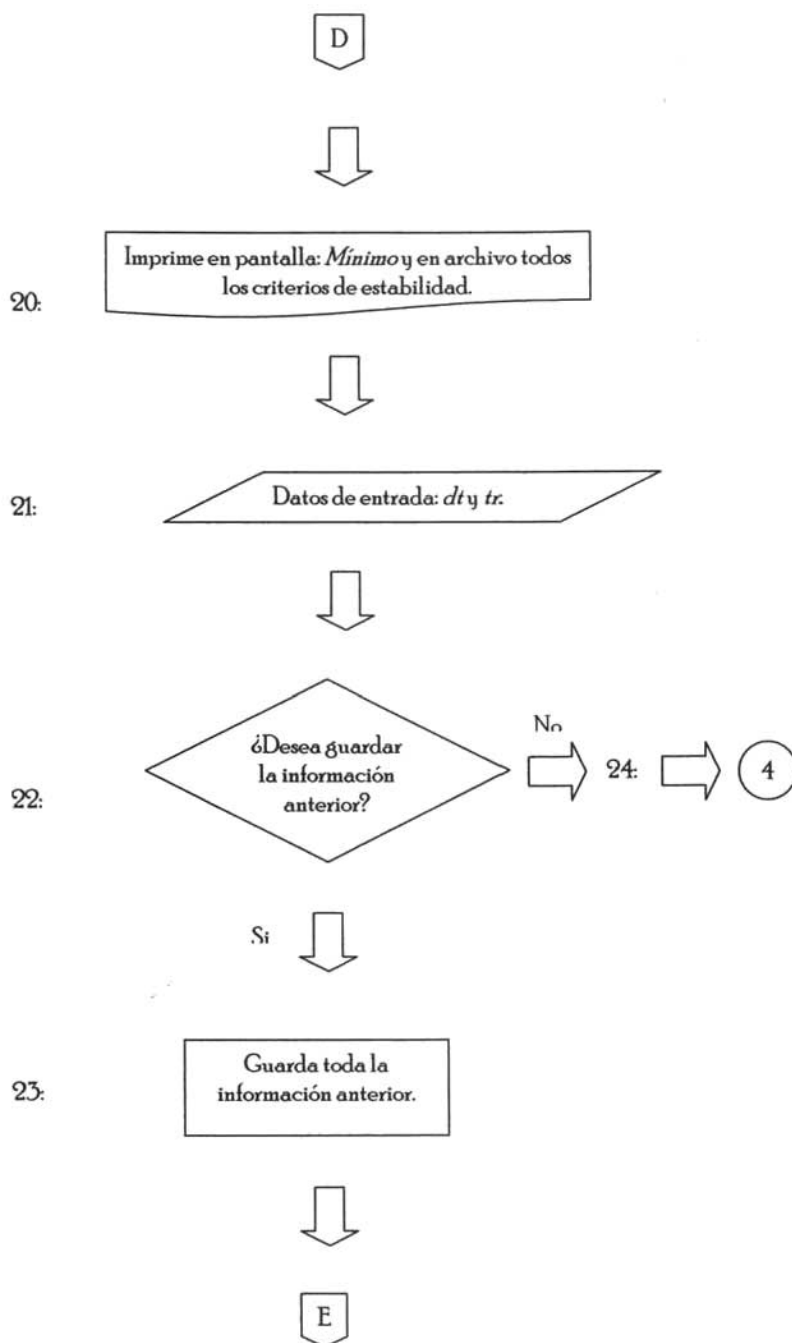
Imprime: ND .

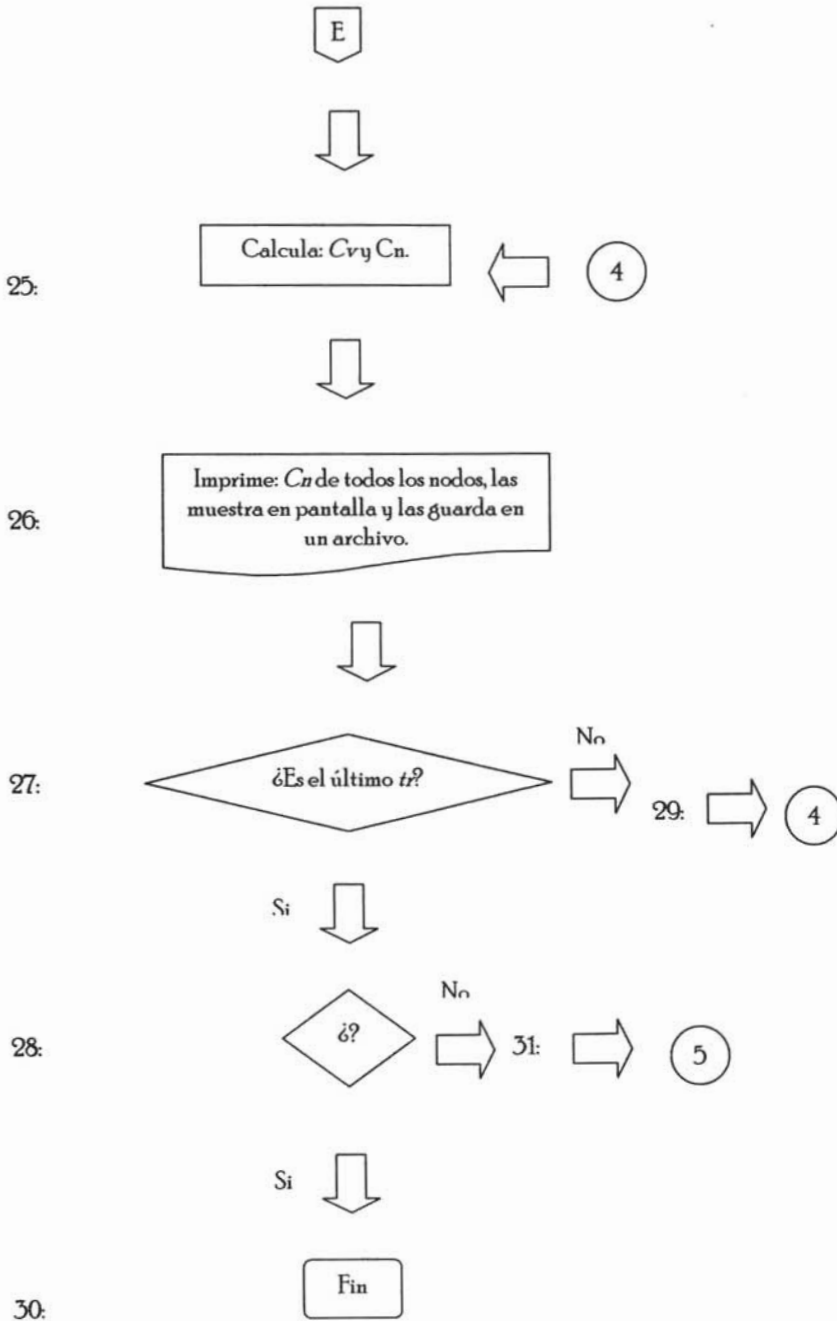


B









APÉNDICE C

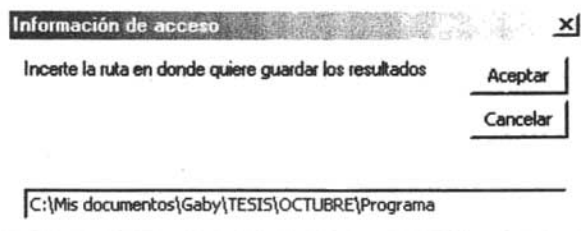
**ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA**

Algoritmo computacional

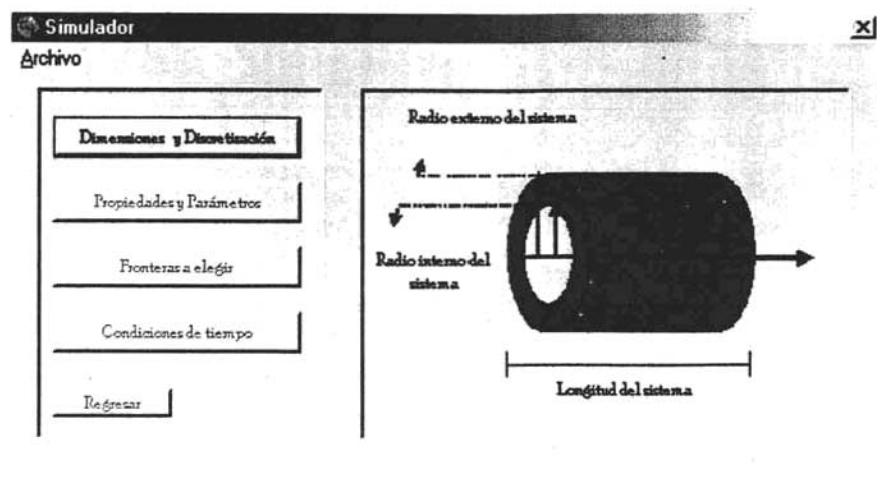
1: Al iniciar el programa, se muestra una ventana llamada Simulador (Forma 1) en donde se despliega el menú Archivo, donde se le da a escoger al usuario entre: Nuevo (si el usuario desea hacer una nueva prueba), Abrir (si el usuario desea abrir una de las pruebas anteriores), Cambiar ruta (donde el usuario indica la ruta en la que se guardarán todos los resultados realizados por el Simulador) y por último el menú Salir (en el que el usuario puede salir completamente del Simulador sin haber realizado ninguna prueba), tal y como lo muestra la siguiente imagen.



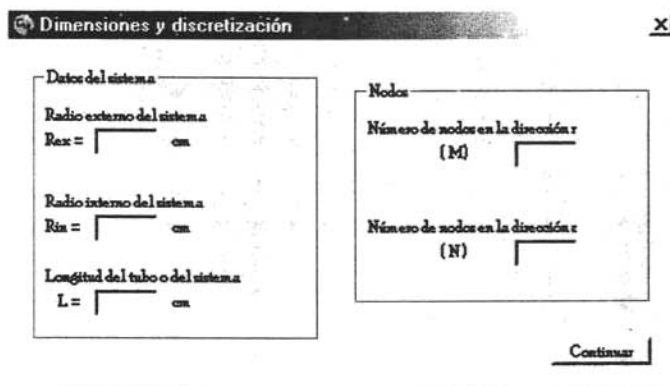
Se hace la aclaración de que el programa automáticamente propone la ruta para guardar los resultados, si el usuario está de acuerdo, acepta y se continúa con la prueba, si no lo está, entonces tendrá que ingresar la ruta que mejor le convenga. La ruta que propone el programa es en la cual se está activando el Simulador.



Al hacer clic en el menú Nuevo, se muestra la ventana Simulador con el botón llamado "Dimensiones y discretización" ya habilitado y un esquema del sistema para el mejor entendimiento del usuario. En esta ventana, se comenzará el ingreso de datos requeridos para el cálculo de áreas y volúmenes.



2: Al hacer clic en el botón habilitado, se muestra la ventana correspondiente a las "Dimensiones y discretización" (Forma 2) en la cual se introducen los valores de las variables rex , rin , l , M y N , para el cálculo de variables requeridas que se encuentran en la subrutina "ayv", localizada en el Módulo 1.



3: Con los valores de las variables anteriores y en la subrutina "ayv" se calcula a DD_m , dr y dz como: rex/M , l/N y $1-dz$ respectivamente. Calcula los radios nodales r (j) y las zetas nodales z (i). Se hace el cálculo de las áreas externas AE de los nodos que se encuentran en las esquinas, después, calcula las áreas externas de los nodos laterales inferiores y superiores, posteriormente calcula las mismas áreas pero para los nodos laterales del lado izquierdo y del lado derecho, de igual forma calcula las áreas externas de los nodos internos. Los pasos anteriores se repiten exactamente iguales para el cálculo de las áreas internas AI , áreas de tapas AT y de los volúmenes V de todos los nodos del sistema.

4: Todos los cálculos anteriores de áreas y volúmenes son guardados en un archivo de texto. En la Forma 3 se imprimen los valores calculados de las variables DD_m y dz ya que son útiles para la siguiente ventana.

5: La ventana siguiente correspondiente a las "Propiedades y parámetros" (Forma 3) se encuentra dividida en tres partes; la primera es llamada "Defecto", en la cual se muestra el intervalo definido por las variables DD_m y dz (antes calculadas) y en el que se debe de seleccionar la distancia del defecto que se tiene.

6: Al hacer clic el botón Nodos, el programa llama a la subrutina "defecto" que se encuentra en el Módulo1, lee el valor de DD y calcula las variables ND , ED y FND . $ND = \frac{DD}{dz} + 1$, $ED = Fix(ND)$ y $FND = ND - ED$ respectivamente. Si dicho botón no es activado, no se puede continuar con la prueba.

7: Al activar el botón Nodos, se le da la información al usuario de la cantidad de nodos afectados con los que el programa hará los cálculos siguientes.

8: En la segunda parte de la ventana "Propiedades y parámetros" (Forma 3) que corresponde al "Coeficiente de difusión", se pregunta si se tiene un valor constante para esta variable.

9: Si el coeficiente de difusión es constante, se introducen los valores de las variables C_i y D .

Propiedades y parámetros

Defecto Coeficiente de Difusión Reacción Química

Concentración Inicial = $\frac{g}{cm^3}$

Coefficiente de difusión

D = constante D = variable

D constante

D = $\frac{cm^2}{seg}$

10: Si no se tiene un valor constante de D , entonces se piden los valores de D_0 , q y $temp$, valores necesarios en la ecuación de Arrhenius para obtener el valor del coeficiente de difusión. Si el mouse pasa por la variable D , aparecerá un mensaje globo en el que se muestra la ecuación de Arrhenius. Para el cálculo de la variable D , se debe de hacer un clic en la casilla que corresponde al resultado de dicha variable.

Propiedades y parámetros

Defecto Coeficiente de Difusión Reacción Química

Concentración Inicial = 0.22 $\frac{g}{cm^3}$

Coefficiente de difusión

D = constante D = variable

D variable

D = $\frac{cm^2}{seg}$

$D_0 = \frac{D_0 \cdot \exp(-Q/R \cdot T)}{T}$ Q = $\frac{J}{cm^3}$

R = 8.314 $\frac{J}{cm^3 \cdot K}$ T = °C

- 11: Se realiza el cálculo de la variable: D
- 12: En pantalla se muestra el valor de D
- 13: El simulador pregunta al usuario ¿Existe Reacción Química?

14: Si se tiene una reacción química homogénea, entonces se piden las variables k_r y CD .

Propiedades y parámetros

Defecto Coeficiente de Difusión Reacción Química

¿Existe una reacción química homogénea?

Sí No

Reacción química

$K_r =$ $\frac{m}{g \text{ mol de Li seg}}$

$CD =$ $\frac{g \text{ mol de Li}}{cm^2 \text{ seg}}$

Continuar

15: Si no se tiene una reacción química homogénea, las casillas correspondientes son deshabilitadas y se sigue con la prueba.

16: En la ventana correspondiente a "Fronteras a elegir" (Forma 4) se pregunta si se desea el tipo de frontera 1. Esta ventana contiene un menú Ayuda, el cual explica brevemente los cuatro tipos de frontera con la clave correspondiente para que el usuario elija entre frontera a y frontera b y se tenga un mejor entendimiento del esquema.

Fronteras a elegir

Ayuda

Distancia Dañada = DND Distancia No Dañada = DND

(0, 0) (N, 0)

(0, M) (N, M)

1 2 3 4 5

Continuar

17: Si se escoge el tipo de frontera a , aparece otra ventana solicitando la información correspondiente a esa frontera, el programa lee las variables C_s , k y CE

Fronteras a elegir [X]

Ayuda

5 | a | 4

Concentración Conocida y Flux

$C_s = \left[\text{input} \right] \left[\frac{\text{g mol}}{\text{cm}^3} \right]$

Flux variable

Flux

$K = \left[\text{input} \right] \left[\frac{\text{cm}^2}{\text{seg}} \right]$ $CE = \left[\text{input} \right] \left[\frac{\text{g mol}}{\text{cm}^2 \cdot \text{seg}} \right]$

1 | 3

2

Continuar

18: Si la frontera es de tipo b , entonces las variables son C_s , k_s y CB

Fronteras a elegir [X]

Ayuda

5 | b | 4

Concentración Conocida y Reacción Heterogénea

$C_s = \left[\text{input} \right] \left[\frac{\text{g mol}}{\text{cm}^3} \right]$

Reacción química heterogénea

$K_s = \left[\text{input} \right] \left[\frac{\text{cm}^2 \cdot \text{seg}}{\text{g mol} \cdot B} \right]$

$CB = \left[\text{input} \right] \left[\frac{\text{g mol} \cdot \text{cm}^2}{\text{seg}} \right]$

1 | 3

2

Continuar

19: La ventana Fronteras a elegir (Forma 4) llama a la subrutina "cdts", que se encuentra en el Módulo 2 para calcular los criterios de estabilidad, seleccionar el mínimo y dar las coordenadas del mínimo de todos los criterios de estabilidad.

20: Los resultados de los cálculos son guardados en un archivo de texto. En la siguiente ventana correspondiente a Condiciones de tiempo (Forma 5) donde se muestra el mínimo de los criterios de

estabilidad (*Minimo*), con el cual se le indica al usuario el intervalo en el que se tiene que seleccionar el incremento de tiempo con el que se desean hacer los cálculos.

21: En esta ventana Condiciones de tiempo (Forma 5) se introducen los valores de las variables dt , y tr . En este momento se hace visible una tabla en donde se introducen los valores para los que se desean ver resultados.

22: Se pregunta si se quieren guardar tanto los datos de entrada como los de salida desde que se inició la prueba, hasta este punto.

The screenshot shows a software window titled "Condiciones de tiempo" with a close button (X). Below the title bar is a "Menú" button. The main area contains two input fields:

- "El intervalo de selección para el dt es de: 0 a 11.541113 minutos" with a text box containing "11.541113".
- "Introduzca el incremento de tiempo seleccionado para la simulación $dt =$ 1.4 min" with a text box containing "1.4".

Below these fields is a "Datos" label and a question: "¿Para estos tiempos desea ver resultados?". A "1" is entered in a small box next to the question. At the bottom of the window is a "ADVERTENCIA DE SEGURIDAD" dialog box with a close button (X). The dialog contains an information icon (i) and the text "Desea guardar los datos antes de continuar con la simulación?". Below the text are two buttons: "Si" (highlighted with a box) and "No".

23: Si se desean guardar todos los valores anteriores, el programa va a la subrutina guardar que se encuentra en el código de la Forma 5.

24: Si no se desean guardar los valores, el programa sigue al cálculo de las concentraciones y se deshabilitan los botones correspondientes a Guardar y Continuar.

25: Se calculan C_v y C_n y se determinan las siguientes variables: dt_{min} , $tiempos$, dt_{minX} , N_v y dt_{mini} . Estos cálculos se realizan en el Módulo 2, en la subrutina llamada "cálculo".

26: Imprime C_n de todos los nodos, los muestra en pantalla y los guarda en un archivo.

Condiciones de tiempo X

Menú

El intervalo de selección para el dt es de: 0 a 1.541113 minutos

Introduzca el incremento de tiempo seleccionado para la simulación: $dt = 1.4$ min

Datos

¿Para cuántos tiempos desea ver resultados?

Tiempo [min]	T1	T2
2	5	

Tiempo=2	i=0	i=1	i=2
j=0	0.164	0.271	0.272
j=1	0.011	0.016	0.016
j=2	0.010	0.010	0.010
j=3	0.010	0.010	0.010
j=4	0.010	0.010	0.010
j=5	0.010	0.010	0.010

27: Se pregunta si ya se llegó al último valor para el que se desean ver resultados.

28: Si es el último valor de tiempo de resultado, entonces el botón correspondiente a Cálculo cambia por el de INICIO el cual se va a la primera ventana del simulador, en Menú existen otras dos opciones para el usuario: Deshacer; el cual indica si se quiere deshacer los resultados anteriores para realizar un nuevo cálculo con diferente dt , añadir o disminuir un tiempo para el que se quieran ver resultados y Salir; el cual simplemente sale por completo del simulador.

Condiciones de tiempo
X

Menú
 Deshacer
 Salir

Selección para el dt es de: 0 a

Introduce el incremento de tiempo
seleccionado para la simulación

dt = min

Datos

¿Para cuántos tiempos deseas ver resultados?

Tiempos [min]	T1	T2	
2	2	5	Guardar
			Continuar

Tiempo→	i=0	i=1	i=2 ▲
j=0	0.254	0.268	0.269
j=1	0.015	0.024	0.024
j=2	0.010	0.010	0.010
j=3	0.010	0.010	0.010
j=4	0.010	0.010	0.010
i=5	0.010	0.010	0.010

INICIO

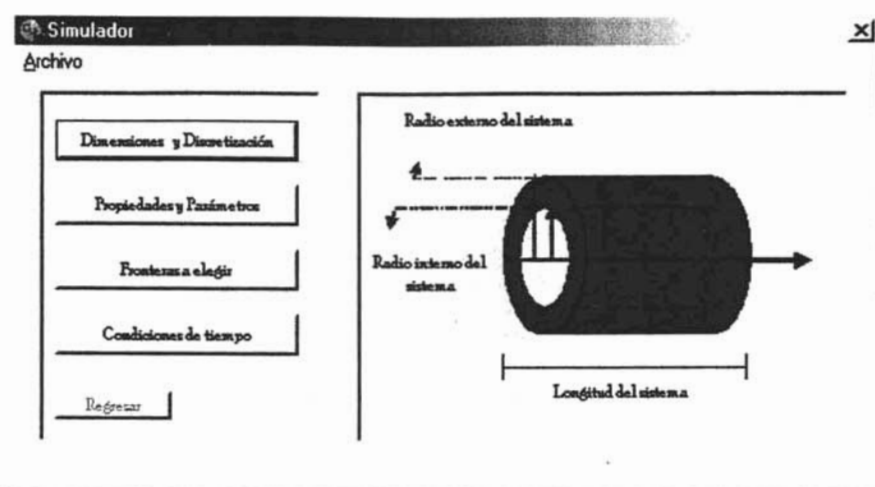
29: Si no se ha llegado al último valor en el que se desean ver resultados, los datos de la tabla mostrada siguen cambiando hasta llegar a dicho valor.

30: El programa sale por completo del simulador.

31: Al apretar el botón INICIO regreso a la ventana Simulador en la cual se pueden seguir haciendo pruebas.

Algoritmo para abrir un estudio existente.

Si se desea abrir un estudio, se pide la ruta en la que se encuentra, al introducirla, se muestra la ventana llamada Simulador para que el usuario mueva o corrija alguno de los datos de entrada.



En esta ventana, el usuario pide seleccionar desde que punto quiere hacer los cambios. Se aclara que en el momento en el que se cambie alguno (s) de los datos, el programa calculará las nuevas variables y se borrarán los datos de las siguientes Formas.

Datos de entrada y de salida

Datos de entrada de la ventana Dimensiones y discretización (Forma 2).

Nombre	Variable
Radio externo del tubo o del sistema	R_{ex}
Radio interno del tubo o del sistema	R_{in}
Longitud del tubo o del sistema	L
Número de nodos en la dirección r	M
Número de nodos en la dirección z	N

Datos de salida (visibles al usuario) de la ventana Dimensiones y discretización (Forma 2).

Nombre	Variable
Distancia máxima del defecto	DD_m
Incremento en la dirección z	dz

Datos de salida (no visibles al usuario y guardadas en un archivo) de la ventana Dimensiones y discretización (Forma 2).

Nombre	Variable
Área externa de los cilindros discretizados	AE
Área interna de los cilindros discretizados	AI
Área de las tapas de los cilindros discretizados	AT
Volumen de los cilindros discretizados	V

Datos de entrada de la ventana Propiedades y parámetros (Forma 3).

Nombre	Variable
Distancia del defecto	DD
Concentración inicial del sistema	C_i
Coefficiente de difusión	D
Factor de frecuencia para el coeficiente de difusión	D_0
Energía de activación para el coeficiente de difusión	Q
Temperatura	T
Coefficiente de la velocidad de reacción	K_r
Concentración del componente D	CD

Datos de salida (visibles al usuario) de la ventana Propiedades y parámetros (Forma 3).

Nombre	Variable
Número de nodos dañados	ND
Coefficiente de difusión	D

Datos de entrada de la ventana Fronteras a elegir (Forma 4).

Nombre	Variable
Bandera (Opción 1 o 2)	A
Constante de velocidad de reacción en la superficie	K_s
Concentración del componente B	CB
Coeficiente del transporte de masa	K
Concentración = $C_{A_{in}}$	CE

Datos de salida (visibles al usuario) de la ventana Fronteras a elegir (Forma 4).

Nombre	Variable
Valor mínimo del conjunto de los criterios de estabilidad	$Mínimo$

Datos de salida (no visibles al usuario y guardados en un archivo) de la ventana Fronteras a elegir (Forma 4).

Nombre	Variable
Conjunto de los criterios de estabilidad	cdt

Datos de entrada de la ventana Condiciones de tiempo (Forma 5).

Nombre	Variable
Incremento de tiempo	dt
Tiempo de resultado	tr

Dato de salida (visible al usuario) de la ventana Condiciones de tiempo (Forma 5).

Nombre	Variable
Concentraciones nuevas calculadas	Cn

Datos de salida (no visibles al usuario y guardadas en un archivo) de la ventana Condiciones de tiempo (Forma 5).

Nombre	Variable
Concentraciones viejas calculadas	Cv

APÉNDICE D

Tabla de variables utilizadas por el programa

Nombre	Variable	Unidades
Bandera ($D =$ constante)	$v1$	
Bandera (Existe reacción química homogénea)	$v2$	
Bandera (Flux)	F	
Bandera (Guarda información deseada)	<i>guardar</i>	
Bandera (No recupera información)	<i>negativa</i>	
Bandera (Opción <i>a</i> ó <i>b</i>)	Op	
Bandera (Reacción química heterogénea)	RH	
Bandera (Se brinca una subrutina)	<i>brinco</i>	
Bandera (Se trabaja con ED)	Boa	
Bandera (Término de generación)	G	
Bandera	<i>bandera</i>	
Bandera	<i>llave</i>	
Coefficiente de la velocidad de reacción	kr	$\frac{cm^3}{g \text{ mol de } D \text{ seg}}$
Coordenadas i, j del cdt-mínimo	$i_{\text{Mínimo}}, j_{\text{Mínimo}}$	
Concentración conocida del sistema	CS	$\frac{g \text{ mol}}{cm^3}$
Concentración inicial	ci	$\frac{g \text{ mol}}{cm^3}$
Concentración nueva	C_n	$\frac{g \text{ mol}}{cm^3}$
Concentración de un componente D	CD	$\frac{g \text{ mol de } D}{cm^3}$
Concentración de un componente B	CB	$\frac{g \text{ mol de } B}{cm^3}$
Concentración componente "A" cuando $r = r_{Rin}$.	$CE = C_{A_{Rin}}$	$\frac{g \text{ mol}}{cm^3}$
Concentración vieja	C_v	$\frac{g \text{ mol}}{cm^3}$
Conjunto de los criterios de estabilidad	cdt	<i>seg</i>
Constante de velocidad de reacción en la superficie	ks	$\frac{cm^3 \text{ cm}}{g \text{ mol de } B \text{ seg}}$
Constante universal de los gases	r	$\frac{J}{g \text{ mol } K}$
Contadores	t, p, i, j	

Contador	<i>cont</i>	
Contador	<i>contador</i>	
Distancia del defecto	<i>DD</i>	<i>cm</i>
Distancia máxima del defecto	<i>DDm</i>	<i>cm</i>
Distancia nodal en la dirección <i>r</i>	<i>r(j)</i>	<i>cm</i>
Distancia nodal en la dirección <i>z</i>	<i>z(i)</i>	<i>cm</i>
Constante universal de los gases	<i>r</i>	$\frac{J}{g \text{ mol } K}$
Energía de activación para el coeficiente de difusión	<i>q</i>	$\frac{J}{g \text{ mol}}$
Factor de frecuencia para el coeficiente de difusión	<i>DO</i>	$\frac{cm^2}{seg}$
Fracción del número de nodos dañados	<i>FND</i>	
Guarda el <i>dtmin</i> una vuelta (es el <i>dtmin</i> original)	<i>dtminX</i>	<i>min</i>
Incremento en la dirección <i>r</i>	<i>dr</i>	<i>cm</i>
Incremento en la dirección <i>z</i>	<i>dz</i>	<i>cm</i>
Incremento de tiempo en minutos	<i>dtmin</i>	<i>min</i>
Incremento de tiempo en segundos	<i>dtseg</i>	<i>seg</i>
Incremento de tiempo que queda si el <i>dt</i> no es múltiplo del tiempo de simulación	<i>dtmini</i>	<i>min</i>
Longitud de tubo o del sistema	<i>l</i>	<i>cm</i>
Matriz donde se guardan los tiempos de prueba	<i>tiempos</i>	
Número de nodos dañados	<i>ND</i>	
Número de vueltas exactas	<i>Nv</i>	
Número entero del número de nodos dañados	<i>ED</i>	
Número π (3.14159265359)	<i>pi</i>	
Radio externo del tubo o del sistema	<i>rex</i>	<i>cm</i>
Radio interno del tubo o del sistema	<i>riu</i>	<i>cm</i>
Temperatura	<i>temp</i>	
Tiempo inicial en la estructura cíclica del cálculo	<i>ti</i>	
Tiempo final en la estructura cíclica del cálculo	<i>tf</i>	
Valor mínimo del conjunto de los criterios de estabilidad	<i>Mínimo</i>	<i>min</i>

APÉNDICE E

Detalle de subrutinas y/o procedimientos

Código de la subrutina "ayv" del Módulo 1:

Sub ayv(DDm!)

Dim r(), z(), rex!, rin!, pi#, i%, j%

pi = 3.14159265358979

rex = Val(Form2.Text1.Text)

rin = Val(Form2.Text2.Text)

l = Val(Form2.Text3.Text)

N = Val(Form2.Text5.Text)

M = Val(Form2.Text4.Text)

N = N - 1

M = M - 1

ReDim AE(N, M), AI(N, M), AT(N, M), V(N, M), r(M), z(N)

dr = rex / M

dz = l / N

DDm = 1 - dz

Radios Nodales

For j = 0 To M

 r(j) = ((dr) * j) + rin

Next j

Zetas Nodales

For i = 0 To N

 z(i) = (dz) * i

Next i

Áreas Externas

Esquinas

AE(0, 0) = 2 * pi * (r(0) + (dr / 2)) * (dz / 2)

AE(0, M) = 2 * pi * (r(M)) * (dz / 2)

AE(N, M) = AE(0, M)

AE(N, 0) = AE(0, 0)

Laterales

Inferiores y Superiores

For i = 1 To N - 1

 AE(i, 0) = 2 * pi * (r(0) + dr / 2) * dz

```

    AE(i,M) = 2 * pi * (r(M)) * dz
Next i
Izquierdos y Derechos
For j = 1 To M - 1
    AE(0,j) = 2 * pi * (r(j) + (dr / 2)) * (dz / 2)
    AE(N,j) = AE(0,j)
Next j
Internos
For j = 1 To M - 1
    For i = 1 To N - 1
        AE(i,j) = 2 * pi * (r(j) + (dr / 2)) * dz
    Next i
Next j

```

```

'Áreas Internas
Esquinas
AI(0,0) = 2 * pi * (r(0)) * (dz / 2)
AI(0,M) = 2 * pi * (r(M) - (dr / 2)) * (dz / 2)
AI(N,M) = AI(0,M)
AI(N,0) = AI(0,0)

```

```

Laterales
Inferiores y Superiores
For i = 1 To N - 1
    AI(i,0) = 2 * pi * (r(0)) * dz
    AI(i,M) = 2 * pi * (r(M) - (dr / 2)) * dz
Next i
Izquierdos y Derechos
For j = 1 To M - 1
    AI(0,j) = 2 * pi * (r(j) - (dr / 2)) * (dz / 2)
    AI(N,j) = AI(0,j)
Next j
Internos
For j = 1 To M - 1
    For i = 1 To N - 1
        AI(i,j) = 2 * pi * (r(j) - (dr / 2)) * dz
    Next i
Next j

```

```

'Áreas Tapas
Esquinas
AT(0,0) = pi * ((r(0) + (dr / 2)) ^ 2 - (r(0)) ^ 2)
AT(0,M) = pi * ((r(M)) ^ 2 - (r(M) - (dr / 2)) ^ 2)
AT(N,M) = AT(0,M)
AT(N,0) = AT(0,0)
Laterales
Inferiores y Superiores
For i = 1 To N - 1
    AT(i,0) = pi * ((r(0) + (dr / 2)) ^ 2 - (r(0)) ^ 2)

```

```

    AT(i,M) = pi * (r(M) ^ 2 - (r(M) - (dr / 2)) ^ 2)
Next i
Izquierdos y Derechos
For j = 1 To M - 1
    AT(0,j) = pi * ((r(j) + (dr / 2)) ^ 2 - (r(j) - (dr / 2)) ^ 2)
    AT(N,j) = AT(0,j)
Next j
Internos
For j = 1 To M - 1
    For i = 1 To N - 1
        AT(i,j) = pi * ((r(j) + (dr / 2)) ^ 2 - (r(j) - (dr / 2)) ^ 2)
    Next i
Next j

Volumenes
Esquinas
V(0,0) = pi * dz * (((r(0) + (dr / 2)) ^ 2 - (r(0)) ^ 2))
V(0,M) = pi * (dz / 2) * (((r(M)) ^ 2 - (r(M) - (dr / 2)) ^ 2))
V(N,M) = V(0,M)
V(N,0) = V(0,0)
Laterales
Inferiores y Superiores
For i = 1 To N - 1
    V(i,0) = pi * dz * ((r(0) + (dr / 2)) ^ 2 - r(0) ^ 2)
    V(i,M) = pi * dz * ((r(M) ^ 2 - (r(M) - (dr / 2)) ^ 2))
Next i
Izquierdos y Derechos
For j = 1 To M - 1
    V(0,j) = pi * dz * (((r(j) + (dr / 2)) ^ 2 - (r(j) - (dr / 2)) ^ 2))
    V(N,j) = V(0,j)
Next j
Internos
For j = 1 To M - 1
    For i = 1 To N - 1
        V(i,j) = pi * dz * (((r(j) + (dr / 2)) ^ 2 - (r(j) - (dr / 2)) ^ 2))
    Next i
Next j

Imprime los resultados
ruta = CurDir()
Open CurDir() & "\datos\ayv.txt" For Output As #20

Para radios nodales
For j = 0 To M Step 1
    Print #20, Format$(r(j), "#####0.0#####");
Next j
Print #20, " "
Para zetas nodales

```



```

For i = 0 To N Step 1
  Print #20, Format$(z(i), "####0.0#####");
Next i
Print #20, " "
Print #20, " "

Print #20, "Nodo: ";
For j = 0 To M Step 1
  Print #20, Format$(j, "00 ");
  Print #20, " ";
Next j
Print #20, ""
Print #20, ""

Para AE
For i = 0 To N
  Print #20, " " & Format$(i, "00") & " ";
  For j = 0 To M Step 1
    Print #20, Format$(AE(i, j), "#000.0000#");
    Print #20, " ";
  Next j
  Print #20, ""
Next i
Print #20, ""

Para AI
For i = 0 To N
  Print #20, " " & i & " ";
  For j = 0 To M Step 1
    Print #20, Format$(AI(i, j), "####0.0#####");
    Print #20, " ";
  Next j
  Print #20, ""
Next i
Print #20, ""

Para AT
For i = 0 To N
  Print #20, " " & i & " ";
  For j = 0 To M Step 1
    Print #20, Format$(AT(i, j), "####0.0#####");
    Print #20, " ";
  Next j
  Print #20, ""
Next i
Print #20, ""

Para V

```

```

For i = 0 To N
Print #20, " &i& " ;
For j = 0 To M Step 1
Print #20, Format$(V(i,j), "###0.0###");
Print #20, " ";
Next j
Print #20, ""
Next i

Close #20
End Sub

```

Código de la subrutina "defecto" del Módulo 1:

```

Sub defecto()
Dim ED, FND, Boa%, DD!
DD = Val(Form3.Text1.Text)

ND = (DD / dz) + 1

ED = Fix(ND)
FND = ND - ED

If FND >= 0 And FND < 0.5 Then
ND = ED
MsgBox "ND=" & ND, vbExclamation, "Número de nodos afectados"
End If

If FND = 0.5 Then
Boa = MsgBox("Si selecciona 'Sí' el programa trabajará con " & ED & " nodos, delo contrario trabajará con " & ED + 1, vbYesNo + vbInformation, "Número de nodos afectados")
If Boa = 6 Then
ND = ED
Else
ND = ED + 1
End If
End If

If FND > 0.5 And FND <= 1 Then
ND = ED + 1
MsgBox "ND=" & ND, vbExclamation, "Número de nodos afectados"
End If

End Sub

```

Código de la subrutina "cdts" del Módulo 2:

Sub cdt\$(Mínimo)

Dim iMínimo%, jMínimo%, i%, j%

ci = Val(Form3.Text2.Text)

kr = Val(Form3.Text8.Text)

CD = Val(Form3.Text9.Text)

If Form4.Text1.Text = "a" Then

CS = Val(Form4.Text2.Text)

k = Val(Form4.Text3.Text)

CE = Val(Form4.Text4.Text)

F = 1

RH = 0

Else

CS = Val(Form4.Text5.Text)

ks = Val(Form4.Text6.Text)

CB = Val(Form4.Text7.Text)

F = 0

RH = 1

End If

G = IIf(Form3.Option3 = True, 1, 0)

ReDim cdt\$(N, M)

'Esquina

'inferior izquierda (0,0)

$$\text{cdt}(0, 0) = 1 / (((D * AT(0, 0)) / (dz * V(0, 0))) + ((D * AE(0, 0)) / (dr * V(0, 0))) + ((kr * CD) * G) + (((ks * CB * AI(0, 0)) / V(0, 0)) * RH) + (((k * AI(0, 0)) / V(0, 0)) * F))$$

'horizontal

'inferior (i,0)dañada

For i = 1 To ND - 1

$$\text{cdt}(i, 0) = 1 / (((2 * D * AT(i, 0)) / (dz * V(i, 0))) + ((D * AE(i, 0)) / (dr * V(i, 0))) + ((kr * CD) * G) + (((ks * CB * AI(i, 0)) / V(i, 0)) * RH) + (((k * AI(i, 0)) / V(i, 0)) * F))$$

Next i

'inferior (i,0)no dañada

For i = ND To N - 1

$$\text{cdt}(i, 0) = 1 / (((2 * D * AT(i, 0)) / (dz * V(i, 0))) + ((D * AE(i, 0)) / (dr * V(i, 0))) + ((kr * CD) * G))$$

Next i

'lateral

'izquierda (0j)

For j = 1 To M - 1

$$\text{cdt}(0, j) = 1 / (((D * AT(0, j)) / (dz * V(0, j))) + ((D * AI(0, j)) / (dr * V(0, j))) + ((D * AE(0, j)) / (dr * V(0, j))) + ((kr * CD) * G))$$

Next j

'central

```

For j = 1 To M - 1
  For i = 1 To N - 1
    cdt(i, j) = 1 / (((2 * D * AT(i, j)) / (dr * V(i, j))) + ((D * AI(i, j)) / (dr * V(i, j))) + ((D * AE(i, j)) / (dr * V(i, j))) + ((kr * CD) * G))
  Next i
Next j

```

Se selecciona el dt mínimo

```

Mínimo = cdt(0, 0)
iMínimo = 0
jMínimo = 0
For j = 1 To M - 1
  For i = 0 To N - 1
    If Mínimo > cdt(i, j) Then
      Mínimo = cdt(i, j)
      iMínimo = i
      jMínimo = j
    End If
  Next i
Next j

```

```

For i = 1 To ND - 1
  If Mínimo > cdt(i, 0) Then
    Mínimo = cdt(i, 0)
    iMínimo = i
    jMínimo = 0
  End If
Next i

```

Imprime los resultados de dt's en un archivo

```

Open CurDir() & "\datos\cdts.txt" For Output As #30
  For j = 0 To M
    For i = 0 To N
      Print #30, "dt(" & i & " "; & j & " )=";
      If cdt(i, j) = 0 Then
        Print #30, "Frontera Cs";
      Else
        Print #30, Format$(cdt(i, j), "#0000.000000");
      End If
      Print #30, " ";
    Next i
    Print #30, ""
  Next j
Close #30

```

End Sub

Código de la subrutina "cálculo" del Módulo 2:

Sub calculo(dtseg!, dtmin!, tiempos%(), ti!, tf!)
 Dim dtminX!, dtmini!, Nv As Long, t!, contador%, bandera As Byte, div!, _
 mult!, rest!

Ecuaciones de los nodos representativos
 'Sub concentraciones)
 En esta linea el programa determina cuantas veces
 $div = (tf - ti) / dtmin$
 $Nv = Fix(div)$
 $mult = (Nv * dtmin)$
 $rest = (tf - ti)$
 $dtmini = rest - mult$
 'calculara las
 'ecuaciones con el dt seleccionado por el usuario y cual
 'será el último dt en caso de que el dt seleccionado no
 'fuera multiplo del tiempo de duración de la prueba.
 contador = 0
 bandera = 0

For i = ti + dtmin To tf Step dtmin
 cambio:

Esquinas
 'superior izquierda (0,M)

$C_n(0, M) = CS$
 $C_v(0, M) = C_n(0, M)$

'superior derecha (N,M)
 $C_n(N, M) = CS$
 $C_v(N, M) = C_n(N, M)$
 'inferior derecha (N,0)
 $C_n(N, 0) = CS$
 $C_v(N, 0) = C_n(N, 0)$
 'inferior izquierda (0,0)

$C_n(0, 0) = (((D * AT(0, 0) * dtseg) / (dz * V(0, 0))) * C_v(1, 0)) + ((1 - ((D * AT(0, 0) * dtseg) / (dz * V(0, 0)))) - ((D * AE(0, 0) * dtseg) / (dr * V(0, 0))) - (kr * CD * dtseg * G) - ((ks * CB * AI(0, 0) * dtseg) / V(0, 0)) * RH) - ((k * AI(0, 0) * dtseg) / V(0, 0)) * F) * C_v(0, 0)) + (((k * CE * AI(0, 0) * dtseg) / V(0, 0)) * F) + (((D * AE(0, 0) * dtseg) / (dr * V(0, 0))) * C_v(0, 1))$
 $C_v(0, 0) = C_n(0, 0)$

Horizontales

'inferior (i,0)

Para frontera dañada

For i = 1 To ND - 1

$$C_n(i, 0) = (((D * AT(i, 0) * dtseg) / (dz * V(i, 0))) * C_v(i + 1, 0)) + ((1 - ((2 * D * AT(i, 0) * dtseg) / (dz * V(i, 0))) - ((D * AE(i, 0) * dtseg) / (dr * V(i, 0))) - (kr * CD * dtseg * G) - ((ks * CB * AI(i, 0) * dtseg) / V(i, 0)) * RH) - (((k * AI(i, 0) * dtseg) / V(i, 0)) * F) * C_v(i, 0)) + (((k * CE * AI(i, 0) * dtseg) / V(i, 0)) * F) + (((D * AT(i, 0) * dtseg) / (dz * V(i, 0))) * C_v(i - 1, 0)) + (((D * AE(i, 0) * dtseg) / (dr * V(i, 0))) * C_v(i, 1))$$

$$C_v(i, 0) = C_n(i, 0)$$

Next i

Para frontera no dañada

For i = ND To N - 1

$$C_n(i, 0) = (((D * AT(i, 0) * dtseg) / (dz * V(i, 0))) * C_v(i + 1, 0)) + ((1 - ((2 * D * AT(i, 0) * dtseg) / (dz * V(i, 0))) - ((D * AE(i, 0) * dtseg) / (dr * V(i, 0))) - (kr * CD * dtseg * G)) * C_v(i, 0)) + (((D * AT(i, 0) * dtseg) / (dz * V(i, 0))) * C_v(i - 1, 0)) + (((D * AE(i, 0) * dtseg) / (dr * V(i, 0))) * C_v(i, 1))$$

$$C_v(i, 0) = C_n(i, 0)$$

Next i

'superior (i,M)

For i = 1 To N - 1

$$C_n(i, M) = CS$$

$$C_v(i, M) = C_n(i, M)$$

Next i

Laterales

'izquierda (0,j)

For j = 1 To M - 1

$$C_n(0, j) = (((D * AT(0, j) * dtseg) / (dz * V(0, j))) * C_v(1, j)) + ((1 - ((D * AT(0, j) * dtseg) / (dz * V(0, j))) - ((D * AI(0, j) * dtseg) / (dr * V(0, j))) - ((D * AE(0, j) * dtseg) / (dr * V(0, j))) - (kr * CD * dtseg * G)) * C_v(0, j)) + (((D * AI(0, j) * dtseg) / (dr * V(0, j))) * C_v(0, j - 1)) + (((D * AE(0, j) * dtseg) / (dr * V(0, j))) * C_v(0, j + 1))$$

$$C_v(0, j) = C_n(0, j)$$

Next j

'derecha (N,j)

For j = 1 To M - 1

$$C_n(N, j) = CS$$

$$C_v(N, j) = C_n(N, j)$$

Next j

Interna (i,j)

For j = 1 To M - 1

For i = 1 To N - 1

$$C_n(i, j) = (((D * AT(i, j) * dtseg) / (dz * V(i, j))) * C_v(i + 1, j)) + ((1 - ((2 * D * AT(i, j) * dtseg) / (dz * V(i, j))) - ((D * AI(i, j) * dtseg) / (dr * V(i, j))) - ((D * AE(i, j) * dtseg) / (dr * V(i, j))) - (kr * CD * dtseg * G)) * C_v(i, j)) + (((D * AT(i, j) * dtseg) / (dz * V(i, j))) * C_v(i - 1, j)) + (((D * AI(i, j) * dtseg) / (dr * V(i, j))) * C_v(i, j - 1)) + (((D * AE(i, j) * dtseg) / (dr * V(i, j))) * C_v(i, j + 1))$$

$$C_v(i, j) = C_n(i, j)$$

Next i

```

Next j

' escribir en el grid
Form5.MSFlexGrid2.Col = 0
Form5.MSFlexGrid2.Row = 0
Form5.MSFlexGrid2.Text = "Tiempo=" & t
For j = 1 To M + 1
  For i = 1 To N + 1
    Form5.MSFlexGrid2.TextMatrix(j,i) = Format$(Cn(i - 1, j - 1), "####0.000")
  Next i
Next j
'

contador = contador + 1
If dtmini <> 0 Then
  If contador = Nv Then
    t = t + dtmini
    dtminX = dtmin
    dtmin = dtmini
    dtseg = dtmin * 60
    bandera = 1
    GoTo cambio
  End If
  If bandera = 1 Then
    i = 0
    j = 0
    dtmin = dtminX
    dtseg = dtmin * 60
    GoTo sigue
  End If
End If
Next t
sigue:
'se escriben en el txt solo los valores de los tiempos deseados
Print #50, ""
Print #50, "Tiempo=" & t
For j = 0 To M
  For i = 0 To N
    Print #50, "C(" & i & ", " & j & ")=";
    Print #50, Format$(Cn(i, j), "#0.00000000");
    Print #50, " ";
  Next i
  Print #50, ""
Next j
'
End Sub

```