



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTONOMA DE MEXICO

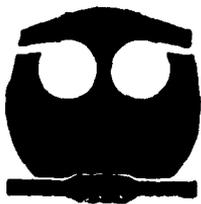
FACULTAD DE QUIMICA



EXAMEN DE PROFESIONALES
FAC. DE QUIMICA

**Formulación y Resolución
del Modelo Diferencial
de una Columna de
Absorción Isotérmica
de Contacto Continuo**

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
INGENIERO QUIMICO
P R E S E N T A
Arturo González Pacheco



México, D. F., Cd. Universitaria

1995

FALLA DE ORIGEN

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

58
Res.



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

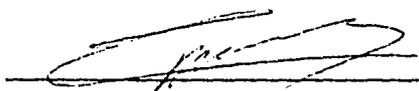
Jurado asignado según el tema:

Presidente	Prof: CARITINO MORENO PADILLA.
Vocal	Prof: GENOVEVO SILVA PICHARDO.
Secretario	Prof: EMILIO ARTURO ZUMAYA PEREZ.
1er. Suplente	Prof: NORMA GISELA GONZALEZ M.
2do. Suplente	Prof: DAVID GUTIERREZ GARAVITO.

SITIO DONDE SE DESARROLLO EL TEMA

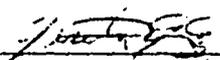
**LABORATORIO DE COMPUTACION, FACULTAD DE
QUIMICA U.N.A.M.**

ASESOR DE TEMA



M. en C. CARITINO MORENO PADILLA.

SUPERVISOR TECNICO



I.Q. NORMA GISELA GONZALEZ MARISCAL

SUSTENTANTE



ARTURO GONZALEZ PACHECO

***A mis padres y hermanos
por su apoyo y comprensión.***

***Al maestro Caritino Moreno
Padilla por sus valiosos
consejos, Estímulos y apoyo
desinteresado para la
realización de este trabajo.***

INDICE

INDICE	Pag
<i>Introducción</i>	1
<i>Objetivos</i>	2
CAPITULO 1 CONCEPTOS BASICOS DE ABSORCION	3
<i>1.1 Absorción de gases</i>	3
<i>1.2 Solubilidad de gases en líquidos en el equilibrio</i>	3
<i>1.3 Sistemas de equilibrio gas-líquido para 2 componentes</i>	4
<i>1.4 Sistemas de multicomponentes</i>	6
<i>1.5 Soluciones líquidas ideales</i>	6
<i>1.6 Soluciones líquidas no ideales</i>	8
CAPITULO 2 BALANCES DE MATERIA	9
<i>2.1 Ecuación general para el transporte molecular</i>	9
<i>2.2 Transporte de masa</i>	19
<i>2.3 Método de análisis</i>	22
<i>2.4 Transferencia a régimen estacionario</i>	24
<i>2.5 Transferencia simple</i>	24
<i>2.6 Balance de masa por transferencia molecular</i>	24
<i>2.7 Balance de masa con flujo global y transporte molecular</i>	27

CAPITULO 3	DESCRIPCION DE METODOS NUMERICOS	30
3.1	<i>Método de Runge-Kutta 4° orden</i>	30
3.2	<i>Método de integración de Euler</i>	30
3.3	<i>Método de Euler-Gauss</i>	33
3.4	<i>Métodos de Runge-Kutta</i>	35
3.5	<i>Deducción del método de Runge-Kutta 2° orden</i>	36
3.6	<i>Deducción del método de Runge-Kutta 4° orden</i>	40
3.7	<i>Método de Newton-Raphson</i>	41
3.8	<i>Descripción del método</i>	41
3.9	<i>Interpretación geométrica del Método de Newton-Raphson</i>	45
3.10	<i>Método de Regula Falsi y métodos relacionados</i>	48
CAPITULO 4	FORMULACION DEL MODELO DE UNA COLUMNA DE ABSORCION	53
4.1	<i>Derivación de las ecuaciones diferenciales de una columna de absorción isotérmica de contacto continuo.</i>	54
4.2	<i>Interacción con el equilibrio en la transferencia de masa</i>	58
4.3	<i>Deducción de las composiciones (X_p, Y_p) en el equilibrio, cuando las soluciones son mezclas diluidas (Sol. Ideales)</i>	60
4.4	<i>Deducción de las composiciones (X_p, Y_p) en el equilibrio, cuando las soluciones son mezclas conc. (Sol. Reales)</i>	62

CAPITULO 5	ELABORACION DE UN PROGRAMA COMPUTACIONAL PARA RESOLVER EL MODELO DE LA TORRE DE ABSORCION	64
5.1	<i>Consideraciones previas</i>	64
5.2	<i>Datos a alimentar para caso ideal (Soluciones ideales)</i>	65
5.3	<i>Diagrama de flujo para caso ideal (Mezcla diluida)</i>	67
5.4	<i>Listado de programa para caso ideal</i>	68
5.5	<i>Problemas propuestos:</i>	71
5.5.1	<i>Problema 1 Sistema: "SO₂ - H₂O"</i>	71
5.5.2	<i>Perfiles obtenidos por "iteraciones"</i>	74
5.5.3	<i>Gráfica de "perfiles de composición" (X_p, Y_p) con respecto a altura de la torre.</i>	78
5.5.4	<i>Problema 2 Sistema: "Acetona-Agua"</i>	79
5.5.5	<i>Perfiles obtenidos por "iteraciones"</i>	80
5.5.6	<i>Gráfica de "Perfiles de composición" (X_p, Y_p) con respecto a altura de la torre.</i>	84
5.5.7	<i>Problema 3 Sistema: "Benceno-Aceite de Lavado"</i>	85
5.5.8	<i>Perfiles obtenidos por "iteraciones"</i>	86
5.5.9	<i>Gráfica de "Perfiles de composición" (X_p, Y_p) con respecto a altura de la torre.</i>	92
5.6	<i>Datos a alimentar para caso real (Soluciones reales)</i>	93
5.7	<i>Diagrama de flujo para caso real (Mezclas concentradas)</i>	94
5.8	<i>Listado de programa para caso real</i>	95

CAPITULO 5	ELABORACION DE UN PROGRAMA COMPUTACIONAL PARA RESOLVER EL MODELO DE LA TORRE DE ABSORCION	64
5.1	Consideraciones previas	64
5.2	Datos a alimentar para caso ideal (Soluciones ideales)	65
5.3	Diagrama de flujo para caso ideal (Mezcla diluida)	67
5.4	Listado de programa para caso ideal	68
5.5	Problemas propuestos:	71
5.5.1	Problema 1 Sistema: " $SO_2 - H_2O$ "	71
5.5.2	Perfiles obtenidos por "Iteraciones"	74
5.5.3	Gráfica de "perfiles de composición" (X_p, Y_p) con respecto a altura de la torre.	78
5.5.4	Problema 2 Sistema: "Acetona-Agua"	79
5.5.5	Perfiles obtenidos por "iteraciones"	80
5.5.6	Gráfica de "Perfiles de composición" (X_p, Y_p) con respecto a altura de la torre.	84
5.5.7	Problema 3 Sistema: "Benceno-Aceite de Lavado"	85
5.5.8	Perfiles obtenidos por "iteraciones"	86
5.5.9	Gráfica de "Perfiles de composición" (X_p, Y_p) con respecto a altura de la torre.	92
5.6	Datos a alimentar para caso real (Soluciones reales)	93
5.7	Diagrama de flujo para caso real (Mezclas concentradas)	94
5.8	Listado de programa para caso real	95

INDICE

5.9	Problemas propuestos:	98
5.9.1	Problema 1 Sistema: " $\text{SO}_2 - \text{H}_2\text{O}$ "	98
5.9.2	Perfiles obtenidos por "iteraciones"	101
5.9.3	Gráfica de "Perfiles de composición" (X, Y) con respecto a altura de la torre.	112
CAPITULO 6	RECOMENDACIONES Y CONCLUSIONES.	113
BIBLIOGRAFIA		117

INTRODUCCION Y OBJETIVOS

INTRODUCCION

En la industria química, existen con mucha frecuencia procesos en los cuales es necesario modificar las composiciones de soluciones y mezclas a través de métodos que no impliquen necesariamente reacciones químicas, por lo general estas operaciones tienden a separar las partes componentes de una substancia.

Si estas operaciones cambian la composición de soluciones, a estas se les conoce como operaciones de transferencia de masa.

*Mediante el desarrollo de un programa computacional se pretende obtener cálculos numéricos en la operación unitaria de **ABSORCION** para diferentes sistemas **LIQ-GAS**, con el fin de poder predecir el comportamiento en la transferencia de masa para esta operación unitaria.*

El conocer este comportamiento tiene gran aplicación en el diseño más adecuado de equipo de proceso y alternativas posibles en la selección de substancias necesarias para lograr igual o mejor separación. Esto trae como consecuencia directa una reducción de materiales empleados en la construcción del equipo, reducción de costos de substancias empleadas y poder obtener las condiciones idóneas que deriven en una mayor eficiencia de separación a un mínimo costo de operación. Ya que con frecuencia el costo principal de un proceso deriva de las separaciones, los costos por separación dependen directamente de la relación entre las concentraciones inicial y final de las substancias separadas.

Una forma de encontrar estas condiciones, es operando el equipo con todas las diferentes alternativas posibles, como esto implica un alto costo, se prefiere utilizar un sistema computacional confiable.

*En el presente trabajo de investigación, se formulara un modelo matemático cuya solución genere información acerca del **EQUILIBRIO FISICO** existente para cada etapa de la torre de absorción.*

INTRODUCCION Y OBJETIVOS

OBJETIVOS

El presente trabajo considera como objetivo fundamental, el resolver simultáneamente las ecuaciones diferenciales que se derivan de los balances de materia y que describen el comportamiento de una torre de absorción isotérmica de contacto continuo operando con flujo a contracorriente en sistemas en donde únicamente un sólo componente es el que se transfiere.

Esta resolución implica obtener los perfiles de composición y flujos más exactos posibles imperantes en cada etapa i , de la torre.

Se hará hincapié en considerar la interacción con el equilibrio para cada etapa i , de la torre, y el efecto que tiene éste en mezclas diluidas (Soluciones ideales) y en mezclas concentradas (Soluciones reales).

El procedimiento de resolución del modelo matemático será iterativo hasta que converja con las condiciones de operación de proceso indicadas.

Se efectuará un análisis de resultados y en función de éstos se harán recomendaciones.

CAPITULO 1

CONCEPTOS BASICOS DE ABSORCION

CAPITULO 1

CONCEPTOS BASICOS DE ABSORCION

1.1 Absorción de gases

La absorción de gases es una operación en la cual una mezcla gaseosa, se pone en contacto con un líquido a fin de disolver de manera selectiva uno o más componentes del gas y así obtener una solución de éstos en el líquido. Ejemplos de este tipo de operación es el gas obtenido como subproducto en los hornos de coque, éste es lavado con agua para eliminar el amoníaco para después lavarlo con un aceite para eliminar los vapores de benceno y tolueno. En la eliminación del molesto sulfuro de hidrógeno de una corriente de hidrocarburos gaseosos naturales éstos se lavan con diferentes soluciones alcalinas para absorber a dicho sulfuro, los valiosos vapores de un disolvente acarreados por una corriente gaseosa pueden recuperarse y después ser reutilizados, bastará lavar el gas con un disolvente adecuado a los vapores.

Estos mecanismos requieren de la transferencia de masa de una corriente gaseosa al líquido, cuando la transferencia de masa sucede en dirección opuesta del líquido al gas la operación se conoce como desorción. Por ejemplo el benceno y el tolueno se eliminan del aceite mencionado anteriormente poniendo en contacto la solución líquida con vapor. Los vapores entran a la corriente gaseosa para ser arrastrados, como consecuencia el aceite puede ser nuevamente reutilizado.

Por lo general estas operaciones sólo se utilizan para la recuperación o eliminación del soluto, para obtener una buena separación de solutos entre sí se utilizan técnicas de destilación fraccionada.

1.2 Solubilidad de gases en líquidos en el equilibrio.

La rapidez con la cual se disolverá un componente gaseoso de una mezcla en un líquido absorbente estará en función de que tanta desviación exista al sistema equilibrio: líquido-gas; ésto significa que en una corriente de gas y de líquido que se pone en contacto íntimo, si este se desvía mucho del equilibrio, la rapidez de transferencia de masa del componente en la fase gaseosa a la fase líquida será mayor, y en la medida en que tienda al equilibrio, la rapidez de transferencia de masa irá decreciendo a tal grado que en el equilibrio no existirá transferencia neta de masa y la rapidez se

CONCEPTOS BASICOS DE ABSORCION

considera igual a cero. De esta forma para alcanzar el equilibrio se requiere de un tiempo infinito.

1.3 Sistema de equilibrio Gas-Líquido para 2 componentes

Si cierta cantidad de un gas simple y un líquido relativamente no volátil se llevan al equilibrio, a la concentración resultante del gas disuelto en el líquido se llama solubilidad del gas a la temperatura y presión predominante, de acuerdo a la Gráfica 1.1

Para una temperatura dada la solubilidad aumentará con la presión. Ejemplo de este caso es el que se presenta en la curva A de la Gráfica 1.1 que muestra la solubilidad del amoníaco en agua a 30°C.

Gases y líquidos presentan curvas de solubilidad distintas las cuales se deben determinar experimentalmente para cada sistema.

De acuerdo a la Gráfica 1.1 si a una concentración dada de líquido la presión en el equilibrio es alta, el gas es relativamente insoluble en el líquido (curva B), por el contrario si es baja la presión, la solubilidad será elevada (curva C). Estas situaciones son relativas ya que es posible obtener cualquier concentración final de gas en el líquido aplicando una presión suficiente, siempre y cuando el gas licuado sea completamente soluble en el líquido.

La solubilidad de cualquier gas depende de la temperatura. Generalmente si se aumenta la temperatura en un sistema de equilibrio ocurre un cambio durante el cual se absorbe calor. No siempre la disolución de un gas tendrá como resultado la evolución de calor, por esta razón en la mayoría de los casos la solubilidad de un gas decrece al aumentar la temperatura.

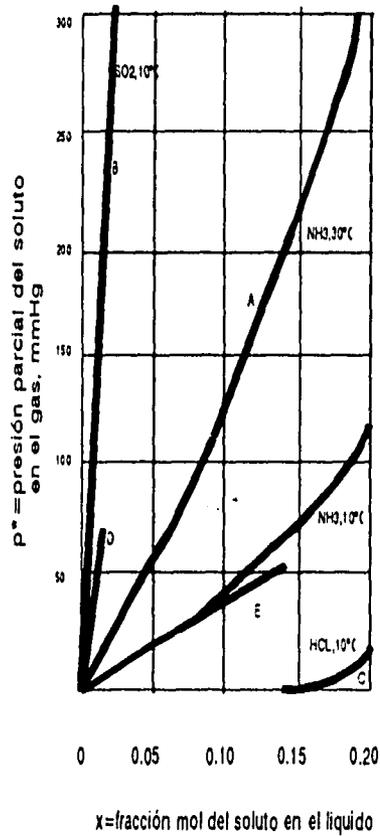
La curva A para amoníaco en agua está arriba de la curva correspondiente a 10°C siempre y cuando su presión de vapor sea menor que la del gas o la del soluto vaporizado, la solubilidad del gas será de 0 en el punto de ebullición del disolvente.

Para gases de peso molecular bajo como hidrógeno, oxígeno, nitrógeno, metano y otros, la solubilidad en agua aumenta con el aumento de la temperatura a más de 100°C y por ende a presiones superiores a la atmosférica. Este fenómeno se puede aplicar en operaciones como la **Lixiviación de Minerales** en donde es necesario tener soluciones que contengan oxígeno.

CONCEPTOS BASICOS DE ABSORCION

GRAFICA 1.1

SOLUBILIDAD DE GASES EN AGUA



U. N. A. M.

FACULTAD DE QUIMICA

TESIS PROFESIONAL

ARTURO GONZALEZ P.

CONCEPTOS BASICOS DE ABSORCION

1.4 Sistema de multicomponentes

Si una mezcla de gases se pone en contacto con un líquido, la solubilidad en el equilibrio de cada gas será en ciertas condiciones independiente de la de los demás, siempre y cuando el equilibrio se describa en función de las presiones parciales de la mezcla gaseosa. Si todos los componentes del gas a excepción de uno son insolubles, sus concentraciones en el líquido son tan pequeñas no afectando la solubilidad del componente relativamente soluble.

la curva A de la gráfica 1.1 describe también la solubilidad del amoníaco en agua, cuando éste está disuelto en el aire. Ya que el aire es muy insoluble en el agua, la ordenada de la gráfica debe ser la presión parcial del amoníaco en la mezcla gaseosa. Siendo esta condición favorable puesto que reduce la cantidad de trabajo experimental en la obtención de datos de solubilidad.

Si varios componentes de la mezcla gaseosa son apreciablemente solubles esta generalización aplica exclusivamente cuando los gases a disolver son indiferentes ante la naturaleza del líquido. Prevalciendo esta situación para los gases ideales. Ejemplo de este caso es el propano y el butano gaseosos de una mezcla que se disuelve por separado en un aceite de parafina no volátil, ya que las soluciones obtenidas son prácticamente ideales. Por otra parte la solubilidad del amoníaco en agua se ve afectada en presencia de metilamina ya que las soluciones resultantes de estos gases no son ideales.

La solubilidad de un gas también es afectada por la presencia de un soluto no volátil en el líquido por ejemplo la presencia de una sal en solución acuosa cuando dichas soluciones no son ideales.

1.5 Soluciones líquidas ideales

Una fase líquida se considera ideal cuando la presión parcial en el equilibrio de un gas en la solución se puede calcular sin necesidad de determinaciones experimentales.

Existen 4 características para las soluciones ideales relacionadas todas entre sí:

- 1.- Las fuerzas intermoleculares de atracción y repulsión en la solución no cambian al mezclar los componentes.

CONCEPTOS BASICOS DE ABSORCION

- 2.- *El volumen de la solución varia linealmente con la composición.*
- 3.- *No hay absorción ni generación de calor al mezclar los componentes, sin embargo gases que se disuelven en líquidos este criterio no incluye el calor de condensación del gas al estado líquido.*
- 4.- *La presión total de vapor de la solución varía linealmente con la composición expresada en fracción mol.*

En la realidad no existen soluciones ideales, las mezclas reales sólo tienden a ser ideales como límite. La condición ideal requiere que las moléculas de los componentes sean similares en tamaño, estructura y naturaleza química. Las soluciones de isómeros ópticos de compuestos orgánicos así como los miembros adyacentes o casi adyacentes de una serie homóloga de compuestos orgánicos, se encuentran cerca de ser ideales de tal forma que para fines de ingeniería se consideran como tales.

Las soluciones de benceno en tolueno de alcohol etílico y propílico o soluciones de gases en hidrocarburos parafínicos en aceites de parafina se consideran soluciones ideales.

Cuando una mezcla gaseosa esta en equilibrio con una solución líquida ideal, ésta sigue también la ley de los gases ideales, la presión parcial p^ de un soluto gaseoso A es igual al producto de su presión de vapor p a la misma temperatura, por su fracción mol en la solución x , ésta es mas comúnmente conocida como Ley de Raoult*

$$p^* = px$$

1.1

El asterisco denota el equilibrio, la naturaleza del líquido disolvente no es tomado en consideración, excepto cuando se establece la condición ideal de la solución, de esta forma la solubilidad de un gas particular en una solución ideal para cualquier disolvente es siempre la misma.

Cabe señalar que para presiones totales mayores a las que se aplica la ley de los gases ideales, la ley de Raoult con frecuencia utiliza los términos de fugacidad en sustitución de los términos de presión.

CONCEPTOS BASICOS DE ABSORCION

1.6 Soluciones líquidas no ideales.

Para soluciones líquidas no ideales la ecuación 1.1 presenta resultados muy incorrectos, en la gráfica 1.1 la línea D es la presión parcial calculada con la ley de Raoult para amoníaco en equilibrio con soluciones acuosas a 10°C pudiéndose ver que no representa los datos.

La línea recta E representa muy bien los datos para el sistema: amoníaco-agua a 10°C hasta fracciones mol de 0.06 en el líquido. Siendo la ecuación de esta línea del tipo:

$$y^* = \frac{p^*}{p_t} = mx \quad m = \text{constante} \quad 1.2$$

Esta ecuación se conoce más comúnmente como ley de Henry y se puede aplicar para diferentes valores de m en cada uno de los gases de la gráfica 1.1 para un rango modesto de concentraciones en el líquido. Si la ley de Henry no es aplicable en un amplio rango de concentraciones es debido a la interacción química con el líquido o a la disociación electrolítica como en el caso del amoníaco en agua o a la condición no ideal en la fase gaseosa.

Puede esperarse que muchos gases sigan la ley hasta presiones en el equilibrio de aproximadamente $5 \cdot 10^5 \text{ N/M}^2$ (aprox. 5 atm). Sin embargo, si la solubilidad es baja como en el caso del hidrógeno en agua, estas presiones pueden llegar a ser tan altas del orden de 34 N/M^2 . Los gases tipo vapor (que están por debajo de su temperatura crítica) por lo regular siguen la ley hasta presiones de aproximadamente 50% del valor a saturación, a la temperatura predominante siempre y cuando no haya una acción química en el líquido, para cualquier caso m debe determinarse experimentalmente.

CAPITULO 2

BALANCES DE MATERIA

CAPITULO 2

BALANCES DE MATERIA

Los balances de materia constituyen una aplicación de la ley de la conservación de la masa. La ecuación básica de balance establece que la entrada más la generación debe ser igual a la salida más la acumulación para cualquier elemento de volumen.

$$\text{FLUJO DE ENTRADA} + \text{RAPIDEZ DE GENERACION} = \text{FLUJO DE SALIDA} + \text{RAPIDEZ DE ACUM}$$

La entrada o la salida a un elemento de volumen puede darse por transporte molecular o por flujo global cuando el sistema es un fluido en movimiento.

La expresión básica de transporte molecular para el transporte de masa es la ley de Fick siendo su forma mas general la expresión siguiente:

$$J_a = -Dv_a \frac{dC_a}{dz} \quad 2.1$$

Donde:

A = Area perpendicular a la dirección de difusión en pies².

C_a = Concentración del componente a, en (lbmol/pie³).

D_a = Coeficiente de difusión volumétrico para una mezcla binaria en pie²/hr.

J_a = Velocidad a la cual el componente a, difunde (movimiento relativo con respecto a la mezcla) (lbmol/hr).

2.1 Ecuación general para el transporte molecular.

La derivación de la ecuación general de velocidad para el transporte molecular, requiere primeramente de la postulación de un modelo físico, y éste será el basado solamente en la migración molecular.

La ecuación de transporte resultante sólo es estrictamente aplicable al modelo ya que éste únicamente considera la migración molecular sin tomar en cuenta el transporte turbulento y otros mecanismos, ésta puede ampliarse

BALANCES DE MATERIA

a gases, líquidos y sólidos reales.

El modelo físico empleado se conoce como modelo simple de los gases. Cabe indicar que se pueden utilizar modelos más complejos para su derivación, pero para el propósito de este trabajo describiremos únicamente el modelo simple.

De acuerdo a la teoría cinética de los gases ultrasimplificada J. C. Maxwell derivó las ecuaciones de velocidad para el transporte de masa, calor y cantidad de momento siendo sus postulados de esta teoría los siguientes:

- 1.- *El gas está constituido por moléculas, cada una de las cuales es una esfera perfecta de diámetro σ .*
- 2.- *No existen fuerzas de atracción o repulsión entre las moléculas del gas.*
- 3.- *El volumen real de las moléculas es muy pequeño en comparación con el volumen que hay entre las moléculas.*
- 4.- *Todas las colisiones entre las moléculas son perfectamente elásticas.*
- 5.- *Cada molécula tiene un movimiento aleatorio, con una velocidad media (c) en la dirección aleatoria.*
- 6.- *Cada molécula se moverá una distancia l entre colisiones con otras moléculas. A la distancia l se conoce como Trayectoria libre media.*
- 7.- *El tiempo que requiere una molécula para recorrer la trayectoria libre media viajando a la velocidad media es el tiempo medio entre colisiones.*

$$\theta = \frac{l}{c} \qquad 2.2$$

- 8.- *El número de moléculas es suficientemente grande, para poder usar valores estadísticos promedios de las propiedades para describir todas las moléculas.*

Estos postulados representan un esquema molecular altamente idealizado de un gas, ya que las moléculas para gases reales no son esféricas y sí se presentan fuerzas de atracción y repulsión grandes entre éstas. Además de que las moléculas se mueven con velocidades diversas. Partiendo de varias distancias entre los choques, lo cual para gases reales implicaría conceptos físicos y matemáticos muy complejos.

Las moléculas que ocupan el volumen se moverán con movimiento errático en todas las direcciones posibles, una simplificación de estos movimientos considera que las moléculas se mueven en trayectorias paralelas a los ejes coordenados X, Y y Z por lo que 1/6 del total de las moléculas se mueven en la dirección +X, 1/6 en la dirección +Y y así respectivamente.

Considerando únicamente las moléculas que se mueven en las trayectorias +X y -X en donde los 3 planos se encuentran espaciados una distancia l uno del otro, teniendo cada uno un área $\Delta Y \Delta Z$, cada plano es el punto medio de una lámina de gas, en donde las propiedades del gas son uniformes dentro de cada lámina. Cierta grupo de moléculas presentan propiedades asociadas con éstas, para la transferencia de masa algunas moléculas son a y otras b , en transferencia de calor las energías térmicas de las moléculas son diferentes, y para la transferencia de cantidad de movimiento, la cantidad de movimiento será variable. De esta forma cada molécula tiene asociada cierta concentración de una de las 3 propiedades transferentes, asociando este concepto de propiedad a un volumen dado de moléculas se define el término Γ .

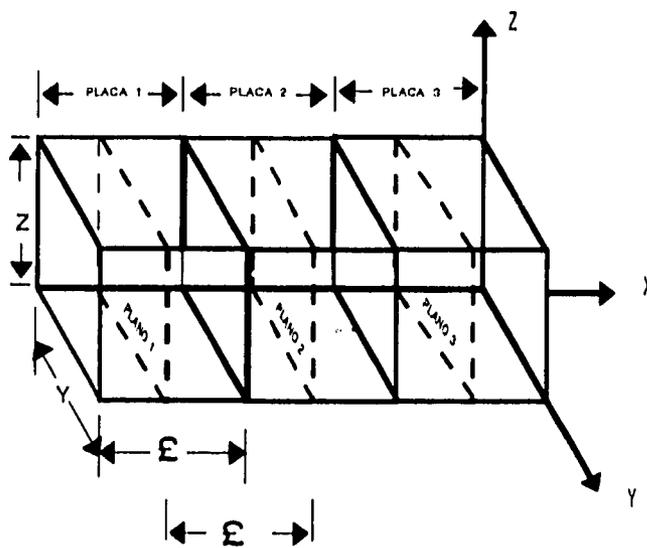
Γ = Concentración de la propiedad que se va a transferir, en dimensiones de propiedad transferente por unidad de volumen gaseoso.

Cada lámina de gas presenta una concentración diferente de una propiedad transferida durante el transporte. Ya que la concentración dentro de cada lámina se considera uniforme, la concentración promedio uniforme de una lámina es igual a la concentración en el plano en el centro de cada lámina.

De esta forma análoga es factible considerar el transporte de lámina en lámina como equivalente al transporte de plano en plano.

Relacionando la concentración de la lámina 2 con la concentración de la lámina 1 de la figura 2.1 se tiene:

FIGURA 2.1



U . N . A . M .
FACULTAD DE QUIMICA
TESIS PROFESIONAL
ARTURO GONZALEZ P.

BALANCES DE MATERIA

$$\Gamma_1 = \Gamma_2 + \frac{d\Gamma}{dX} (-l) \quad 2.3$$

donde:

$d\Gamma/dX$ = Incremento de concentración de la propiedad que se transfiere, con distancia l en la dirección $+X$.

$-l$ = distancia del plano 2 al plano 1.

De forma similar el plano 3 en relación con el plano 2 es:

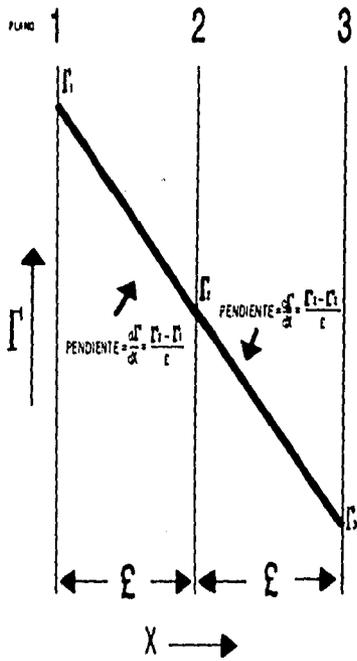
$$\Gamma_3 = \Gamma_2 + \frac{d\Gamma}{dX} (l) \quad 2.4$$

Considerando que en el elemento de volumen de la figura 2.1 el gradiente es constante en cualquier instante, las moléculas que atraviesan el plano 2 con dirección $+X$ y con dirección $-X$, al movimiento total de moléculas en el plano 2, será la suma vectorial de los movimientos moleculares en estas 2 direcciones. Las moléculas que se mueven con dirección $+X$ llegan al plano 2 con su última colisión en el plano 1 y con una cierta concentración de la propiedad que se transfiere, característica del plano 1, estas moléculas se desplazan una distancia \mathcal{L} en un tiempo Θ , siendo la velocidad de las moléculas:

$$c = \frac{\mathcal{L}}{\Theta}$$

Como la dirección de las moléculas que se mueven en la dirección $+X$ son sólo $1/6$ de la concentración de las moléculas para cualquier volumen, el flujo de moléculas que se mueven del plano 1 al plano 2, será la concentración de moléculas que se mueven en esa dirección $1/6 \Gamma_1$, multiplicada por la velocidad (c), designándose el FLUJO por la letra griega ϵ psi.

FIGURA 2.2



GRADIENTE DE
CONCENTRACION
A ESTADO ESTABLE

U. N. A. M.

FACULTAD DE QUIMICA

TESIS PROFESIONAL

ARTURO GONZALEZ P.

$$\epsilon_{(1 \rightarrow 2)} = \frac{\Gamma_1 /}{\delta \theta} \quad 2.5$$

El flujo tiene dimensiones de cantidad de propiedad que se transfiere por unidad de tiempo y por unidad de area de transporte.

En forma análoga, el flujo desde el plano 2 hacia el plano 1 es:

$$\epsilon_{(2 \rightarrow 1)} = \frac{-\Gamma_2 /}{\delta \theta} \quad 2.6$$

Siendo el signo negativo debido a que el flujo se mueve en la dirección -X.

El flujo neto es positivo en la dirección +X ya que el sistema no varía con el tiempo, existiendo un gradiente de concentración constante y uniforme de la propiedad que se transfiere.

Sumando el flujo en la dirección +X y el flujo en la dirección -X para cualquier región de flujo uniforme como la que se encuentra entre los planos 1 y 2 se tiene:

$$\epsilon_{\text{neto}(1 \rightarrow 2)} = \epsilon_{(1 \rightarrow 2)} + \epsilon_{(2 \rightarrow 1)}$$

Sustituyendo los valores de $\epsilon_{(1 \rightarrow 2)}$ y $\epsilon_{(2 \rightarrow 1)}$:

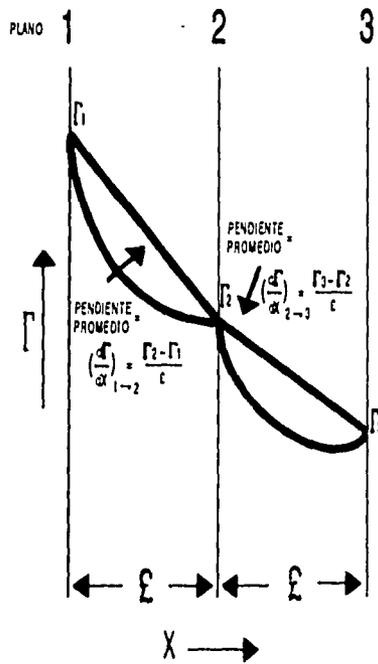
$$\epsilon_{(\text{neto})} = \frac{\Gamma_1 /}{\delta \theta} + \left(\frac{-\Gamma_2 /}{\delta \theta} \right) \quad 2.7$$

Si la pendiente del gradiente de concentración, para geometría de placa plana no es constante, la acumulación de la propiedad que se transfiere no es cero existiendo un estado inestable figura 2.3

ya que el flujo es constante en tiempo y posición, los subíndices de posición se omiten en ϵ y como el tiempo entre colisión se expresa como:

$$\theta = \frac{l}{c}$$

FIGURA 2.3



GRADIENTE DE
CONCENTRACION
A ESTADO
INESTABLE

U.N.A.M.

FACULTAD DE QUIMICA

TESIS PROFESIONAL

ARTURO GONZALEZ P.

Sustituyendo en 2.7 se obtiene:

$$\epsilon = - \frac{1}{6} / c \frac{d\Gamma}{dX} \quad 2.8$$

Como el gradiente es negativo de acuerdo a la figura 2.3 el flujo será positivo en la dirección $+X$ por efecto del signo negativo de la ecuación 2.8

Podemos establecer de acuerdo a esta derivación, que el flujo de la propiedad que se transfiere será proporcional al gradiente de la concentración de esa propiedad, multiplicada por una constante de proporcionalidad, siendo dicha constante para gases ideales de la forma:

$$\frac{1}{6} / c$$

Para gases reales la constante de proporcionalidad se evalúa a partir de datos experimentales o a partir de teorías cinéticas más sofisticadas, siendo su derivación general para cualquier transporte que dependa del movimiento molecular aleatorio.

La ecuación derivada en 2.8 representa la ecuación general de transporte para una dimensión, ésta se puede escribir en los términos que se registran en la tabla 2.1 para cualquier mecanismo específico de transporte.

TABLA 2.1

Notación general para el gas modelo	Notación específica (con dimensiones)		
	Transporte de masa	Transporte de energía térmica	Transporte de momento
Flujo de la propiedad que se transfiere	E_{neto}	$N_a/A (M/L_y L_z \theta)$	$q/A (H/L_y L_z \theta)$
Concentración de la propiedad que se transfiere	C	$C_a (M/L_x L_y L_z)$	$C_p T (H/L_x L_y L_z)$
Constante de proporcionalidad la difusividad de transporte	$D = \frac{1}{\rho \bar{c}}$	$\alpha (L_x^2 \theta)$	$\alpha = k/\rho C_p (L_x^2 \theta) \quad \nu = \frac{\mu}{\rho} (L_x^2 \theta)$

Notación para el transporte de masa, calor, y momento.

U . N . A . M .
FACULTAD DE QUIMICA
TESIS PROFESIONAL
ARTURO GONZALEZ P.

2.2 Transporte de Masa.

Si el gas del modelo consta de 2 diferentes tipos de moléculas, podrá presentarse transporte de masa.

Considerando que el elemento de volumen descrito en la figura 2.1 contiene a 2 especies diferentes de gas, denotado por a y b, se presentará transporte de masa, únicamente si la concentración de la fase gaseosa no es uniforme.

En base al modelo todas las moléculas tendrán el mismo tamaño moviéndose a velocidades iguales en una dirección aleatoria.

Si en un volumen dado se encuentran presentes mas moléculas de a, estas tendrán a migrar por movimiento molecular aleatorio, hacia una región vecina de menor concentración del gas a. Si se mantiene la diferencia de concentración, se mantendrá un flujo estable del gas a desde la región de mayor concentración hasta la región de menor concentración.

Expresando la concentración en términos de moles por unidad de volumen, para obtener una propiedad promedio de un cierto grupo de moléculas se tiene:

$$\text{Moles del gas a} = \frac{\text{Moléculas del gas a}}{\text{Número de Avogadro}}$$

En donde:

$$\text{Número de Avogadro} = 6.023 * 10^{23} \text{ Moléculas/Mol de gas.}$$

De esta forma la concentración para el transporte de masa en Ingeniería es:

$$C_a = \left(\frac{\text{Lbmol del gas a}}{\text{pie}^3 \text{ totales gas}} \right)$$

Para el S.I es:

$$C_a \left(\frac{\text{mol}}{\text{m}^3} \right)$$

Considerando que la concentración varía en sentido lineal del plano 1 al plano 2 para el elemento de volumen de la figura 2.1 siendo el gradiente de concentración constante y en estado estable, podemos derivar la ecuación general de transporte análoga a 2.8 sustituyendo los términos de flujo ϵ y gradiente de concentración Γ de la tabla 2.1 para transporte de masa se tiene:

$$\frac{N_a}{A} = - \frac{1}{6} / c \frac{dC_a}{dX} \quad 2.9$$

Siendo:

$\frac{N_a}{A}$ = Flujo de masa de un componente a

resultado de un transporte molecular, en dirección de un gradiente de concentración: (dC_a/dX) .

Ya que esta ecuación aplica únicamente al gas simple (ideal) es necesario extenderla a gases, líquidos y sólidos reales, para estos 3 estados físicos es posible determinar el flujo de masa (N_a/A) y el gradiente de concentración (dC_a/dX); lo que no es posible determinar es la trayectoria libre media / velocidad media (c) ya que estas se determinaron a partir del modelo de gas simple, por tanto la ecuación 2.9 puede ser aplicable a materiales reales, sustituyendo el factor $1/6 / c$ por un nuevo factor determinado empíricamente D convirtiéndose la ecuación 2.9 en:

$$\frac{N_a}{A} = - D \frac{dC_a}{dX} \quad 2.10$$

Donde:

D = Coeficiente de difusividad en pie^2/hr

Esta ecuación se conoce más comúnmente como ley de FICK y aplica tanto para sólidos como para líquidos y gases.

La difusividad D varía con la temperatura y la presión y ésta se

BALANCES DE MATERIA

determina experimentalmente o mediante correlaciones empíricas.

Desarrollando un tratamiento análogo a las moléculas de *b* en la mezcla de gases se obtiene:

$$\frac{N_b}{A} = - \frac{1}{6} / c \frac{dC_b}{dX} \quad 2.11$$

Sustituyendo el término: $\frac{1}{6} / c$ por *D* se tiene:

$$\frac{N_b}{A} = - D \frac{dC_b}{dX} \quad 2.12$$

Para gases reales diluidos y líquidos los coeficientes de difusión en 2.10 y 2.12 son iguales, interrelacionando las velocidades de difusión de los gases *a* y *b*, la concentración total *C_t* de la mezcla gaseosa es:

$$C_t = C_a + C_b \quad 2.13$$

Si la temperatura y la presión son constantes el *N°* total de moles por unidad de volumen es constante *C_t*. Diferenciando 2.13 con respecto a la distancia *X* se tiene:

$$0 = \frac{dC_a}{dX} + \frac{dC_b}{dX}$$

Reagrupando términos:

$$\frac{dC_a}{dX} = - \frac{dC_b}{dX} \quad 2.14$$

Podemos inferir que el gradiente del gas *b* es igual pero de signo contrario al del gas *a* y ya que existe un gradiente de *b* habrá un flujo de

masa de b.

Combinando las ecuaciones 2.10, 2.12, y 2.14 se obtiene:

$$N_b = -N_a \qquad 2.15$$

Se puede inferir que las velocidades de difusión para mezclas binarias son siempre iguales pero en direcciones opuestas.

Cuando el único mecanismo presente es el transporte molecular al proceso de transferencia global se le conoce como contradifusión equimolar, dando perfiles de concentración lineales para estado estable y cuando son usadas coordenadas rectangulares.

2.3 Método de análisis.

A continuación indicaremos un procedimiento general, para el análisis del sistema de transferencia basado en transporte molecular.

1.- Formulación de un modelo.

La especificación de un modelo requiere comprender bien todos los mecanismos que puedan afectar a la concentración de la propiedad que se transfiere en el sistema.

El modelo debe apegarse a la realidad física aunque frecuentemente se omitan ciertos fenómenos físicos cuya influencia es mínima. El modelo de transporte de masa generalmente omite la difusión térmica y la difusión forzada, siendo éstos mecanismos insignificantes en comparación con la difusión resultante de un gradiente de la concentración de masa. Un modelo físico que incluye todos los mecanismos posibles deriva como resultado a expresiones matemáticas difíciles de usar. Por otro lado el simplificar el modelo puede no conducir a una descripción precisa del sistema real, siendo siempre deseable verificar las expresiones finales que describen el sistema mediante el uso de datos experimentales obtenidos del mismo.

2.- Expresiones de los balances para las propiedades en transferencia pertinentes.

Se obtienen los balances de masa, calor y momento para un elemento de volumen pequeño y finito incluyendo todos los mecanismos que aparecen

BALANCES DE MATERIA

en el modelo físico, debido a que tanto la concentración como los mecanismos, varían dentro del volumen del sistema.

Al hacer balances para un elemento infinitesimal de volumen, esto conduce a ecuaciones diferenciales que se integran para describir al sistema completo. Para obtener las ecuaciones diferenciales los límites de los balances de un elemento de volumen pequeño y finitos toman como las dimensiones cuando el elemento de volumen tiende a 0.

Con el procedimiento normal del cálculo diferencial, si la concentración de la propiedad en transferencia es una función de más de 1 variable independiente, es necesario una ecuación diferencial parcial.

3.- Los términos de flujo en las ecuaciones diferenciales de balance, son reemplazados por expresiones de gradiente de concentración.

Se sustituye el valor ϵ por $-\delta A(dT/dX)$ este paso reduce el número de variables en las ecuaciones diferenciales, eliminando la variable de flujo.

4.- Integración de las ecuaciones diferenciales utilizando condiciones límites apropiadas.

La integración necesaria puede ser compleja, algunas veces las ecuaciones diferenciales están interrelacionadas pudiéndose resolver estas de manera simultánea. En muchos casos no es posible integrar las ecuaciones analíticamente, siendo necesario utilizar **métodos numéricos** y seleccionando las condiciones límites a partir de datos conocidos del sistema.

5.- Verificación de las expresiones finales con los datos experimentales disponibles.

Este paso es necesario para comprobar que el modelo que se formuló en el paso 1 describe la realidad física con suficiente precisión.

6.- Consideraciones geométricas.

Los sistemas por analizar pueden tener cualquier tamaño o forma, muchas de estas formas pueden ser difíciles de describir en forma analítica, por lo que puede ser necesario recurrir a métodos numéricos aproximados.

2.4 Transferencia a régimen estacionario

En régimen estacionario no existe acumulación de la propiedad que se transfiere de un elemento de volumen, quedando reducida la expresión de balance a la forma:

$$\text{FLUJO DE ENTRADA} + \text{RAPIDEZ DE GENERACION} = \text{FLUJO DE SALIDA}$$

La transferencia a régimen estacionario puede clasificarse en términos de presencia o ausencia de generación interna a la transferencia sin generación interna recibe el nombre de transferencia simple.

2.5 Transferencia Simple.

No habiendo generación interna la expresión de balance se reduce a:

$$\text{FLUJO DE ENTRADA} = \text{FLUJO DE SALIDA}$$

En general la entrada y la salida pueden ser tanto para transferencia molecular como por flujo del fluido.

2.6 Balance de masa por transferencia molecular.

Si la entrada y la salida se deben únicamente al transporte molecular, la expresión de balance a un elemento rectangular de volumen será de acuerdo a la figura 2.4

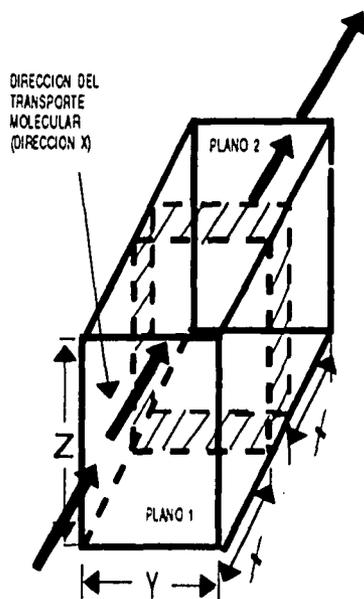
$$(\epsilon_0)_x = (\epsilon_0)_{x+\Delta x} \tag{2.16}$$

reordenando y dividiendo entre Δx se obtiene una expresión equivalente:

$$\frac{(\epsilon_0)_{x+\Delta x} - (\epsilon_0)_x}{\Delta x} = 0 \tag{2.17}$$

Tomando límites cuando Δx tiende a cero se tiene:

FIGURA 2.4



U. N. A. M.
FACULTAD DE QUIMICA
TESIS PROFESIONAL
ARTURO GONZALEZ P.

BALANCES DE MATERIA

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{(\epsilon_a)_{x+\Delta x} - (\epsilon_a)_x}{\Delta x} = \frac{d(\epsilon_a)}{dx} \quad 2.18$$

Sustituyendo 2.18 en 2.17

$$\frac{d(\epsilon_a)}{dx} = 0 \quad 2.19$$

Esta ecuación diferencial, resulta de los 2 primeros pasos del procedimiento de 5 pasos. Para el primer paso se escoge el modelo físico como transporte molecular a estado estable en la dirección +X sin generación interna. El segundo paso involucra escribir el balance con respecto a un elemento finito de volumen tomando el límite para obtener una ecuación diferencial que es un balance en un elemento de espesor infinitesimal.

El balance de masa básico para el transporte molecular se obtiene de la ecuación 2.19 para un componente a en una mezcla binaria (a,b).

$$\frac{dN_a}{dx} = 0 \quad 2.20$$

Para el componente b se tiene:

$$\frac{dN_b}{dx} = 0 \quad 2.21$$

Integrando las ecuaciones 2.20 y 2.21 y considerando que sólo son aplicables cuando el único mecanismo de transferencia de masa es por transporte molecular (difusión) se tiene:

$$N_a = \text{cte y } N_b = \text{cte}$$

2.7 Balance de masa con flujo global y transporte molecular.

Para este caso el flujo global involucra el movimiento general de la fase fluida como un todo. Si expresamos un balance de masa incluyendo ambos mecanismos con respecto a un elemento de volumen y aplicando la ecuación general de balance para transferencia simple se tiene, de acuerdo a la figura 2.5

$$N_{t_f} \frac{C_a}{C_t} + N_a = N_{t_f} \frac{C_a}{C_t} + N_a \quad 2.22$$

N_{t_f} = Velocidad de flujo total en lbmol/hr.

C_a = concentración de a en lbmol/pie³.

C_t = concentración molar total en lbmol/pie³ a T y P constante.

Reordenando 2.22 y dividiendo entre Δx y tomando el límite cuando $\Delta x \rightarrow 0$ se obtiene:

$$\frac{dN_a}{dx} + \frac{d(N_{t_f} C_a/C_t)}{dx} = 0 \quad 2.23$$

Integrando 2.23 se tiene:

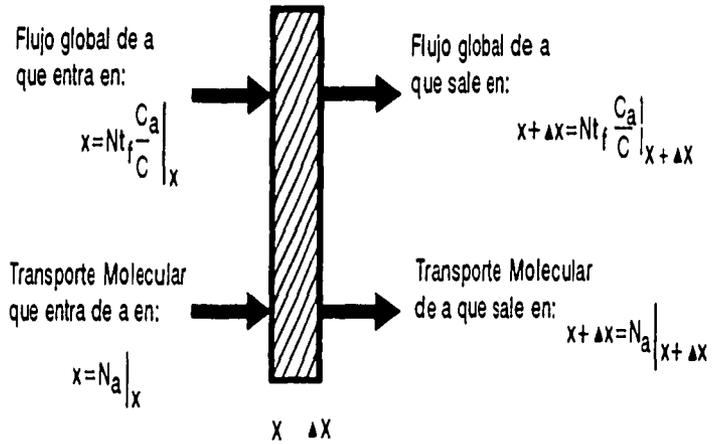
$$N_a + N_{t_f} \frac{C_a}{C_t} = \text{constante} \quad 2.24$$

El primer término en 2.24 es la velocidad de transporte molecular de a, y el segundo término es la velocidad de flujo global de a, por tanto la constante viene siendo la velocidad total de transferencia por contribución de los 2 mecanismos.

$$(N_a)_t = N_a + N_{t_f} \frac{C_a}{C_t} \quad 2.25$$

BALANCE DE MASA CON FLUJO GLOBAL
Y TRANSPORTE MOLECULAR

FIGURA 2.5



U. N. A. M.

FACULTAD DE QUIMICA

TESIS PROFESIONAL

ARTURO GONZALEZ P.

BALANCES DE MATERIA

Efectuando un balance para el componente b se tiene:

$$(N_b)_t = N_b + Nt_r \frac{C_b}{C_1} \quad 2.26$$

Sumando las ecuaciones 2.25 y 2.26

$$(N_a)_t + (N_b)_t = N_a + N_b + Nt_r \frac{(C_a + C_b)}{C_1} \quad 2.27$$

Como las velocidades de transporte molecular de las 2 especies son iguales pero con direcciones opuestas de:

$$C_1 = C_a + C_b, \quad N_b = -N_a \text{ y de 2.25 se obtiene:}$$

$$Nt_r = (N_a)_t + (N_b)_t$$

Pudiendo inferir que la velocidad de flujo global es igual a la suma de las velocidades totales de transferencia de los 2 componentes con ambos mecanismos.

CAPITULO 3

DESCRIPCION DE METODOS NUMERICOS

CAPITULO 3

DESCRIPCION DE METODOS NUMERICOS.

Nuestro interés fundamental estará enfocado en describir los métodos numéricos involucrados en la resolución de este modelo matemático.

3.1 Método de Runge-Kutta 4° orden.

Este método es utilizado para resolver ecuaciones diferenciales de tipo lineal, entendiéndose este tipo de ecuaciones como aquellas en las que no aparecen potencias de las variables dependientes por sus derivadas, o de productos entre derivadas, ejemplos de este tipo de ecuaciones son:

$$\frac{dy}{dx} = \cos x, \quad \frac{d^2y}{dx^2} + K^2y = 0, \quad \frac{\delta^2v}{\delta x^2} + \frac{\delta^2v}{\delta y^2} = 0$$

El método considera que dada una condición inicial, da una solución paso a paso ya que a partir de uno o varios puntos conocidos se calcula el siguiente, una vez calculado se apoya en éste y en los anteriores para calcular uno o más y así sucesivamente. La solución de un problema de valores iniciales se obtiene generalmente paso a paso por métodos de integración hacia adelante, lo que permite valuar y_{i+1} tan pronto se conocen los valores de y_i , y_{i-1} de y en uno o más pivotes anteriores.

Previo a describir el método de Runge-Kutta, describiremos 2 métodos numéricos de los cuales deriva el método de Runge-Kutta.

3.2 Método de integración de Euler.

Dada la ecuación diferencial con condición inicial:

$$y'(x) = f(x,y), \quad y(x_0) = y_0. \quad 3.1$$

Integrando 3.1 de un punto x_i a otro punto x_{i+1} se tiene:

DESCRIPCION DE METODOS NUMERICOS

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} y'(x) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x_i, y_i) dx \quad 3.2$$

Integrando el miembro de la izquierda en la expresión 3.2

$$y(x) \Big|_{x_i}^{x_{i+1}} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x_i, y_i) dx$$

$$y_{i+1} - y_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x_i, y_i) dx$$

Para integrar el miembro de la derecha en la expresión 3.2 aplicamos la fórmula de interpolación de Newton, la cual obtiene un valor aproximado de la integral $f(x)$ en el intervalo $x_0 \leq x \leq x_n$.

$$f(x) = y_0 + \frac{K}{1} \Delta y_0 + \frac{K}{2} \Delta^2 y_0 + \frac{K}{3} \Delta^3 y_0 + \dots + \frac{K}{j} \Delta^j y_0$$

Integrando:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_n} \left(y_0 + \frac{K}{1} \Delta y_0 + \frac{K}{2} \Delta^2 y_0 + \frac{K}{3} \Delta^3 y_0 + \dots + \frac{K}{j} \Delta^j y_0 \right) dx \quad 3.3$$

Considerando que:

$$k = \frac{x_n - x_0}{h}$$

Su derivada es:

$$\frac{dk}{dx} = \frac{1}{h}; \quad dx = h dk$$

DESCRIPCION DE METODOS NUMERICOS

Como $x_k = x_0 + (k)h$; $k=0$

$x_k = x_0 + nh$; $k=n$

Sustituyendo en 3.3 dx:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_n} \left(y_0 + k \Delta y_0 + \frac{k(k-1)}{2!} \Delta^2 y_0 + \frac{k(k-1)(k-2)}{3!} \Delta^3 y_0 + \dots + \int_0^k \left| \Delta^j y_0 \right| h^j dk \right) dx \quad 3.4$$

Integrando 3.4

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx = h \left(ky_0 + \frac{k^2}{2} \Delta y_0 + \left(\frac{k^3}{6} - \frac{k^2}{4} \right) \Delta^2 y_0 + \left(\frac{k^4}{24} - \frac{k^3}{6} + \frac{k^2}{6} \right) \Delta^3 y_0 + \dots + \int_0^n \left(\int_0^k \left| \Delta^j y_0 \right| h^j dk \right) dx \right)$$

Sustituyendo límites:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx = h \left(ny_0 + \frac{n^2}{2} \Delta y_0 + \left(\frac{n^3}{6} - \frac{n^2}{4} \right) \Delta^2 y_0 + \left(\frac{n^4}{24} - \frac{n^3}{6} + \frac{n^2}{6} \right) \Delta^3 y_0 + \dots + \int_0^n \left(\int_0^k \left| \Delta^j y_0 \right| h^j dk \right) dx \right) \quad 3.6$$

Sustituyendo 3.6 en 3.2 e integrando entre el punto x_0 y x_1 se obtiene:

DESCRIPCION DE METODOS NUMERICOS

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = h[y_0 + \frac{1}{2} \Delta y_0 - \frac{1}{12} \Delta^2 y_0 + \dots]$$

donde: $y_0 = f(x_0)$

$$\Delta y_0 = y_1 - y_0 = f(x_1) - f(x_0)$$

$$\Delta^2 y_0 = y_2 - 2y_1 + y_0 = f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0)$$

Sustituyendo $f(x)$ por una función de 2 variables $f(x,y)$ e integrando entre un punto cualquiera x_i y x_{i+1} se obtiene:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x,y) dx = h[f(x_i, y_i) + \frac{1}{2}(f(x_{i+1}, y_{i+1}) - f(x_i, y_i) + \dots)] \quad 3.8$$

El método de Euler consiste en integrar el segundo miembro de la expresión 3.2 considerando únicamente el primer sumando de la expresión 3.8 con su correspondiente error.

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x,y) dx = hf(x_i, y_i) + \text{error} \quad 3.9$$

Despreciando el error y sustituyendo esta expresión en 3.2 y despejando y_{i+1} se obtiene:

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i) ; i=0,1,2,\dots \quad 3.10$$

3.3 Método de Euler-Gauss.

La aproximación que proporciona el método de Euler puede mejorarse al integrar la ecuación diferencial:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} y'(x) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x,y) dx$$

DESCRIPCION DE METODOS NUMERICOS

Aplicando la fórmula trapezoidal el cual equivale a considerar los 2 primeros sumandos de la expresión 3.8 se obtiene:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x,y) dx = h[f(x_i,y) + \frac{1}{2}(f(x_{i+1},y_{i+1}) - f(x_i,y))] + \text{error} \quad 3.11$$

Simplificando:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x,y) dx = \frac{h}{2} [f(x_i,y) + f(x_{i+1},y_{i+1})] + \text{error} \quad 3.12$$

Sustituyendo en 3.2 despejando y_{i+1} y despreciando el error se tiene:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [f(x_i,y) + f(x_{i+1},y_{i+1})] \quad 3.13$$

A diferencia del método de Euler, en esta expresión no es posible conocer el valor de y_{i+1} , debido a que este valor está en función de sí mismo, el problema se resuelve obteniendo el valor de y_{i+1} a través del método de Euler el cual se considera únicamente como un predictor que es sustituido en el miembro del lado derecho de la expresión 3.13, con lo cual obtendremos un nuevo valor corregido de y_{i+1} .

Por lo tanto tenemos que el método de Euler será una ecuación predictora y el método de Euler-Gauss una ecuación correctora.

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i,y)$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [f(x_i,y) + f(x_{i+1},y_{i+1})] ; i=0,1,2,\dots \quad 3.14$$

DESCRIPCION DE METODOS NUMERICOS

3.4 Métodos de Runge-Kutta.

Considerando la estructura del método de Euler y Euler-Gauss:

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i) ; i=0,1,2,\dots$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})] ; i=0,1,2,\dots$$

Ambos métodos pueden escribirse como:

$$y_{i+1} = y_i + h\phi(x_i, y_i) ; i=0,1,2,\dots \quad 3.15$$

En donde el método de Euler es:

$$\phi(x, y) = f(x, y)$$

y el método de Euler-Gauss es:

$$\phi(x, y) = \frac{1}{2} [f(x, y) + f(x+h, y+hy')]$$

Los métodos de Runge-Kutta de orden n consisten en obtener una ecuación similar a la expresión 3.15 que en forma similar se escribe como:

$$y_{i+1} = y_i + (W_1K_1 + W_2K_2 + \dots + W_nK_n) ; i=0,1,2,\dots \quad 3.16$$

donde:

$$K_1 = hf(x_i, y_i)$$

$$K_2 = hf(x_i + \alpha_1 h, y_i + \beta_{1,1} K_1)$$

$$K_3 = hf(x_i + \alpha_2 h, y_i + \beta_{2,1} K_1 + \beta_{2,2} K_2)$$

$$K_4 = hf(x_i + \alpha_3 h, y_i + \beta_{3,1} K_1 + \beta_{3,2} K_2 + \beta_{3,3} K_3)$$

$$K_n = hf(x_i + \alpha_{n-1} h, y_i + \beta_{n-1,1} K_1 + \beta_{n-1,2} K_2 + \dots + \beta_{n-1,n-1} K_{n-1})$$

Siendo

DESCRIPCION DE METODOS NUMERICOS

$$W_1, W_2, \dots, W_n, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n, \beta_{1,1}, \beta_{2,2}, \dots, \beta_{n,n-1}$$

constantes que deben determinarse de tal forma que proporcionen la mayor exactitud posible a la solución de la ecuación diferencial.

La ventaja de los métodos de Runge-Kutta con respecto a los métodos de Euler y Euler-Gauss, consiste en que los primeros cuentan con un orden n de error mínimo con respecto a la serie de Taylor, estos métodos tienen la ventaja de que no requieren valuar ninguna derivada, sino únicamente a la función $f(x,y)$.

3.5 Dedución del método de Runge-Kutta 2° orden.

El método de Runge-Kutta de 2° orden consiste en considerar $n=2$ dentro de las expresiones que definen a estos métodos ec. 3.16

$$y_{i+1} = y_i + (W_1 K_1 + W_2 K_2) \quad ; \quad i=0,1,2,\dots \quad 3.17$$

donde:

$$K_1 = hf(x_i, y_i) \quad 3.18$$

$$K_2 = hf(x_i + \alpha_1 h, y_i + \beta_{1,1} K_1) \quad 3.19$$

Desarrollando en series de Taylor, el miembro de la izq. de la expresión 3.17 en el entorno del punto $x=x_i$ y considerando hasta los términos de orden h^3 se obtiene:

$$y_{i+1} = y(x_{i+1}) = y(x_i) + y'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{y''(x_i)}{2} (x_{i+1} - x_i)^2 + \frac{y'''(x_i)}{6} (x_{i+1} - x_i)^3 + \dots \quad 3.20$$

Simplificando:

$$y_{i+1} = y_i + h y_i' + \frac{h^2}{2} y_i'' + \frac{h^3}{6} y_i''' + \dots \quad 3.21$$

Desarrollando en series de Taylor la función de 2 variables $f(x,y)$ en el entorno del punto $x=x_i$ y $y=y_i$ se tiene:

DESCRIPCION DE METODOS NUMERICOS

$$\begin{aligned}
 f(x,y) = & f(x_1, y_1) + \frac{\delta}{\delta x} f(x,y) \Big|_{\substack{x=x_1 \\ y=y_1}} (x-x_1) + \frac{\delta}{\delta y} f(x,y) \Big|_{\substack{x=x_1 \\ y=y_1}} (y-y_1) + \frac{1}{2} \frac{\delta}{\delta x^2} f(x,y) \Big|_{\substack{x=x_1 \\ y=y_1}} (x-x_1)^2 \\
 & + \frac{\delta}{\delta x \delta y} f(x,y) \Big|_{\substack{x=x_1 \\ y=y_1}} (x-x_1)(y-y_1) + \frac{1}{2} \frac{\delta}{\delta y^2} f(x,y) \Big|_{\substack{x=x_1 \\ y=y_1}} (y-y_1)^2 + \dots \quad 3.22
 \end{aligned}$$

Para simplificar la expresión 3.22 utilizaremos la notación siguiente:

$$f_{m,n} = \frac{\delta}{\delta m \delta n} f(m,n)$$

Si las derivadas parciales de la función se valúan en $x=x_n$ y $y=y_n$ la expresión 3.22 queda:

$$f(x,y) = f(x_n, y_n) + f_x(x-x_n) + f_y(y-y_n) + \frac{1}{2} f_{xx}(x-x_n)^2 + f_{xy}(x-x_n)(y-y_n) + \frac{1}{2} f_{yy}(y-y_n)^2 + \dots$$

Valuando la función para $x = x_1 + \alpha_1 h$ y $y = y_1 + \beta_{1,1} K_1$ se obtiene:

$$\begin{aligned}
 f(x_1 + \alpha_1 h, y_1 + \beta_{1,1} K_1) = & f(x_1, y_1) + f_x(x_1 + \alpha_1 h - x_1) + f_y(y_1 + \beta_{1,1} K_1 - y_1) + \\
 & \frac{1}{2} f_{xx}(x_1 + \alpha_1 h - \alpha_1 h - x_1)^2 f_{xy}(x_1 + \alpha_1 h - x_1)(y_1 + \beta_{1,1} K_1 - y_1) + \frac{1}{2} f_{yy}(y_1 + \beta_{1,1} K_1 - y_1)^2 + \dots
 \end{aligned}$$

Simplificando:

$$\begin{aligned}
 f(x_1 + \alpha_1 h, y_1 + \beta_{1,1} K_1) = & f(x_1, y_1) + \alpha_1 h f_x + \beta_{1,1} K_1 f_y + \frac{\alpha_1^2 h^2}{2} f_{xx} + \alpha_1 h \beta_{1,1} K_1 f_{xy} + \\
 & + \frac{\beta_{1,1}^2 K_1^2}{2} f_{yy} + \dots \quad 3.25
 \end{aligned}$$

De la expresión 3.2 se tiene:

$$f(x_1 + \alpha_1 h, y_1 + \beta_{1,1} K_1) = \frac{K_2}{h} \quad 3.26$$

DESCRIPCION DE METODOS NUMERICOS

$$\begin{aligned}
 f(x,y) = & f(x_1,y_1) + \frac{\delta}{\delta x} f(x,y) \Big|_{\substack{x=x_1 \\ y=y_1}} (x-x_1) + \frac{\delta}{\delta y} f(x,y) \Big|_{\substack{x=x_1 \\ y=y_1}} (y-y_1) + \frac{1}{2} \frac{\delta}{\delta x^2} f(x,y) \Big|_{\substack{x=x_1 \\ y=y_1}} (x-x_1)^2 \\
 & + \frac{\delta}{\delta x \delta y} f(x,y) \Big|_{\substack{x=x_1 \\ y=y_1}} (x-x_1)(y-y_1) + \frac{1}{2} \frac{\delta}{\delta y^2} f(x,y) \Big|_{\substack{x=x_1 \\ y=y_1}} (y-y_1)^2 + \dots \quad 3.22
 \end{aligned}$$

Para simplificar la expresión 3.22 utilizaremos la notación siguiente:

$$f_{m,n} = \frac{\delta}{\delta m \delta n} f(m,n)$$

Si las derivadas parciales de la función se valúan en $x=x_1$ y $y=y_1$ la expresión 3.22 queda:

$$f(x,y) = f(x_1,y_1) + f_x(x-x_1) + f_y(y-y_1) + \frac{1}{2} f_{xx}(x-x_1)^2 + f_{xy}(x-x_1)(y-y_1) + \frac{1}{2} f_{yy}(y-y_1)^2 + \dots$$

Valuando la función para $x=x_1 + \alpha_1 h$ y $y=y_1 + \beta_{1,1} K_1$ se obtiene:

$$\begin{aligned}
 f(x_1 + \alpha_1 h, y_1 + \beta_{1,1} K_1) = & f(x_1, y_1) + f_x(x_1 + \alpha_1 h - x_1) + f_y(y_1 + \beta_{1,1} K_1 - y_1) + \\
 & \frac{1}{2} f_{xx}(x_1 + \alpha_1 h - \alpha_1 h - x_1)^2 + f_{xy}(x_1 + \alpha_1 h - x_1)(y_1 + \beta_{1,1} K_1 - y_1) + \frac{1}{2} f_{yy}(y_1 + \beta_{1,1} K_1 - y_1)^2 + \dots
 \end{aligned}$$

Simplificando:

$$\begin{aligned}
 f(x_1 + \alpha_1 h, y_1 + \beta_{1,1} K_1) = & f(x_1, y_1) + \alpha_1 h f_x + \beta_{1,1} K_1 f_y + \frac{\alpha_1^2 h^2}{2} f_{xx} + \alpha_1 h \beta_{1,1} K_1 f_{xy} + \\
 & + \frac{\beta_{1,1}^2 K_1^2}{2} f_{yy} + \dots \quad 3.25
 \end{aligned}$$

De la expresión 3.2 se tiene:

$$f(x_1 + \alpha_1 h, y_1 + \beta_{1,1} K_1) = \frac{K_2}{h} \quad 3.26$$

DESCRIPCION DE METODOS NUMERICOS

despejando K_2 :

$$K_2 = hf(x_i, y_i) + \alpha_1 h^2 f_x + \beta_{1,1} K_1 h f_y + \frac{\alpha_1^2 h^3}{2} f_{xx} + \alpha_1 h^2 \beta_{1,1} K_1 f_{xy} + \frac{\beta_{1,1}^2 K_1^2 h}{2} f_{yy} + \dots \quad 3.27$$

Sustituyendo 3.26 y 3.21 en 3.1 y considerando que

$K_1 = hf(x_i, y_i)$ se tiene:

$$y_i + hy_i + \frac{h^2}{2} y_i'' + \frac{h^3}{6} y_i''' + \dots = y_i + W_1 h f(x_i, y_i) + W_2 h f(x_i, y_i) + \alpha_1 h^2 f_x + \beta_{1,1} h^2 f(x_i, y_i) f_y + \frac{\alpha_1^2 h^3}{2} f_{xx} + \frac{\beta_{1,1}^2 h^3 f^2(x_i, y_i)}{2} + f_{yy} + \dots \quad 3.28$$

Igualando potencias de h :

$$hy_i = W_1 h f(x_i, y_i) + W_2 h f(x_i, y_i)$$

y como $y_i = f(x_i, y_i)$

$$1 = W_1 + W_2 \quad 3.29$$

igualando potencias de h^2 :

$$\frac{h^2}{2} y_i'' = W_2 \alpha_1 h^2 f_x + W_2 \beta_{1,1} h^2 f(x_i, y_i) f_y \quad 3.30$$

DESCRIPCION DE METODOS NUMERICOS

siendo:

$$Y_i'' = \frac{d}{dx} f(x,y) = \frac{\delta}{\delta x} f(x,y) + \frac{\delta}{\delta y} f(x,y) f(x_i, y_i)$$

Utilizando la notación indicada se podrá escribir como:

$$y_i'' = f_x + f_y f(x_i, y_i) \tag{3.31}$$

Sustituyendo 3.31 en 3.30

$$\frac{h^2}{2} (f_x + f_y f(x_i, y_i)) = W_2 \alpha_1 h^2 f_x + W_2 \beta_{1,1} h^2 f(x_i, y_i) f_y \tag{3.32}$$

por lo tanto:

$$\frac{1}{2} = W_2 \alpha_1 = W_2 \beta_{1,1} \tag{3.33}$$

de 3.29 y 3.33 se forma el siguiente sistema:

$$\begin{aligned} W_1 + W_2 &= 1 \\ W_2 \alpha_1 &= \frac{1}{2} \\ W_2 \beta_{1,1} &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Como el sistema tiene 4 incógnitas y solamente 3 ecuaciones, éste tiene un número infinito de soluciones, siendo una de ellas:

$$\begin{aligned} W_1 &= W_2 = \frac{1}{2} \\ \alpha_1 &= \beta_{1,1} = 1 \end{aligned}$$

Sustituyendo en 3.16 se obtienen las fórmulas de recurrencia que definen el método de Runge-Kutta de 2° orden.

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{2}(K_1 + K_2) \quad ; \quad i=0,1,2,\dots$$

DESCRIPCION DE METODOS NUMERICOS

donde:

$$\begin{aligned}K_1 &= hf(x_i, y_i) \\ K_2 &= hf(x_i + h, y_i + hf(x_i, y_i))\end{aligned}$$

3.6 Deducción del método de Runge-Kutta de 4° orden

El método de Runge-Kutta se obtiene al considerar $n=4$ en las expresiones, quedando:

$$y_{i+1} = y_i + (W_1 K_1 + W_2 K_2 + W_3 K_3 + W_4 K_4) ; i=0,1,2,\dots$$

donde:

$$\begin{aligned}K_1 &= hf(x_i, y_i) \\ K_2 &= hf(x_i + \alpha_1 h, y_i + \beta_{1,1} K_1) \\ K_3 &= hf(x_i + \alpha_2 h, y_i + \beta_{2,1} K_1 + \beta_{2,2} K_2) \\ K_4 &= hf(x_i + \alpha_3 h, y_i + \beta_{3,1} K_1 + \beta_{3,2} K_2 + \beta_{3,3} K_3)\end{aligned}$$

Si realizamos un análisis similar al del método de Runge-Kutta de 2° se obtiene:

$$\begin{array}{ll}W_1 = 1/6 & \alpha_1 = \alpha_2 = 1/2 \\ W_2 = 1/3 & \alpha_3 = 1 \\ W_3 = 1/3 & \beta_{1,1} = \beta_{2,2} = 1/2, \beta_{3,3} = 1 \\ W_4 = 1/6 & \beta_{2,1} = \beta_{3,1} = \beta_{3,2} = 0\end{array}$$

Sustituyendo:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6} (K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) ; i=0,1,2,\dots$$

En donde:

$$\begin{aligned}K_1 &= hf(x_i, y_i) \\ K_2 &= hf(x_i + 1/2h, y_i + 1/2K_1) \\ K_3 &= hf(x_i + 1/2h, y_i + 1/2K_2) \\ K_4 &= hf(x_i + h, y_i + K_3)\end{aligned}$$

DESCRIPCION DE METODOS NUMERICOS

3.7 Método de Newton-Raphson.

Este método numérico obtiene las soluciones reales de una ecuación algebraica no lineal o trascendente de la forma: $f(x)=0$. Está fundamentado en aproximaciones sucesivas, en el que a partir de una primera aproximación a la solución de una ecuación y mediante la aplicación de una fórmula de recurrencia que relaciona a 2 elementos de una sucesión particular de números, se obtiene una mejor aproximación a la solución.

3.8 Descripción del método.

Sea una ecuación algebraica o trascendente:

$$f(x)=0 \qquad \qquad \qquad 3.34$$

sumando x en ambos miembros de 3.34 se tiene:

$$f(x)+x=x \qquad \qquad \qquad 3.35$$

El miembro izquierdo de 3.35 es otra función de x definida como:

$$G(x)=f(x)+x \qquad \qquad \qquad 3.36$$

Sustituyendo 3.36 en 3.35 se tiene:

$$x=G(x) \qquad \qquad \qquad 3.37$$

si $x=a$ y es una raíz de la ecuación 3.34 implica que:

$$f(a)=0 \ ; \ a=G(a)$$

Sustituyendo un valor inicial (x_0) aproximado a la raíz en el 2º miembro de 3.37 y si el valor inicial proporcionado es la raíz, se tendrá que cumplir que:

$$x_0=G(x_0)$$

DESCRIPCION DE METODOS NUMERICOS

como esta situación es realmente difícil de que ocurra ya que el valor inicial proporcionado x_0 es solamente un valor cercano a la raíz, esto implica que:

$$x_n \neq G(x_n) \text{ o bien } x_{n+1} = G(x_n) \quad 3.38$$

siendo x_{n+1} la nueva aproximación de la raíz, de esta forma y procediendo reiteradamente a la n -ésima aproximación será:

$$x_n = G(x_{n-1}) ; n=1,2,3,\dots$$

o bien:
$$x_{n+1} = G(x_n) ; n=0,1,2,\dots \quad 3.39$$

Esta ecuación se puede escribir de la forma:

$$x_{n+1} = x_n + G(x_n) - x_n \text{ para } n=0,1,2,\dots \quad 3.40$$

al sumar y restar simultáneamente en el 2º miembro en 3.39 y si representamos $G(x_n) - x_n$ con Δx_n se tiene:

$$x_{n+1} = x_n + \Delta x_n \quad 3.41$$

El método de Newton-Raphson consiste en efectuar el incremento Δx_n en 3.41 con un factor de peso α obteniéndose la siguiente ecuación de recurrencia:

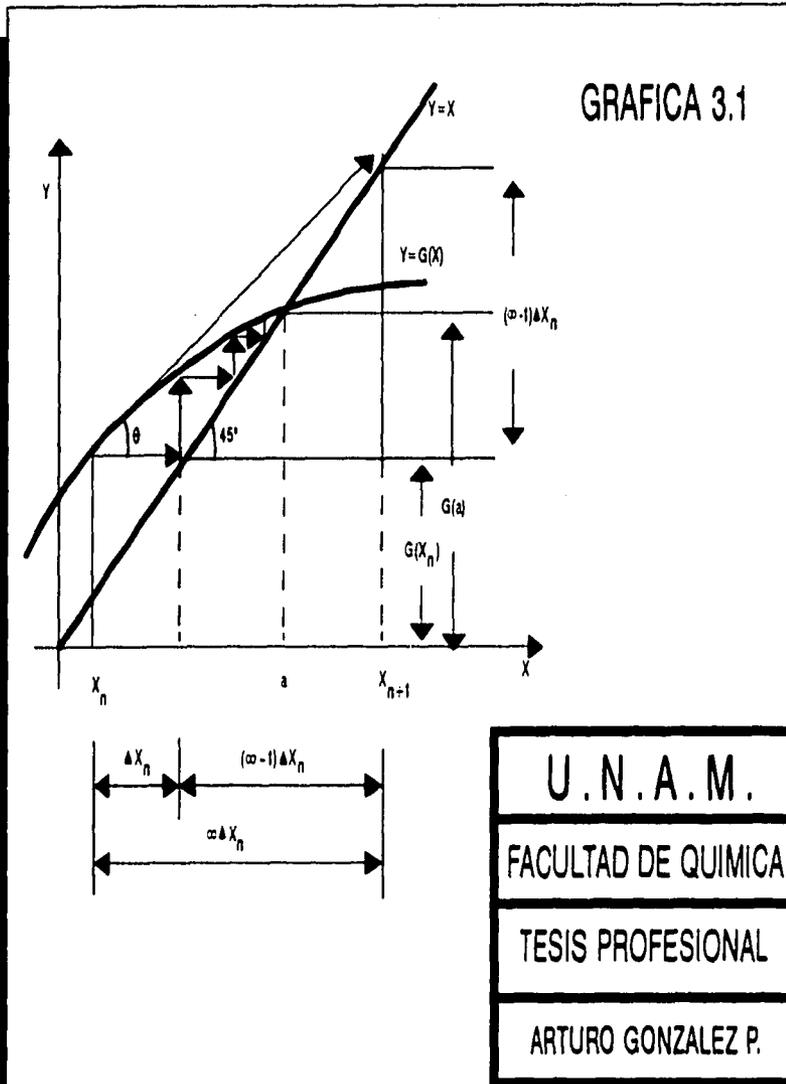
$$x_{n+1} = x_n + \alpha \Delta x_n \quad 3.42$$

α se determina en forma tal, que se orienta por la tangente en un punto de coordenadas $(x_n, G(x_n))$ de acuerdo a la gráfica 3.1, Se puede conocer el valor de α efectuando el siguiente razonamiento:

$$\operatorname{tg} \theta = \frac{(\alpha-1) \Delta x_n}{\alpha \Delta x_n}$$

como: $\operatorname{tg} \theta = G'(x_n)$

$$G'(x_n) = \frac{\alpha-1}{\alpha}$$



despejando el valor de α :

$$\alpha = \frac{1}{1-G'(x_n)}$$

sustituyendo α en 3.42:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{1}{1-G'(x_n)} \Delta x_n \quad 3.43$$

como: $\Delta x_n = G(x_n) - x_n$

$$G(x_n) = f(x_n) + x_n$$

Sustituyendo $G(x_n)$ en Δx_n

$$\Delta x_n = f(x_n) + x_n - x_n \quad 3.44$$

Derivando $G(x_n)$

$$G'(x_n) = f'(x_n) + 1 \quad 3.45$$

Sustituyendo 3.44 y 3.45 en 3.43

$$x_{n+1} = x_n + \frac{f(x_n)}{1-(f'(x_n)+1)}$$

Simplificando:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} ; \quad n=0,1,2,\dots \quad 3.46$$

Esta expresión se conoce como ecuación de recurrencia del método de Newton-Raphson o también conocido como método de las tangentes.

3.9 Interpretación geométrica del método de Newton-Raphson.

El comportamiento del método para las diferentes pendientes de $G(x)$ se describe en la gráfica 3.2

Método de Newton-Raphson para $y=G(x)$

Ya que la deducción del método de Newton-Raphson se hizo a partir del método de aproximaciones sucesivas, en las figuras A y B se grafican las ecuaciones $y=G(x)$ y $y=x$ con el fin de explicar su comportamiento geométrico, debido a que este método trabaja directamente con la función $f(x)$, en la Gráfica 3.3 se presenta el comportamiento geométrico del método, graficando las ecuaciones $y=f(x)$ y $y=0$.

Para verificar lo anterior, se obtiene la ecuación de la recta tangente que pasa por el punto de coordenadas $[x_n, f(x_n)]$ y teniendo a $f'(x_n)$ como pendiente, partiendo de la forma general de la ecuación de la recta:

$$(y - y_n) = m(x - x_n) \qquad 3.47$$

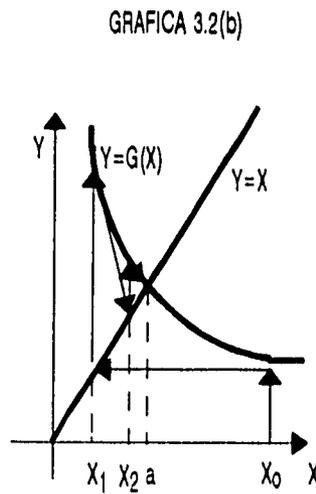
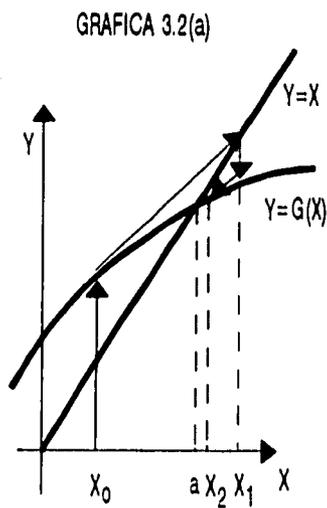
siendo:

$$\begin{aligned} y_n &= f(x_n) \\ x_n &= x_n \\ m &= f'(x_n) \end{aligned}$$

si se desea conocer el valor de la abscisa en el punto de intersección de ésta con el eje x , se puede obtener sustituyendo el valor de su ordenada en ese punto, que es 0 de la ecuación 3.45 y despejando el valor de x .

$$\begin{aligned} (0 - f(x_n)) &= f'(x_n)(x - x_n) \\ - f(x_n) &= f'(x_n) x - f'(x_n) x_n \end{aligned}$$

GRAFICA 3.2



U.N.A.M.

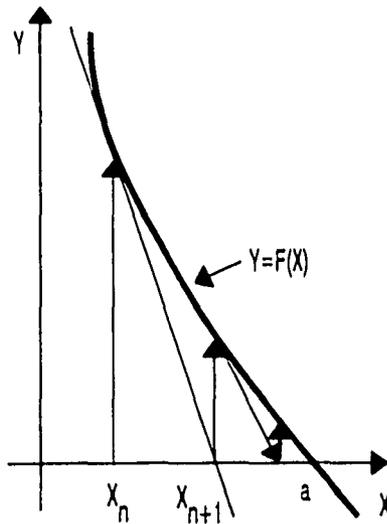
FACULTAD DE QUIMICA

TESIS PROFESIONAL

ARTURO GONZALEZ P.

GRAFICA 3.3

INTERPRETACION DEL
METODO DE:
NEWTON-RAPHSON



U.N.A.M.

FACULTAD DE QUIMICA

TESIS PROFESIONAL

ARTURO GONZALEZ P.

DESCRIPCION DE METODOS NUMERICOS

$$f'(x_n) x_n - f(x_n) = f'(x_n) x$$

$$x = \frac{f'(x_n)}{f'(x_n)} x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

$$x = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

3.10 Método de Regula Falsi y métodos relacionados.

Este es un método para encontrar una raíz de la ecuación $f(x)=0$ que se encuentra en el intervalo $[a,b]$, el método es similar a la técnica de bisección en que se generan intervalos $[a_i, b_i]$ encerrando a la raíz, y el método es similar al método de la secante en la manera de obtener nuevos intervalos aproximados suponiendo que el intervalo $[a_i, b_i]$ contiene una raíz de $f(x)=0$, se calcula la intersección con el eje x de la recta que une los puntos $(a_i, f(a_i))$ denotando este punto por p_i , si $f(p_i)f(a_i) < 0$ definimos $a_{i+1}=a_i$ y $b_{i+1}=p_i$, de otra forma se define $a_{i+1}=p_i$ y $b_{i+1}=b_i$.

El método llamado de regla de falsa posición se interpreta de acuerdo a la gráfica 3.4

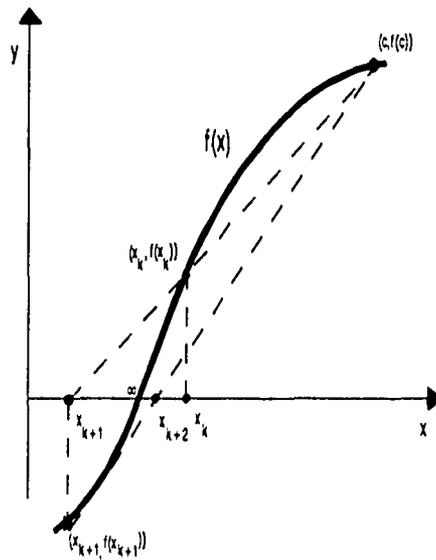
$(c, f(c))$ es un punto fijo de $y=f(x)$, trazando una recta de este punto a el punto $(x_n, f(x_n))$ tal que se intersecte al eje x en el punto $(x_{n+1}, 0)$ se tiene:

$$x_{n+1} = \frac{cf(x_n) - x_n f(c)}{f(x_n) - f(c)} \quad 3.48$$

Este nuevo punto podrá ser una mejor aproximación a α comparado con x_n . El procedimiento puede ser determinado mediante el método de sustituciones sucesivas.

METODO DE FALSA POSICION

GRAFICA 3.4



U.N.A.M.

FACULTAD DE QUIMICA

TESIS PROFESIONAL

ARTURO GONZALEZ P.

DESCRIPCION DE METODOS NUMERICOS

$$f(x) = \frac{cf(x) - xf(c)}{f(x) - f(c)} \quad 3.49$$

Otra técnica para proporcionar raíces es el método del intervalo medio Gráfica 3.5. Si los valores de x_l y x_r son conocidos tal que $f(x_l)$ y $f(x_r)$ son opuestos en signo para una función continua el número $f(x_l + x_r)/2$ será el valor de la función un punto intermedio, es 0 o tiene el signo de $f(x_l)$ o el signo de $f(x_r)$ si el valor no es 0 el segundo par x_l y x_r puede estar cambiando desde los números x_l, x_r y $(x_l + x_r)/2$ de esta forma $f(x_l)$ y $f(x_r)$ son opuestos en signo mientras que:

$$|x_l - x_r| = \frac{1}{2} |x_l - x_r|$$

Continuando de esta manera, siempre hay un punto α en el intervalo $[x_l, x_r]$ para el cual $f(\alpha) = 0$.

Cada nueva aplicación de la iteración reduce a la mitad la longitud del intervalo en x conocido que contiene a α .

Una técnica la cual en algunos casos combina las características de los 2 procedimientos puede ser referido a la gráfica 3.6

dejando x_l y x_r ser números tales que $f(x_l)$ y $f(x_r)$ son opuestos en signo, dejando x_2 ser la abscisa de el punto de intersección de el eje x y uniendo los puntos:

$((x_l, f(x_l)), (x_r, f(x_r)))$ se obtiene x_2 de la forma:

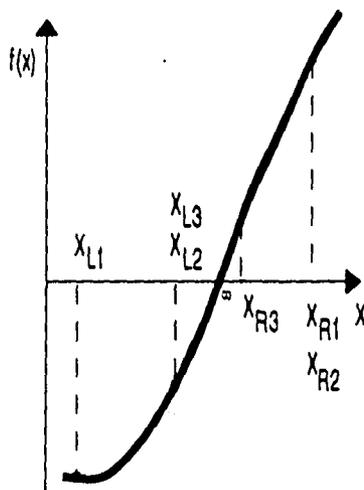
$$x_2 = \frac{x_l f(x_r) - x_r f(x_l)}{f(x_r) - f(x_l)} \quad 3.50$$

Si $f(x_2) = 0$ el proceso termina con un 0 de $f(x)$. Si $f(x_2)$ tiene el mismo signo que $f(x_r)$, cambia $x_l = x_l$ y $x_r = x_2$.

Si $f(x_2)$ tiene el mismo signo que $f(x_l)$ cambia $x_l = x_2$ y $x_r = x_r$, este proceso es entonces continuo para crear la secuencia de pares (x_l, x_r) .

METODO DEL INTERVALO MEDIO

GRAFICA 3.5



U.N.A.M.

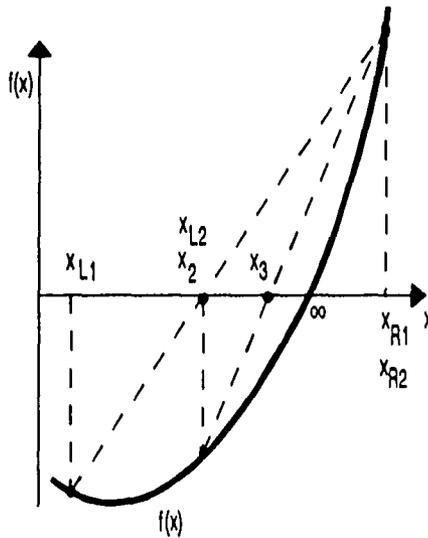
FACULTAD DE QUIMICA

TESIS PROFESIONAL

ARTURO GONZALEZ P.

METODO DE REGULA FALSI

GRAFICA 3.6



U.N.A.M.

FACULTAD DE QUIMICA

TESIS PROFESIONAL

ARTURO GONZALEZ P.

CAPITULO 4

FORMULACION DEL MODELO DE LA TORRE

CAPITULO 4

FORMULACION DEL MODELO DE UNA COLUMNA DE ABSORCION.

Para poder formular las ecuaciones diferenciales que describen el comportamiento de un absorbedor isotérmico de contacto continuo se harán las siguientes consideraciones:

1.- Proceso a régimen estacionario: Esto implica que el término de acumulación en la ecuación de balance sea 0.

$$\text{FLUJO DE ENTRADA} + \text{RAPIDEZ DE GENERACION} = \text{FLUJO DE SALIDA}$$

2.- No hay reacción química: Esto implica que el término de generación en la ecuación de balance sea 0.

$$\text{FLUJO DE ENTRADA} = \text{FLUJO DE SALIDA}$$

3.- Se asume que no hay dispersión axial ni radial: Esto permitirá asumir que un segmento diferencial está representado por un sólo valor de concentración en la fase líquida y por un solo valor de concentración en la fase gaseosa (x,y) para un componente dado.

4.- Únicamente se transfiere un sólo componente: De la fase vapor hacia la fase líquida, no habiendo transferencia de tipo multicomponente.

5.- Se asume que existe una interfase estacionaria: Que separa a la fase gaseosa de la fase líquida (Zona de equilibrio).

FORMULACION DEL MODELO DE LA TORRE

4.1 Derivación de las ecuaciones diferenciales para una columna de absorción isotérmica de contacto continuo.

Primeramente procedemos a hacer un balance de materia total para el elemento diferencial de volumen: Z_i a Z_{i+1} de acuerdo a la figura 4.1

$$\underbrace{V}_{Z_{i+1}} + \underbrace{L}_{Z_i} = \underbrace{V}_{Z_i} + \underbrace{L}_{Z_{i+1}}$$

Entrada/tiempo **Salida/tiempo**

Reordenando términos:

$$\underbrace{V}_{Z_{i+1}} + \underbrace{L}_{Z_i} - \underbrace{V}_{Z_i} - \underbrace{L}_{Z_{i+1}} = 0$$

Utilizando el teorema del valor medio del cálculo diferencial y tomando límites cuando Δz tiende a cero. Se obtiene la siguiente ecuación diferencial en el intervalo ($0 < Z < Z_i$):

$$\frac{dV}{dZ} - \frac{dL}{dZ} = 0 \tag{4.3}$$

Efectuando un balance de materia para el componente k que se transfiere de la fase vapor a la fase líquida en el elemento de volumen Z_i a Z_{i+1} de la figura 4.2

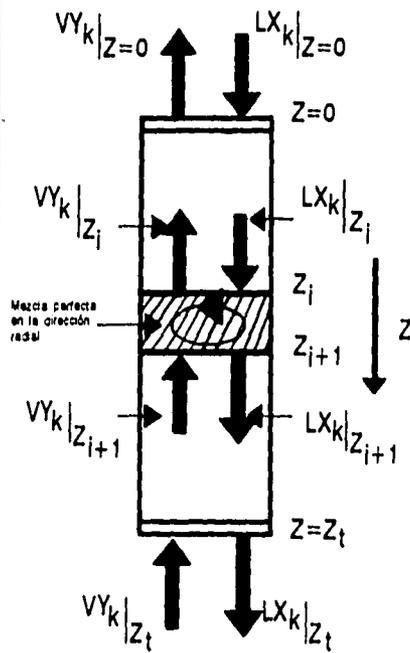
$$\underbrace{LX_k}_{Z_i} + \underbrace{N_k}_{Z_{i+1}} = \underbrace{LX_k}_{Z_{i+1}}$$

$$\underbrace{LX_k}_{Z_i} - \underbrace{LX_k}_{Z_{i+1}} - \underbrace{N_k}_{Z_i} dZ = 0 \tag{4.4}$$

FORMULACION DEL MODELO DE LA TORRE

FIGURA 4.1

TORRE DE ABSORCION DIFERENCIAL



U. N. A. M.

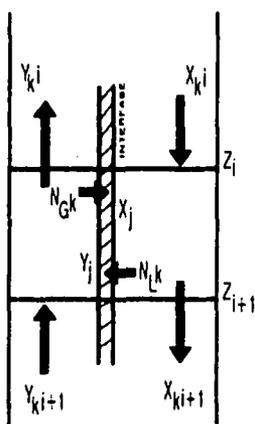
FACULTAD DE QUIMICA

TESIS PROFESIONAL

ARTURO GONZALEZ P.

FORMULACION DEL MODELO DE LA TORRE

FIGURA 4.2



ETAPA DE ABSORCION
DIFERENCIAL

U. N. A. M.

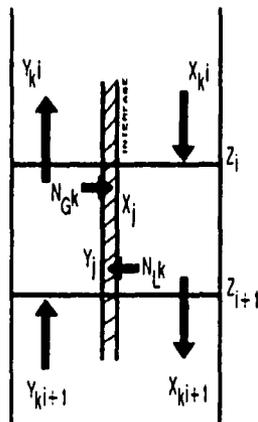
FACULTAD DE QUIMICA

TESIS PROFESIONAL

ARTURO GONZALEZ P.

FORMULACION DEL MODELO DE LA TORRE

FIGURA 4.2



ETAPA DE ABSORCION
DIFERENCIAL

U . N . A . M .

FACULTAD DE QUIMICA

TESIS PROFESIONAL

ARTURO GONZALEZ P.

FORMULACION DEL MODELO DE LA TORRE

Aplicando el teorema del valor medio del cálculo diferencial a los 2 primeros términos y del teorema del valor medio del cálculo integral al último término del lado izquierdo de la ecuación 4.4 seguida por la toma de límites cuando Δz tiende a 0 se obtiene la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{d(LX_k)}{dz} + NG_k = 0 ; (0 < Z < Z_1) \quad 4.5$$

De manera similar el balance de materia cuando el componente k se transfiere de la fase líquida a la fase vapor (desorción):

$$VY_k \Big|_{Z_{1+1}} - VY_k \Big|_{Z_1} + \int_{Z_1}^{Z_{1+1}} NL_k dz = 0$$

$$\frac{d(VY_k)}{dz} + NL_k = 0 ; (0 < Z < Z_1) \quad 4.6$$

En donde el término N_k es la velocidad de transferencia de masa del componente k de una fase hacia la interfase y está determinada por la ley de FICK de la forma:

$$NG_k = Kya'_k (Y_k - Y_j)$$

$$NL_k = -Kxa'_k (X_k - X_j)$$

Siendo:

NG_k = Velocidad de transferencia de masa del componente k en la fase gaseosa (flux) en lbmol/pie² hr.

NL_k = Velocidad de transferencia de masa del componente k en la fase líquida (flux) en lbmol/pie² hr.

Kya'_k = Coeficiente de transferencia de masa del componente k en la fase gaseosa en lbmol/hr pie² Δy .

FORMULACION DEL MODELO DE LA TORRE

$Kx a'_k$ = Coeficiente de transferencia de masa del componente k en la fase líquida en $\text{lbmol/hr pie}^2 \Delta x$.

X_k = Fracción mol del componente k en la fase líquida.

Y_k = Fracción mol del componente k en la fase vapor.

Xk_j = Fracción mol del componente k en la interfase líquida (equilibrio).

Yk_j = Fracción mol del componente k en la interfase vapor (equilibrio).

Sustituyendo NG_k y NL_k en 4.5 y 4.6 respectivamente se tiene:

$$\frac{d(LX_k)}{dZ} = -Kya'_k (Y - Y_j) \quad 4.7$$

$$\frac{d(VY_k)}{dZ} = Kxa'_k (X - X_j) \quad 4.8$$

Aplicando balances globales de corrientes, se obtienen las siguientes 2 ecuaciones diferenciales equivalentes a 4.7 y 4.8 respectivamente:

$$\frac{dV}{dZ} = Kxa'_k (X - X_j) \quad 4.9$$

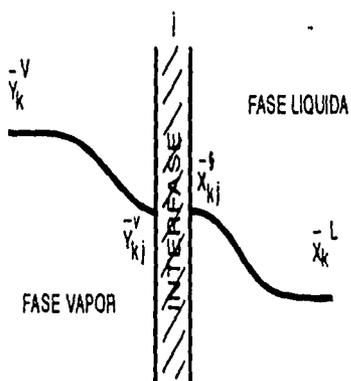
$$\frac{dL}{dZ} = -Kya'_k (Y - Y_j) \quad 4.10$$

4.2 Interacción con el equilibrio en la transferencia de masa.

Estamos asumiendo que el componente k se transfiere de la fase gas hacia la interfase j y de la interfase hacia la fase líquida de acuerdo al perfil de composiciones de la figura 4.3

PERFIL DE COMPOSICIONES EN
LA INTERFASE

FIGURA 4.3



U.N.A.M.

FACULTAD DE QUIMICA

TESIS PROFESIONAL

ARTURO GONZALEZ P.

FORMULACION DEL MODELO DE LA TORRE

La resistencia neta a la transferencia es cero en la interfase. La interfase es una película estacionaria que siempre estará en condiciones de equilibrio de tal forma que Y_j y X_j son las composiciones en el equilibrio de la fase vapor y de la fase líquida respectivamente.

Y_k^v y X_k^l son las composiciones promedio del componente k en la fase vapor y en la fase líquida respectivamente.

Y_k^i y X_k^i son las composiciones en la zona de interfase (equilibrio).

Existe un coeficiente llamado de distribución o más comúnmente conocido como constante de equilibrio que relaciona las composiciones X_p, Y_p en el equilibrio siendo su forma:

$$K_j = \frac{Y_j}{X_j} \quad 4.11$$

Por lo tanto la funcionalidad de Y_j en relación con X_j esta dada por:

$$Y_j = K_j X_j \quad 4.12$$

*La cual representa una **línea recta** de pendiente igual a la constante de equilibrio.*

4.3 Deducción de las composiciones (X, Y) en el equilibrio cuando las soluciones son diluidas (Soluciones ideales).

de 4.3

$$\frac{dV}{dZ} = \frac{dL}{dZ}$$

Dividiendo 4.9 % 4.10 se tiene:

$$1 = - \frac{K_{xa}'_k (X - X_j)}{K_{ya}'_k (Y - Y_j)}$$

$$K_{ya}'_k (Y - Y_j) = -K_{xa}'_k (X - X_j) \quad 4.13$$

FORMULACION DEL MODELO DE LA TORRE

como: $Y_j = KX_j$ sustituyendo en 4.13:

$$K_{ya}'_k (Y - KX_j) = -K_{xa}'_k (X - X_j)$$

desarrollando términos:

$$K_{ya}'_k Y - K_{ya}'_k KX_j = -K_{xa}'_k X + K_{xa}'_k X_j$$

$$K_{ya}'_k Y + K_{xa}'_k X = K_{xa}'_k X_j + K_{ya}'_k KX_j = X_j(K_{xa}'_k + K_{ya}'_k K)$$

Despejando X_j :

$$X_j = \frac{K_{ya}'_k Y + K_{xa}'_k X}{K_{xa}'_k + K_{ya}'_k K} \quad 4.14$$

dividiendo entre $K_{ya}'_k$ 4.14:

$$X_j = \frac{Y + \frac{K_{xa}'_k X}{K_{ya}'_k}}{\frac{K_{xa}'_k}{K_{ya}'_k} + K}$$

Reordenando:

$$X_j = \frac{Y + \frac{K_{xa}'_k}{K_{ya}'_k} X}{K + \frac{K_{xa}'_k}{K_{ya}'_k}} \quad 4.15$$

Por lo tanto la composición en la fase vapor en el equilibrio será:

$$Y_j = KX_j$$

FORMULACION DEL MODELO DE LA TORRE

4.4 Deducción de las composiciones (X_j, Y_j) en el equilibrio cuando las soluciones son mezclas concentradas (Soluciones Reales).

Para el caso de mezclas concentradas la línea de equilibrio en un gráfica de X vs Y por lo regular no sigue una funcionalidad de tipo lineal de la forma: $Y=KX$ sino que en la mayoría de los casos son curvas de tipo: parabólico o del tipo polinomial de forma generalizada como:

$$Y = A_0 + A_1 X_1 + A_2 X_2^2 + \dots + A_n X^n$$

donde: $A_0, A_1, A_2, \dots, A_n$ son constantes a determinar.

Deducción:

de 4.13 se tiene que:

$$-K_{ya}'_k (Y - Y_j) = +K_{xa}'_k (X - X_j)$$

Sustituyendo $Y_j = A_0 + A_1 X_j + A_2 X_j^2 + \dots$ en 4.13 se tiene:

$$K_{xa}'_k X - K_{xa}'_k X_j = -K_{ya}'_k (Y - (A_0 + A_1 X_j + A_2 X_j^2))$$

Desarrollando términos:

$$K_{xa}'_k X - K_{xa}'_k X_j = -K_{ya}'_k Y + K_{ya}'_k A_0 + K_{ya}'_k A_1 X_j + K_{ya}'_k A_2 X_j^2$$

Pasando los términos del 2° miembro al primer miembro se tiene:

$$K_{ya}'_k A_2 X_j^2 + K_{ya}'_k A_1 X_j + K_{xa}'_k X_j + K_{ya}'_k A_0 - K_{ya}'_k Y - K_{xa}'_k X = 0$$

$$K_{ya}'_k A_2 X_j^2 + (K_{ya}'_k A_1 + K_{xa}'_k) X_j + K_{ya}'_k A_0 - K_{ya}'_k Y - K_{xa}'_k X = 0$$

La ecuación obtenida es del tipo:

$$AX_j^2 + BX_j + C = 0$$

FORMULACION DEL MODELO DE LA TORRE

Por lo tanto X_j serán las raíces o la solución a la ecuación que hacen que:

$$f(X_j) = 0.$$

CAPITULO 5

CAPITULO 5

ELABORACION DE UN PROGRAMA COMPUTACIONAL PARA RESOLVER EL MODELO DE LA TORRE DE ABSORCION.

De acuerdo a los métodos numéricos descritos en el capítulo 3, y a las ecuaciones diferenciales formuladas en el capítulo 4, desarrollaremos, aplicando estos métodos un programa computacional en lenguaje de programación BASIC que nos permita obtener los perfiles de composición del componente transferido, tanto en la fase vapor y_p , como en la fase líquida x_p , así como los perfiles respectivos de flujo de gas G_i y de líquido L_i en cada etapa i , en relación con la altura de la torre.

5.1 Consideraciones previas.

- 1.- *El modelo diferencial a resolver, es la ecuación de velocidad de transferencia de masa por transporte molecular (Ecuación de FICK).*
- 2.- *Proceso a régimen estacionario.*
- 3.- *No hay reacción química.*
- 4.- *La torre de absorción opera en condiciones de temperatura constante, y a presión atmosférica, no afectando de esta manera a los sistemas de equilibrio.*
- 5.- *Se considera que únicamente un sólo componente, es el que se transfiere de la fase vapor a la fase líquida.*
- 6.- *Se considera que una etapa de transferencia es equivalente a un segmento diferencial de la torre, operando como una etapa ideal.*
- 7.- *Ya que no hay dispersión axial ni radial, esto permite asumir que un segmento diferencial está representado por un sólo valor de concentración en la fase líquida y por un sólo valor de concentración en la fase gaseosa (x,y) para un componente dado.*
- 8.- *Inclusión de interacciones con el sistema de equilibrio en todos los segmentos diferenciales de la torre (Gradientes de concentración necesarios*

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

para que exista transferencia de masa).

9.- El modelo diferencial se resolverá en forma "iterativa" hasta que converja con las condiciones de proceso.

Simulación:

A.- Dadas las composiciones a la entrada para una torre operando a contracorriente y con una altura determinada de empaque "Z" se determinarán las composiciones a la salida.

5.2 Datos a alimentar para caso ideal (Mezclas Diluidas).

x_n, y_n : Composiciones del soluto a absorber, entrantes a la torre.

L_n, G_n : Flujos de líquido y gas entrantes a la torre.

N : Número de intervalos.

Z : Altura de la torre.

k_{ya}, k_{xa} : Coeficientes de transferencia de masa, para la fase gaseosa y para la fase líquida.

S : Area de sección transversal de la torre.

K : Constante de equilibrio, ésta se determina mediante **Regresión lineal** a partir de datos experimentales de sistemas de equilibrio x^* vs y^* siendo su funcionalidad:

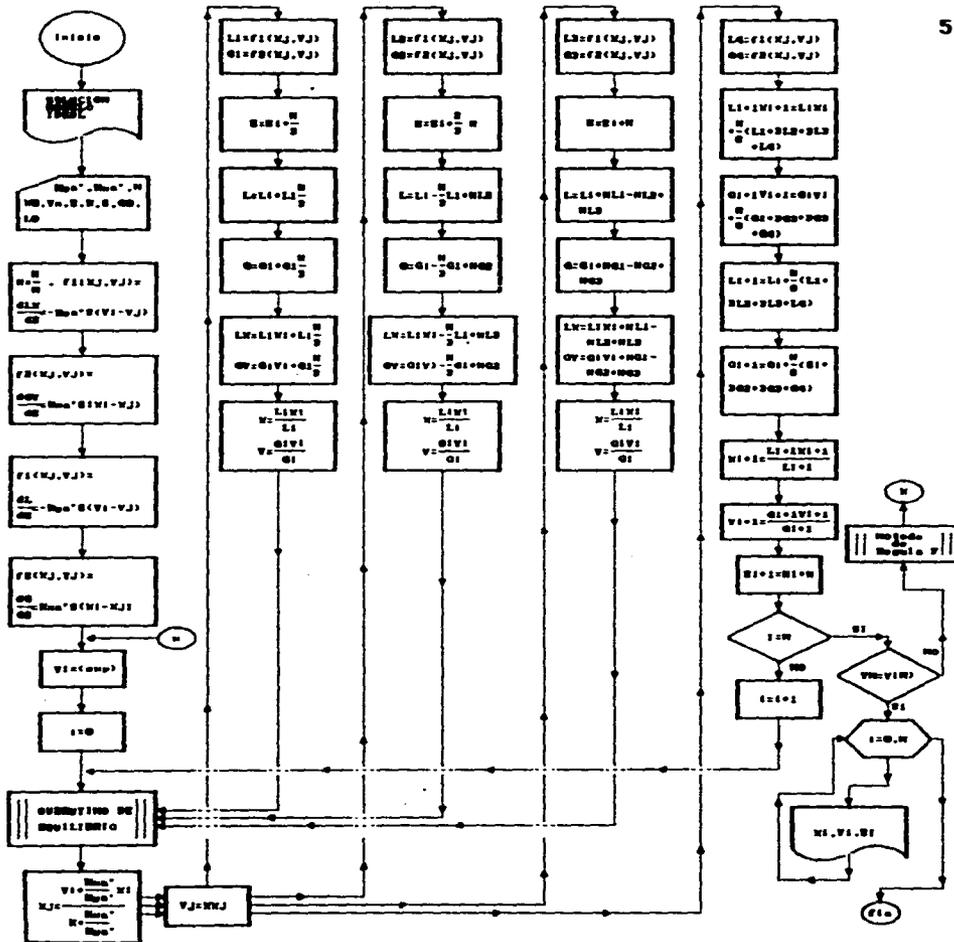
$$y^* = Kx^*$$

" Y_n (supuesta)": Suposición de una composición en la fase gaseosa a la salida de la torre.

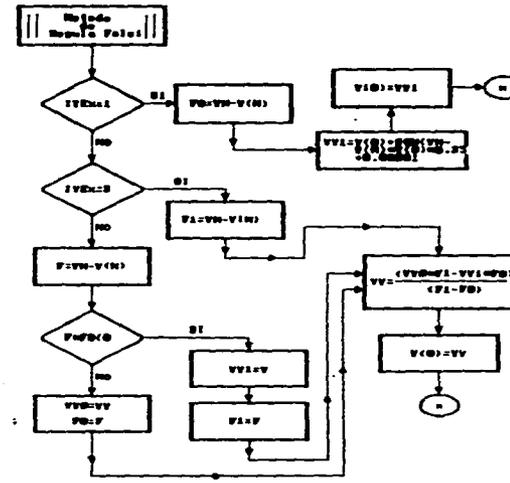
Los perfiles serán los correctos hasta que el programa en forma "iterativa" converja con la composición de la fase gaseosa entrante Y_n .

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Para poder correr este programa se consideraron 3 problemas, en los cuales se requería calcular la altura de empaque de la torre, necesaria para lograr cierta separación de un componente en el gas.



5.3 Diagrama de flujo "Modelo Ideal"



Metodo de "Regula Falsi"

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

5.4 Listado de programa para caso ideal

```
10 REM SOLUCION DEL MODELO PARA CASO IDEAL
20 REM ABSORCION DE UN COMPONENTE DE LA FASE VAPOR A
  LA FASE LIQUIDA
30 PRINT "SOLUCION DE LAS ECUACIONES
  DIFERENCIALES:"
40 PRINT "F(Xj, Yj) = d(LXi)/dZ = Kya'S(Yi-Yj)"
50 PRINT "F(Xj, Yj) = d(GYi)/dZ = -Kxa'S(Xi-Xj)"
60 PRINT "F(Xj, Yj) = dL/dZ = Kya'S(Yi-Yj)"
70 PRINT "F(Xj, Yj) = dG/dZ = -Kxa'S(Xi-Xj)"
80 INPUT "Kya' = "; KYA: INPUT "Kxa' = "; KXA: INPUT "S = "; S
90 INPUT "N = "; N: INPUT "X0 = "; X0: INPUT
  "YN = "; YN: INPUT "ZN = "; ZN
100 INPUT "K = "; K: INPUT "G0 = "; G0: INPUT
  "L0 = "; L0
110 DIM X(N+1), Y(N+1), L(N+1), G(N+1), Z(N+1)
120 X(0) = X0: Y(N) = YN: L(0) = L0: G(0) = G0: Z(0) = Z0
130 H = ZN/N
140 DEF FN F1(Y, YJ) = KYA*S*(Y-YJ)
150 DEF FN F2(X, XJ) = -KXA*S*(X-XJ)
185 INPUT "Y(0)supuesta = "; Y(0): YY0 = Y(0)
190 I = 0: X = X(0): Y = Y(0)
210 GOSUB 1000
220 L1 = FN F1(Y, YJ)
230 G1 = FN F2(X, XJ)
240 Z = Z(I) + H/3
250 L = L(I) + L1*H/3
260 G = G(I) + G1*H/3
270 LX = L(I)*X(I) + L1*H/3
280 GY = G(I)*Y(I) + G1*H/3
290 X = LX/L(I): Y = GY/G(I)
300 GOSUB 1000
310 L2 = FN F1(Y, YJ)
320 G2 = FN F2(X, XJ)
330 Z = Z(I) + H*2/3
340 L = L(I) - H*L1/3 + H*L2
350 G = G(I) - H/3*G1 + H*G2
```

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

```
360 LX=L(I)*X(I)-H/3*L1+H*L2
370 GY=G(I)*Y(I)-H/3*G1+H*G2
380 X=LX/L(I):Y=GY/G(I)
390 GOSUB 1000
400 L3=FN F1(Y, YJ)
410 G3=FN F2(X, XJ)
420 Z=Z(I)+H
430 L=L(I)+H*L1-H*L2+H*L3
440 G=G(I)+H*G1-H*G2+H*G3
450 LX=L(I)*X(I)+H*L1-H*L2+H*L3
460 GY=G(I)*Y(I)+H*G1-H*G2+H*G3
470 X=LX/L(I):Y=GY/G(I)
480 GOSUB 1000
490 L4=FN F1(Y, YJ)
500 G4=FN F2(X, XJ)
510 LX=L(I)*X(I)+H/8*(L1+3*L2+3*L3+L4)
520 GY=G(I)*Y(I)+H/8*(G1+3*G2+3*G3+G4)
530 L(I+1)=L(I)+H/8*(L1+3*L2+3*L3+L4)
540 G(I+1)=G(I)+H/8*(G1+3*G2+3*G3+G4)
550 X(I+1)=LX/L(I+1)
560 Y(I+1)=GY/G(I+1)
570 Z(I+1)=Z(I)+H
580 IF I=N THEN GOTO 610
590 I=I+1
600 GOTO 210
610 IF ABS(Y(N)-YN) <= 0.0001 THEN A$="Perfiles de concentración y
    flujos con respecto a altura":GOSUB 630:END
620 ITE%=ITE%+1:A$="Perfiles de concentración y flujos con respecto
    a altura..iteración"+STR$(ITE%):GOSUB 630: IF ITE%=1 THEN
    F0=YN-Y(N):YY1=Y(0)
    +SGN(YN-Y(N))*(Y(0)*0.25+0.00001)
    :Y(0)=YY1:GOTO 190 ELSE IF ITE%=2 THEN F1=YN-Y(N):
    GOTO 625
621 F=YN-Y(N):IF F*F0 < 0 THEN YY1=YY:F1=F ELSE
    YY0=YY:F0=F
625 YY=(YY0*F1-YY1*F0)/(F1-F0):Y(0)=YY:GOTO 190
630 CLS:LOCATE,(80-LEN(A$))/2:COLOR 0,7:PRINT A$:COLOR
    7,0:A$=SPACES(14)
```

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

```
631 PRINT "┌";FOR I=1 TO 4:PRINT
    STRING$(14,"—");"└";:NEXT I: PRINT
    STRING$(14,"—");"┐";:LOCATE 3,3:PRINT" | ALTURA | Fracc.
    mol liq | Fracc. mol vap | Flujo liquido | Flujo vapor | ";:LOCATE
    4,3:PRINT"└";

632 FOR I=1 TO 4:PRINT
    STRING$(14,"—");"┐";:NEXT I:PRINT STRING$(14,"—");"└";
635 FOR I=0 TO N:LOCATE
    5+1,3:PRINT" | ";LEFT$(STR$(Z(I))+A$,14);
    " | ";LEFT$(STR$(STR$(X(I)+A$,14);" | ";
    LEFT$(Y(I)+A$,14);" | ";
    LEFT$(STR$(L(I)+A$,14);" | ";
    LEFT$(STR$(G(I)+A$,14);" | ";NEXT I
640 LOCATE 5+1,3:PRINT"┌";:FOR I=1 TO 4:PRINT
    STRING$(14,"—");:NEXT I:PRINT
    STRING$(14,"—");"┐";:LOCATE 25,21:
    PRINT "Para continuar presione cualquier
    tecla";:A$=INPUT$(I):PRINT
660 RETURN
1000 REM SUBROUTINA PARA EVALUAR COMPOSICIONES EN EL
    EQUILIBRIO (Xj,Yj)
1010 XJ=(Y+(KXA)/(KYA)*X)/(K+(KXA)/KYA)
1020 YJ=K*XJ
1030 RETURN
```

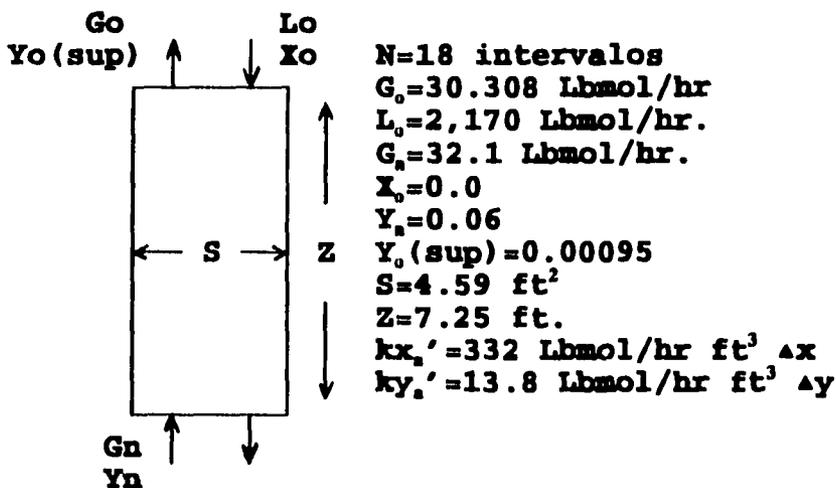
ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

5.5 Problemas propuestos.

5.5.1 Sistema: "SO₂ - H₂O".

Una mezcla de gas que contiene 6.0% de SO₂ y 94% de aire seco va a lavarse con agua dulce en una torre empacada con anillos Raschig de cerámica de 1 plg. para eliminar el SO₂, de tal forma que el gas de salida no contenga más de 0.1% en mol de SO₂. La torre debe tratar 1000 lb/hr de gas y se diseña usando 50% de la velocidad de inundación, el flujo de agua se considera el doble del mínimo requerido para alcanzar esta separación en una torre de altura infinita, las condiciones de operación son isotérmicas a 87°F y 1 atm. de presión.

A continuación se presentan los valores que se obtienen desarrollando el procedimiento general para el cálculo del diámetro y la altura de la torre requeridos, los cuales son datos necesarios de entrada para nuestro programa:



ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Obtención de la Constante de equilibrio: K

Datos de equilibrio:

X	Y
0.0000565	0.000079
0.000141	0.00224
0.000281	0.0062
0.000422	0.0107
0.000564	0.01566
0.0008444	0.0259
0.00141	0.0474
0.00197	0.0684
0.104	0.0028

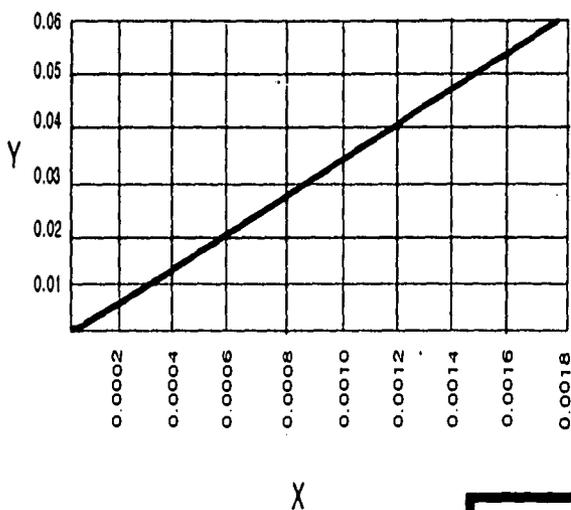
Efectuando Regresión lineal:

$$r^2 = 0.99863$$

$$K = 37.754$$

GRAFICA 5.1

CURVA DE EQUILIBRIO
SISTEMA: SO₂-H₂O



U. N. A. M.

FACULTAD DE QUIMICA

TESIS PROFESIONAL

ARTURO GONZALEZ P.

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

5.5.2 Perfiles de composición obtenidos por "iteraciones"

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura..ite 1

ALTURA	X_{mol}	Y_{mol}	G_x	G_y
0	0	0.00095	2170	30.308
0.4027778	4.701834E-06	1.286212E-03	2170.01	30.3182
0.8055556	1.018688E-05	1.678147E-03	2170.022	30.3301
1.208333	1.658584E-05	2.135002E-03	2170.036	30.3439
1.611111	2.404916E-05	2.667327E-03	2170.052	30.3601
2.013889	3.275112E-05	3.287292E-03	2170.071	30.3790
2.416667	4.289357E-05	4.008924E-03	2170.093	30.4010
2.819444	5.470986E-05	4.848352E-03	2170.119	30.4267
3.222222	6.846937E-05	5.824069E-03	2170.149	30.4565
3.625	8.448234E-05	6.957212E-03	2170.183	30.4913
4.027777	1.031053E-04	8.271848E-03	2170.224	30.5317
4.430555	1.247467E-04	9.795257E-03	2170.271	30.5787
4.833333	1.498729E-04	0.0115582	2170.325	30.6332
5.23611	1.790147E-04	1.359515E-02	2170.388	30.6965
5.638888	2.127728E-04	1.594445E-02	2170.462	30.7698
6.041666	2.518241E-04	1.864838E-02	2170.546	30.8545
6.444443	2.969261E-04	0.0217531	2170.644	30.9525
6.847221	3.489204E-04	2.530833E-02	2170.757	31.0654
7.249999	4.087344E-04	2.936686E-02	2170.887	31.1953

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura..ite 2

ALTURA	X_{med}	Y_{med}	G_x	G_y
0	0	0.0011975	2170	30.308
0.4027778	5.926777E-06	1.621162E-03	2170.013	30.3288
0.8055556	1.284009E-05	2.114896E-03	2170.028	30.3358
1.208333	2.09039E-05	2.690188E-03	2170.046	30.3533
1.611111	3.030667E-05	3.360179E-03	2170.066	30.3737
2.013889	4.12664E-05	4.139991E-03	2170.09	30.3975
2.416667	5.403495E-05	5.04699E-03	2170.118	30.4252
2.819444	6.890283E-05	6.101061E-03	2170.15	30.4575
3.222222	8.620434E-05	7.324898E-03	2170.187	30.4950
3.625	1.063232E-04	8.744288E-03	2170.231	30.5387
4.027777	1.296983E-04	0.0103884	2170.282	30.5894
4.430555	1.568303E-04	1.229001E-02	2170.341	30.6483
4.833333	1.882873E-04	1.448576E-02	2170.409	30.7166
5.23611	2.247112E-04	1.701621E-02	2170.488	30.7957
5.638888	2.66823E-04	1.992589E-02	2170.579	30.8871
6.041666	3.154269E-04	0.0232631	2170.685	30.9926
6.444443	3.71413E-04	2.707952E-02	2170.807	31.1142
6.847221	4.35757E-04	3.142952E-02	2170.946	31.254
7.249999	5.095166E-04	3.636915E-02	2171.106	31.4142

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura..ite 3

ALTURA	X_{med}	Y_{med}	G_x	G_y
0	0	2.032747E-03	2170	30.308
0.4027778	1.006062E-05	2.751095E-03	2170.022	30.3298
0.8055556	2.179171E-05	3.587432E-03	2170.047	30.3552
1.208333	3.546705E-05	4.560635E-03	2170.077	30.3849
1.611111	5.140002E-05	5.692139E-03	2170.112	30.4195
2.013889	6.995083E-05	7.006362E-03	2170.152	30.4598
2.416667	9.153272E-05	8.531016E-03	2170.199	30.5066
2.819444	1.166182E-04	1.029739E-02	2170.253	30.5610
3.222222	1.457453E-04	1.234058E-02	2170.317	30.6243
3.625	1.795241E-04	1.469969E-02	2170.39	30.6976
4.027777	2.186427E-04	1.741787E-02	2170.475	30.7825
4.430555	2.63872E-04	0.0205423	2170.573	30.8807
4.833333	3.160698E-04	2.412385E-02	2170.686	30.9940
5.23611	3.761817E-04	2.821657E-02	2170.817	31.1246
5.638888	4.452404E-04	3.287685E-02	2170.967	31.2746
6.041666	5.24359E-04	3.816214E-02	2171.139	31.4464
6.444443	6.147205E-04	4.412927E-02	2171.335	31.6427
6.847221	7.175606E-04	5.083227E-02	2171.558	31.8662
7.249999	8.341422E-04	5.831976E-02	2171.812	32.1196

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

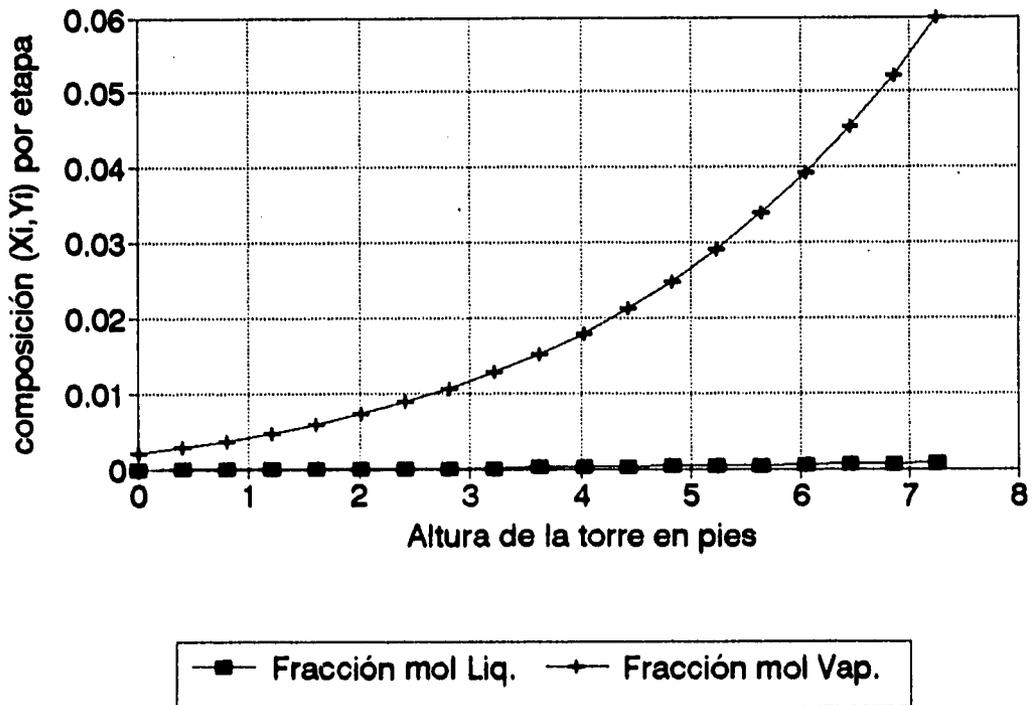
Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura

ALTURA	X_{med}	Y_{med}	G_x	G_y
0	0	2.096682E-03	2170	30.308
0.4027778	1.037705E-05	2.83756E-03	2170.023	30.3305
0.8055556	2.247678E-05	3.700062E-03	2170.049	30.3567
1.208333	3.658123E-05	4.70361E-03	2170.079	30.3873
1.611111	5.301311E-05	5.870246E-03	2170.115	30.4230
2.013889	7.214321E-05	7.225059E-03	2170.157	30.4645
2.416667	9.439662E-05	8.796494E-03	2170.205	30.5128
2.819444	1.202591E-04	1.061663E-02	2170.261	30.5689
3.222222	1.502833E-04	1.272142E-02	2170.326	30.6341
3.625	1.850955E-04	1.515082E-02	2170.402	30.7097
4.027777	2.254008E-04	1.794889E-02	2170.489	30.7972
4.430555	2.719886E-04	2.116364E-02	2170.59	30.8983
4.833333	3.257355E-04	0.0248467	2170.707	31.0150
5.23611	3.876063E-04	2.905279E-02	2170.841	31.1494
5.638888	4.586519E-04	3.383869E-02	2170.996	31.3037
6.041666	5.400023E-04	3.926198E-02	2171.172	31.4804
6.444444	6.328546E-04	4.537916E-02	2171.374	31.6821
6.847221	7.384538E-04	5.224349E-02	2171.604	31.9116
7.249999	8.580666E-04	5.990219E-02	2171.864	32.1716

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

5.5.3 Gráfica de "perfiles de composición (x,y) con respecto a altura de la torre"

Perfiles de conc. con respecto a altura
Sistema: SO₂ - H₂O (Mezcla Diluida)



ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

5.5.4 Problema 2 Sistema: "Acetona-Agua"

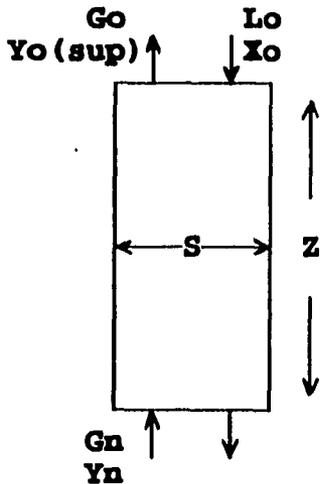
Se está absorbiendo acetona con agua en una torre empacada que tiene un área de sección transversal de 0.186 m^2 a 293°K y una presión de 101.32 Kpa (1 atm). El aire de entrada contiene 2.6% mol de acetona y el de salida 0.5% mol. El flujo de gas es $13.65 \text{ Kg mol de aire inerte/hr}$ (30.1 Lbmol/hr). El flujo de entrada de agua pura es $45.36 \text{ Kgmol de agua/hr}$ (100 Lbmol/hr). Los coeficientes de película para los flujos dados en la torre son:

$$k_{ya}' = 3.78 \cdot 10^{-2} \text{ kgmol/s.m}^2.\text{frac.mol}$$

$$(8.50 \text{ Lbmol/hr.pie}^2 \Delta y)$$

$$k_{xa}' = 6.16 \cdot 10^{-2} \text{ kgmol/s.m}^2.\text{frac.mol}$$

$$(13.85 \text{ Lbmol/hr.pie}^2 \Delta x)$$



$N=18$ intervalos

$G_0=30.22 \text{ Lbmol/hr}$

$L_0=100 \text{ Lbmol/hr}$

$G_n=30.22 \text{ Lbmol/hr}$

$X_0=0.0$

$Y_n=0.026$

$Y_0(\text{sup})=0.0095$

$S=0.186 \text{ ft}^2$

$Z=6.26 \text{ ft}$

$k_{xa}'=13.85 \text{ Lbmol/hr ft}^2 \Delta x$

$k_{ya}'=8.50 \text{ Lbmol/hr ft}^2 \Delta y$

$K=1.186$

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

5.5.5 Perfiles de composición obtenidos por "iteraciones"

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura..ite 1

ALTURA	X _{mol}	Y _{mol}	G _x	G _y
0	0	0.0095	100	30.22
0.3483333	3.378402E-04	1.060645E-02	100.0338	30.2538
0.6966667	7.005223E-04	1.179235E-02	100.0701	30.2901
1.045	1.089752E-03	1.306284E-02	100.1091	30.3291
1.3933333	1.507345E-03	1.442338E-02	100.151	30.3709
1.741667	1.955225E-03	0.0158797	100.1959	30.4159
2.09	2.435424E-03	1.743778E-02	100.2442	30.4641
2.438333	2.950084E-03	1.910387E-02	100.2959	30.5158
2.786667	3.501462E-03	2.088446E-02	100.3514	30.5713
3.135	4.091932E-03	2.278631E-02	100.4109	30.6308
3.483333	4.723982E-03	0.0248164	100.4747	30.6946
3.831667	5.40022E-03	2.698194E-02	100.543	30.7629
4.18	6.123368E-03	2.929033E-02	100.6161	30.8361
4.528333	6.896267E-03	3.174913E-02	100.6944	30.9144
4.876667	7.721867E-03	3.436606E-02	100.7782	30.9982
5.225	8.603226E-03	3.714895E-02	100.8678	31.0877
5.573334	9.543508E-03	4.010565E-02	100.9636	31.1835
5.921667	1.054597E-02	4.324408E-02	101.0659	31.2858
6.27	1.161395E-02	4.657206E-02	101.1751	31.3950

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura..ite 2

ALTURA	X_{med}	Y_{med}	G_x	G_y
0	0	0.007115	100	30.22
0.348333	2.53046E-04	7.945903E-03	100.0253	30.2453
0.696666	5.248186E-04	8.837216E-03	100.0525	30.2725
1.045	8.166417E-04	9.793046E-03	100.0817	30.3017
1.393333	1.129924E-03	1.081773E-02	100.1131	30.3331
1.741667	1.466161E-03	1.191585E-02	100.1468	30.3668
2.09	1.826942E-03	1.309225E-02	100.183	30.4030
2.438333	2.21395E-03	1.435199E-02	100.2219	30.4418
2.786667	2.62897E-03	1.570042E-02	100.2636	30.4835
3.135	3.073886E-03	1.714315E-02	100.3083	30.5283
3.483333	3.550691E-03	1.868601E-02	100.3563	30.5763
3.831667	4.061485E-03	2.033512E-02	100.4078	30.6278
4.18	4.608481E-03	2.209684E-02	100.463	30.6829
4.528333	5.194001E-03	2.397777E-02	100.5221	30.7421
4.876667	5.820485E-03	2.598473E-02	100.5855	30.8054
5.225	6.490483E-03	2.812476E-02	100.6533	30.8732
5.573334	7.206663E-03	0.030051	100.7259	30.9459
5.921667	7.971803E-03	3.283314E-02	100.8036	31.0235
6.27	8.788789E-03	3.541643E-02	100.8867	31.1066

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura..ite 3

ALTURA	X_m	Y_m	G_x	G_y
0	0	5.10183E-03	100	30.22
0.3483333	1.814603E-04	5.698981E-03	100.0182	30.2381
0.6966667	3.764221E-04	6.340005E-03	100.0377	30.2576
1.045	5.858633E-04	7.027995E-03	100.0586	30.2786
1.393333	8.108225E-04	7.76622E-03	100.0812	30.3011
1.741667	1.052408E-03	8.558151E-03	100.1054	30.3253
2.09	1.311799E-03	9.40747E-03	100.1314	30.3513
2.438333	1.590252E-03	1.031808E-02	100.1593	30.3792
2.786667	1.889104E-03	0.0112941	100.1893	30.4092
3.135	2.209775E-03	1.233988E-02	100.2215	30.4414
3.483333	2.553774E-03	1.346004E-02	100.256	30.4760
3.831667	2.922699E-03	1.465939E-02	100.2931	30.5131
4.18	3.318247E-03	1.594304E-02	100.3329	30.5529
4.528333	3.74221E-03	1.731632E-02	100.3756	30.5956
4.876666	4.196482E-03	1.878483E-02	100.4214	30.6414
5.225	4.683063E-03	0.0203544	100.4705	30.6905
5.573334	5.204059E-03	2.203112E-02	100.5231	30.7431
5.921667	5.761688E-03	2.382132E-02	100.5795	30.7995
6.27	6.358275E-03	2.573156E-02	100.6399	30.8599

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

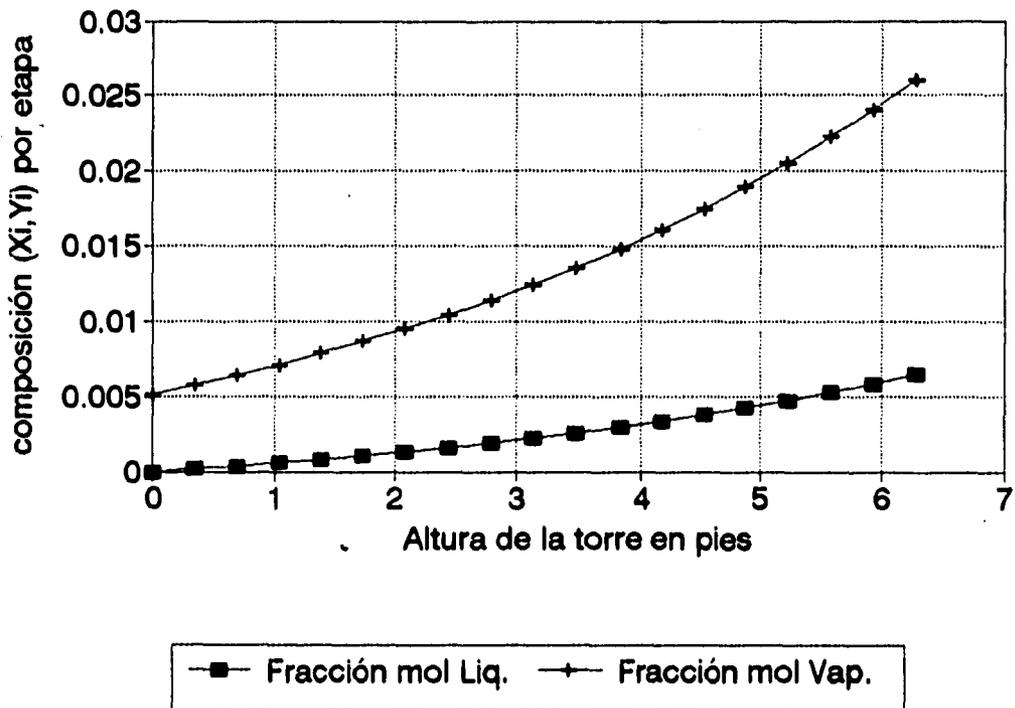
Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura

ALTURA	X_{m-1}	Y_{m-1}	G_x	G_y
0	0	5.158481E-03	100	30.22
0.3483333	1.834749E-04	5.762224E-03	100.0184	30.2383
0.6966667	3.805991E-04	6.410312E-03	100.0381	30.2580
1.045	5.923605E-04	7.105867E-03	100.0593	30.2792
1.393333	8.198087E-04	7.85219E-03	100.082	30.3020
1.741667	1.064063E-03	8.652786E-03	100.1065	30.3265
2.09	1.326314E-03	9.511372E-03	100.1328	30.3528
2.438333	1.607832E-03	1.043188E-02	100.161	30.3810
2.786667	1.909966E-03	1.141848E-02	100.1914	30.4113
3.135	2.234151E-03	1.247556E-02	100.2239	30.4439
3.483333	2.58191E-03	1.360775E-02	100.2589	30.4788
3.831667	2.954856E-03	1.481994E-02	100.2964	30.5163
4.18	3.354701E-03	1.611726E-02	100.3366	30.5566
4.528333	3.783253E-03	1.750508E-02	100.3798	30.5997
4.876667	4.242425E-03	1.898905E-02	100.426	30.6460
5.225	4.734232E-03	2.057503E-02	100.4757	30.6956
5.573334	0.0052608	2.226917E-02	100.5288	30.7488
5.921667	5.824361E-03	2.407782E-02	100.5858	30.8058
6.27	6.427262E-03	2.600759E-02	100.6469	30.8668

5.5.6 Gráfica de "perfiles de composición (x_p, y_p) con respecto a altura de la torre"

Perfiles de conc. con respecto a altura

Sistema: "Acetona-Agua" (Mezcla Diluida)

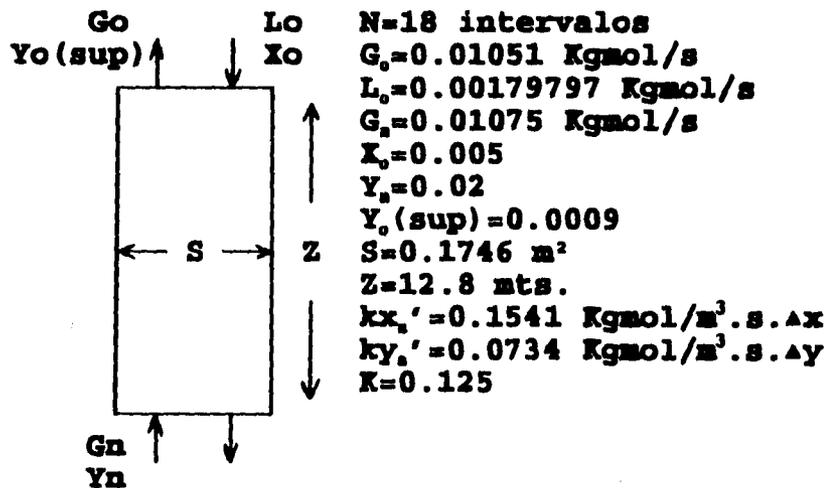


ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

5.5.7 Problema 3 Sistema "Benceno - Aceite de Lavado"

Un gas de alumbrado se va a liberar del aceite ligero lavándolo con un aceite de lavado como absorbente.

Gas entrante $0.250 \text{ m}^3/\text{s}$ a 26°C ; $P_t = 1.07 \cdot 10^5 \text{ N/m}^2$ (803 mm Hg) contendrá 2.0% en volumen de vapores de aceite ligero. Se supone que todo el aceite ligero es benceno y que se requiere un 96% de eliminación. El aceite de lavado va a entrar a 26°C , contendrá 0.005 fracción mol de Benceno y tendrá un peso molecular promedio de 260, se va a utilizar un flujo de circulación de aceite de 1.5 veces la mínima. Las soluciones de Aceite de Lavado-Benceno son ideales, la temperatura es constante e igual a 26°C .



ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

5.5.8 Perfiles de composición obtenidos por "iteraciones"

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura..ite 1

ALTURA	X_{mol}	Y_{mol}	G_x	G_y
0	0.005	0.0009	1.7979E-03	0.01051
0.7111111	6.462266E-03	1.151491E-03	1.8006E-03	0.01051
1.422222	8.28252E-03	1.465408E-03	1.8039E-03	0.01051
2.133334	1.055133E-02	1.858023E-03	1.8080E-03	0.01052
2.844445	1.338166E-02	2.349902E-03	1.8132E-03	0.01052
3.555556	1.691581E-02	2.967386E-03	1.8197E-03	0.01053
4.266667	2.133384E-02	3.744487E-03	1.8279E-03	0.01054
4.977778	2.686434E-02	4.725474E-03	1.8383E-03	0.01055
5.688889	3.379865E-02	5.968553E-03	1.8515E-03	0.01056
6.4	4.250959E-02	7.551128E-03	1.8684E-03	0.01058
7.111111	5.347611E-02	9.577526E-03	1.8900E-03	0.01060
7.822222	6.731536E-02	1.219049E-02	1.9180E-03	0.01063
8.533333	8.482365E-02	1.558869E-02	1.9547E-03	0.01066
9.244444	0.1070257	2.005369E-02	2.0033E-03	0.01071
9.955555	0.1352272	2.599237E-02	2.0687E-03	0.01078
10.66667	0.1710527	3.400351E-02	2.1581E-03	0.01087
11.37778	0.2164238	4.498225E-02	2.2830E-03	0.01099
12.08889	0.2733779	6.027691E-02	2.4620E-03	0.01174
12.8	0.3435499	8.190093E-02	2.7252E-03	0.01143

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura..ite 2

ALTURA	X_{med}	Y_{med}	G_x	G_y
0	0.005	0.000665	1.7979E-03	0.01051
0.7111111	5.212961E-03	7.015973E-04	1.7983E-03	0.01051
1.422225	5.478652E-03	7.472738E-04	1.7988E-03	0.01051
2.133334	5.810386E-03	8.043331E-04	1.7994E-03	0.01051
2.844445	6.224664E-03	8.756344E-04	1.8001E-03	0.01051
3.555556	6.742103E-03	9.647601E-04	1.8011E-03	0.01051
4.266667	7.388508E-03	1.076207E-03	1.8022E-03	0.01051
4.977778	0.0081962	1.215631E-03	1.8037E-03	0.01051
5.688889	9.205702E-03	1.390156E-03	1.8056E-03	0.01051
6.4	1.046787E-02	1.608776E-03	1.8079E-03	0.01051
7.111111	1.204659E-02	1.882879E-03	1.8107E-03	0.01052
7.822222	0.0140223	2.22693E-03	1.8144E-03	0.01052
8.533333	0.0164964	2.659386E-03	1.8189E-03	0.01053
9.244444	1.959704E-02	3.203903E-03	1.8247E-03	0.01053
9.955555	2.348659E-02	3.891006E-03	1.8320E-03	0.01054
10.66667	2.837142E-02	4.760359E-03	1.8412E-03	0.01055
11.37778	3.451464E-02	5.863968E-03	1.8529E-03	0.01056
12.08889	4.225307E-02	7.270742E-03	1.8679E-03	0.01057
12.8	5.201932E-02	9.073103E-03	1.8871E-03	0.01059

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura..ite 3

ALTURA	X_{med}	Y_{med}	G_x	G_y
0	0.005	7.002588E-04	1.7979E-03	0.01051
0.7111111	5.400603E-03	7.691101E-04	1.7986E-03	0.01051
1.422222	5.90023E-03	8.550449E-04	1.7995E-03	0.01051
2.133334	6.523887E-03	9.624137E-04	1.8007E-03	0.01051
2.844445	7.302605E-03	1.096635E-03	1.8021E-03	0.01051
3.555556	8.275203E-03	1.264517E-03	1.8039E-03	0.01051
4.266667	9.490353E-03	1.474651E-03	1.8061E-03	0.01051
4.977778	1.100917E-02	1.737899E-03	1.8088E-03	0.01052
5.688889	0.129085	2.068042E-03	1.8123E-03	0.01052
6.4	1.528515E-02	2.48264E-03	1.8167E-03	0.01052
7.111111	1.826136E-02	3.004168E-03	1.8222E-03	0.01053
7.822222	2.199182E-02	3.66157E-03	1.8292E-03	0.01054
8.533333	2.667295E-02	4.492392E-03	1.8380E-03	0.01055
9.244444	3.255495E-02	5.54575E-03	1.8491E-03	0.01056
9.955555	0.0399577	6.886556E-03	1.8634E-03	0.01057
10.66667	4.929171E-02	8.601639E-03	1.8817E-03	0.01059
11.37778	6.108557E-02	1.080872E-02	1.9053E-03	0.01061
12.08889	7.602148E-02	1.366994E-02	1.9361E-03	0.01064
12.8	9.497969E-02	1.741258E-02	1.9767E-03	0.01068

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura..ite 4

ALTURA	X_{med}	Y_{med}	G_x	G_y
0	0.005	7.082729E-04	1.7979E-03	0.01051
0.7111111	5.443244E-03	7.844551E-04	1.7987E-03	0.01051
1.422222	5.99601E-03	8.795397E-04	1.7997E-03	0.01051
2.133334	6.685955E-03	9.983446E-04	1.8010E-03	0.01051
2.844445	7.547007E-03	1.146874E-03	1.8025E-03	0.01051
3.555556	8.623328E-03	1.332683E-03	1.8045E-03	0.01051
4.266667	9.96761E-03	1.565306E-03	1.8069E-03	0.01051
4.977778	1.164795E-02	1.85682E-03	1.8100E-03	0.01052
5.688889	1.374952E-02	2.222567E-03	1.8139E-03	0.01052
6.4	1.637971E-02	2.682137E-03	1.8187E-03	0.01053
7.111111	1.967425E-02	3.260665E-03	1.8248E-03	0.01053
7.822222	2.380515E-02	3.990615E-03	1.8326E-03	0.01054
8.533333	2.899105E-02	4.914246E-03	1.8423E-03	0.01055
9.244444	3.551093E-02	6.087085E-03	1.8548E-03	0.01056
9.955555	4.372202E-02	7.58288E-03	1.8707E-03	0.01058
10.66667	5.408348E-02	9.500825E-03	1.8912E-03	0.01060
11.37778	6.718723E-02	1.197645E-02	1.9178E-03	0.01062
12.08889	8.379743E-02	1.519763E-02	1.9526E-03	0.01066
12.8	0.1048987	0.01943	1.9986E-03	0.01071

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura..ite 5

ALTURA	X_{med}	Y_{med}	G_x	G_y
0	0.005	7.100223E-04	1.7979E-03	0.01051
0.7111111	5.452551E-03	7.878046E-04	1.7987E-03	0.01051
1.422222	6.016913E-03	8.848861E-04	1.7998E-03	0.01051
2.133334	6.721325E-03	1.006187E-03	1.8010E-03	0.01051
2.844445	7.600832E-03	1.157841E-03	1.8026E-03	0.01051
3.555556	8.699304E-03	1.347564E-03	1.8046E-03	0.01051
4.266667	1.007177E-02	0.0015851	1.8071E-03	0.01051
4.977778	1.178735E-02	1.882788E-03	1.8103E-03	0.01052
5.688889	1.393306E-02	2.256317E-03	1.8142E-03	0.01052
6.4	0.0166186	2.725722E-03	1.8192E-03	0.01053
7.111111	1.998264E-02	3.316724E-03	1.8254E-03	0.01053
7.822222	2.420098E-02	4.062567E-03	1.8333E-03	0.01054
8.533333	2.949717E-02	5.006561E-03	1.8433E-03	0.01055
9.244444	3.615648E-02	6.205653E-03	1.8560E-03	0.01056
9.955555	4.454439E-02	7.735585E-03	1.8723E-03	0.01058
10.66667	5.513074E-02	9.69836E-03	1.8933E-03	0.01060
11.37778	0.0685214	1.223343E-02	1.9205E-03	0.01063
12.08889	0.0854985	1.553464E-02	1.9562E-03	0.01066
12.8	0.1070693	0.0198763	2.0034E-03	0.01071

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

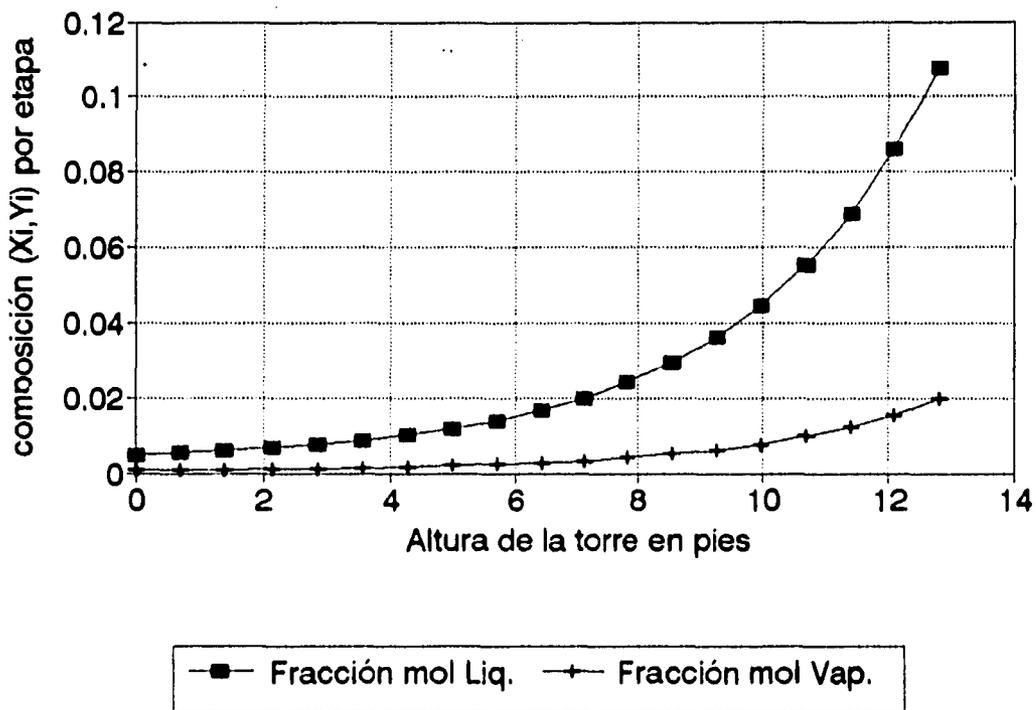
Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura

ALTURA	X_{med}	Y_{med}	G_x	G_y
0	0.005	7.104012E-04	1.7979E-03	0.01051
0.7111111	5.454567E-03	7.885297E-04	1.7987E-03	0.01051
1.422222	6.021438E-03	8.860433E-04	1.7998E-03	0.01051
2.133334	6.728981E-03	1.007885E-03	0.0018011	0.01051
2.844445	0.0076124	1.160216E-03	1.8027E-03	0.01051
3.555556	8.715755E-03	1.350788E-03	1.8047E-03	0.01051
4.266667	1.009433E-02	1.589389E-03	1.8072E-03	0.01051
4.977778	1.181755E-02	1.888416E-03	1.8103E-03	0.01052
5.688889	1.397283E-02	2.263633E-03	1.8143E-03	0.01052
6.4	1.667037E-02	2.735173E-03	1.8193E-03	0.01053
7.111111	2.004949E-02	3.328884E-03	1.8255E-03	0.01053
7.822222	2.428682E-02	4.07818E-03	1.8335E-03	0.01054
8.533333	2.960695E-02	5.026596E-03	1.8435E-03	0.01055
9.244444	3.629653E-02	6.231396E-03	1.8563E-03	0.01056
9.955555	4.472281E-02	7.768743E-03	1.8727E-03	0.01058
10.66667	5.535796E-02	9.741256E-03	1.8938E-03	0.01060
11.37778	6.881088E-02	1.228927E-02	1.9211E-03	0.01063
12.08889	8.586759E-02	1.560788E-02	1.9570E-03	0.01066
12.8	0.1075403	1.997337E-02	2.0045E-03	0.01071

5.5.9 Gráfica de "perfiles de composición (x_i, y_i) con respecto a altura de la torre"

Perfiles de conc. con respecto a altura

Sistema: 'Benceno-Aceite de Lavado'(M.D)



ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

5.6 Datos a alimentar para el caso de mezclas concentradas (Soluciones Reales).

X_n, Y_n : Composiciones del soluto a absorber entrantes a la torre.

L_n, G_n : Flujos de gas y líquido entrantes a la torre.

Z_n : Altura de la torre.

N : Número de intervalos.

k_{ya}', k_{xa}' : Ecuaciones empíricas para la determinación de coeficientes de transferencia de masa en función de:

$$k_{ya}' = f(G_y, G_x), \quad k_{xa}' = f(G_x) : G_x = f(x), \quad G_y = f(y).$$

S : Area de sección transversal del absorbedor.

$A_0, A_1, A_2, \dots, A_n$: Coeficientes obtenidos mediante regresión, de los datos experimentales de Equilibrio x^* vs y^* por medio del modelo de ecuación que se ajusta a éstos del tipo:

$$Y = A_0 + A_1 X + A_2 X^2 + \dots + A_n X^n$$

" $Y_n(\text{supuesta})$ ": Suposición de una composición en la fase gaseosa a la salida de la torre.

Los perfiles serán los correctos, hasta que el programa en forma "iterativa" converja con la composición de la fase gaseosa entrante.

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

5.8 Listado de programa para caso real

```
10 REM SOLUCION DEL MODELO PARA CASO REAL
20 REM ABSORCION DE UN COMPONENTE DE LA FASE VAPOR A
  LA FASE LIQUIDA
30 PRINT "SOLUCION DE LAS ECUACIONES DIFERENCIALES:"
40 PRINT "F(Xj, Yj)=d(LXi)/dZ=Kya'S(Yi-Yj)"
50 PRINT "F(Xj, Yj)=d(GYi)/dZ=-Kxa'S(Xi-Xj)"
60 PRINT "F(Xj, Yj)=dL/dZ=Kya'S(Yi-Yj)"
70 PRINT "F(Xj, Yj)=dG/dZ=-Kxa'S(Xi-Xj)"
80 INPUT "Kya'= ";KYA:INPUT "Kxa'= ";KXA:INPUT "S= ";S
90 INPUT "N= ";N:INPUT "X0= ";X0:INPUT
  "YN= ";YN:INPUT "ZN= ";ZN
100 INPUT "K= ";K:INPUT "G0= ";G0:INPUT "L0= ";L0
110 DIM X(N+1),Y(N+1),L(N+1),G(N+1),Z(N+1)
120 X(0)=X0:Y(N)=YN:L(0)=L0:G(0)=G0:Z(0)=Z0
130 H=ZN/N
140 DEF FN F1(Y, YJ)=KYA*S*(Y-YJ)
150 DEF FN F2(X, XJ)=-KXA*S*(X-XJ)
185 INPUT "Y(0)supuesta= ";Y(0):YY0=Y(0)
190 I=0:X=X(0):Y=Y(0)
210 GOSUB 1000
220 L1=FN F1(Y, YJ)
230 G1=FN F2(X, XJ)
240 Z=Z(I)+H/3
250 L=L(I)+L1*H/3
260 G=G(I)+G1*H/3
270 LX=L(I)*X(I)+L1*H/3
280 GY=G(I)*Y(I)+G1*H/3
290 X=LX/L(I):Y=GY/G(I)
300 GOSUB 1000
310 L2=FN F1(Y, YJ)
320 G2=FN F2(X, XJ)
330 Z=Z(I)+H*2/3
340 L=L(I)-H*L1/3+H*L2
350 G=G(I)-H/3*G1+H*G2
360 LX=L(I)*X(I)-H/3*L1+H*L2
370 GY=G(I)*Y(I)-H/3*G1+H*G2
```

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

```
380 X=LX/L(I):Y=GY/G(I)
390 GOSUB 1000
400 L3=FN F1(Y,YJ)
410 G3=FN F2(X,XJ)
420 Z=Z(I)+H
430 L=L(I)+H*L1-H*L2+H*L3
440 G=G(I)+H*G1-H*G2+H*G3
450 LX=L(I)*X(I)+H*L1-H*L2+H*L3
460 GY=G(I)*Y(I)+H*G1-H*G2+H*G3
470 X=LX/L(I):Y=GY/G(I)
480 GOSUB 1000
490 L4=FN F1(Y,YJ)
500 G4=FN F2(X,XJ)
510 LX=L(I)*X(I)+H/8*(L1+3*L2+3*L3+L4)
520 GY=G(I)*Y(I)+H/8*(G1+3*G2+3*G3+G4)
530 L(I+1)=L(I)+H/8*(L1+3*L2+3*L3+L4)
540 G(I+1)=G(I)+H/8*(G1+3*G2+3*G3+G4)
550 X(I+1)=LX/L(I+1)
560 Y(I+1)=GY/G(I+1)
570 Z(I+1)=Z(I)+H
580 IF I=N THEN GOTO 610
590 I=I+1
600 GOTO 210
610 IF ABS(Y(N)-YN)<=0.0001 THEN A$="Perfiles de concentración y
    flujos con respecto a altura":GOSUB 630:END
620 ITE%=ITE%+1:A$="Perfiles de concentración y flujos con respecto
    a altura..iteración"+STR$(ITE%):GOSUB 630: IF ITE%=1 THEN
    F0=YN-Y(N):YY1=Y(0)+
    SGN(YN-Y(N))*(Y(0)*0.25+
    0.00001):Y(0)=YY1:GOTO 190 ELSE IF ITE%=2 THEN
    F1=YN Y(N) :GOTO 625
621 F=YN-Y(N):IF F*F0<0 THEN YY1=YY:F1=F ELSE
    YY0=YY:F0=F
625 YY=(YY0*F1-YY1*F0)/(F1-F0):Y(0)=YY:GOTO 190
630 CLS:LOCATE ,(80-LEN(A$))/2:COLOR 0,7:PRINT A$:COLOR
    7,0:A$=SPACE$(14)
631 PRINT"  ┘";FOR I=1 TO 4:PRINT
    STRING$(14,"-");"┘";NEXT I:PRINT
```

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

```

STRING$(14,"—");"⌋";LOCATE 3,3:PRINT" | ALTURA | Fracc.
mol liq | Fracc. mol vap | Flujo liquido | Flujo vapor | ";LOCATE
4,3:PRINT" ⌋";
632 FOR I=1 TO 4:PRINT
STRING$(14,"—");"⌋";NEXT I:PRINT STRING$(14,"—");"⌋";

635 FOR I=0 TO N:LOCATE
5+1,3:PRINT" | ";LEFT$(STR$(Z(I))+A$,14);
" | ";LEFT$(STR$(STR$(X(I)+A$,14));" | "
;LEFT$(Y(I)+A$,14);" | ";
LEFT$(STR$(L(I)+A$,14);" | ";
LEFT$(STR$(G(I)+A$,14);" | ";NEXT I
640 LOCATE 5+1,3:PRINT" ⌋";FOR I=1 TO 4:PRINT
STRING$(14,"—");; NEXT I:PRINT
STRING$(14,"—");"⌋";LOCATE 25,21:
PRINT "Para continuar presione cualquier
tecla";A$=INPUT$(I):PRINT
660 RETURN
900 REM SUBROUTINA PARA EVALUAR COEFICIENTES DE
TRANSFERENCIA DE MASA: Kya', Kra'
910 GY=(0.000653*29+0.000653*(Y/I-Y)*64.1)/0.929
920 GX=(0.042*18+0.042*(X/I-X)*64.1)/0.0929
930 KYA=0.0594*GY^0.7*GX^0.25
940 KXA=0.152*GX^0.82:GOTO 1030
1000 REM SUBROUTINA PARA EVALUAR COMPOSICIONES EN EL
EQUILIBRIO (Xj,Yj)
1010 REM CALCULO DE LA COMPOSICION DE LA FASE LIQUIDA
EN EL EQUILIBRIO MEDIANTE EL METODO DE
"NEWTON-RAPHSON"
1020 REM Xj+1=Xj-f(Xj)/f'(Xj)
1030 FF=0:FF=FF+FN F(X,Y)
1040 IF ABS(FF) <= 0.0005 THEN GOTO 1080
1050 DD=0:DD=DD+FN DF(X,Y)
1060 XJ=XJ-FF/DD
1070 GOTO 1030
1080 YJ=A0+A1*ABS(XJ)+A2*ABS(XJ)^2
1090 RETURN

```

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

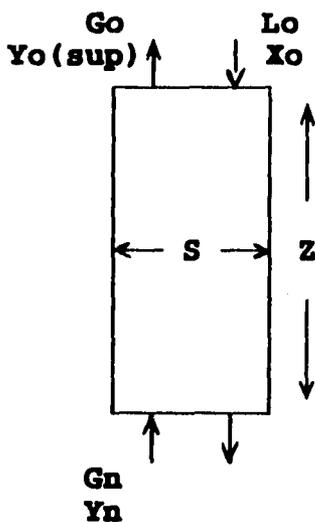
5.9 Problemas propuestos:

5.9.1 Problema 1 Sistema: "SO₂ - H₂O"

Se desea diseñar una torre empacada con anillos cerámicos de 25.4 mm para absorber SO₂ del aire mediante agua pura a 293°K y 1.03*10⁵ Pa. de presión absoluta. El gas de entrada contiene 20% en mol de SO₂, y el que sale 2% en mol. El flujo de aire inerte es 6.53*10⁴ Kgmol de aire/s. y el flujo de agua inerte es 4.20*10³ Kgmol de agua/s. El área de sección transversal de la torre es 0.0929 m². Para SO₂, diluido. Los coeficientes de transferencia de masa de película a 293°K son para anillos de 25.4 mm (1plg)(W1).

$$k_{ya}' = 0.0594 \text{ y}^{0.7} \text{ Gx}^{0.25} ; k_{xa}' = 0.152 \text{ Gx}^{0.25}$$

donde k_{ya}' es $\text{kgmol/s.m}^2 \cdot \text{frac.mol}$, k_{xa}' es $\text{kgmol/s.m}^2 \cdot \text{frac.mol Gx}$ y G_x y G_y son Kg totales de líquido o gas respectivamente por seg por m² de sección transversal de la torre.



Datos a alimentar para el programa

N=18 intervalos
G_o=0.000666 Kgmol/s
L_o=0.04200 Kgmol/s
X_o=0
Y_o=0.2
Y_o(sup)=0.0095
S=0.0929 m²
Z=1.588 mt.
A_o=-0.005473
A₁=30.52368
A₂=124.4327

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Datos de equilibrio para el sistema: SO₂ - H₂O a 293°K

X	Y
0.0000565	0.0000
0.0000562	0.000658
0.0001403	0.00421
0.000422	0.00763
0.000564	0.01120
0.000842	0.01855
0.001403	0.0342
0.001965	0.0513
0.00279	0.0775
0.00420	0.121
0.00698	0.212
0.01385	0.443
0.0206	0.682
0.0273	0.917

Efectuando "Regresión lineal" para modelo del tipo:

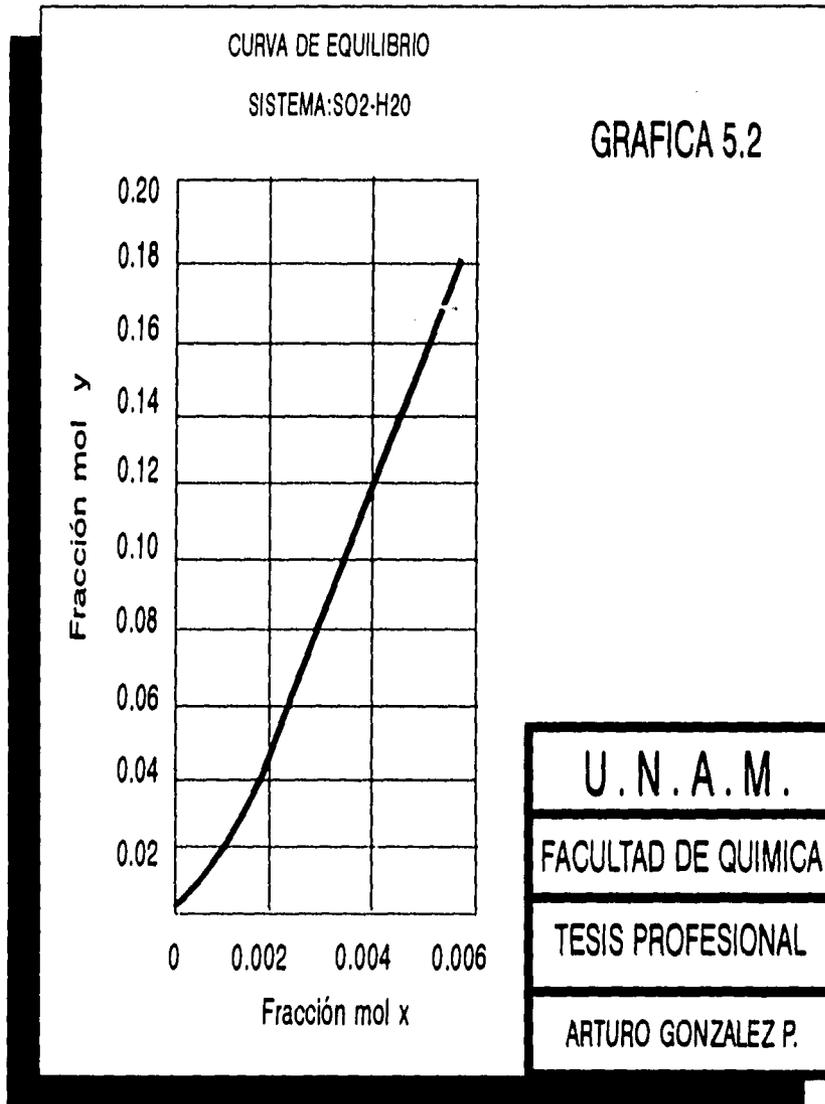
$$Y = A_0 + A_1X_1 + A_2X_2^2 + \dots + A_nX^n$$

$$r^2 = 0.999853$$

$$A_0 = -0.003717$$

$$A_1 = 30.52368$$

$$A_2 = 124.4327$$



ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

5.9.2 Perfiles de composición obtenidos por "iteraciones"

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura..ite 1

ALTURA	X _{mol}	Y _{mol}	G _x	G _y
0	0	0.0095	0.042	.000666
8.8222E-02	5.44512E-05	1.172987E-02	4.2002E-02	.000667
0.1764445	1.147592E-04	1.368846E-02	4.2004E-02	.000668
0.2646667	1.872071E-04	1.504117E-02	4.2007E-02	.000697
0.3528889	2.663566E-04	1.560332E-02	4.2011E-02	.000670
0.4411112	3.464057E-04	1.534139E-02	4.2014E-02	.000669
0.5293334	4.220828E-04	1.427703E-02	4.2017E-02	.000669
0.6175556	4.884532E-04	1.247614E-02	4.2025E-02	.000668
0.7057778	5.411388E-04	1.004988E-02	4.2022E-02	.000666
0.794	5.766108E-04	7.15052E-03	4.2024E-02	.000664
0.8822222	5.924295E-04	3.963846E-03	0.0420249	.000662
0.9704444	5.874218E-04	6.989195E-04	4.2024E-02	.000660
1.058667	5.61788E-04	-2.42457E-03	4.2023E-02	.000658
1.146889	5.171232E-04	-5.19109E-03	4.2021E-02	.000656
1.235111	4.563437E-04	-7.40517E-03	4.2019E-02	.000654
1.323333	3.835135E-04	-8.90714E-03	4.2016E-02	.000653
1.411556	3.035764E-04	-9.58678E-03	4.2012E-02	.000653
1.499778	2.220092E-04	-9.39336E-03	4.2009E-02	.000653
1.588	1.444249E-04	-8.34043E-03	4.2006E-02	.000654

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura..ite 2

ALTURA	X_{med}	Y_{med}	G_x	G_y
0	0	0.011885	0.042	.000666
8.8222E-02	6.517516E-05	1.445265E-02	4.2002E-02	.000667
0.1764445	1.445839E-04	1.626879E-02	4.2006E-02	.000668
0.2646667	2.3292E-04	1.721707E-02	4.2009E-02	.000669
0.3528889	3.176016E-04	1.758955E-02	4.2013E-02	.000669
0.4411112	3.640457E-04	1.976663E-02	4.2015E-02	.000671
0.5293334	4.229993E-04	2.140999E-02	4.2017E-02	.000672
0.6175556	4.905159E-04	2.240471E-02	4.2020E-02	.000673
0.7057778	5.621092E-04	2.269066E-02	4.2023E-02	.000673
0.794	6.331352E-04	2.225194E-02	4.2026E-02	.000673
0.8822222	6.99006E-04	2.111578E-02	4.2029E-02	.000672
0.9704444	7.554544E-04	1.935178E-02	4.2031E-02	.000671
1.058667	7.987964E-04	1.706884E-02	4.2033E-02	.000669
1.146889	8.261628E-04	1.440993E-02	4.2034E-02	.000667
1.235111	8.35691E-04	1.154464E-02	4.2035E-02	.000665
1.323333	8.266614E-04	8.659716E-03	4.2034E-02	.000663
1.411556	7.995692E-04	5.947405E-03	4.2033E-02	.000662
1.499778	7.561189E-04	3.592491E-03	4.2031E-02	.000660
1.588	6.991354E-04	1.758668E-03	4.2029E-02	.000659

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura...ite 3

ALTURA	X_{med}	Y_{med}	G_x	G_y
0	0	5.870161E-02	0.042	.000666
8.8222E-02	2.168558E-04	6.908166E-02	4.2009E-02	.000673
0.1764445	4.452254E-04	7.987515E-02	4.2018E-02	.000681
0.2646667	6.849805E-04	0.0910333	4.2028E-02	.000689
0.3528889	9.362563E-04	0.1025023	4.2039E-02	.000698
0.4411112	1.198739E-03	0.1142397	4.2050E-02	.000707
0.5293334	1.47196E-03	0.126201	4.2061E-02	.000717
0.6175556	1.755362E-03	0.1383389	4.2073E-02	.000727
0.7057778	2.048289E-03	0.150604	4.2086E-02	.000738
0.794	0.00235	0.1629464	4.2098E-02	.000748
0.8822222	2.659672E-03	0.1753164	4.2112E-02	.000760
0.9704444	2.976419E-03	0.1876652	4.2125E-02	.000771
1.058667	3.299298E-03	0.199946	4.2139E-02	.000783
1.146889	3.62733E-03	0.2121145	0.0421529	.000795
1.235111	3.959508E-03	0.2241295	4.2166E-02	.000808
1.323333	4.294817E-03	0.2359534	4.2181E-02	.000820
1.411556	4.632241E-03	0.2475526	4.2195E-02	.000833
1.499778	4.97078E-03	0.2588976	4.2209E-02	.000845
1.588	5.309463E-03	0.2699631	4.2224E-02	.000858

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura..ite 4

ALTURA	X_{med}	Y_{med}	G_x	G_y
0	0	4.633275E-02	0.042	.000666
8.8222E-02	1.654252E-04	5.557489E-02	4.2006E-02	.000672
0.1764445	3.571532E-04	6.430893E-02	4.2015E-02	.000678
0.2646667	5.68985E-04	7.285803E-02	4.2023E-02	.000685
0.3528889	7.77458E-04	8.214615E-02	4.2032E-02	.000691
0.4411112	9.893701E-04	9.192657E-02	4.2041E-02	.000699
0.5293334	1.208755E-03	0.1019648	4.2050E-02	.000707
0.6175556	1.438124E-03	0.1122806	4.2060E-02	.000715
0.7057778	1.677445E-03	0.1228124	4.2070E-02	.000724
0.794	1.926217E-03	0.1335164	4.2081E-02	.000733
0.8822222	2.183907E-03	0.1443522	4.2091E-02	.000742
0.9704444	2.449924E-03	0.155278	4.2103E-02	.000751
1.058667	2.723599E-03	0.1662521	4.2114E-02	.000761
1.146889	3.004199E-03	0.1772329	4.2126E-02	.000771
1.235111	3.290938E-03	0.1881804	4.2138E-02	.000782
1.323333	3.582981E-03	0.1990562	4.2151E-02	.000792
1.411556	3.879464E-03	0.2098243	4.2163E-02	.000803
1.499778	4.179505E-03	0.2204514	4.2176E-02	.000814
1.588	4.482211E-03	0.2309074	4.2189E-02	.000825

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura..ite 5

ALTURA	X_{med}	Y_{med}	G_x	G_y
0	0	4.157448E-02	0.042	.000666
8.8222E-02	1.540698E-04	0.0497684	4.2006E-02	.000671
0.1764445	3.289132E-04	5.758722E-02	4.2013E-02	.000677
0.2646667	5.200531E-04	6.535655E-02	4.2021E-02	.000682
0.3528889	7.082685E-04	7.382847E-02	4.2029E-02	.000689
0.4411112	8.998485E-04	8.278793E-02	4.2037E-02	.000695
0.5293334	1.104307E-03	9.153154E-02	4.2046E-02	.000702
0.6175556	1.327273E-03	0.1002299	4.2055E-02	.000709
0.7057778	1.54681E-03	0.1095221	4.2065E-02	.000716
0.794	0.0017687	0.1191773	4.2074E-02	.000724
0.8822222	1.996427E-03	0.1289886	4.2084E-02	.000732
0.9704444	2.232303E-03	0.1389745	4.2093E-02	.000741
1.058667	2.476156E-03	0.1490771	4.2104E-02	.000750
1.146889	2.727381E-03	0.1592569	4.2114E-02	.000759
1.235111	2.985367E-03	0.1694784	4.2125E-02	.000768
1.323333	3.249468E-03	0.1797064	4.2136E-02	.000778
1.411556	3.518994E-03	0.1899064	4.2148E-02	.000787
1.499778	3.793217E-03	0.2000456	4.2159E-02	.000797
1.588	4.071385E-03	0.2100929	4.2171E-02	.000808

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura..ite 6

ALTURA	X _{med}	Y _{med}	G _x	G _y
0	0	4.009245E-02	0.042	.000666
8.8222E-02	1.507841E-04	4.794029E-02	4.2006E-02	.000671
0.1764445	3.203852E-04	5.545836E-02	4.2013E-02	.000676
0.2646667	5.049253E-04	6.297551E-02	4.2021E-02	.000682
0.3528889	6.866457E-04	7.118283E-02	4.2028E-02	.000688
0.4411112	8.717069E-04	0.07974	4.2036E-02	.000694
0.5293334	1.069363E-03	8.836542E-02	4.2044E-02	.000701
0.6175556	1.285127E-03	9.682173E-02	4.2054E-02	.000707
0.7057778	1.497774E-03	0.1058662	0.042063	.000714
0.794	1.71279E-03	0.1152822	4.2072E-02	.000722
0.8822222	1.939844E-03	0.1243836	4.2081E-02	.000730
0.9704444	2.184258E-03	0.1333609	4.2091E-02	.000737
1.058667	2.415656E-03	0.1431219	0.0421017	.000746
1.146889	2.655524E-03	0.1529422	4.2111E-02	.000754
1.235111	2.90204E-03	0.1628416	4.2122E-02	.000763
1.323333	3.154544E-03	0.172792	4.2132E-02	.000772
1.411556	3.412513E-03	0.1827613	4.2143E-02	.000782
1.499778	3.675359E-03	0.1927188	4.2154E-02	.000791
1.588	3.942457E-03	0.2026352	4.2166E-02	.000801

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura..ite 7

ALTURA	X _{med}	Y _{med}	G _x	G _y
0	0	3.971034E-02	0.042	.000666
8.8222E-02	1.492795E-04	4.751219E-02	4.2000E-02	.000671
0.1764445	3.174479E-04	5.498375E-02	4.2013E-02	.000676
0.2646667	5.006037E-04	6.244917E-02	4.2021E-02	.000682
0.3528889	6.810035E-04	7.060098E-02	4.2028E-02	.000688
0.4411112	8.647222E-04	.0792364	4.2036E-02	.000694
0.5293334	1.060974E-03	8.767542E-02	4.2044E-02	.000701
0.6175556	1.275248E-03	9.608139E-02	4.2053E-02	.000707
0.7057778	1.486471E-03	0.1050741	4.2062E-02	.000714
0.794	1.700064E-03	0.1144402	4.2071E-02	.000722
0.8822222	1.925663E-03	0.1234959	4.2081E-02	.000729
0.9704444	2.16858E-03	0.1324305	4.2091E-02	.000737
1.058667	2.398614E-03	0.1421482	4.2100E-02	.000745
1.146889	2.637128E-03	0.1519281	4.2111E-02	.000754
1.235111	2.88231E-03	0.1617901	4.2121E-02	.000762
1.323333	3.133512E-03	0.1717065	4.2132E-02	.000772
1.411556	3.390216E-03	0.1816451	4.2142E-02	.000781
1.499778	3.651843E-03	0.1915755	4.2153E-02	.000791
1.588	3.917772E-03	0.2014684	0.0421652	.000800

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura..ite 8

ALTURA	X _{msl}	Y _{msl}	G _x	G _y
0	0	0.0394989	0.042	.000666
8.8222E-02	1.486409E-04	4.726245E-02	4.2006E-02	.000671
0.1764445	3.160401E-04	0.054699	4.2013E-02	.000676
0.2646667	4.983352E-04	6.213173E-02	4.2020E-02	.000682
0.3528889	6.778983E-04	0.0702489	4.2028E-02	.000688
0.4411112	8.607726E-04	7.884926E-02	4.2036E-02	.000694
0.5293334	1.056141E-03	8.725528E-02	4.2044E-02	.000700
0.6175556	1.269479E-03	9.562951E-02	4.2053E-02	.000707
0.7057778	1.479806E-03	0.1045897	4.2062E-02	.000714
0.794	1.692503E-03	0.1139243	4.2071E-02	.000721
0.8822222	1.917186E-03	0.1229511	4.2080E-02	.000729
0.9704444	2.15916E-03	0.1318587	4.2090E-02	.000736
1.058667	2.388335E-03	0.141549	4.2100E-02	.000745
1.146889	2.625993E-03	0.1513033	4.2110E-02	.000753
1.235111	2.870334E-03	0.1611416	4.2120E-02	.000762
1.323333	3.120731E-03	0.1710363	4.2131E-02	.000771
1.411556	3.376618E-03	0.1809554	0.0421423	.000781
1.499778	3.637473E-03	0.1908686	4.2153E-02	.000790
1.588	3.902662E-03	0.2007465	4.2164E-02	.000800

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura..ite 9

ALTURA	X _{med}	Y _{med}	G _x	G _y
0	0	3.939179E-02	0.042	.000666
8.8222E-02	1.483295E-04	4.713512E-02	4.2006E-02	.000671
0.1764445	3.153403E-04	5.455335E-02	4.2013E-02	.000676
0.2646667	4.971933E-04	6.196926E-02	0.0420209	.000682
0.3528889	6.763257E-04	7.006836E-02	4.2028E-02	.000687
0.4411112	8.587657E-04	7.865095E-02	0.0420361	.000694
0.5293334	1.05368E-03	8.703998E-02	4.2044E-02	.000700
0.6175556	1.266536E-03	9.539788E-02	4.2053E-02	.000707
0.7057778	1.476402E-03	0.1043413	4.2062E-02	.000714
0.794	1.688639E-03	0.1136596	4.2071E-02	.000721
0.8822222	1.912851E-03	0.1226716	0.0420805	.000729
0.9704444	2.154339E-03	0.1315652	4.2090E-02	.000736
1.058667	2.383071E-03	0.1412414	4.2100E-02	.000744
1.146889	2.620289E-03	0.1509825	4.2110E-02	.000753
1.235111	2.864197E-03	0.1608085	4.2120E-02	.000762
1.323333	3.114151E-03	0.1706921	4.2131E-02	.000771
1.411556	3.369644E-03	0.1806012	4.2142E-02	.000780
1.499778	3.630102E-03	0.1905054	4.2153E-02	.000790
1.588	3.89491E-03	0.2003756	4.2164E-02	.000800

ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura..ite 10

ALTURA	X_{med}	Y_{med}	G_x	G_y
0	0	3.933799E-02	0.042	.000666
8.8222E-02	1.481738E-04	4.707113E-02	4.2006E-02	.000671
0.1764445	3.149897E-04	5.448012E-02	4.2013E-02	.000676
0.2646667	4.966205E-04	6.188756E-02	4.2020E-02	.000682
0.3528889	6.75536E-04	6.997796E-02	0.0420284	.000687
0.4411112	8.577574E-04	7.855121E-02	4.2036E-02	.000694
0.5293334	1.052443E-03	0.0869317	4.2044E-02	.000700
0.6175556	1.265057E-03	9.528139E-02	4.2053E-02	.000707
0.7057778	1.474691E-03	0.1042164	4.2062E-02	.000714
0.794	1.686696E-03	0.1135265	4.2070E-02	.000721
0.8822222	1.910671E-03	0.122531	4.2080E-02	.000729
0.9704444	2.151915E-03	0.1314176	4.2090E-02	.000736
1.058667	2.380424E-03	0.1410866	4.2100E-02	.000744
1.146889	2.61742E-03	0.1508211	4.2110E-02	.000753
1.235111	2.861109E-03	0.1606409	4.2120E-02	.000762
1.323333	3.110851E-03	0.1705188	4.2131E-02	.000771
1.411556	3.366135E-03	0.1804228	4.2141E-02	.000780
1.499778	3.626392E-03	0.1903226	4.2152E-02	.000790
1.588	3.891008E-03	0.2001889	4.2164E-02	.000799

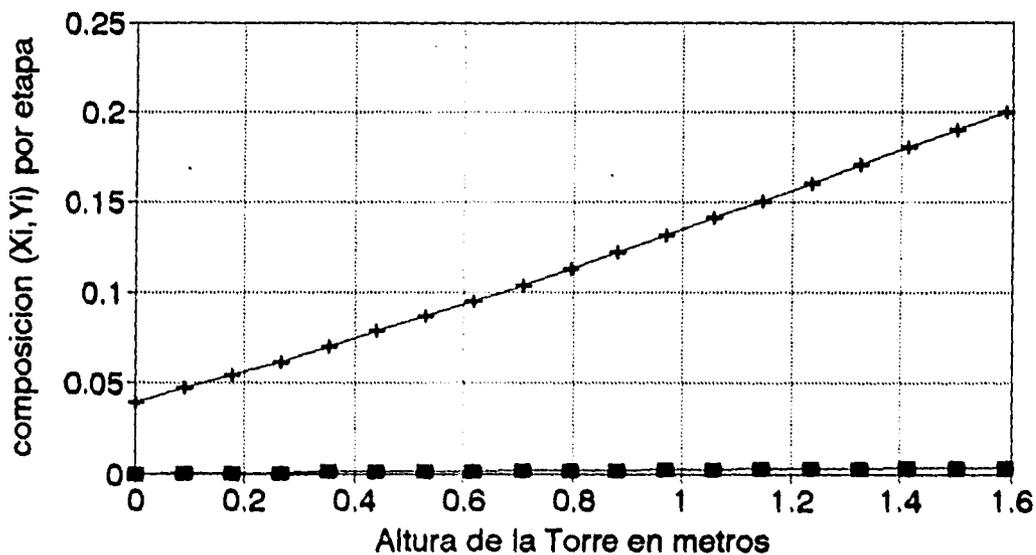
ELABORACION DE PROGRAMA COMPUTACIONAL

Perfiles de concentración y flujos con respecto a altura

ALTURA	X_{med}	Y_{med}	G_x	G_y
0	0	3.931097E-02	0.042	.000666
8.8222E-02	1.480955E-04	4.703899E-02	4.2006E-02	.000671
0.1764445	3.148135E-04	5.444333E-02	4.2013E-02	.000676
0.2646667	4.963326E-04	6.184653E-02	4.2020E-02	.000681
0.3528889	6.751394E-04	6.993243E-02	4.2028E-02	.000687
0.4411112	8.572512E-04	7.850111E-02	4.2036E-02	.000694
0.5293334	1.051822E-03	0.0868773	4.2044E-02	.000700
0.6175556	1.264314E-03	9.522286E-02	4.2053E-02	.000707
0.7057778	1.473831E-03	0.1041536	4.2061E-02	.000714
0.794	1.68572E-03	0.1134596	4.2070E-02	.000721
0.8822222	1.909576E-03	0.1224603	4.2080E-02	.000729
0.9704444	2.150697E-03	0.1313434	4.2090E-02	.000736
1.058667	2.379094E-03	0.1410089	4.2100E-02	.000744
1.146889	2.615978E-03	0.15074	4.2110E-02	.000753
1.235111	2.859558E-03	0.1605567	4.2120E-02	.000762
1.323333	3.109192E-03	0.1704318	4.2130E-02	.000771
1.411556	3.364373E-03	0.1803332	4.2141E-02	.000780
1.499778	3.624529E-03	0.1902307	4.2152E-02	.000790
1.588	3.889049E-03	0.200095	4.2163E-02	.000799

5.9.3 Gráfica de "perfiles de composición (x,y) con respecto a altura de la torre"

Perfiles de composición con resp. altura
Mezcla concentrada: SO₂-H₂O



—■— Fracc. mol liquido —+— Fracc. mol vapor

CAPITULO 6

RECOMENDACIONES Y CONCLUSIONES

CAPITULO 6

RECOMENDACIONES Y CONCLUSIONES

RECOMENDACIONES

Se recomienda, para resolver de la mejor manera y con mayor precisión las ecuaciones diferenciales que describen el comportamiento de una torre de absorción isotérmica de contacto continuo, los siguientes aspectos:

1.- Datos experimentales de equilibrio (x^ , y^*) para sistemas "Liq- Gas" a una presión y temperatura determinada para los casos siguientes:*

SOLUCIONES IDEALES: *Obtención de la constante de equilibrio K mediante técnicas de regresión lineal para modelo del tipo:*

$$Y^* = KX^*$$

SOLUCIONES REALES: *Obtención de coeficientes $A_0, A_1, A_2, \dots, A_n$ del modelo polinomial:*

$$Y = A_0 + A_1X_1 + A_2X_2^2 + \dots + A_nX^n$$

que mejor se ajuste a los datos de la curva de equilibrio experimental, mediante la técnica de mínimos cuadrados (Regresión no lineal).

2.- Considerar un número de intervalos mayor de 10, en la medida que se tenga un mayor número de segmentos diferenciales y por consiguiente secciones diferenciales más pequeñas se tendrán valores de composición y flujos más precisos

3.- Obtener datos experimentales de composición tomando muestras para las diferentes etapas que integran la altura de la torre, para comparar éstas con las obtenidas del modelo computacional desarrollado. Para de esta forma, poder saber que tan confiable es la predicción de la transferencia de masa.

4.- Utilizar como una muy buena aproximación a la solución de las ecuaciones diferenciales los métodos numéricos de Runge-Kutta de orden $n=4$

RECOMENDACIONES Y CONCLUSIONES

así como el método de Newton-Raphson en la búsqueda de raíces para un polinomio de grado n.

5.- Definir correcta y totalmente lo siguiente:

Número de intervalos a lo largo de la torre, los flujos de alimentación y composiciones entrantes a la torre, coeficientes de transferencia de masa globales, sección y altura de la torre predeterminadas. Estos serán los datos necesarios básicos para poder correr el programa.

6.- Para el caso del modelo real, contar con ecuaciones empíricas para el cálculo de coeficientes de transferencia de masa en función de los flujos máxicos:

$$k_{ya}' = f(G_1), \quad k_{xa}' = f(G_1, G_2)$$

ya que éstos varían a lo largo de la torre.

7.- Suponer una composición $Y_0(\text{sup})$ saliente, regularmente cercana a la de condición de proceso para poder obtener varias iteraciones previas y así conocer el comportamiento del método antes de que éste converja a la solución.

RECOMENDACIONES Y CONCLUSIONES

CONCLUSIONES

1.- La ecuación resultante de los balances de materia para un único componente que se transfiere es la que se deriva únicamente por contribución de transporte molecular siendo ésta la ecuación de **FICK**.

2.- Las técnicas de Runge-Kutta de orden 4 fueron buenos métodos en la solución de los casos propuestos, converjeron rápidamente a la solución en un promedio de 4 a 5 iteraciones para el modelo ideal.

Para el caso del modelo real se requirió un mayor número de iteraciones para que el método converjiera a la solución.

3.- Para el modelo real la técnica de Newton-Raphson fue un buen método para encontrar las raíces positivas de las composiciones en la fase líquida en el equilibrio, como resultado de considerar la curva experimental de equilibrio al modelo polinomial parabólico de grado $n=2$ de la forma:

$$Y = A_0 + A_1 X_1 + A_2 X_2^2$$

(interacción con el equilibrio cap.4)

4.- Del sistema: SO_2-H_2O para modelo ideal donde no se contaba con el dato de la constante de equilibrio K los datos experimentales de la curva de equilibrio se ajustaron al modelo del tipo lineal:

$$Y^* = KX^*$$

dando coeficientes de correlación r^2 muy cercanos a 1 derivando de esto que el modelo de tipo lineal se ajuste perfectamente a los datos experimentales de la curva de equilibrio.

5.- La curva de equilibrio para el caso de mezclas concentradas se ajustó al modelo polinomial de grado $n=2$ para la determinación de los coeficientes A_0, A_1, A_2 de la forma:

$$Y = A_0 + A_1 X_1 + A_2 X_2^2$$

RECOMENDACIONES Y CONCLUSIONES

Dando un coeficiente de correlación r^2 muy cercano a 1 lo cual nos indica que el modelo polinomial de grado $n=2$ se ajusta perfectamente a los datos experimentales de la curva de equilibrio.

6.- Los tiempos de procesamiento de cálculo para el modelo ideal fue de aproximadamente de 2 a 3 minutos, y para el modelo real de entre 4 a 5 minutos.

BIBLIOGRAFIA

BIBLIOGRAFIA

ALAN S. FOUST
PRINCIPIOS DE OPERACIONES UNITARIAS
EDITORIAL C.E.C.S.A. S.A. 1987 SEGUNDA EDICION

ROBERT E. TREYBAL
OPERACIONES DE TRANSFERENCIA DE MASA
EDITORIAL Mc.GRAW-HILL 1980 SEGUNDA EDICION

WARREN L. MC. CABE
OPERACIONES BASICAS DE INGENIERIA QUIMICA
EDITORIAL REVERTE, S.A. 1981

CHRISTIE J. GEANKOPLIS
PROCESOS DE TRANSPORTE Y OPERACIONES UNITARIAS
EDITORIAL C.E.C.S.A. S.A. 1982 PRIMERA EDICION

PHILLIP C. WANKAT
SEPARATIONS IN CHEMICAL ENGINEERING EQUILIBRIUM
STAGED SEPARATIONS
PTR PRENTICE HALL

CHARLES D. HOLLAND
FUNDAMENTOS Y MODELOS DE PROCESOS DE SEPARACION
EDITORIAL PRENTICE/HALL INTERNATIONAL, 1981 PRIMERA
EDICION

JAMES R. WELTY
FUNDAMENTALS OF MOMENTUM, HEAT AND MASS TRANSFER
JOHN WILEY & SONS, INC.

RAFAEL IRIARTE V. BALDERRAMA
HUGO E. BORRAS GARCIA
ROSSYNELA DURAN CUEVAS
APUNTES DE METODOS NUMERICOS
FACULTAD DE INGENIERIA U.N.A.M.

BIBLIOGRAFIA

**BRICE CARNAHAN
APPLIED NUMERICAL METHODS
EDITORIAL JOHN WILEY & SONS, INC.**