Tes.

UNIVERSIDAD LA SALLE

ESCUELA DE QUIMICA

INCORPORADA A LA U N A.M

"APLICACIONES DEL SOFTWARE MATHEMATICA EN LA SOLUCION DE ALGUNOS PROBLEMAS DE LA INGENIERIA QUIMICA".

T E S I S PROFESIONAL

Que para obtener el título de

Ingeniero Químico

P R E S E N T A.

Alfredo Jiménez Díaz de León.

ASESOR DE TESIS: I. Q Gerardo Múgica Zerecero

México, D.F. Octubre de 1998.

267086

INDICE

INTRODUCCION.

A principio de la década de los 70's se introdujeron en el mercado las calculadoras electrónicas de bolsillo conteniendo funciones especiales para el cálculo de logaritmos, funciones trigonométricas, elevación de potencias etc , lo que constituyo que el uso de la regla de cálculo pasara a la historia.

A finales de la misma década aparecieron las computadoras personales con 212 k bytes de memoria R.A M. con el lenguaje Basic incorporado lo que permitia realizar cálculos técnicos utilizando algoritmos de cálculo numérico

A finales de la década de los 90's han aparecido lenguajes que permiten realizar cálculo simbólico ó algebraico como también se le conoce con computadoras personales, que al incorporar mayor capacidad de memoria y mayor velocidad de procesamiento hacen que estos lenguajes tengan una utilidad inimaginable

La utilización de lenguajes de cálculo simbólico representará sin duda una verdadera revolución en los métodos de enseñanza de múltiples disciplinas que utilizan el lenguaje matemático como herramienta de análisis

El cálculo simbólico permitirá que en la educación se utilice mayor tiempo al análisis de los fenómenos que a la solución de los problemas matemáticos que se emplean como modelos, lo que redundará en un mejor aprovechamiento en el análisis y comprensión de los fenómenos estudiados.

En la ciencia y en la ingeniería el cálculo simbólico es ya hoy día una herramienta indispensable habiéndose ampliado su uso en universidades y centros de investigación de países desarrollados

El presente trabajo es una pequeña muestra del potencial del cálculo simbólico con computadoras personales en aplicaciones de la Ingeniería Química

El lenguaje utilizado en este trabajo es el de Mathematica desarrollado en 1988 en Los estados Unidos de Norteamérica por Stephen Wolfram y un equipo de científicos destacados

Sin duda la incorporación paulatina de este tipo de herramientas en la educación y en las empresas abrirá las puertas a nuevos horizontes no vistos anteriormente.

CAPITULO 1.

1.1 ORIGENES DE LA COMPUTACION MATEMATICA O SIMBOLICA

Con la aparición de los primeros ordenadores digitales, las técnicas del cálculo numérico sufrieron gran impulso Estos primeros ordenadores estuvieron dedicados principalmente a procesos de simulación, optimización, análisis numérico etc En estos años parecía que la única utilidad que los ordenadores podían aportar a las matemáticas era la realización de operaciones numéricas a gran velocidad, y de esta manera comenzó un periodo de desarrollo de técnicas de cálculo numérico

Los avances en el campo de la microelectrónica contribuyeron al abaratamiento de los equipos, y nacieron así los primeros ordenadores personales, desarrollándose una nueva concepción del uso del computador para el cálculo matemático, es decir el trabajo en modo simbólico y exacto. La idea no era nueva , pero no fue hasta mediados de los años cincuenta cuando pudo comenzar a realizarse Los trabajos sobre derivación analítica mediante el computador de Kahrimaniany Nolan en el año de 1953 son considerados como el primer intento del uso de una computadora para la manipulación algebraica formal y los orígenes de una nueva disciplina conocida con varios nombres: cálculo simbólico, cálculo formal ó álgebra computacional

Es a partir de los años sesenta cuando comienzan a surgir los primeros sistemas de cálculo simbólico Dichos sistemas pueden clasificarse en dos grupos

- Sistemas especializados. Normalmente tratan algunos temas específicos en el campo de la matemática aplicada. Muchos de ellos no son interactivos y al estar orientados a especialistas en ciertos temas, resultan difíciles de usar. Algunos ejemplos de esta categoría son MACAULAY (especializado en anillos), LIE (álgebra lineal), GAP (grupos)

- Sistemas generales Estos sistemas sacrifican velocidad en favor de flexibilidad y facilidad de uso. Sus principales características son

- No están restringidos a una aplicación en particular
- Poseen una mejor interfase del usuario
-Permiten el uso interactivo.
-Son válidos para una gran variedad de hardware

Actualmente se están desarrollando de forma paralela ambas tendencias de computación tanto la simbólica como la numérica En el futuro se espera que el camino sea hacia la complementación de ambas corrientes aprovechando las ventajas de cada una; volviéndose así a la forma tradicional del trabajo matemático.

El álgebra computacional se ha convertido en los últimos años por méritos propios en una disciplina autónoma. Son de destacar el aumento de las publicaciones, congresos y revistas especializadas en estos temas

1.2 PRINCIPALES CARACTERISTICAS DE LOS SISTEMAS DE CALCULO SIMBOLICO.

La mayor dificultad que se encuentra en la computación simbólica, con respecto a la numérica, es que el hardware actual no está diseñado para la manipulación de expresiones algebraicas, siendo por tanto más laborioso en algunos casos la programación La precisión de las operaciones para obtener resultados numéricos está bajo la decisión del programador y requiere un control por software de dicha precisión, teniéndose como limitación la memoria disponible
En el cálculo simbólico la mayor parte de los datos son expresiones matemáticas con una apariencia externa similar a las normalmente usadas en las matemáticas En el aspecto de almacenamiento cabe destacar el uso de listas, estructuras de árbol en general estructuras con administración dinámica de memoria

Desde el punto de vista computacional, otra propiedad importante es el uso de la técnica de recursividad. La recursividad permite al programador escribir un programa de manera sencilla pero a costa de una mayor lentitud y uso de demasiada memoria Un proceso recursivo supone el tener iniciado de forma paralela el mismo proceso varias veces pero con parámetros diferentes, con la consiguiente duplicidad de memoria requerida. Si el nivel de recursión es elevado puede llegar a agotarse la memoria

Otra dificultad computacional que se presentó con el cálculo simbólico fue la falta de un lenguaje especialmente concebido para este fin No ocurre lo mismo en la computación numérica en la que el FORTRAN es el lenguaje universalmente utilizado. El lenguaje que ha parecido tener mayor acomodo a las necesidades del cálculo simbólicos es el LISP que según su inventor John McCarthy, es un lenguaje adecuado para la manipulación simbólica Muchos de los sistemas están escritos en LISP, lo cual les da un cierto nivel de portabilidad.

En los últimos años han surgido también algunos sistemas de cálculo simbólico escritos en lenguaje C de acuerdo a algunos expertos es posible que el C llegue a imponerse como ya lo ha hecho en otras áreas de la informática. La ventaja del C es su direccionamiento dinámico de la memoria, pudiendo ser el C el lenguaje que sirva de puente entre la computación simbólica y numérica

Los sistemas de cálculo simbólico suelen contener además lenguajes propios muy simples, con gran número de comandos preprogramados y fáciles de manejar, por su parecido con el lenguaje matemático habitual

Los sistemas de cálculo simbólico resultan de gran utilidad ya que ahorran tiempo y esfuerzo en la resolución de una gran variedad de problemas, además las soluciones obtenidas resultan más fiables que las obtenidas manualmente

1.3 SISTEMAS GENERALES DE CALCULO SIMBOLICO

A continuación se describen algunos de los sistemas generales de cálculo simbólico más conocidos:

REDUCE: Sus orígenes se remontan al año de 1963 e inicialmente fue desarrollado para resolver problemas de física de alta energía Su creador fue Anthony C. Hearn Tras su evolución se convirtió en el primer sistema de cálculo simbólico de propósito general, estando disponible a partir del año 1970 El programa está escrito en LISP En comparación con otros sistemas tiene pocos comandos predefinidos, pero permite al usuario incorporar sus propias funciones.

MACSYMA Fue desarrollado en el M I.T. (Massachusetts Institute of Technology) entre los años 1969 y 1982, pero no fue comercial hasta mediados de los setenta Es el más desarrollado de estos sistemas al igual que REDUCE está escrito en LISP Contiene gran número de funciones predefinidas. Su principal inconveniente es que está disponible en pocos ordenadores.

MAPLE Desarrollado en la Universidad de Waterloo (Canadá) a partir de 1980, no fue hasta 1983 cuando estuvo disponible en el mercado. El núcleo de MAPLE está escrito en lenguaje C, gracias a lo cual resulta muy rápido en comparación con otros sistemas
Posee además gran número de librerías escritas en un lenguaje propio similar al Pascal. Fue un sistema diseñado para la enseñanza. Además de las capacidades de programación propias, posee facilidades para la interconexión con otros programas escritos igualmente en C Hay una gran variedad de versiones de MAPLE para distintos ordenadores

muMATH: Su desarrollo comenzó a finales de los setenta y también fue concebido inicialmente para la enseñanza Constituyó el primer sistema de cálculo simbólico creado específicamente para micro-ordenadores Sus autores son David Stoutemyer y Albert Rich. Está escrito en LISP y funciona bajo los sistemas operativos PC-DOS o MS-DOS

AXIOM· Constituye la versión comercial de SCRATCHPAD desarrollado por IBM a mediados de los setenta Su implementación es en LISP y requiere de máquinas IBM muy potentes. El principal inconveniente para su uso masivo es el alto costo tanto del software como del hardware necesario para soportarlo

MATHEMATICA Escrito y desarrollado por Stephen Wolfram su lanzamiento se produjo en 1988. Destaca del resto de los sistemas sobre todo por sus posibilidades gráficas (tanto dimensional como tridimensional y animación de imágenes) Puede ser usado bajo distintas plataformas de hardware incluyendo PC compatibles y Macintosh Su implementación está hecha en lenguaje C

Mathematica ha tenido una gran difusión y aceptación por parte de múltiples usuarios, científicos, ingenieros, economistas, así como en universidades como herramienta pedagógica. Existe una gran diversidad de publicaciones con aplicaciones en diversos campos; también los sistemas comerciales contienen una gran variedad de funciones predefinidas y paquetes que son programas en los que se definen de forma externa otra gran variedad de funciones y utilerías.

1.4 GENERALIDADES DE MATHEMATICA.

En este trabajo se presenta el modo de trabajo con Mathemetica para la versión 2 2 1 bajo entorno ó ambiente windows

La versión de Mathematica bajo Windows goza de todas las ventajas que ofrece este entorno de Microsoft Se trata de un entorno amigable y fácil de manejar y bastante menos rígido que el entorno MS-DOS. Mathematica utiliza todos los periféricos que aporta Windows para manejar sus aplicaciones y se puede comunicar directamente con todas las aplicaciones que corren bajo este estándar actual. Por otra parte el uso de menús, el acceso a más memoria y el manejo del ratón agilizan bastante los procesos

La versión empleada permite cargar y ejecutar los trabajos (Note books) desarrollados en las versiones anteriores sin cambios En lo que se refiere al cálculo numérico, la versión utilizada es más rápida que las anteriores y también presenta mejoras en el cálculo simbólico de la solución de las ecuaciones .

En el programa Mathematica se puden distinguir dos grandes partes. Una de ellas llamada núcleo (kernel), es la encargada de ejecutar todos los comandos y realizar los cálculos que ello conlleve. La otra consiste en la interfase del usuario (front End)
Una vez cargado el núcleo se está en condiciones de comunicarse con el programa A un input dado por el usuario Mathematica devolverá un output

CAPITULO 2.

2.1 DESCRIPCION DE MATHEMATICA

Mathematica es un software que puede ser usado para diversos usos siendo algunos los siguiente:

- Como una calculadora numérica.
- Como una calculadora para cálculos simbólicos
- Como un lenguaje de alto nivel
- Como un sistema para análisis de datos

Los cálculos con Mathematica pueden ser divididos en tres clases principales: Numéricos, simbólicos y gráficos. Mathematica utiliza estas tres clases de cálculos de una manera unificada.

Mathematica utiliza expresiones simbólicas para proporcionar una representación general del cálculo matemático

El rango de cálculos que pueden realizarse con Mathematica es tanto ó mayor que el que puede realizarse con los lenguajes tradicionales de computación como FORTRAN ó BASIC. Por otro lado los softwares tradicionales solo pueden realizar operaciones numéricas, sin embargo Mathematica puede realizar cómputos simbólicos y gráficos, entendiéndose por los primeros los cálculos que implican operaciones algebraicas, de cálculo diferencial e integral, ecuaciones diferenciales, cálculos con matrices y vectores, etc

Mathematica es una poderosa herramienta de productividad utilizada por profesionales y estudiantes de todas las disciplinas en las que se requiere de cálculos matemáticos.

En el presente trabajo se realizan diversas aplicaciones del software Mathematica en la Ingeniería Química. Los comandos utilizados corresponden a la versión de Mathematica 2.2.1

En la siguiente sección se dan algunos ejemplos de operaciones elementales con Mathematica con las cuales se muestra el poder de este software

Al escribir las órdenes ó comandos en Mathematica deberá prestarse atención a su expresión y sintaxis, especialmente se debe de tener cuidado con

Las mayúsculas y minúsculas. Mathematica distingue unos caracteres de otros Todas las funciones, opciones, variables y constantes incorporados en el programa empiezan con mayúsculas

Los espacios. Un espacio entre dos variables se interpreta como el signo de multiplicar. Por otro lado, cuando se da un nombre a un comando, función ó una variable que contenga más de una palabra no se debe de dejar un espacio entre ellas Mathematica identifica las funciones predefinidas iniciando éstas con mayúsculas

Llaves, paréntesis y corchetes. Los paréntesis se utilizan normalmente para agrupar e indicar prioridad

Los corchetes son exclusivos de las funciones y son los que delimitan los argumentos de las mismas

Por último, las llaves, se utilizan para definir listas de elementos separados por comas.

2.2 OPERACIONES SIMPLES CON MATHEMATICA.

En los ejemplos que se presentan se comentan con un tipo de letra más pequeño los símbolos o aclaraciones que se juzgan pertinentes los cuales no aparecen cuando se realizan cálculos en Mathematica sino que se presentan aquí para explicar el significado de las expresiones que lo requieren

NOTACION MATEMATICA

Mathematica utiliza los símbolos convencionales usados en el cálculo matemático normalmente, Mathemetica utiliza los comandos en idioma inglés, pero permite referirse a las funciones matemáticas estándar mediante símbolos de uso generalizado como se muestran a continuación:

Símbolo	Función
+	Suma
-	Resta.
*	Multiplicación (El espacio entre variables opera también como operador de multiplicación)
/	División.
^	Elevar a potencia
!	Factorial.
<	Menor que
<=	Menor ó igual que.
>	Mayor que

>=	Mayor ó igual que.

También Mathematica ofrece símbolos para denotarlas operaciones lógicas relacionales, condicionales y de estructura

x==y	Igualdad
x!=y	Desigualdad
!p	No
p&&q&& .	Y
if[then,else]	Se ejecuta then si p es verdadero y se ejecuta else si p es falso
Do[expr,{n}]}	Evalua n veces la expresión expr.
Do[expr,{i,imin,imax,di}]	Evalúa repetidas veces la expresión para valores de i desde imin hasta imax con incrementos sucesivos de valores de di
For[expr1,condición, incremento, expr2]	Evalua expr1 y sigue evaluando expr2 e incremento hasta que la condición sea cierta.

CALCULOS NUMERICOS

Se pueden realizar operaciones similares a las que se realizan con una calculadora.

1) Elevar el número 4 a la potencia 2 325

In[1] 4^2.325 El símbolo ^ significa elevación de potencia

Out[1] 25.1067 El mensaje Out[1] es la respuesta de cálculo al input In[1]

2) Cálculo de la raíz cuadrada del número 8 utilizando 30 dígitos de precisión.

IN[2] **N[Sqrt[8],30]** El símbolo N significa un resultado numérico aproximado.

OUT[2] 2.82842712474619009760337744842

3) El número 15 multiplicado por 8! (factorial)

IN[1] **15 (8!)** En Mathematica es suficiente dejar un espacio para indicar la operación de multiplicación

OUT[1] 604800

4) División de dos números complejos 4+8i/(5-3i)

IN[1] **4+8I/(5-3I)** La letra I representa $\sqrt{-1}$

```
         56   20 I
OUT[1]   -- + ----
         17    17
```

CALCULOS SIMBOLICOS EN ALGEBRA

1) Desarrollar el polinomio $\left(5x^3 - 6x^2 Sena + 8\right)^5$ utilizando la instrucción Expand.

Para desarrollar esta expresión se utiliza el comando:

Expand[Expr]

In[1] **Expand[(5x^3-6x^2 Sin[a] +8)^5]**

OUT[1]

```
                   3          6          9
32768 + 102400 x  + 128000 x  + 80000 x  +

         12          15            2
 25000 x   + 3125 x   - 122880 x  Sin[a] -

          5                 8
 307200 x  Sin[a] - 288000 x  Sin[a] -

          11              14
 120000 x   Sin[a] - 18750 x   Sin[a] +
```

$$184320\, x^{4} \,\text{Sin}[a]^{2} + 345600\, x^{7} \,\text{Sin}[a]^{2} +$$

$$216000\, x^{10} \,\text{Sin}[a]^{2} + 45000\, x^{13} \,\text{Sin}[a]^{2} -$$

$$138240\, x^{6} \,\text{Sin}[a]^{3} - 172800\, x^{9} \,\text{Sin}[a]^{3} -$$

$$54000\, x^{12} \,\text{Sin}[a]^{3} + 51840\, x^{8} \,\text{Sin}[a]^{4} +$$

$$32400\, x^{11} \,\text{Sin}[a]^{4} - 7776\, x^{10} \,\text{Sin}[a]^{5}$$

Como se aprecia en este ejemplo Mathematica tiene la capacidad de realizar cálculo simbólico y desplegar la respuesta de forma algebraica. Es evidente en este ejemplo el ahorro de tiempo que se logra en el manejo de estas expresiones

2) Simplificar la siguiente expresión

$$\frac{1}{(1-x^2)} - \frac{1}{(1-x)} + \frac{2}{(1+2x)}$$

Para lo cual se utiliza el comando

Simplify[Expr]

IN[1] **Simplify[(1/(1-X^2))-(1/(1-X))-(2/(1+2X))]**

OUT[1] $$\frac{2 + X}{-1 - 2X + X^{2} + 2X^{3}}$$

3) Encontrar las raíces de la siguiente ecuación:

$$5x^3-8\ 75x^2-1\ 25x-8=0$$

Para lo cual se utiliza el siguiente comando:

Solve[lhs==rhs,x] Donde lhs y rhs significan parte izquierda y derecha de la ecuación, y x la variable a resolver

IN[1] **Solve[5 x^3-8.75 x^2-1.25 x-8==0,x]**

OUT[1] {{x -> -0 222862 - 0 824027 I},

{x -> -0 222862 + 0 824027 I}, {x -> 2 19572}}

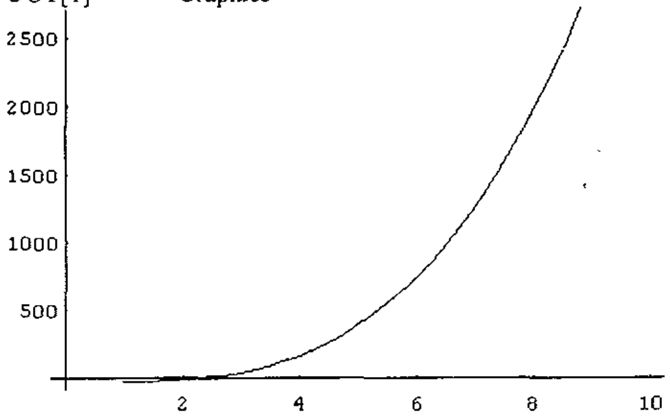
La ecuación muestra dos raíces imaginarias y una real

.4) A continuación se gráfica esta ecuación en el rango de x [1,10], utlizando la instrucción Plot.

Plot[f, {x, xmin, xmax}]

IN[1] **Plot[5x^3-8.75x^2-1.25x-8,{x,1,10}]**

OUT[1] -Graphics-



En la gráfica se comprueba que la función corta al eje de las abcisas en el punto 2 2

CALCULOS SIMBOLICOS EN CALCULO DIFERENCIAL E INTEGRAL

1) Calcular la derivada de:

$$\frac{d\left(x^n\right)}{dx}$$

Para ello se utiliza el comando

D[

] Que significa $\frac{\partial f}{\partial x}$

IN[1] **D[x^n,x]**

```
          -1 + n
OUT[1]  n x
```

En los ejemplos siguientes se omitirá la notación tradicional a fin de abreviar espacio y se incluirá cuando se requiera mayor claridad en el planteamiento

2) Cálculo de una derivada de una función más complicada

IN[1] **D[(Sin[x]-8 x^3)/(Tan[x]-x^3-x),x]**

```
OUT[1]
            2          2     3
 (-1 - 3 x  + Sec[x] ) (-8 x  + Sin[x])
-(------------------------------------)   +
                3          2
       (-x - x  + Tan[x])

      2
 -24 x  + Cos[x]
 ---------------
       3
 -x - x  + Tan[x]
```

3) De igual forma se puede calcular simbólicamente la integral de una función utilizando el comando:

Integrate[f,x] Que equivale a la expresión: $\int f dx$

Por ejemplo

IN[1]

Integrate[3x^3+Sin[x]-1/x,x]

OUT[1]

```
  4
3 x  - 4 Cos[x]
--------------- - Log[x]
      4
```

Como se aprecia la respuesta omite la constante de integración.

4) Ahora calcularemos la integral de una expresión más compleja:

IN[1]

Integrate[x Exp[x]- Tan[x]+Log[x],x] En esta expresión Exp[x] significa e^x.

OUT[1]

```
  x      x
-E  - x + E  x + x Log[x] + Log[Cos[x]]
```

5) De igual forma se puede realizar el cálculo de una integral definida por medio de la expresión

Nintegrate[f,{x,xmin,xmax}] Que equivale a la expresión $\int_{xmin}^{xmax} f dx$

Por ejemplo el cálculo de la siguiente integral:

IN[1]

NIntegrate[5x^4-3x^3+8,{x,1,10}]

OUT[1]

92571.7

6) A continuación se muestra la utilización de la instrucción para solucionar ecuaciones diferenciales:

DSolve[eqns, y[x], x] *Con la cual* se resuelve una ecuación diferencial para y[x], considerando x como la variable dependiente

Resolveremos la siguiente ecuación

$$\frac{dy}{dx} = ay$$

IN[1] **DSolve[y'[x]==a y[x], y[x],x]**

```
                   a x
OUT[1]   {{y[x] -> E    C[1]}}
```

Ahora una ecuación más complicada

$$\frac{d^2y}{dx^2} - kx = Senx$$

IN[1] **DSolve[y''[x]- k x==Sin[x], y[x], x]**

OUT[1]

```
                                 3
                              k x  - 6 Sin[x]
{{y[x] -> C[1] + x C[2] + ---------------}}
                                   6
```

7) Con la función **Series** se puede desarrollar una función en serie de potencias para lo cual se tiene la siguiente sintaxis

Series[f, {x, xo, orden} En la cual "orden" significa el grado de la serie de potencias a desarrollar.

Como ejemplo se desarrolla a continuación la función

$(1+x)^n$

In[1] **Series[(1+x)^n, {x,0,3}]**

Out[1]

$$1 + n\,x + \frac{(-1+n)\,n\,x^2}{2} + \frac{(-2+n)(-1+n)\,n\,x^3}{6} + O[x]^4$$

Donde $O[x]^4$ es el residuo

8) La función en Mathematica para calcular una suma que corresponde a la expresión

$$\sum_{imin}^{imax} f(x)$$

la cual tiene la siguiente sintaxis.

Sum[f, {i, imin, imax}]

Como ejemplo se desarrolla a continuación la siguiente función de suma

$$\sum_{x=1}^{x=5} \frac{ax}{ax+1}$$

IN[1] **Sum[a x/(a x+1), {x, 1,5}]**

OUT[1]

$$\frac{a}{1+a} + \frac{2a}{1+2a} + \frac{3a}{1+3a} + \frac{4a}{1+4a} + \frac{5a}{1+5a}$$

2.3 REPRESENTACIONES GRAFICAS CON MATHEMATICA

En Mathemetica es posible realizar representaciones gráficas en dos y tres dimensiones que permite visualizar los fenómenos fisicos a través de su representación gráfica

A continuación se dan algunos ejemplos de representación gráfica de diversas funciones:

1) Representación gráfica de la función

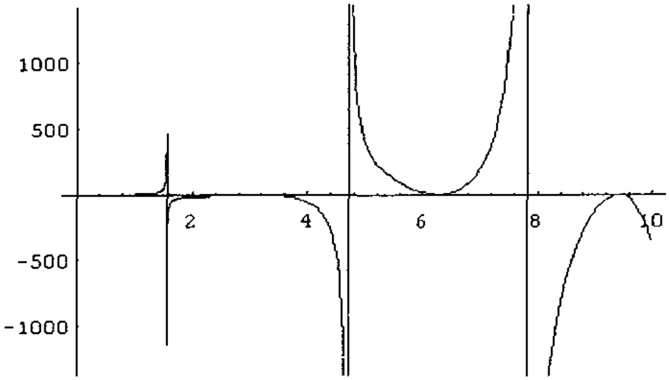
$$y = x^3 (Senx)(Tanx)$$

Para graficar esta función en el rango [1,10] se utilizará la siguiente función de Mathematica:

Plot[f,{x,xmin,xmax}]

IN[1] **Plot[(x^3 Sin[x] Tan[x]),{x,1,10}]**

Out[1]



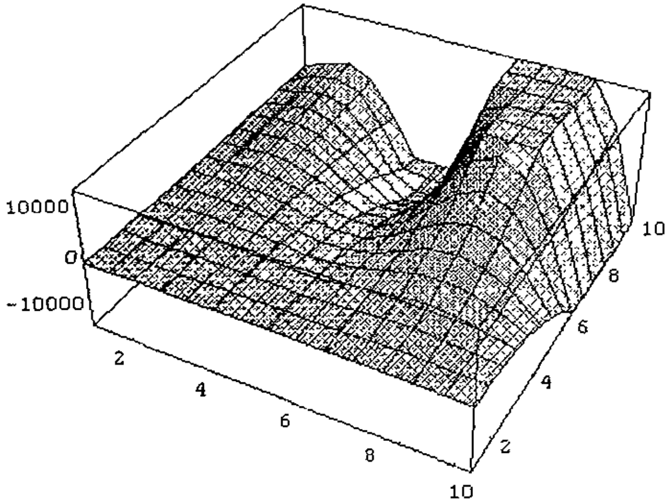
2) Así mismo se puede realizar la representación gráfica en el espacio de una función *con dos variables independientes, por ejemplo la función.*

$z = (x^2 Senx) y^3$ se puede graficar en el rango de x e y [1,10] mediante la función

Plot3D[f, {x,xmin,xmax}, {y,ymin,ymax}]

IN[1] **Plot3D[(x^2 Sin[x]) y^3, {x,1,10},{y,1,10}]**

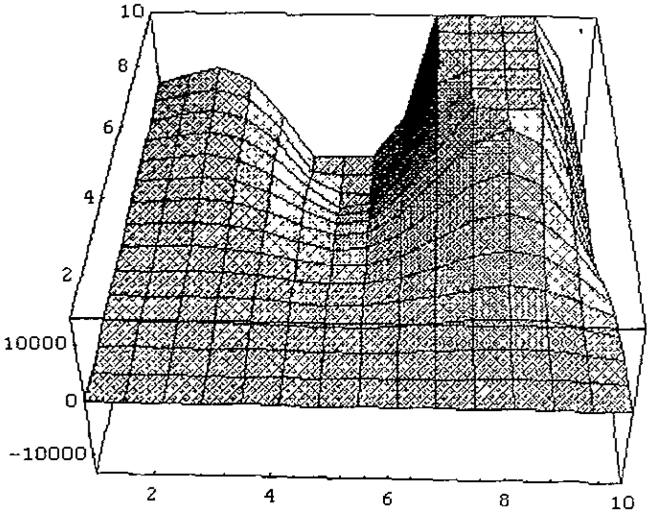
OUT[1]



Se puede vizualizar la gráfica desde otro punto de vista como se muestra a continuación.

Plot3D[(x^2 Sin[x]) y^3, {x,1,10},{y,1,10}, ViewPoint->{0.080,-2.400,2.000}]

OUT[1]



CAPITULO 3..

APLICACIONES DE MATHEMATICA A LA SOLUCION DE ALGUNOS PROBLEMAS DE LA INGENIERIA QUIMICA

En este capítulo aplicaremos las funciones y comandos que tiene Mathematica a la solución de algunos problemas que se presentan en las disciplinas que son competencia del campo de la Ingeniería Química:

3.1 ECUACION DE ESTADO.

Algunos problemas requieren de la solución de ecuaciones algebraicas no lineales en termodinámica, la relación volumen-presión y temperatura de los gases reales son descritas por las ecuaciones de estado Existen algunas ecuaciones de tipo semiteórico o ecuaciones obtenidas de manera empírica, como la de Redlich-Kwog, la de Beattie-Bridgeman, y la de Benedict-Webb-Rubin. Como ejemplo tomaremos la ecuación de estado de Beattie-Bridgeman:

$$PV = RT + \frac{\beta}{V} + \frac{\gamma}{V^2} + \frac{\delta}{V^3} \qquad (1)$$

en donde P, V, T, representan la presión, el volumen específico y la temperatura respectivamente R es la constante de los gases y α, β, γ, δ son funciones empíricas de la temperatura para cada gas como se muestran a continuación

$$\beta = RTB_0 - A_0 - \frac{R_C}{T^2}$$

$$\gamma = -RTbB_0 + \alpha . A_0 - \frac{RB_{0C}}{T^2}$$

$$\delta = \frac{RB_0 b_C}{T^2}$$

La ecuación (1) puede ser rearreglada para quedar como sigue:

$$PV^4 - RTV^3 - \beta V^2 - \gamma . V - \delta = 0 \qquad (2)$$

Con lo cual la ecuación se reduce a un polinomio de cuarto grado

A continuación se calculará el volumen específico para el n-butano siendo las constantes para este gas las siguientes

$A_0 = 17\ 7940$

$B_0 = 0.24620$

$\alpha = 0\ 12161$

$b = 0.09423$

$c = 350x10^4$

Las unidades son·

P atmósferas
V. litros/mol.
T kelvin.
R=0 08206(atm lt)/mol kelvin

El programa en Mathematica se indica a continuación para calcular el volumen del n-butano a una temperatura de 425 Kelvin y una presión de 1 atm

```
A=17.7940;
B=0.24620;
alfa=0.12161;
b=0.09423;
c=3500000;
R=0.08206;
P=1;
t=425;
beta:= R t B-A-(R c)/t^2
gama:=- R t B b+alfa A-(R B c)/t^2
delta:=(R B b c)/t^2
Print[beta]
Print[gama]
Print[delta]
Solve[(P v^4-R t v^3-beta v^2- gama v-delta==0),v]
```

-10.7977
0.963357
0.0368892

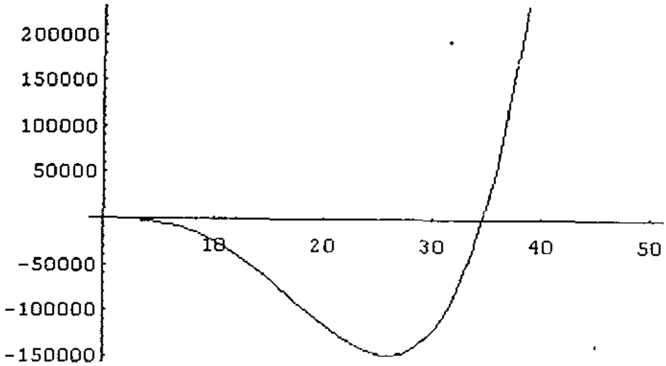
{{v -> -0.0284128}, {v -> 0 170002 - 0.0930715 I},

{v -> 0.170002 + 0.0930715 I}, {v -> 34 5639}}

La solución que proporciona Mathematica corresponde a las cuatro raíces del polinomio de cuarto grado, siendo la respuesta buscada V=34.5639 lts/mol *ya que las otras tres raíces no tienen significado físico.*

A continuación se gráfica el polinomio para apreciar el punto en donde la función toma el valor de cero.

Plot[P v^4-R t v^3-beta v^2- gama v-delta,{v,1,50}]



En la gráfica se aprecia que la función "corta" el eje de las abcisas aproximadamente en el punto 35.0.

3.2 EXPANSION Y COMPRESION DE FLUIDOS

El trabajo mecánico se define como la energía transferida por el efecto de una fuerza que actúa a lo largo de una determinada trayectoria y es igual al producto de aquella fuerza por la distancia de acción Así , *cuando un fluido contenido en un recipiente* bajo presión experimenta una variación de volumen, se realiza un trabajo como resultado de la fuerza de presión que desplaza la distancia correspondiente al cambio de volumen..

En un proceso realizado en un sistema cerrado en el cual se realiza la compresión ó *expansión de un gas el trabajo (reversible) realizado está dado por:*

$$w = \int_{v1}^{v2} p dV$$

donde p es la presión del sistema y dV la diferencial del volumen

La ecuación anterior se aplica a procesos cerrados mecánicamente reversibles.
A continuación se aplica la ecuación anterior utilizando la ecuación de estado de Beattie-Bridgeman para el n-butano.

$$P = \frac{RT}{V} + \frac{\beta}{V^2} + \frac{\gamma}{V^3} + \frac{\delta}{V^4}$$

$$w = \int_{v1}^{v2} \left(\frac{RT}{V} + \frac{\beta}{V^2} + \frac{\gamma}{V^3} + \frac{\delta}{V^4} \right) dV$$

Para obtener la solución de la integral anterior se desarrolla a continuación el programa correspondiente en Mathematica haciendo P=1 atm

```
In[1]
A=17.7940;
B=0.24620;
alfa=0.12161;
b=0.09423;
c=3500000;
R=0.08206;
beta:= R t B-A-(R c)/t^2
gama:=- R t B b+alfa A-(R B c)/t^2
delta:=(R B b c)/t^2
Integrate[((R t)/v+beta/v^2+gama/v^3+delta/v^4),{v,1,v2}]
```

En la función de Mathematica Integrate se esta manejando la sintaxis de una integral definida entre los valores {v,1,v2}, es decir se obtendrá la función analítica de la integral entre los límites de la integral 1, V2.

La respuesta que da Mathematica es la siguiente

$$-16.712 - \frac{320345.}{t^2} + 0.0192513\,t - \frac{222104.}{t^2\,v2^3} +$$

$$\frac{35355.6 - 1.08196\,t^2 + 0.000951872\,t^3}{t^2\,v2^2} +$$

$$\frac{287210 + 17.794\,t^2 - 0.0202032\,t^3}{t^2\,v2} +$$

$$0.08206\,t\,\mathrm{Log}[v2]$$

Como se aprecia se utilizan las variables de la función como minúsculas a fin de evitar errores en la sintaxis ya que los comandos de Mathematica se inician con letras *mayúsculas*

A continuación se agrega al programa el valor de T=298 Kelvin, con lo que la función del trabajo queda solo con V2 como variable independiente:

Evaluate[%/.t->298]

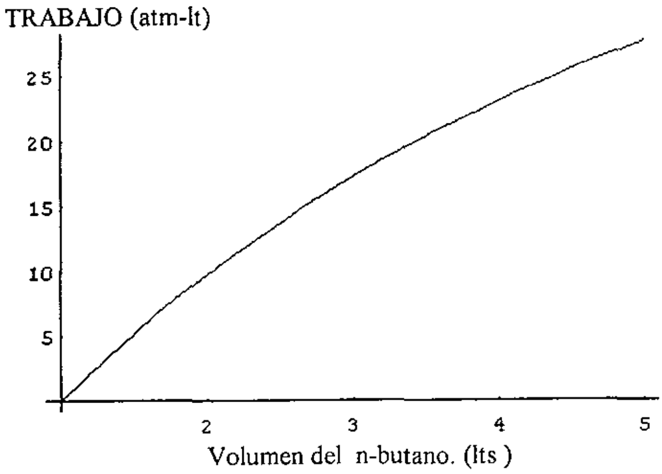
La función de Mathematica Integrate se indica como una integral definida con límite inferiorV1 y límite superior V2

La respuesta que da Mathematica para este cálculo es

$$-14.5825 - \frac{0.0250105}{v2^3} - \frac{0.400176}{v2^2} + \frac{15.0077}{v2} + 24.4539\,\mathrm{Log}[v2]$$

A continuación se agrega un comando de Mathematica para graficar el trabajo desarrollado al expandir el n-butano a T=298 Kelvin desde V2= 1 hasta V2=5 lt.

Grafl=Plot[%,{v2,1,5}]; El símbolo % significa "de la función o respuesta anterior...", se grafica la función para valores desde V2=1, hasta V2=5.

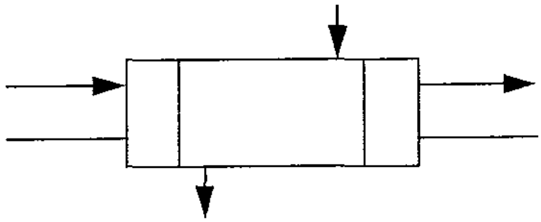


3 3 DETERMINACION DE LAS TEMPERATURAS DE LOS FLUIDOS EN UN INTERCAMBIADOR DE CALOR DE CORAZA Y TUBOS

En el dibujo que se muestra a continuación se muestra el diagrama del intercambiador de calor en el cual se enfría aceite disponiéndose de una corriente de agua de enfriamiento a 80 grados Fahrenheit y se desea calcular cual será la temperatura que se obtendrá en el aceite a la salida del intercambiador de calor bajo el régimen de estado estacionario, así como los valore de la cantidad de calor transferida Q, y la temperatura de salida del agua de enfriamiento.

70,000 lb/Hr , 250 grados F
Cp=0.5 BTU/Lb-grados F

170 5 GPM. de agua a 80 grados F



El coeficiente de transferencia de calor y el área del intercambiador de calor son·

U=120 Btu/hr-ft2- grados F. A=879 pies cuadrados

El problema resulta interesante ya que para su solución se requiere realizar cálculos iterativos pudiéndose emplear la capacidad gráfica de Mathematica para encontrar alrededor de que punto se encuentra la solución.

A continuación se plantean las ecuaciones para resolver el sistema·

$$Q = UA(LMTD)$$

$$Q = mCp_{aceite}\Delta t$$

$$Q = MCp_{H_2O}\Delta T$$

$$Q = 70000(0.5)(250 - TH2)$$

$$Q = 170\,5(60)(8.33)(TC2 - 80)$$

$$LMTD = \frac{(250 - TC2) - (TH2 - 80)}{\ln\left(\frac{250 - TC2}{TH2 - 80}\right)}$$

El programa de Mathematica para resolver el anterior sistema de ecuaciones simultáneas puede desarrollarse de manera similar a un proceso iterativo en FORTRAN ó BASIC parar obtener una solución numérica del problema
Los comandos para lograr un lazo iterativo son

```
Clear[TC2,TH2,THa]
Do[                              Inicio de la iteración
Q=35000 * (250-TH2);
TC2=(Q/82512.9)+80;
LMTD=((250-TC2)-(TH2-80))/Log[(250-TC2)/(TH2-80)];
Q1=105480 LMTD;
THa=-(Q1/35000)+250;
If[Abs[(Q-Q1)]<=1000,            Condicional en la comparación de los valores de Q y de Q1
Print[{Q,Q1,TH2,THa,TC2}]],      Si el condicional se cumple imprime los valores.
{TH2,90,100,0.01}]               Cierre de la iteración de TH2, entre 90 y 100 grados con incrementos de
                                 0 01 grados
```

La respuesta que se obtiene es

La respuesta que se obtiene es·

Q　　　　Q1　　　TH2　　THa　　TC2

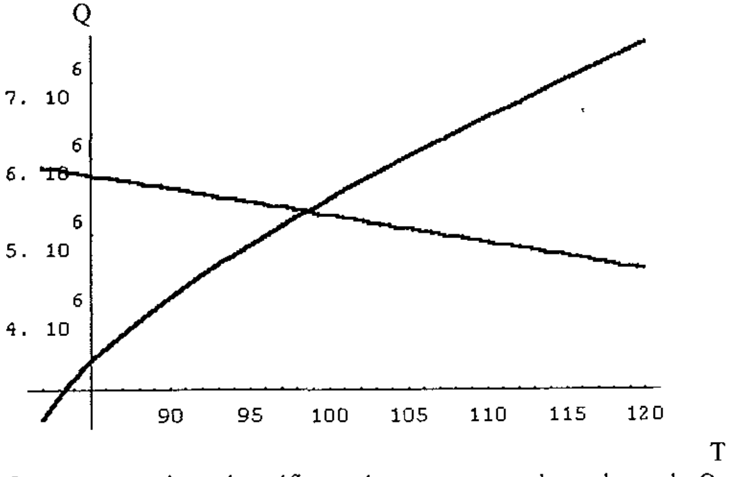
$\{5.2969\ 10^{6}, 5\ 29736\ 10^{6}, 98.66, 98.6468, 144\ 195\}$

Mathematica ha realizado las iteraciones requeridas y ha desplegado los valores de Q, Q1, TH2, Tha, y TC2, cuando la diferencia entre Q y Q1 ha sido igual ó menor a 1000. Como se aprecia en los valores obtenidos de TH2 y Tha son prácticamente idénticos El valor de TC2 es 144 2 F

Una representación gráfica de las funciones puede mostrar fácilmente el punto donde se cortan es decir el punto que corresponde a la solución del sistema, modificando el programa anterior como sigue

```
Clear[TC2,TH2,THa]
Q=35000 * (250-TH2);
TC2=(Q/82512.9)+80;
LMTD=((250-TC2)-(TH2-80))/Log[(250-TC2)/(TH2-80)];
Q1=105480 LMTD;
THa=-(Q1/35000)+250;
aa=Plot[Q1,{TH2,82,120}];
bb=Plot[Q,{TH2,82,120}];
Show[aa,bb]
```

El comando Show permite mostrar varias funciones en la misma gráfica



Como se aprecia en la gráfica ambas representan los valores de Q, en donde la línea recta es la gráfica del calor transferido por el aceite y la línea curva es el calor transferido entre ambos fluidos, agua y aceite para diversas temperaturas cortándose ambas curvas alrededor del punto de temperatura de 98 grados

3.4 EQUILIBRIOS EN LAS REACCIONES QUIMICAS.

Para un sistema gaseoso como se muestra a continuación

bB+cC+...=rR+sS+ .

la constante de equilibrio está dada por la ecuación:

$$K=\left(\frac{N_R^r N_S^s}{N_B^b N_C^c\ldots}\right)\left(\frac{\upsilon_R^r \upsilon_S^s\ldots}{\upsilon_B^b \upsilon_C^c\ldots}\right)\pi^{r+s+\ .-b-c}$$

En donde N representa el número de moles de cada especie, ν los coeficientes de fugacidad, *π la presión total del sistema.*

El número de moles en el equilibrio de la especie R esta dado por:

$$N_R=\frac{n_R}{n_B+n_C+..+n_R+n_S+..+n_I}$$

donde la especie I representa a la presencia de gases inertes

La relación entre los coeficientes de fugacidad es constante para una presión y temperaturas determinadas y está dada por:

$$K_\upsilon=\frac{\upsilon_R^r \upsilon_S^s\ldots}{\upsilon_B^b \upsilon_C^c}$$

combinando las ecuaciones anteriores la constante de equilibrio es

$$k=\left(\frac{n_R^r n_S^s.}{n_B^b n_C^c\ldots}\right)K\upsilon\left(\frac{\pi}{n_B+n_C+\ldots+n_R+n_S+\ldots+n_I}\right)^{(r+s+\ )-(b+c+\ldots)}$$

A continuación se hace un planteamiento de un problema para resolverlo con la ayuda de Mathematica

La reacción de SO2 con O2 en fase gaseosa para producir S03 es:

SO2(g)+1/2 O2(g)= SO3(g)

El convertidor (reactor) en donde se realiza la reacción catalítica con V_2O_5 como catalızador opera a una temperatura de 500 grados centígrados y a una presión de 760 mm Hg.
En virtud de que la presión es cercana a la atmosférica la constante de equilibrio de las fugacidades pude considerarse con un valor igual a la unidad.

El valor de la constante de equilibrio como función de la temperatura es

$$LogK_p = \frac{4956}{T} - 4678 \qquad \text{1/atm2}$$

siendo T la temperatura absoluta en Kelvın.

La composición de la mezcla original es

SO_2	7.8 %
O_2	10 8 %
N_2	81 4 %
Total·	100 0 %

Si x es la conversión de equilibrio del SO_2, en el equilibrio se tienen los siguientes balances para 100 lb-mol de mezcla original

Para el SO_2	7 8-7.8 x	=	n_{SO2} lb-mol
Para el SO_3	7.8 x	=	n_{SO3}
Para el O_2	10.8-7 8 (x/2)	=	n_{O2}
Para el N_2	81 4	=	n_{N2}

Aplicando la ecuación de equilibrio con estos valores la ecuación queda

$$\left(\frac{n_{SO2}}{n_{SO2}(n_{O2})^{1/2}}\right)\left(\frac{\pi}{n_{SO2+}n_{SO3} + n_{O2} + n_{N2}}\right)^{-1/2} = K$$

Sustituyendo valores la ecuación queda como

$$\frac{7.8x}{(7.8-7.8x)(10.8-3.9x)^{1/2}}\left(\frac{\pi}{100-3.9x}\right)^{-1/2}=K_p$$

Rearreglando

$$\frac{x}{1-x}\left(\frac{100-3.9x}{10.8-3.9x}\right)^{1/2}-10^{(4695/T-4\,678)}=0$$

El programa para resolver en Mathematica esta ecuación tomando los rangos de T[600,1000] con incrementos de 50 grados es

```
Clear[x,T]
Table[NSolve[(x/(1-x))((100-3.9 x)/(10.8- 3.9 x))^0.5-(10)^(4965/T-
4.678)==0,x],{T,600,1000,50}]
```

La solución que proporciona Mathematica es

```
{{{x -> 0.999057}}, {{x -> 0.995933}},

 {{x -> 0 985897}}, {{x -> 0.959503}},

 {{x -> 0 902631}}, {{x -> 0 803767}},

 {{x -> 0.666796}}, {{x -> 0 514281}},

 {{x -> 0.373535}}}
```

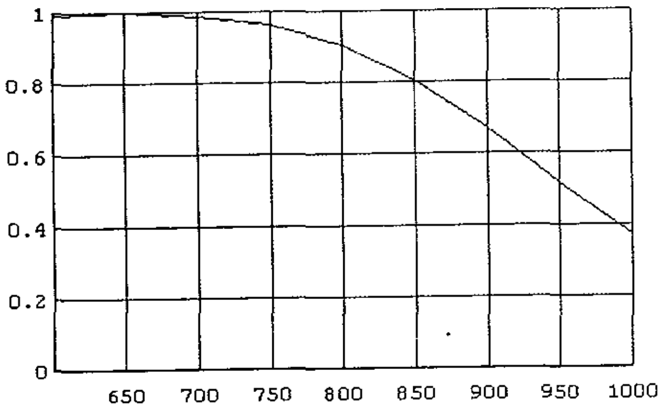
Como se aprecia Mathematica calcula directamente la solución de la ecuación anterior para varios valores de T, el cálculo tradicional con una calculadora o con un programa en FORTRAN ó BASIC hubiera requerido de un método iterativo a partir de un valor de solución supuesto para encontrar las soluciones

Los puntos anteriores pueden graficarse con las siguientes instrucciones

```
ListPlot[{{600,0.99057},{650,0.995933},
{700,0.985897},
{750,0.959503},{800,0.902631},{850,0.803767},
{900,0.666796},
```

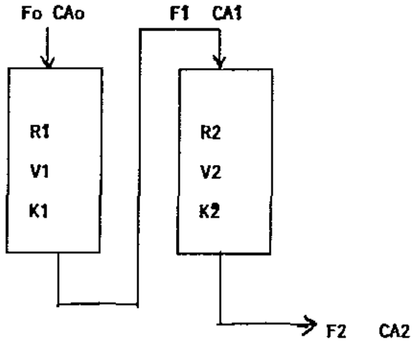
```
{950,0.514281},{1000,0.373535}},PlotJoined->True
,PlotRange->{{600,1000},{0,1}},GridLines->Automatic]
```

La gráfica que presenta Mathematica es.



3.5 SOLUCION DE ECUACIONES DE CINETICA QUIMICA

En la figura que se muestra a continuación representa dos reactores continuos agitados conectados en serie



El producto B es producido y el producto A es consumido en cada uno de los dos reactores perfectamente agitados de acuerdo a una reacción de primer orden en fase liquida se asume que en los dos reactores el volumen y la temperatura permanecen constantes (proceso isotérmico). También se asume que la densidad permanece constante a través del sistema de la mezcla de A y B.

Si el volumen y la densidad de cada tanque permanecen constantes, la masa total en cada tanque permanece constante

Dadas las condiciones anteriores la ecuación de continuidad para el primer reactor es:

$$\frac{d(\rho V_1)}{dt} = \rho F_0 - \rho F_1 = 0$$

$$F_1 = F_0$$

en donde ρ representa la densidad.

Se desea conocer la cantidad de reactante A o del reactante B que se tiene en un momento dado en cada tanque Para realizar el cálculo se elige el componente A para describir las ecuaciones del sistema (con unidades de A moles/segundo).

$$V_1 \frac{dC_{A1}}{dt} = F(C_{A0} - C_{A1}) - V_1 k_1 C_{A1}$$
$$V_2 \frac{dC_{A2}}{dt} = F(C_{A1} - C_{A2}) - V_2 k_{21} C_{21}$$

Las constantes específicas de reacción K están dadas por la ecuación de Arrhenius:

$$k_n = \alpha e^{-E/RT_n}$$

En donde α representa una constante, E representa la energía de activación,
R representa una constante igual a 0.082 Atm-Lt/g Mol- K.

El *subíndice n se refiere* al número de etapa del proceso.

El volumen V quede fuera de la derivada dado que es constante en el tiempo.

Las dos ecuaciones diferenciales de primer orden representan el modelo matemático del sistema.. En las ecuaciones descritas se puede sustituir la relación:

$$\frac{V}{F} = \tau$$

con lo que las ecuaciones quedan como.

$$\frac{dC_{A1}}{dt} = \frac{1}{\tau}(C_{A0} - C_{A1}) - V_1 k_1 C_{A1}$$
$$\frac{dC_{A2}}{dt} = \frac{1}{\tau}(C_{A1} - C_{A2}) - V_2 k_{21} C_{21}$$

A continuación se desarrolla el programa en Mathematica para obtener una solución algebraica de las dos ecuaciones diferenciales bajo las siguientes condiciones iniciales:

τ=2 min
k=0 5 /min
CA1(0)=0 4 moles/pie3
CA2(0)=0 2 mole/pie3

Clear[T,k,ca1,ca2]
tau=2;
k=0.5;

```
ca10=0.4;
ca20=0.2;
expresion1=DSolve[{(ca1)'[t]==1/tau (ca10-ca1[t])- k ca1[t],
ca1[0]==0.4}
,ca1[t],t]
expresion2=DSolve[{(ca2)'[t]==1/tau ((0.2+0.2/Exp[t])-ca2[t])-
k ca2[t],
ca2[0]==0.2}
,ca2[t],t]
aa=Plot[ca1[t]/.expresion1,{t,0,10}]
bb=Plot[ca2[t]/.expresion2,{t,0,10}];
```

El símbolo / significa sustituir por

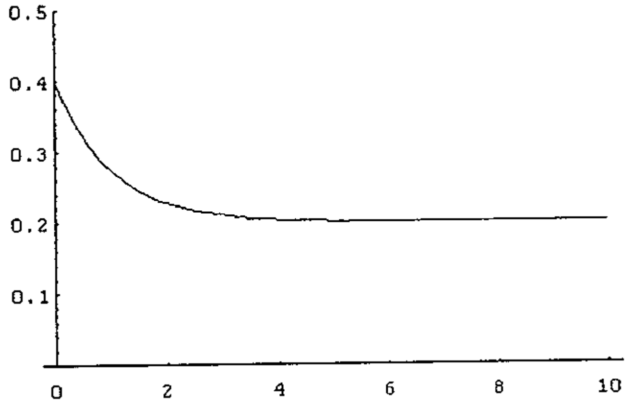
La solución algebraica que da Mathematica es

```
                      0 2
{{ca1[T] -> 0.2 + -----}}
                      1 T
                    E
```

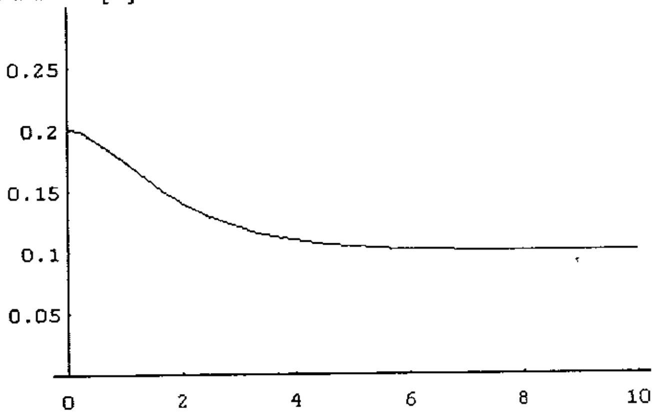
```
                                1. T
               0.1        0.1 E      +  0 1 T
{{ca2[T] -> ----- + --------------------}}

               1. T             1 T
             E                E
```

La representación gráfica de estas dos ecuaciones es

Para CA1[T]



Para CA2[T]



3.6 OPTIMIZACION DE UN SISTEMA DE COMPRESION DE TRES ETAPAS.

En este ejercicio se desarrollará el cálculo de el trabajo mínimo de compresión adiabática de un gas ideal.

Para el caso de un fluido adiabático no se puede establecer a priori la relación entre la presión y la densidad ya que se desconoce la temperatura como función de la presión y la densidad, por tanto la relación entre la presión y la densidad se deriva utilizando el balance mecánico del sistema. Si se asume que el gas tiene un comportamiento ideal, y $k = C_p / C_v$ se asume que es constante en el rango de interés en la compresión de p1 a p2, entonces se puede utilizar la relación

$$pV^k = constante$$

y aplicándola para el trabajo teórico por mol del gas comprimido para un compresor de una sola etapa es:

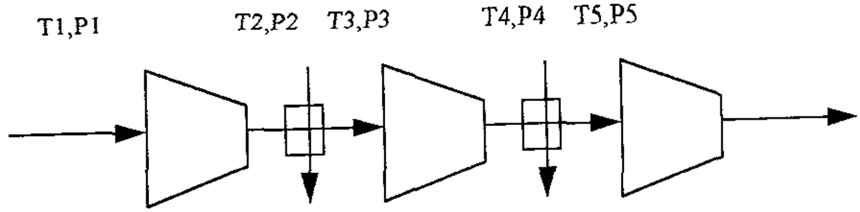
$$W = \frac{kRT_1}{k-1}\left[\left(\frac{p2}{p1}\right)^{(k-1)/k} - 1\right]$$

donde T1 es la temperatura de entrada y R es la constante para el gas ideal.

Para el caso de un compresor de tres etapas con enfriamiento entre las etapas para entrar a cada una a un a temperatura T1 el trabajo de compresión de p1 a p4 esta dado por la siguiente ecuación:

$$W = \frac{kRT1}{k-1}\left[\left(\frac{p2}{p1}\right)^{(k-1)/k} + \left(\frac{p3}{p2}\right)^{(k-1)/k} + \left(\frac{p4}{p3}\right)^{(k-1)/k} - 3\right]$$

se desea determinar la presiones optimas interetapas p2 y p3 a fin de minimizar el trabajo W realizado manteniendo p1 y p4 predeterminados.



Las condiciones dadas para este problema se consideran para realizar el proceso de compresión de aire de una presión inicial p1=100 Kpa , a una presión al final de la tercera etapa p4=1000 Kpa La constante k para el aire tiene un valor de k=1.4

La solución de este problema para encontrar el mínimo de w es:

1) Derivar la función de w respecto de p2.

2) Derivar la función de w respecto de p3

3) Igualar a cero ambas derivadas y resolver el sistema de las dos ecuaciones para encontrar p2 y p3

A continuación se presenta el programa en Mathematica para realizar los pasos anteriores y obtener las presiones p2 y p3 para obtener un trabajo mínimo w

```
Clear[A,B,F,w,p1,p4]
p1=100;
p4=1000;
k=1.4;
A=(p2/p1)^((k-1)/k);
B=(p3/p2)^((k-1)/k);
F=(p4/p3)^((k-1)/k);
w=(k R T1/(k-1))(A+B+F-3);
Dp2=Simplify[D[w,p2]];   Cálculo de la derivada de w respecto a p2, y simplificación del
                         resultado
Dp3=Simplify[D[w,p3]];
Print["LA DERIVADA DE W RESPECTO DE P2 ES",Dp2]
Print["LA DERIVADA DE W RESPECTO DE P3 ES",Dp3]
Solve[{Dp2==0,Dp3==0},{p2,p3}]   Solución de las dos ecuaciones simultáneas
```

El programa anterior primero establece los parámetros del problema y calcula las derivadas requeridas de la función W, obteniéndose dos ecuaciones que son resueltas simultáneamente para encontrar p2 y p3 mediante el comando **Solve.**

A continuación se muestra la respuesta que proporciona Mathematica a este cálculo el cual se realizó en aproximadamente 2 minutos en una PC con 12 Mb de memoria Ram y 55 Mhz.

```
LA DERIVADA DE W RESPECTO DE P2 ES

 79 9443 R        298. p3 R
----------   -   ----------------
   0.714286       2    p3  0.714286
p2              p2    (--)
                       p2


LA DERIVADA DE W RESPECTO DE P3 ES

   -2144 66 R                298. R
-------------------   + ---------------------
 1  0 714286   2              p3   0 714286
(--)           p3        p2  (--)
 p3                           p2


{{p2 -> -215 443, p3 -> -464.159},

 {p2 -> -215 443, p3 -> 464 159},

 {p2 -> 215.443, p3 -> -464.159},

 {p2 -> 215.443, p3 -> 464.159},

 {p2 -> 107.722 - 186 58 I,

  p3 -> -232.079 - 401.973 I},

 {p2 -> 107.722 - 186 58 I,

  p3 -> 232.079 + 401 973 I},
```

{p2 -> -107.722 + 186.58 I,

p3 -> -232.079 - 401.973 I},

{p2 -> -107 722 + 186.58 I,

p3 -> 232.079 + 401 973 I},

{p2 -> -107 722 - 186.58 I,

p3 -> 232.079 - 401.973 I},

{p2 -> -107.722 - 186.58 I,

p3 -> -232 079 + 401.973 I},

{p2 -> 107 722 + 186.58 I,

p3 -> 232 079 - 401.973 I},

{p2 -> 107.722 + 186 58 I,

p3 -> -232.079 + 401 973 I}}

Mathematica proporciona primero el resultado de las dos derivadas, respecto de p2 y p3, y posteriormente lista todas las posibles soluciones del sistema de ecuaciones de las dos derivadas igualadas a cero.

Observando el conjunto de soluciones se observa que solo uno de los pares de valores de p2 y p3 tiene significado físico que son:

p2= 215.443

p3=464 159

Ya que las otras soluciones contienen valores negativos o imaginarios.

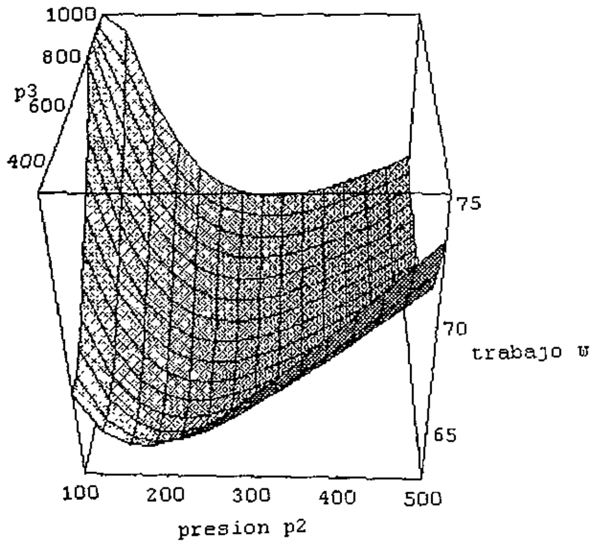
Estos valores obtenidos para p2 y p3 corresponden a las presiones que minimizan el trabajo de compresión

Mathematica tiene la ventaja de manejar gráficas en tres dimensiones y poder predeterminar el punto de observación de la gráfica a fin de observar como en este caso los extremos de la función.

A continuación se graficará con comandos de Mathematica la función W en tres dimensiones para observar la región en donde se tiene un trabajo mínimo.

```
Clear[A,B,F,w,p1,p4,R,T1]
p1=100;
p4=1000;
k=1.4;
R=0.082;
T1=298;             Se supone una temperatura T1=298
A=(p2/p1)^((k-1)/k);
B=(p3/p2)^((k-1)/k);
F=(p4/p3)^((k-1)/k);
w=(k R T1/(k-1))(A+B+F-3);
Plot3D[w,{p2,100,500},{p3,300,1000},
AxesLabel->{"presion p2"," p3","trabajo w"},BoxRatios->{2,2,2},
ViewPoint->{0.150,-2.725,2.000}]
```

La gráfica que presenta Mathematica se muestra a continuación.



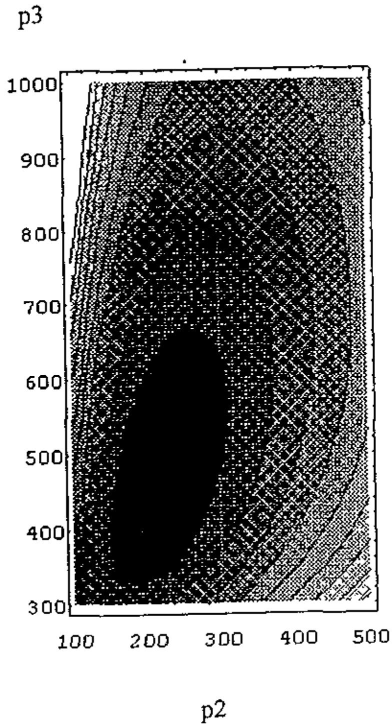
En la gráfica se encuentra que el mínimo de W efectivamente se encuentra alrededor de las coordenadas p2= 215 y p3 =464.

También se puede generar una gráfica de contorno en la que aparece la función representada en un plano de dos dimensiones con diversas intensidades de grises indicando los tonos más claros las zonas más altas en el eje Z y las más obscuros los valores menores

a continuación se muestra la instrucción para que Mathematica desarrolle la gráfica de contorno:

Show[ContourGraphics[%]]

La gráfica que devuelve Mathematica es la siguiente



Se puede apreciar que en la gráfica de contorno anterior la zona más obscura que corresponde a los valores inferiores de W corresponde a valores de p2 de 200-300 y de 350 a 650 para p3. como se vio en el desarrollo por cálculo simbólico el valor del trabajo se minimiza para p2= 215.43 KPa y p3=464 16 KPa

En este ejemplo se ha demostrado la facilidad de solución de los problemas utilizando las ventajas que presenta el software de Mathematica y la capacidad gráfica del mismo que permite visualizar la solución del problema de manera muy clara y objetiva.

También en este ejemplo se pueden desarrollar valores de la función w para rangos determinados de p2 y de p3 a fin de poder encontrar el conjunto de ellos que se traducen en el valor mínimo de w.

El programa en Mathematica para realizar las operaciones descritas se muestra a continuación.

```
Clear[A,B,F,w,p1,p4,R]
p1=100;
p4=1000;
k=1.4;
R=0.082;
T1=298;
A=(p2/p1)^((k-1)/k);
B=(p3/p2)^((k-1)/k);
F=(p4/p3)^((k-1)/k);
w=(k R T1/(k-1))(A+B+F-3);
g=Table[{p2,p3,w},{p2,150,300,10},{p3,250,550,10}];
Print[TableForm[{g}]]
```

El comando **Table** permite realizar el cálculo de la función w para los rangos p2[150,300] y p3[250,550] con incrementos de 10 Kpa para cada caso

El resultado que proporciona Mathematica es en forma de tabla en tres columnas, la primera corresponde a p2, la segunda a p3 y la tercera a w, como se muestra a continuación:

p2	p3	w	p2	p3	w	p2	p3	w
150	250	65.5092	160	250	65.4883	170	250	65 529
150	260	65.2083	160	260	65.1669	170	260	65.1888
150	270	64.9454	160	270	64.8842	170	270	64 8878
150	280	64 7169	160	280	64 6364	170	280	64 6222
150	290	64 5195	160	290	64 4202	170	290	64 3886
150	300	64 3502	160	300	64 2326	170	300	64.1841
150	310	64.2066	160	310	64.071	170	310	64 006
150	320	64 0864	160	320	63.9333	170	320	63.852
150	330	63.9874	160	330	63.8172	170	330	63.7202
150	340	63 9081	160	340	63.7211	170	340	63.6086
150	350	63.8466	160	350	63.6432	170	350	63 5155

150 360 63 8016	160 360 63.5821	170 360 63.4396
150 370 63 7718	160 370 63.5366	170 370 63.3795
150 380 63.756	160 380 63.5053	170 380 63.334
150 390 63 7532	160 390 63 4872	170 390 63.3019
150 400 63.7623	160 400 63.4814	170 400 63 2823
150 410 63.7824	160 410 63.487	170 410 63.2744
150 420 63 8129	160 420 63.503	170 420 63 2771
150 430 63.8529	160 430 63.5289	170 430 63.2899
150 440 63 9018	160 440 63 5638	170 440 63.3121
150 450 63.9589	160 450 63 6073	170 450 63 3429
150 460 64 0237	160 460 63.6586	170 460 63.3818
150 470 64.0957	160 470 63.7174	170 470 63 4283
150 480 64.1745	160 480 63.783	170 480 63 4819
150 490 64.2594	160 490 63 8551	170 490 63.5421
150 500 64 3502	160 500 63.9333	170 500 63.6086
150 510 64.4465	160 510 64.017	170 510 63.6808
150 520 64 5479	160 520 64.1061	170 520 63.7585
150 530 64.6542	160 530 64.2002	170 530 63.8413
150 540 64 7649	160 540 64.2989	170 540 63.929
150 550 64.8798	160 550 64.402	170 550 64.0211

180 250 65.6209	190 250 65 7558
180 260 65.2633	190 260 65.382
180 270 64.9454	190 270 65 0483
180 280 64.6633	190 280 64.7507
180 290 64.4136	190 290 64 4861
180 300 64 1933	190 300 64 2512
180 310 63.9999	190 310 64 0435
180 320 63.831	190 320 63 8606
180 330 63.6844	190 330 63 7004
180 340 63.5585	190 340 63.5611
180 350 63.4514	190 350 63 441
180 360 63.3617	190 360 63.3385
180 370 63.2881	190 370 63.2523
180 380 63.2294	190 380 63.1812
180 390 63.1843	190 390 63.1241
180 400 63 152	190 400 63.0799
180 410 63.1315	190 410 63.0477
180 420 63 122	190 420 63.0268
180 430 63.1227	190 430 63.0162
180 440 63 1329	190 440 63.0153
180 450 63.152	190 450 63.0235
180 460 63 1794	190 460 63.0402
180 470 63.2146	190 470 63.0648
180 480 63.257	190 480 63 0968

180 490 63.3062	190 490 63 1358	
180 500 63.3617	190 500 63.1812	
180 510 63.4233	190 510 63.2328	
180 520 63.4904	190 520 63.2902	
180 530 63 5629	190 530 63.3529	
180 540 63 6402	190 540 63.4207	
180 550 63.7223	190 550 63 4933	
200 250 65.9268	210 250 66 1284	
200 260 65.5378	210 260 65.7252	
200 270 65.1894	210 270 65.3629	
200 280 64 8775	210 280 65 0376	
200 290 64.5988	210 290 64 7457	
200 300 64 3502	210 300 64 4844	
200 310 64.1292	210 310 64.2508	
200 320 63.9333	210 320 64.0427	
200 330 63.7603	210 330 63 8578	
200 340 63.6086	210 340 63 6943	
200 350 63.4762	210 350 63.5505	
200 360 63 3617	210 360 63 4248	
200 370 63.2638	210 370 63 3159	
200 380 63.1812	210 380 63.2225	
200 390 63 1128	210 390 63 1435	
200 400 63.0575	210 400 63.0778	
200 410 63.0144	210 410 63.0245	
200 420 62.9828	210 420 62 9828	
200 430 62 9617	210 430 62.9518	
200 440 62 9504	210 440 62.9309	
200 450 62.9485	210 450 62.9193	
200 460 62 9551	**210 460 62.9166**	**------> VALOR MINIMO DE W p2=210, p3=460.**
200 470 62 9698	210 470 62 922	
200 480 62.9921	210 480 62.9352	
200 490 63.0215	210 490 62.9556	
200 500 63 0575	210 500 62 9828	
200 510 63.0998	210 510 63.0163	
200 520 63 1479	210 520 63 0559	
200 530 63.2016	210 530 63.1011	
200 540 63.2605	210 540 63.1516	
200 550 63 3243	210 550 63.2071	
220 250 66 3561	230 250 66 6059	
220 260 65 9395	230 260 66.1767	
220 270 65.5642	230 270 65.7891	
220 280 65 2262	230 280 65 4392	
220 290 64.922	230 290 65 1233	

220 300 64 6486	230 300 64.8385
220 310 64.4032	230 310 64.5821
220 320 64 1836	230 320 64.3516
220 330 63.9874	230 330 64.1449
220 340 63.8129	230 340 63 96
220 350 63 6584	230 350 63 7952
220 360 63 5221	230 360 63 649
220 370 63.4029	230 370 63 52
220 380 63.2993	230 380 63 4069
220 390 63.2103	230 390 63.3085
220 400 63.1348	230 400 63.2238
220 410 63.0719	230 410 63 1518
220 420 63 0208	230 420 63 0917
220 430 62.9805	230 430 63.0427
220 440 62.9504	230 440 63.0041
220 450 62.9299	230 450 62.9751
220 460 62.9183	230 460 62.9551
220 470 62.9151	230 470 62 9436
220 480 62 9197	230 480 62.9401
220 490 62.9316	230 490 62.9441
220 500 62.9504	230 500 62 9551
220 510 62 9758	230 510 62.9727
220 520 63 0072	230 520 62.9965
220 530 63.0445	230 530 63.0262
220 540 63.0871	230 540 63.0614
220 550 63.1348	230 550 63 1018

240 250 66 8748	250 250 67.1599
240 260 66.4337	250 260 66.7075
240 270 66.0344	250 270 66.2973
240 280 65 6732	250 280 65 9253
240 290 65.3463	250 290 65.588
240 300 65 0508	250 300 65 2823
240 310 64.7839	250 310 65.0054
240 320 64 5431	250 320 64 7549
240 330 64.3263	250 330 64 5287
240 340 64.1316	250 340 64.3247
240 350 63 9573	250 350 64 1412
240 360 63.8016	250 360 63 9766
240 370 63 6634	250 370 63 8296
240 380 63 5412	250 380 63.6988
240 390 63.4339	250 390 63.5831
240 400 63.3405	250 400 63 4814
240 410 63 26	250 410 63.3928
240 420 63.1914	250 420 63.3163

240 430 63.1341	250 430 63 2511
240 440 63.0873	250 440 63 1966
240 450 63.0503	250 450 63 152
240 460 63.0225	250 460 63 1167
240 470 63.0033	250 470 63 0901
240 480 62.9921	250 480 63.0717
240 490 62.9885	250 490 63.061
240 500 62 9921	250 500 63.0575
240 510 63.0024	250 510 63.0608
240 520 63 019	250 520 63 0706
240 530 63.0415	250 530 63.0864
240 540 63 0697	250 540 63.1079
240 550 63 1032	250 550 63.1348

260 250 67.4591	270 250 67.7703
260 260 66.9959	270 260 67 2969
260 270 66.5753	270 270 66.8663
260 280 66.1931	270 280 66.4745
260 290 65 8459	270 290 66 1178
260 300 65.5305	270 300 65.7932
260 310 65 2442	270 310 65 4979
260 320 64.9844	270 320 65.2294
260 330 64.7491	270 330 64.9855
260 340 64.5363	270 340 64.7642
260 350 64.3442	270 350 64.5639
260 360 64.1711	270 360 64.3828
260 370 64.0158	270 370 64.2195
260 380 63.8769	270 380 64.0728
260 390 63 7532	270 390 63.9415
260 400 63.6436	270 400 63 8245
260 410 63 5473	270 410 63.7208
260 420 63 4632	270 420 63.6295
260 430 63.3906	270 430 63.5498
260 440 63.3287	270 440 63.4809
260 450 63.2769	270 450 63.4222
260 460 63.2345	270 460 63.3731
260 470 63.2009	270 470 63.3328
260 480 63.1756	270 480 63.301
260 490 63.1581	270 490 63.277
260 500 63.1479	270 500 63.2605
260 510 63.1447	270 510 63.251
260 520 63.1479	270 520 63.2481
260 530 63.1573	270 530 63.2513
260 540 63.1725	270 540 63.2605
260 550 63.1932	270 550 63.2752

280 250 68 0919	290 250 68.4225	300 250 68 7607
280 260 67 6088	290 260 67.93	300 260 68 2593
280 270 67.1687	290 270 67.4809	300 270 67 8015
280 280 66.7676	290 280 67.071	300 280 67 3832
280 290 66 402	290 290 66 6967	300 290 67 0007
280 300 66 0686	290 300 66.3549	300 300 66.6509
280 310 65 7647	290 310 66.0428	300 310 66.331
280 320 65.4878	290 320 65.758	300 320 66 0384
280 330 65.2357	290 330 65 498	300 330 65.771
280 340 65.0064	290 340 65.2611	300 340 65.5268
280 350 64.7982	290 350 65 0454	300 350 65.3039
280 360 64.6094	290 360 64 8492	300 360 65.1007
280 370 64.4386	290 370 64 6713	300 370 64 9158
280 380 64 2845	290 380 64.5101	300 380 64.7479
280 390 64.1459	290 390 64.3646	300 390 64 5958
280 400 64 0218	290 400 64.2336	300 400 64.4583
280 410 63.9111	290 410 64.1162	300 410 64.3345
280 420 63.8129	290 420 64.0115	300 420 64.2234
280 430 63 7264	290 430 63.9185	300 430 64.1243
280 440 63 6509	290 440 63 8367	300 440 64 0364
280 450 63 5857	290 450 63.7652	300 450 63.9589
280 460 63 5301	290 460 63.7034	300 460 63.8912
280 470 63.4835	290 470 63 6508	300 470 63.8328
280 480 63 4454	290 480 63 6067	300 480 63.783
280 490 63.4153	290 490 63 5707	300 490 63.7414
280 500 63.3927	290 500 63.5423	300 500 63.7075
280 510 63.3772	290 510 63 5211	300 510 63.6808
280 520 63 3684	290 520 63 5066	300 520 63.6609
280 530 63 3658	290 530 63 4986	300 530 63.6475
280 540 63.3693	290 540 63.4965	300 540 63.6402
280 550 63.3783	290 550 63.5001	300 550 63.6387

3.7 APLICACIONES EN LA ABSORCION DE GASES.

Dentro de las operaciones unitarias la absorción de gases estudia la separación de uno o varios componentes de una mezcla gaseosa por disolución en un líquido. al poner en contacto un gas con un líquido en el que es soluble , las moléculas del gas pasan al líquido formando una disolución en aquel, y al mismo tiempo las moléculas disueltas en el líquido tienden a volver a la fase gaseosa, estableciéndose un equilibrio dinámico entre las moléculas del gas que pasan a la disolución y las que retornan a la fase gaseosa

La solubilidad del gas en el líquido es función de la naturaleza de ambos componentes, de la temperatura de la presión parcial del gas en la fase gaseosa y de la concentración del gas disuelto en el líquido.

Las solubilidades de gases en líquidos se expresan de diferentes formas. en forma numérica, por medio de tablas y también por medio del coeficiente de la Ley de Henry., según la cual la concentración de un componente en una fase es proporcional a su concentración en la otra es decir

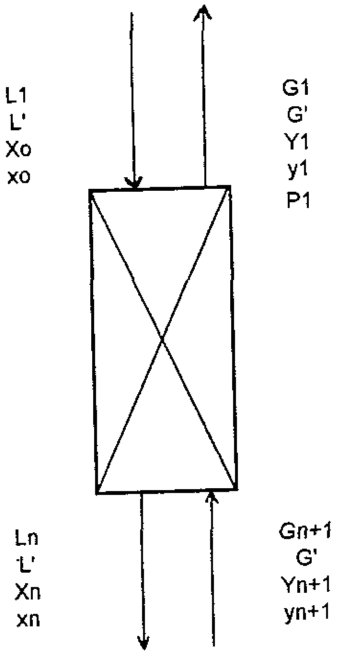
$$P^*=H\,c$$

donde H es el coeficiente de la Ley de Henry, cuyo valor numérico depende del sistema considerado y de la temperatura, P^* representa la presión parcial del soluto en la fase gaseosa y c su concentración en la fase líquida

La cantidad total de gas G que pasa a través de la torre en sentido ascendente por unidad de tiempo y área de sección normal al flujo (mol/h m2) consta de G' moles de inerte o componente que no se difunde y soluto o componente que se difunde

Para la cantidad total de líquido L que baja a lo largo de la torre por unidad de tiempo y área de sección normal de flujo (mol/h m2) consta de L' moles de absorbente no volátil que no se difunde

En la figura que se muestra a continuación se representa esquemáticamente una torre de absorción con funcionamiento en contra corriente, en el interior de la cual se efectúa el contacto líquido-gas.



La composición de la fase gaseosa se expresa en fracción molar y, presión parcial p, o *relación molar* Y (moles de componente que se difunde por mol de componente inerte). La composición de la fase líquida se expresa en fracción molar x, o en relación molar X (moles de componente que se difunde por mol de componente inerte)

La transferencia de masa entre las fases en una columna empacada toma lugar

a) Cuando la transferencia esta controlada por la película de gas controla
b) *Cuando* la transferencia del esta controlada por la película de líquido controla
c)Cuando existe un mecanismo de control de ambas fases.

Para expresar la facilidad ó dificultad en la transferencia bajo determinadas condiciones de operación en el equilibrio, se evalúan el número de unidades de transferencia Nog, Nol

Para las soluciones diluidas se tiene la siguiente relación.:

$$N_{OG}=\int_{y2}^{y1}\frac{dy}{(y-y^{*})}$$

en donde y1 , y2 representan las concentraciones en concentración molar del soluto en la fase gaseosa, y y* la fracción molar del soluto en la fase gaseosa en el equilibrio

a continuación se resolverá un ejemplo empleando funciones de Mathematica para encontrar el número de unidades de transferencia

Una torre empacada de 10 pulgadas de diámetro interior con sillas Berl de una pulgada se utilizará para absorber un gas de venteo en agua a 85 grados Fahrenheit. Los datos de laboratorio muestran que la solubilidad se ajusta a la Ley de Henry y es

$$y^{*}=1.5\ x$$

donde x es la fracción molar del soluto en la fase líquida

Los flujos molares son:

G1'=200 mols gas/hr pie2

L2'=500 mols de agua /hr pie2

y1=0.03

y2=0.001

x2=0

Del balance de materia resulta

G1(y1-y2)=200 (y1-0.001)

L2(x2-x1)=500 (0-x1)

Es decir:

200(y1-0.001)=500(0-x1) dado que el signo negativo de x1 solo indica el sentido de la transferencia la ecuación anterior puede escibirse como

200(y1-.001)=500 x1 y el número de unidades de transferencia se obtiene calculando:

$$N_{OG} = \int_{y2}^{y1} \frac{dy}{(y - y^*)}$$

A continuación se describe el programa en Mathematica .

Clear[y,x,a,b]

a=Solve[200 (y-0.001)==500 x,x]

{{x -> 0.4 (-0 001 + y)}}

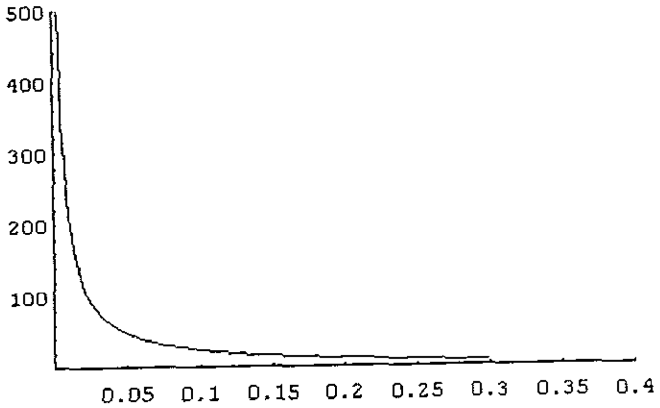
b=.4 (-.001+y);

NIntegrate[1/(y-1.5 b),{y,.001,.03}] Cálculo de la integral.

6 33424 El número de unidades de transferencia .

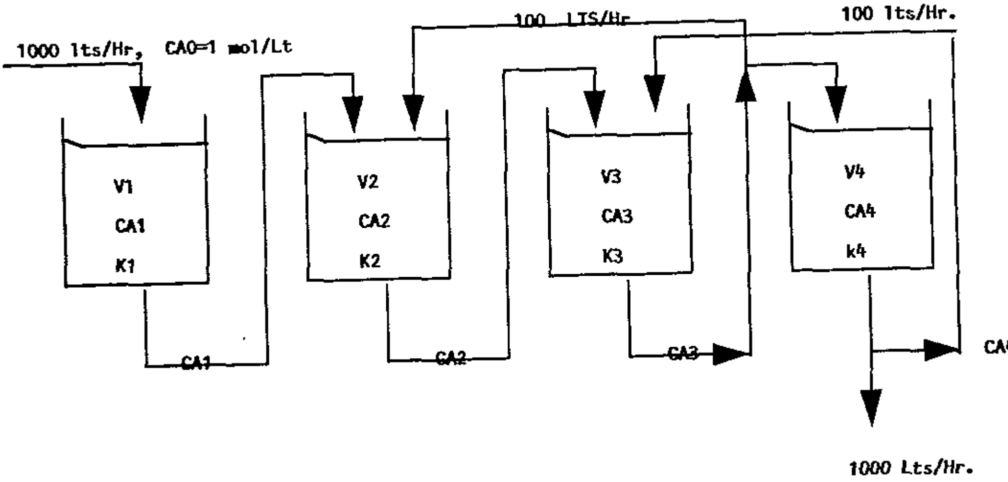
La gráfica que se ha integrado se puede obtener mediante la siguiente función de Mathematica.

Plot[1/(y-1.5 b),{y,0.001,0.3},PlotRange->
{{0.001,0.4},
{0,500}},AspectRatio->1]



3.8 SOLUCION DE SISTEMAS DE ECUACIONES.

A continuación se aplicara el programa Mathematica para resolver un sistema de ecuaciones generado en el planteamiento de un problema de cinética química
Una reacción química se realiza en un sistema de cuatro reactores agitados en proceso continuo como se muestra en la siguiente figura



La reacción química es de primer orden irreversible del tipo

$$A \xrightarrow{k1} B$$

Las condiciones de temperatura en cada reactor son tales que el valor de k1 es diferente en cada reactor. También, el volumen en cada reactor es diferente

Los valores de ki y el volumen de cada reactor son

REACTOR	Vi, lts.	k , 1/h
1	1000	0.1
2	1500	0.2
3	100	0 4
4	500	0 3

Las siguientes consideraciones tienen lugar

a) El sistema esta en estado estacionario.
b) La reacción se realiza en fase liquida.
c) No hay cambio en el volumen ó en la densidad de el liquido.

d)La velocidad de desaparición del componente A en cada reactor está dada por.

$$R_i = V_i k_i C_{A_i}$$

aplicando el balance de materia para cada uno de los cuatro reactores se tiene:

$$(100)(1) = 1000C_{A1} + V_1 k_1 C_{A1}$$

$$000C_{A1} + 100C_{A3} = 1100C_{A2} + V_2 k_2 C_{A2}$$

$$100C_{A2} + 100C_{A4} = 1200C_{A3} + V_3 k_3 C_{A3}$$
$$100C_{A3} = 1100C_{A4} + V_4 k_4 C_{A4}$$

Sustituyendo los valores de Vi y de ki se tiene:

$$100C_{A1} = 1000$$
$$000C_{A1} - 1400C_{A2} + 100C_{A3} = 0$$
$$100C_{A2} - 1240C_{A3} + 100C_{A3} = 0$$
$$100C_{A3} - 1250C_{A4} = 0$$

con lo que el sistema de solución de las ecuaciones simultáneas es.

$$\begin{bmatrix} 1100 & 0 & 0 & 0 \\ 1000 & -1400 & 100 & 0 \\ 0 & 1100 & -1240 & 100 \\ 0 & 0 & 1100 & -1250 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{A1} \\ C_{A2} \\ C_{A3} \\ C_{A4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1000 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

El sistema de ecuaciones puede ser resuelto mediante la función de Mathematica **LinearSolve**[m,b], la cual calcula el vector x que resuelve el sistema de ecuaciones representados en forma de matriz:

$$[\mathbf{m}] \bullet [\mathbf{x}] = \mathbf{b}$$

La función **LinearSolve** puede manipular datos numéricos y simbólicos en las matrices. La matriz m puede ser cuadrada ó rectangular.

A continuación se muestra el programa que resuelve el sistema de ecuaciones del sistema descrito

```
m={{ 1100 ,0,0,0},{1000 ,-1400 ,100,0 },
{0,1100 ,-1240 ,100},{0,0,1100 ,-1250 }};
b={1000,0,0,0};
LinearSolve[m,b]
```

```
 10  28800  2500  2200
{-- --, -----, ----,   -- - ---- }
 11  41327  3757  3757
```

N[%] Realiza la operación para dar un número racional.

{0.909091, 0.696881, 0.665425, 0.585574}

Es decir que la solución corresponde a los siguientes valores:

$$C_{A1} = 0.909091$$
$$C_{A2} = 0.69881$$
$$C_{A3} = 0.665425$$
$$C_{A4} = 0.585574$$

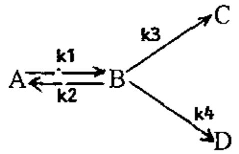
Como se aprecia en esta aplicación el programa Mathematica permite con unos cuantos comandos arribar a la solución de un sistema de ecuaciones simultáneas

3.9 UTILIZACION DE LAS FUNCIONES DE MATHEMATICA DE DERIVACION Y SOLUCION DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS.

En algunos problemas de la Ingeniería Química aparecen ecuaciones diferenciales las cuales pueden ser resueltas de forma simbólica por el programa Mathematica lo que permite obtener una función algebraica de su solución.

A fin de demostrar la solución de ecuaciones diferenciales a continuación se realiza el planteamiento de un problema de cinética química:

En un reactor cerrado se lleva a cabo la siguiente reacción



Los componentes presentan las siguientes concentraciones iniciales·

ca0=50 gmol/lt.
cb0=5.0
cc0=0
cd0=0

las constantes de las velocidades de reacción son·

k1=2.00 1/h
k2=1
k3=0.2
k4=0 6

Se trata de encontrar el tiempo de residencia óptimo para obtener el rendimiento óptimo de el producto cb.

A partir de las velocidades de reacción asumiendo que son de primer orden se tiene:

$$\frac{dca}{dt} = -k1ca + k2cb. \quad (a)$$

$$\frac{dcb}{dt} = k1ca - (k2 + k3 + k4)cb \quad .(b)$$

$$\frac{dcc}{dt} = k3cb...(c)$$

$$\frac{dcd}{dt} = k4cb. \ .(d)$$

así mismo del balance de materiales se tiene

ca+cb+cc+cd=ca0+cb0+cc0+cd0...(e)

Se requiere resolver la concentración de cb como función del tiempo, para lo cual

De la ecuación (b) resolviendo para ca se tiene.

$$ca = \frac{1}{k1}\left[\frac{dcb}{dt} + (k2 + k3 + k4)cb\right] \quad (f)$$

Sustituyendo los valores de las constantes de velocidades de reacción se tiene·

$$ca = \frac{1}{2.00}\left(\frac{dcb}{dt} + 1.80cb\right)..(f)$$

Diferenciando la ecuación anterior con respecto al tiempo se tiene.

$$\frac{dca}{dt} = \frac{1}{2\,00}\left(\frac{d^2cb}{dt^2} + 1.80\frac{dcb}{dt}\right)..\ (g)$$

Sustituyendo en la ecuación (a) los valores dela derivada de ca respecto de t y ca en función de cb como se muestra en la ecuación (f) se tiene·

$$\frac{d^2cb}{dt^2} + 3\ 80\frac{dcb}{dt} + 1.60cb = 0...(h)$$

Ahora procederemos a resolver esta ecuación diferencial homogénea de segundo orden empleando los comandos de Mathematica·

DSolve[{ cb''[t]+3.80 cb'[t]+1.60 cb[t]==0},cb[t],t]

```
               C[1]         C[2]
{{cb[t] -> ---------- + -----------}}. (i)
            3.31774 t     0.482255 t
           E             E
```

Mathematica presenta la solución general en este caso con las dos constantes que serán calculadas a continuación.

De las ecuaciones (f) e (i) se obtiene la siguiente expresión:

a=c1 E^(-3.31774 t) + c2 E^(-0.48225 t); reescritura de la solución

ca= 1/2(D[a,t]+1.8 cb) Expresión en Mathematica de la ecuación (f), con cálculo de la derivada de cb respecto a t

```
          3.31774 c1     0.48225 c2
1 8 cb -  ----------   - ---------------
           3 31774 t     0 48225 t
          E              E
-----------------------------------------   Expresión de la ecuación (f)
                     2
```

Ahora se procederá a obtener los valores de c1 y c2.

%/.{cb->5,t->0}

$$\frac{9 - 3.31774\ c1 - 0.48225\ c2}{2}$$

Es decir se tiene la ecuación anterior que es igual a ca, si se sustituye el valor de ca=50 ya que ca(0)=50 y ya que cb(0)= 5 entonces c1+c2=5 de la ecuación (i).

La solución de este sistema sencillo de ecuaciones simultáneas en Mathematica es

Solve[{%==50,c1+c2==5},{c1,c2}] Solución de la ecuación anterior para c1 y c2

{{c1 -> -32.9436, c2 -> 37.9436}}

Sustituyendo los valores de c1 y c2 se tiene:

cb=-32.9436 E^(-3.31774 t)+37.9436 E^(-0.48225 t);

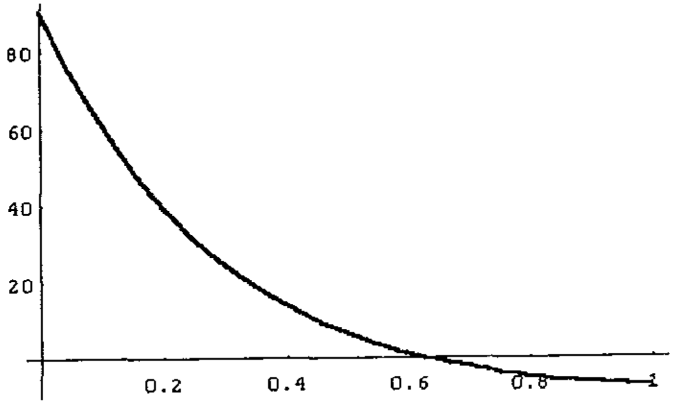
La derivada de cb respecto de t es

m=D[cb,t]

$$\frac{109.298}{E^{3.31774\ t}} - \frac{18.2983}{E^{0.48225\ t}}$$

El punto óptimo se tiene en el punto en que la ecuación anterior es igual a cero, para encontrar este punto a continuación se utiliza la función de Mathematica **Plot** para graficar la ecuación y determinar el punto en donde corta la función el eje de las abscisas.

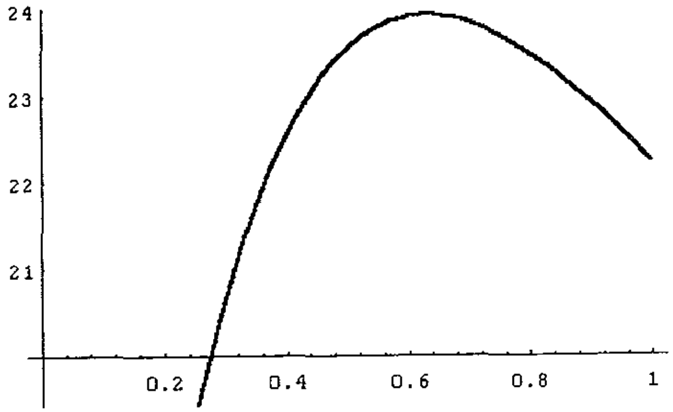
Plot[%,{t,0,1}]



El valor de t en donde la función toma el valor de cero es aproximadamente T=0.63

La concentración de cb en función del tiempo se gráfica a continuación:

Plot[cb,{t,0,1}]



La concentración de cb llega a su máximo en el timpo t=0.63 con un valor de paroximadamente cb=0 23

3 9 APLICACIONES DE MATHEMATICA EN EL ANALISIS DE REGRESION.

En ocasiones se requiere del análisis de datos fisicos o químicos y de correlacionarlos con un modelo matemático que permita establecer una función matemática lineal o no linele que relacione a las variables entre sí

El análisis de procesos es la aplicación de métodos cientificos que permiten el establecimiento de métodos para su solución, una parte fundametal del análisis de procesos es es la de construir a partir de información teórica , experimental o empírica una función matemática que pueda ser utilizada para predecir el comportamiento de un fenómeno fisisco, químico o el comportamiento de un proceso.

El análisis de regresión es la aplicación de métodos matemáticos y estadisticos para el análisis de datos provenientes de un desarrollo experimental, y el ajuste de modelos matemáticos para los datos recabados a traves de la estimación de los parámetros de un modelo matemático propuesto.

Muchos de los modelos matemáticos encontrados en los problemas de la ingeniería Química se relacionan con funciones que tienen parametros no lineales

Un modelo matemático de un sistema ncorresponde a un grupo de ecuaciones que pueden eser usadas para calcular como evoluciona el sistema el estado del sistema es descrito por como un conjunto de variables conocidas El primer paso consiste en desarrollar un modelo matemático que identifique y relacione a las variable.

Las variables de ciontrol son aquellas que pueden ser directamente controladas por el experimentador y que tienen una influencia directa en el sistema . algunos ejempols de las variables de control en una reacción química serían la temperatura, la presión , o la concentración de alguno de los componentes Laas variables de estado son aquellas que describen el estado de una variable y que adoptan un valor como resultado de la modificación de alguna de las variables que afectan al proceso.

Las ecuaciones qu incluyen los modelos matemáticos del proceso son llamadas "Ecuaciones de desempeño",: estas ecuaciones muestran el efecto de las variables de control en la evolución de las llamadas variables de estado. Las ecuacuaciones de desempeño pueden ser ecuaciones diferenciales, ó algebraícas

Los modelos pueden ser escritos en una gran variedad de formas matemáticas La selección de un modelo empírico requiere de la visualización del comportamiento de las variables para proponer untipo de ecuación cuyo comportamiento pueda ser ajustada a los datos por la determinación de parámetros que se mantienen constantes El mejor modelo será aquel que presente el menor error entre los datos observados y los calculados con el modelo

Cuando los modelos son lineales en los coeficientes , estos pueden ser determinados por un procedimiento de regresión lineal. si los coeficientes aparecen en un esquema no lineal, la estimación de estos se desarrolla por un proceso de regresión no lineal

Mathematica es una aplicación escrita en lenguaje C Sin embargo posee un lenguaje en el que se pueden generar programas. Un archivo que contiene definiciones escritas en el propio lenguaje de Mathematica se denomin PAQUETE Para utilizar las definiciones o comandos contenidas en un paquete es necesario previamente cargarlo

Con la versión 2.2 de Mathematica se incluyen cerca de 130mpaquetes de diferente aplicación en cálculo, gráficas, álgebra lineal, estadística, etc

Mathematica permite realizar el análisis de la regresión multidimensional, lineal o no lineal Para ello se cargan los paquetes correspondientes

Para demostrar el uso del paquete de regresión no lineal se plantea a continuación una aplicación de la termodinámica para encontrar una función que describa la capacidad calorifica de una substancia como una función de la temperatura con una ecuación de forma polinómica del tipo:

$$C_p = a + bT + cT^2 + dT^3$$

Los datos de laboratorio obtenidos son:

Temperatura, grados centígrados	Capacidad calorífica. cal/g-mol - C
100.00	29.38
200.00	29 88
300.00	30.42
400 00	30 98
500.00	31.57
600.00	32.15
700.00	32 73
800.00	33.29
900.00	33 82
1000.00	34 31

Para resolver este problema con el paquete de regresión no lineal de Mathematica primeramente se forma la matriz de los datos de la tabla de la siguiente forma:

data1={{100,29.8},{200,,29.88},{300,30.42},{400,30.98}
{500,31.57},{600,32.15},{700,32.73},{800,33.29},{900,33.82},
{1000,34.1}}

posteriormente se carga el paquete mediante el siguiente comando.

<<Statisti\nonlinea.m

y se aplica el comando para resolver el sistema de regresión no lineal y encontrar el valor de las constantes a,b,c,d, de la ecuación polinómica.

NonlinearFit[data1,a+b x+ c x^2+d x^3,x,{a,b,c,d},
ShowProgress->True]

una vez que Mathematica procesa este comando despliega las iteraciones que realiza como se muestra a continuación:

Iteration:1 ChiSquared:$6.400064000478634\ 10^{31}$

Parameters:{1., 1., 1 , 1.}

Iteration:2 ChiSquared:$1.469314578930648\ 10^{26}$

Parameters:{$7.23956\ 10^{12}$, $-1.31393\ 10^{10}$, -67204.2,

0.663935}

Iteration:3 ChiSquared $1.083599650847877\ 10^{26}$

Parameters {$6.69773\ 10^{12}$, $-1\ 15988\ 10^{10}$, -71051 ,

0 644389}

Iteration:4 ChiSquared $2.012820038966331\ 10^{25}$

Parameters:{$2.87589\ 10^{12}$, $-4.93782\ 10^{9}$, -87521 3,

0.560693}

Iteration 5 ChiSquared.$1.001781777912173\ 10^{23}$

Parameters:{$1.84892\ 10^{11}$, $-2\ 47836\ 10^{8}$, -99116 8, 0.501757}

Iteration: 6 ChiSquared: $3.988223300035954\ 10^{20}$

Parameters: {$-1.73973\ 10^{10}$, $1.04714\ 10^{8}$, -99976.3,

0.497266}

Iteration: 7 ChiSquared: $3.922134851870207\ 10^{20}$

Parameters: {$-1.8905\ 10^{10}$, $1.0725\ 10^{8}$, -99859.5,

0.496618}

Iteration: 8 ChiSquared: $3.826969662521758\ 10^{20}$

Parameters: {$-1.86754\ 10^{10}$, $1.05942\ 10^{8}$, -98640.6,

0.490557}

Iteration: 9 ChiSquared: $3.031471435885421\ 10^{20}$

Parameters: {$-1.66214\ 10^{10}$, $9.42908\ 10^{7}$, -87792.,

0.436605}

Iteration: 10 ChiSquared: $6.0647576262283\ 10^{19}$

Parameters: {$-7.43445\ 10^{9}$, $4.21744\ 10^{7}$, -39267.6,

0.195285}

Iteration: 11 ChiSquared: $3.398536489220831\ 10^{17}$

Parameters: {$-5.56529\ 10^{8}$, $3.1571\ 10^{6}$, -2939.5,

0.0146187}

Iteration: 12 ChiSquared: $2.18159759613187\ 10^{13}$

Parameters {-4 45889 10^{6}, 25294 7, -23.5513,

0 000117125}

Iteration:13 ChiSquared 1.368649843276736 10^{7}

Parameters {-3502.68, 20 04, -0.0186539,

9 27689 10^{-8} }

Iteration 14 ChiSquared:0.2336276964774064

Parameters·{28 8239, 0 00636262, -1.07108 10^{-6},

5.31498 10^{-12} }

Iteration·15 ChiSquared.0.167943157423971

Parameters:{29.0686, 0.00497467, 2.21208 10^{-7},

-1 11178 10^{-12} }

{a -> 29 0686, b -> 0 00497466, c -> 2.2121 10^{-7},

d -> -1 1118 10^{-12} }

Mathematica ha realizado15 iteraciones hasta encontrar el valor más pequeño de Chi cuadrada de 0 1679 es decir que los parámetros que presentan una mejor correlación de los datos son los valores de.

a=29 0686

b=0 00497466

c=2.2121 10^{-7}

d=-1 1118 10^{-12}

con lo que la ecuación polinómica queda como

$$C_p = 29\ 0686 + 0.0049746T + 2\ 212\ 10^{-7}\ T^2 + -1\ 11178\ 10^{-12}\ T^3$$

A continuación con el comando Table se genera la tabla de valores que arroja la ecuación ajustada·

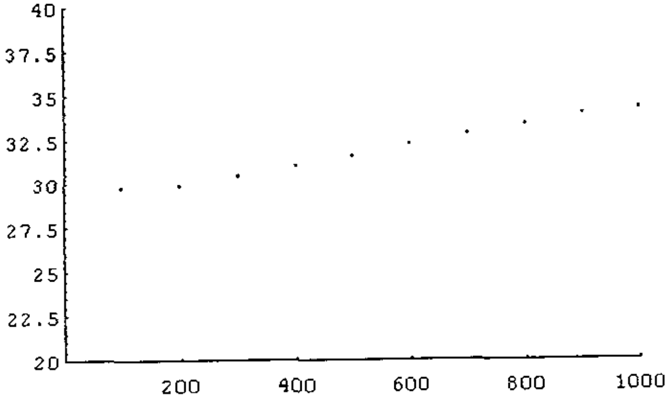
```
Table[{29.06686+ 0.00497466 x+
2.2121 10^-7 x^2-1.1118 10^-12},
{x,100,1000,100}]
```

```
{{29 5665}, {30.0706}, {30.5792}, {31 0921},
 {31.6095}, {32.1313}, {32 6575}, {33.1882},
 {33.7232}, {34 2627}}
```

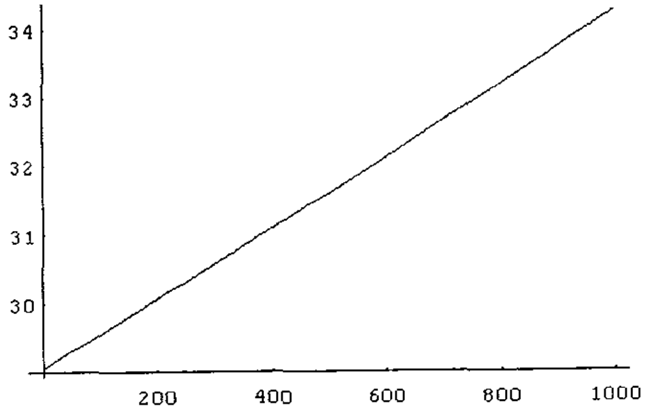
como se aprecia se tiene una buena correlación entre los datos experimentales y los que arroja la función ajustada

La gráfica de los puntos de los datos experimentales y de la función ajustada se muestra a continuación:

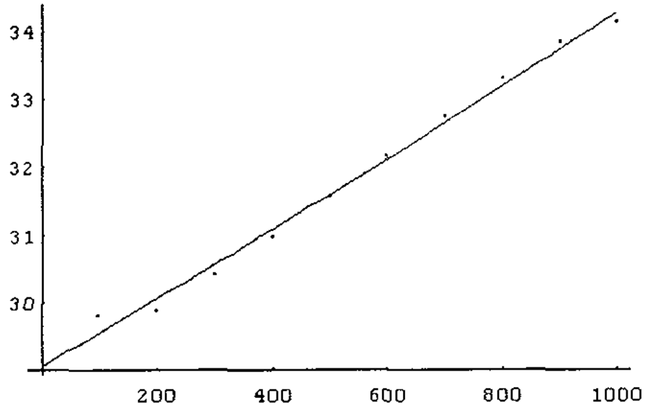
```
data1={{100,29.8},{200,29.88},{300,30.42},{400,30.98},
{500,31.57},{600,32.15},{700,32.73},{800,33.29},
{900,33.82},
{1000,34.1}};
b=ListPlot[data1,PlotRange->{{0,1000},{20,40}}];
```



**a1=Plot[{29.06686+ 0.00497466 x+
2.2121 10^-7 x^2-1.1118 10^-12},
{x,0,1000}];**



Show[a1,b]



El software de Matrhematica tambien contiene un paquete para realizar regresión multiple lineal, teniendose diversas aplicaciones en el campo de las ciencias la ingeniería y la economía

Cuando un fenómeno puede ser representado con un buen grado de presición empleando un modelo matemático con coeficientes lineales el problema consiste en encontrar los coeficientes de la ecuación seleccionada de forma de que esta represente una alto grado de correlación entre los datos observados y los que arroja la ecuación

A fin de demostrar el paquete de regresión múltiple lineal de Mathematica a continuación se plantea un problema en el que se cuenta con los datos obtenidos en un experimento en el que se trata de correlacionar el rendimiento obtenido en una reacción en relación con la temperatura y el tiempo transcurrido Los datos arrojados en el experimento son.

TIEMPO h.	TEMPERATURA. grados centígrados	RENDIMIENTO. %
1	240	24
5	240	42
1	280	3
5	280	19
1	240	24
5	240	46
1	280	5
5	280	21

Se tratará de encontrar los coeficientes de una ecuación del tipo·

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2$$

Primeramente se procede a cargar el paquete de regresión múltiple lineal

<<Statisti\linearre.m
Clear[all]
data2={{1,240,24},{5,240,42},{1,280,3},{5,280,19},{1,240,24},
{5,240,46},{1,280,5},{5,280,21}}; Matriz del conjunto de datos

Regress[data2,{1,x1,x2},{x1,x2},OutputList->{BestFit,PredictedResponse}]
Función para desarrollar la regresión para calcular X1 y X2 y proyectar los valores de la ecuación obtenida

La respuesta que entrega Mathematica es:

{BestFit -> 152.5 + 4.5 x1 - 0.55 x2, Ecuación ajustada.

PredictedResponse ->

{25 , 43., 3., 21., 25., 43., 3., 21.}, Valores proyectados.

ParameterTable ->

	Estimate	SE	TStat	PValue \
1	152 5	9 28036	16 4326	0 0000152299
x1	4 5	0 353553	12.7279	0 000053237
x2	-0 55	0.0353553	-15 5563	0 0000199401

, RSquared -> 0.987775, Coeficiente de correlación.

AdjustedRSquared -> 0 982885,

EstimatedVariance -> 4 ,

ANOVATable -> Tabla del análisis de varianza

	DoF	SoS	MeanSS	FRatio	PValue
Model	2	1616	808	202.	0.0000165241
Error	5	20.	4.		
Total	7	1636			

}

3.10 APLICACIONES DE MATHEMATICA AL CONTROL ESTADISTICO DE CALIDAD.

Cuando se toman muestras de una población finita en la que se detectan elementos sin defectos y otros con fallas y además se realiza la muestra sin reemplazo es decir la población permanece igual como cuando seleccionamos n diferentes elementos de entre N elementos de que consta la población en donde N es un número relativamente grande, se tiene una distribución del tipo de una variable aleatoria hipergeomét rica

La distribución de probabilidad conocida como distribución hipergeométrica de probabilidad se aplica para el cálculo de la probabilidad de encontrar x cantidad de elementos defectuosos de una población de acuerdo a una variable discreta aleatoria de probabilidad llamada hipergeométrica.

Las características que definen una variable aleatoria hipergeométrica son.

1 - El experimento consiste en seleccionar n elementos sin remplazo de una población de N elementos, de los cuales r son aceptables y (N-r) tienen defectos.

2 - La muestra n es relativamente grande en relación al número total de elementos N de tal forma que n/N>0.05.

3 - La variable aleatoria hipergeométrica y es el número de elementos aceptados encontrados en la muestra n.

La distribución de probabilidad hipergeométrica está dada por:

$$p(y) = \frac{\binom{r}{y}\binom{N-r}{n-y}}{\binom{N}{n}}$$

donde·

N= Número total de elementos.
r=Número de elementos sin defectos en la pobalción N.
n=Número de elementos de la muestra.
y=Número de elementos satisfactorios en la muestra de n elementos

donde el numerador indica el número de muestras que pueden obtenerse con y de ellos satisfactorios y el resto aceptables, y el denominador el número total de muestras posibles

La media y la varianza de una variable aleatoria hipergeométrica están dadas por

$$\mu = \frac{nr}{N}$$

$$\sigma^2 = \frac{r(N-r)n(N-n)}{N^2(N-1)}$$

Mathematica habilita una función para la función de distribución de la variable hipergeométrica, que viene dada por

PDF[HypergoemetricDistribution[n,m,j],k]

A continuación se emplea la función de la variable hipergeométrica para aplicaciones en el control estadístico de calidad

Se disponen de 1000 tons. de un polímero almacenado en recipientes de 200 kg, de los cuales se sabe que 20 tienen una variable fuera de especificación; si tomamos una muestra de 100 envases , se desea conocer la probabilidad de que no existan más de 3 defectuosas

La probabilidad de que como mucho se tengan 3 unidades defectuosas será el valor de la función de distribución en el punto 3, que se calculará mediante la expresión de Mathematica·

Primeramente cargaremos el paquete de funciones estadísticas que se incluye en el software de Mathematica mediante el comando

<<Statisti\discrete.m

Posteriormente se aplica la expresión de Mathematica de la función hipergeométrica:

CDF[HypergeometricDistribution[100,20,1000],3]

con lo que Mathematica entrega el siguiente resultado

15194391602717502581725294642914

174838439018167991104004974596 35

que puede convertirse en un número racional mediante:

N[%]

0.869053

que corresponde a la probabilidad buscada

Se desea ahora saber cual es la probabilidad de que *los 100 envases contengan* material dentro de especificación

Para encontrar esta solución se aplica el comando de Mathematica para la distribución hipergeométrica de la siguiente manera

CDF[HypergeometricDistribution[100,20,1000],0]

La respuesta que da Mathematica es

$$\frac{208061096750418040939657220591 4}{1748384390181679911040049745963 5}$$

Que se transforma en un número real mediante el comando

N[%]

0 119002

Es decir que la probabilidad de que cero envases contengan material defectuoso es del 11 90 %

OTRAS APLICACIONES ESTADISTICAS DE MATHEMATICA

Una variable aleatoria x se dice que tiene una distribución beta con parámetros z y w (z>0, w>0) si tiene la siguiente función de densidad

$$f(x) = \frac{1}{\beta\ (z,w)} x^{z-1}\,(1-x)^{w-1}$$

si 0<x<1 y f(x)=0 en el resto.

donde $\beta\ (z,w) = \dfrac{\Gamma(z)\ \Gamma(w)}{\Gamma(z+w)} = \displaystyle\int_0^1 t^{\ a-1}\ (1-t)^{\ b-1}\ dt$

siendo Γ la función gama .

El programa mathematica también permite calcular el valor de la función de distribución de una variable aleatoria x beta de parámetros z y w en el punto x mediante la función

F(x)=p(X<=x)=CDF[BetaDistribution[x,z],w]

Esta variable se denomina beta incompleta de primera especie.

A continuación se muestra una aplicación de estas funciones.

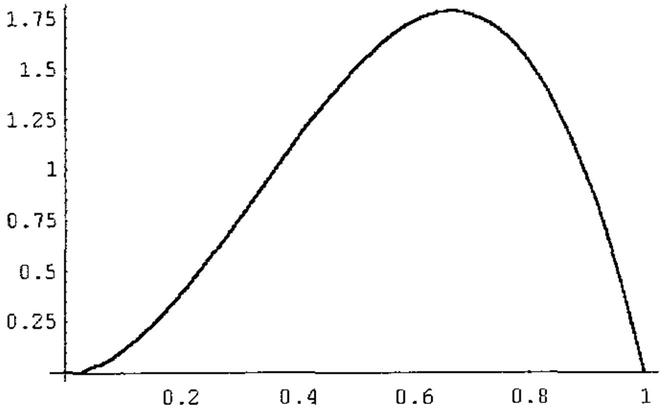
Si el porcentaje de impurezas por unidad de producción en un producto químico es una variable aleatoria Y que presenta una función de densidad:

$f(y) = 12\,y^2(1-y)$ *si* $0 < y < 1$ y f(y)=0 en otro caso

Se sabe que un producto con más de 40 % de impurezas no es posible utilizarlo. Se desea encontrar cuál es la probabilidad de que una unidad de producción seleccionada al azar no funcione porque tenga *demasiadas impurezas*.

Primeramente graficamos la función de probabilidad para poder comparar el tipo de distribución que presenta y entonces determinar los valores de z y de w

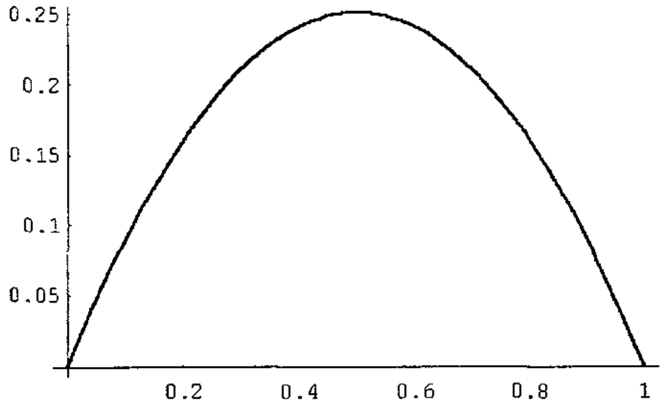
Plot[12 y^2 (1-y),{y,0,1}]



Ahora graficamos la función beta para los valores, z=2, w=2

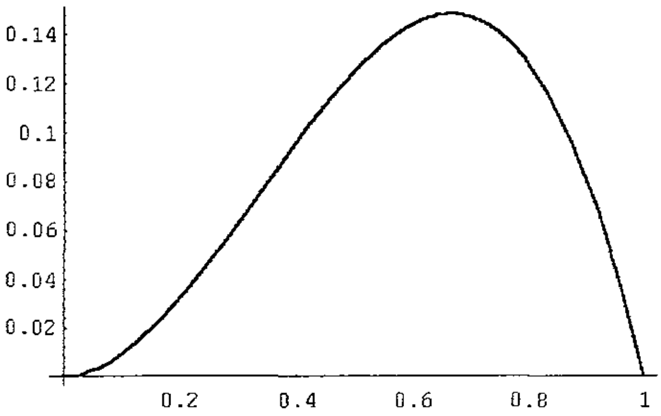
Clear[z,w]
z=2,
w=2;

Plot[(t^(z-1)) (1-t)^(w-1),{t,0,1}]



Como se aprecia la distribución beta presenta una configuración diferente a la función de distribución del problema, ahora graficamos la función beta con los valores z=2, w=3

```
Clear[z,w]
z=3;
w=2,
Plot[(t^(z-1)) (1-t)^(w-1),{t,0,1}]
```



Como se ve esta distribución presenta el perfil de la función de probabilidad por lo que *ahora calculamos la probabilidad con estos valores de z y w.*

Beta[3,2]

La respuesta de Mathematica es

1
--
12

es decir se tiene una probabilidad de 0 0833 ó 8 33% de que el producto sea defectuoso

3.11 APLICACIONES DE MATHEMATICA A LA SOLUCION DE PROBLEMAS PRESENTADOS EN LOS FENOMENOS DE TRANSPORTE"

El estudio de los fenómenos transitorios de transferencia de momentum, energía y masa son estudiados dentro de un campo que se le ha denominado como fenómenos de transporte La solución de estos problemas conduce al planteamiento y solución de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales de primero y de segundo orden

El programa Mathematica permite la manipulación de ecuaciones matemáticas complejas de una forma relativamente sencilla

A continuación se plantea un problema hipotético de transferencia de calor para su solución mediante diversos comandos de Mathematica

Una lámina que ocupa el espacio comprendido entre y= -b e y=+b está inicialmente a la temperatura To. En el instante t=0 las superficies situadas en y=±b se ponen bruscamente a T1 y se mantienen a esta temperatura. Hallar T(y,t).

Este es un problema de conducción no estacionaria del calor en un sólido, y que es descrita por la ecuación de Fourier que se expresa como:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$$

en donde α representa la difusividad térmica del sólido es decir

$$\alpha = \frac{k}{C_p \rho}$$

Se introducen los siguientes números adimensionales

$$\Theta = \frac{T_1 - T}{T_1 - T_0} \quad \textit{temperatura admensional}$$

$$\eta = \frac{y}{b} \quad \textit{longitud adiMensional.}$$

$$\tau = \frac{\alpha t}{b^2} \quad \textit{tiempo adiMensional.}$$

La ecuación diferencial toma la forma

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \eta^2}$$

con las siguientes condiciones de frontera

para $\tau=0$ $\Theta=1$

para $\eta=\pm 1$ $\Theta=0$

La solución de esta ecuación diferencial parcial de segundo orden puede realizarse por el método de separación de variables siendo su solución de cuerdo a R B. Bird.

$$\frac{T_1 - T}{T_1 - T_0} = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(n+\frac{1}{2})\pi} e^{-(n+\frac{1}{2})^2 \pi^2 \alpha t / b^2} \cos(n+\frac{1}{2})\frac{\pi y}{b}$$

Se puede escribir la ecuación anterior como·

$$\Theta = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(n+\frac{1}{2})\pi} e^{-(n+\frac{1}{2})^2 \pi^2 \alpha t / b^2} \cos(n+\frac{1}{2})\frac{\pi y}{b}$$

ahora se calculará la ecuación anterior utilizando los comandos de Mathematica para el cálculo de la sumatoria

```
Clear[n,t,alfa,b,y]

a=2*Sum[(-(1)^n)/((n+1/2) Pi) Exp[(-(n+1/2)^2)
(Pi^2 alfa t/b^2)]
Cos[(n+1/2) Pi y/b],{n,0,5}]
```

El programa Mathematica desarrolla la sumatoria desde n=0 hasta n=5 en forma simbólica como se muestra a continuación.

```
            Pi y
     -2 Cos[----]
             2 b
2 (----------------------- -
             2       2
   (alfa Pi  t)/(4 b )
  E                    Pi

               3 Pi y
         2 Cos[------]
                 2 b
   ---------------------------- -
                 2       2
      (9 alfa Pi  t)/(4 b )
   3 E                     Pi

               5 Pi y
         2 Cos[------]
                 2 b
   ---------------------------- -
                 2       2
      (25 alfa Pi  t)/(4 b )
   5 E                       Pi

               7 Pi y
         2 Cos[------]
                 2 b
   ---------------------------- -
                 2       2
      (49 alfa Pi  t)/(4 b )
   7 E                       Pi
```

```
          9 Pi y
    2 Cos[------]
            2 b
---------------------------- -
                  2      2
    (81 alfa Pi  t)/(4 b )
9 E                        Pi

          11 Pi y
    2 Cos[-------]
             2 b
-----------------------------)
                   2      2
    (121 alfa Pi  t)/(4 b )
11 E                        Pi
```

A continuación se realizan con Mathematica los cálculos numéricos para los siguientes valores.

y/b=[0,1]

Θ=[0,1]

Para simplificar el cálculo se realizan las siguientes sustituciones en la sumatoria

η=y/b

αt/b^2

Los comandos para formar una tabla de valores numéricos es:

```
Clear[a,n,t,alfa,b,y,eta]
alfa=1;
r=1;
a=Table[2*Sum[(-(1)^n)/((n+1/2) Pi) Exp[(-(n+1/2)^2)
(Pi^2 r)]
Cos[(n+1/2) Pi eta],{n,0,10}],{eta,0,1,0.1}];
N[%]
```

La respuesta que se obtiene como valores numéricos es:

{-0 107977, -0.106648, -0 102692, -0 0962083,

-0 0873553, -0 0763513, -0 0634673, -0 0490206,

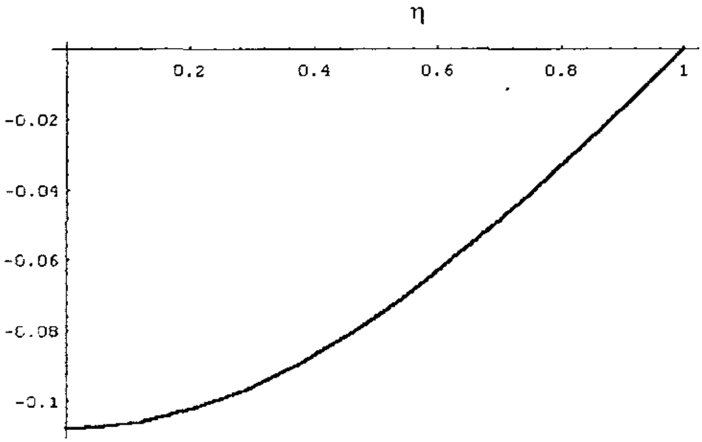
-0.0333667, -0 0168913, $-6\ 61169\ 10^{-18}$ }

que corresponde a los valores de Θ para valores de r de 0 a 1 con incrementos de 0 1

a continuación se gráfica esta función con los siguientes comandos

Plot[(2*Sum[(-(1)^n)/((n+1/2) Pi) Exp[(-(n+1/2)^2)
(Pi^2 r)]
Cos[(n+1/2) Pi eta],{n,0,10}]),{eta,0,1}]

La gráfica es:



$$\Theta = \frac{T_1 - T}{T_1 - T_0}$$

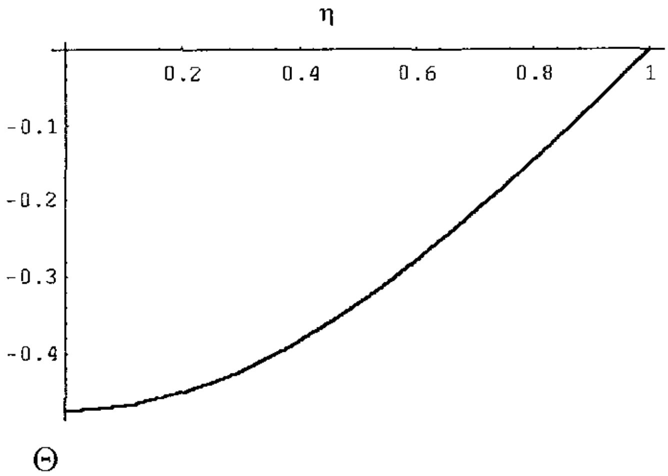
Los valores para r= 0.4 son

{-0 474605, -0 468756, -0 451355, -0 422833, -0.383898,

-0 335513, -0 278875, -0.215381, -0.146595, -0 0742087,

$-2\ 90468\ 10^{-17}$ }

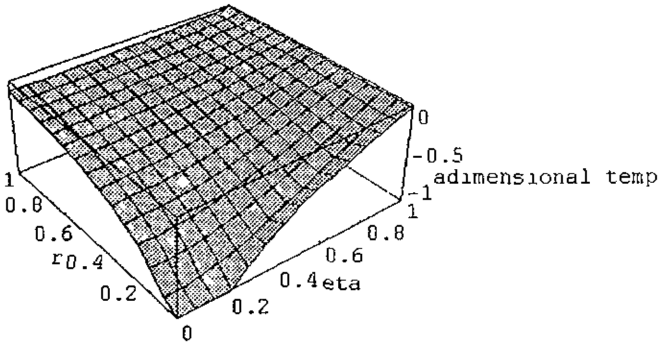
cuya gráfica es:



Asi mismo el programa Mathematica tiene la capacidad de realizar gráficas en tres dimensiones, a continuación se gráfica la variable Θ en función de η y r para lo cual se escribe la siguiente linea de programa

```
Clear[r]

Plot3D[(2*Sum[(-(1)^n)/((n+1/2) Pi) Exp[(-(n+1/2)^2)
(Pi^2 r)]
Cos[(n+1/2) Pi eta],{n,0,10}]),{eta,0,1},{r,0.01,1},
ViewPoint->{-1.860,-2.400,2.000},AxesLabel->{eta,r,temp
adimensional}]
```

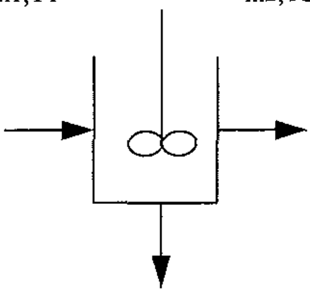
La gráfica que se obtiene es



En la gráfica tridimensional se aprecia la evolución de la temperatura adimensional es decir Θ en función de r y de la longitud adimensional η.

Otra aplicación en la solución de problemas de fenómenos de transporte se plantea a continuación.

Como se muestra en la figura de abajo se tiene un tanque agitado que recibe fluidos de dos alimentaciones diferentes y tiene una descarga en el fondo del tanque.



La masa de fluido en el tanque se mantiene como una cantidad constante igual a M y la temperatura T en el tanque también se mantiene constante como resultado de la agitación tanto las paredes del tanque como la masa del agitador son relativamente pequeñas en relación con la masa de fluido contenida en el tanque, por lo que su efecto en el balance térmico se puede despreciar. La masa inicial y la temperatura inicial en el tanque son Mo y To La masa y la temperatura de los fluidos de las alimentaciones son m1 , T1 y m2 y T2 respectivamente *La salida del tanque tiene un fluido de salida m3 a T3*

Se requiere calcular la temperatura en el tanque como una función del tiempo

En razón de que la temperatura en el tanque es uniforme por efecto de la agitación se tiene el siguiente balance energético

$$E_T = MC_vT$$

En donde C_v es la capacidad calorífica de la mezcla a volumen constante

El cambio en la energía como función del tiempo es:

$$\frac{d}{dt}[MC_vT] = m1C_vT1 + m2C_vT2 - m3C_vT \qquad \text{a)}$$

El balance de masa es:

$$M = (m1 + m2 - m3)t + Mo = mt + Mo \qquad \text{. b)}$$

en donde m=m1+m2-m3

. Sustituyendo la ecuación b en a se tiene

$$\frac{d}{dt}[mt + Mo)T] = m1T1 + m2T2 - m3T$$

y tomando en cuenta que d(xy)=xdy+ydx se tiene

$$(mt + Mo)\frac{dT}{dt} + mT = m1T1 + m2T2 - m3T$$

y rearreglando

$$\frac{dT}{dt} = \frac{-(m+m3)\{T - [(m1T1 + m2T2)/(m+m3)]\}}{m[t + (Mo/m)]}$$

esta ecuación diferencial se resolverá a continuación con el programa Mathematica tomando en cuenta las siguientes condiciones

T=To a t=0

```
Clear[a,m]

a=m+m3;
b=m1 T1+ m2 T2;
DSolve[{T'[t]+(a(T[t]-(b/a)))/(m(t+Mo/m))==0,T[0]==To},T[t],t]
```

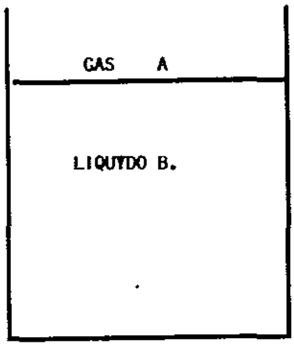
La solución que proporciona Mathematica de la ecuación diferencial con condiciones *iniciales es*

```
                1 + m3/m                (-m - m3)/m
{{T[t] -> (Mo              (Mo + m t)

    (m To + m3 To - m1 T1 - m2 T2)) / (m + m3) +

   m1 T1 + m2 T2
   -------------------- }}
     m + m3
```

Que es la solución de la ecuación diferencial obtenida con Mathematica Una solución con valores numéricos específicos puede obtenerse fácilmente sustituyendo las variables por valores numéricos

Otro problema interesante dentro de los Fenómenos de transporte es la difusión con reacción química homogénea. En este caso el gas a se disuelve en un líquido B y se difunde en la fase líquida Al mismo tiempo de la difusión la sustancia A sufre una reacción química irreversible de primer orden.

A+B---->AB



El balance de materia toma la forma:

$$N_{A2}\Big|_{z}S - N_{Az}\Big|_{z+\Delta z}S - K_1 C_A S \Delta Z = 0 \quad .1)$$

en donde K1 es la constante de velocidad de reacción de primer orden para la *descomposición química* de A y S el arrea transversal de líquido. El producto de la multiplicación de K1 CA representa el número de moles de A que desaparecen por unidad de volumen y unidad de tiempo

Dividiendo la ecuación 1) por SΔz, y tomando el límite cuando Δ z tiende a cero se tiene:

$$\frac{dN_{Az}}{dz} + k_1 C_A = 0 \quad ..2)$$

Si A y AB están presentes a bajas concentraciones la ecuación de difusión puede representarse por:

$$N_{Az} = -D_{AB}\frac{dC_A}{dz} \quad ..3)$$

Sustituyendo en la ecuación 2) se tiene·

$$-D_{AB}\frac{d^2 C_A}{dZ^2} + k_1 C_A = 0 \quad . 4)$$

La anterior es una ecuación diferencial homogénea de segundo orden que puede ser resuelta por Mathemetica de acuerdo a las siguientes condiciones límite:

para z=0 CA=CA0

para z=L NAZ=0 es decir $\frac{dC_A}{dz} = 0$

El programa de Mathematica para resolver la condición anterior se puede escribir como.

```
Clear[d,cao,L,z,k1]
ec=DSolve[{-d ca''[z]+k1 ca[z]==0,ca[0]==cao,ca'[L]==0},
ca[z],z]//Simplify
```

El comando //Simplify se emplea para obtener una solución más sencilla
El coeficiente de difusión se escribió como "d" .

La respuesta que proporciona Mathematica es.

$$ca\ z \rightarrow \frac{cao\, E^{-\frac{\sqrt{k1}\, z}{\sqrt{d}}}\left(E^{\frac{2\sqrt{k1}\, L}{\sqrt{d}}} + E^{\frac{2\sqrt{k1}\, z}{\sqrt{d}}}\right)}{1 + E^{\frac{2\sqrt{k1}\, L}{\sqrt{d}}}}\}\}$$

La respuesta anterior se generó con la versión de Mathematica 3 0, como se aprecia el despliegue de las ecuaciones es más claro que el de la versión 2.2

La solución de ecuaciones diferenciales con Mathematica también pueden obtenerse mediante el comando

Dsolve[ecuación, y, x]

Este comando proporciona la solución de la ecuación en base a un conjunto de reglas o funciones que especifican como se han de reemplazar y[x] por la expresión formal de la solución de la ecuación en cualquier expresión en que intervenga; de esta forma se tiene la posibilidad de operar con la función solución sin más que utilizar en cada cálculo las reglas de transformación resultantes (se ha de utilizar el comando de especificación de reglas "/ ").

A continuación se resuelve el problema anterior para los siguientes valores específicos

Coeficiente de difusividad d=1
Concentración Ca0=1
Distancia L=10
Constante de velocidad de reacción k1=2

Los comandos de Mathematica quedan como.

```
Clear[d,cao,L,z,k1,ec]
d=1;
cao=1;
L=10;
k1=2;
ec=DSolve[{-d ca''[z]+k1 ca[z]==0,ca[0]==cao,ca'[L]==0},
ca[z],z]
```

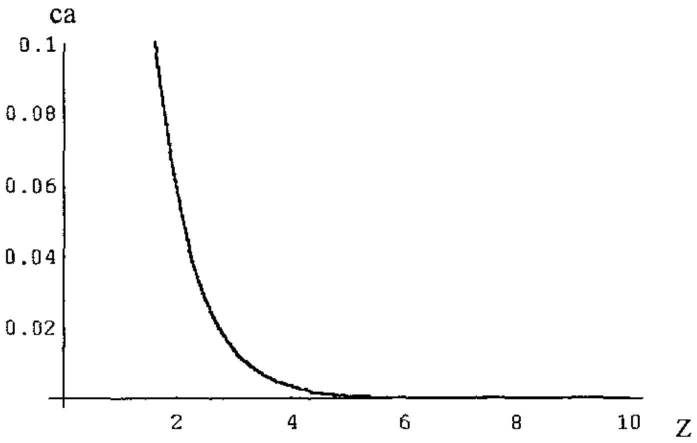
La solución que reporta Mathematica es:

$$ca\ z \rightarrow E^{-\sqrt{2}\, z}\left(1 - \frac{1}{1 + E^{20\sqrt{2}}} + \frac{E^{2\sqrt{2}\, z}}{1 + E^{20\sqrt{2}}}\right)$$

Ahora se graficará la solución anterior para valores de L[0,10].

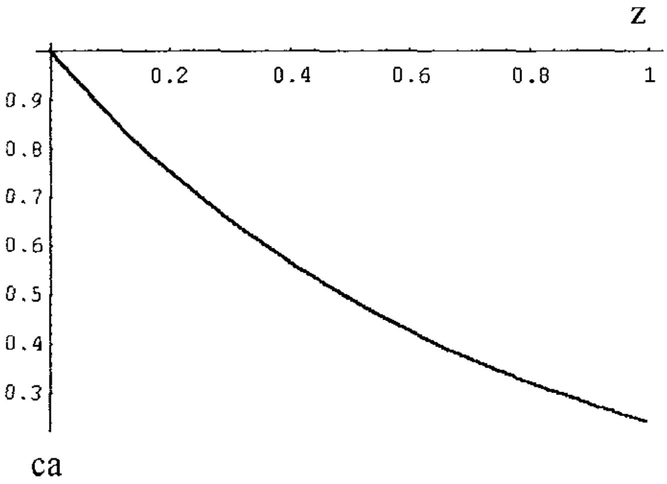
```
ca[z]/.ec
Plot[%,{z,0,10}]
```

La gráfica que presenta Mathematica es



Para valores pequeños de z se puede obtener la siguiente gráfica complementaria:

ca[z]/.ec;
Plot[%,{z,0,1}]



CAPITULO 4

CONCLUSIONES.

La simulación numérica y con cálculo simbólico de varios procesos naturales y tecnológicos con la ayuda de computadoras resulta hoy una herramienta poderosa en el estudio de estos fenómenos. Mathematica forma parte de lo que se conoce como cálculo simbólico, siendo uno de los paquetes más conocidos que permiten dicho cálculo.

El cálculo simbólico está revolucionando áreas en las matemáticas y como consecuencia en todas las disciplinas que la utilizan como herramienta

La incorporación de los paquetes de cálculo simbólico a las aulas transformará los métodos de enseñanza de los métodos de cálculo tradicional Muchas de las tareas y del tiempo empleado en el aprendizaje pueden ser optimizados empleando estos paquetes

El lenguaje soportado por Mathematica permite pensar en el desarrollo de aplicaciones de uso específico con base matemática, incluso con soporte gráfico y multimedia

El presente trabajo es solamente una pequeña muestra del poder y la capacidad de Mathematica en aplicaciones específicas de la Ingeniería Química ya sea realizando cálculos numéricos como los desarrollados en FORTRAN, BASIC y lenguaje C, ó aplicando su capacidad de cálculo simbólico y representación gráfica lo que permite una visualización clara y objetiva del comportamiento del modelo en estudio

Sin duda la generalización del uso de estos paquetes inducirán cambios significativos en la educación, la investigación y en general en el empleo de las matemáticas como una herramienta de análisis de fenómenos y modelos no solo de manera más amigable sino con mayor certidumbre en la obtención de resultados que corresponden al modelo planteado.

Se podría concluir que el cálculo simbólico trae consigo una nueva forma de abordar los problemas que abre muchas posibilidades y permite dar rienda suelta a la creatividad.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

1. Applied Numerical Methods with Personal Computers.
   Alkis Constantinides
   Ed McGraw Hill

2 Optimiztion of Chemical Process
   T F Edgar.
   D. M Himmeblau
   Ed. McGraw Hill

3 Process Modeling Simulation and Control for Chemical Engineers
   Luyben
   Ed Mac Graw Hill.

4 Principios de Los Procesos Químicos.
   Hougen, Watson, Ragatz
   Ed. Reverté.

5 Mathematica, A System for Doing Mathematics by Computer.
   Stephen Wolfram.
   Ed Addison wesley.

6 Programming in Mathematica
   Roman Maeder
   Ed addison Wesley

7 Fenómenos de Transporte
   R B Bird.
   Ed Reverté.

8 Exploring Mathematics With Mathematica.
   Theoddore W. Gray
   De Addison Wesley.