

# **TEMA 9.**

## **PROBLEMAS APLICADOS A LA INGENIERIA QUIMICA**



## Regresiones lineales múltiples.

### RLM.1. Transmisión de calor en una tubería

La transmisión de calor a través de tuberías se sabe que el número de Nusselt (Nu) es función del número de Reynolds y del número de Prandlt:

$$Nu = f(Re, Pr)$$

$$\frac{hD}{k} = f\left(\frac{Dv\rho}{\mu}, \frac{C_p\mu}{k}\right)$$

Una correlación ampliamente utilizada es la ecuación sugerida por Sieder y Tate:

$$Nu = 0.023 Re^{0.8} Pr^{1/3}$$

Los coeficientes de la anterior ecuación se han obtenido por correlación de muchos datos experimentales. Aunque en general la anterior ecuación se puede escribir como

$$Nu = a Re^b Pr^c$$

Donde a, b, c son parámetros ajustables.

Para los siguientes datos experimentales obtenidos en una tubería de ¾ de pulgada de diámetro externo

- compruebe la ecuación original de Sieder y Tate, calculando el error para cada punto y representándolo gráficamente)
- Utilice una correlación lineal múltiple para hallar los parámetros a, b, c. Y calcule y represente nuevamente los errores obtenidos en esta correlación.

Punto	Re	Pr	Nu
1	49000	2.3	277
2	68600	2.28	348
3	84800	2.27	421
4	34200	2.32	223
5	22900	2.36	177
6	1321	246	114.8
7	931	247	95.9
8	518	251	68.3
9	346	273	49.1
10	122.9	1518	56
11	54.0	1549	39.9
12	84.6	1521	47
13	1249	107.4	94.2
14	1021	186	99.9
15	465	414	83.1
16	54.8	1302	35.9

**Solución:**

Para linealizar la ecuación basta tomar logaritmos. Así:

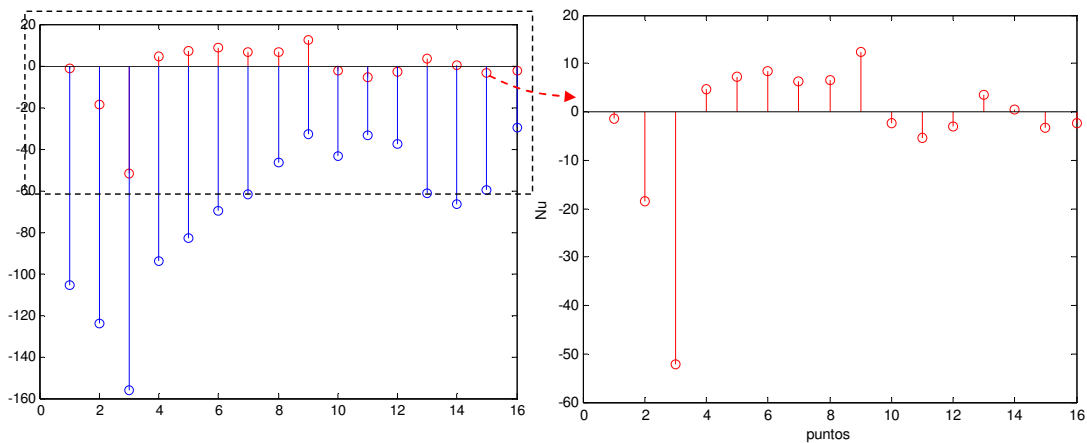
$$\log(Nu) = \log(a) + b \log(Re) + c \log(Pr)$$

Haciendo un ajuste lineal múltiple, se obtiene que

$$\log(a) = -0.1684 \Rightarrow a = 10^{-0.1684} = 0.6786$$

$$b = 0.5374; \quad c = 0.2435$$

La representación de los errores utilizando la ecuación original y la obtenida por el ajuste es la siguiente:



En azul aparecen los errores de la correlación de Sieder y Tate, y en rojo los errores cuando se ajustan los datos experimentales.

### RLM.2. Transferencia de calor en un reactor de lecho fluidizado

Dow y Jacob [Dow, W.M. y Jacob, M. Chem. Eng. Prog. 47, 637 (1951)] propusieron las siguientes ecuaciones adimensionales para modelar la transmisión de calor en un tubo vertical con un sólido fluidizado con aire:

$$Nu = a_1 \left( \frac{D_t}{L} \right)^{a_2} \left( \frac{D_t}{D_p} \right)^{a_3} \left( \frac{1 - \varepsilon \rho_s C_s}{\varepsilon \rho_g C_g} \right)^{a_4} \left( \frac{D_t G}{\mu_g} \right)^{a_5}$$

Determine los parámetros  $a_1$ - $a_5$  y los errores cometidos.

$\frac{h_m D_t}{k_g}$	$\frac{D_t}{L}$	$\frac{D_t}{D_p}$	$\frac{1-\epsilon}{\epsilon} \frac{\rho_s C_s}{\rho_g C_g}$	$\frac{D_t G}{\mu_g}$
469	0.636	309	833	256
913	0.636	309	868	555
1120	0.641	309	800	786
234	0.285	309	800	255
487	0.285	309	800	555
709	0.283	309	767	850
581	0.518	683	795	254
650	0.521	683	795	300
885	0.524	683	795	440
672	0.455	1012	867	338
986	0.451	1012	867	565
1310	0.455	1012	867	811
1190	0.944	1130	1608	343
1890	0.974	1130	1608	573
2460	0.985	1130	1608	814
915	0.602	1130	1673	343
1260	0.602	1130	1673	485
1690	0.617	1130	1673	700

$$Nu = \frac{h_m D_t}{k_g} \quad \text{Número de Nusselt}$$

$h_m$  Coeficiente individual de transmisión de calor

$D_t$  Diámetro de tubo

$D_p$  Diámetro de partícula

$L$  Longitud del lecho fluidizado caliente

$G$  Velocidad másica del gas

$k_g, \rho_g, C_g, \mu_g$  Propiedades de la fase gas

$C_s, \rho_s$  Propiedades de la fase sólida

**Solución**

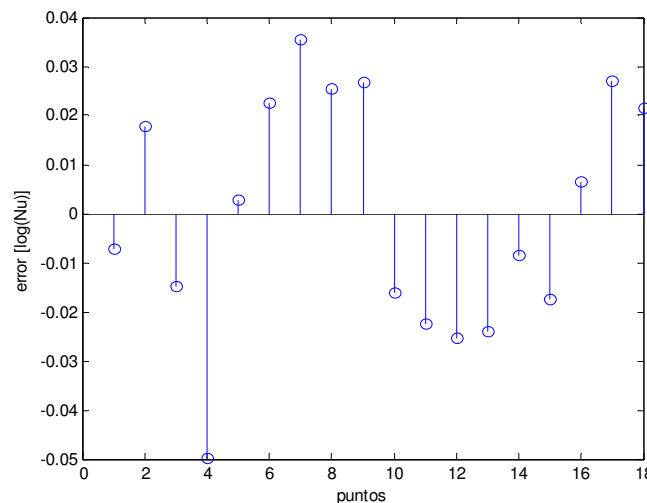
Se debe en primer lugar linealizar la ecuación. Basta para ello tomar logaritmos en ambos lados de la ecuación:

$$\log(Nu) = \log(a_1) + a_2 \log\left(\frac{D_t}{L}\right) + a_3 \log\left(\frac{D_t}{D_p}\right) + a_4 \log\left(\frac{1-\epsilon}{\epsilon} \frac{\rho_s C_s}{\rho_g C_g}\right) + a_5 \log\left(\frac{D_t G}{\mu_g}\right)$$

Utilizando ahora una rutina para regresión lineal múltiple:

	Coeficientes	Intervalo de confianza del 95%
$\log(a_1)$	0.0714	-0.3753, 0.5181
$a_2$	0.7402	0.6221, 0.8583
$a_3$	0.3454	0.2648, 0.4260
$a_4$	$-5.7041 \cdot 10^{-4}$	-0.1613, 0.1602
$a_5$	0.7865	0.7082, 0.8648

El resultado muestra que los intervalos de confianza para el primer parámetro y para el cuarto cortan el valor cero, lo que indica que, posiblemente a1 se pueda fijar a uno y que la dependencia del cuarto término se pueda despreciar, al menos en el intervalo de valores experimentales testado.



**RLM.3. Correlación de los parámetros de la ecuación de Antoine para el calculo de la presión de vapor de un componente puro (propano)**

La ecuación de Antoine permite calcular la presión de vapor de un componente puro en función de la temperatura.

$$P_v = 10^{\left(A + \frac{B}{T+C}\right)}$$

Linealice la ecuación anterior y determine, utilizando regresión lineal múltiple, los parámetros A, B y C para los siguientes datos de presión de vapor del propano

Punto	T (°F)	P (psia)	Punto	T (°F)	P (psia)
1	-70	7.37	11	30	66.3
2	-60	9.72	12	40	78
3	-50	12.6	13	50	91.8
4	-40	16.2	14	60	107.1
5	-30	20.3	15	70	124
6	-20	25.4	16	80	142.8
7	-10	31.4	17	90	164
8	0	38.2	18	100	187
9	10	46	19	110	213
10	20	55.5	20	120	240

Represente los valores calculados y experimentales en una gráfica P vs T. Represente los errores cometidos en P vs T para cada dato.

Solución:

Para poder obtener los parámetros el primer paso es obtener una expresión lineal. Para ello se debe reescribir la ecuación

$$P_v = 10^{\left(A + \frac{B}{T+C}\right)}; \quad \log(P_v) = A + \frac{B}{T+C}; \quad \log(P_v)(T+C) = A(T+C) + B$$

$$\log(P_v)T + C \log(P_v) = AT + AC + B; \quad \log(P_v)T = (AC + B) + AT - C \log(P_v)$$

Recordando que en una regresión lineal múltiple

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + \dots \text{ identificando términos}$$

$$y = \log(P_v) T; \quad x_1 = T; \quad x_2 = \log(P_v)$$

$$a_0 = AC + B; \quad a_1 = A; \quad a_2 = -C$$

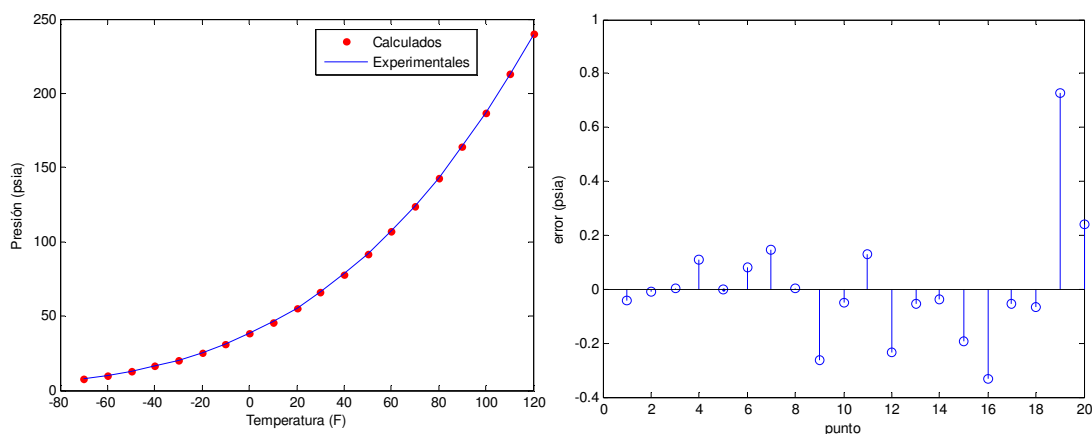
Haciendo el ajuste lineal múltiple se obtiene que:

$$a_0 = 677.3026; \quad a_1 = 5.2258; \quad a_2 = -428.1183$$

Y por lo tanto:

$$A = 5.2258; \quad B = -1560.0; \quad C = 428.1183$$

Las representaciones de los puntos experimentales y los calculados a través de la regresión, así de los errores cometidos en cada punto son:



#### RLM.4. Capacidad calorífica del propano.

La capacidad calorífica del propano gas se puede expresar como un polinomio de la temperatura:

$$C_p = a_0 + a_1T + a_2T^2 + a_3T^3 + \dots$$

Ajuste los datos de la tabla siguiente y a polinomios de diferentes grados y compárelos entre sí

Punto	T (K)	Cp (kJ kmol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )	Punto	T (K)	Cp (kJ kmol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )
1	50	34.06	11	700	142.67
2	100	41.3	12	800	154.77
3	150	48.79	13	900	163.35
4	200	56.07	14	1000	174.6
5	273.16	68.74	15	1100	182.67
6	298.15	73.6	16	1200	189.74
7	300	73.93	17	1300	195.85
8	400	94.01	18	1400	201.21
9	500	112.59	19	1500	205.89
10	600	128.7			

Represente valores de Cp calculados y experimentales vs T en la misma gráfica

**Nota:** en este caso es necesario escalar los valores de T, para ello defina una nueva variable:  $T^* = \frac{T}{T_m}$  (donde Tm es el valor medio de las temperaturas) de

tal forma que

$$C_p = a_0 + b_1(T^*) + b_2(T^*)^2 + b_3(T^*)^3 + \dots$$

Y por lo tanto :  $a_1 = \frac{b_1}{T_m}$ ;  $a_2 = \frac{b_2}{T_m^2}$ ;  $a_3 = \frac{b_3}{T_m^3}$ ; .....  $a_i = \frac{b_i}{T_m^i}$

**Solución:**

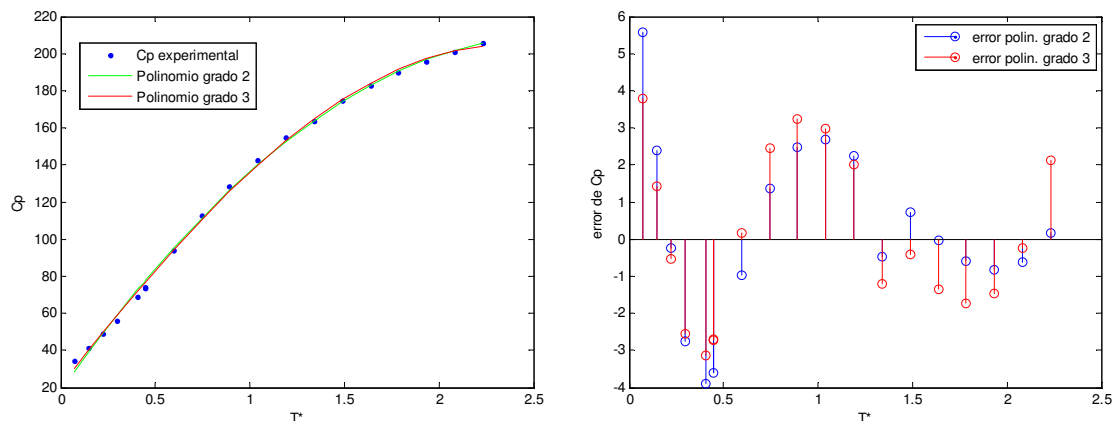
De acuerdo a la sugerencia del enunciado calculamos  $T_m = 672.1742 \text{ K}$

Utilizaremos directamente  $T^*$  para el resto del problema.

Los resultados los ajustamos a polinomios de diversos grados (entre 2 y 3) los resultados se dan en la siguiente tabla, se incluye el valor de los parámetros para un intervalo de confianza del 95%.

Polinomio grado 2		Intervalo de confianza del 95%
$a_0$	17.7427	[14.3303 ; 21.1552]
$a_1$	146.3905	[138.6433 ; 154.1376]
$a_2$	-27.8513	[-31.2312 ; -24.4715]
Polinomio de grado 3		Intervalo de confianza del 95%
$a_0$	20.5235	15.8850 25.1620
$a_1$	132.0625	113.3747 150.7504
$a_2$	-12.1304	-31.2679 7.0070
$a_3$	-4.5947	-10.1096 0.9203

Los resultados del ajuste se pueden ver a continuación.



### RLM.5. Correlación de los coeficientes de actividad de una mezcla binaria utilizando la ecuación de Margules.

La ecuación de Margules para la correlación de de coeficientes de actividad en mezclas binarias es:

$$\gamma_1 = \exp \left[ x_2^2 (2B - A) + 2x_2^3 (A - B) \right]$$

$$\gamma_2 = \exp \left[ x_1^2 (2A - B) + 2x_1^3 (B - A) \right]$$

Donde  $x_1, x_2$  son las fracciones molares de los componentes 1 y 2 respectivamente y  $\gamma_1, \gamma_2$  son los coeficientes de actividad. Los parámetros A y B son constantes para cada mezcla binaria.



Las dos ecuaciones anteriores se pueden combinar para calcular la energía libre de exceso de Gibbs.

$$g = \frac{G_E}{RT} = x_1 \ln(\gamma_1) + x_2 \ln(\gamma_2) = x_1 x_2 (Ax_2 + Bx_1)$$

Para la mezcla Benceno (1) y n-heptano (2) están disponibles los siguientes datos:

Punto	$x_1$	$\gamma_1$	$\gamma_2$
1	0.0464	1.2968	0.9985
2	0.0861	1.2798	0.9998
3	0.2004	1.2358	1.0068
4	0.2792	1.1988	1.0159
5	0.3842	1.1598	1.0359
6	0.4857	1.1196	1.0676
7	0.5824	1.0838	1.1096
8	0.6904	1.0538	1.1664
9	0.7842	1.0311	1.2401
10	0.8972	1.0078	1.4038

Calcule los valores de los parámetros A y B

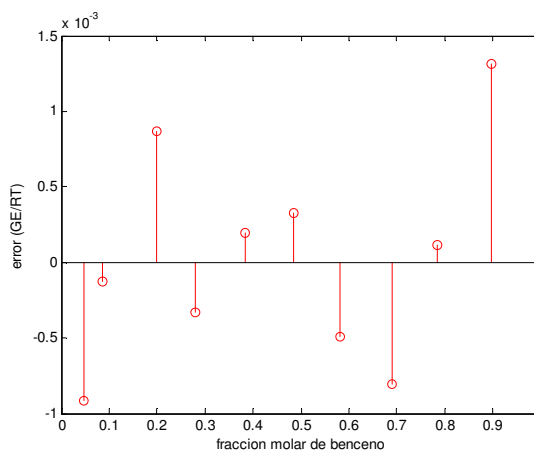
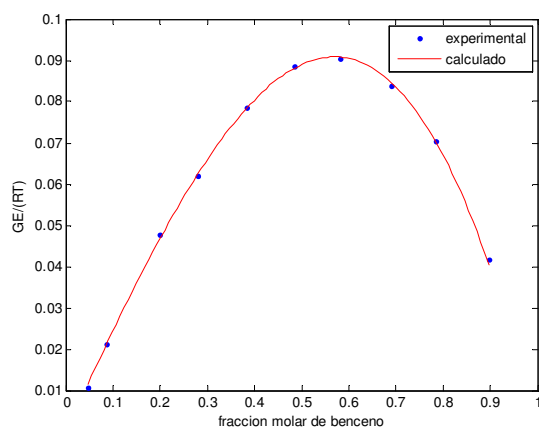
Solución:

En este caso podemos reordenar la ecuación que nos da la energía libre de exceso de la siguiente manera:

$$g = \frac{G_E}{RT} = x_1 \ln(\gamma_1) + x_2 \ln(\gamma_2) = A x_1 x_2^2 + B x_1^2 x_2 = Az_1 + Bz_2$$

donde  $z_1 = x_1 x_2^2$ ;  $z_2 = x_1^2 x_2$  La dificultad en este caso es que el ajuste lineal múltiple exige que la recta de correlación pase por el origen. Teniendo esto en cuenta se obtiene:

$A = 0.2511$ ;  $B = 0.4609$



### RLM.6. Regresión de velocidades de reacción catalítica heterogénea.

La Tabla siguiente presenta la velocidad de reacción para la siguiente reacción catalítica heterogénea, representada por  $A \rightarrow B$

$P_A$ (atm)	$P_B$ (atm)	$r \cdot 10^5$
1	0.0010	5.10
0.9	0.1016	5.40
0.8	0.2021	5.55

0.7	0.3011	5.85
0.6	0.4004	6.00
0.5	0.5043	6.15
0.4	0.6040	6.30
0.3	0.7020	6.45

Se ha sugerido la siguiente ecuación para correlacionar los datos:

$$r = \frac{k_1 P_A}{(1 + K_A P_A + K_B P_B)^2} \quad \text{donde } k_1, K_A \text{ y } K_B \text{ son coeficientes que deben determinarse por regresión.}$$

Utilizando regresión lineal, determine dichos coeficientes.

*Solución*

La ecuación anterior se puede linealizar reordenando los términos, invirtiendo y tomando la raíz cuadrada.

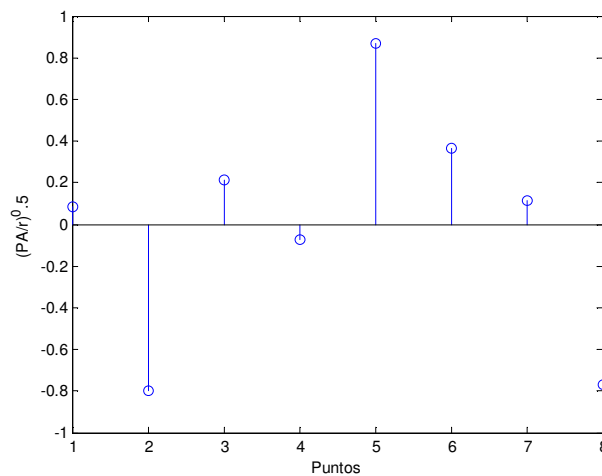
$$\left(\frac{P_A}{r}\right)^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{k_1}} + \frac{K_A}{\sqrt{k_1}} P_A + \frac{K_B}{\sqrt{k_1}} P_B = a_1 + a_2 P_A + a_3 P_B$$

El resultado es:  $a_1 = -177.8217$ ;  $a_2 = 317.5511$ ;  $a_3 = 215.8415$  y por lo tanto

$$k_1 = \left(\frac{1}{-177.8217}\right)^2 = 3.1625 \cdot 10^{-5}$$

$$K_A = a_2 \sqrt{k_1} = 1.7858$$

$$K_B = a_3 \sqrt{k_1} = 1.2138$$



## Ecuaciones no lineales

### ENL.1. Diámetro de una tubería a través del flujo

Utilizando la ecuación de Chen, un alumno de Ingeniería química obtuvo un factor de fricción ( $f$ ) de 0.01 para una tubería con rugosidad relativa ( $\epsilon$ ) 0.006. Si por la tubería circulaba agua con un caudal de  $0.01 \text{ m}^3/\text{s}$ . ¿Cuál era el diámetro de la tubería?. (Utilice diferentes métodos numéricos para calcularlo)

Ecuación de Chen:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -4 \log \left( \frac{\epsilon}{3.7065} - \frac{5.0452}{\text{Re}} \log \left( \frac{\epsilon^{1.1098}}{2.8257} \right) + \frac{5.8506}{\text{Re}^{0.898}} \right)$$

Solución:

Se debe reescribir la ecuación igualándola a cero, por ejemplo:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} + 4 \log \left( \frac{\epsilon}{3.7065} - \frac{5.0452}{\text{Re}} \log \left( \frac{\epsilon^{1.1098}}{2.8257} \right) + \frac{5.8506}{\text{Re}^{0.898}} \right) = 0$$

Y aplicar cualquier método numérico (bisección Newton, secante, etc)

$D = 0.3869 \text{ m}$ .

### ENL.2. Ecuación de Van der Waals

La ecuación de Van der Waals para un gas es:

$$\left( P + \frac{A}{V^2} \right) (V - B) = R T \quad \text{donde la } P \text{ es la presión (atm). } V \text{ es el volumen}$$

molar (l/mol).  $T$  es la temperatura absoluta (K) y  $R=0.082054 \text{ atm l/mol K}$ . Hallar el volumen molar del  $\text{CO}_2$  a 500 K y 10 atm, utilizando todos los métodos estudiados.

Nota:  $A = 3.592 \text{ l}^2 \text{ atm/mol}^2$        $B = 0.04267 \text{ l/mol}$ .

Solución

Para los métodos de punto fijo es necesario despejar el volumen molar del gas de alguna manera, por ejemplo:

$$V = \frac{R T}{\left( P + \frac{A}{V^2} \right)} + B$$

(Tenga en cuenta que no siempre convergerá, depende de cómo despeje el volumen). Resolviendo por diferentes métodos se obtiene:  $V = 4.055 \text{ l}$

Para métodos como el de Newton la ecuación hay que reorganizarla de forma que quede igualada a cero

$$\left( P + \frac{A}{V^2} \right) (V - B) - R T = 0$$

### ENL.3. Evaporador Flash

Una mezcla de composición (fracción molar) como la de la tabla se introduce en un evaporador flash a la temperatura de  $160 \text{ }^\circ\text{C}$  y 1 atm. Determinar que fracción de mezcla se ha evaporado. Suponer mezcla ideal.

comp j	$z_j$	$A_j$	$B_j$
1	0.1	-3848	8.358
2	0.2	-4002	7.833
3	0.2	-4997	8.665
4	0.2	-5595	8.847

5	0.2	-6301	9.261
6	0.1	-7296	10.078

$$\ln(K_j) = \frac{A_j}{T+460} + B_j \quad K_j = \frac{P_j^*}{P} \quad (T \text{ } ^\circ\text{C})$$

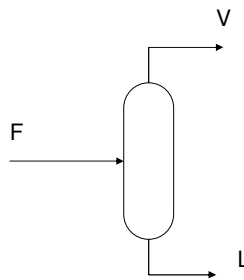
Nota: la forma más fácil de resolver el problema es resolver

$$\sum_{j=1}^n (x_j - y_j) = 0 \quad \text{donde } x_j, y_j \text{ son funciones de la fracción evaporada.}$$

Calcule también las temperaturas e rocío y burbuja de la mezcla.

*Solución.*

*Este problema se puede resolver planteando el conjunto completo de ecuaciones o bien reducirlo a una única ecuación que dependa sólo de la fracción de vapor. Veámos como se puede llegar hasta este punto.*



*Haciendo un balance de material.*

$$F = L + V$$

$$Fz_j = Lx_j + Vy_j$$

*Definiendo la fracción de vapor como  $\alpha = \frac{V}{F}$*

$$z_j = (1 - \alpha)x_j + \alpha y_j$$

*Como  $y_j = K_j x_j$ , sustituyendo en la ecuación anterior se tiene que:*

$$x_j = \frac{z_j}{(1 - \alpha) + \alpha K_j}$$

*Como sugiere el enunciado se puede resolver una sola ecuación de la forma*

$$\sum_{j=1}^n (x_j - y_j) = 0 = \sum_{j=1}^n \left( \frac{z_j}{(1 - \alpha) + \alpha K_j} - K_j \frac{z_j}{(1 - \alpha) + \alpha K_j} \right) = \sum_{j=1}^n \left( \frac{z_j(1 - K_j)}{(1 - \alpha) + \alpha K_j} \right)$$

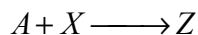
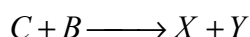
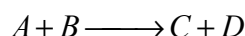
*El resultado es:*

$$\alpha = 0.6876$$

comp j	z <sub>j</sub>	x <sub>j</sub>	y <sub>j</sub>
1	0.1	0.0161	0.1381
2	0.2	0.0658	0.2610
3	0.2	0.1272	0.2331
4	0.2	0.2251	0.1886
5	0.2	0.3382	0.1372
6	0.1	0.2276	0.0420

**ENL.4. Reacciones de equilibrio**

Sea el siguiente conjunto de reacciones:



Calcule las concentraciones de equilibrio de cada una de las especies si inicialmente se introduce una concentración de:

$$C_{A0} = 1.5 \text{ M} \quad C_{B0} = 1.5 \text{ M}$$

Datos:

Las constantes de equilibrio para el sistema son:

$$K_1 = \frac{C_C C_D}{C_A C_B} = 1.06 \quad K_2 = \frac{C_X C_Y}{C_C C_B} = 2.63 \quad K_3 = \frac{C_Z}{C_A C_X} = 5 \text{ (l/mol)}$$

Resuelva el sistema de ecuaciones por el método que considere oportuno. Justifique su elección. Tome valores iniciales razonables para cada una de las variables. (No use el valor cero como valor inicial).

*Solución:*

*Quizá la mejor forma de resolver el problema sea utilizar grados de avance de cada ecuación. Así, si  $\varepsilon_i$  es el grado de avance de cada una de las reacciones se tiene que:*

$$C_A = C_{A0} - \varepsilon_1 - \varepsilon_3$$

$$C_B = C_{B0} - \varepsilon_1 - \varepsilon_2$$

$$C_C = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$$

$$C_D = \varepsilon_1$$

$$C_X = \varepsilon_2 - \varepsilon_3$$

$$C_Y = \varepsilon_2$$

$$C_Z = \varepsilon_3$$

*Para evitar divisiones por cero conviene pasar los términos que están dividiendo multiplicando y dejar el sistema de ecuaciones de la siguiente manera:*

$$C_C C_D - 1.06 C_A C_B = 0$$

$$C_X C_Y - 2.63 C_C C_B = 0$$

$$C_Z - 5 C_A C_X = 0$$

*El resultado, aplicando el método de Newton es:*

$$\varepsilon_1 = 0.7053; \quad \varepsilon_2 = 0.5518; \quad \varepsilon_3 = 0.3740$$

*NOTA: Los valores iniciales son muy importantes en este caso. Conviene comprobar que el resultado final de concentraciones lleva a soluciones con sentido físico, porque desde el punto de vista puramente matemático el sistema tiene diferentes soluciones.*

**ENL.5. Circulación de fluidos en una red de tuberías**

Agua a 25 °C está circulando por la red de tuberías que se muestra en la figura. La presión a la salida de la bomba es de 15 bares (15 105 Pa) sobre la atmosférica, y el agua se descarga a presión atmosférica al final de la línea. Todas las tuberías son de 6" catálogo 40 (0.154 m de diámetro interno), con

rugosidad relativa 0.006. Las longitudes equivalentes de todas las tuberías conectando los diferentes nodos son

$$L_{01} = 100 \text{ m}; \quad L_{12} = L_{23} = L_{45} = 300 \text{ m}; \quad L_{13} = L_{24} = L_{34} = 1200 \text{ m}$$

Calcular los flujos y presiones en los nodos 1, 2, 3 y 4 para la red. Asuma que el factor de fricción es constante e igual a 0.005 para todas las tuberías.

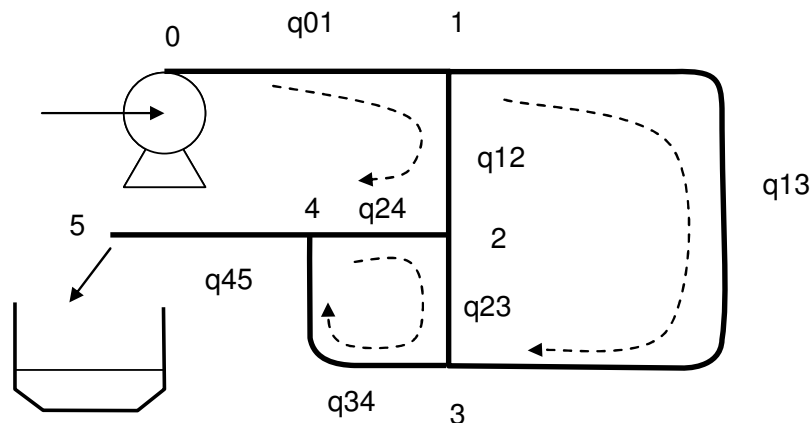
Información adicional y notas:

Para la solución del problema es conveniente expresar la pérdida de presión en cada nodo desde i hasta j como:

$$\Delta P_{i,j} = k_{i,j} (q_{i,j})^2$$

Donde  $q_{i,j}$  es el flujo volumétrico y  $\Delta P_{i,j}$  es la caída de presión. El término  $k_{i,j}$  está relacionado con los factores de fricción de fanning y la velocidad media de los fluidos a través de la ecuación

$$k_{i,j} = \frac{2f\rho \frac{L_{i,j}}{D}}{(\pi D^2 / 4)^2} = \frac{32f\rho L_{i,j}}{\pi^2 D^5}$$



Repita el problema pero ahora usando una ecuación adecuada para calcular el factor de fricción.

*Solución:*

Hay dos relaciones que gobiernan el proceso. 1. La suma de los flujos en cada nodo debe ser cero. 2. La suma de todas las caídas de presión en un bucle cerrado debe ser cero.

$$q_{01} - q_{12} - q_{13} = 0$$

$$q_{12} - q_{24} - q_{23} = 0$$

$$q_{23} + q_{13} - q_{34} = 0$$

$$q_{24} + q_{34} - q_{45} = 0$$

$$\Delta P_{01} + \Delta P_{12} + \Delta P_{24} + \Delta P_{45} = \Delta P_{bomba}$$

$$\Delta P_{13} - \Delta P_{23} - \Delta P_{12} = 0$$

$$\Delta P_{23} + \Delta P_{34} - \Delta P_{24} = 0$$

Que junto con la ecuación que relaciona los flujos y las caídas de presión define completamente el sistema de ecuaciones.

$$\Delta P_{i,j} = k_{i,j} (q_{i,j})^2$$

Dado que los flujos en m<sup>3</sup>/s pueden ser muy pequeños en comparación con las presiones conviene escalar el problema, por ejemplo trabajando en kPa y en litros/s

Caso a:

Tramo	Q (l/s)	P (kPa)
0-1	0.3118	1.8194
1-2	0.2059	2.3812
1-3	0.1059	2.5165
2-3	0.0491	0.1352
2-4	0.1569	5.5261
3-4	0.1549	5.3909
4-5	0.3118	5.4583

Caso b. Debemos además utilizar una ecuación adecuada para los factores de fricción. Por ejemplo la ecuación de Coolebrock y White. Ahora los factores de fricción son también incógnitas de nuestro sistema. Nuevamente para facilitar la resolución numérica es conveniente escalar las variables. En este caso se puede escalar por un factor de 100 el factor de fricción.

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -4 \log \left( \frac{\varepsilon/D}{3.7} + \frac{1.256}{\text{Re} \sqrt{f}} \right)$$

Tramo	Q (l/s)	P (kPa)	f · 10 <sup>3</sup>
0-1	0.3915	0.2809	0.2809
1-2	0.2682	0.3159	0.3159
1-3	0.1232	0.4160	0.4160
2-3	0.0697	0.5248	0.5248
2-4	0.1985	0.3494	0.3494
3-4	0.1929	0.3530	0.3530
4-5	0.3915	0.2809	0.2809

### ENL.6. Velocidad terminal

Determinar la velocidad terminal de una partícula sólida cayendo en un fluido.

Considere una partícula esférica uniforme de hierro cayendo en aire.

Datos para la partícula:

$$\rho_p = 7860 \text{ kg / m}^3$$

$$D_p = 0.5 \text{ mm}$$

Datos para el aire

$$\rho = 1.23 \text{ kg / m}^3$$

$$\mu = 1.79 \cdot 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}$$

Notas: La velocidad terminal de una partícula esférica cayendo en un medio fluido se puede determinar por la siguiente expresión

$$v_t = \sqrt{\frac{4 g (\rho_p - \rho) D_p}{3 C_D \rho}}$$

El coeficiente de rozamiento depende del número de Reynolds de la siguiente manera:

$$C_D = \frac{24}{Re} \quad Si \quad Re < 0.1$$

$$C_D = \frac{24}{Re} (1 + 0.14 Re^{0.7}) \quad Si \quad 0.1 \leq Re \leq 1000$$

$$\text{Donde } Re = \frac{v_t D_p \rho}{\mu}$$

*Solución. Realmente basta con resolver una ecuación con una incognita que es la velocidad terminal. Suponiendo un número de Reynolds mayor que 0.1, se obtiene  $v_t = 7.586 \text{ m/s}$ . Debemos además comprobar el número de Reynolds que es a la velocidad terminal 260.7*

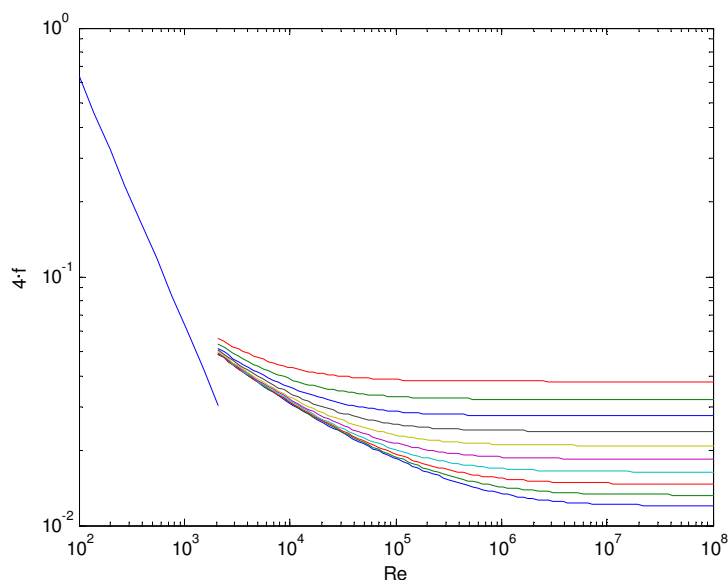
### ENL.7. Gráfica de Moody

Dibuje la gráfica de Moody utilizando la ecuación de Colebrook para el factor de fricción en régimen turbulento

*Solución: La gráfica de moody representa el Número de Reynolds frente a  $4f$ . Reordenar que*

$$f = \frac{16}{Re} \quad Si \quad Re < 2100$$

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -4 \log \left( \frac{\epsilon/D}{3.7} + \frac{1.256}{Re \sqrt{f}} \right) \quad Si \quad Re \geq 5000$$



### ENL.8. Temperatura de llama

Cuando se quema gas con aire, la temperatura máxima teórica que se puede alcanzar en la llama, es lo que se conoce como temperatura de llama adiabática. Esta temperatura depende de la composición del gas así como de la cantidad de aire con la que este se quema. Determine la temperatura de



llama adiabática cuando se quema gas natural. Considere los casos en los que la relación aire/gas natural varía entre 0.5 y 20.

Composición del gas natural:

CH<sub>4</sub>: 90% en volumen, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>: 6% en volumen; N<sub>2</sub>: 4% en volumen.

Entalpía combustión: CH<sub>4</sub>: -212798 cal/mol; C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>: -372820 cal/mol.

La capacidad calorífica de los diferentes gases implicados se puede expresar por:

$$C_p = a + bT + cT^2 \quad (T \text{ en K y } C_p \text{ en cal/mol K}).$$

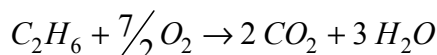
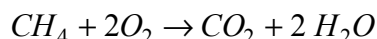
	<b>a</b>	<b>b</b>	<b>c</b>
CH <sub>4</sub>	3.381	18.044	-4.3
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	2.247	32.201	-11.049
CO <sub>2</sub>	6.214	10.396	-3.545
H <sub>2</sub> O	7.256	2.298	0.283
O <sub>2</sub>	6.148	3.102	-0.923
N <sub>2</sub>	6.524	1.25	-0.001

La temperatura ambiente y de todas las entradas al quemador es de 25 °C.

*Solución:*

*Para determinar la temperatura de llama adiabática debemos realizar un balance de materia en función de conversión y un balance de energía.*

*Las reacciones de combustión son las siguientes:*



*Nota: Si no hay oxígeno suficiente para la combustión se forman productos de combustión incompleta. Sin embargo vamos a suponer que el metano y el etano no reaccionarían más y simplemente se calentarían, además no hay preferencia por ninguna de las reacciones y ambas se dan en la misma extensión (lo que nos permite tratarla como si fuera una sola reacción)*

*La composición del gas natural (fracción molar = fracción en volumen)*

$$x_{CH_4} = 0.75; \quad x_{C_2H_6} = 0.23; \quad x_{N_2} = 0.02$$

*Y la composición del aire*

$$(x_{O_2})_{aire} = 0.21; \quad (x_{N_2})_{aire} = 0.79$$

*Llamando  $r$  a la relación aire/gas natural y tomando como base de cálculo 1 mol de gas natural las cantidades iniciales de cada componente en la mezcla serán:*

*El oxígeno necesario para la combustión completa será:*

$$(O_2)_{combustion\ completa} = 2(CH_4)_0 + \frac{7}{2}(C_2H_6)_0$$

*El oxígeno consumido por cada reacción (suponiendo que la reacción fuese completa) sería:*

$$(O_2)_{react1} = 2 \frac{(O_2)_0 (CH_4)_0}{2(CH_4)_0 + 3.5(C_2H_6)_0}$$

$$(O_2)_{react2} = 3.5 \frac{(O_2)_0 (C_2H_6)_0}{2(CH_4)_0 + 3.5(C_2H_6)_0}$$

La conversión dependerá de la cantidad de oxígeno disponible. Así:

$$\text{Si } (O_2)_{\text{combustion completa}} < \zeta = \frac{0.5(O_2)_{\text{reac1}}}{(CH_4)_0}$$

$$\text{En otro caso } \zeta = 1$$

Donde  $\zeta$  es la conversión.

Los moles finales se pueden calcular en función de la conversión de la siguiente manera:

$$CH_4 = (CH_4)_0 (1 - \zeta)$$

$$C_2H_6 = (C_2H_6)_0 (1 - \zeta)$$

$$CO_2 = (CO_2)_0 + (CH_4)_0 \zeta + 2(C_2H_6)_0 \zeta$$

$$H_2O = (H_2O)_0 + 2(CH_4)_0 \zeta + 3.5(C_2H_6)_0 \zeta$$

$$O_2 = (O_2)_0 - 2(CH_4)_0 \zeta - 3.5(C_2H_6)_0 \zeta$$

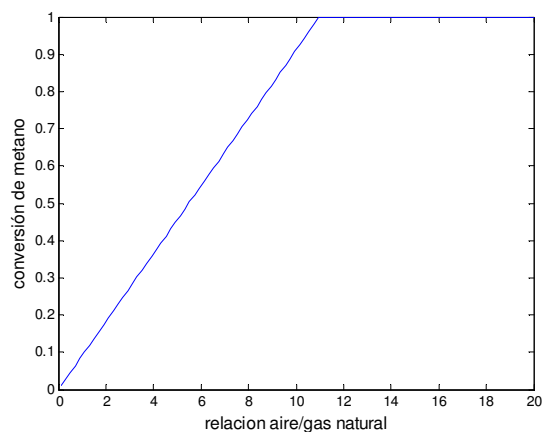
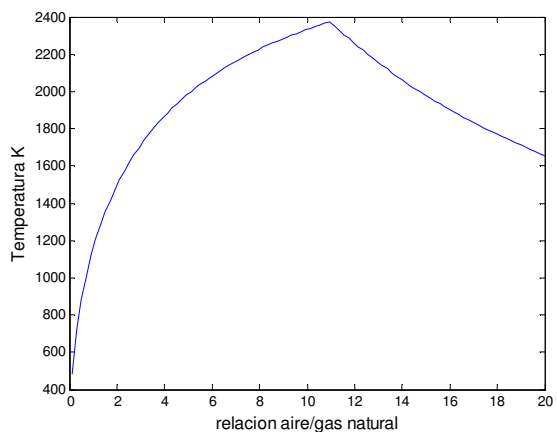
$$N_2 = (N_2)_0$$

Finalmente de un balance de energía

$$\Delta H_{C, CH_4} [(CH_4)_0 - CH_4] + \Delta H_{C, C_2H_6} [(C_2H_6)_0 - C_2H_6] +$$

$$\sum_i (\text{moles finales})_i \int_{T_0}^T C_p(T)_i = 0$$

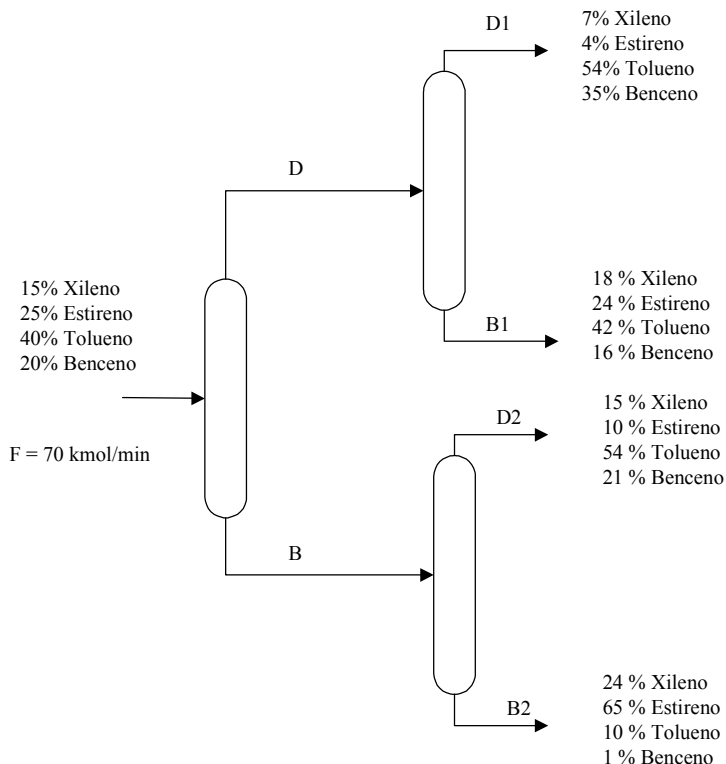
Si resolvemos utilizando un método de Newton la ecuación anterior para diferentes valores de  $r$  se obtiene. Como esa de esperar la temperatura máxima se obtiene justo cuando se añade la cantidad estequiométrica de aire. (primer punto de conversión total).



## Ecuaciones lineales

### LIN.1. Balances de materia en estado estacionario para una secuencia de separación.

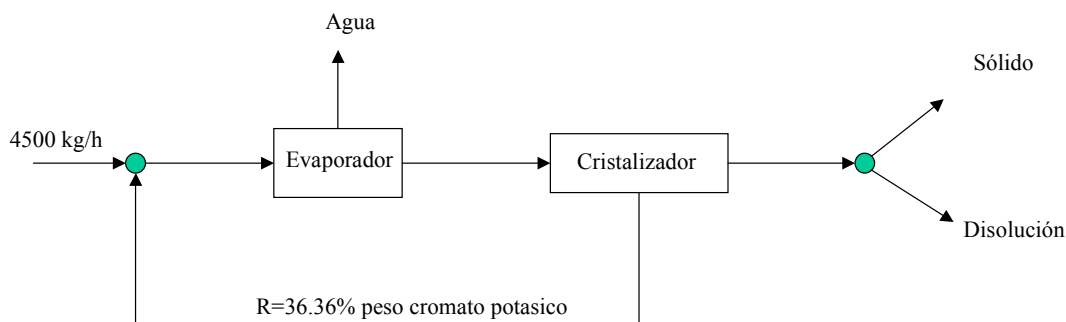
El p-xileno, estireno, tolueno y benceno se separan en la siguiente secuencia de columnas de destilación.



- Calcula el flujo molar de las corrientes D1, D2, B1 y B2.
- Reduce el flujo original de la corriente de alimento en un 1% y luego en un 2% y repite el apartado (a). Explica los resultados.
- Determina el flujo molar y las composiciones de las corrientes B y D del apartado (a).

### LIN.2. Recuperación de Cromato potásico cristalino

A continuación se muestra el diagrama de flujo de un proceso en régimen estacionario para la recuperación de cromato potásico cristalino, a partir de una disolución acuosa de esta sal.



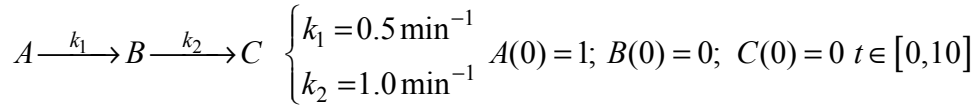
Se combinan 4500 kg/h de una disolución que contiene  $1/3$  (fracción másica) de cromato potásico con un flujo de recirculación que contiene 36.36% en peso de cromato. El flujo combinado se alimenta a un evaporador. El flujo concentrado que sale del evaporador contiene un 49.9% en peso de cromato.

Este flujo se alimenta a un cristizador donde se enfría (produciendo la precipitación de cristales de cromato potásico). Una parte se filtra y se recircula. La otra parte que es una mezcla de sólido y disolución al 36.36% en peso se extrae del sistema. Se sabe que el 95% en masa de toda la parte extraída del sistema es cromato sólido. Plantee un sistema de ecuaciones lineal y calcule todas las variables desconocidas del sistema

### Ecuaciones diferenciales ordinarias

#### EDO.1. Cinética de reacción

Calcule, utilizando los métodos numéricos que considere oportunos, la variación con el tiempo de las especies A, B y C en la siguiente reacción.



Solución: Las ecuaciones que hay que integrar son las siguientes:

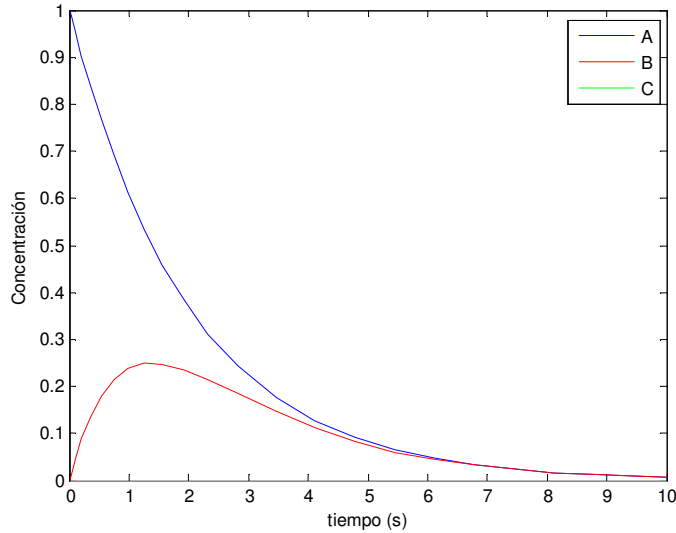
$$\frac{d C_A}{dt} = -k_1 C_A$$

$$\frac{d C_B}{dt} = k_1 C_A - k_2 C_B \quad \text{Con las condiciones de contorno dadas en el}$$

$$\frac{d C_C}{dt} = k_2 C_B$$

enunciado.

El resultado es:



#### EDO.2. Reactor de lecho fluidizado

En un reactor de lecho fluidizado de 0.8 m de longitud y 1 m de diámetro se lleva a cabo una reacción catalítica. El modelo de flujo aplicable es el de partículas de tamaño intermedio, con lo que las concentraciones de reactivo A en la fase burbuja ( $C_{Ab}$ ) y en la emulsión ( $C_{Ae}$ ) siguen las ecuaciones:

$$-u_b \frac{d C_{Ab}}{dz} = \gamma_b k C_{Ab} + K_{be} (C_{Ab} - C_{Ae})$$

$$-(1 - \delta) u_{mf} \frac{d C_{Ae}}{dz} = (1 - \delta)(1 - \epsilon_{mf}) k C_{Ae} - \delta K_{be} (C_{Ab} - C_{Ae})$$

En estas ecuaciones:

$z$  es la distancia hasta el fondo del lecho (altura)

$k$  es la constante cinética de la reacción (igual a  $3 \text{ seg}^{-1}$  en nuestro caso)

$\gamma_B$  es la fracción de sólidos en la estela (igual a  $10^{-3}$  en nuestro caso)

$u_{mf}$  es la velocidad mínima de fluidización (igual a **0.21 m/s** en nuestro caso)

$\epsilon_{mf}$  es la porosidad en el punto de mínima fluidización (igual a **0.45** en nuestro caso)

$u_b$  es la velocidad de ascenso de la burbuja, que es una función de su diámetro:

$$u_b = 1.6 \left\{ (u_0 - u_{mf}) + 1.13 d_b^{0.5} \right\} d_t^{1.35} + u_{br}, \quad [m/s]$$

$u_0$  es la velocidad de alimentación del gas (igual a **0.4 m/s** en nuestro caso)

$u_{br}$  es la velocidad de ascenso de una burbuja individual:

$$u_{br} = 0,711 (g d_b)^{0.5}$$

$d_t$  es el diámetro del reactor (igual a **1 m** en nuestro caso)

$d_b$  es el diámetro de una burbuja, que es una función de la posición:

$$d_b = 2,3 (u_0 - u_{mf})^{1,11} z^{0,81} [SI]$$

$\delta$  es la fracción de burbujas, que puede calcularse con la expresión:

$$\delta = \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b}$$

$K_{be}$  es el coeficiente de transferencia de materia desde la burbuja a la emulsión que debe calcularse mediante el uso de  $K_{bc}$  (burbuja-nube) y  $K_{ce}$  (nube-emulsión):

$$1/K_{be} = (1/K_{bc}) + (1/K_{ce})$$

$$K_{bc} = 4,5 \left( \frac{u_{mf}}{d_b} \right) + 5,85 \left( \frac{D^{0,5} g^{1/4}}{d_b^{5/4}} \right) [s^{-1}]$$

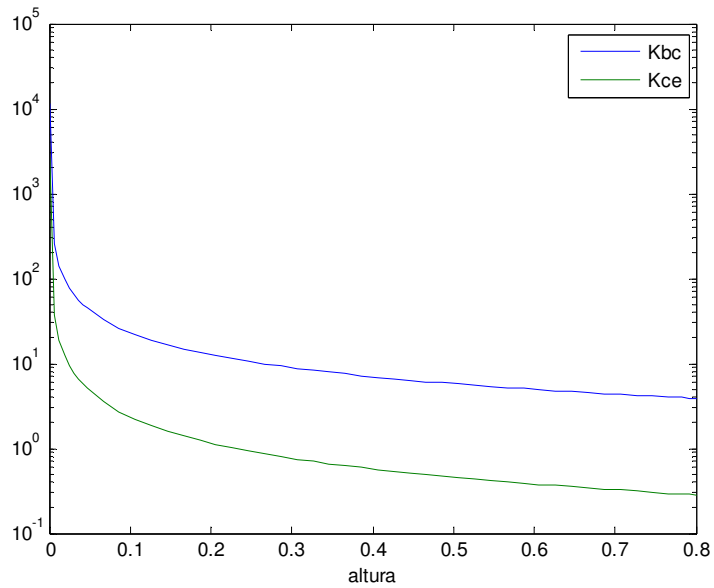
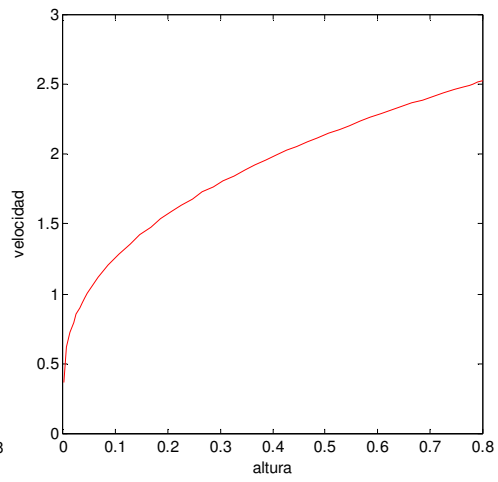
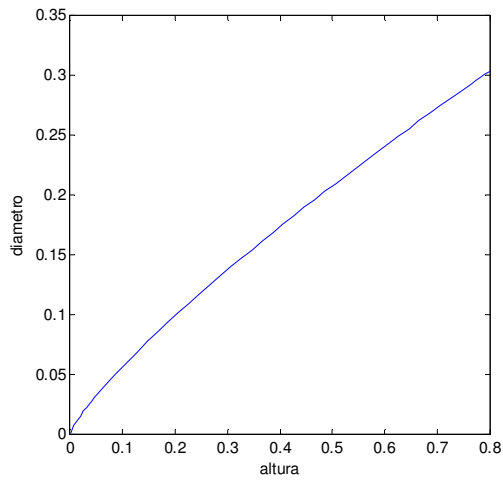
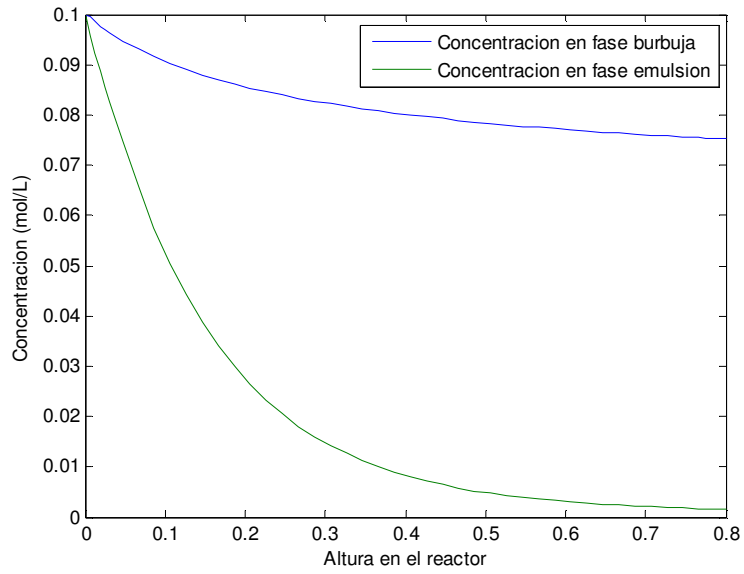
$$K_{ce} = 6,77 \left( \frac{D \epsilon_{mf} u_{br}}{d_b^3} \right)^{0,5} [s^{-1}]$$

$D$  es la difusividad del reactivo ( **$9 \cdot 10^{-5} m^2/s$**  en nuestro caso).

Se desea conocer cómo varían a lo largo de la altura del reactor:

- las concentraciones  $C_{Ab}$  y  $C_{Ae}$ , teniendo en cuenta que a la entrada son ambas iguales a 0.1 mol/L
- los coeficientes de transferencia  $K_{bc}$  y  $K_{ce}$
- el diámetro y la velocidad de las burbujas

*Solución: Basta resolver las ecuaciones diferenciales del enunciado, y luego sustituir para encontrar cada una de los parámetros que se piden:*



**EDO.3. Reactor encamisado exotérmico**

En un reactor encamisado se lleva a cabo una reacción exotérmica. Para este tipo de sistema se comprueba mediante balances de materia y energía que se cumple la siguiente ecuación:

$$\frac{dT}{d\zeta} = \Delta T_{ad} - \frac{4U(T - T_c)}{d_t \rho C_p k(1 - \zeta)}$$

donde  $\zeta$  es la conversión en el reactor (cero para  $\tau = 0$ ) y  $T_c$  es la temperatura del encamisado. A la entrada del sistema ( $\tau = 0$ ) la temperatura es de 340 K.

En el sistema, de primer orden, se cumple la ecuación de diseño:

$$\frac{d\zeta}{d\tau} = k(1 - \zeta)$$

en la que la constante de velocidad sigue la ley de Arrhenius,

$$k = k_0 \exp\left[-\frac{E}{RT}\right]$$

y se dispone de los siguientes datos:

T (K)	k (s <sup>-1</sup> )
300	0.00012239
320	0.0013828
330	0.003864
340	0.0107844

En el caso particular que se trata:

- la temperatura inicial del sistema de reacción es 340 K,
- se midió el valor de  $\Delta T_{ad} = 146 \text{ K}$ ,
- se conoce  $\frac{4U}{d_t \rho C_p} = 0.2 \text{ s}^{-1}$

En este ejercicio:

- 1) Se desea seguir la evolución T- $\tau$  para tres temperaturas de encamisado distintas, 330, 335 y 337 K. Realiza los programas necesarios para visualizar las diferencias en una misma gráfica.
- 2) También se quiere seguir la evolución T- $\zeta$  en una misma gráfica para los tres casos presentados.

#### NOTAS:

1. Tenga en cuenta que en la ecuación 1 la variable independiente es la conversión, y en la 2 es el tiempo. Cuando integre ambas deben depender del tiempo
2. Integre para los primeros 200 segundos.

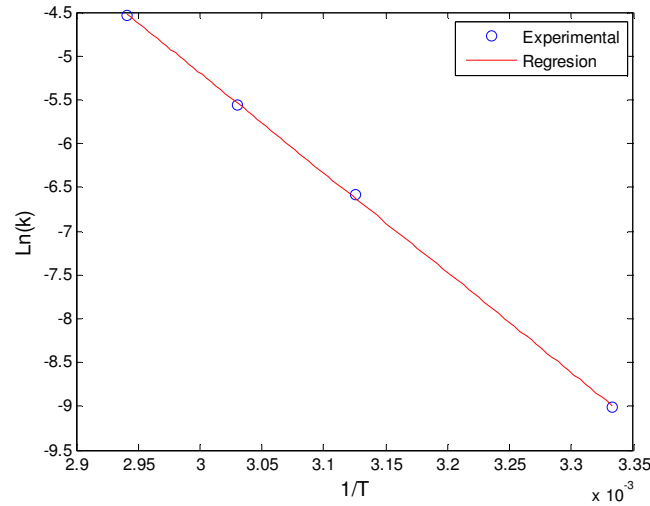
*Solución:*

*La primera parte requiere estimar los valores de la Energía de activación y el factor pre-exponencial de la ecuación cinética. Para ello se puede llevar a cabo un ajuste lineal múltiple representando  $\ln(k)$  vs.  $\frac{1}{T}$*

$$k_0 = 3.9955 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$$

*Haciendo esto se obtiene que:*  $\frac{E}{R} = 11403.42 \text{ K}$



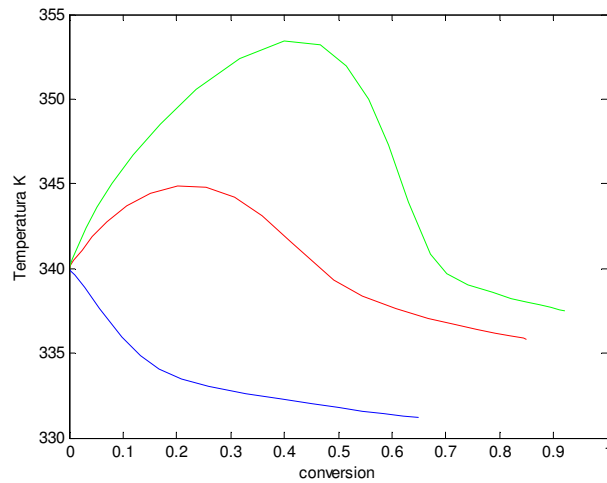
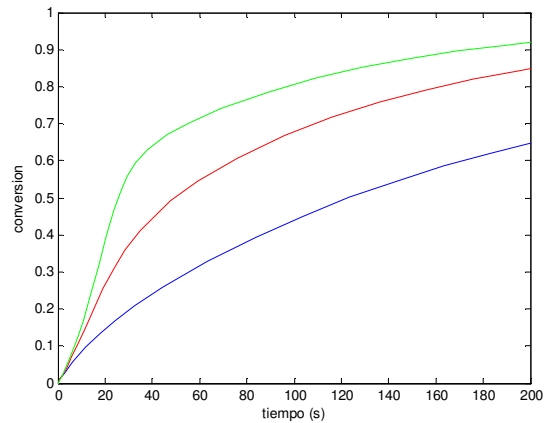
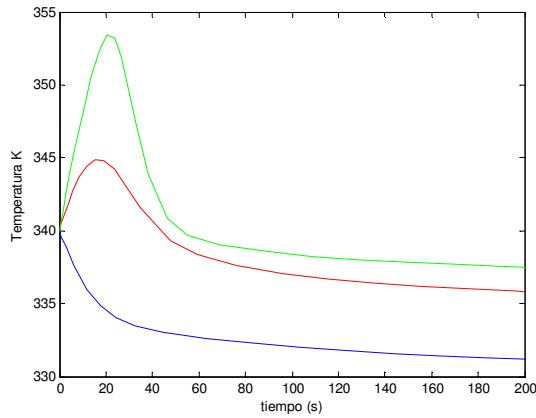


El siguiente paso es resolver el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, simplemente poniendo ambas ecuaciones en función del tiempo:

$$\frac{dT}{d\tau} = k(1-\zeta) \left[ \Delta T_{ad} - \frac{4U(T-T_c)}{d_t \rho C_p k(1-\zeta)} \right]$$

$$\frac{d\zeta}{d\tau} = k(1-\zeta)$$

El resultado final

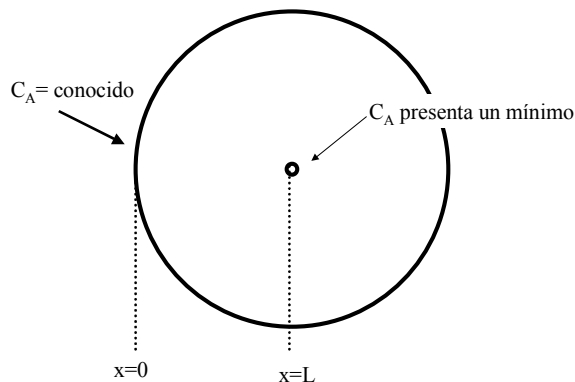


**EDO.4. Descomposición de SH<sub>2</sub> en una partícula esférica**

Se pretende descomponer el sulfuro de hidrógeno en sus elementos. Para ello se dispone de un sistema en el que se difunde SH<sub>2</sub> dentro de las partículas esféricas de un catalizador poroso de sílica/alúmina. El sistema se caracteriza por la ley de Fick, que aplicada a un sistema con una reacción de primer orden, como es el caso, tiene la forma:

$$D_e \frac{d^2 C_A}{dx^2} - k C_A = 0$$

donde  $D_e$  representa la difusividad efectiva,  $C_A$  la concentración de SH<sub>2</sub>,  $k$  la constante de velocidad de reacción y  $x$  la distancia desde el centro de la partícula.



Las condiciones de contorno de la ecuación anterior son:

- 1º. La concentración de SH<sub>2</sub> en la superficie del catalizador es conocida, e igual a 10 mol/m<sup>3</sup>.
- 2º. La concentración de SH<sub>2</sub> en el centro de la partícula presenta un mínimo, por lo que  $dC_A/dx=0$  en el centro.

Se desea determinar el perfil de concentración de SH<sub>2</sub> a lo largo de la partícula.

**Datos:**

$$D_e = 5 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$$

$$k = 1 \text{ s}^{-1}$$

Radio de la partícula = 2 mm.

*Solución:* El primer paso es transformar la ecuación diferencial de segundo orden en un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden:

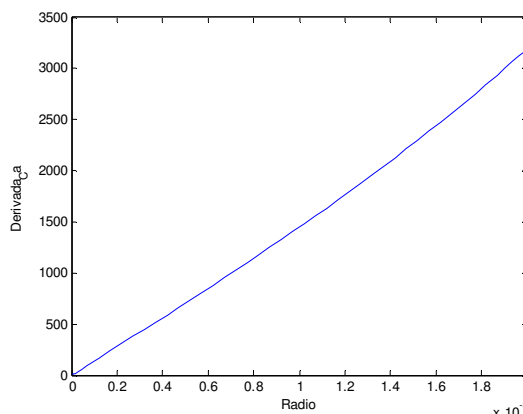
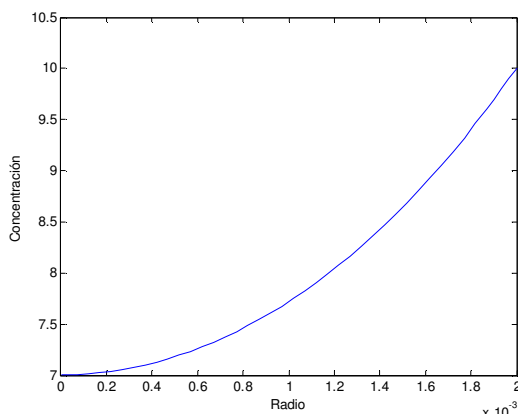
$$\frac{dC_A}{dx} = V \quad \text{con condiciones de contorno:} \quad \begin{array}{l} x=0 \rightarrow C_A = 10 \\ x=L \rightarrow V = \left( \frac{dC_A}{dx} \right) = 0 \end{array}$$

*El problema es que ahora las condiciones de contorno vienen dadas en dos puntos diferentes. Para solucionar el problema se puede utilizar la técnica conocida como 'Shooting method' que consiste en suponer uno de los valores iniciales, integrar la ecuación diferencial, y comprobar si se satisface el otro valor inicial. Si no es así el valor supuesto se modifica hasta que el segundo valor inicial se cumpla. Para hacer esto de forma sistemática se puede introducir la ecuación diferencial dentro de un método para resolver ecuaciones.*

*En este caso es conveniente suponer la concentración en  $x=L$ . La razón es que el valor de la concentración en dicho punto es fácilmente acotable (estará*

siempre entre 0 y 10), lo que nos permite utilizar un método como el de la bisección que podemos asegurar que va a converger siempre. Sin embargo de la otra alternativa, suponer el valor de la derivada de la concentración en el punto inicial, sólo sabemos que debería ser negativa. El resultado es el siguiente:

Valor de la concentración en  $x=L$ ,  $C_A(x=L) = 7.0058$



### EDO.5. Cinética de descomposición formación

La concentración de un reactivo 'A' varía con el tiempo según la siguiente ecuación:

$$\frac{dC_A}{dt} = -9420 \exp\left(-\frac{3500}{298}\right) C_A \quad t \text{ en minutos, } C_A \text{ en mol/L}$$

que no depende de la temperatura. Se realiza un experimento y al cabo de 25 minutos se encuentran en el sistema 3.4 mol/L de 'A'. ¿Cuál era la concentración inicial? Dibuje la variación de la concentración con el tiempo para este reactivo.

b) La concentración de un reactivo 'B' varía con el tiempo según la siguiente ecuación:

$$\frac{dC_B}{dt} = -5 \cdot 10^{15} \exp\left(-\frac{15000}{T}\right) C_B^2 \quad t \text{ en minutos, } C_B \text{ en mol/L, } T \text{ en K}$$

y la temperatura varía con el tiempo según la ecuación:

$$T = 298 + 5t \quad t \text{ en minutos, } T \text{ en K}$$

En el sistema se parte de una concentración de B de 7 mol/L. ¿Cuál es la concentración al cabo de 25 minutos? Dibuje la variación  $C_B$ -t.

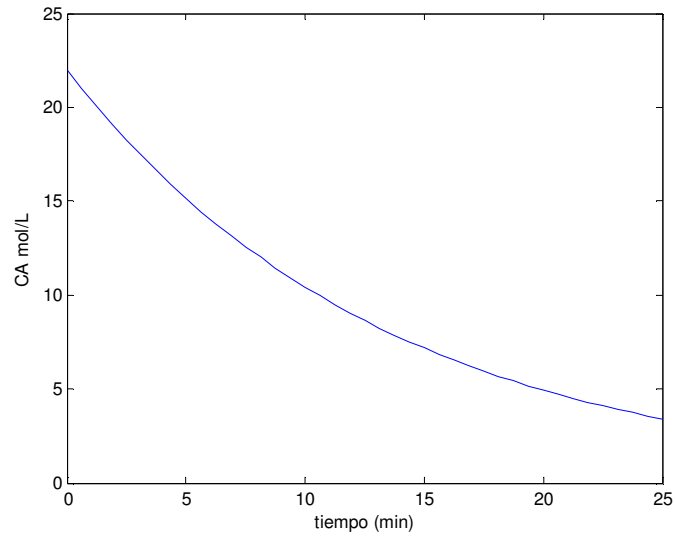
c) Un tercer reactivo 'C' está presente en el sistema. La concentración de C es una función de las ecuaciones que describen la variación de A y B, de forma que:

$$\frac{dC_C}{dt} = -0.05(C_A + C_B)$$

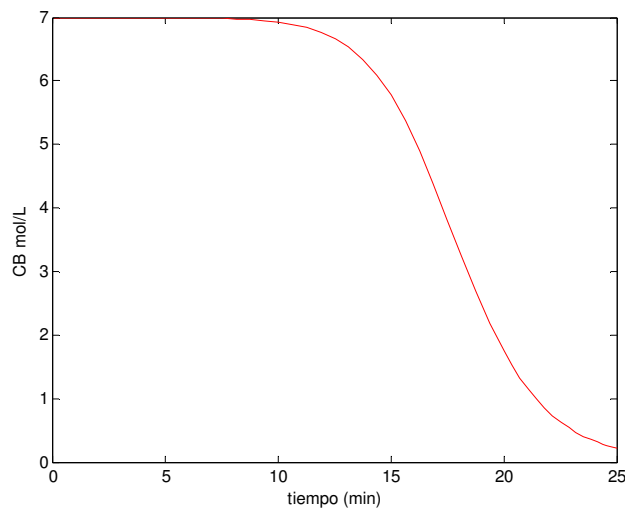
La concentración inicial de C es 20 mol/L. Dibuje la variación de  $C_C$  con el tiempo para los 25 primeros minutos

**Solución:**

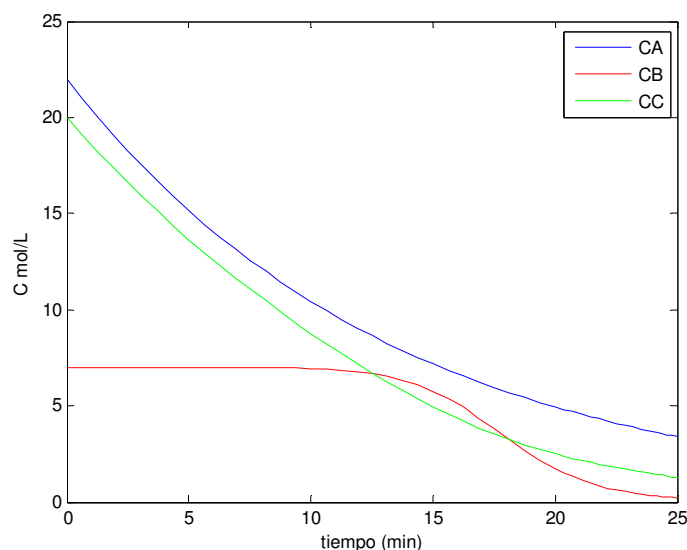
En este caso tenemos primero una ecuación diferencial, cuya única dificultad es que se debe integrar hacia atrás (incrementos de tiempo negativos). El resultado es



*El valor de la concentración de A a tiempo cero es de : 22.00 mol/L.  
El segundo apartado sólo requiere tener en cuenta que la temperatura varía de forma lineal con el tiempo. El resultado es:*

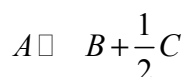


*Por último, en el tercer caso se tiene un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias donde se debe utilizar el valor inicial de concentración de A, calculado en el primer apartado. El resultado es*



**EDO.6. Reactor catalítico de membrana**

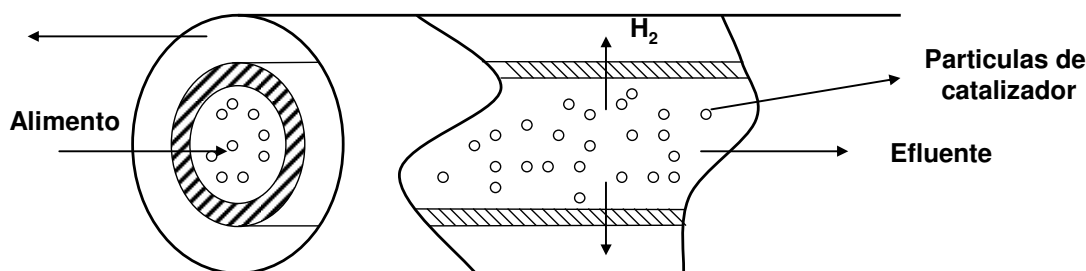
La deshidrogenación de un compuesto A tiene lugar en un reactor con membrana selectiva bajo condiciones isotermas.



La reacción es reversible con constante de equilibrio  $K_C$ .

La ventaja de utilizar un reactor de membrana está en que uno de los productos atraviesa de forma selectiva la membrana, de tal manera que si el componente que atraviesa la membrana es uno de los productos, la reacción se puede llevar hasta conversión completa.

**Permeado  $H_2$**



La velocidad de transferencia hasta la membrana depende no sólo de la resistencia ofrecida por la membrana, si no también de las 'capas' de concentración en cada lado de ésta. El coeficiente de transferencia de materia a través de la membrana se puede correlacionar a través de la siguiente ecuación:

$$k_C(v) = k_C(v_0) \left( \frac{v}{v_0} \right)^{1/2} = k_{C0} \left( \frac{v}{v_0} \right)^{1/2}$$

Si el paso limitante es el flujo a través de la membrana entonces el coeficiente se puede considerar independiente de la velocidad, pero este no es el caso.

El componente C es transportado a través de la membrana, se puede calcular como:

$$r_{C(membrana)} = k_C a C_C \text{ para valores de permeado C bajos.}$$

Calcule los flujos molares, en función de la masa de catalizador, así como la pérdida de presión para los siguientes valores:

$$k = 0.5 \frac{dm^3}{kg \min}; \quad v_0 = 50 \frac{dm^3}{\min}; \quad K_C = 0.5 \left( \frac{kmol}{dm^3} \right)^{0.5}$$

$$P_0 = 10 \text{ atm}; \quad F_{A0} = 10 \frac{kmol}{\min}; \quad \alpha = 0.002 \frac{atm}{kg}$$

$$k_{C0} = 0.1 \frac{dm}{\min}; \quad a = 2 \frac{dm^2}{kg}; \quad W = 200 \text{ kg}$$

*Solución: Las ecuaciones para este sistema serían las siguientes.*

*Balances de Materia:*

$$\frac{dF_A}{dW} = r'_A$$

$$\frac{dF_B}{dW} = -r'_A$$

$$\frac{dF_C}{dW} = -\frac{1}{2} r'_A - k_C a C_C$$

*Ecuaciones de velocidad*

$$r'_A = -k \left( C_A - \frac{C_B C_C^{1/2}}{K_C} \right)$$

*Relación flujo concentración y estequiometría*

$$C_A = \frac{F_A}{v}; \quad C_B = \frac{F_B}{v}; \quad C_C = \frac{F_C}{v}$$

$$v = v_0 \left( \frac{F_A + F_B + F_C}{F_{A0}} \right) \frac{P_0}{P} = v_0 \left( \frac{F_A + F_B + F_C}{F_{A0}} \right) \frac{1}{y} \quad \text{con } y = \frac{P}{P_0}$$

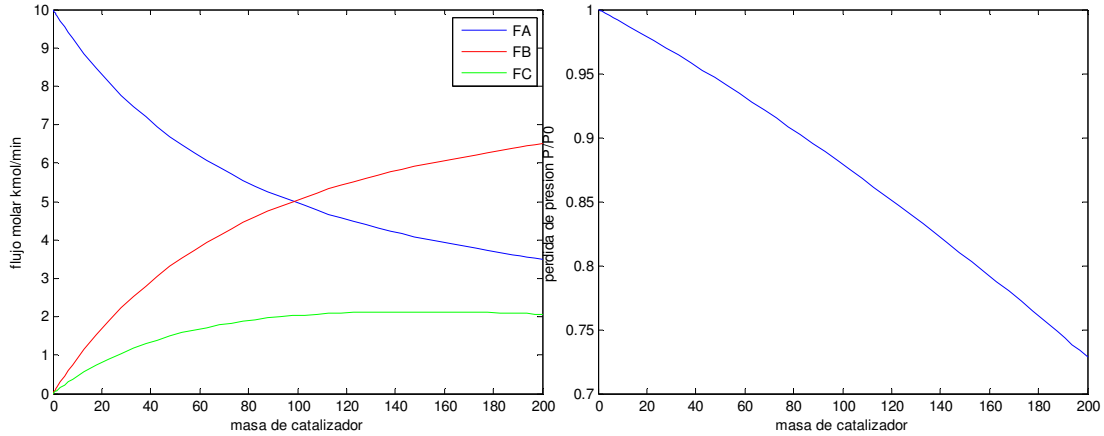
*Caída de presión*

$$\frac{dy}{dW} = \frac{-\alpha \left( \frac{F_A + F_B + F_C}{F_{A0}} \right)}{2y}$$

*Coefficiente de transferencia de materia*

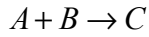
$$k_C = k_{C0} \left( \frac{v}{v_0} \right)^{1/2}$$

*La integración de las cuatro ecuaciones diferenciales en función de la masa de catalizador (entre 0 y 200 kg) lleva a:*



**EDO.7. Asociación de RCTA isotermos**

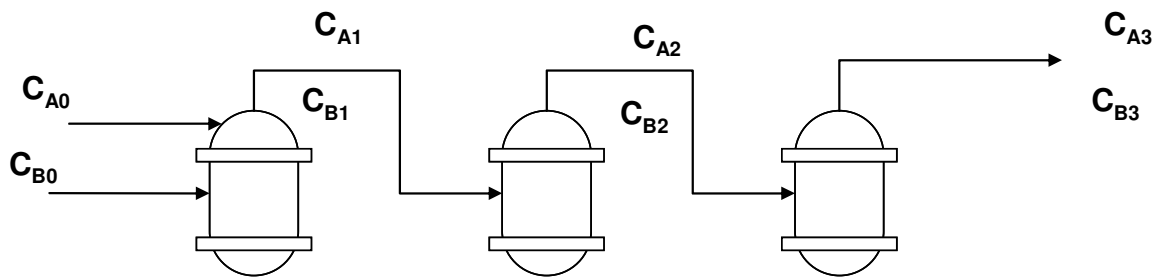
Considere que la siguiente reacción elemental e irreversible que tiene lugar en fase líquida.



Se lleva a cabo en una asociación de 3 reactores en serie de tipo tanque agitado. Las especies A y B se adicionan de forma individual al primer tanque con un flujo volumétrico (cada una de ellas) de  $6 \text{ dm}^3/\text{min}$ . El volumen de cada reactor es de  $200 \text{ dm}^3$ . Considere que inicialmente cada reactor está lleno con un disolvente líquido inerte. La concentración inicial de cada reactante es

$$C_{A0} = C_{B0} = 0.5 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3} \text{ y la constante de reacción es de } k = 0.5 \frac{\text{dm}^3}{\text{mol min}}$$

- Calcule las concentraciones en estado estacionario a la salida de cada reactor
- Calcule el perfil de concentraciones hasta que se alcanza el estado estacionario
- Repita el apartado b suponiendo que ahora el componente B se divide en tres partes iguales que se alimentan a cada reactor.



*Solución: La primera parte consiste en resolver un sistema de ecuaciones no lineales:*

$$\frac{v_{0A}C_{A0} - v_1C_{A1} - k C_{A1}C_{B1} V_1}{V_1} = 0$$

$$\frac{v_{0B}C_{B0} - v_1C_{B1} - k C_{A1}C_{B1} V_1}{V_1} = 0$$

$$\frac{v_1C_{A1} - v_2C_{A2} - k C_{A2}C_{B2} V_2}{V_2} = 0$$

$$\frac{v_1C_{B1} - v_2C_{B2} - k C_{A2}C_{B2} V_2}{V_2} = 0$$

$$\frac{v_2C_{A2} - v_3C_{A3} - k C_{A3}C_{B3} V_3}{V_3} = 0$$

$$\frac{v_2C_{B2} - v_3C_{B3} - k C_{A3}C_{B3} V_3}{V_3} = 0$$

Con  $C_{A0} = C_{B0} = 2.0$ ;  $k = 0.5$ ;  $V_1 = V_2 = V_3 = 200$   
 $v_{0A} = v_{0B} = 6$ ;  $v_1 = v_2 = v_3 = 12$

$$C_{A1} = C_{B1} = 0.29167$$

Se obtienen los siguientes valores:  $C_{A2} = C_{B2} = 0.13644$

$$C_{A3} = C_{B3} = 0.08132$$

En la segunda parte debemos integrar las siguientes ecuaciones:

$$\frac{dC_{A1}}{dt} = \frac{v_{0A}C_{A0} - v_1C_{A1} - k C_{A1}C_{B1} V_1}{V_1}$$

$$\frac{dC_{B1}}{dt} = \frac{v_{0B}C_{B0} - v_1C_{B1} - k C_{A1}C_{B1} V_1}{V_1}$$

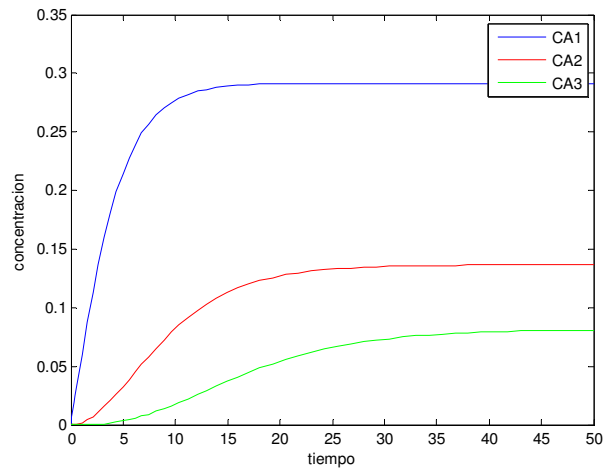
$$\frac{dC_{A2}}{dt} = \frac{v_1C_{A1} - v_2C_{A2} - k C_{A2}C_{B2} V_2}{V_2}$$

$$\frac{dC_{B2}}{dt} = \frac{v_1C_{B1} - v_2C_{B2} - k C_{A2}C_{B2} V_2}{V_2}$$

$$\frac{dC_{A3}}{dt} = \frac{v_2C_{A2} - v_3C_{A3} - k C_{A3}C_{B3} V_3}{V_3}$$

$$\frac{dC_{B3}}{dt} = \frac{v_2C_{B2} - v_3C_{B3} - k C_{A3}C_{B3} V_3}{V_3}$$



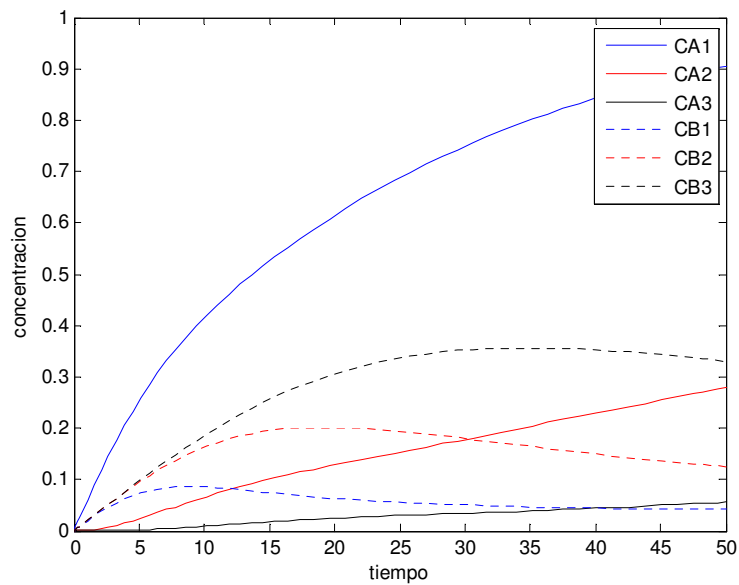


En el tercer caso debemos modificar las ecuaciones referentes a CB2 y CB3 de la siguiente manera;

$$\frac{dC_{B2}}{dt} = \frac{v_{0B}C_{B0} + v_1C_{B1} - v_2C_{B2} - k C_{A2}C_{B2} V_2}{V_2}$$

$$\frac{dC_{B3}}{dt} = \frac{v_{0B}C_{B0} + v_2C_{B2} - v_3C_{B3} - k C_{A3}C_{B3} V_3}{V_3}$$

Pero ahora con  $v_{0B} = 2$ ;  $v_1 = 8$ ;  $v_2 = 10$ ;  $v_3 = 12$



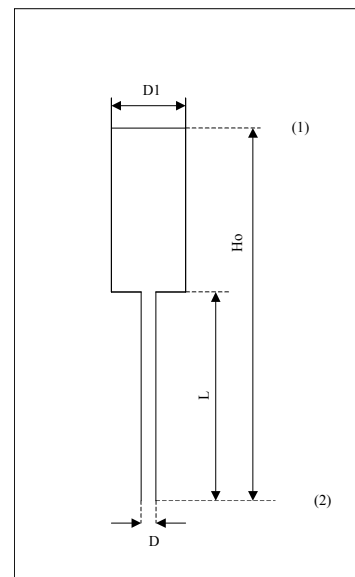
**EDO.8. Tiempo de vaciado de un depósito**

El depósito de la figura, inicialmente lleno de agua, se descarga (vacía) a la atmósfera a través del tubo inferior. Calcule y represente gráficamente, para las dos primeras horas de vaciado:

- Variación de la altura (H) del agua con el tiempo dentro del depósito.
- Variación de la velocidad de salida con el tiempo (punto 2).

Tenga en cuenta que la velocidad en cada instante se puede calcular a partir de un balance de energía mecánica:

$$\frac{V_2^2}{2} - gH + 2fV_2^2 \frac{L}{D} = 0$$



donde:  $V_2$  = velocidad en la sección de salida (2).

$g$  = constante de gravitación universal

$f$  = factor de fricción

$L$  = longitud de tubería

$D$  = Diámetro de tubería

$H$  = altura del agua contando desde el punto (2)

el factor de fricción se puede calcular a partir de la ecuación de Coolebrook y White:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -4 \log \left( \frac{\varepsilon/D}{3.7} + \frac{1.256}{\text{Re} \sqrt{f}} \right)$$

donde  $\varepsilon$  = rugosidad

$\text{Re}$  = número de Reynolds.

Datos:

$\mu = 10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$  (Viscosidad del agua)

$\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$  (Densidad del agua)

$\varepsilon = 5 \cdot 10^{-4} \text{ m}$  (Rugosidad)

$L = 1 \text{ m}$  Longitud de tubo

$D = 0.5 \text{ cm}$  diámetro del tubo en el punto (2)

$H_0 = 10 \text{ m}$  Altura inicial del agua medida desde el punto

(2).

$D_1 = 0.2 \text{ m}$  Diámetro del depósito.

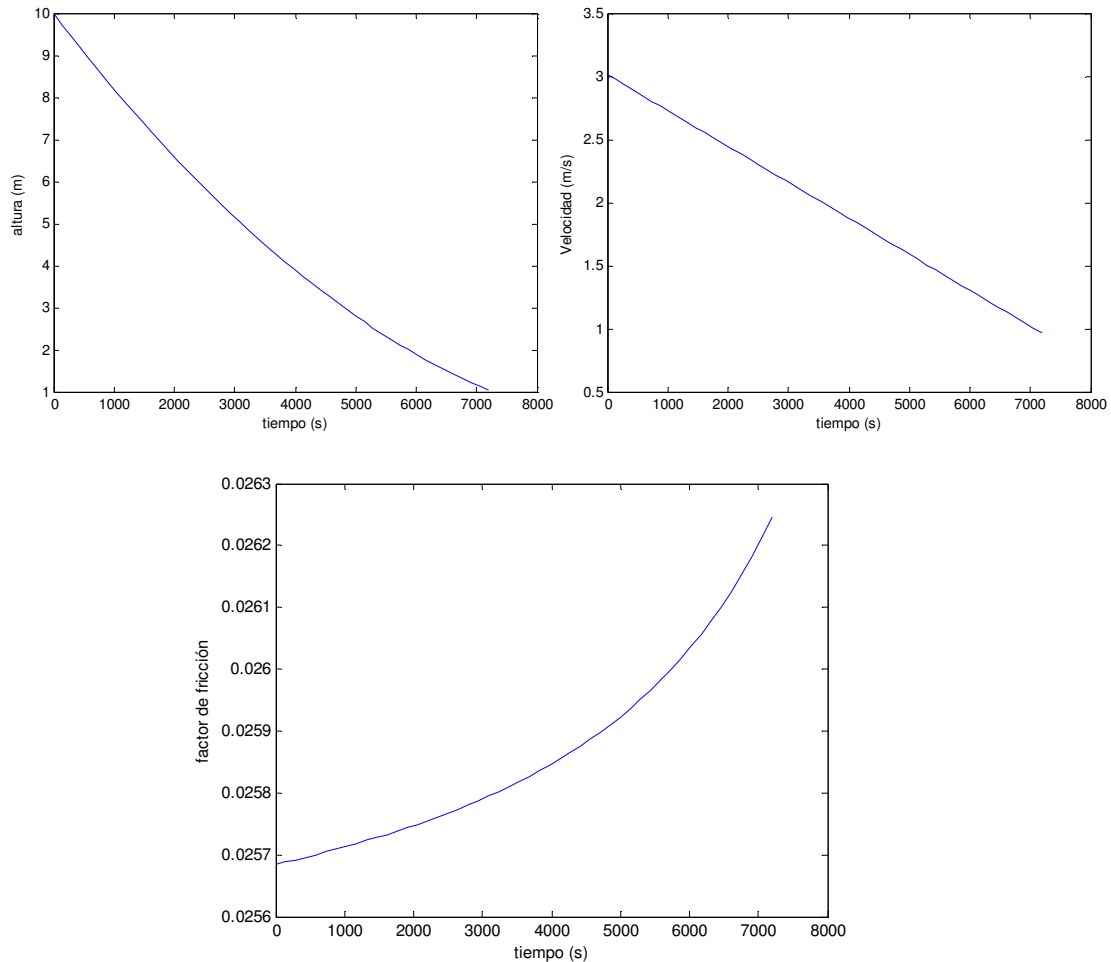
Además, utilizando la ecuación de continuidad se tiene que la variación de altura con el tiempo viene dada por la expresión:

$$V_2 S_2 = - S_1 \frac{dH}{dt}$$

donde  $S_1$  = sección en el punto (1)

$S_2$  = sección en el punto (2)

*Solución: En este problema se debe resolver una ecuación diferencial ordinaria. Sin embargo, en cada paso de la integración se debe además resolver un sistema de ecuaciones no lineales que permitan determinar el valor de la velocidad y el factor de fricción.*



### EDO.9. Simulación del enfriamiento del agua dentro de un botijo.

Un botijo se encuentra expuesto al sol en un día muy caluroso ( $39\text{ }^{\circ}\text{C}$ ). el objetivo es simular como varía la temperatura y la masa de agua contenida en el botijo con el tiempo.

Para ello haga las siguientes suposiciones:

- ✓ El botijo es perfectamente esférico con un radio de 0.1 m.
- ✓ La densidad del agua es constante  $1000\text{ kg/m}^3$
- ✓ No hay pérdidas de agua por goteo o exudación
- ✓ El coeficiente de transferencia de materia en la superficie exterior y en la interior es el mismo.
- ✓ La superficie del líquido en la interfase con el aire esta a Temperatura constante y en equilibrio con el aire
- ✓ La pared seca alrededor del líquido se mantiene constante a  $39^{\circ}\text{C}$  e irradia a la superficie interior del líquido a ( $\theta_s = 24.2\text{ }^{\circ}\text{C}$ )

- ✓ El coeficiente global de transmisión de calor U incluye todas las resistencias de convección en el líquido y conducción en el líquido y a través de las paredes.
- ✓ El líquido está perfectamente mezclado.
- ✓ La capacidad calorífica de la arcilla es mucho menor en comparación con la capacidad calorífica del agua, de tal forma que el contenido de calor del botijo se puede despreciar.
- ✓ El factor de forma de radiación f es constante.
- ✓ La renovación de aire en el exterior es constante.
- ✓ La humedad y la temperatura del aire permanecen constantes.

Las ecuaciones que definen el sistema son entonces:

$$\frac{dV}{dt} = -k' a (H_s - H)$$

$$VC_p \left( \frac{d\theta_L}{dt} \right) = h_C a (\theta_G - \theta_S) + f \epsilon \sigma \left[ (273 + \theta_G)^4 - (273 + \theta_S)^4 \right] (4\pi R^2 - S) - Ua(\theta_L - \theta_S) - \lambda_w \left( -\frac{dV}{dt} \right)$$

La primera ecuación expresa la velocidad de evaporación como una función del coeficiente de transferencia de materia del agua (k') de la superficie total (a = A + S) y la diferencia entre la humedad de saturación del aire (Hs) y la humedad ambiental (H). donde:

$$H_s = 0.018 \text{ kg agua / kg aire seco}$$

$$H = 0.011 \text{ kg agua / kg aire seco}$$

La segunda ecuación es un análisis global que expresa la variación térmica del líquido y corresponde a un balance entre la transferencia de calor del aire al agua (convección térmica sobre la superficie A+S y radiación térmica del aire en la cámara sin agua). Las pérdidas de calor en la interfase líquido vapor y la evaporación del líquido.

Datos y Notas:

$$M_0 = 3.161 \text{ kg}$$

$$k' = 80 \text{ kg agua / (h m}^2\text{)}$$

$$a = A + S$$

$$H_s = 0.018 \text{ kg agua / kg aire seco}$$

$$H = 0.011 \text{ kg agua / kg aire seco}$$

$$C_p = 1 \text{ kcal / (kg K)}$$

$$\theta_G = 39^\circ \text{ C}$$

$$\theta_S = 24.2^\circ \text{ C}$$

$$\theta_L$$

$$\lambda_w = 583 \text{ kcal / kg}$$

$$f \epsilon \sigma = 3.05 \cdot 10^{-8} \text{ kcal / (h m}^2 \text{ K}^4\text{)}$$

$$U = 22 \text{ kcal / (h m}^2 \text{ K)}$$

Masa inicial de agua

Coeficiente individual de transferencia de materia

Área total

Humedad de saturación

Humedad ambiental

Capacidad calorífica del agua

Temperatura del Aire

Temperatura del vapor justo encima de la superficie del agua (coincide con la temperatura de saturación adiabática)

Temperatura del agua (varía con tiempo)

Calor de vaporización del agua

Coeficiente global de transmisión de

De acuerdo con Sherwood Pigford :  $\frac{h_c}{k'} = s Le^{2/3}$

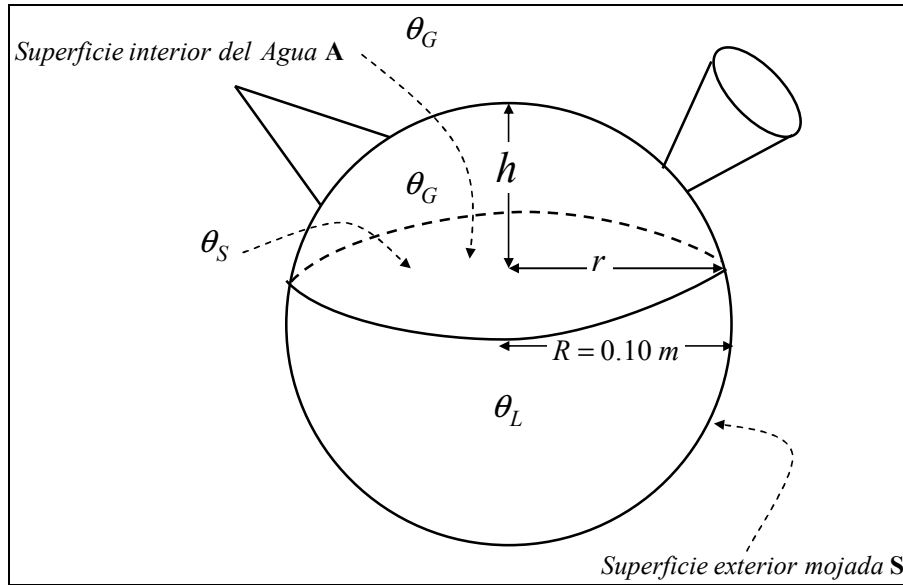
$$s = 0.24 \text{ kcal} / (\text{kg K})$$

$$Le = 1.15$$

calor

Calor húmedo

Número de Lewis



Hay que tener en cuenta que el volumen ocupado por el agua es

$$V = \frac{4}{3} \pi R^3 - \frac{\pi}{3} (3Rh^2 - h^3)$$

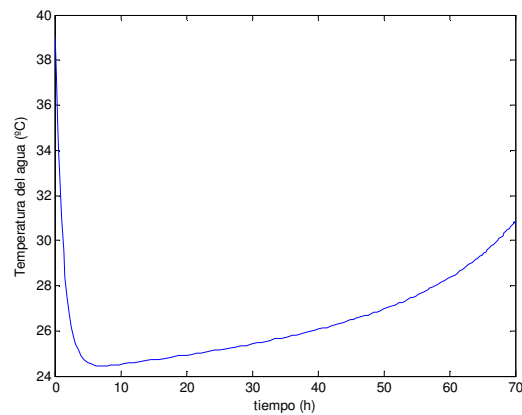
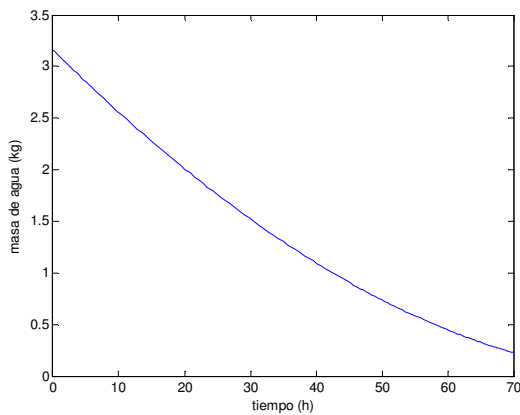
El área interior del agua:

$$A = \pi (2Rh - h^2)$$

Y la superficie exterior mojada

$$S = 2\pi R (2R - h)$$

*Solución: Se deben integrar las ecuaciones diferenciales anteriores con el cálculo simultáneo de V, A, S y h. Quizás lo más sencillo sea escribir las ecuaciones en función de h.*



**EDO.10. Reactor no isoterma**

En un reactor químico tiene lugar la reacción  $A \rightarrow R$ , que tiene lugar en fase líquida. Se conocen los siguientes datos sobre la capacidad calorífica de la mezcla, la cinética y el calor de reacción:

$$C_{ps} = 250 \text{ cal / mol} \cdot K$$

$$\Delta H_r = -15000 \text{ cal / mol}$$

$$E / R = 12000 \text{ K}$$

$$k_0 = 8 \cdot 10^{13} \text{ min}^{-1}$$

Las condiciones de operación suponen un tiempo espacial  $\tau = 100 \text{ min}$  y una temperatura de entrada de la alimentación  $T_0 = 29.5^\circ C$

Un balance de materia en estado no estacionario, indica que para el arranque del reactor se cumple la siguiente ecuación:

$$\frac{dx_A}{dt} = \left[ k_0 \exp\left(-\frac{E/R}{T}\right) \right] (1 - x_A) - \frac{x_A}{\tau}$$

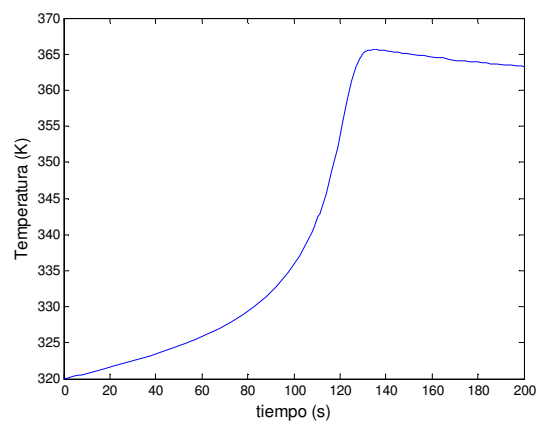
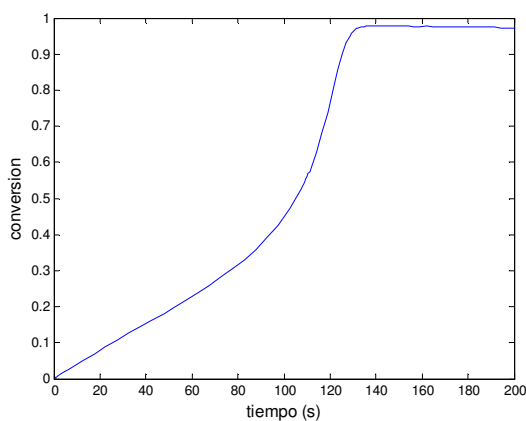
Asimismo, un balance de energía en régimen no estacionario proporciona:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{(-\Delta H_r)}{C_{ps}} \left[ k_0 \exp\left(-\frac{E/R}{T}\right) \right] (1 - x_A) - \frac{(T - T_0)}{\tau}$$

En las ecuaciones anteriores,  $x_A$  representa la conversión de A y T la temperatura.

Represente las variaciones de la conversión y la temperatura si la temperatura inicial es de 300 K.

*Solución:*



## Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales

### EDP.1. Perfil de temperaturas en la pared de un horno

Calcule como varía con el tiempo el perfil de temperaturas de la pared de un horno cuyo interior se mantiene a temperatura constante de 1000 °C. Para los siguientes casos.

- El lado exterior se mantiene a 25°C.
- El lado exterior se puede considerar una superficie perfectamente aislante.
- El lado exterior pierde calor al ambiente.

Datos y Notas.

$L = 0.1\text{m}$	Grosor de la pared
$C_p = 400\text{ J}/(\text{kg K})$	Capacidad calorífica
$\rho = 2000\text{ kg}/\text{m}^3$	Densidad de la pared
$T_o = 25\text{ }^\circ\text{C}$	Temperatura ambiente
$T_{\text{int}} = 1000$	Temperatura de la pared interior
$h = 20\text{ W}/(\text{m}^2\text{ K})$	Coefficiente individual de transmisión de calor
$k = 0.55\text{ W}/(\text{m K})$	Conductividad calorífica

Para los puntos interiores se debe cumplir que:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad \alpha = \frac{k}{\rho C_p}$$

Se deben cumplir las siguientes condiciones iniciales y de contorno

En todos los casos

$$T(0, x) = T_o \quad \forall x \neq L; \quad T(0, L) = T_{\text{int}}$$

Para el primer caso:

$$T(t, 0) = T_o; \quad T(t, L) = T_{\text{int}}$$

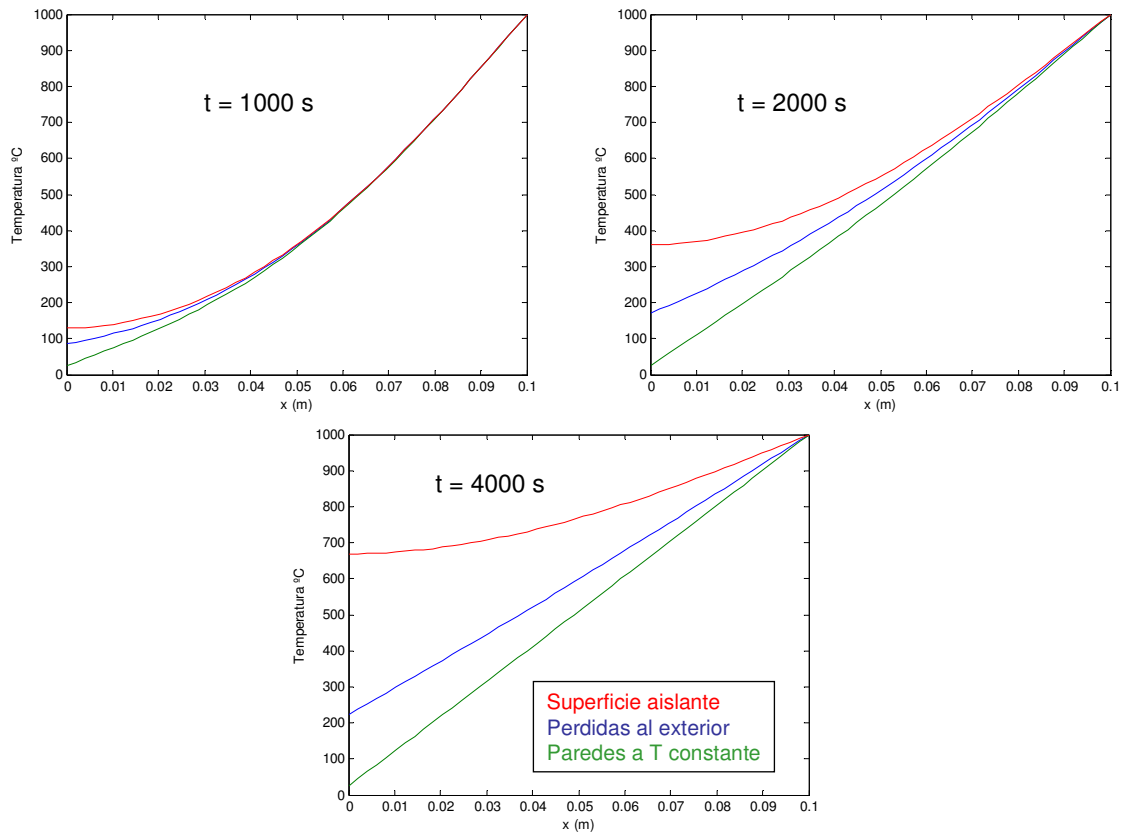
Para el segundo caso

$$q = -k \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0} = 0 \quad T(0, L) = T_{\text{int}}$$

Para el tercer caso

$$q = -k \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0} = h(T_{x=0} - T_o) \quad T(0, L) = T_{\text{int}}$$

*Solución: La solución en estos casos supone la representación con el tiempo de todos los perfiles de temperatura, se darán sólo algunos valores.*



**EDP.2. Difusión más reacción de un gas**

Sobre una película líquida se absorbe un gas (A) que reacciona para dar un compuesto B. dicho compuesto a su vez reacciona para dar otro C.



Un balance en estado no estacionario viene dado por

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_A \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + r_A$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 C_B}{\partial x^2} + r_B$$

Con condiciones iniciales y de contorno.

$$t = 0 \Rightarrow (C_A = 0 \quad \forall x \neq 0; \quad C_B = 0)$$

$$x = 0 \Rightarrow (C_A = C_{A0}; \quad C_B = 0 \quad \forall t)$$

$$x = L \Rightarrow \left( \frac{dC_A}{dx} = 0; \quad \frac{dC_B}{dx} = 0 \right)$$

Utilizando un método de diferencias finitas realice un programa en Matlab que permita visualizar la variación de la concentración de A y B con el tiempo para los 25 primeros segundos. (Utilice 50 puntos para discretizar el espacio x).

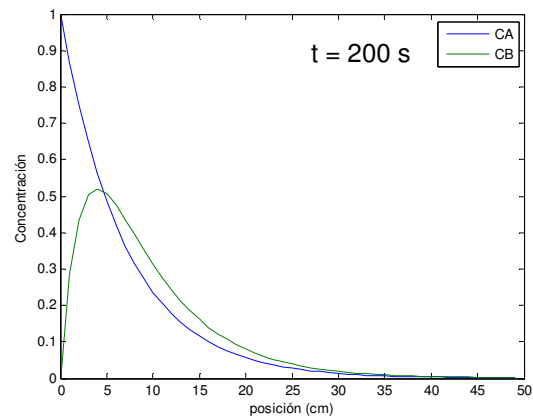
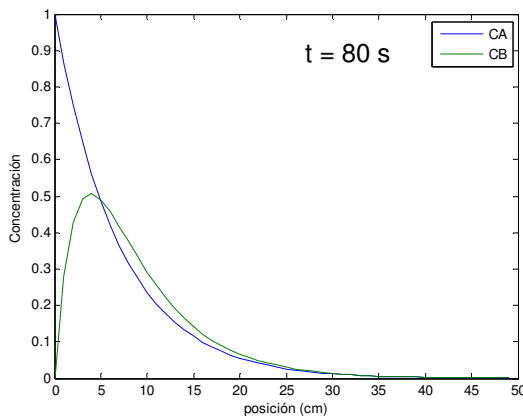
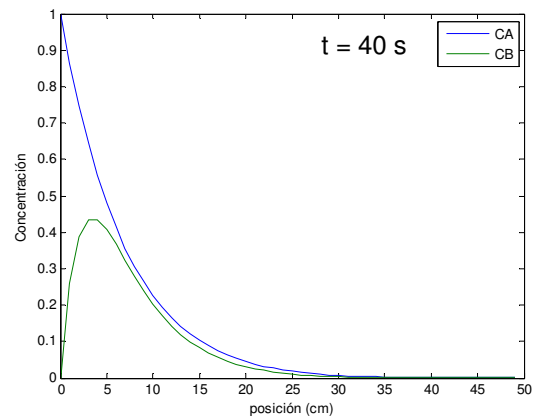
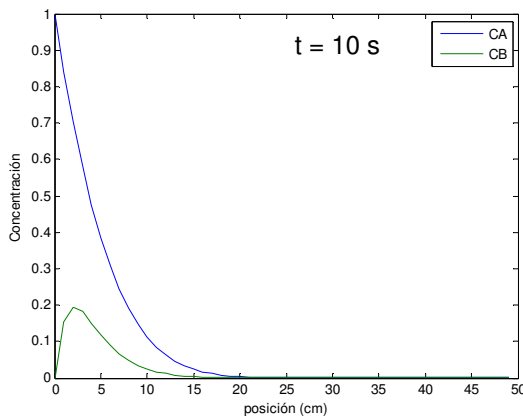
Indique claramente el resultado de aplicar el criterio de estabilidad.



Para el compuesto B realice un grafico en 3 dimensiones que represente la concentración frente al tiempo y a la posición (considere los 25 primeros segundos).

Datos:

$$\begin{aligned}
 L &= 0.5 \text{ cm}; \\
 D_A &= 0.001 \text{ cm}^2 / \text{s} \\
 D_B &= 0.0001 \text{ cm}^2 / \text{s} \\
 k_1 &= 0.05 \text{ s}^{-1} \\
 k_2 &= 0.04 \text{ s}^{-1} \\
 C_{A0} &= 1 \text{ mol / L} \\
 C_{B0} &= 0 \text{ mol / L}
 \end{aligned}$$



### EDP.3. Flujo más dispersión en una tubería

A lo largo de un tubo está circulando una corriente de agua. En un momento dado se comienza a introducir en uno de sus extremos una cierta sustancia, de tal manera que, manteniendo el caudal constante, la concentración varía con el tiempo adimensional de acuerdo a la siguiente expresión:

$$C_o = \exp\left(-\frac{(t-0.4)^2}{0.005}\right)$$

donde t hace referencia a unidades de tiempo adimensional y  $C_o$  la concentración que entra a la tubería en un instante dado. La variación de la concentración en función del tiempo a lo largo de la dirección axial dentro del tubo se puede calcular mediante la expresión

$$\frac{\partial C}{\partial t} = M \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{\partial C}{\partial x}$$

donde C es la concentración, t es tiempo adimensional, M es el modulo de difusión y x es una longitud adimensional.

Con condición de contorno en el punto de salida  $\frac{\partial C}{\partial x} = 0$  en  $x=1$

Utilizando el método de **Crank-Nicholson** de diferencias finitas calcule el perfil de concentraciones que tendría el tubo al cabo de una unidad de tiempo adimensional para los siguientes tres valores de M (0.01; 0.001; 0.0001). represente en una misma figura con distintos colores los perfiles obtenidos.

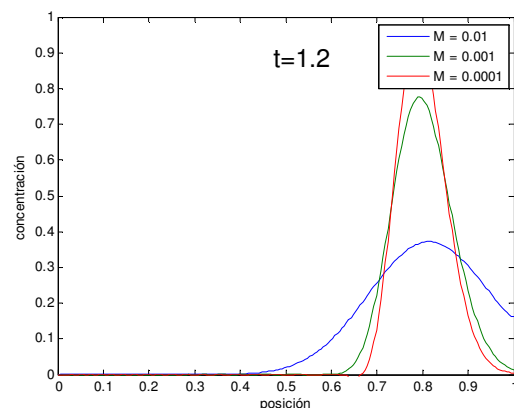
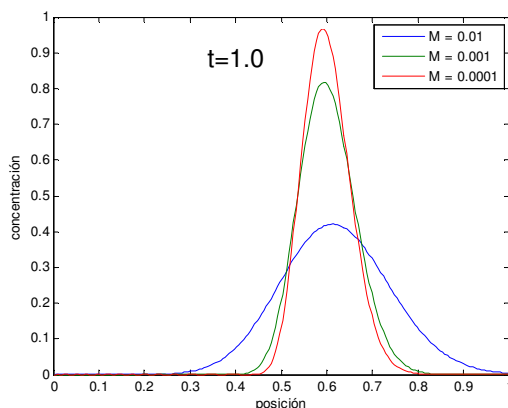
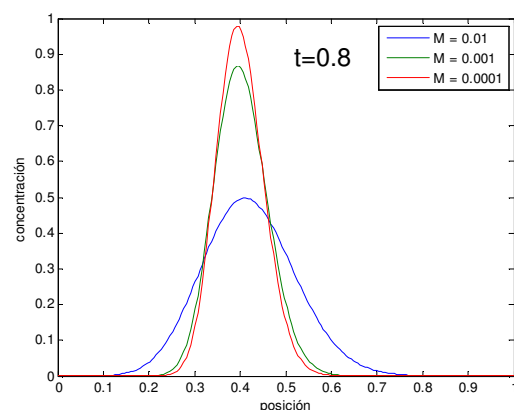
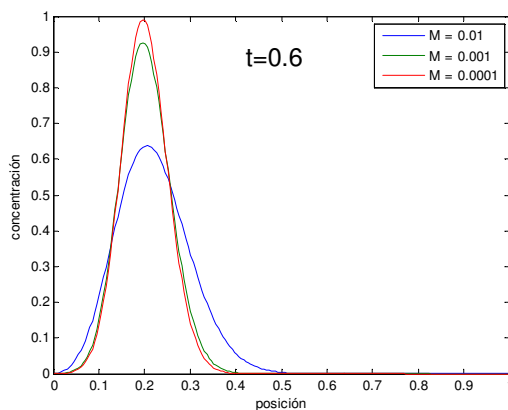
Notas:

Utilice 200 nodos para la posición

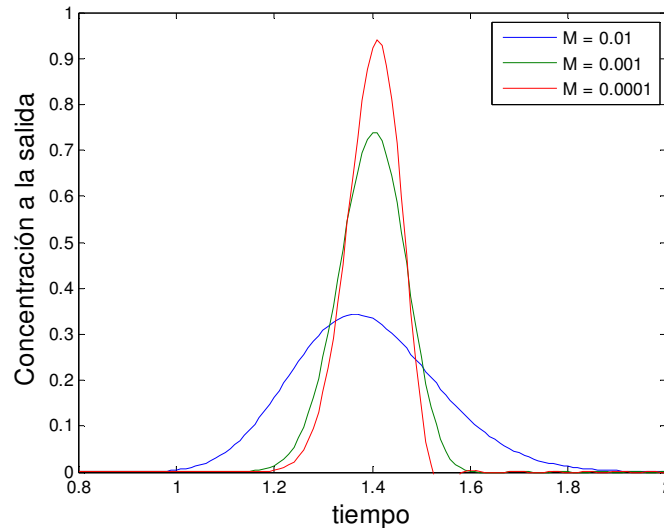
Utilice un incremento de tiempo adimensional de 0.01 unidades.

Para las derivadas temporales utilice una diferencia de primer orden hacia delante

Para las derivadas respecto a la posición utilice un esquema de diferencias centrales de segundo orden, excepto para la condición de contorno, donde tiene libertad para elegir el esquema que considere oportuno.



*En este caso es interesante también ver cual es el perfil a la salida del tubo con el tiempo (remarcar que las graficas anteriores están todas referidas a la posición):*



#### EDP.4. Enfriamiento de una esfera

Una esfera de diámetro  $D = 0.1$  m. con una temperatura de  $90$  °C. inicialmente igual en todos sus puntos, se introduce en un baño de agua a  $20$  °C.

Datos y Nomenclatura

$R$  = radio de la esfera

$k = 10$  W/(m °C) Conductividad térmica

$C_p = 410$  J/(kg K) Capacidad calorífica

$h = 220$  W/(m<sup>2</sup> K) Coeficiente individual con el exterior

$\rho = 2000$  kg/m<sup>3</sup> Densidad de la esfera

$T_a = 20$  °C Temperatura del agua

$T_o = 90$  Temperatura inicial de la esfera.

- a) Haciendo un análisis global, es decir, suponiendo que todos los puntos de la esfera están siempre a la misma temperatura, si se plantea un balance de energía se obtiene que:

Entrada + Generación = Salida + Acumulación

$$0 + 0 = h(4\pi R^2)(T - T_a)\Delta t + \left(\frac{4\pi R^3}{3}\right)\rho C_p (T_{t+\Delta t} - T_t)$$

Dividiendo por  $\Delta t$  y tomando límites se llega a:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{-h(4\pi R^2)(T - T_a)}{\left(\frac{4\pi R^3}{3}\right)\rho C_p} = \frac{-3h(T - T_a)}{R\rho C_p}$$

a.1) Calcule cómo varía la temperatura de la esfera durante los primeros 100 segundos y represente T vs t.

a.2) Calcule cuál sería la temperatura de la esfera a los 40 segundos.

Admita en todos los casos que la temperatura del agua no varía

b) Haciendo un análisis local o sea, si no se admite que la temperatura de todos los puntos de la esfera varían a la misma velocidad, sino que la temperatura depende del radio (r), siguiendo un procedimiento análogo al anterior se llega a la siguiente expresión:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r^2 \rho C_p} \frac{\partial}{\partial r} \left( k r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right)$$

Con condiciones de contorno:

$$-k \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} = h(T - T_a)$$

$$-k \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0$$

b.1) Calcule utilizando un método en diferencias finitas explícito, el perfil de temperaturas a los 40 segundos. (Divida el radio en 30 puntos). Y deduzca las condiciones de estabilidad.

b.2) Represente el perfil obtenido en el apartado anterior junto con el perfil a 40 segundos del apartado a (nota: para el apartado a será una línea horizontal porque en el caso a todos los puntos de la esfera están a la misma temperatura).

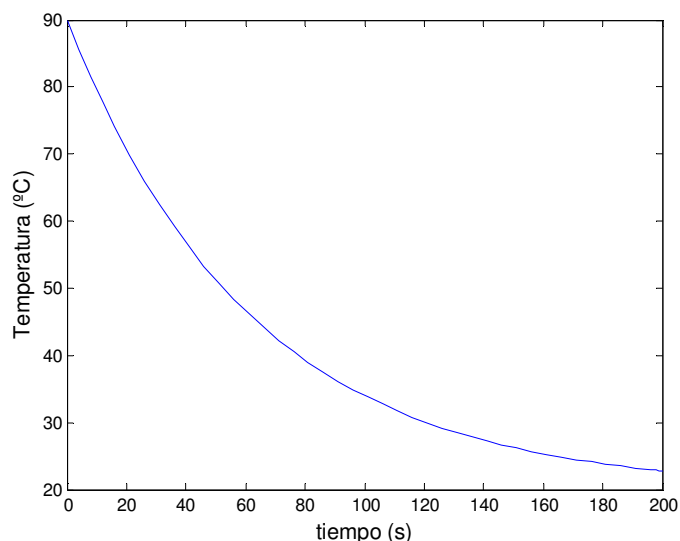
b.3) Calcule la temperatura media de la esfera a los 40 s, comente la validez de la aproximación hecha en el apartado a).

$$\text{Nota : } \bar{T} = \frac{\int_0^R T(r) dr}{\int_0^R dr}$$

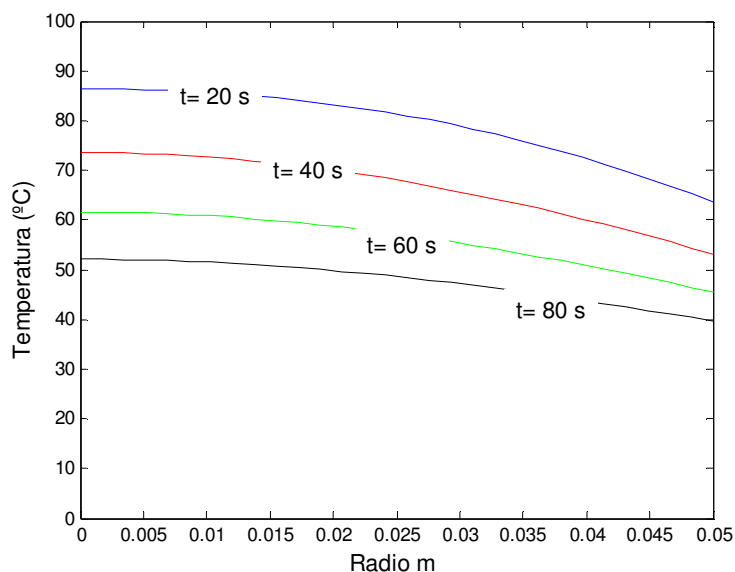
Admita en todos los casos que la temperatura del agua no varía

*Solución:*

Apartado a) el análisis global lleva a una ecuación diferencial ordinaria, cuyo resultado se muestra gráficamente a continuación.



Apartado b1) La temperatura varía tanto con la posición como con el tiempo. El perfil de temperaturas a diferentes tiempos es el siguiente.



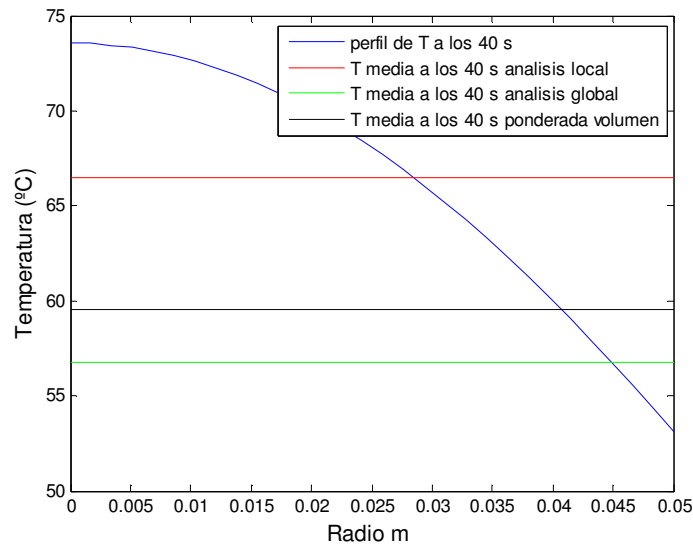
Apartado b.2)

La temperatura a los 40 s resultante del análisis global es de 56.79 °C. Si integramos para conseguir la temperatura media a los 40 s en el análisis local la temperatura que se obtiene es de 66.47 °C. Se puede observar una desviación importante.

Una modificación interesante es calcular la temperatura media ponderada en función de la masa (o el volumen a densidad constante). En este caso la temperatura media es de 59.55 °C

$$\bar{T} = \frac{\int_0^R V(r)T(r) dr}{\int_0^R V(r) dr}$$

Los resultados gráficamente son los siguientes (las líneas rectas indican temperaturas medias).



**EDP.5. Simulación de una columna cromatográfica**

En una columna de cromatografía de un metro de longitud, se introduce por uno de sus extremos una mezcla de dos sustancias A y B. La concentración en el extremo de entrada para cada una de las sustancias viene dada por la siguiente expresión:

$$(C_j)_{x=0} = \frac{1}{v_j} \exp\left(-\frac{(t-1.5)^2}{0.2}\right) \quad \text{donde } v_A = 0.2 \quad \text{y} \quad v_B = 0.4$$

Donde t = tiempo (min); Cj = concentración (mol/m<sup>3</sup>)

La ecuación que describe el avance a través de la columna para cada componente j es la siguiente:

$$\frac{\partial C_j}{\partial t} = D_j \frac{\partial^2 C_j}{\partial x^2} - u_j \frac{\partial C_j}{\partial x} \quad j = A, B$$

Donde t = tiempo (min)

Dj = difusividad efectiva (m<sup>2</sup>/min)

vj = velocidad (m/min)

Inicialmente en la columna la concentración de cada uno de los componentes es cero.

Como condición contorno en el extremo de salida use:

$$\frac{\partial C_j}{\partial x} = 0 \quad \text{en } x=L$$

DATOS:

	Componente A	Componente B
u (m/min)	0.2	0.4

D (m <sup>2</sup> /min)	2·10 <sup>-3</sup>	10 <sup>-4</sup>
-------------------------	--------------------	------------------

Longitud Columna = 1 m.

Utilizando un método en **diferencias finitas totalmente implícito**, desarrolle en Matlab un programa que permita:

- Visualizar simultáneamente la variación de concentración de cada uno de los componentes A y B a lo largo de la columna con el tiempo.
- Representar, en otra figura, la variación con el tiempo de la concentración de A y B (en una misma gráfica) en el punto de salida de la columna.
- Para el componente A: Calcule el número de moles totales por unidad de área que entra a la columna; el número de moles totales por unidad de área que sale de la columna y el número total de moles por unidad de área transversal que hay dentro de la columna a los 4 minutos. Estos valores deben ser iguales, y son una medida de cómo se cumple el balance de materia. ¿Qué porcentaje de error está cometiendo?. Para la integración utilice el método de los trapecios.

NOTA: Para calcular los moles por unidad de área de un componente que han atravesado una determinada sección en un intervalo de tiempo dado debemos resolver:

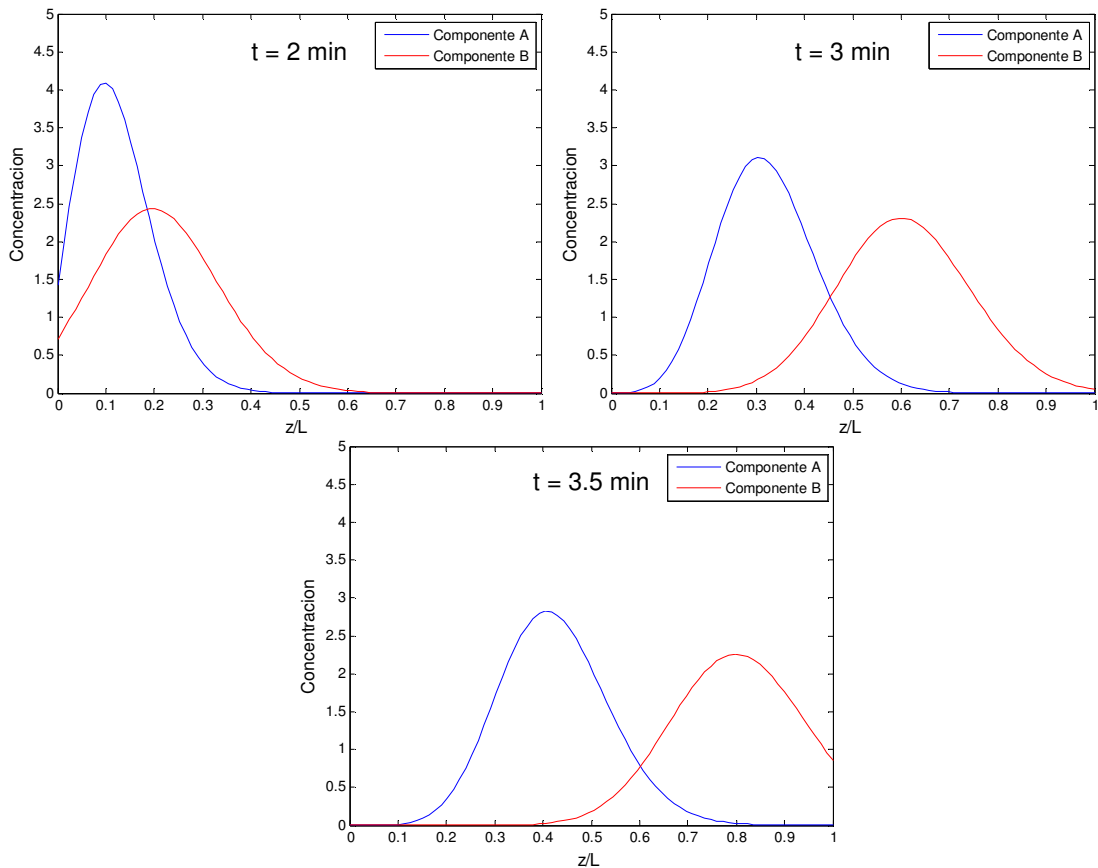
$$\frac{1}{S} \int_{t_1}^{t_2} Q_j C_j dt = \frac{1}{S} \int_{t_1}^{t_2} S u_j C_j dt = \int_{t_1}^{t_2} u_j C_j dt$$

Para calcular el número de moles de un componente dentro de la columna en un momento dado basta resolver:

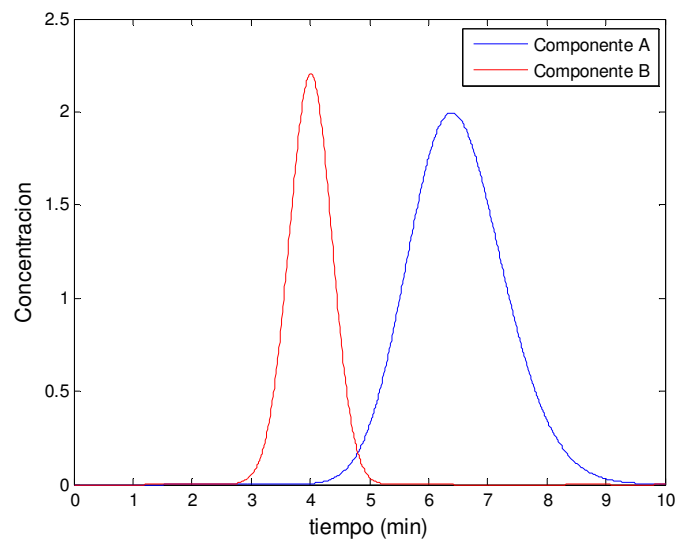
$$\int_0^L C_j dx$$

**Utilice un esquema en diferencias finitas con 80 puntos en el espacio y utilice un incremento de tiempo de 0.01 min. Integre durante los 10 primeros minutos.**

*Solución: Los perfiles a diferentes tiempos son los siguientes:*



El perfil de concentraciones en función del tiempo a la salida de la columna cromatográfica es el siguiente.



Las integrales numéricas de los moles iniciales, finales y a los 4 minutos son: 0.79266; 0.79258; 0.79248. Lo que lleva a errores del 0.011%, 0.0009% 0.012% respectivamente. Se comprueba que el error es suficientemente pequeño, al menos en lo que a balance de materia se refiere