

LA HOJA DE CALCULO EN EL APRENDIZAJE DE LA INGENIERÍA QUÍMICA.

José Antonio Martínez Pons
Departamento de Química Analítica e Ingeniería Química
Universidad de Alcalá
España
Correo electrónico joseantonio.martinez@uah.es

1. INTRODUCCIÓN

El estudio de la Ingeniería Química, aunque fundamentado en sólidas *leyes generales físico químicas* requiere la aplicación de estas leyes a *situaciones reales* donde muchas de las simplificaciones de la teoría física llevan a resultados no coherentes con la realidad física del problema, véase casos de aproximaciones al comportamiento ideal de los gases o la aplicación de la ecuación de Bernoulli al flujo de fluidos. Además, muchas de las ecuaciones y modelos matemáticos de gran belleza formal conducen a situaciones en las cuales el cálculo es imposible. Entonces hay que recurrir al cálculo gráfico o a efectuar aproximaciones.

El problema se hace patente, por ejemplo, en aplicaciones a estados no estacionarios (tanto en la transmisión de calor, materia o momento, como en la dinámica de fluidos) donde la aparición de ecuaciones diferenciales de difícil o imposible integración simbólica, integrales elípticas^[4] y de otro tipo crean dificultades añadidas al aprendizaje conceptual de la materia.

Afortunadamente, desde que se ha generalizado el uso de la *herramienta informática como instrumento de cálculo* existen programas matemáticos de gran potencia, valga como ejemplo Maple o Mathematica, que pueden resolver muchos de estos problemas. No obstante, su disponibilidad e incluso adquisición de la destreza en su manejo, no son sencillas, razón por la que aquí se propone el uso de programas tan accesibles como son las *hojas de cálculo*, concretamente la Excel de Microsoft, dada su amplia difusión y posibilidad de ser usada tanto sobre P.C. como sobre Mackintosh.

Una digresión sobre el tema es que a corto o medio plazo los profesores deberán *cuestionarse el sistema tradicional de prueba de examen*, basado en preguntas o problemas académicos que el estudiante resuelve sin más apoyo que su calculadora electrónica y a lo sumo, información escrita, y pensar que las pruebas se realicen frente al ordenador, liberando en parte al alumno del cálculo mecánico, lo que permitirá una evaluación más profunda del nivel conceptual alcanzado.

2. APLICACIONES

La hoja de cálculo puede aplicarse ventajosamente, entre otras, a tres clases de situaciones:

1. - Manejo de **fórmulas y correlaciones empíricas de expresión compleja**.
2. - Resolución de problemas que requieran **procesos de integración difíciles o imposibles en modo simbólico**.
3. Resolución de problemas que requieran métodos de aproximaciones sucesivas, **“Métodos de tanteo”**.

También es de gran utilidad su potencialidad, por el método de la matriz inversa, de resolver sistemas de ecuaciones lineales, en aplicaciones como balances de energía o materia, así como sus funciones económicas y de optimización de programas aplicable en cuestiones de economía de la empresa química, pero estas cuestiones no se analizan en este trabajo.

2.1. Cálculo de propiedades mediante correlaciones complejas

Por tales se entiende expresiones matemáticas ya sea basadas en teorías físicas, ya en medidas experimentales, que incluyen abundantes constantes universales o no, relacionadas a través de operadores matemáticos complejos. Su tratamiento con calculadora de bolsillo significa alta posibilidad de error tanto en la introducción de los datos como en la formalización de las operaciones.

En general, al tratarse de secuencias de números sin constancia escrita, es imposible repasar el proceso y detectar el error. Este aspecto incluye también la comprobación de unidades, tan importante.

La repetición de cálculos en problemas semejantes se eterniza y la fatiga aumenta la probabilidad de error.

La hoja de cálculo sin embargo permite minimizar estos riesgos. Para ello un método cómodo consiste en crear una *hoja maestra* en la cual se establezca en forma de casillas de entrada la ubicación de los datos empíricos precisos. Las principales ventajas son:

- Las constantes se introducen de una sola vez.
- Pueden almacenarse tablas de constantes en algún lugar de la hoja y recurrir a ellas cuando sea preciso, normalmente con un simple golpe de ratón.
- Al definir las ecuaciones y correlaciones en función de las celdas de entrada de datos, cambiar una aplicación se reduce a cambiar el dato en el lugar correspondiente.
- El repaso de la fórmula se hace cuando se prepara la hoja, a partir de aquí la hoja es "segura".
- Al estar todos los datos a la vista el repaso y comprobación de los mismos son inmediatos.
- Los resultados de una hoja se pueden copiar a otra o a otro documento con un simple clic de ratón. No hay errores de transferencia.

Ejemplo: Cálculo del coeficiente de difusión molecular gas-gas en la aproximación de gas ideal, con la ecuación de Chapman-Enskog ^[2,6]

El coeficiente de difusión molecular, D_m , se calcula a partir de la teoría cinética de los gases, considerando los gases como ideales según la siguiente ecuación

$$D_{m(AB)} = \frac{2\rho_M}{3d_{AB}^2 n} \sqrt{\frac{kT}{\pi^3} \left(\frac{1}{2m_A} + \frac{1}{2m_B} \right)} = \frac{2}{3d_{AB}^2 N_{Av}} \sqrt{\frac{R_0 T}{\pi^3} \left(\frac{1}{2M_A} + \frac{1}{2M_B} \right)}$$

Donde

- $D_{m(AB)}$ es el coeficiente de difusión
- ρ_M es la densidad molar
- d_{AB} es el diámetro medio de las moléculas gaseosas
- m_A y m_B la masa respectiva de las moléculas
- M_A y M_B sus masas moleculares
- N_{av} la constante de Avogadro
- k la constante de Boltzmann
- n el número de moléculas por m^3
- R_0 la constante de los gases

Cuando el comportamiento de los gases se separa del ideal se han propuesto distintas correlaciones, una de las más usadas es la de Chapman-Enskog

$$D_m = \frac{0,00815}{r_{AB}^2 \cdot \Omega} \sqrt{T \left(\frac{1}{M_A} - \frac{1}{M_B} \right)} \text{ kmol m}^{-1} \text{ hr}^{-1}$$

Ω es la función de colisión que depende de $\varepsilon_{AB} k/T$

ε_{AB} energía de interacción molecular, igual a la media geométrica de las respectivas de cada gas.

Introduciendo los valores de los radios en Å se obtiene el resultado en las unidades indicadas.

Los valores de ε_A y ε_B se encuentran en tablas. Si no se dispone de ellas existen correlaciones aproximadas.

Las tablas de radios atómicos y energías de interacción se han llevado a la hoja de cálculo.

La programación de las fórmulas es sencilla dejando fuera de ellas los datos variables, de modo que cuando posteriormente se escriben o leen sobre las propias tablas, el resultado es inmediato.

En el ejemplo resuelto, el coeficiente de difusión del dióxido de carbono en aire se calcula según ambos modelos.

Cambiar de gas significa simplemente cambiar la casilla en que se deben leer los datos empíricos, que se adjuntan en forma de tabla.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	gas	M	e/k	r/A	T	Tc	Vc	Tb	
2	aire	29	97	3,617	295				
3	H2	2	33,3	2,968	e/k	r			
4	N2	28	91,4	3,681	0	0			
5	CO2	44	190	3,996	rA/A	rB/A	rAB/A	Ea/K/(K-1)	Eb/K(K ⁻¹)
6	N2O	44	220	3,879	3,996	3,617	3,8065	190	97
7	NO	30	119	3,879	T/K	MA	MB		
8	CH4	16	136,5	3,882	293	44	29		
9	O2	32	113,2	3,433	Chapman-Enskog				
10	CO	28	110,3	3,59	Dm				
11	A		124	3,418	0,00219324	kmol/(m.hr)			
12	Ne		35,7	2,8					
13	He		6,03	2,7	Difusividad				
14	CCl4	154	322,7	5,947	Teoría gas ideal				
15	CH3OH	32	481,8	3,626					
16	CS2	76	467	4,483	ra/m	rb/m	dab	P/Pa	Ma/kg
17	C2H6	30	215,7	4,443	3,996E-10	3,617E-10	7,613E-10	1,01E+05	0,044
18	C3H8	44	237,1	5,118					

Tabla 1. - Aspecto de la hoja de cálculo, cuando se calcula el coeficiente de difusión molecular por la ecuación de Chapman-Enskog.

Este esquema de trabajo se puede utilizar por ejemplo para simplificar el cálculo de balances entálpicos o de materia en estado estacionario siempre en la búsqueda de la sencillez y la posibilidad de resolver casi simultáneamente problemas análogos.

El uso de la herramienta "solver" permite resolver problemas inversos imponiendo la variación de casilla o casillas dato en función de la solución.

2.2. Resolución de problemas que requieren integraciones complejas

En este terreno es donde más se aprecia la utilidad de la hoja de cálculo. Mientras que en el ejemplo del apartado 2.1 se ganaba tiempo y evitaban errores, ahora se podrán

resolver problemas que de modo tradicional serían insolubles o su solución comportaría un grado casi inabordable de dificultad matemática.

La idea general es la del proceso de integración numérica^[1, 3, 7], simplificado al máximo, puesto que la hoja de cálculo permite trabajar a gran velocidad con un elevado número de valores.

Sea t la variable independiente, los Δt correspondientes se pueden hacer muy pequeños, prácticamente infinitesimales, por lo cual utilizando la fórmula de los rectángulos, o a lo sumo, la de los trapecios, se obtienen unos resultados más que satisfactorios. Así con la primera es:

$$\int_a^b \Psi(t) dt \approx \sum_0^n \Psi\left(a + \frac{2k+1}{2} \Delta t\right) \times \Delta t \Delta t = \frac{b-a}{n}$$

y mediante la fórmula de los trapecios cada uno de los términos del sumatorio sería:

$$\Delta t (\Psi(a+kt) + \Psi(a+(k+1)t)) / 2,$$

donde k es un número natural $0 \leq k \leq n$

Es importante estimar el error en cada paso. Se puede demostrar que para la primera fórmula el error debe evaluarse en cada intervalo i, j como

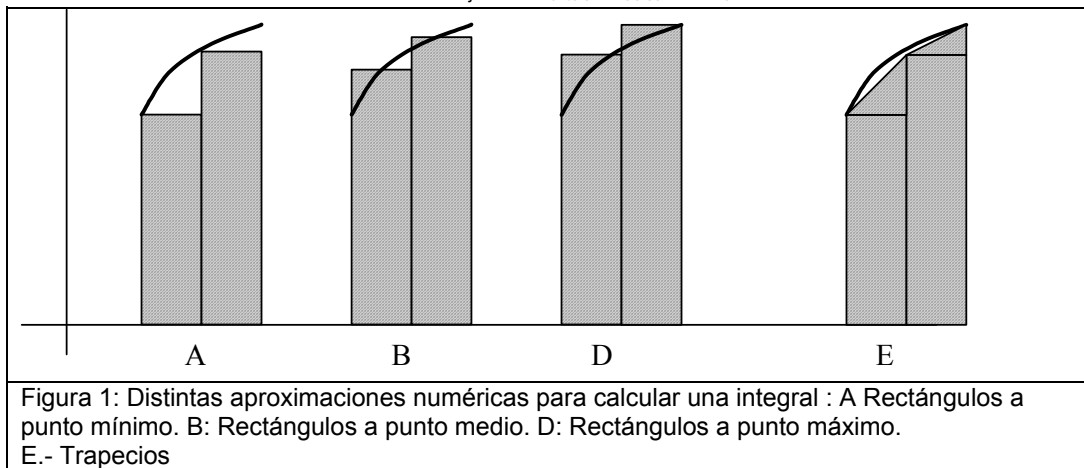
$$\varepsilon_{ij} \leq \max(i, j) |\Psi''(t)| (\Delta t^3 / 24)$$

mientras que con la fórmula de los trapecios

$$\varepsilon_{ij} \leq \max(i, j) |\Psi''(t)| (\Delta t^3 / 12)$$

Por otra parte, si en lugar de calcular $\Psi(t)$ para el punto medio del intervalo se toma el extremo, entonces

$$\varepsilon_{ij} \leq \max(i, j) |\Psi'(t)| (\Delta t^2 / 4).$$



La evaluación exacta del error cometido en cada caso no es fácil, aunque existen métodos muy potentes para conocerlo, como los de Romberg o Gregory. Al tomar intervalos muy pequeños los errores de truncamiento tienden a cero, siendo el error de redondeo la principal fuente de error^[1, 7].

De hecho los métodos aproximados de integración aproximan la función buscada a un polinomio, en todos y cada uno de los intervalos. Se llama error de truncamiento en un

intervalo i, j $\int_i^j (\Psi(t) - p(t)) dt$ donde $p(t)$, es el polinomio al que se aproxima.

Una forma práctica de operar es realizar el cálculo con intervalos, pasos, diferentes y comparar los resultados.

Un último detalle a tener en cuenta es que en este error influye y no poco la máquina usada, de manera que una vez más aparece o puede aparecer un caos determinista, en forma de efecto mariposa. Seguir en esta línea llevaría muy lejos y no es el objetivo propuesto aquí.

A modo de resumen, en general deberá trabajarse con pasos de integración muy pequeños, así queda garantizado que el error de truncamiento no afecte al resultado.

En la práctica no existe una diferencia significativa entre cualquiera de las tres fórmulas, *rectángulos a punto medio*, *a extremo* o *trapeacios*.

2.2.1. Casos en que aparecen ecuaciones diferenciales

Las ecuaciones en derivadas totales con una sola variable se abordan a continuación por ser uno de los ejemplos más representativos**.

El método de resolución más recomendable es el clásico de Euler que se aplica del siguiente modo:

Sea la ecuación que se desea integrar

$$y' = f(y, t); \quad dy = dt f(y, t)$$

se debe iterar las veces que sea necesario, siendo k un número natural

$$y_{k+1} = y_k + h f(t_k, y_k) \quad \text{donde } h = t_{k+1} - t_k$$

El principal inconveniente del método, la lentitud en alcanzar la convergencia, lo soluciona ordenador "per se", gracias a su rapidez de cálculo. Eliminado este problema, la sencillez y obviedad del procedimiento lo hacen el más adecuado.

Su aplicación práctica consiste en fijar unas condiciones iniciales, establecer un paso h suficientemente pequeño y programar la serie de iteraciones hasta que se alcanza el resultado.

Los comentarios hechos para el caso anterior al tratar el tema de los errores, deben repetirse aquí.

Ejemplo: Balance en estado no estacionario: Evolución de la temperatura del líquido de un depósito mal aislado, alimentado de forma continua.

Se resuelve planteando un balance entálpico durante un tiempo infinitesimal dt cuando la temperatura del depósito es T

Cálculo del calor cedido por el agua caliente en un tiempo muy pequeño.

$$dQ_1 = dm c_e (T_a - T) = 5 \text{ kg/s } 1 \text{ kcal/kg } ^\circ\text{C} (80 - T) ^\circ\text{C} dt = (400 - 5T) dt \text{ kcal} \quad (1)$$

Calor evacuado: Puesto que la chapa es muy delgada no son precisas correcciones del radio ni distinguir entre radio interno y externo y dadas las aproximaciones

$$dQ_2 = U (T - 22) dt \quad S = 360 (T - 22) ^\circ\text{C} \cdot \pi y / 3600 = 0,314y(T - 22) dt \text{ kcal} \quad (2)$$

Calor acumulado por el sistema

$$dQ_3 = m c_e dT = V \cdot \rho c_e dT = 785,4y dT \text{ kcal} \quad (3)$$

Estableciendo el correspondiente balance

$$dQ_1 - dQ_2 = dQ_3 \quad (4)$$

** El método más común es el de Runge -Kutta, que se suele presentar como librería en la mayoría de programas de tratamiento matemático, Matlab, Mathematica etc. Este método presenta, como es sabido, un adecuado balance de compensación de ambos errores. No obstante se insiste en que el objeto de este trabajo es facilitar el cálculo al alumno medio, no experto, tal vez ni siquiera interesado, en la informática. Con Excel también es posible el uso de este método pero es excesivamente complicado

se llega a

$$(400-5T-0,314y(T-22))dt=785,4y dT \quad (5)$$

Además

$$y = (y_0 + 5 \cdot 10^{-3} t/\pi) = (1 + 5 \cdot 10^{-3} t/\pi); \quad (6)$$

la ecuación que resulta se puede resolver de modo más cómodo en función de y que de t

$$dy = 1,59 \cdot 10^{-3} dt \quad (7)$$

$$dt = 638,22 dy$$

$$325,04 - 4,06T - 0,255 yT + 5,613y = y T' \quad (8)$$

donde T' representa derivación respecto a y

$$yT' + T(4,06T + 0,255y) = 325,04 + 5,613y \quad (9)$$

$$T' + T(4,06T + 0,255y)/y = 325,04/y + 5,613 \quad (10)$$

2.2.1.2. Solución informática:

La ecuación (10) que resulta no es de integración inmediata por lo que resulta más cómoda la operación numérica con la hoja Excel: Se presentarán dos métodos, el primero es el sencillo método de Euler.

U	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	t	y	T	dt(s)	q(kg/s)	d	s	h0	m0	dy(m)	T(°C)	
2	10	80	22	0,03926502	785,398163	5						
3	t	y	T	dt	m(kg)		1	0,78539816	1	785,398163	0,000249969	25,0769686
4	0	1	22	0,01449819	785,398163							
5	0,03926502	1,00024997	22,0144982	0,01446818	785,594488							
6	0,07853004	1,00049994	22,02899664	0,01443822	785,790814							
7	0,11779506	1,00074991	22,04349506	0,01440832	785,987139							
8	0,15706008	1,00099988	22,05799348	0,01437848	786,183464							
9	0,1963251	1,00124984	22,0724919	0,01434869	786,379789							
10	0,23559012	1,00149981	22,08699032	0,01431896	786,576114							
11	0,27485514	1,00174978	22,10148874	0,01428929	786,772439							
12	0,31412016	1,00199975	22,11598716	0,01425968	786,968764							
13	0,35338518	1,00224972	22,12948558	0,01423013	787,165089							
14	0,3926502	1,00249969	22,14398401	0,01420063	787,361414							
15	0,43191522	1,00274966	22,15848243	0,01417119	787,557739							
16	0,47118024	1,00299963	22,17298086	0,01414181	787,754065							
17	0,51044526	1,0032496	22,18747928	0,01411248	787,95039							
18	0,54971028	1,00349956	22,20197771	0,01408321	788,146715							
19	0,5889753	1,00374953	22,21647613	0,014054	788,34304							
20	0,62824031	1,0039995	22,23097456	0,01402485	788,539365							
21	0,66750533	1,00424947	22,24547298	0,01399575	788,735689							
22	0,70677035	1,00449944	22,25997141	0,01396671	788,932015							
23	0,74603537	1,00474941	22,27446983	0,01393772	789,12834							
24	0,78530039	1,00499938	22,28896826	0,01390879	789,324665							
25	0,82456541	1,00524935	22,29346668	0,01387992	789,52099							
26	0,86383043	1,00549932	22,30796511	0,01385111	789,717316							
27	0,90309545	1,00574928	22,32246353	0,01382234	789,913641							
28	0,94236047	1,00599925	22,33696196	0,01379363	790,109966							
29	0,98162549	1,00624922	22,35146038	0,01376498	790,306291							
30	1,02089051	1,00649919	22,36595881	0,01373639	790,502616							
31	1,06015553	1,00674916	22,38045723	0,01370785	790,698941							
32	1,09942055	1,00699913	22,39495566	0,01367937	790,895266							

Tabla2.- Evolución de los cálculos en la hoja Excel para obtener la integral, observese que para facilitar la lectura se ha copiado el valor de la celda solución (K2)

Se utiliza directamente el balance inicial por lo que no son precisas las ulteriores manipulaciones algebraicas

Si se despeja en (5) se tiene, en modo simbólico

$$dT = \frac{(q(T_{en} - T) - U\pi Dy(T - T_{ex}))dt}{\rho \frac{D^2 \pi}{4} y}$$

(11)

Esta ecuación es la que se programa : Obsérvese que en la tabla se deja fuera los parámetros y datos para tener el problema resuelto de la forma más general posible y hacer uso de la facilidad que da la hoja de cambiar alguno de estos y obtener de modo inmediato los resultados.

Las columnas representan tiempo, altura, temperatura del tanque y variación de la temperatura, así como la masa contenida en el tanque.

La columna de programación más compleja es precisamente

$$dT = (\$E\$2 * (\$B\$2 - C4) - \$A\$2 * (C4 - \$C\$2) * PI() * \$F\$2 * B4) * \$D\$2 / (\$G\$2 * 1000 * B4)$$

$$m = 1000 * G2 * H2$$

$$T = C4 + D4$$

$$y = E4 / (\$G\$2 * 1000)$$

Una vez programada la hoja y extendido el cálculo hasta un número suficiente de puntos, en este caso 8000, se utiliza la herramienta solver para imponer que el último punto corresponda a la altura máxima deseada. La temperatura cuando se llega a los tres metros es de 22,085 °C

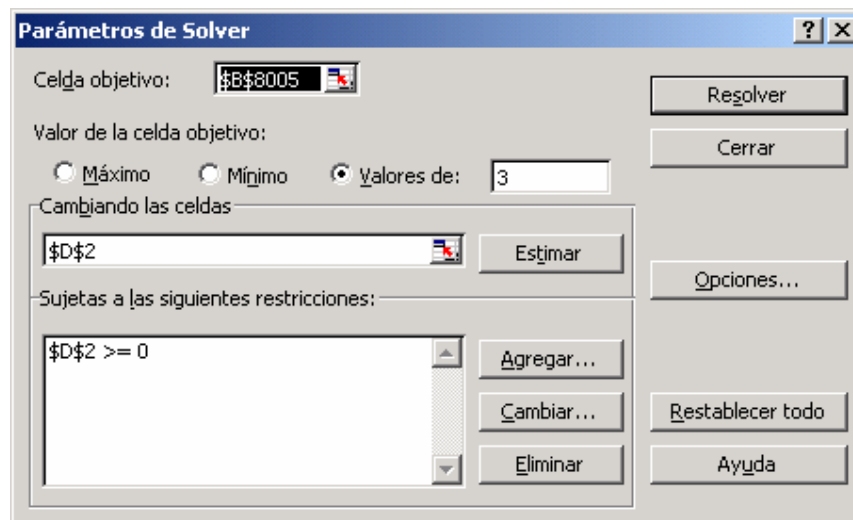


Figura 2. Pantalla interactiva de la herramienta "Solver"

Otra ventaja añadida es la facilidad para conseguir gráficos de la evolución del sistema, altamente informativos

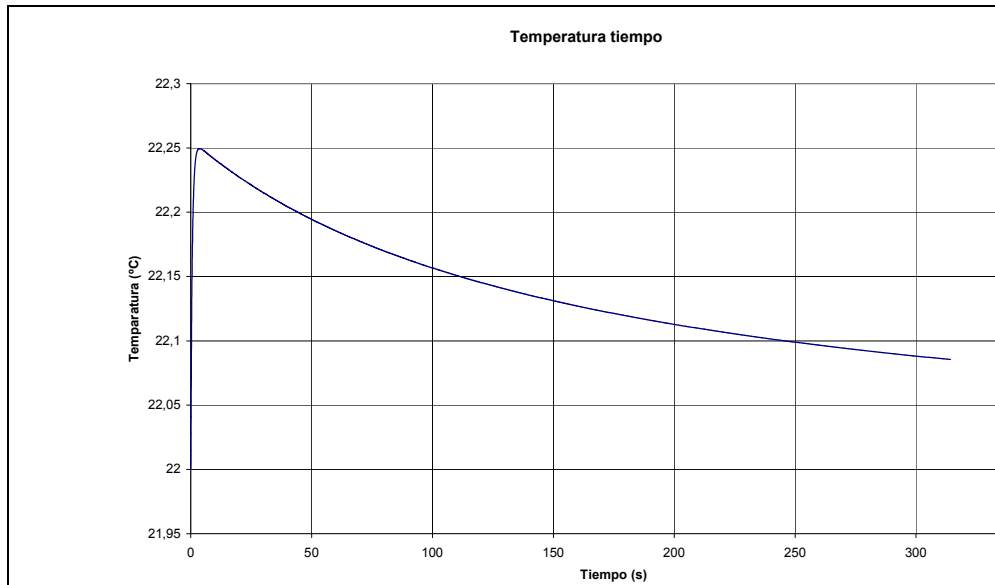


Figura 3 Evolución de la temperatura de la mezcla con el tiempo

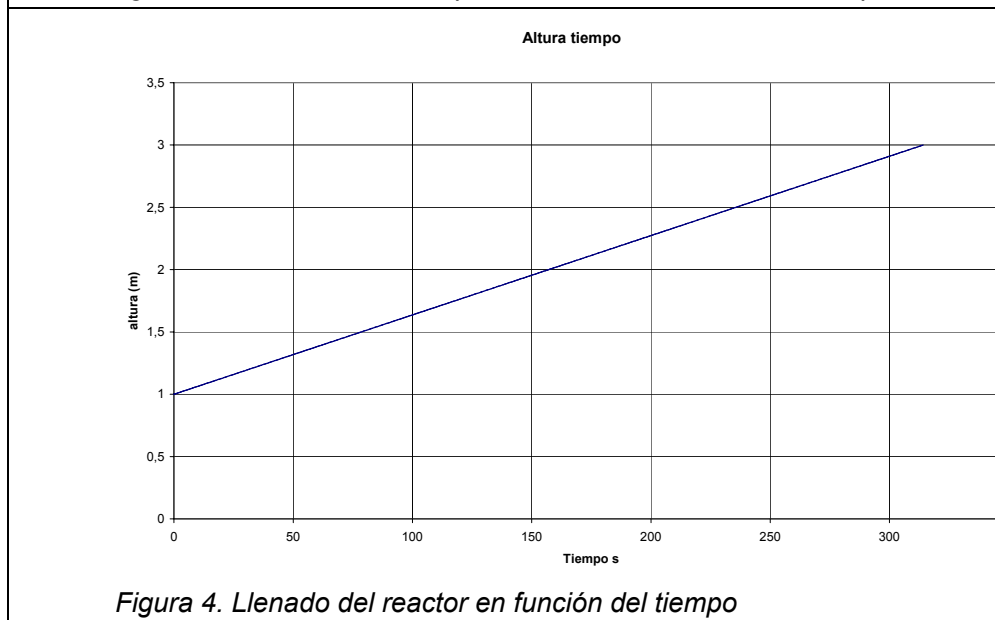


Figura 4. Llenado del reactor en función del tiempo

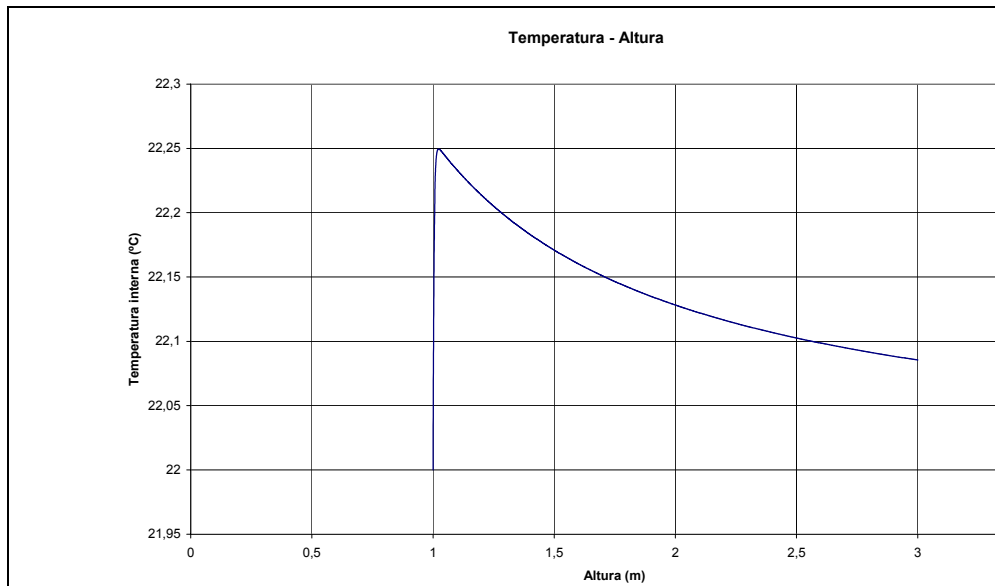


Figura 4b. Evolución de la temperatura de la mezcla con la altura alcanzada

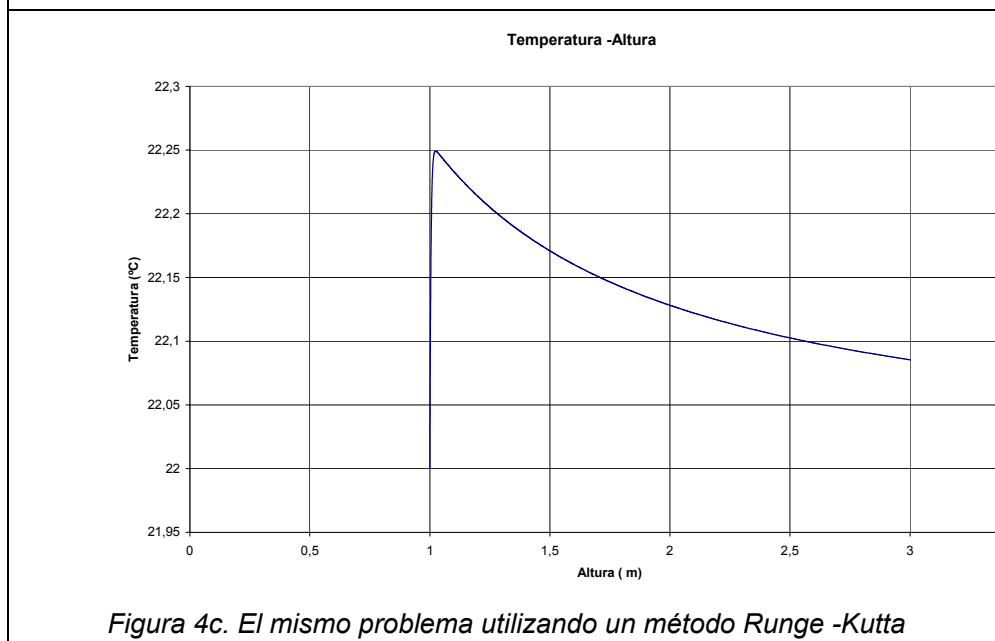


Figura 4c. El mismo problema utilizando un método Runge -Kutta

Utilizando un método Runge – Kutta en este caso de cuatro pasos los resultados son prácticamente idénticos, sin embargo, la programación de la hoja es bastante más compleja.

El comentario de los resultados queda para el lector. Es muy interesante variar por ejemplo el coeficiente U y ver como cambian las gráficas de modo inmediato. También es de respuesta inmediata en las condiciones de ambiente o alimentación. Un cambio en el caudal requerirá un nuevo uso de Solver.

En el ejemplo los datos de entrada se copian automáticamente en la hoja en que se programó un Runge – Kutta, por lo que sólo es necesario introducirlos una vez.

1	U	T1	T0	dt(s)	q(kg/s)	d	s	h0	m0	dy(m)	T(°)	L
2		10	80	22	0,03926502	5	1	0,78539816	1	785,398163	0,000249969	25,0769877
3	t	y	T	k1	k2	k3	k4					
4	0	1	22	0,01449819	0,01448138	0,01448139	0,01448139		785,398163			
5	0,03926502	1,00024997	22,0144842	0,0144682	0,01445142	0,01445143	0,01445143		785,594488			
6	0,07853004	1,00049994	22,0289384	0,01443827	0,01442152	0,01442153	0,01442153		785,790814			
7	0,11779506	1,00074991	22,0433627	0,01440839	0,01439168	0,01439169	0,01439169		785,987139			
8	0,15706008	1,00099988	22,0577572	0,01437858	0,01436189	0,01436191	0,01436191		786,183464			
9	0,1963251	1,00124984	22,0721219	0,01434862	0,01433216	0,01433218	0,01433218		786,379789			
10	0,23559012	1,00149981	22,0864568	0,01431911	0,01430249	0,01430251	0,01430251		786,576114			
11	0,27485514	1,00174978	22,1007621	0,01428947	0,01427288	0,0142729	0,0142729		786,772439			
12	0,31412016	1,00199975	22,1150377	0,01425988	0,01424333	0,01424334	0,01424334		786,968764			
13	0,35338518	1,00224972	22,1292838	0,01423035	0,01421383	0,01421385	0,01421385		787,165089			
14	0,3926502	1,00249969	22,1435004	0,01420088	0,01418439	0,01418441	0,01418441		787,361414			
15	0,43191522	1,00274966	22,1576876	0,01417147	0,01415501	0,01415502	0,01415502		787,557739			
16	0,47118024	1,00299963	22,1718453	0,01414211	0,01412568	0,0141257	0,0141257		787,754065			
17	0,51044526	1,0032496	22,1859738	0,01411281	0,01409642	0,01409643	0,01409643		787,95039			
18	0,54971028	1,00349956	22,2000729	0,01408366	0,0140672	0,01406722	0,01406722		788,146715			
19	0,5889753	1,00374953	22,2141429	0,01405437	0,01403805	0,01403806	0,01403806		788,34304			
20	0,62824031	1,0039995	22,2281836	0,01402524	0,01400895	0,01400896	0,01400896		788,539365			
21	0,66750533	1,00424947	22,2421953	0,01399617	0,01397991	0,01397992	0,01397992		788,735689			
22	0,70677035	1,00449944	22,2561779	0,01396715	0,01395092	0,01395094	0,01395094		788,932015			
23	0,74603537	1,00474941	22,2701316	0,01393819	0,01392199	0,01392201	0,01392201		789,12834			
24	0,78530039	1,00499938	22,2840563	0,01390928	0,01389312	0,01389313	0,01389313		789,324665			
25	0,82456541	1,00524935	22,2979521	0,01388043	0,0138643	0,01386431	0,01386431		789,52099			
26	0,86383043	1,00549932	22,3118191	0,01385164	0,01383554	0,01383555	0,01383555		789,717316			
27	0,90309545	1,00574928	22,3256573	0,01382229	0,01380683	0,01380685	0,01380685		789,913641			
28	0,94236047	1,00599925	22,3394668	0,01379422	0,01377818	0,0137782	0,0137782		790,109966			
29	0,98162549	1,00624922	22,3532477	0,01376559	0,01374959	0,0137496	0,0137496		790,306291			
30	1,02089051	1,00649919	22,367	0,01373702	0,01372105	0,01372106	0,01372106		790,502616			
31	1,06015553	1,00674916	22,3807237	0,0137085	0,01369256	0,01369258	0,01369258		790,698941			
32	1,09942055	1,00699913	22,3944189	0,01368004	0,01366413	0,01366415	0,01366415		790,895266			

Tabla 3. El mismo problema resuelto por un método de Runge Kutta de cuatro pasos. Compárese el resultado de la celda K2 con el mostrado en la Tabla 1

Fórmulas para el método (T corresponde a una fila más)

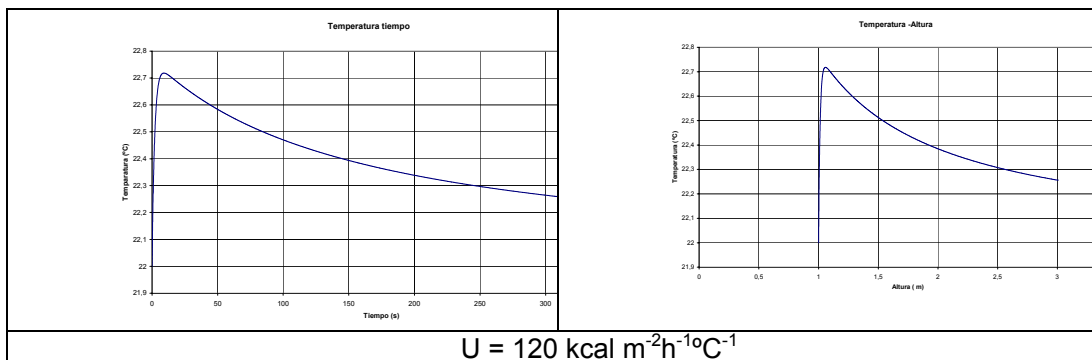
$$K1 = (\$E\$2 * (\$B\$2 - C4) - \$A\$2 * (C4 - \$C\$2) * PI()) * \$F\$2 * B4 * \$D\$2 / (\$G\$2 * 1000 * B4)$$

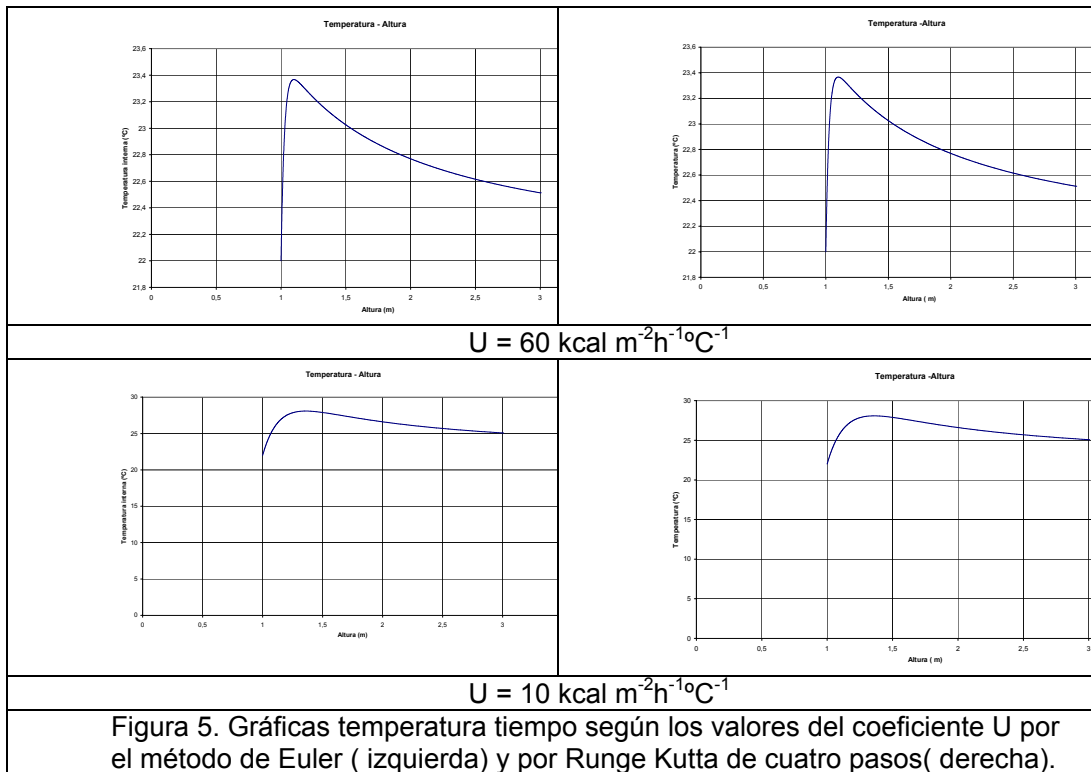
$$K2 = (\$E\$2 * (\$B\$2 - (C4 + 0,5 * D4)) - \$A\$2 * (C4 + D4 * 0,5 - \$C\$2) * PI()) * \$F\$2 * (B4 + 0,5 * \$J\$2) * \$D\$2 / (\$G\$2 * 1000 * (B4 + \$J\$2))$$

$$K3 = (\$E\$2 * (\$B\$2 - (\$C4 + 0,5 * E4)) - \$A\$2 * (\$C4 + E4 * 0,5 - \$C\$2) * PI()) * \$F\$2 * (\$B4 + 0,5 * \$J\$2) * \$D\$2 / (\$G\$2 * 1000 * (\$B4 + \$J\$2))$$

$$K4 = (\$E\$2 * (\$B\$2 - (\$C4 + 0,5 * F4)) - \$A\$2 * (\$C4 + F4 * 0,5 - \$C\$2) * PI()) * \$F\$2 * (\$B4 + 0,5 * \$J\$2) * \$D\$2 / (\$G\$2 * 1000 * (\$B4 + \$J\$2))$$

$$T = C4 + 1/6 * (D4 + 2 * E4 + 2 * F4 + G4)$$





2.2.2. Casos en que aparecen integrales elípticas^[4]

Ejemplo: Variación del nivel del líquido en un depósito esférico en proceso de drenaje.

Las integrales elípticas así como las funciones de Bessel aparecen en muchos problemas de Ingeniería Química que involucran dinámica de fluidos o transferencias de calor. Su operación no es fácil, no obstante con la hoja de cálculo es sencillo resolver problemas en los que intervienen obviando sus dificultades, entre ellos se encuentran los drenajes de recipientes cónicos, esféricos o cilíndricos en posición horizontal. Valga como ejemplo el drenaje de un depósito esférico de 1m de radio por un orificio en su polo inferior de 5 cm de radio efectivo. Esta parcialmente lleno con agua hasta una altura de 1,5 m respecto al polo inferior, donde se encuentra el desagüe. Se supondrá:

1. - En el depósito se ha practicado una abertura a la atmósfera en su polo superior de manera que la presión en su superficie es igual a la exterior.
2. - Los efectos de fricción con las paredes son despreciables.
3. - Las pérdidas por evaporación son despreciables.

No representaría, sin embargo, mayor dificultad incluir todos o alguno de estos efectos así como un coeficiente de descarga.

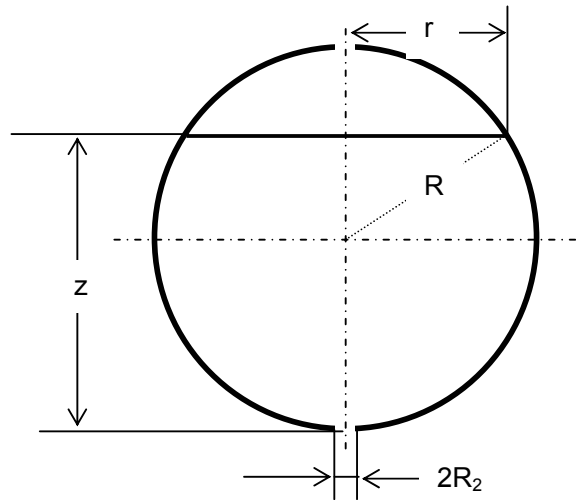


Figura 6. Esquema del depósito y sus variables geométricas

Solución clásica:

Puesto que la presión en el nivel superior del fluido y en la salida es la atmosférica, puede escribirse la ecuación de Bernoulli como

$$z g + \frac{1}{2} v^2 = \frac{1}{2} u^2 \quad (1)$$

por otra parte, de la ecuación de continuidad se tiene que $Sv = su$ siendo v la velocidad instantánea del fluido en el depósito, u la velocidad del desagüe, S y s las secciones en el depósito y desagüe. Si r es el radio instantáneo de la sección del depósito y R_2 la del desagüe, constante, se llega a $u = (r/R_2)^2 v$ lo que conduce, sustituyendo en (1) a

$$v^2 \left(\left(\frac{r}{R_2} \right)^4 - 1 \right) = 2zg \quad (2)$$

$$v = \frac{dz}{dt} = \sqrt{\frac{2gz}{\left(\frac{r}{R_2} \right)^4 - 1}} \quad (3)$$

La integración de esta ecuación podría atacarse por el cambio

$$z = R + R \operatorname{sen} \alpha; \quad dz = R \cos \alpha \, d\alpha; \quad r = R \cos \alpha$$

lo que llevado a (3) supondría

$$R \cos \alpha \, d\alpha = \frac{2R(1 + \operatorname{sen} \alpha)g}{\left(\left(\frac{R \cos \alpha}{R_2} \right)^4 - 1 \right)^{1/2}} dt \quad (4)$$

Aunque la separación de variables es fácil, aparecen integrales del tipo $K \cos^2 \alpha - 1$ cuya integración tampoco es inmediata. Veamos como se puede resolver de un modo más sencillo.

Solución informática:

Para ello se partirá de (3) escrita como

$$dz = \sqrt{\frac{2gz}{\left(\frac{r}{R_2} \right)^4 - 1}} dt \quad (5)$$

que será la función básica del algoritmo informático con el que se irá obteniendo cada valor sucesivo de z como

$$z_i = z_{i-1} - dz$$

Si además se desean evaluar las correspondientes velocidades “instantáneas” será suficiente con utilizar (2) y (3).

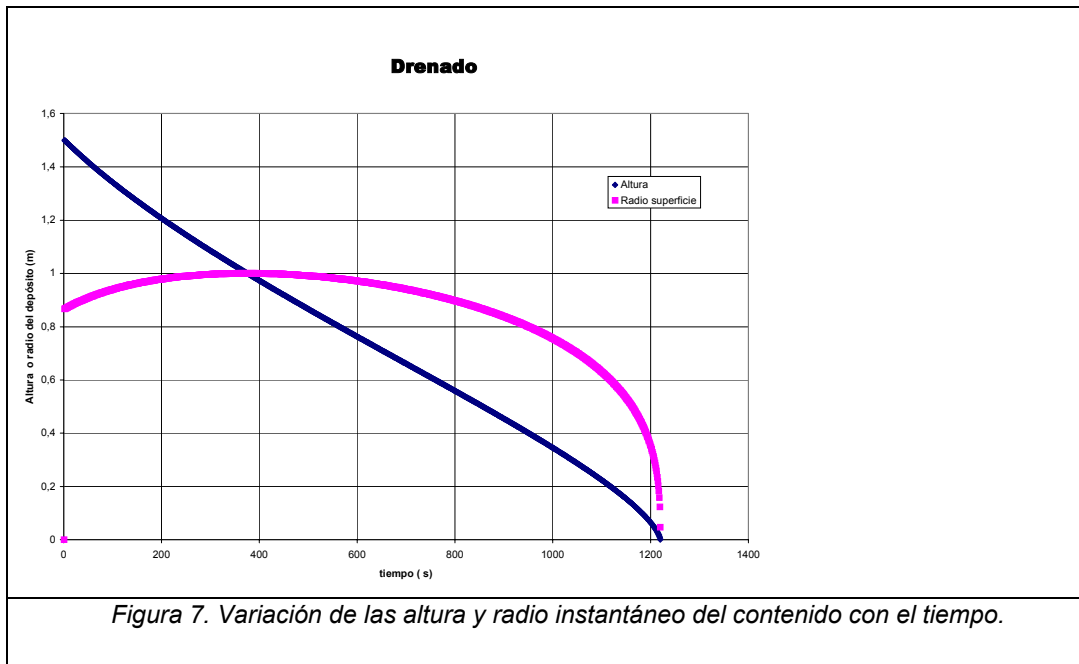
No es necesario un gran número de pasos. Aunque aquí se han tomado hasta 6000, la solución converge muy rápidamente como muestran los resultados obtenidos.

Paso (dt)/s	1	0,1	0,08	0,07	0,06	0,05	0,04	0,03	0,02	0,01	
t/s		122	121,7	121,76	121,73	121,74	121,76	121,74	121,72	121,72	121,72

Otra ventaja es la posibilidad de obtener muy fácilmente una representación gráfica del proceso.

R(m)	R2(m)	dt(s)	z0(m)	t(s)	z(m)	r	dz	v(m/s)	u(m/s)	Tiempo de drenado
1	1	0,05	0,1	0	1,5	0,866025404	0,0018074	0,01807402	5,42220681	121,7
5	0,1	1,4981926	0,867066396	0,00180198	0,01801978	5,41893898				
6	0,2	1,49639062	0,868099276	0,00179661	0,01796611	5,41567899				
7	0,3	1,49459401	0,869124138	0,0017913	0,017913	5,41242676				
8	0,4	1,49280271	0,870141076	0,00178604	0,01786045	5,4091822				
9	0,5	1,49101666	0,87115018	0,00178084	0,01780843	5,40594522				
10	0,6	1,48923582	0,872151542	0,00177569	0,01775694	5,40271574				
11	0,7	1,48746013	0,873145249	0,0017706	0,01770598	5,39949368				
12	0,8	1,48568953	0,874131388	0,00176555	0,01765554	5,39627895				
13	0,9	1,48392397	0,875110043	0,00176056	0,0176056	5,39307147				
14	1	1,48216341	0,876081299	0,00175562	0,01755616	5,38987116				
15	1,1	1,4804078	0,877045237	0,00175072	0,01750721	5,38667795				
16	1,2	1,47865708	0,878001938	0,00174587	0,01745875	5,38349176				
17	1,3	1,4769112	0,878951481	0,00174108	0,01741076	5,38031251				
18	1,4	1,47517013	0,879893944	0,00173632	0,01736324	5,37714013				
19	1,5	1,4734338	0,880829402	0,00173162	0,01731618	5,37397454				
20	1,6	1,47170218	0,881757931	0,00172696	0,01726967	5,37081568				
21	1,7	1,46997523	0,882679605	0,00172234	0,01722341	5,36766347				
22	1,8	1,46825289	0,883594497	0,00171777	0,01717769	5,36451784				
23	1,9	1,46653512	0,884502676	0,00171324	0,0171324	5,36137872				
24	2	1,46482188	0,885404214	0,00170875	0,01708754	5,35824605				

Tabla 5- Aspecto de la hoja de calculo cuando se calcula el nivel de un líquido que se está drenando.



En el facsímile se han mantenido las cifras decimales presentadas por la hoja a fin de mostrar la convergencia y estabilidad de los resultados. Como es preceptivo, la solución final deberá dejarse en sus cifras significativas.

2.2.3. Casos en que aparecen son precisos cálculos complejos repetitivos^[4] e integrales numéricas.

Ejemplo: Absorción de gases.

C	p^* (mm de Hg)	Con objeto de reducir la concentración de SO_2 del 16% al 1% en volumen de una mezcla SO_2 – aire, se trata en contracorriente con agua en una torre de absorción de relleno. Se desea tratar 300 m^3/h a 15°C y 3,5 ata con un caudal másico de aire $G' = 800 \text{ kg de aire. m}^{-2} \text{ h}^{-1}$ y con una cantidad de agua 30 % superior a la mínima. En estas condiciones es razonable suponer que la resistencia al transporte de materia está controlada por la fase gaseosa, siendo $K_G a = 16 \text{ kmol m}^{-3} \text{ h}^{-1}$. Calcúlese
10,00	567,0	a) Diámetro de la columna.
7,50	419,0	b) Número de elementos de transmisión.
5,00	270,0	c) Altura de relleno.
2,50	127,0	
1,50	71,0	
1,00	44,0	Los datos de equilibrio para este sistema a 15°C expresados en C = gramos de SO_2 por 100 g de agua frente a p^* , presión parcial de SO_2 se muestran en la tabla adjunta.
0,70	28,0	Solución:
0,50	19,3	a) Esta parte se resuelve sin mayores problemas de modo clásico. Se calcula para la parte inferior de la torre donde la velocidad másica del gas es mayor.
0,30	10,0	
0,20	5,7	
0,15	3,8	
0,10	2,2	
0,05	0,8	
0,02	0,3	
0,00	0,0	

Calculando un valor medio de la masa molecular del gas $M = 29 \cdot 0,84 + 64 \cdot 0,16 = 34,60$
 Se puede estimar la densidad del gas de entrada $\rho = MP/RT = 5,127 \text{ kg m}^{-3}$

De ahí la masa de gas a tratar por hora $m = 300 \cdot 5,127 = 1528 \text{ kg h}^{-1}$

Y la velocidad másica $G = G' / (1-y) = 800 / (1-0,16) = 952,4 \text{ kg m}^{-2} \text{ h}^{-1}$

Haciendo un balance de materia se tiene que $m = S \cdot G$ y en consecuencia $S = 1.615 \text{ m}^2$ y por simples consideraciones geométricas de $S = \pi D^2/4 \Rightarrow D = 1,47 \text{ m}$

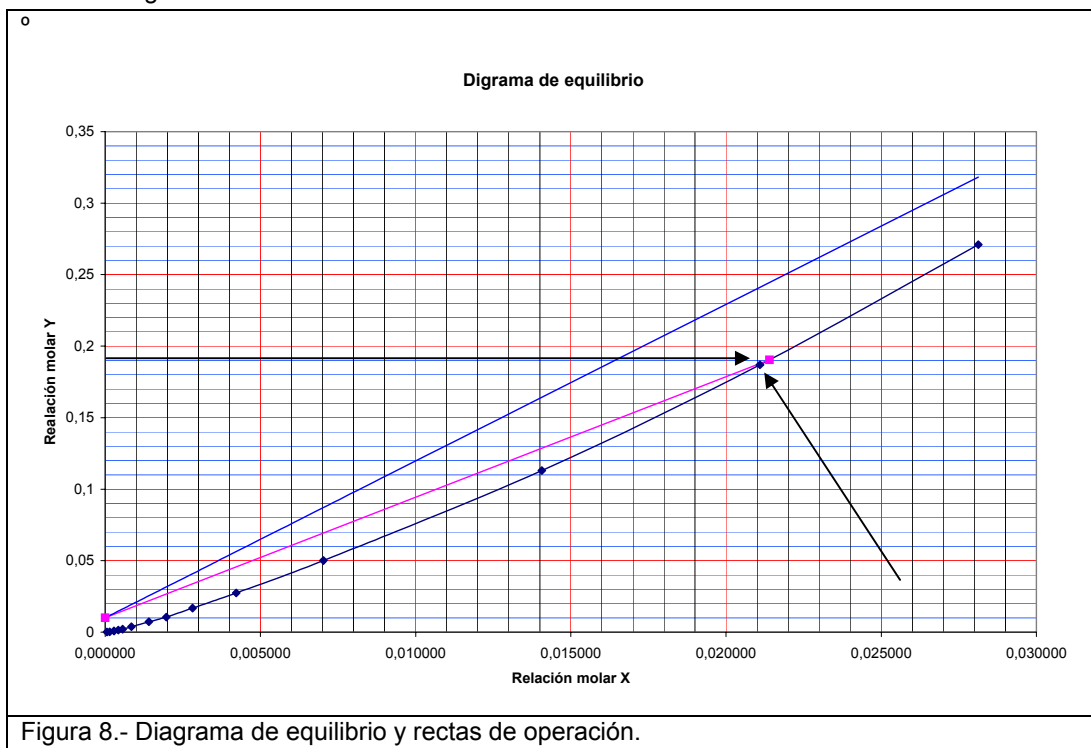
b)

Se empieza por dibujar el diagrama de equilibrio del proceso. En este caso se utilizarán, como por otra parte es habitual las relaciones molares, indicadas por X e Y

De la propia definición de X, y combinando los datos del enunciado $X = C \times \frac{1/64}{100/18}$

$$\text{Por otra parte } Y = \frac{P_{SO_2}^*}{P_{total} - P_{SO_2}^*}$$

Es suficiente pues introducir las fórmulas en sendas columnas de la hoja y dibujar el diagrama



Para el cálculo de la cantidad mínima de agua basta determinar los valores de Y a la entrada Y_1 y salida Y_2 de la columna

$$Y_1 = 0,19 / (1-0,16) = 0,1905$$

$Y_2 = 0,01 / (1-0,01) = 0,0101$. Para tener la mínima cantidad de absorbente, es necesario que el equilibrio se encuentre en la base, entrada. Como se trabaja con agua pura, el punto representativo de la cúspide es pues (0; 0,0101) y punto de la base corresponderá a $Y = 0,1995$ situado sobre la curva de equilibrio, es decir $X = 0,0215$, lo que da

$$\text{una pendiente para la recta de operación a cantidad mínima } \left(\frac{L'}{G'} \right)_{\min} = 8,425 \text{ y en}$$

consecuencia $L'_{\min} = 6740 \text{ kg de agua /h.}$

Como se usará un 30% más que esta cantidad, $L' = 1,3 \cdot 6740 = 8762 \text{ kg de agua /h.}$ la pendiente de la recta real de operación $(L'/G') = 8762 / 800 = 10,95$. El trazado de esta recta es inmediato en Excel

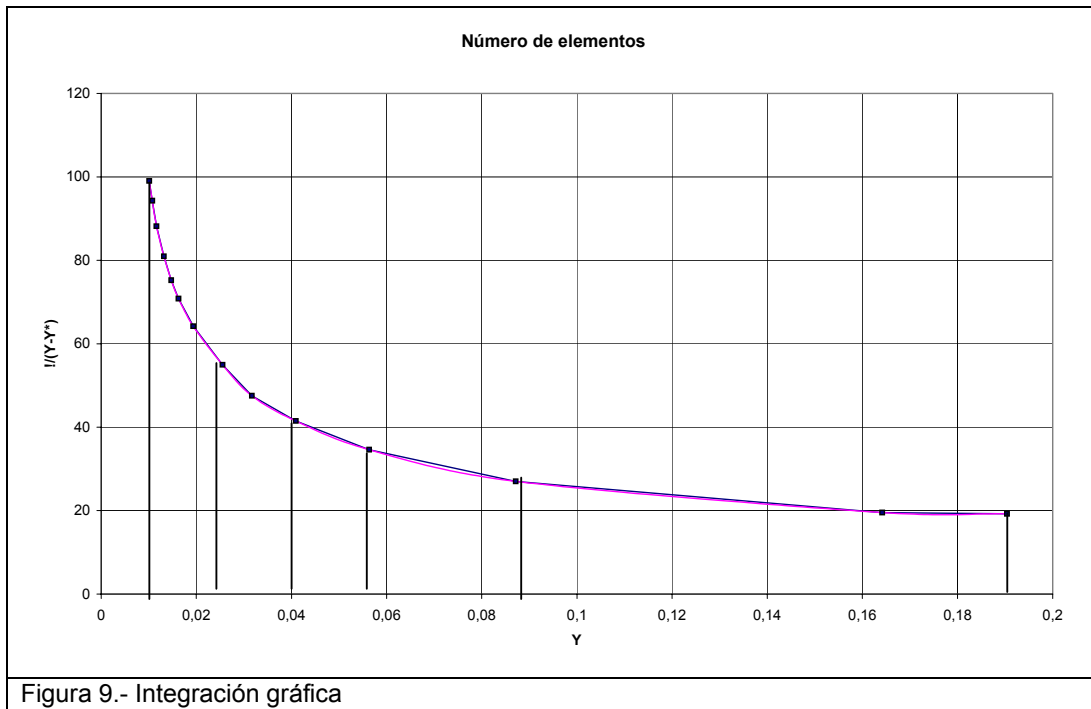
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	MM											
2		64										
3												
4	C	p* (mm de H ₂ O)	Y*	Y(OP)		x	Y*	Y	Y-Y*		1/(Y-Y*)	
5		10,00	567,0	0,028125	0,27090301							
6		7,50	419,0	0,021094	0,1869701		0,0214	0,1384	0,1904	0,052	19,2307692	0,50803793
7		5,00	270,0	0,014063	0,11297071		0,0140625	0,11297071	0,16418352	0,0512128	19,5263668	1,79317687
8		2,50	127,0	0,007031	0,05013818		0,00703125	0,05013818	0,08714176	0,03700358	27,024411	0,94953788
9		1,50	71,0	0,004219	0,02742372		0,00421875	0,02742372	0,05632505	0,02890134	34,600473	0,58628153
10		1,00	44,0	0,002813	0,01681957		0,0028125	0,01681957	0,0409167	0,02409713	41,4987157	0,41159787
11		0,70	28,0	0,001969	0,0106383		0,00196875	0,0106383	0,03167169	0,02103339	47,5434438	0,31583871
12		0,50	19,3	0,001406	0,00730867		0,00140625	0,00730867	0,02550835	0,01819968	54,9460107	0,36723096
13		0,30	10,0	0,000844	0,00377358		0,00084375	0,00377358	0,01934501	0,01557143	64,220194	0,20810887
14		0,20	5,7	0,000563	0,00214746		0,0005625	0,00214746	0,01626334	0,01411588	70,8421915	0,11253955
15		0,15	3,8	0,000422	0,00143062		0,00042188	0,00143062	0,01472251	0,01329189	75,2338439	0,12032368
16		0,10	2,2	0,000281	0,00082775		0,00028125	0,00082775	0,01318167	0,01235392	80,9459798	0,13030031
17		0,05	0,8	0,000141	0,00030084		0,00014063	0,00030084	0,01164084	0,01133999	88,1834775	0,08435685
18		0,02	0,3	0,000056	0,00011279		0,00005625	0,00011279	0,01071633	0,01060354	94,3081327	0,05957424
19		0,00	0,0	0,000000	0		0	0	0,0101	0,0101	99,009901	
20	operación											
21	X	Y										5,64690523
22		0	0,0101									-0,08212002
23		0,0214	0,19047									5,56478521
24												
25												
26												
27												
28												
29												
30												
31												
32												

Tabla 4.- Cálculos e integración numérica del problema de absorción

El número de elementos se puede calcular según

$$N_{OG} = \int_{Y_2}^{Y_1} \frac{dY}{Y - Y^*} + \frac{1}{2} \ln \frac{1 + Y_2}{1 + Y_1}$$

La integral se calcula por el método de los trapecios. Para ello se escribe las Y e Y* entre los puntos de integración. Se calcula Y - Y* y su inversa. La integral se calcula por el método de los trapecios cuya fórmula es $= (K7 + K6) / 2 * (-I7 + I6)$.



La fórmula se extiende hasta el penúltimo valor (Muy importante)

El sumando no integral se calcula a continuación lo que da un número de elementos de transmisión de 5,56, como se observa en el facsímil de la hoja.

c) La altura de un elemento de transmisión se calcula según

$$H_{OG} = \frac{G}{K_y a (1-Y)_{\log}} = 1,91m \quad \text{en consecuencia } z = H_{OG} * N_{OG} \cong 10 m$$

2.3.-Problemas en los que debe recurrirse a métodos de ensayo y error o aproximaciones sucesivas, o en general a tanteos.

En este tipo de problemas la hoja muestra su eficacia, especialmente si se hace uso de la utilidad "solver", por ejemplo.

Ejemplo cálculo de la temperatura de una llama.

Calcúlese la temperatura teórica de llama producida al quemar completamente una mezcla de gases cuya composición en volumen es 20% de CO, 40% de H₂ y 4% de N₂ con un 50 % de exceso de aire. Inicialmente combustible y comburente se encuentran a 25°C.

Los calores específicos en kcal (kmol K) se obtienen según

$$c_p = a + bT + cT^2$$

	a	b·10 ²	c·10 ⁵
H ₂	6,424	0,1039	-0,7804
CO	6,480	0,1566	-2,387
N ₂	6,529	0,1488	-2,2271
O ₂	6,732	0,1505	-1,791
H ₂ O (v)	6,970	0,3464	-4,833

Para el CO_2 $c_p = 18,036 - 4,474 \cdot 10^{-5} T - 158,08 T^{-0,5}$

Y los calores normales de combustión

De H_2 a H_2O (v) $\Delta H^0 = -57,8 \cdot 10^3$ kcal/kmol

De CO $\Delta H^0 = -67,63 \cdot 10^3$ kcal/kmol

La solución de modo clásico significa establecer una base de cálculo, por ejemplo 100 kmol de combustible, efectuar el correspondiente balance de materia, establecer una temperatura de referencia y efectuar el balance entálpico, sabiendo que por definición la temperatura de llama se calcula para un proceso adiabático. Por no alargar se omiten los cálculos que conducen a la solución siguiente

El Gas de combustión contiene

Componente	Kmol
CO	20
H_2O (v)	40
O_2	15
N_2	169,3

El balance entálpico $H_s - H_e + \Sigma \Delta H_r = 0$, siendo H_s entalpía de salida, H_e id. de entrada y $\Sigma \Delta H_r$ entalpía de reacción, conduce (s.e.u. o.) a la ecuación

$-2,016 \cdot 10^{-5} T^3 + 0,2061 T^2 + 1845,8 T - 6330 T^{0,5} - 41,233 \cdot 10^5 = 0$ su solución es realmente compleja sin embargo la aplicación de la utilidad "Solver" da una respuesta rápida *** obteniéndose el resultado 2021,89658 K.

Es suficiente con introducir un valor cualquiera en una casilla, escribir la ecuación en función de esta casilla e imponer que la casilla ocupada por la fórmula tome el valor cero.

Puede evitarse la integración programando el balance entálpico instantáneo desarrollando este e imponiendo que al cabo de un determinado número de pasos, este sea nulo.

*** También podría haberse utilizado, en este caso con ventaja, cualquier programa de cálculo, como "Derive"

Microsoft Excel - ing1b

Archivo Edición Ver Insertar Formato Herramientas Datos Ventana ?

F12

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
4	N ₂	6,529	0,001488	-2,27E-05	169,3	169,3			
5	O ₂	6,732	0,001505	-1,79E-05	45	15			
6	H ₂ O (v)	6,97	0,003464	-4,88E-05	0	40			
7	C ₂ H ₂				0	20			
8									
9	T0	dt							
10	298	0,5743679				Solución			
11	T	Hs	He	Hr	Q	2021,67808			
12	298	0	0	-3,665E+06	-3664600				
13	298,574368	1,02E+03	0	-3,665E+06	-3663577,34				
14	299,148736	2,05E+03	0	-3,665E+06	-3662554,46				
15	299,723104	3,07E+03	0	-3,665E+06	-3661531,36				
16	300,297472	4,09E+03	0	-3,665E+06	-3660508,03				
17	300,87184	5,12E+03	0	-3,665E+06	-3659484,48				
18	301,446207	6,14E+03	0	-3,665E+06	-3658460,7				
19	302,020575	7,16E+03	0	-3,665E+06	-3657436,7				
20	302,594943	8,19E+03	0	-3,665E+06	-3656412,48				
21	303,169311	9,21E+03	0	-3,665E+06	-3655388,03				
22	303,743679	1,02E+04	0	-3,665E+06	-3654363,36				
23	304,318047	1,13E+04	0	-3,665E+06	-3653338,47				
24	304,892415	1,23E+04	0	-3,665E+06	-3652313,35				
25	305,466783	1,33E+04	0	-3,665E+06	-3651288,02				
26	306,041151	1,43E+04	0	-3,665E+06	-3650262,46				

Hoja1 Hoja2 Gráfico1 Hoja3

Dibujo Autoformas

Listo NUM

Obsérvese la concordancia entre ambos resultados

La fórmula informática básica es $H=B12+(\$F\$7*(18,036-0,00004474*A13-158,08*A13^{(0,5)})) + \$F\$6*(\$B\$6 +\$C\$6*A13 +\$D\$6*A13*A13) +\$F\$5*(\$B\$5 +\$C\$5*A13 +\$D\$5*A13*A13)+\$F\$4*(\$B\$4+ \$C\$4*A13+ \$D\$4*A13*A13))*\$B\$10$

Véase también como las constantes así como las cantidades de reactivos y productos se han dejado como encabezamiento de la tabla, a fin de facilitar un posible cambio en las mismas, sin modificación sustancial del problema.



Figura 10. Esquema gráfico del balance entálpico del problema.

3. CONCLUSIONES

Se han mostrado el fundamento y algunos ejemplos de aplicación de la hoja de cálculo en la enseñanza de la Ingeniería Química.

Con esta herramienta tan ampliamente difundida:

- Se pueden obtener soluciones a problemas que implican emplear matemáticas de nivel medio con suficiente aproximación, evitando complicaciones innecesarias y en un tiempo muy reducido.
- No es preciso utilizar métodos complejos de cálculo numérico, puesto que nada impide elegir pasos de integración suficientemente pequeños, y comprobar la convergencia de los resultados.
- No obstante su sencillez de uso, su empleo a la hora de facilitar el estudio de problemas de ingeniería es grande puesto que libera en alto grado gran parte del cálculo matemático mecánico y permite centrar el esfuerzo en la comprensión física del problema.
- Minimiza errores de cálculo.
- Permite la solución de modo sencillo de problemas y supuestos que en otro caso serían prácticamente insolubles.
- Proporciona de modo inmediato un seguimiento gráfico del problema.
- Una vez resuelto un problema, si se toma la precaución de dejar fuera de la tabla de cálculo propiamente dicha, los parámetros y datos del problema, se tiene resuelto cualquier problema semejante.
- Abundando en lo anterior, y como principal valor añadido desde el punto de vista del aprendizaje, se puede variar los valores numéricos de los parámetros físicos o geométricos y obtener respuesta inmediata, tanto numérica como gráfica, lo que facilita la determinación de la influencia de tales parámetros en el problema.

4. BIBLIOGRAFÍA

1. Backalov N (1980) **Métodos numéricos**. Paraninfo Madrid
2. Badger W.L. Banchemo J.T.(1972) **Introducción a la ingeniería química**. Castillo Madrid
3. Demidovich B.P.(1980) **Métodos numéricos de Análisis**. Paraninfo Madrid
4. Hart P.W , Sommerfeld J.T.(1996) **ChE applications of elliptic integrals**. Che Summer
5. Hildebrand F.B. (1965)**Métodos de cálculo para ingenieros**.Aguilar Madrid
6. Kranoschiokov E.A. Sukomiel A.S.(1975) **Problemas de termotransferencia**. Mir . Moscú
7. Mac Cabe W.I Smith J.C(1981). **Operaciones básicas en ingeniería química**. Reverté. Barcelona
8. Martínez Pons, J.A. (1998) **La hoja de cálculo como auxiliar en la enseñanza de la Física**. CPR Arganda. Madrid
9. Martínez Pons, J.A. (2002) **El drenado de depósitos, un ejemplo de aplicación de la hoja de cálculo a la resolución de problemas en ingeniería química**”Revista Anales de la Real Sociedad Española de Química 98-3-2002 Págs. 42 a 46
- 10.Morris, Max y Brown, Orley (1960) **Ecuaciones diferenciales**. Aguilar. Madrid
11. Ocón García, J. Y Tojo Barreiro, G. (1967) **Problemas de ingeniería química**. Tomos 1 y 2. Aguilar. Madrid.

12. Piskunov N. (1977) **Cálculo diferencial e integral**. Mir Moscú
 13. Shield F. B. **Análisis numérico**. 1968 Schaum series. Mc Graw Hill México 1968
 14. Volkov E.A. **Métodos Numéricos**. Mir. Moscú 1990

5. ANEXO

5.1. Integrales elípticas^{4,5}

Una integral⁴ del tipo $\int A/R(x, \sqrt{f(x)})$ donde R denota cualquier función racional y $f(x)$ es una función de tercer o cuarto grado en x , puede expresarse como suma finita de integrales elementales e integrales elípticas de tres tipos básicos.

Una integral elíptica surge de la medida de la longitud de una elipse $x^2/a^2 + y^2/b^2 = 1$, con el cambio a coordenadas polares $x = r \cos \theta$, $y = r \sin \theta$

$$ds = \sqrt{(dx)^2 + (dy)^2} = \sqrt{a^2 \cos^2 \theta + b^2 \sin^2 \theta} d\theta = a \sqrt{1 - e^2 \sin^2 \theta} d\theta,$$

$$e = \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{a}$$

e es la excentricidad de la elipse

La integral entre 0 y $\pi/2$ de esta expresión corresponde a la longitud de un cuarto de elipse y por razones de simetría la longitud total del perímetro es cuatro veces la anterior.

Existen tres tipos fundamentales de integrales elípticas, son las mostradas en el recuadro

$$IF(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}}$$

$$IIE(k) = \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta} d\theta$$

$$IIII(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{(1 + n \sin^2 \theta) \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}}$$

Tal como se han formulado se llaman completas, sustituyendo el límite superior por un valor cualquiera ϕ se llaman incompletas.

El término k es el módulo de la integral.

El término ϕ se llama amplitud.

El término n es el parámetro de integral de tercer orden.

Estas funciones aunque integrables no pueden, salvo en el caso trivial de $k=1$, expresarse como combinación finita de funciones elementales como ocurre con otras muchas⁹ como $\int e^{-x^2} dx$; $\int (\sin x) dx/x$; $\int dx/\ln x$, etc., no obstante su frecuente uso en la Física y en la Matemática aplicadas.

Tablas con sus valores suelen encontrarse en muchos manuales.