UNIVERSIDAD SIMÓN BOLÍVAR
DIVISIÓN DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DPTO. TERMODINÁMICA Y FENÓMENOS DE TRANSFERENCIA
MÉTODOS APROXIMADOS EN ING. QUÍMICA
TF-1313

SEGUNDO PARCIAL RESUELTO

(1 DE NOVIEMBRE DE 2006)

Esta guía fue elaborada por:

Prof. Aurelio Stammitti Scarpone

con la ayuda de:

Br. María M. Camacho A.

SEGUNDO PARCIAL
(Septiembre Diciembre 2006)

La tabla siguiente muestra la respuesta de un tipo de reactor tipo *Tanque Agitado* sometido a una entrada tipo *Escalón de Concentración* de un trazador.

t	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.6	0.8	1.2	1.6
***F*(*t*)**	0	0.02	0.12	0.27	0.43	0.7	0.86	0.97	0.996

al que se le desea obtener la curva $F(\theta)$ con $\theta = t/t_m$, $t_m = V/Q$, $V = 60lt, Q = 120lt/h$.

Ejercicio 1

Con un polinomio de interpolación de grado 3 (por lo menos), calcule F para $\theta = 0.5$.

Solución

Lo primero que se tiene que observar cuando se proporciona una tabla es <u>SI la tabla es equiespaciada</u> en '*x*'; ya que, para este tipo de tablas el procedimiento es diferente.

La condición de equiespaciada lo que dice es lo siguiente: $x_n - x_{n-1} = h$.

Al observar como esta dispuesta nuestra tabla en '*x*' que en este caso corresponde a la variable '*t*', se ve que efectivamente cumple con la condición equiespaciada.

Ahora, como nos piden $F(\theta=0.5)$, lo más recomendable es hacer la conversión de '*t*' a 'θ' para luego hallar nuestro polinomio de Newton Gregory.

Para la conversión se hace lo siguiente:

1.- Se calcula t_m.
2.- Con t_m se procede a calcular θ.
3.- Se escribe la nueva tabla.
4.- Se cumple que $F(t)=F(\theta)$, ya que cambiar de t a q es solo hacer un cambio de escala en esa variable.

Cálculo de t_m.

$$t_m = V/Q = 60lt / 120lt/h = 0.5\,h$$

$\boldsymbol{\theta}$	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.2	1.6	2.4	3.2
$\boldsymbol{F(\theta)}$	0	0.02	0.12	0.27	0.43	0.7	0.86	0.97	0.996

<u>Procedimiento para la obtención del Polinomio de Newton Gregory</u> **<u>(hacia delante)</u>**:

1.- Se define un auxiliar: $s = \dfrac{x - x_o}{h}$, x_o : punto inicial de la sección de la tabla

2.- Se construye la Tabla de Diferencias hacia delante.

3.- Se construye la recta hacia delante de la siguiente forma:

$$y = y_o + s \cdot \Delta F_0 + s \cdot \frac{(s-1)}{2!} \cdot \Delta^2 F_0 + s \cdot \frac{(s-1)\cdot(s-2)}{3!} \cdot \Delta^3 F_0 + \ldots$$

Paso 1:

Para θ= 0,5 $\quad s = \dfrac{0,5 - 0,2}{0,2} = 1,5$

Se toma como valor de 'x' a 0,5 porque queremos saber F(0,5).

Paso 2:

Construcción de nuestra Tabla de Diferencias hacia delante desde θ= 0,2 hasta θ= 0,8 porque <u>es la zona equiespaciada de la tabla alrededor del punto de interés</u>:

θ	F	ΔF	Δ^2F	Δ^3F
0,2	0,02	0,10	0,05	-0,04
0,4	0,12	0,15	0,01	
0,6	0,27	0,16		
0,8	0,43			

Se llega hasta Δ^3F porque se pide que el polinomio debe ser por lo menos de grado tres (3).

Paso 3:

$$y(1,5) = 0,02 + (1,5)\cdot(0,10) + (1,5)\cdot\frac{(1,5-1)}{2}.(0,05) + (1,5).\frac{(1,5-1)\cdot(1,5-2)}{6}\cdot(-0,04)$$

Evaluando la expresión anterior nos queda que F(1,5) es: $\quad y(0,5) = F(0,5) = 0,19125$

Ejercicio 2

Se sabe que para este tipo de reactor, la curva que mejor ajusta es la del tipo $F = a + b \cdot e^{-\theta}$, que corresponde a un tanque de agitado perfecto. Determine las constantes a, b y calcule luego F para $\theta = 0.5$.

Solución

Como para este ejercicio se pide determinar las constantes 'a' y 'b', se tiene que hacer una aproximación.

Para ilustrar la forma de adaptación se utilizó el método de aproximación multifunción para la resolución del problema.

Procedimiento de aproximación multifunción:

1.- Se reescribe la ecuación dada como una combinación lineal que depende de tantas funciones como sea necesario.

$$f(x) = a_0 \cdot f_0(x) + a_1 \cdot f_1(x)$$

Identificamos las funciones f_0 y f_1 correspondientes a la forma especificada en el problema:

2.- Se resuelve el siguiente sistema matricial:

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{n} f_0(x_i) \cdot f_0(x_i) & \sum_{i=0}^{n} f_0(x_i) \cdot f_1(x_i) \\ \sum_{i=0}^{n} f_1(x_i) \cdot f_0(x_i) & \sum_{i=0}^{n} f_1(x_i) \cdot f_1(x_i) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{n} y_i \cdot f_0(x_i) \\ \sum_{i=0}^{n} y_i \cdot f_1(x_i) \end{pmatrix}$$

con N : nº de puntos en la tabla

3.- Una vez que se halla a_0 y a_1, se calcula 'a' y 'b'.

Paso 1:

Reescribamos la ecuación original: $F(\theta) = a + b \cdot e^{-\theta}$ como: $f(x) = a_0 \cdot f_0(x) + a_1 \cdot f_1(x)$

Con f, a_0, f_0, a_1 y f_1 definidos de la siguiente manera:
$$\begin{matrix} f_0(\theta) = 1 & f_1(\theta) = e^{-\theta} \\ a_0 = a & a_1 = b \end{matrix}$$

Paso 2:

Antes de resolver el sistema matricial es recomendable plantear la tabla de valores:

i	$\boldsymbol{\theta}$	$\boldsymbol{y = F(\theta)}$	$\boldsymbol{f_1 = e^{-\theta}}$	$\boldsymbol{f_1 \cdot f_1}$	$\boldsymbol{y \cdot f_1}$
0	0	0	1	1	0
1	0,2	0,02	0,81873	0,67032	0,01637
2	0,4	0,12	0,67032	0,44933	0,08044
3	0,6	0,27	0,54881	0,30119	0,14818
4	0,8	0,43	0,44433	0,19743	0,19106
5	1,2	0,70	0,30119	0,09072	0,21083
6	1,6	0,86	0,20190	0,04076	0,17363
7	2,4	0,97	0,09072	0,00823	0,08800
8	3,2	0,996	0,04076	0,00166	0,04060

$$\sum_{i=0}^{n} f_0 \cdot f_0 = 9$$

$$\sum_{i=0}^{n} f_0 \cdot f_1 = \sum f_1 = 4{,}12236$$

$$\sum_{i=0}^{n} f_1 \cdot f_1 = 2{,}76465$$

$$\sum_{i=0}^{n} y_i \cdot f_0 = 4{,}366$$

$$\sum_{i=0}^{n} y_i \cdot f_1 = 0{,}95127$$

Solución del sistema matricial:

$$\begin{pmatrix} 9 & 4{,}12236 \\ 4{,}12236 & 2{,}76465 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4{,}366 \\ 0{,}95127 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{matrix} a_0 = 1{,}033 \\ a_1 = -1{,}196 \end{matrix}$$

Paso 3:

En este caso, como se hizo un cambio de variables y se reescribió la ecuación inicial como una ecuación lineal no es necesario devolver ningún cambio, debido a que a_0 y a_1 corresponden a ‘*a*’ y ‘*b*’ respectivamente.

$$F = 1{,}033 - 1{,}996 \cdot e^{-\theta}$$
$$F(0{,}5) = 0{,}30759$$

<u>*Observación*</u>: si comparan los resultados de $F(0{,}5)$ entre el Polinomio de Newton Gregory y la Aproximación, van a ver que los resultados difieren completamente; esto se debe a que los polinomios de interpolación obligan al polinomio a pasar por todos los puntos mientras, que por medio de la aproximación se hace un ajuste suave.

Ejercicio 3

Se tienen dos discos paralelos (uno arriba del otro), de radio *R*=10 cm, separados una distancia de *h*=5mm y el espacio entre los discos llenos de aceite ($\rho = 884.1\, kg/m^3$, $\mu = 0.486\, Pa \cdot s$). El disco de abajo está fijo mientras que el de arriba gira a una velocidad $\omega = 50\, rad/s$. El perfil de velocidades y de presión para este problema está dado por:

$$v_\theta = \frac{\omega \cdot r \cdot z}{h} \quad , \quad p = \frac{\rho \cdot \omega^2 \cdot z^2}{2 \cdot h^2} \cdot r^2 - \rho \cdot g \cdot z + p_o$$

se pide calcular:

a) El torque ejercido al disco de abajo $M = \int_0^R r \cdot (\tau \cdot 2 \cdot \pi \cdot r) dr \;\; con \;\; \tau = \mu \frac{\partial v_\theta}{\partial z}$

b) La fuerza axial que el flujo ejerce sobre el disco de arriba

$$F = \int_0^R \left(\left(p - p_o \right)\Big|_{z=h} \right) \cdot 2 \cdot \pi \cdot r \, dr$$

Solución

Parte a)

Como nos piden el torque ejercido al disco de abajo, y nos dan la integral que hay que resolver para hallar dicho torque, hay que ver si se puede simplificar algo.

Ya que 'r' multiplica al paréntesis, al resolver el mismo queda:

$$M = \int_0^R \tau \cdot 2 \cdot \pi \cdot r^2 \, dr$$

Aparte, en el problema nos dicen que R=10 cm = 0,10 m; por lo tanto:

$$M = \int_0^{0,10} \tau \cdot 2 \cdot \pi \cdot r^2 \, dr$$

Por último, sabemos que el término 2π es constante y no depende de '*r*' por lo que puede salir de la integral.

$$M = 2\pi \int_0^{0,10} \tau \cdot r^2 \, dr \leftarrow \textbf{Integral a resolver}$$

con : $\tau = \mu \dfrac{\partial v_\theta}{\partial z}$

donde : $v_\theta = \dfrac{\omega \cdot r \cdot z}{h} = \dfrac{50 \cdot r \cdot z}{0,005} = 10000 \cdot r \cdot z \Rightarrow v_\theta(r,z) = 10000 \cdot r \cdot z$

Como saben, para existen varios métodos para resolver integrales; entre dichos métodos se encuentra el de cuadratura gaussiana que es el que vamos a usar para resolver esta parte del problema. La razón por la cuál usamos este método y no otro sino porque es un método muy preciso y adicionalmente se tiene una función explícita.

Procedimiento de cálculo:

1.- Seleccionar '*n*'.

2.- Extraer los valores t_i, ω_i de la tabla.

3.- Aplicar el cambio de base $x = \dfrac{(b-a) \cdot t + b + a}{2}$

4.- Evaluar los x_i con los ti usando el cambio de base.

5.- Evaluar los $f(x_i)$.

6.- Hacer la suma $I = \dfrac{b-a}{2} \cdot \sum_{i=1}^{n} \omega_i \cdot f(x_i)$

Pasos 1 y 2:

Seleccionamos n=3

Al entrar a la tabla de coeficientes para la cuadratura de Gauss-Legendre con n=3, leemos t_1, t_2, t_3 y sus respectivos ω.

i	t_i	ω_i
1	-0,774597	0,555
2	0	0,888
3	0,774597	0,555

Paso 3:

Al aplicar el cambio de base para la variable '*r*' que corresponde a '*x*' tenemos:

$$a = 0 \quad b = 0{,}10$$
$$r = \frac{(0{,}10 - 0)\cdot t + (0{,}10 + 0)}{2} \Rightarrow r = 0{,}05 \cdot t + 0{,}05$$

Paso 4:

Cuando evaluamos los '*r*' para su correspondiente '*t*' resulta:

i	t_i	r_i
1	-0,774597	0,0112701
2	0	0,05
3	0,774597	0,0887298

Pasos 5 y 6:

La integral se reescribe como la suma de tres términos, correspondientes a las evaluaciones de *f* multiplicadas por los respectivos ω_i.

$$M = 2\pi \int_0^{0,10} \tau r^2\, dr = 2\pi \cdot 0{,}05 \cdot \left[\omega_1 \cdot r_1^2 \cdot \tau(r_1) + \omega_2 . r_2^2 \cdot \tau(r_2) + \omega_3 \cdot r_3^2 \cdot \tau(r_3)\right]$$

Ahora debemos evaluar los $\tau(r_i)$, los cuales dependen de v_θ, que a su vez dependen de z: La derivada de v_θ debe evaluarse numéricamente también, por simplicidad, utilizamos la diferencia finita hacia delante de primer orden para la variable z. Fijamos un valor del paso h_z arbitrario aceptablemente pequeño para el problema. Adicionalmente, se pide hallar el valor de M en el disco inferior, lo que significa que debe evaluar la derivada en z=0 para los distintos radios.

$$\left.\frac{\partial v_\theta}{\partial z}\right|_{\substack{z=0\\ r_i}} = \frac{v_\theta(r_1, 0 + h_z) - v_\theta(r_1, 0)}{h_z}; \qquad h_z = 0{,}01 \text{ (simplicidad)}$$

Ahora ya podemos evaluar cada uno de los términos para la integral:

$$\tau(r_1) = \mu \left.\frac{\partial v_\theta}{\partial z}\right|_{\substack{z=0\\ r_1}} = \mu\left[\frac{v_\theta(r_1; 0{,}01) - v_\theta(r_1; 0)}{0{,}01}\right] \Rightarrow \tau(r_1) = 54{,}77269$$

$$\tau(r_2) = \mu \left.\frac{\partial v_\theta}{\partial z}\right|_{\substack{z=0\\ r_2}} = \mu\left[\frac{v_\theta(r_2; 0{,}01) - v_\theta(r_2; 0)}{0{,}01}\right] \Rightarrow \tau(r_2) = 243$$

$$\tau(r_3) = \mu \frac{\partial v_\theta}{\partial z}\bigg|_{\substack{z=0\\ r_3}} = \mu\left[\frac{v_\theta(r_3;0,01) - v_\theta(r_3;0)}{0,01}\right] \Rightarrow \tau(r_3) = 431,22683$$

Finalmente, el resultado de toda la integral es: $M = 0,76431$

Parte b)

Aquí la integral que nos piden resolver es la siguiente:

$$F = \int_0^R \left((p - p_o)\Big|_{z=h} \right) \cdot 2 \cdot \pi \cdot r\, dr$$

con : $(p - p_o)\big|_{z=h} = \dfrac{\rho \cdot \omega^2}{2} \cdot r^2 - \rho \cdot g \cdot h$

Pero, en la integral aparece el término $(p - p_o)\big|_{z=h}$ así que tenemos que evaluar la expresión anterior para *z=h*.

Al evaluarla nos queda una función de *r*:

$$(p - p_o)\big|_{z=h} = 1105125 \cdot r^2 - 43,3209$$

Por ende, la integral que tenemos que resolver es:

$$F = \int_0^R \left((p - p_o)\Big|_{z=h} \right) \cdot 2 \cdot \pi \cdot r\, dr = \int_0^R (6943705 \cdot r^3 - 272,193245)\, dr$$

Y como aquí también tenemos una integral con una función explícita se puede aplicar el método de cuadratura gaussiana.

Como los límites de integración son los mismos, el procedimiento efectuado anteriormente para hallar los r_i a partir de los t_i es el mismo, lo que cambia, es la función final en la que se evalúan los r_i.

$$f(r_1) = 6,87208 \quad f(r_2) = 854,35346 \quad f(r_3) = 4826,4965$$

La integral por cuadratura gaussiana se reduce a:

$$F = 0,05 \cdot \left[\omega_1 \cdot f(r_1) + \omega_2 \cdot f(r_2) + \omega_3 \cdot f(r_3)\right] \Rightarrow F = 172,23$$