EL DRENADO DE DEPÓSITOS, UN EJEMPLO DE APLICACIÓN DE LA HOJA DE CÁLCULO A LA RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

José Antonio Martínez Pons

IES Las Lagunas. Rivas Vaciamadrid

Dpto. Química Analítica e Ingeniería Química. Universidad de Alcalá

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 en las que ecuaciones y modelos matemáticos de gran belleza formal conducen a situaciones en las cuales el cálculo simbólico es muy complejo o simplemente imposible. Entonces hay que recurrir al cálculo gráfico o a efectuar aproximaciones numéricas.

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 Marple o Mathematica, que pueden resolver muchos de estos problemas. No obstante, su disponibilidad e incluso adquisición de la destreza en su manejo, no es sencillo, 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 facilidad de manejo, aprendido en el bachillerato.

Debido al objetivo fundamental de este trabajo, buscar la sencillez en la aplicación, no se contempla la posibilidad de escribir pequeños programas en el lenguaje de macros, o en la versión de Visual Basic asociada a Excel, que pueden dar aun más agilidad.

El autor utiliza las técnicas descritas en este trabajo en Seminarios de problemas y aconseja su utilización en las hojas de trabajo que, con peso en la calificación final, deben presentar sus alumnos de 2° año de Licenciatura, la verdad, dicho sea de paso, que con poca respuesta por parte de un alumnado que teóricamente "ha mamado" el ordenador. Este trabajo está dirigido pues a los estudiantes , aunque pensamos que puede ser útil a profesores de la disciplina, e incluso, a profesionales en ejercicio, dada la simplicidad del método y, se insiste una vez más, la facilidad de disponer del programa básico.

Es además importante resaltar que en ningún momento la hoja de calculo se convierte en una suerte de "caja negra" en la que entran unos datos y salen unos resultados, sino que el propio estudiante debe conocer perfectamente el proceso físico o químico al que se refiere el problema así como las leyes que lo rigen, siendo sólo liberado del cálculo mecánico que deberá haber programado adecuadamente, con la ventaja añadida de que puede obtener de modo inmediato la representación gráfica de la evolución del problema, de ahí su interés como herramienta didáctica.

2. CAMPO DE APLICABILIDAD

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

Manejo de **fórmulas y correlaciones empíricas de expresión compleja.**

Resolución de problemas que requieran **procesos de integración difíciles o imposibles en modo simbólico.**

Resolución de problemas que requieran métodos de aproximaciones sucesivas, **"Métodos de tanteo".**

También es de gran utilidad su potencialidad, de resolver sistemas de ecuaciones lineales por el método de la matriz inversa, 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.

3. APLICACIÓN EN ESTE TRABAJO

El ejemplo que se propone, el drenado de un depósito es un ejemplo de situación compleja, en la cual aparecen integrales de imposible resolución simbólica, aunque las ideas generales valen para casi cualquier problema que evolucione en el tiempo o siguiendo cualquier otra variable. Se trata de un método que la experiencia docente demuestra como muy efectivo, a la par que sencillo

Se prepara una fila de datos empíricos, como condiciones iniciales, medidas fijas del instrumental etc, en función de los cuales se desarrollará la solución.

De este modo se pretende poder variar estos datos y obtener un resultado inmediato respondiendo a la pregunta ¿Qué ocurriría si?.

La norma general consiste en desarrollar en el tiempo el problema, por ello se deja como parámetro el incremento temporal con el que se construirá la escala de tiempo.

La columna de tiempos se construye a partir del incremento temporal y se fija en unos 4000 a 6000 valores, número suficientemente grande como para dar una buena información y permitir aproximaciones del diferencial por el incremento y todavía manejable.

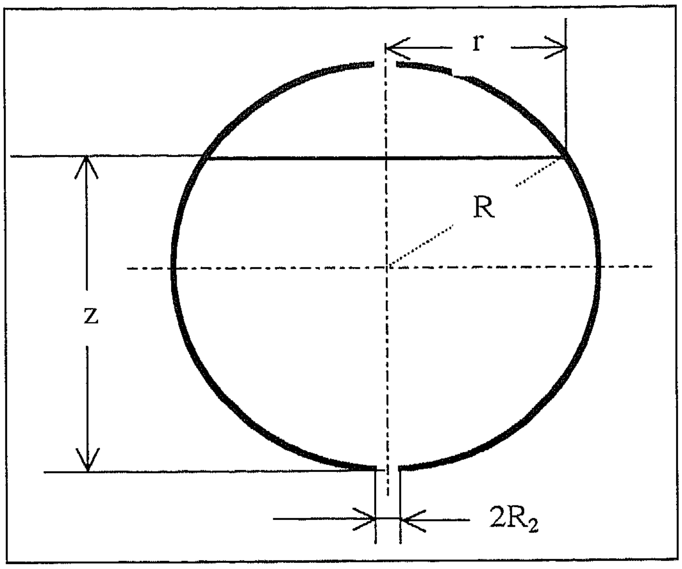


Figura 1. *Esquema del depósito y sus variables geométricas*

Es muy recomendable que todas las magnitudes vengan rotuladas con sus correspondientes unidades, a poder ser Sistema Internacional De Unidades

El principal inconveniente del método es que dados los incrementos temporales que se manejan, los errores de truncamiento son muy pequeños, sin embargo, pueden aparecer errores de redondeo. Para garantizar su escasa magnitud, puede ensayarse la solución con diferentes incrementos temporales y verificar la convergencia. (Véase el ejemplo propuesto).

También es posible, con la herramienta *Solver*, resolver problemas "*inversos*", es decir, dada una solución modificar algún parámetro para obtener esta solución.

4.- EJEMPLO

A modo de ejemplo de la aplicación de la hoja se presenta un clásico problema de drenado de un depósito.

Este problema no presenta mayores dificultades cuando el depósito presenta una sección transversal constante, sin embargo, aunque no conceptualmente, si, matemáticamente se complica en el caso de que el depósito no cumpla esta condición , aunque se trate de formas tan comunes como un depósito esférico, un cilindro horizontal o inclinado etc. La dificultad de estos problemas está en que en su solución suelen aparecer integrales tipo elíptico. Éstas así como las funciones de Bessel aparecen en muchos problemas de Ingeniería Química que involucran dinámica de fluidos o transferencias de calor. Su aplicación 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.

Enunciado del problema

Estúdiese como varía el nivel 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:

- 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.

- Los efectos de fricción con las paredes son despreciables.

- 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.

Solución clásica:

Se resolverá por aplicación de la ecuación de Bernouilli, sin hacer ninguna simplificación aparte de las del enunciado[2]

Como es sabido la ecuación de Bernouilli no es sino una expresión de la conservación de la energía mecánica y por tanto puede aplicarse entre dos puntos cualesquiera del circuito del fluido. Aunque está deducida para flujos potenciales, conservativos, con las adecuadas correcciones: fricción, presencia de bombas etc, puede aplicarse con buena aproximación a casi cualquier caso real.

Aplicando la ecuación entre el nivel superior de líquido y el punto de salida y puesto que la presión en el nivel superior del fluido y en la salida es la atmosférica, puede escribirse la ecuación de Bernoulli como

$$z\,g + {}^{1}/_{2}\, v^2 = {}^{1}/_{2}\, u^2 \qquad (1)$$

por otra parte, de la ecuación de continuidad, como expresión matemática de la conservación de la materia, se tiene que

$$Sv = su \qquad (1b)$$

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 sustituyendo en (1b) el valor de las secciones en función del radio respectivo a $u = (r/R_2)^2\, v$ lo que conduce, sustituyendo en (1) a

$$v^2((r/R_2)^4 - 1) = 2zg \qquad (2)$$

[2] *En estos problemas es típico suponer que instantemente la velocidad en el depósito es mucho menor que la del desagüe, sin embargo aquí no es precisa esta simplificación, que, además, dada la forma del depósito no se cumple siempre ya que los radios de desagüe y deposito tiende a hacerse comparables.*

[3] *En razón de brevedad se omiten las manipulaciones algebraicas que conducen a ellas*

y despejando

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

La integración de esta ecuación podría atacarse por el cambio,

$z = R + R\, sen\, \alpha;\ dz = R \cos \alpha\, d\alpha;\ r = R \cos \alpha$

cuya interpretación geométrica es evidente en la figura y sustituyendo en (3)

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

Aunque la separación de variables es inmediata, no así las integrales del tipo $\sqrt{1 - K sen^2\alpha}$, es decir, de tipo elíptico que aparecen[3], que incluso pueden no tener primitiva.[4].

El método propuesto en este trabajo es mucho más asequible.

Solución informática:

Para ello se partirá de (3) escrita como

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

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, lo que además confirma que los errores de redondeo en este caso no son importantes..

El cálculo se detiene cuando el radio instantáneo es el del orificio de drenado.

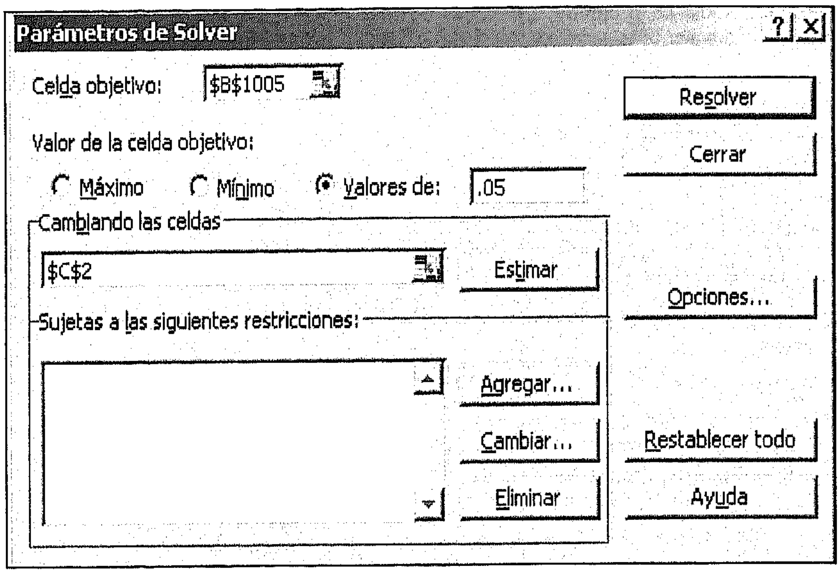


Figura 2 *Facsímil de la Herramienta "Solver"*

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.

La hoja se ha preparado según la técnica descrita al principio, es decir, con una línea de introducción de datos empíricos fácilmente modificables, en que se ubica radios del depósito y del orificio, altura inicial e incremento temporal

La serie de tiempos se construye mediante la fórmula informática A5= A4 +$D$2, fijado A4= 0 y extendiendo al número de filas deseado.

La altura instantánea se programa del siguiente modo. En la celda primera se impone la igualdad con el dato inicial, de este modo un cambio en este se transmite de modo inmediato a todo el problema.El radio instantáneo del depósito se programa haciendo uso del Teorema de Pitágoras, aunque podría hacerse utilizando la coordenada polar

r =RAIZ($A$2^2-(B4-$A$2)^2) ; donde el primer sumando representa el radio del depósito, hipotenusa, ver figura 1 y el segundo el cateto, como diferencia entre la altura instantánea y el radio.

La columna dz es la que encierra todo el meollo del problema y se programa según (5)

dz =RAIZ(2*9,8*B4/((C4/$B$2)^4-1))*$C$2; la fórmula es auto explicativa

Las velocidades se obtienen de forma inmediata según las fórmulas

v = dz/dt =D4/$C$2 ; u =v$(r/R_2)^2$ =E4*(C4/$B$2)^2

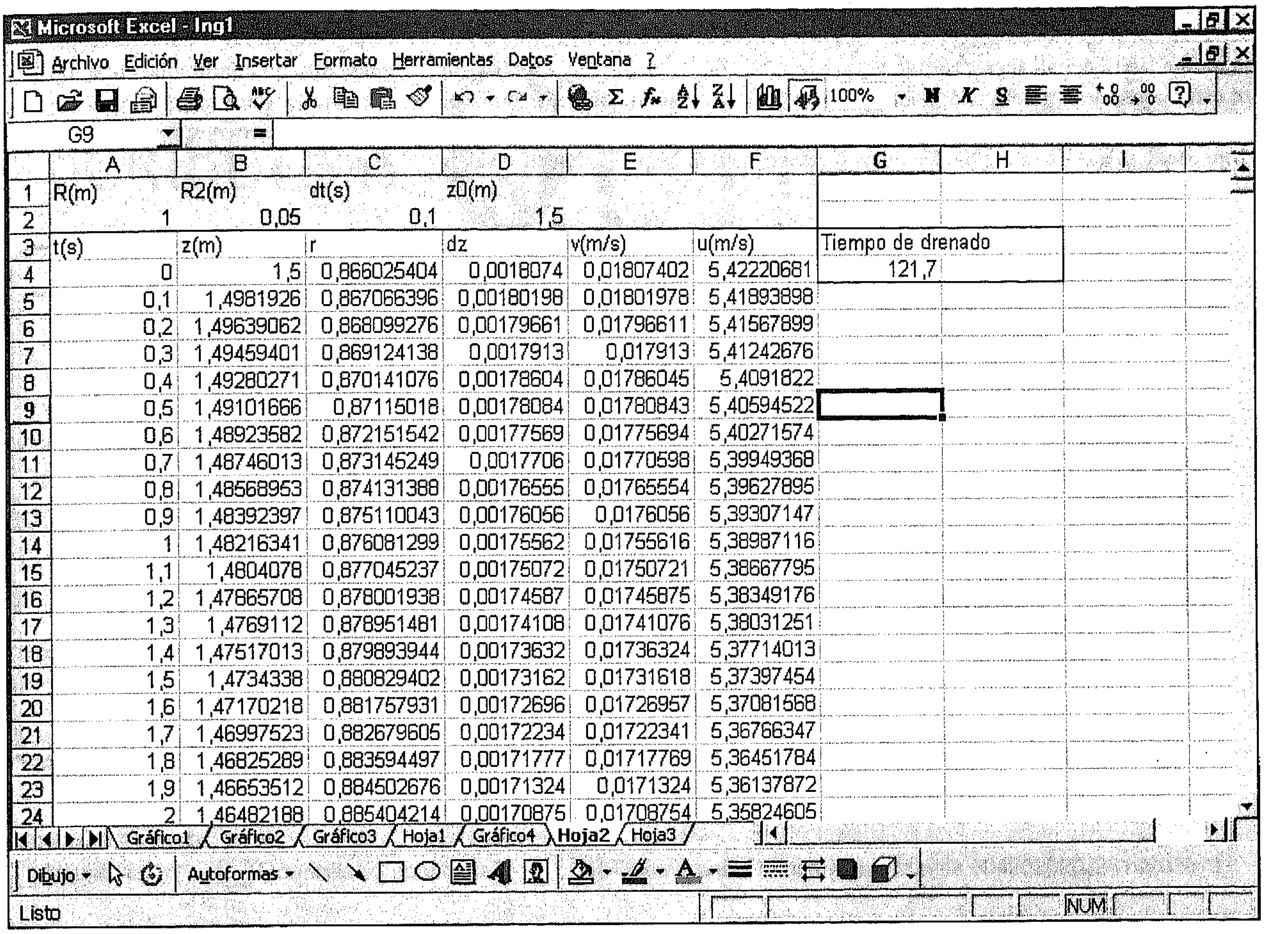
El paso final es programar la evolución de la altura , z, simplemente restando el valor de dz anterior

z = B4-D4.

Para hallar la solución final puede procederse de diferentes modos, uno es fijar un valor de dt y utilizando la herramienta "buscar", localizar el valor de r más próximo al dato.

Otro método más sencillo consiste en hacer uso de la herramienta "Solver". Para ello se pide que obligue a la celda correspondiente, por ejemplo, a 6.000 pasos, a tomar el valor del radio dato, modificando el valor de dt. Conviene imponer la restricción de que el valor de

[4] *No está de más recordar la diferencia entre primitiva de una función, que, simplificando , es una cuestión de análisis matemático e integral que es un problema de medida, de modo que existe abundantes funciones que no obstante no tener primitiva en funciones transcendentes, son perfectamente integrables.*



	A	B	C	D	E	F	G
1	R(m)	R2(m)	dt(s)	z0(m)			
2	1	0,05	0,1	1,5			
3	t(s)	z(m)	r	dz	v(m/s)	u(m/s)	Tiempo de drenado
4	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	0,01726957	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 1.- Aspecto de la hoja de cálculo cuando se calcula el nivel de un líquido que se está drenando.

dt sea mayor que cero.El programa realiza las iteraciones convenientes y devuelve la respuesta , que se refleja en la celda G4 del ejemplo, copia del valor correspondiente.Debe decirse que si se cambia algún dato del problema, debe volverse a invocar la herramienta *"Solver"* ya que , a diferencia de las funciones, no se actualiza de forma automática.

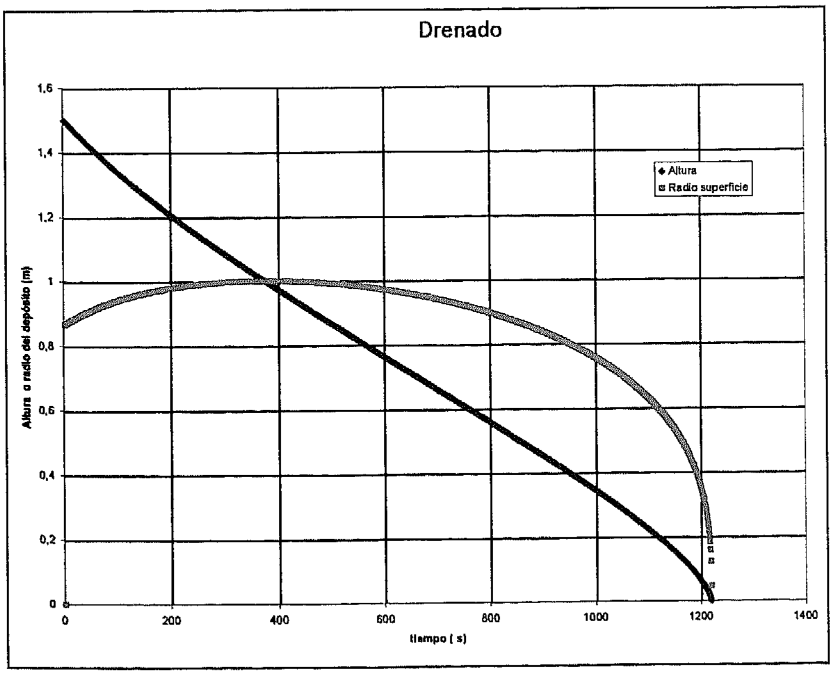


Figura 3. *Variación de la altura y del radio instantáneo frente al tiempo*

En el facsímil 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.De modo semejante puede estudiarse el drenado de depósitos cilíndricos horizontales, con el orificio de drenado dispuesto lateralmente, etc., o viceversa, los procesos de llenado.

5.-CONCLUSIONES

En el ejemplo, que es una muestra de lo que se puede hacer, ha quedado suficientemente claro como una problema que conceptualmente es sencillo y sin embargo sus solución implica un aparato matemático, muy complejo, posiblemente fuera del alcance exigible a un estudiante de primer ciclo, puede resolverse fácilmente por medio de la Hoja de cálculo.En su solución el estudiante queda liberado de la complejidad del cálculo analítico, sin embargo debe manejar con soltura el modelo matemático, comprender las aproximaciones que se hacen y saber interpretar los resultados, además , se encuentra en condiciones que introducir modificaciones ya en datos, ya en enunciado con respuesta casi inmediata.

Bibliografía

Backalov, N "**Métodos numéricos**". Paraninfo Madrid 1980.

Badger, W.L. y Banchero, J.T. "**Introducción a la ingeniería química**". Castillo Madrid 1972.

Calleja, G. , García Herruzo F y otros "**Introducción a la Ingeniería Química**". Síntesis Madrid 1999.

Demidovich, B.P. "**Métodos numéricos de Análisis**". Paraninfo Madrid 1980.Giles, Ranald V., Evett, Jack B. Liu, Cheng.

"**Mecánica de los Fluidos e Hidráulica**"(3ª Edición) Schaum . Mc Graw Hill. 1998

Hart, P.W. y Sommerfeld J.T. "**ChE Applications of elliptic integrals**". Che Summer, 1996.

Hildebrand, F.B. "**Métodos de cálculo para ingenieros**", Aguilar, Madrid, 1965.

Kranoschiokov, E.A., y Sukomiel, A.S. "**Problemas de termotransferencia**". Mir. Moscú 1975.Mac Cabe, W.I. y Smith, J.C. "**Operaciones básicas en ingeniería química**". Reverté, Barcelona 1981.(Hay ediciones posteriores en castellano)

Martínez Pons, J.A. "**La hoja de cálculo como auxiliar en la Docencia de la Física**". CPR. Arganda. 1999

Shield, F. B., "**Análisis numérico**". Schaum Series. Mc Graw Hill, Mexico, 1968.

Volkov, E.A., "**Métodos Numéricos**". Mir Moscú 1990.