





# Introducción al modelamiento y simulación en Ingeniería Química



# Introducción al modelamiento y simulación en Ingeniería Química

Nicolás Ríos Ratkovich

Juan Pablo Valdés

Hugo Pineda

Miguel Daza

Andrés Pinilla

Deisy Becerra

Edwar Pérez

Luis Ramírez

Adriana Echeverri

Jéssica Gómez

Daniela Bobadilla

Isabel Cuervo

Alejandro Sierra

Universidad de los Andes

Facultad de Ingeniería

Departamento de Ingeniería Química

Nombres: Ríos Ratkovich, Nicolás, autor. | Valdés Ujueta, Juan Pablo, autor. | Pineda Pérez, Hugo Alejandro, autor. | Daza Gómez, Miguel Andrés Mauricio, autor. | Pinilla Angarita, Jorge Andrés, autor. | Becerra Tuta, Deisy Steffania, autora. | Pérez García, Edwar Leonardo, autor. | Ramírez Cerquera, Luis Alfonso, autor. | Echeverri Romero, Adriana, autora. | Gómez Hernández, Jéssica María, autora. | Bobadilla Romero, Daniela, autora. | Cuervo Páez, Isabel Tatiana, autora. | Sierra Castañeda, Alejandro, autor.

Título: Introducción al modelamiento y simulación en Ingeniería Química.

Descripción: Bogotá: Universidad de los Andes, Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Química, Ediciones Uniandes, 2020. | 1 recurso en línea (xxi, 143 páginas)

Identificadores: ISBN 9789587749304 (electrónico)

Materias: Ingeniería química – Modelos matemáticos | Ingeniería química – Métodos de simulación | MATLAB (Programa para computador)

Clasificación: CDD 660.0151–dc23

SBUA

Primera edición: mayo del 2020

© Nicolás Ríos Ratkovich, Juan Pablo Valdés Ujueta, Hugo Alejandro Pineda Pérez, Miguel Andrés Mauricio Daza Gómez, Jorge Andrés Pinilla Angarita, Deisy Steffania Becerra Tuta, Edwar Leonardo Pérez García, Luis Alfonso Ramírez Cerquera, Adriana Echeverri Romero, Jéssica María Gómez Hernández, Daniela Bobadilla Romero, Isabel Tatiana Cuervo Páez y Alejandro Sierra Castañeda

© Universidad de los Andes, Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Química  
Ediciones Uniandes  
Calle 19 n.º 3-10, oficina 1401  
Bogotá, D. C., Colombia  
Teléfono: 339 4949, ext. 2133  
<http://ediciones.uniandes.edu.co>  
[infeduni@uniandes.edu.co](mailto:infeduni@uniandes.edu.co)

ISBN *e-book*: 978-958-774-930-4

Corrección de estilo: Andrea del Pilar Sierra  
Diagramación interna: Precolombi EU, David Reyes  
Diagramación cubierta: Neftalí Vanegas  
Imagen cubierta: “Grafico con MATLAB di una superficie”, por Opisthofulax, en [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Grafico\\_con\\_MATLAB\\_di\\_una\\_superficie.png](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Grafico_con_MATLAB_di_una_superficie.png), bajo licencia Creative Commons Attribution-Share Alike 4.0 International

Todos los derechos reservados. Esta publicación no puede ser reproducida ni en su todo ni en sus partes, ni registrada en o transmitida por un sistema de recuperación de información, en ninguna forma ni por ningún medio, sea mecánico, fotoquímico, electrónico, magnético, electro-óptico, por fotocopia o cualquier otro, sin el permiso previo por escrito de la editorial.

Universidad de los Andes | Vigilada Mineducación.

Reconocimiento como universidad: Decreto 1297 del 30 de mayo de 1964.

Reconocimiento de personería jurídica: Resolución 28 del 23 de febrero de 1949, Minjusticia.

Acreditación institucional de alta calidad, 10 años: Resolución 582 del 9 de enero del 2015, Mineducación

## Agradecimientos

*A Esteban Guerrero, asistente-docente*





# Contenido

<b>Lista de tablas</b>	XIII
<b>Lista de figuras</b>	XV
<b>Lista de gráficas</b>	XVII
<b>Introducción</b>	XIX
<b>Introducción a MATLAB®</b>	1
Apariencia	1
Variables	2
Operadores	3
Funciones y <i>scripts</i>	4
<b>Sistemas de ecuaciones no-lineales</b>	5
Sistemas de una variable	5
Método numérico de sustitución sucesiva	5
Método numérico de Wegstein	8

Método numérico de Newton-Raphson	11
Método numérico de bisección	14
Método numérico de falsa posición	17
Método numérico secante	20
Ejemplo IQUI	22
Sistemas de múltiples variables	27
Método numérico de sustitución sucesiva multivariable	27
Método numérico de Wegstein multivariable	30
Método numérico de Newton-Raphson multivariable	32
Método numérico de Broyden	35
Método numérico de Sherman-Morrison	38
Ejemplo IQUI	42
<b>Sistemas de ecuaciones lineales</b>	<b>53</b>
Métodos iterativos	56
Método numérico de Gauss-Seidel	56
Método numérico de Jacobi	58
Ejemplo IQUI	61
Métodos algebraicos	65
Método eliminación de Gauss	65
Método eliminación de Gauss-Jordan	69
Ejemplo IQUI	72
<b>Sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE)</b>	<b>79</b>
Condiciones iniciales	81
Método de Euler (Runge-Kutta de primer orden)	81
Método Runge-Kutta de segundo orden	83
Método Runge-Kutta de cuarto orden	86
Método de Taylor de segundo orden	88
Método de Taylor de cuarto orden	91
Ejemplo IQUI	93
Condiciones de frontera	103
Sistemas de una condición de frontera	103
Sistemas de dos o mas condiciones de frontera	106
Ejemplo IQUI	109

<b>Sistemas de ecuaciones algebro-diferenciales (DAE)</b>	113
Solución de sistemas DAE de índice 1	114
Solución de sistemas DAE de índice 2 o superior	119
<b>Sistemas de ecuaciones diferenciales parciales (PDE)</b>	121
Método de diferencias finitas	122
Ejemplo IQUI	125
<b>MESH</b>	131
Algoritmo de Thomas	134
<b>Referencias</b>	143
<b>Los autores</b>	145



# Lista de tablas

Tabla 1.	Valores de las constantes de la ecuación de presión de saturación para cada componente	136
Tabla 2.	Información general de los flujos	137
Tabla 3.	Suposición de perfil de temperatura para cada etapa	137
Tabla 4.	Presión de saturación (Pa) de cada componente en el separador	137
Tabla 5.	Constante de equilibrio ( $K_{ij}$ ) de cada componente en el separador	138
Tabla 6.	Matriz tridiagonal	138
Tabla 7.	Valores de $D_i$ para cada etapa	138
Tabla 8.	Solución de matriz de metano a partir del algoritmo de Thomas	139
Tabla 9.	Matriz después de eliminación	139
Tabla 10.	Vector respuesta $q_i$	139
Tabla 11.	Solución de matriz $q_i$ después de eliminación	140
Tabla 12.	Concentración de metano en cada etapa	140
Tabla 13.	Concentraciones por componente en cada etapa	140
Tabla 14.	Composiciones $x$ normalizadas	141
Tabla 15.	Composiciones $y$ normalizadas	141

Tabla 16.	Perfil de presión en cada etapa después de iterar	142
Tabla 17.	Composiciones $x$ normalizadas en todas las etapas	142
Tabla 18.	Composiciones $y$ normalizadas en todas las etapas	142

# Lista de figuras

Figura 1.	Esquema del área de modelamiento y simulación a través de herramientas computacionales	xx
Figura 2.	Interfaz general del <i>software</i> MATLAB®, versión 2016	2
Figura 3.	Resultados del ejemplo IQUI para la ecuación de Colebrook	27
Figura 4.	Proceso de transferencia de masa con el método Sherman-Morrison	39
Figura 5.	Reacciones para la producción del m-xileno	42
Figura 6.	Ejemplo de una matriz	54
Figura 7.	Diferencias entre los métodos iterativos de (a) Gauss-Seidel y (b) Jacobi	59
Figura 8.	Método de eliminación de Gauss ilustrado paso por paso	67
Figura 9.	Método de eliminación de Gauss-Jordan ilustrado paso por paso	70
Figura 10.	Circuito eléctrico del ejemplo	73
Figura 11.	Matriz de masa incorrecta	115
Figura 12.	Matriz de masa correcta	115
Figura 13.	Esquema del ejemplo IQUI	126
Figura 14.	Discretizaciones consideradas para el ejemplo IQUI	126

Figura 15.	Modelo general de una etapa de equilibrio a contracorriente	133
Figura 16.	Modelo de una torre de destilación en cascada con arreglo de etapas a contracorriente	134
Figura 17.	Sistema de ecuaciones tridiagonal para las ecuaciones $M$ modificadas	135



# Lista de gráficas

Gráfica 1.	Representación del método de sustitución sucesiva	6
Gráfica 2.	Representación del método de Wegstein	8
Gráfica 3.	Representación del método de Newton-Raphson	11
Gráfica 4.	Representación del método de bisección	14
Gráfica 5.	Representación del método de falsa posición	17
Gráfica 6.	Representación del método secante	20
Gráfica 7.	Resultados por el método de Wegstein multivariable	51
Gráfica 8.	Resultados por el método de Newton-Raphson multivariable	51
Gráfica 9.	Procedimiento iterativo, (a) convergencia, (b) divergencia	55
Gráfica 10.	Solución del perfil de $y$ por el método de Euler (Runge-Kutta de primer orden)	83
Gráfica 11.	Solución del perfil de $y$ por el método de Runge-Kutta de segundo orden	85
Gráfica 12.	Solución del perfil de $y$ por el método de Runge-Kutta de cuarto orden	88
Gráfica 13.	Solución del perfil de $y$ por el método de Taylor de segundo orden	91