

Cuadratura. Ejemplo de aplicación. 2020

Prof.: Dr. Alejandro S. M. Santa Cruz

J.T.P.: Dr. Juan Ignacio Manassaldi

Aux. 1^{ra}: Ing. Amalia Rueda

- En simulación de procesos químicos, la entalpía de un gas ideal se calcula tomando como valor de referencia su calor de formación.
- Como sabemos la entalpía de un gas ideal solo depende de la temperatura, por lo su la entalpía a la presión y temperatura actual corresponde a:

$$H_{T,P}^{IG} = \Delta H_f^0 + \int_{298.15}^T c_p^{IG} dT$$

- El calor de formación (ΔH_f^0) y la capacidad calorífica (C_p^{IG}) se obtienen de las llamadas Bases de datos de compuestos puros (PCD - Pure Compound Database).
- Existen numerosas funciones matemáticas que relacionan la capacidad calorífica de un gas ideal con la temperatura.
- Para algunas PCD la función $C_p(T)$ no es integrable analíticamente.
- Para su implementación los simuladores de procesos tienen programados internamente algoritmos de integración numérica.

- Al ser de acceso libre, el software Chemsep (utilizado en destilación) contiene una base de datos ampliamente difundida.
- Para algunos compuestos, contiene la siguiente función para representar la capacidad calorífica como gas ideal:

$$cp^{IG} = a + \exp\left(\frac{b}{T} + c + dT + eT^2\right)$$

A partir de los siguientes datos calcular la entalpía del dióxido de carbono a 500 K.

$$H_{T,P}^{IG} = \Delta H_f^0 + \int_{298.15}^T cp^{IG} dT$$

$$cp^{IG} = a + \exp\left(\frac{b}{T} + c + dT + eT^2\right)$$

$$\Delta H_f^0 = -3.93510 \times 10^8 \frac{J}{kmol}$$

$$cp^{IG} \left[\frac{J}{kmol K} \right]$$

$$a = 28933$$

$$b = -494.28$$

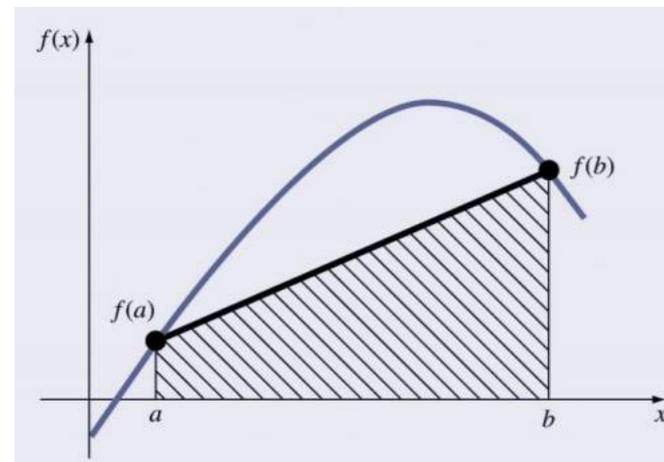
$$c = 10.658$$

$$e = 3.3268 \times 10^{-9}$$

$$d = 2.7375 \times 10^{-5}$$

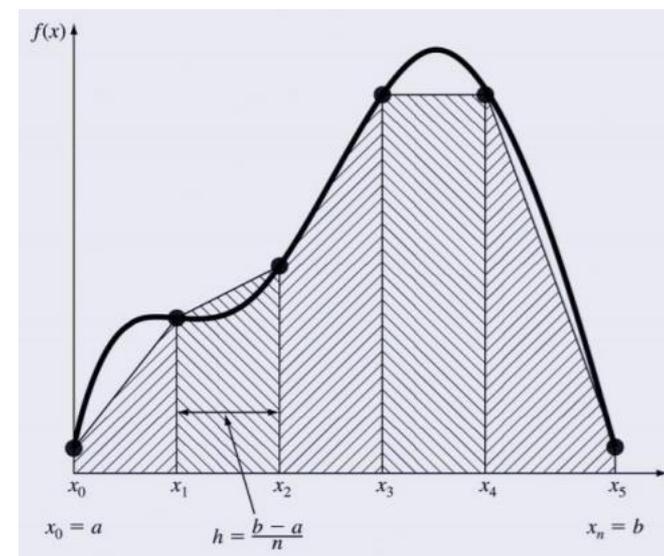
- Fórmula de aplicación simple:

$$I \cong \underbrace{(b-a)}_{\text{Width}} \underbrace{\frac{f(a)+f(b)}{2}}_{\text{Average Height}}$$



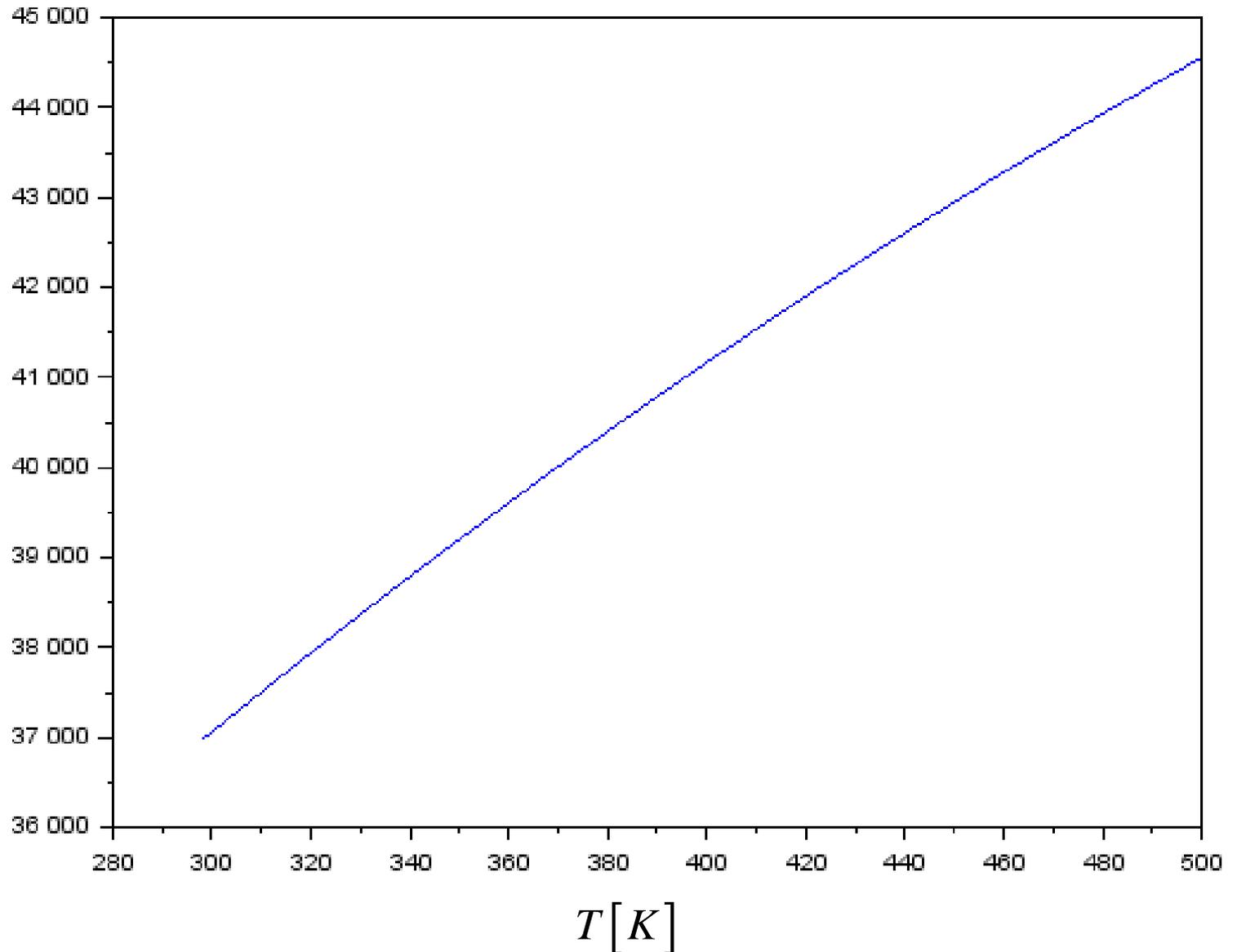
- Fórmula de aplicación compuesta:

$$I \cong \underbrace{(b-a)}_{\text{Width}} \underbrace{\frac{f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)}{2n}}_{\text{Average Height}}$$



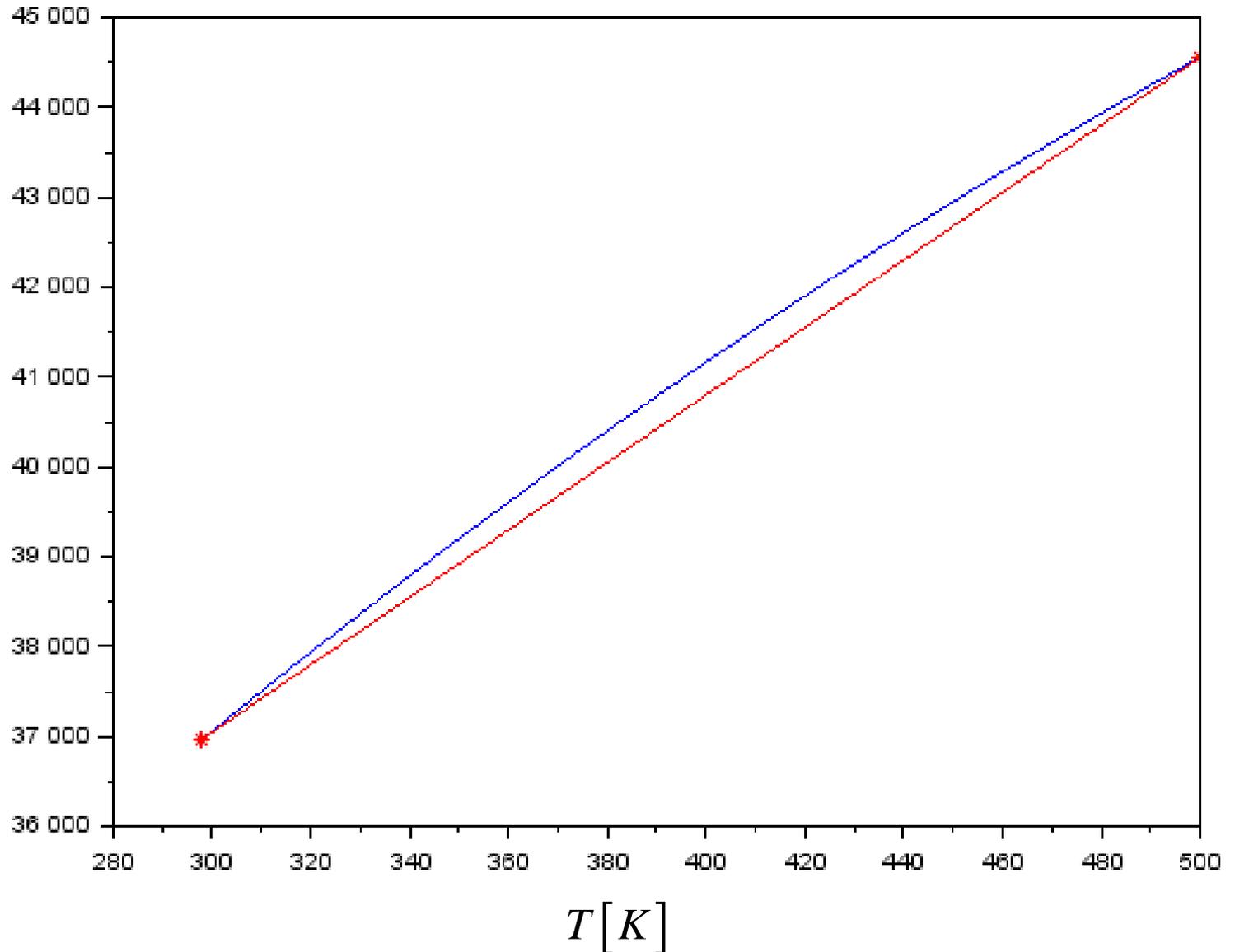
$$cp^{IG}$$

$$\left[\frac{J}{kmol K} \right]$$

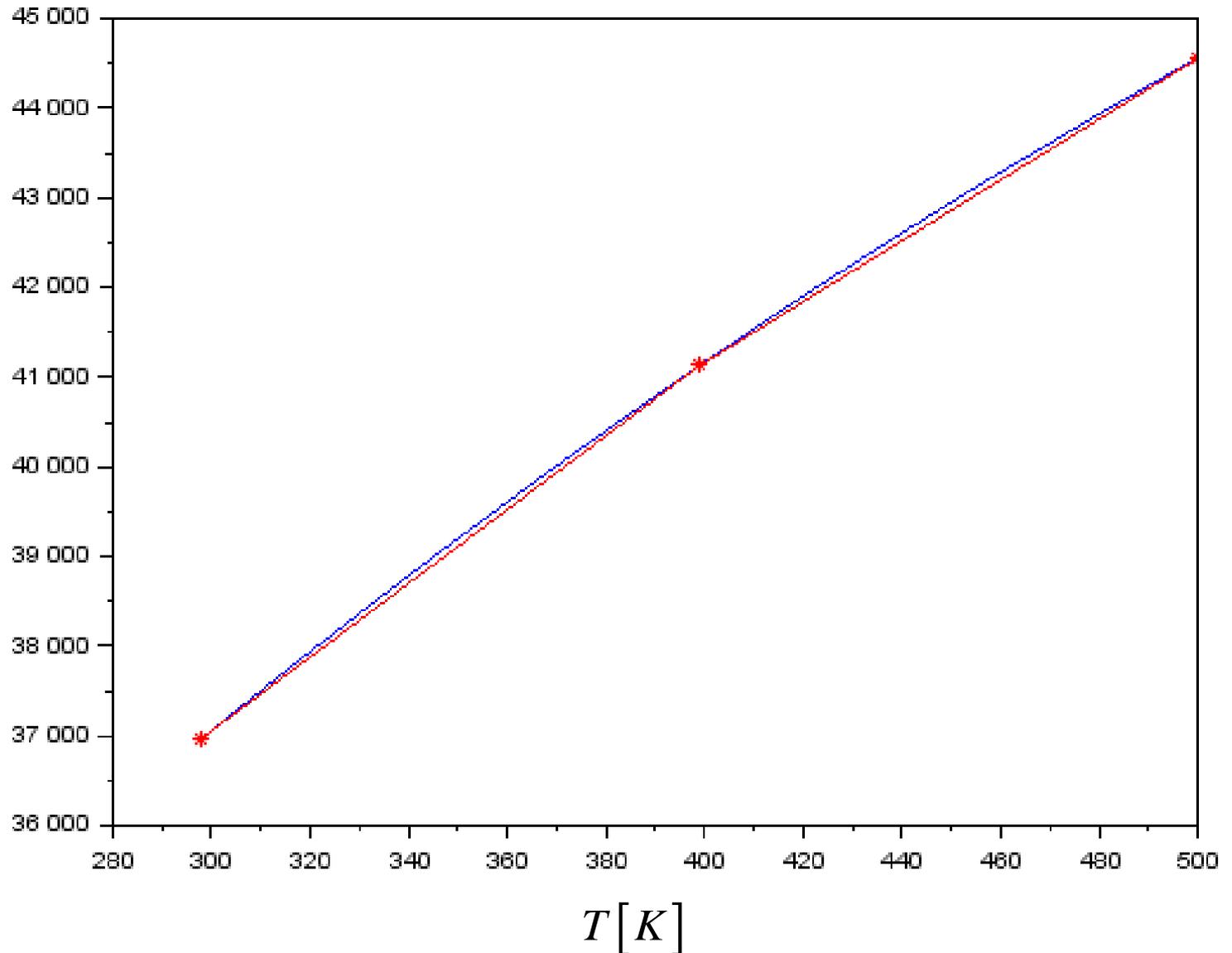


$$cp^{IG}$$

$$\left[\frac{J}{kmol K} \right]$$

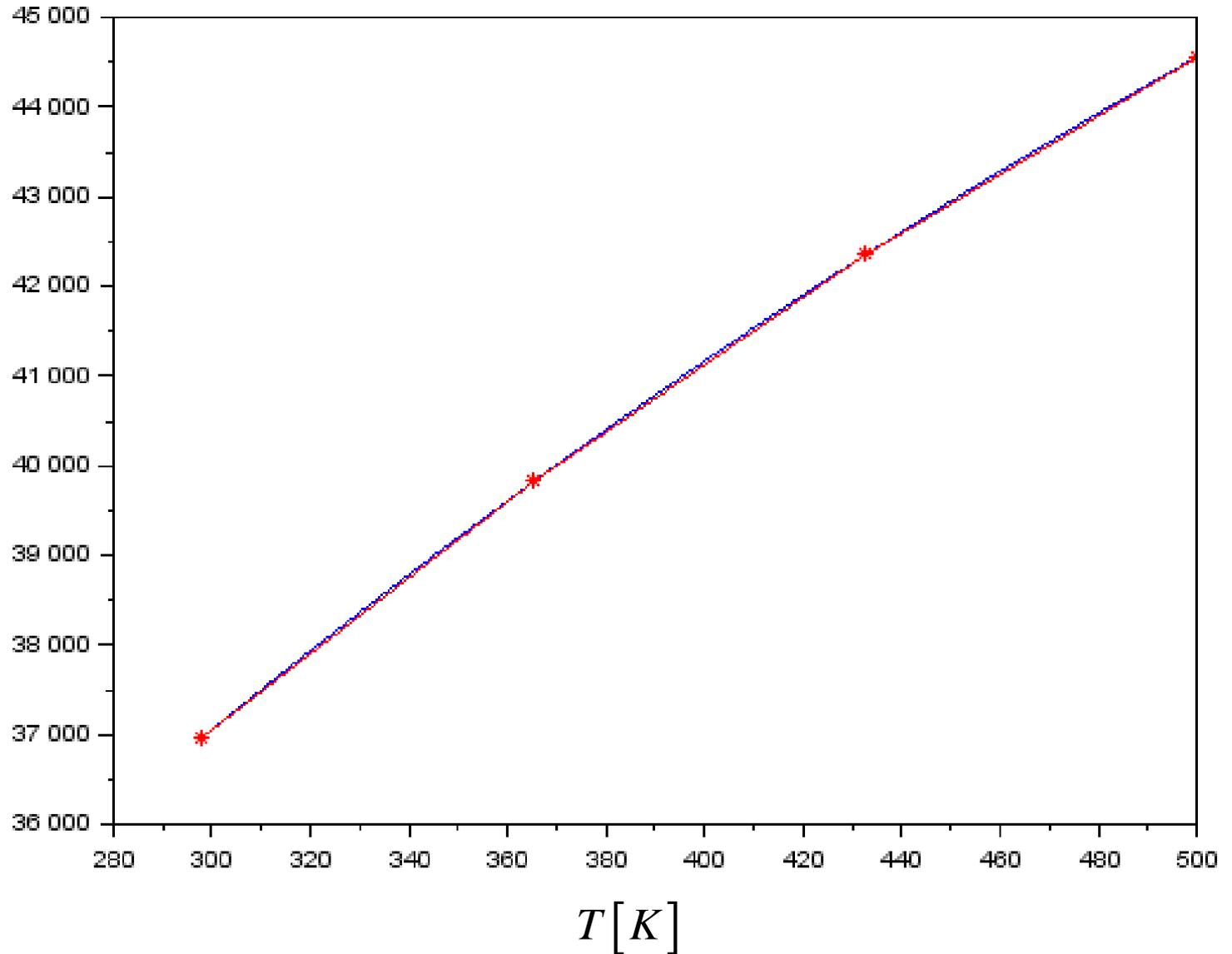


$$cp^{IG} \left[\frac{J}{kmol K} \right]$$



$$cp^{IG}$$

$$\left[\frac{J}{kmol K} \right]$$



$$H_{T,P}^{IG} = \Delta H_f^0 + \int_{298.15}^T cp^{IG} dT$$

$$cp^{IG} = a + \exp\left(\frac{b}{T} + c + dT + eT^2\right)$$

$$I \cong \underbrace{(b-a)}_{\text{Width}} \underbrace{\frac{f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)}{2n}}_{\text{Average Height}}$$

$$\Delta H_f^0 = -3.93510 \times 10^8 \frac{J}{\text{kmol}}$$

$$cp^{IG} \left[\frac{J}{\text{kmol K}} \right]$$

$$a = 28933$$

$$b = -494.28$$

$$c = 10.658$$

$$e = 3.3268 \times 10^{-9}$$

$$d = 2.7375 \times 10^{-5}$$

$$H_{500K}^{IG} = -385237.884 \frac{J}{\text{mol}}$$

```
function y=CpIG(T, a, b, c, d, e)
    y = a + exp(b./T + c + d*T + e*T.^2)
endfunction

Hf=-3.93510e8; //J/(kmol)
//CPIG J/(kmol.K)
a=28933;
b=-494.28;
c=10.658;
d=-0.000027375;
e=3.3268e-9;

n=3;
Ti=298.15;
Tf=500;
T=linspace(Ti,Tf,n+1);
Cp=CpIG(T,a,b,c,d,e);
H= Hf + (Tf-Ti)*(Cp(1) + 2*sum(Cp(2:n)) + Cp(n+1))/(2*n);
```