3. GAIA

KALKULU-TEKNIKAK

GAI HAU IKASTEAN GAITASUN HAUEK LORTU BEHARKO DITUZU:

1. Koordenatu logaritmikoetan emandako grafikoak irakurtzea.
2. Zenbakizko metodoen bidez ekuazio eta ekuazio-sistemak ebaztea.
3. Metodo grafikoarekin eta gehikuntza-finituen bidez integralak ebaztea.
4. Batez besteko balioak kalkulatzea.

Ingeniaritza kimikoan, hainbat kasutan ebazpen zaileko ekuazio-sistemak eta integralak agertzen dira. Era berean, hainbat grafiko berezi erabiltzen dira ekuazioen erabilera nekeza saihesteko.

3.1 ADIERAZPEN GRAFIKOAK

Ingeniaritza kimikoan sarri erabiltzen dira adierazpen grafikoak, eta haietako batzuk ez dira ohiko koordenatu cartesiar linealean emanak. Besteak beste, koordenatu logaritmikoak, erdilogaritmikoak eta diagrama triangeluarrak erabiltzen dira. Azken horiek 14. gaian azalduko dira.

3.1.1 Koordenatu logaritmikoak

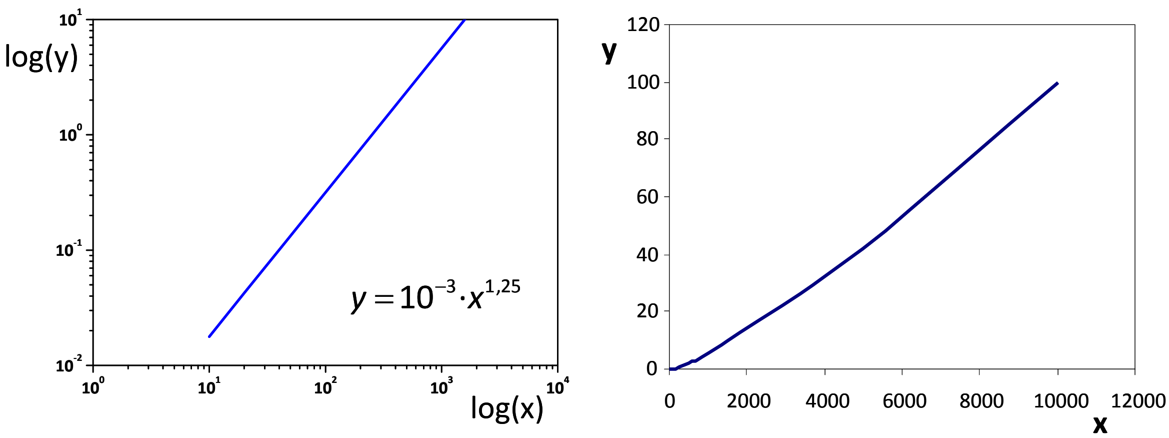
Irudikatu beharreko ekuazioak itxura hau badu:

$$y = a \cdot x^b \tag{3.1}$$

koordenatu cartesiar linealetan adierazten bada, $b \neq 0$ edo $b \neq 1$ bada, lerro ez-zuzena da. Lerro zuzenekin jardutea ez-zuzenekin lan egitea baino erosoagoa denez, ekuazioaren logaritmo hamartarrak hartzen badira,

$$\log(y) = \log(a) + b \cdot \log(x) \tag{3.2}$$

funtzioa, koordenatu logaritmikotan, b maldako lerro zuzen bihurtzen da. Abzisen ardatzean, log(x) irudikatzen da, eta, ordenatuen ardatzean, log(y) irudikatzen da. 3.1 Irudian, $y = 10^{-3} \cdot x^{1,25}$ ekuazioa adierazi da koordenatu logaritmikotan. Ohartzen bagara, ordenatu zein abzisen zatiketan, 10^0 eta 10^1 arteko distantzia, 10^3 eta 10^4 artekoa edo 10^{-2} eta 10^{-1} artekoa berdinak dira. Gainera, $1 \cdot 10^0$ eta $2 \cdot 10^0$ arteko luzera $4 \cdot 10^0$ eta $5 \cdot 10^0$ artekoa baino handiagoa da; proportzioa zenbakiaren logaritmo hamartarrak ematen du.



3.1 Irudia. $y = 10^{-3} \cdot x^{1,25}$ **ekuazio potentzialaren adierazpen grafikoa, koordenatu logaritmikotan (ezkerrean) eta koordenatu cartesiarrean (eskuinean) adierazia**.

3.2 EKUAZIOAK EBAZTEKO TEKNIKAK

Hainbat kasutan, ebazpen zaileko ekuazioak agertzen dira; beste batzuetan aldagai ezezaguna askatzea ezinezkoa da. Horrelako kasuak ebazteko, bi metodo azalduko dira, adibide baten bitartez.

Demagun $y = f(x) = e^{(0,2\cdot x)} - \left(\frac{12}{x}\right) + 2\cdot x^2 = 0$ ekuazioaren erroa (x_{erroa}) aurkitu nahi dela [0,5, 5] tartean.

3.2.1 Regula-Falsi metodoa

$x = x_{erroa}$ denean funtzioak zero balio badu, erroa baino balio txikiago eta handiagoarentzat kalkulatzean, funtzioa zeinuz aldatuko da. Funtzioa zeinuz aldatuko den muturreko bi balio hartuko dira, $x_{ezker-m}$ eta $x_{eskuin-m}$. Hala, x_{erroa} [$x_{ezker-m}$, $x_{eskuin-m}$] tartean dago.
Tarte horren barruan dagoen tarteko balio berria kalkulatuko da:

$$x_{tartea} = x_{ezker-m} - \frac{x_{eskuin-m} - x_{ezker-m}}{f\left(x_{eskuin-m}\right) - f\left(x_{ezker-m}\right)} \cdot f\left(x_{ezker-m}\right) \tag{3.3}$$

Puntu horretan, $f(x_{tartea})$ funtzioaren balio berria kalkulatzen da, eta zeinuaren arabera, tartea aldatu egingo da:

[$x_{ezker-m}$, x_{tartea}], baldin eta $f(x_{tartea}) > 0$ bada

[x_{tartea}, $x_{eskuin-m}$], baldin eta $f(x_{tartea}) < 0$ bada.

Hala, tartea estutu egin da x_{erroa}-ren inguruan. Urrats horiek behin eta berriz errepikatzen dira nahi den zehaztasuna lortu arte. Ondoren azaltzen da adibidearen erroa aurkitzeko egin diren urratsen eboluzioa.

urratsa	$x_{tartekoak}$	$f(x_{tartea})$	iruzkinak
1	0,5	-22,395	Hasierako $x_{ezker-m}$
2	5	50,318	Hasierako $x_{eskuin-m}$
3	1,886	2,209	Tarte berria [0,5, 1,886]
4	1,762	0,816	Tarte berria [0,5, 1,762]
5	1,717	0,319	Tarte berria [0,5, 1,717]
6	1,700	0,127	Tarte berria [0,5, 1,700]
7	1,693	0,051	Tarte berria [0,5, 1,693]
8	1,691	0,021	Tarte berria [0,5, 1,691]
9	1,690	0,008	Tarte berria [0,5, 1,690]

Beraz, zehaztasun-maila onargarriarekin, ekuazioaren erroa 1,690 da.

3.2.2 Newton-Raphson-en metodoa

Metodo hau deribagarriak diren funtzioekin erabil daiteke soilik. Kalkulua hasteko, lehen balio bat hartu behar da ($x_{hasiera}$; adibidean, 0,5), eta funtzioak eta funtzioaren deribatuak puntu horretan hartzen dituzten balioekin, x_{erroa}-tik hurbilago dagoen $x_{bukaera}$ kalkulatzen da; $x_{bukaera}$ hurrengo urratseko $x_{hasiera}$ gisa erabiliko da. Prozedurari jarraitzen zaio $x_{hasiera} = x_{bukaera}$ izan arte.
Metodo hau deribagarriak diren funtzioekin erabil daiteke soilik. Kalkulua hasteko, lehen balio bat hartu behar da ($x_{hasiera}$; adibidean, 0,5), eta funtzioak eta funtzioaren deribatuak puntu horretan hartzen dituzten balioekin, x_{erroa}-tik hurbilago dagoen $x_{bukaera}$ kalkulatzen da; $x_{bukaera}$ hurrengo urratseko $x_{hasiera}$ gisa erabiliko da. Prozedurari jarraitzen zaio $x_{hasiera} = x_{bukaera}$ izan arte.

$$\left(x_{k+1\_urratsa}\right) = \left(x_{k\_urratsa}\right) - \frac{f\left(x_{k\_urratsa}\right)}{\left[\frac{df\left(x_{k\_urratsa}\right)}{dx}\right]} \tag{3.4}$$

Taulan agertzen da prozesuaren eboluzioa.

urratsa	$x_{hasiera}$	$f(x_{hasiera})$	$f'(x_{hasiera})$	$x_{bukaera}$
1	0,5	-22,395	50,221	0,946
2	0,946	-9,688	17,437	1,502
3	1,502	-2,132	11,599	1,685
4	1,685	-0,038	11,246	1,689
5	1,689	0,000	11,243	1,689

Zehaztasun-maila onargarriarekin, ekuazioaren erroa 1,689 da.

3.2.3 Saiakuntza- eta errore-metodoa

Metodo honetan, balio bat hartzen da, funtzioak puntu horretan duen balioa kalkulatzen da eta zero (0) den frogatzen da; hala bada, emaitza zuzena da, eta ez bada, beste balio bat hartu behar da, $f(x)$ = 0 izan arte. Metodo honen desabantaila nagusia hurrengo urratserako hasierako baliorik ez ematea da. Taula honetan agertzen da adibidearen ebazpenaren eboluzioa.

urratsa	x	f(x)	iruzkinak
1	0,5	-22,395	Hasierako balioa
2	1	-8,779	Norabide egokia, errorea txikituaz doalako.
3	2,0	3,492	$x_{erroa} \in [1, 2]$
4	1,5	-2,150	$x_{erroa} \in [1{,}5, 2]$
5	1,75	0,687	$x_{erroa} \in [1{,}5, 1{,}75]$
6	1,80	1,247	Norabide okerra
7	1,60	-1,003	$x_{erroa} \in [1{,}6, 1{,}75]$
8	1,70	0,126	$x_{erroa} \in [1{,}6, 1{,}7]$
9	1,65	-0,437	$x_{erroa} \in [1{,}65\ 1{,}7]$
10	1,675	-0,155	$x_{erroa} \in [1{,}675\ 1{,}7]$
11	1,690	0,014	Emaitza onargarria

Zehaztasun-maila onargarriarekin, ekuazioaren erroa 1,690 da.

3.2.4 Saiakuntza- eta errore-metodoa Excel programaz baliatuz[1]

Office software-paketeko Excel kalkulu-orria erabil daiteke horrelako ekuazioak ebazteko. $y = f(x) = e^{(0,2\cdot x)} - \left(\frac{12}{x}\right) + 2\cdot x^2 = 0$ adibidearekin jarraituz, $f(x_{erroa})$ = 0 egiten duen x_{erroa} lortu behar da.

Demagun A zutabeko bigarren lerroan erroaren inguruko x-en balio bat idazten dela (A2). Horren aldameneko B zutabearen bigarren lerroan (B2), funtzioak A2 puntuan duen balioa idatziko da:

exp(0,2*A2)-(12/A2)+2*potencia(A2;2).

Orain, B2 = 0 baldintza betetzeko, A2 gelaxkan hasierako balio bat esleituko da. Adibidez, A2 = 2 hartuko da.

Une honetan, B2 gelaxkaren balioa azaltzen da pantailan (9,389).

TRESNAK > Xede-bilaketa sakatu ondoren, elkarrizketa-koadroa zabalduko da, eta hemen azaldutako balioez bete behar da:

[1] Gaztelaniazko softwarea erabili da adibide honetan.

Galdera	Bete beharrekoa
Gelaxka honetan:	B2
Lortu beharreko balioa:	0
Gelaxka hau aldatu:	A2

Sakatu ***Ados***, eta programak A2-ko balioak probatzen ditu B2 zero egin arte. Bukatzean, sakatu ***Ados***, eta A2 eta B2 gelaxketan funtzioaren erroa eta *f(x)* balioa agertzen dira, hurrenez hurren (adibide honetan 1,6888 eta 0,00033). Beraz, ekuazioaren erroa 1,689 dela har daiteke.

Programa hau erabili ahal izateko, errotik hurbil dagoen baliotik hasi behar da.

3.2.5 Ekuazio-sistemen ebazpena

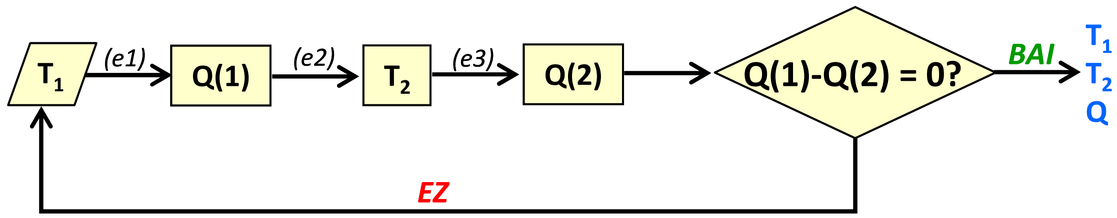
Sarri, zuzeneko ordezkapena ezinezkoa edo oso zaila duten ekuazio-sistemak ebatzi behar dira. Horrelako sistemak ebazteko, Saiakuntza-froga iterazio-metodoa erabiltzen da. Metodo honek ez du ematen hurrengo urratserako erabiliko den balioaren berri. Har dezagun, adibidez, bero-trukagailuen diseinua egitean agertzen den egoera:

$$Q = 10\cdot(90 - T_1) \qquad \text{(e1)}$$

$$Q = 12\cdot(T_2 - 20) \qquad \text{(e2)}$$

$$Q = 8{,}8\cdot\frac{(T_1 - T_2)}{\ln\left(\frac{T_1}{T_2}\right)} \qquad \text{(e3)}$$

Iterazio-kalkulua egiteko prozeduraren fluxu-diagrama beheko irudian agertzen da. T_1 esleitzen da, eta (e1) ekuazioan ordezkatzean Q(1) lortzen da. Hori (e2) ekuazioan ordezkatuz, T_2 kalkulatuko litzateke. T_1 eta T_2 balioekin Q(2) kalkulatzen da, eta ezinbesteko baldintza betetzen duen frogatzen da, hau da, bi bideetatik kalkulatutako Q (Q1 eta Q2) berdinak diren arakatzen da. Hala bada, kalkulatutako balioak egokiak dira; hala ez bada, beste T_1 esleitu, eta prozedura berriro egin behar litzateke.



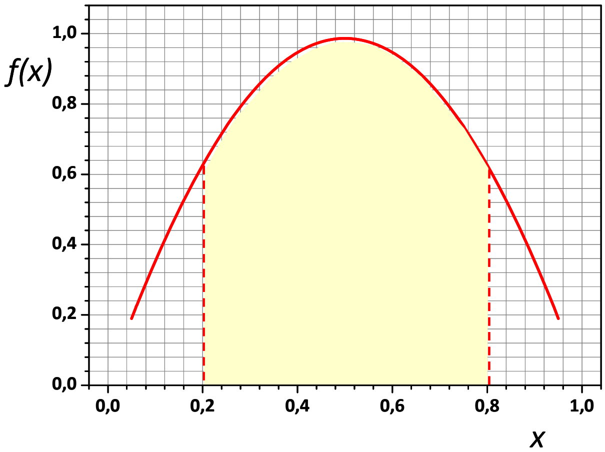
Adibidea ebazteko prozeduraren eboluzioa taula honetan agertzen da.

T_1	Q*(1)*	T_2	Q*(2)*	Q*(1)* – Q*(2)*	iruzkinak
60	300	45	458,8	-158,84	Abiapuntua
50	400	53,3	454,5	-54,51	Errotik hurbilago
45	450	57,5	448,8	1,24	Errotik hurbilago; zeinuz aldatu duelako hurrengo urratsean $T_1 > 45$ hartuko da
45,2	448	57,3	449,0	-1,03	hurrengo urratsean $45 < T_1 < 45{,}2$ hartuko da
45,1	449	57,4	448,9	0,11	hurrengo urratsean $45{,}1 < T_1 < 45{,}2$ hartuko da
45,11	448,9	57,4	448,9	-0,01	Emaitza onargarria

Ondorioz, sistema honen emaitza $(T_1,T_2,Q) = (45{,}11,\ 57{,}4,\ 448{,}9)$ da.

3.3 INTEGRALAK EBAZTEKO TEKNIKAK

Integralen ebazpen analitikoa astuna denean, numerikoki zein grafikoki ebatz daitezke. Integral definituen definizioaren arabera, $I = \int_{x_1}^{x_n} f(x)\cdot dx$ integralaren balioa x_1 eta x_n tarteko *f(x)* vs. *x* kurbaren azpiko azalera da. 3.2 irudian $f(x) = 4\cdot x\cdot(1 - x)$ funtzioa integratzen da, x_1 = 0,2 eta x_n = 0,8 muturren artean; horren emaitza ilundutako azalera da. Ondoren, integralaren hurbilketazko ebazpenerako teknikak azalduko dira.



3.2 irudia. **Integralaren esangura**.

3.3.1 Gehikuntza finituen metodoa (laukizuzenen metodoa)

Kurbaren azpialdea laukizuzenen batuketaz ordezkatzen da; hala, integralaren balioa laukizuzenen azaleren batuketaz lortzen da. x_1-x_n integrazio-tartea (n-1) azpitartetan banatzen da; guztiek (x_1-x_n)/(n-1) neurtzen dute (laukizuzen bakoitzaren oinarria, alegia). Laukizuzen bakoitzaren altuera $\left(\frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2}\right)$ izango da. Zenbat eta txikiagoa izan laukizuzenaren oinarria, orduan eta zehatzagoa da integralaren kalkulua.

Integrala, beraz, ondoko adierazpena bihurtzen da:

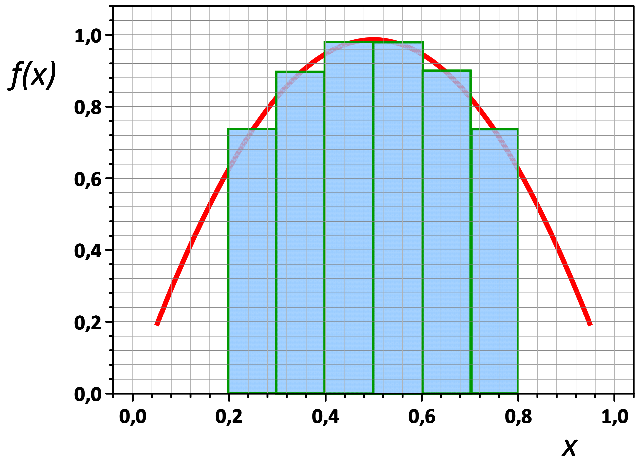
$$I = \int_{x_1}^{x_n} f(x)\cdot dx \approx \sum_{i=1}^{n-1} \left(\frac{x_1 - x_n}{n-1}\right)\cdot\left(\frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2}\right) \qquad (3.5)$$

Adibidez, 3.3 irudian agertzen da integrazio-metodo honen azalpen grafikoa. Ondoren, adibideko integrala ebazteko egin den prozedura azaltzen da.

x	*f(x)*	Δx = oinarria	$\left(\frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2}\right)$ = altuera	azalera
0,2	0,64	-	-	-
0,3	0,84	0,1	0,74	0,074
0,4	0,96	0,1	0,9	0,09
0,5	1	0,1	0,98	0,098
0,6	0,96	0,1	0,98	0,098
0,7	0,84	0,1	0,9	0,09
0,8	0,64	0,1	0,74	0,074

Ebazteko, laukizuzenen oinarria 0,1ekoa hartu da.

Laukizuzen guztien azalerak baturik, I ≈ 0,524 lortzen da (ebazpen analitikoarekin 0,527 lortzen da).

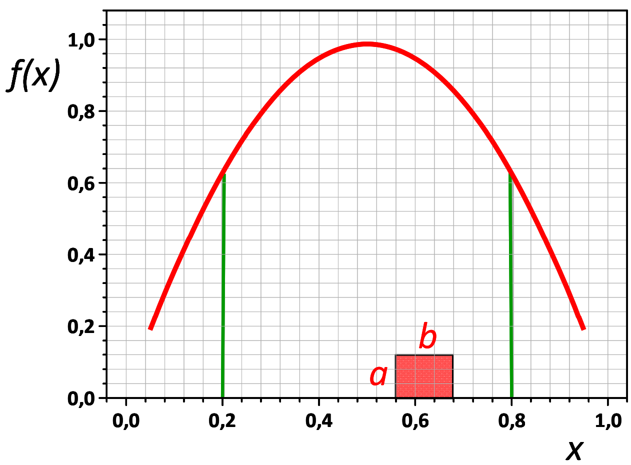


3.3 irudia. $I = \int_{0,2}^{0,8} 4 \cdot x \cdot (1-x) \cdot dx$ **integralaren ebazpena laukizuzenen metodoaz, hauen oinarria 0,1 hartuta**.

3.3.2 Metodo grafikoa

Behin *f(x)* vs. *x* funtzioa, x_1 eta x_n tartean, orri laukidunean irudikatuta, *oinarri-azalera* aukeratzen da ($a \cdot b$); hala, kurbaren azpialdean zenbat oinarri-azalera dauden (N) zenbatzen da. Integrala, beraz, adierazpen hau bihurtzen da:

$$I = \int_{x_1}^{x_n} f(x) \cdot dx \approx (a \cdot b) \cdot N \tag{3.6}$$



3.4 irudia. $I = \int_{0,2}^{0,8} 4 \cdot x \cdot (1-x) \cdot dx$ **integralaren ebazpen grafikoa egiteko oinarri-azalera**.

Prozedura honetan, zenbat eta oinarri-azalera txikiagoa aukeratu, orduan eta zehatzagoa da kalkulua, baina prozedura astuna bihurtzen da. 3.4 irudian agertzen da adibidearen ebazpena, oinarri-azalera = $a \cdot b$ = 0,12·0,12 = 0,0144 unitate izanik. $N \approx$ 36,5 unitate zenbatzen badira, integralaren balio hurbildua $I \approx$ 0,0144·36,5 = 0,5256 lortzen da.

3.4 BATEZ BESTEKO BALIOAK

Ingeniaritza kimikoan egiten diren kalkulu askotan, aldagaien batez besteko balioak erabiltzen dira. Adibidez, φ propietate fisiko baten zenbait balio neurtu badira T_1 eta T_2 tenperatura-tartean, aldagai horren batez besteko balioa hau da:

$$\phi_{batezb} = \frac{\int_{T_1}^{T_2} \phi \cdot dT}{T_2 - T_1} \qquad (3.7)$$

$\varphi = f(T)$ funtzioaren adierazpen analitikoa ezagutzen ez denean, eta datuak taulatan jasota daudenean, integrazioa arestian aipatutako metodoren batekin ebazten da.

Adibidea

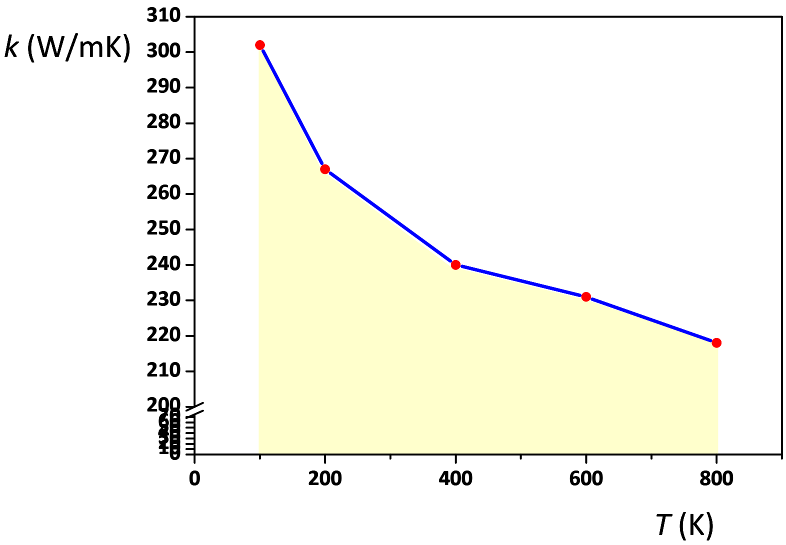
3.1 adibidea

Aluminio metalaren eroankortasun termikoa (k) neurtu da 100-800 K tartean. Kalkula dezagun eroankortasunaren batez besteko balioa, tenperatura-tarte horretan.
Datuak:

k (W/mK)	302	267	240	231	218
T (K)	100	200	400	600	800

<u>*Ebazpena*</u>

Lehenik eta behin, k vs. T irudikatuko da, ondoren ebazpen grafikoa egiteko.



Kurbaren azpiko azalera = $\int_{100}^{800} k \cdot dT \approx 171.150$ W/m

Beraz, 100-800 K tarterako k_{batezb} = 171.150 W/m/(700 K) = 244,5 W/mK.

3.4.1 Batezbesteko logaritmikoa

Zenbait kasutan, bi balioren batezbesteko logaritmikoa erabiltzen da (bero-transmisioan eta masa-transferentzian, adibidez). x_1 eta x_2 balioen batezbesteko logaritmikoa honela definitzen da:

$$x_{BL} = \frac{x_1 - x_2}{\ln\left(\frac{x_1}{x_2}\right)} \tag{3.8}$$

3.4.2 Batezbesteko geometrikoa

Beste hainbat kasutan, bi balioren edo gehiagoren batezbesteko geometrikoa erabiltzen da (bero-transmisioan, esfera hutsen kasua, adibidez). x_1, x_2, ⋯, x_N balioen batezbesteko geometrikoa honela definitzen da:

$$x_{BG} = \left(\prod_{i=1}^{N} x_i\right)^{1/N} \tag{3.9}$$

Ohar gaitezen berdinak diren bi zenbakiren edozein batezbestekoa (aritmetikoa, logaritikoa zein geometrikoa) zenbaki bera dela, nahiz eta 3.8 ekuazioaren arabera indeterminazioa lortu.