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

TERCER PARCIAL RESUELTO
(20 DE JULIO DE 2007)

Esta guía fue elaborada por:

Prof. Aurelio Stammitti Scarpone

con la ayuda de:

Br. María M. Camacho A.

TERCER PARCIAL
(Abril Julio 2007)

Ejercicio 1

En un laboratorio se realiza una experiencia de una reacción de isomerización en un reactor cerrado isotérmico.

$$A \underset{r_2}{\overset{r_1}{\rightleftharpoons}} B \quad \text{con} \quad \begin{array}{ll} r_1(T, C_A, C_B) = k_1(T)\cdot\left(C_A^2 - 0,45\cdot C_B^{0,35}\right) & k_1(T) = 0,31\cdot\exp\left(\dfrac{-1,5e4}{R\cdot T}\right) \\ r_2(T, C_A, C_B) = k_2(T)\cdot C_B^{0,1} & k_2(T) = 2\cdot\exp\left(\dfrac{-2,5e4}{R\cdot T}\right) \end{array} \quad R = 8,314\frac{kJ}{kmol\cdot K}$$

Las ecuaciones de diseño son: $\dfrac{dC_A}{dt} = -r_1 + r_2 \quad \dfrac{dC_B}{dt} = r_1 - r_2$

Al inicio de la experiencia, es decir, $C_A(t=0) = 10$; $C_B(t=0) = 0$. Determine las concentraciones a los 30 min utilizando un método de integración de cuarto orden, tomando como Δt = 10 min. Al cabo de los 30 min, el experimentador incrementa la temperatura a 600 K, determine las concentraciones finales al cabo de 60 min. Cree usted que este aumento en la temperatura influye en las concentraciones finales ?. Explique.

Solución

Este problema se resuelve por Runge Kutta de 4^{to} Orden debido a que nos dicen que usemos un método de integración de cuarto orden y este es más sencillo que el AB4-AM4.

Ahora, si observamos bien lo que nos dicen vemos que este problema consta de dos partes; por lo que hay que resolver el ejercicio usando dos condiciones diferentes.

La primera parte consiste en hallar las concentraciones a los 30 min para una temperatura de 400 K y la segunda, en encontrar dichas concentraciones desde los 30 min hasta los 60 min pero a una temperatura de 600 K.

Visto eso, observemos como quedan las ecuaciones que tenemos que resolver:

$$\frac{dC_A}{dt} = -\left[0,31\cdot\exp\left(\frac{-1,5e4}{R\cdot T}\right)\cdot\left(C_A^2 - 0,45\cdot C_B^{0,35}\right)\right] + \left[2\cdot\exp\left(\frac{-2,5e4}{R\cdot T}\right)\cdot C_B^{0,1}\right]$$

$$\frac{dC_B}{dt} = \left[0,31\cdot\exp\left(\frac{-1,5e4}{R\cdot T}\right)\cdot\left(C_A^2 - 0,45\cdot C_B^{0,35}\right)\right] - \left[2\cdot\exp\left(\frac{-2,5e4}{R\cdot T}\right)\cdot C_B^{0,1}\right]$$

Al ver las ecuaciones nos damos cuenta que ambas EDO's dependen de la C_A y C_B; por lo tanto, el Runge Kutta que tenemos que aplicar es multivariable.

En forma genérica el Sistema de ED's tiene la forma:

$$\begin{cases} \dfrac{dC_A}{dt} = f_{CA}\left(t, C_A, C_B\right) \\ \dfrac{dC_A}{dt} = f_{CA}\left(t, C_A, C_B\right) \end{cases} \quad \text{con} \quad \begin{cases} C_A(t = t_0) = C_{A0} \\ C_B(t = t_0) = C_{B0} \end{cases}$$

<u>Se debe aplicar el método de RK4 en su expresión vectorial:</u>:

$$\vec{k}_1 = h \cdot \vec{F}(t_i, \vec{Y}_i)$$

$$\vec{k}_2 = h \cdot \vec{F}\left(t_i + \frac{h}{2}; \vec{Y}_i + \frac{1}{2}\vec{k}_1\right)$$

$$\vec{k}_3 = h \cdot \vec{F}\left(t_i + \frac{h}{2}; \vec{Y}_i + \frac{1}{2}\vec{k}_2\right) \qquad \text{con} \qquad \vec{Y} = \begin{pmatrix} C_A \\ C_B \end{pmatrix} \quad \vec{Y}' = \begin{pmatrix} dC_A/dt \\ dC_B/dt \end{pmatrix} \quad \vec{F}\left(t; \vec{Y}\right) = \begin{pmatrix} f_{CA}\left(t; \vec{Y}\right) \\ f_{CB}\left(t; \vec{Y}\right) \end{pmatrix}$$

$$\vec{k}_4 = h \cdot \vec{F}\left(t_i + h; \vec{Y}_i + \vec{k}_3\right)$$

$$\vec{Y}_{i+1} = \vec{Y}_i + \frac{1}{6}\left(\vec{k}_1 + 2\vec{k}_2 + 2\vec{k}_3 + \vec{k}_4\right) + \vec{O}(h^4)$$

Parte a) *Concentraciones a los 30 min para una temperatura de 400 K*

i	t	$C_{A\,i}$	$C_{B\,i}$	r_1	r_2	k_{1CA}	k_{1CB}	k_{2CB}	k_{2CA}	k_{3CA}	k_{3CB}	k_{4CA}	k_{4CB}	$C_{A\,i+1}$	$C_{B\,i+1}$
0	**0**	10,0	0,0	0,341	0	-3,4079	3,4079	-2,3155	2,3155	-2,6373	2,6373	-1,8139	1,8139	7,4787	2,5213
1	**10**	7,479	2,521	0,188	0,0012	-1,8729	1,8729	-1,4226	1,4226	-1,5254	1,5254	-1,1703	1,1703	5,9888	4,0112
2	**20**	5,989	4,011	0,120	0,0012	-1,1849	1,1849	-0,9536	0,9536	-0,9968	0,9968	-0,8095	0,8095	5,0063	4,9937
3	**30**	5,006	4,994	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Parte b) *Concentraciones de los 30 a los 60 min para una temperatura de 600 K*

Para esta sección, los valores iniciales son la salida de la sección anterior, ya que están uno a continuación del otro.

i	t	$C_{A\,i}$	$C_{B\,i}$	r_1	r_2	k_{1CA}	k_{1CB}	k_{2CB}	k_{2CA}	k_{3CA}	k_{3CB}	k_{4CA}	k_{4CB}	$C_{A\,i+1}$	$C_{B\,i+1}$
0	**30**	5,006	4,994	0,3720	0,0156	-3,5638	3,5638	-1,2974	1,2974	-2,6255	2,6255	-0,5651	0,5651	3,0105	6,9895
1	**40**	3,010	6,990	0,1252	0,0162	-1,0910	1,0910	-0,6284	0,6284	-0,8134	0,8134	-0,4347	0,4347	2,2756	7,7244
2	**50**	2,276	7,724	0,0653	0,0163	-0,4892	0,4892	-0,3257	0,3257	-0,3783	0,3783	-0,2441	0,2441	1,9187	8,0813
3	**60**	1,919	8,081	0,0421	0,0164	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

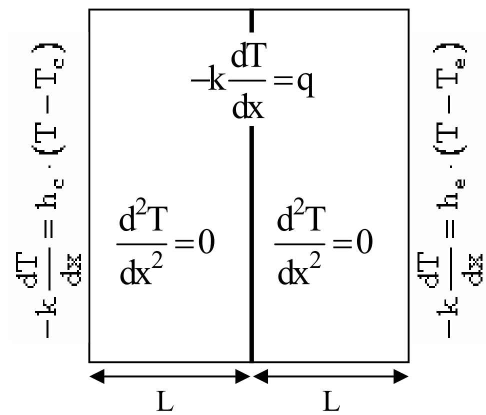
Ejercicio 2

Algunos parabrisas traseros de vehículos poseen una placa interna de cobre para calentarlo y así, evitar el empañamiento en el interior. Dadas las dimensiones del parabrisas, éste puede modelarse como una placa infinita, quedando reducido el problema a la determinación del perfil de temperaturas en el espesor del vidrio. Utilizando el método de diferencias finitas con una discretización de siete (7) nodos totales, determine y grafique el perfil de temperaturas en el espesor del parabrisas. Datos requeridos:

$L = 0{,}015\,\mathrm{m} \quad k_{vidrio} = 1{,}4\,\mathrm{W/m\cdot K} \quad q = 500\,\mathrm{W/m^2}$

Cabina : $T_c = 300\,\mathrm{K} \quad h_c = 20\,\mathrm{W/m^2\cdot K}$

Exterior : $T_e = 280\,\mathrm{K} \quad h_e = 60\,\mathrm{W/m^2\cdot K}$



Solución

Dado que nos piden resolver el problema con el método de diferencias finitas y una discretización de siete nodos totales, nos están diciendo que hay 5 nodos internos y 2 nodos frontera.

<u>Procedimiento</u>:

1.- Determinar la distancia que hay entre nodo y nodo, es decir, el delta (Δx) de separación entre ellos.

2.- Plantear las ecuaciones de los nodos internos.

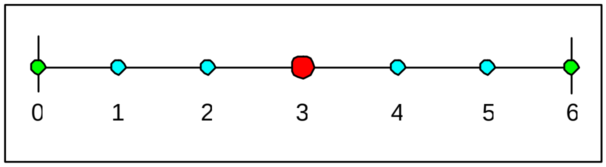
3.- Ver las condiciones de borde y/o frontera y, en base a eso plantear las ecuaciones de los nodos frontera.

4.- Armar el sistema lineal de ecuaciones en forma matricial.

5.- Resolver el sistema.

Paso 1: $\Delta x = \dfrac{L_f - L_i}{N_T - 1}$ con $\begin{cases} N_T\text{: nodos totales} \\ L_f \text{ y } L_i\text{: longitud final e inicial} \end{cases}$

$$\Delta x = \frac{(0,030-0)\text{m}}{7-1} \Rightarrow \Delta x = 0,005\,\text{m}$$



Paso 2:

Recordemos que para los nodos internos de la forma $\partial^2 T / \partial x^2$ se emplea la siguiente ecuación de diferencias centradas:

$$\frac{d^2 T_j}{dx_j^{\,2}} = \frac{T_{j+1} - 2T_j + T_{j-1}}{\Delta x^2}$$

Por lo tanto, para los nodos internos j la ecuación genérica queda de la forma:

$$\frac{d^2 T}{dx^2} = 0 \Rightarrow \frac{d^2 T_j}{dx_j^{\,2}} = \frac{T_{j+1} - 2T_j + T_{j-1}}{\Delta x^2} = 0 \Rightarrow T_{j-1} - 2T_j + T_{j+1} = 0$$

En este caso, los nodos internos son los nodos 1,2,4 y 5. El nodo 3 corresponde a la zona central donde está la placa de cobre, la cual tiene su propia ecuación.

Paso 3:

Para plantear las ecuaciones de los nodos frontera hay que ver la forma de las condiciones de borde; en este caso, tenemos dos fronteras, la derecha y la izquierda y una región especial en el centro del vidrio.

Frontera derecha (Nodo 6): Usamos Diferencia hacia atrás para la derivada:

$$\frac{dT_j}{dx_j} = \frac{T_j - T_{j-1}}{\Delta x} = -\frac{h_e}{k}\cdot(T_j - T_e) \quad \Rightarrow \quad -\left(\frac{1}{\Delta x}\right)\cdot T_{j-1} + \left(\frac{1}{\Delta x} - \frac{h_e}{k}\right)\cdot T_j = -\frac{h_e}{k} T_e$$

Frontera izquierda (Nodo 0): Usamos Diferencia hacia delante:

$$\frac{dT_j}{dx_j} = \frac{T_{j+1} - T_j}{\Delta x} = -\frac{h_i}{k}\cdot(T_j - T_i) \quad \Rightarrow \quad -\left(\frac{1}{\Delta x} - \frac{h_i}{k}\right)\cdot T_{j+1} + \left(\frac{1}{\Delta x}\right)\cdot T_j = -\frac{h_i}{k} T_i$$

Región Central (Nodo 3): Este punto particular también se conoce como punto de fuente, es decir, es un lugar en el vidrio que funciona suministrando una fuente de calor, por lo tanto, tiene su ecuación particular. La expresión más apropiada es la de diferencias centradas ya que no está en ninguno de los bordes.

$$\frac{dT_j}{dx_j} = \frac{T_{j+1} - T_{j-1}}{2\Delta x} = -\frac{q}{k} \quad \Rightarrow \quad -T_{j-1} + T_{j+1} = -2\Delta x \cdot \frac{q}{k}$$

Paso 4:

Ahora se procede a armar el sistema matricial ya que se tienen las ecuaciones para todos los puntos, tanto internos, fronteras y fuente.

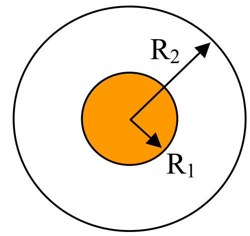
$$\begin{pmatrix} -185,714286 & 200 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -200 & 242,857143 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4285,71429 \\ 0 \\ 0 \\ -3,57142857 \\ 0 \\ 0 \\ 12000 \end{pmatrix}$$

Paso 5:

$$\begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 305,535714 \\ 305,140306 \\ 304,744898 \\ 304,34949 \\ 301,173469 \\ 297,997449 \\ 294,821429 \end{pmatrix} \text{ Solución del perfil de temperaturas del vidrio}$$

Ejercicio 3

En un experimento de conducción de calor se utiliza un cilindro muy largo, que en el centro posee un núcleo que genera calor. La forma más simple de modelar esta experiencia es como sigue:



$$\frac{d^2T}{dr^2}+\frac{1}{r}\cdot\frac{dT}{dr}=0 \quad \text{con} \quad r=R_1\begin{cases} T=T_1 \\ -k\dfrac{dT}{dr}=q \end{cases}$$

Determine el perfil de temperaturas a lo largo del eje radial del cilindro utilizando exclusivamente un método predictor – corrector de cuarto orden, con cuatro pasos de integración. Utilice los siguientes datos:

$$R_1=0,05\text{m} \quad R_2=0,2\text{m} \quad k=2\text{W}/\text{m}\cdot\text{K} \quad q=250\text{W}/\text{m}^2 \quad T_1=350\text{K}$$

Adicionalmente determine el valor del coeficiente convectivo (h) en la superficie exterior del cilindro, con T_∞=310 K.

$$-k\cdot\left.\frac{dT}{dr}\right|_{R_2}=h\cdot\left(T-T_\infty\right)$$

Solución

Tal y como nos dice el enunciado, este problema se resuelve usando un método predictor – corrector de cuarto orden y como sabemos, el único método que cumple con esas condiciones es el AB4-AM4.

Ahora, el dato que nos dan de que usemos cuatro pasos de integración se refiere a que nuestro Δr va a ser:

$$\Delta r=\frac{(0,2-0,05)\,m}{4}=0,0375\,m$$

Parte a)

Como nos piden calcular el perfil de temperaturas y tenemos una ecuación de 2do Orden, se hace la siguiente transformación para poder resolver nuestra EDO.

Transformación:

Se propone un cambio de variables para pasar de una EDO de 2do Orden a un sistema de dos EDO's de 1er Orden con dos condiciones iniciales:

Primero se propone el cambio: $\frac{dT}{dr} = Z$ y se sustituye en la EDO original:

$$\frac{d^2T}{dr^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{dT}{dr} = 0 \Rightarrow \frac{dZ}{dr} + \frac{1}{r} \cdot Z = 0 \Rightarrow \frac{dZ}{dr} = -\frac{1}{r} \cdot Z$$

Ele sistema final queda entonces con dos ecuaciones:

$$\begin{cases} \frac{dT}{dr} = f_T(r, T, Z) = Z \\ \frac{dZ}{dr} = f_Z(r, T, Z) = -\frac{1}{r} \cdot Z \end{cases} \quad \text{con} \quad \begin{matrix} T(r = R_1) = T_1 \\ Z(r = R_1) = -\frac{q}{k} \end{matrix}$$

Una vez convertida la EDO de 2º Orden a un sistema de dos EDO's de 1er Orden, para poder aplicar el ABM-4 se tienen dos opciones, utilizar RK de 4to Orden para determinar los primeros cuatro puntos o usar los AMB desde orden 1 hasta orden 4 para hallar dichos puntos. En este caso, se va a emplear los ABM desde 1 hasta 4.

						Predicho (AB)				**Corregido (AM)**		
i	**r**	**T**	**Z=dT/dr**	**$f_T(T_i,Z_i)$**	**$f_Z(T_i,Z_i)$**	**T^P**	**Z^P=dT/dr**	**$f_T(T_{i+1},Z_{i+1})$**	**$f_Z(T_{i+1},Z_{i+1})$**	**T^C**	**Z^C=dT/dr**	**Método**
0	0,05	350	-125	-125	2500	345,31	-31,25	-31,25	625	348,83	-101,56	ABM1
1	0,0875	348,83	-101,56	-101,56	1160,71	345,46	-83,15	-83,15	950,26	345,36	-61,98	ABM2
2	0,125	345,36	-61,98	-61,98	495,855	344,03	-45,32	-45,32	362,52	343,42	-47,55	ABM3
3	0,1625	343,42	-47,55	-47,55	292,605	340,94	-36,17	-36,17	222,56	341,83	-37,79	ABM4
4	0,2	341,83	-37,79	-37,79	188,960	—	—	—	—	—	—	—

Por lo tanto, el perfil de temperaturas a lo largo del eje radial del cilindro es:

r	**T**
0,05	350
0,0875	348,83
0,125	345,36
0,1625	343,42
0,2	341,83

Parte b)

Esta parte es muy sencilla ya que sólo nos piden el valor del coeficiente convectivo en la superficie, el cual viene dado por:

$$-k \cdot \left.\frac{dT}{dr}\right|_{R_2} = h \cdot \left(T - T_\infty\right)$$

Por lo tanto, $$h = -\frac{k}{\left(T - T_\infty\right)} \cdot \left.\frac{dT}{dr}\right|_{R_2}$$

donde $(dT/dr)|_{R2}$ = -37,792 según la parte a) del ejercicio.

Así que, el valor de 'h' que estamos buscando es: $h = 2{,}3746183$ W/m^2.K