

TALLER 2 – REACTOR

MODELACIÓN MATEMÁTICA
UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y MECATRÓNICA
HUGO ANDRÉS DÍAZ BERNAL
DIEGO HUERTAS MARTÍNEZ
Mayo de 2015

Abstract

En el presente documento se mostrará el modelado de un reactor químico regido bajo la ecuación de advección-reacción-difusión. Primero se adimensionalizó una ecuación diferencial parcial parabólica así como sus condiciones de frontera. Luego se discretizó usando diferencias Crank Nicolson y por último se desarrolló con un código en Fortran 90.

1. Presentación del modelo

Una de las ecuaciones diferenciales parciales más comunes es la ecuación de advección-reacción-difusión. En particular, la ecuación de advección – difusión – reacción en una sola dirección, ecuación (1), es un modelo matemático válido para calcular la distribución de la concentración de un reactivo a lo largo de un reactor químico de sección transversal constante (ver Figura 1), tal como se presenta a continuación:

$$\frac{\partial y}{\partial t} = D \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - U \frac{\partial y}{\partial x} - ky \quad (1)$$

Donde,

- y : Concentración en el reactivo (kg/m^3)
- t : Tiempo (s)
- D : Coeficiente de difusión (m^2/s)

- x : Distancia longitudinal (m)
- Velocidad promedio de flujo de reactivo (m/s)
- k : velocidad de reacción del reactivo (s^{-1})

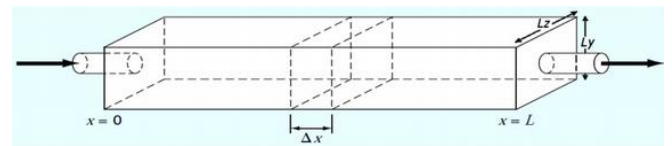


Figura 1: Reactor con una entrada y una salida

Este problema viene dado por las siguientes condiciones de frontera:

$$-D \frac{\partial y}{\partial x} - Uy = U c_{ref} \quad \text{en } x = 0$$

$$\frac{\partial y}{\partial x} = 0 \quad \text{en } x = L$$

Donde c_{ref} es un valor de referencia de la concentración (la concentración justo antes de ingresar al reactor).

Parámetros iniciales del modelo

- $D = 1.8 \text{ m}^2/\text{s}$
- $L = 0.9 \text{ m}$
- $U = 2 \text{ m/s}$
- $c_{ref} = 0.1 \text{ kg/m}^3$
- $k = 5 \text{ s}^{-1}$

2. Desarrollo del modelo

Haciendo los siguientes cambios de variables para adimensionalizar la ecuación (1),

Para la concentración,

$$\begin{aligned} y^* &= \frac{y}{c_{ref}} \\ y &= y^* c_{ref} \\ dy &= c_{ref} dy^* \\ d^2y &= c_{ref} d^2y^* \end{aligned}$$

Para la distancia,

$$\begin{aligned} x^* &= \frac{x}{L} \\ x &= Lx^* \\ dx &= Ldx^* \\ dx^2 &= L^2dx^{*2} \end{aligned}$$

Para el tiempo,

$$\begin{aligned} t^* &= \frac{t}{\tau} \\ t &= \tau t^* \\ dt &= \tau dt^* \end{aligned}$$

Donde,

$$\tau = \frac{L}{U}$$

Reemplazando estas variables en la ecuación (1), se tiene,

$$\frac{c_{ref} dy^*}{\tau dt^*} = \frac{D c_{ref} d^2 y^*}{L^2 dx^{*2}} - U \frac{c_{ref} dy^*}{L dx^*} - k y^* c_{ref}$$

Luego,

$$\begin{aligned} \frac{dy^*}{dt^*} &= \frac{D \tau d^2 y^*}{L^2 dx^{*2}} - \frac{dy^*}{dx^*} - k \tau y^* \\ \frac{dy^*}{dt^*} &= \beta \frac{d^2 y^*}{dx^{*2}} - \frac{dy^*}{dx^*} - \gamma y^* \end{aligned} \quad (2)$$

Donde,

$$\beta = \frac{D \tau}{L^2}$$

$$\gamma = k \tau$$

Ahora, adimensionalizando las condiciones de frontera, obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{dy^*}{dx^*} + \alpha y^* &= -\alpha \\ \frac{dy^*}{dx^*} &= 0 \end{aligned}$$

Donde,

$$\alpha = \frac{UL}{D}$$

Formulación implícita (Crank Nicolson)

Aplicando diferencias finitas centradas para la ecuación (2), con el método semi-implícito

$$\begin{aligned} \frac{y_i^{n+1} - y_i^n}{\Delta t} &= \frac{\beta}{2} \left(\frac{y_{i+1}^{n+1} - 2y_i^{n+1} + y_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right) \\ &\quad + \frac{\beta}{2} \left(\frac{y_{i+1}^n - 2y_i^n + y_{i-1}^n}{\Delta x^2} \right) \\ &\quad - \frac{1}{2} \left(\frac{y_{i+1}^{n+1} - y_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} + \frac{y_{i+1}^n - y_{i-1}^n}{2\Delta x} \right) \\ &\quad - \gamma (y_i^{n+1} + y_i^n) \end{aligned}$$

Haciendo los siguientes cambios de variables

$$a_0 = \beta \frac{\Delta t}{2\Delta x^2}$$

$$a_1 = \frac{\Delta t}{4\Delta x}$$

$$a_2 = \Delta t \gamma$$

Entonces, la discretización por diferencias finitas queda,

$$\begin{aligned} Ay_i^{n+1} + By_{i+1}^{n+1} - Cy_{i-1}^{n+1} = \\ Ey_i^n - By_{i+1}^n + Cy_{i-1}^n \end{aligned}$$

Donde,

$$A = 1 + 2a_0 + a_2$$

$$B = a_1 - a_0$$

$$C = a_1 + a_0$$

$$E = 1 - 2a_0 - a_2$$

La ecuación anterior se puede dar para cada uno de los nodos del sistema, sin embargo, este proceso introduce nodos que están fuera del sistema o nodos “fantasma”, por lo que debe hacerse uso de las condiciones de frontera

Para el primer nodo (nodo 1)

$$\begin{aligned} Ay_1^{n+1} + By_2^{n+1} - Cy_0^{n+1} = \\ Ey_1^n - By_2^n + Cy_0^n \end{aligned}$$

En este caso, el nodo “fantasma” es el nodo 0, pues nuestro dominio empieza a partir del nodo 1, entonces, haciendo diferencias finitas centradas en el primer nodo en la ecuación de frontera, obtenemos,

Para el tiempo n,

$$\frac{y_2^n - y_0^n}{2\Delta x} = -\alpha - \alpha y_1^n$$

$$y_0^n = 2\alpha\Delta x \quad 1 + y_1^n + y_2^n$$

Para el tiempo n+1

$$\frac{y_2^{n+1} - y_0^{n+1}}{2\Delta x} = -\alpha - \alpha y_1^{n+1}$$

$$y_0^{n+1} = 2\alpha\Delta x \quad 1 + y_1^{n+1} + y_2^{n+1}$$

Esta condición en el primer nodo se da para cualquier instante de tiempo, pues es la condición inicial, por eso es igual para el nodo n y para el nodo n+1

Sustituyendo la expresión anterior en el nodo 1, queda,

$$\begin{aligned} (A - CF)y_1^{n+1} + (B - C)y_2^{n+1} - CF = \\ E + CF \quad y_1^n + (C - B)y_2^n + CF \end{aligned}$$

Donde,

$$F = 2\alpha\Delta x$$

Ahora, suponiendo que la distancia del reactor en x la dividimos en 4 nodos, para el último se tiene de nuevo un nodo 6 por fuera de nuestro dominio por lo que se hace uso de diferencias finitas centradas en la condición de Neumann,

Para el tiempo n,

$$\frac{y_5^n - y_3^n}{2\Delta x} = 0$$

Luego,

$$y_5^n = y_3^n$$

$$y_5^{n+1} = y_3^{n+1}$$

De esta forma la ecuación para el último nodo (nodo 4) queda,

$$(B - C)y_3^{n+1} + Ay_4^{n+1} = C - B \quad y_3^n + Ey_4^n$$

Ahora, reorganizando las cuatro ecuaciones para los nodos del sistema en forma matricial se obtiene un sistema de ecuaciones así,

$$[A][y]^{n+1} = [B][y]^n + [k]$$

Donde $[A]$ y $[B]$ son matrices tridiagonales, $[y]^n$ y $[y]^{n+1}$ son los vectores de variables y $[k]$ es un vector de valores iniciales.

$$\begin{pmatrix} A-CF & B-C & 0 & 0 \\ -C & A & B & 0 \\ 0 & -C & A & B \\ 0 & 0 & B-C & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1^{n+1} \\ y_2^{n+1} \\ y_3^{n+1} \\ y_4^{n+1} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} E+CF & C-B & 0 & 0 \\ C & E & -B & 0 \\ 0 & C & E & -B \\ 0 & 0 & C-B & E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1^n \\ y_2^n \\ y_3^n \\ y_4^n \end{pmatrix}$$

El vector de condiciones iniciales es el siguiente,

$$\begin{pmatrix} 2CF \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Los cálculos realizados están restringidos por un criterio de estabilidad según [1]

$$\Delta t < \frac{(\Delta x)^2}{2D + k(\Delta x)^2}$$

Formulación implícita

Aplicando diferencias finitas centradas para hacer una formulación explícita, se tiene,

$$\frac{y_i^{n+1} - y_i^n}{\Delta t} = \beta \left(\frac{y_{i+1}^n - 2y_i^n + y_{i-1}^n}{\Delta x^2} \right) - \frac{y_{i+1}^n - y_{i-1}^n}{\Delta x} - \gamma y_i^n$$

Haciendo los siguientes cambios de variables

$$b_0 = \beta \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$$

$$b_1 = \frac{\Delta t}{\Delta x}$$

$$b_2 = \Delta t \gamma$$

Y reorganizando, se tiene,

$$y_i^{n+1} = Xy_{i+1}^n + Yy_i^n + Zy_{i-1}^n$$

Donde,

$$X = b_0 - b_1$$

$$Y = 1 - b_0 - b_1$$

$$Z = b_0 + b_1$$

Reemplazando para el nodo uno y para el nodo cuatro, obtenemos, respectivamente

$$y_1^{n+1} = Xy_2^n + Yy_1^n + Zy_0^n$$

$$y_4^{n+1} = Xy_5^n + Yy_4^n + Zy_3^n$$

Para obtener el valor de los nodos “fantasma” y_5^n y y_0^n , se utilizan las condiciones de Robin y Neumann descritas anteriormente, así, estas ecuaciones resultan,

$$y_1^{n+1} = (X + Z)y_2^n + (Y + ZF)y_1^n + ZF$$

$$y_4^{n+1} = (X + Z)y_3^n + Yy_4^n$$

Por lo tanto, el sistema matricial tiene la forma:

$$[y]^{n+1} = [A][y]^n + [k]$$

$$\begin{pmatrix} Y + ZF & X + Z & 0 & 0 \\ Z & Y & X & 0 \\ 0 & Z & Y & B \\ 0 & 0 & X + Z & Y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1^n \\ y_2^n \\ y_3^n \\ y_4^n \end{pmatrix}$$

El vector del lado izquierdo es:

$$\begin{pmatrix} y_1^{n+1} \\ y_2^{n+1} \\ y_3^{n+1} \\ y_4^{n+1} \end{pmatrix}$$

El vector de valores iniciales es:

$$\begin{pmatrix} ZF \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

3. Análisis de simulaciones

Para el desarrollo de este modelo se utilizó el software Fortran 90 y GNU plot para graficar. En el código se usó el algoritmo de Thomas para resolver los sistemas de matrices

tridiagonales. A continuación se muestran los resultados de las simulaciones.

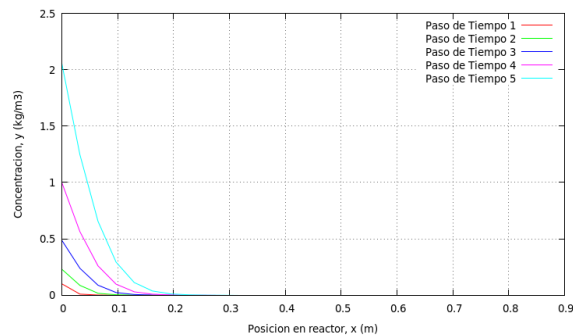


Figura 2. Concentración del reactivo a lo largo del reactor para diferentes instantes de tiempo.

Como se puede observar en el Figura 2, la cantidad de reactivo disminuye a medida que recorre el interior de la cavidad del reactor, debido a que éste reacciona e interactúa con su atmósfera circundante. La curva de color cian (la más superior) representa la concentración a lo largo del reactivo para el tiempo mayor, mientras que la curva de color rojo (la más inferior), lo hace en el menor tiempo.

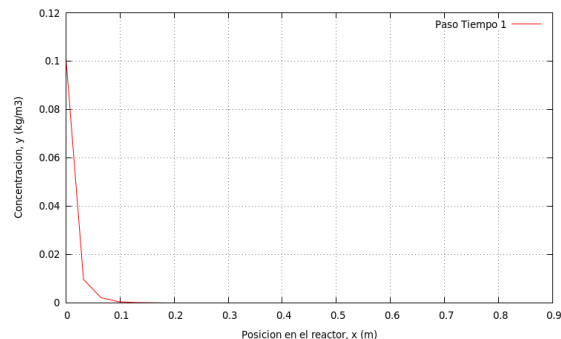


Figura 3. Concentración en el tiempo 1

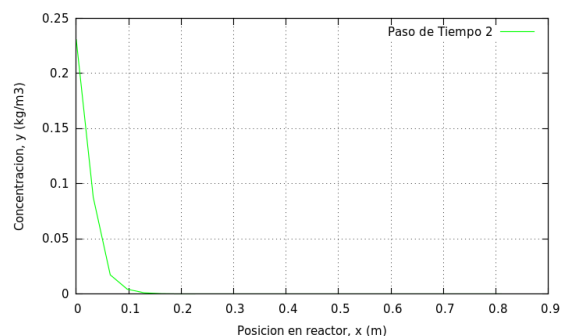


Figura 4. Concentración en el tiempo 2

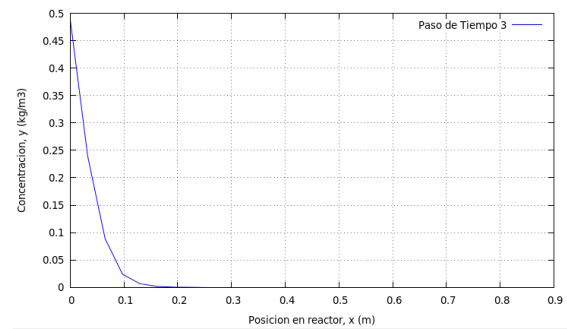


Figura 5. Concentración en el tiempo 3

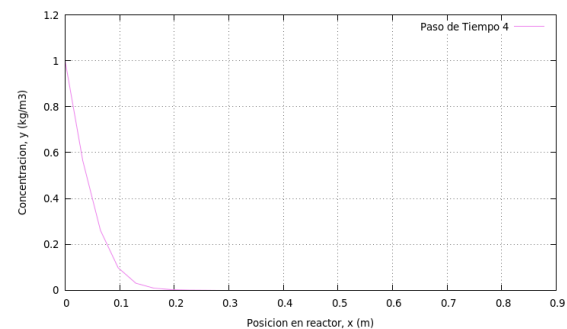


Figura 6. Concentración en el tiempo 4

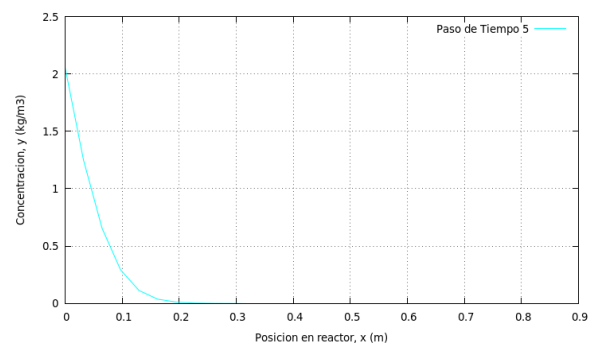


Figura 7. Concentración en el tiempo 5

El número de nodos es un factor de gran importancia en este modelo pues es el que limita la estabilidad del mismo, a continuación se muestra en la Figura 8 que para una correcta simulación se debe tener un máximo de 36 nodos, pues a partir del nodo número 37 se empiezan a notar incongruencias, las cuales se agravan a medida que se aumenta el número de nodos, como se ve en la Figura 9, que para 45 nodos se generan curvas bastante imprecisas e incoherentes.

REFERENCIAS

- [1] S. Chapra, R. Canale, *Métodos numéricos para ingenieros*. Mc Graw Hill, 2007.

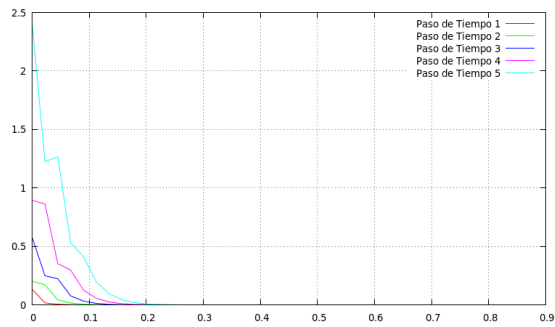


Figura 8. Inestabilidad con 37 nodos

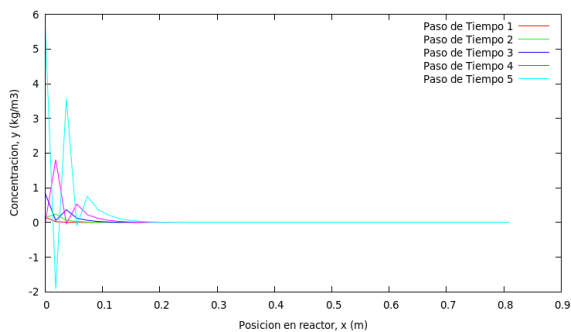


Figura 8. Inestabilidad con 45 nodos

4. Conclusiones

- Como era de esperarse, se obtuvieron curvas acorde a la literatura, pues la concentración del reactivo decae (y se estabiliza) a medida que fluye en el espacio x dentro del reactor.
- Según lo mostrado en las gráficas, la solución se aproxima a un nivel de estado estacionario cuando avanza el tiempo, pues la curva se vuelve más “plana”
- El problema está limitado por el número de nodos, pues conforme éstos aumentan después de cierto punto, así mismo lo hace el error computacional.