

Taller evaluativo 1.1: Reacción química exotérmica en un reactor de laboratorio continuo.

Integrantes:

ID:

Juan Esteban Barrientos Sierra

000428876

Daniel Orlando Escorcia Díaz

000427686

Docente:

Raúl Adolfo Valencia Cardona

Viernes, 18 de febrero del 2022

Universidad Pontificia Bolivariana

Métodos numéricos

2022-10

1. Planteamiento del problema

Calcular la temperatura T y la concentración C_A de la corriente de salida cuando el reactor trabaja a régimen transitorio y hasta alcanzar el régimen permanente para el caso de una reacción de primer orden. Considerar que se está trabajando con el modelo de un reactor de laboratorio continuo, tipo tanque perfectamente agitado, en el cual se lleva a cabo una reacción química exotérmica, cuya temperatura se regula a través de un líquido que circula por una chaqueta, la cual se mantiene a una temperatura uniforme T_j .

2. Variables y ecuaciones

Condiciones iniciales: $C_A(0) = 5 \text{ gmol/L}$ y $T(0) = 300 \text{ K}$

F = Gasto de alimentación al reactor (10 ml/s)

V = Volumen de reactor (2000 ml)

C_{A0} = Concentración del reactante A en el flujo de alimentación (5 gmol/L)

T_0 = Temperatura de flujo de alimentación (300 K)

ΔH = Calor de reacción (-10000 cal/gmol)

U = Coeficiente global de transmisión de calor (100 cal/°C s m²)

A = Área de transmisión de calor (0.02 m²)

K = Constante de velocidad de reacción ($8 \times 10^{12} \exp(-22500/1.987 T) \text{ s}^{-1}$)

T_j = Temperatura del líquido que circula por la chaqueta (330 K)

C_p = Calor específico de la masa reaccionante (1 Kcal/kg°C)

ρ = Peso específico de la masa reaccionante (1 kg/L)

Balance de materia para el reactante A:

Acumulación = Entrada - Salida - Reacciona

$$\frac{dVC_A}{dt} \quad FC_{A0} \quad FC_A \quad kVC_A^n$$

Balance de calor:

$$\text{Acumulación} = \text{Entrada} - \text{Salida-generado} - \text{Eliminado}$$

$$\frac{dVpCpT}{dt} = FpCp(T_0 - T) - \Delta H_k V C_A^n - UA(T - T_j)$$

V, p y C_p son constantes.

3. Código python

```

"""
Juan Esteban Barrientos Sierra (000428876) & Daniel Orlando Escorcía Díaz (000427686)
"""
#Definición de funciones
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

def funcomp(x,y):
    dydx=np.array((((0.025-0.005*y[0])-8*10**12*np.exp(-22500/(1.987*y[1])))*y[0],(0.005)*(300-y[0])))
    return dydx

def meulermj(xi,yi,h,f):
    x=xi+h
    y1=yi+h*f(xi,yi)
    y2=yi+h*((f(xi,yi)+f(x,y1))/2)

    return(x,y2)

def rk3(xi,yi,h,f):
    x=xi+h
    k1=h*f(xi,yi)
    k2=h*f(xi+0.5*h,yi+0.5*k1)
    k3=h*f(xi+h,yi-k1+2*k2)
    y=yi+(k1+4*k2+k3)/6

    return (x,y)

#Calcule la temperatura T y la concentración Ca

f=10 #ml/s #Gasto de alimentación al reactor
v=2000 #ml #Volumen del reactor
cao=5 #gmol/L #Concentración del reactante A en el flujo de alimentación
To=300 #K #Temperatura del flujo de alimentación
H=-10000 #cal/gmol #Calor de reacción
U=100 #Cal/°Csm2 #Coeficiente global de transmisión de calor
A=0.02 #Área de transmisión de calor
Ti=330 #K
Cp=1
p=1

xi=0
yi=5
yii=300

xf=4000
n=10000
h=(xf-xi)/(n-1)

#Método de euler mejorado
x=np.zeros(n)
ynum=np.zeros(shape=(n,2))#Matriz solución

#Valor inicial
yi=np.array([5,300])

ynum[0,0]=yi[0]
ynum[0,1]=yi[1]

```

```

for i in range(1,n):
    x[i],ynum[i,:]=meulermj(x[i-1],ynum[i-1,:],h,funcomp)

#Método de rk3
x3=np.zeros(n)
yrk3=np.zeros(shape=(n,2))#Matriz solución

#Valor inicial
yrk3[0,0]=yi[0]
yrk3[0,1]=yi[1]

for i in range(1,n):
    x3[i],yrk3[i,:]=rk3(x3[i-1],yrk3[i-1,:],h,funcomp)

#Gráficos meuler mejorado
plt.figure(1,figsize=(17,8))
plt.subplot(1,2,1)
plt.plot(x,ynum[:,0],label="Método de euler mejorado")
plt.legend(loc="best")
plt.xlabel("Tiempo (s)")
plt.ylabel("Concentración (gmol/L)")

plt.subplot(1,2,2)
plt.plot(x,ynum[:,1],label="Método de euler mejorado")
plt.legend(loc="best")
plt.xlabel("Tiempo (s)")
plt.ylabel("Temperatura (K)")

#Gráficos rk3
plt.figure(2,figsize=(17,8))
plt.subplot(1,2,1)
plt.plot(x3,yrk3[:,0],label="Rk3")
plt.legend(loc="best")
plt.xlabel("Tiempo (s)")
plt.ylabel("Concentración (gmol/L)")

plt.subplot(1,2,2)
plt.plot(x3,yrk3[:,1],label="Rk3")
plt.legend(loc="best")
plt.xlabel("Tiempo (s)")
plt.ylabel("Temperatura (K)")
print("Para el régimen permanente:\n")
print("Una concentración de ", ynum[-1,0], "gmol/L")
print("Temperatura de ",ynum[-1,1], "K")

```

4. Resultados y análisis

Para el régimen permanente:

Una concentración de 0.7366520872847755 gmol/L
 Temperatura de 340.5278992727123 K

La temperatura (T) y la concentración (C_A) de la corriente de salida cuando el reactor trabaja a régimen transitorio, hasta alcanzar el régimen permanente, redondeado a cuatro cifras decimales, es 340.5279 K y 0.7367 gmol/L, respectivamente.

Considerando las condiciones iniciales en las cuales se trabajó para concentración (C_A) y temperatura (K), en comparación con estos resultados obtenidos estas mismas variables, un detalle a destacar es ambas variables tuvieron un comportamiento distinto e inverso, es decir, en el caso de la temperatura, que inicialmente era 300 K, terminó con un valor de 340.5279 K, mientras que, para el caso de la concentración, que inicialmente era 5 gmol/L, el valor final fue muy inferior al inicial, 0.7367 gmol/L, con lo que, también es válido afirmar que a mayor temperatura, menor será

el nivel de concentración en la corriente de salida cuando sucede este cambio de régimen en el reactor.

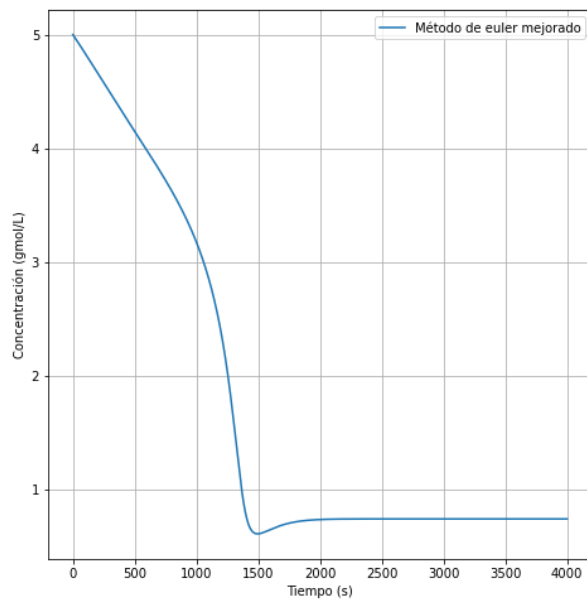


Fig. 1. Gráfico C_A Vs. Tiempo (Método de Euler mejorado)

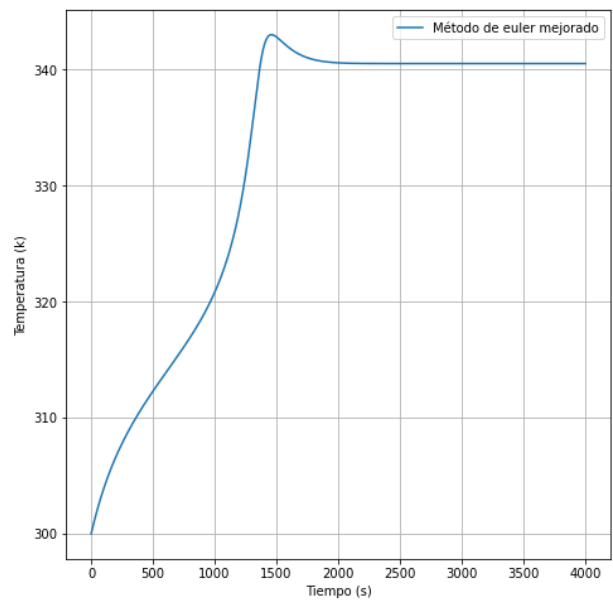


Fig. 2. Gráfico Temperatura Vs. Tiempo (Método de Euler mejorado)

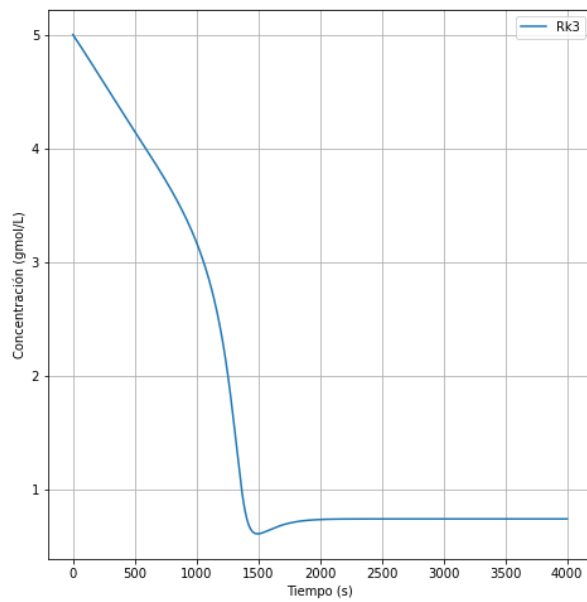


Fig. 3. Gráfico C_A Vs. Tiempo (Método RK3)

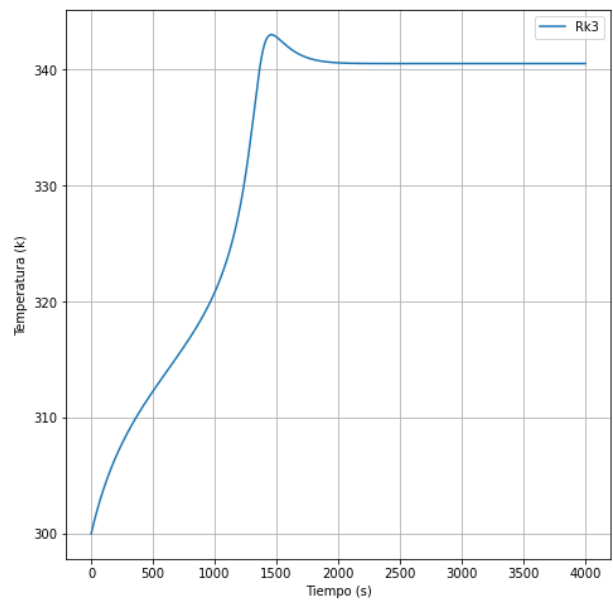


Fig. 4. Gráfico Temperatura Vs. Tiempo (Método RK3)

Comparado la figura 1, que corresponde al gráfico de la concentración contra el tiempo, utilizando el método de Euler mejorado, con la figura 3, que también corresponde al gráfico de la concentración contra el tiempo, pero utilizando el método de Runge Kutta e orden 3 (RK3), se

observa como ambos gráficos cuentan con una similitud exacta para cada uno de los valores que se detallan en cada uno de los ejes del gráfico, por lo que, es apropiado afirmar que el valor obtenido para la concentración es correcto, sin importar cuál de los dos métodos se utilice para encontrar este valor. Además, también se puede observar como la concentración disminuye a medida que aumenta el tiempo, aunque, si se observa más a detalle, la concentración disminuye considerablemente hasta un tiempo $t = 1500$ segundos, a partir del cual el valor de la concentración incrementa muy levemente hasta llegar a un tiempo $t = 2000$ segundos, tiempo a partir del cual su valor permanece constante y siendo inferior a 1 gmol/L . Asimismo, ocurre igual con la figura 2 y la figura 4, que corresponden al gráfico de la temperatura contra el tiempo utilizando el método de Euler mejorado y el método de Runge Kutta de orden 3, respectivamente. Al comparar ambas figuras, se puede notar que ambos gráficos tienen una similitud y un comportamiento exactamente igual, por lo tanto, se puede afirmar que la respuesta obtenida para el valor de la temperatura también es correcta, sin importar qué método se utilice, ya sea el método mejorado de Euler o el método de Runge Kutta de orden 3. Igualmente, al observar ambas figuras a grandes rasgos, es propio afirmar que la temperatura aumenta a medida que aumenta el tiempo, caso contrario a lo que ocurre con la concentración. Observando ambos gráficos de forma más detallada, se puede notar como la temperatura incrementa notablemente hasta un tiempo $t = 1500$ segundos, a partir del cual su valor se reduce muy poco hasta llegar a un tiempo $t = 2000$ segundos, donde se observa que el valor de la temperatura empieza a tomar un comportamiento constante.

En conclusión, el aumento del tiempo influye de manera diferente en el valor de la concentración y de la temperatura, ya que, en el caso de la concentración, esta disminuye a medida que aumenta el tiempo, mientras que, en el caso de la temperatura, esta aumenta a medida que también aumenta el tiempo. También es importante resaltar que, de acuerdo a cada una de las cuatro figuras, el tiempo en el que la concentración llega a un valor mínimo y la temperatura a un valor máximo es en $t = 1500$ segundos. Por otra parte, cuando $t = 2000$ segundos, se puede observar que es a partir de este instante cuando el comportamiento de la concentración, así como también el de la temperatura, empieza a ser contante, según los gráficos donde se reflejan los resultados.

5. Anexos:

Link video explicación código: <https://youtu.be/qdx8CvFhTYU>