

RECUERDE: La tarea es estrictamente individual. Cualquier indicio de copia, será procesado de acuerdo con el reglamento de copia de la Universidad.

El link para enviar los archivos de soporte estará habilitado hasta las 06:30 am del 5/03/2019

Cualquier trabajo enviado por correo después de la hora tendrá una calificación de cero. Por favor enviar los archivos comprimidos en extensión .zip en el siguiente formato, teniendo en cuenta las instrucciones dadas en el programa: **ApellidoNombre_Codigo.zip**

Se debe entregar un documento en físico con los resultados y el respectivo análisis de cada uno de los numerales. El límite es de 5 páginas. Resultados o análisis en las siguientes páginas no será tenido en cuenta. Se debe imprimir a doble cara y a color las gráficas que lo ameriten. Además, se deben subir los archivos de MATLAB que soporten sus respuestas al link disponible en Sicua Plus.

Taller 3

Ecuaciones Diferenciales y Reactores Químicos

Punto 1

Usted está encargado del diseño de un sistema de refrigeración rudimentario el cual emplea como elemento refrigerante una esfera de hielo de 17 cm de diámetro. Con el fin de determinar el comportamiento de dicho sistema, usted coloca esta esfera en un experimento el cual emplea un ventilador para simular las condiciones del viento, con un coeficiente de transferencia convectivo $\left(h = 300 \frac{W}{m^2 K}\right)$ y de una bandeja que retira toda el agua fundida proveniente de la bola de hielo. Se conoce además que la temperatura del ambiente se encuentra en 18°C y que el experimento se realiza a una presión de 1 atm.

Adicionalmente, a partir de sus conocimientos de transferencia de calor, usted conoce que el balance sobre la esfera es igual a:

$$\frac{dQ}{dt} (\text{flujo de calor}) = Ah(T_{amb} - T)$$

Ayuda: Considere que la transferencia de calor hacia el hielo solamente provoca el cambio de fase del agua, es decir: $\frac{dQ}{dt} = \frac{dm}{dt} L_f$

1. Grafique el volumen de la esfera de hielo en función del tiempo, hasta un tiempo total de 3000 segundos. Resuelva mediante **Euler y RK4**
2. Usted decide usar un nuevo ventilador, el cual contiene un motor con velocidad variable, por lo tanto, su coeficiente convectivo puede tomar los siguientes valores (50, 100, 150, 200, 250, 300). Grafique la variación del volumen de la esfera para cada uno de los posibles valores de h. Resuelva por medio de **Taylor de 2 orden**.
Ayuda: Para determinar la derivada, emplee la definición de derivada.
3. Analice los resultados obtenidos en los dos puntos anteriores

Propiedades del agua

$$L_f(\text{Calor latente de fusión}) = 333 \frac{\text{kJ}}{\text{kg}}$$

$$\rho(\text{densidad del hielo}) = 917 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

Punto 2

El proceso de Pott-Broche o licuefacción directa del carbón, convierte el carbón en una mezcla de hidrocarburos llamada crudo sintético. En general primero se disuelve el carbón a alta temperatura y presión, y luego se añade hidrógeno para realizar hidrocrackeo en presencia de un catalizador. Considere la licuefacción del carbón Kentucky núm 9, la cual se efectuó en reactor de lecho empacado (PFR). Las partículas de carbón que medían menos de malla 200 se disolvieron en un corte al vacío a aproximadamente 250 °C de aceite reciclado saturado con hidrógeno a 400 °C, llevando a cabo la secuencia de reacción de la figura 1:

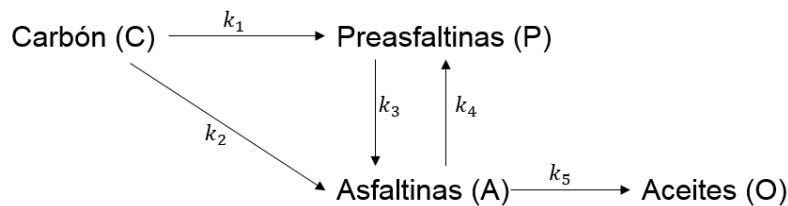


Figura 1. Licuefacción del carbón Kentucky núm 9.

Teniendo en cuenta que todas las reacciones son de primer orden, calcule el flujo molar de cada especie en función del espacio tiempo. Recuerde que $\tau = V/v_0$, donde v_0 es el flujo volumétrico de entrada y V es el volumen del reactor. Utilice el método **de Euler (RK1), Taylor de orden 2, RK4 y la función predeterminada ODE45**. Analice sus resultados en función de las especies reactantes, el tiempo de convergencia, etc.

Información adicional:

Concentración de entrada de carbón: 2 kmol/m^3

Flujo volumétrico de entrada: $8.5 \text{ dm}^3/\text{min}$.

Volumen del reactor: 820 dm^3

A 400 °C, $k_1 = 0.12 \text{ min}^{-1}$, $k_2 = 0.046 \text{ min}^{-1}$, $k_3 = 0.020 \text{ min}^{-1}$, $k_4 = 0.034 \text{ min}^{-1}$, $k_5 = 0.04 \text{ min}^{-1}$.

Punto 3

El comportamiento reactivo de unas partículas de catalizador porosas está sujeto a los gradientes másicos como a los gradientes de temperatura del sistema. Estos balances se muestran a continuación:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{dy}{dx} = \phi^2 y \exp \left[\gamma \left(1 - \frac{1}{T} \right) \right]$$

$$\frac{d^2 T}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{dT}{dx} = -\beta \phi^2 y \exp \left[\gamma \left(1 - \frac{1}{T} \right) \right]$$

Donde y es la concentración adimensional, T es la temperatura adimensional, x es la coordenada radial adimensional, ϕ es el módulo de Thiele ($=0.38$), γ es el número de Arrhenius ($=25$) y β es el número de Prater ($=0.4$). Adicionalmente, se pueden deducir las siguientes condiciones de frontera:

$$\frac{dT}{dx} = \frac{dy}{dx} = 0 \quad \rightarrow \quad x = 0$$

$$T = y = 1 \quad \rightarrow \quad x = 1$$

Utilice el **método de Newton Shooting** para resolver el problema considerando un valor de cero (0) como inicialización de las condiciones iniciales desconocidas. Puede hacer uso de la función ODE45. Realice las siguientes gráficas y analice sus resultados:

- a) x vs. y & T
- b) x vs. dy/dx & dT/dx .