

# Simulación de un Reactor Químico de Flujo Continuo

Samuel Duran Paniagua  
Emanuel Osorio Gonzales  
Cristobal A. Hernandez Porras  
Cristian Muñoz Piedrahita  
Juan A. Rojas Roman  
Andrés D. Mora Lobo

March 8, 2025

## 1 Resumen

En este proyecto, Se implementarán métodos numéricos para resolver un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs) que modelan la cinética de reacción en un reactor químico de flujo continuo (CSTR). Se utilizarán métodos como Runge-Kutta para analizar el comportamiento de las concentraciones de los reactantes y productos.

## 2 Objetivos

- Modelar matemáticamente un reactor químico de flujo continuo.
- Implementar métodos numéricos para resolver las ecuaciones diferenciales del sistema.
- Comparar los métodos en términos de estabilidad y precisión.
- Evaluar el impacto de parámetros como la velocidad de reacción y la concentración de entrada.

## 3 Justificación

Los reactores químicos son fundamentales en la industria, y su modelado matemático permite optimizar procesos, reducir costos y mejorar la eficiencia en la producción de sustancias químicas. Resolver numéricamente las ecuaciones de balance de materia y energía ayuda a predecir el comportamiento del reactor bajo diferentes condiciones operativas.

## 4 Metodología

### 4.1 Formulación del problema

El modelo matemático se basa en el balance de masa para las especies químicas A y B dentro del reactor. Se asume un mezclado perfecto, lo que implica que la concentración es uniforme en todo el volumen del reactor. Esto permite formular un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs) que describen la evolución de las concentraciones de A y B en función del tiempo.

El reactor se modela mediante un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$V \frac{dC_A}{dt} = F_A^{in} - F_A - r_A V \quad (1)$$

$$V \frac{dC_B}{dt} = -F_B + r_A V \quad (2)$$

Donde:

- $C_A$  y  $C_B$  son las concentraciones de los reactantes y productos.
- $V$  es el volumen del reactor.
- $F_A^{in}$  y  $F_A$  son los flujos molares de entrada y salida.
- $F_A = C_A Q$ ,  $F_B = C_B Q$ , donde  $Q$  es el caudal volumétrico del reactor.
- $r_A$  es la velocidad de reacción, que sigue una cinética de primer orden:  $r_A = kC_A$ .

### 4.2 Condiciones iniciales

$$C_A(0) = C_{A0}, \quad C_B(0) = 0 \quad (3)$$

### 4.3 Implementación numérica

- Se hace uso del método de euler y el método de Runge Kutta de cuarto orden para resolver el sistema de ecuaciones.
- Se implementa un código de python para facilitar la resolución de las ecuaciones haciendo uso de los métodos mencionados anteriormente.

### 4.4 Análisis y discusión

- El reactor hace uso de los reactantes para obtener productos, pero esto no indica que se consuma la cantidad total de reactante, esto se evidencia en las gráficas construidas con los valores arrojados por el código, en el cual se puede observar como el reactante al cabo de un tiempo tiende a un comportamiento asintótico, que depende de los parámetros del tanque y de entrada de reactante.
- Al realizar iteraciones con los valores de  $k$  y de  $V$  se puede observar como la eficiencia del reactor cambia en función de si se aumenta o se disminuyen ambos valores, es decir que la cantidad de productos cambia, por otro lado si solo se realizan iteraciones con uno solo:

- Si se realizan iteraciones con  $k$  se puede observar un cambio brusco en el tiempo de la reacción.
- Si se realizan iteraciones con  $V$  se puede observar como cambia la cantidad de reactante utilizado, lo que indica que con un mayor volumen del tanque se utiliza mayor cantidad de reactantes y a su vez se obtiene mayor cantidad de productos

## 5 Resultados esperados

- Como se menciona antes se implemento un codigo en python para resolver las ecuaciones por medio de metodos numericos, codigo el cual se puede encontrar en el siguiente enlace [codigo python](#)

### 5.1 Gráficos de la evolución temporal de las concentraciones de reactantes y productos

- en la figura 1 podemos ver como es el comportamiento de los reactantes respecto al tiempo, calculado con ambos metodos.
- en la figura 2 podemos ver como es el comportamiento de los productos respecto al tiempo, utilizando el metodo de euler.
- en la figura 3 podemos ver el comportamiento de los productos, pero esta vez utilizando el metodo de Runge Kutta 4.

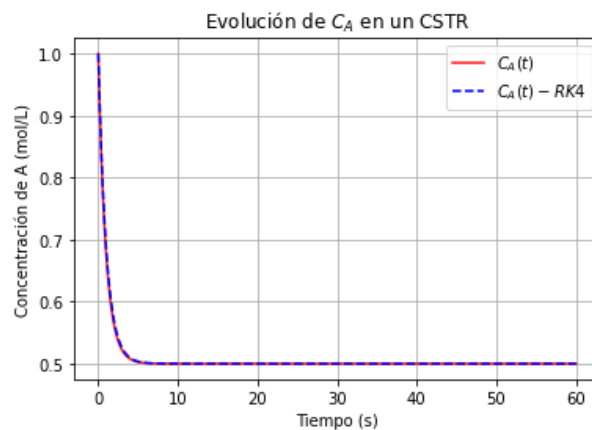


Figure 1: grafico de reactantes en el tiempo

### 5.2 Comparación de errores entre métodos.

- en las figuras 4 y 5 podemos observar el error en la solución de las ecuaciones usando los dos metodos diferentes.
- Como se puede observar para el comportamiento de los reactantes el error es muy minimo, mientras que para los productos ya se puede observar una diferencia grande, por lo que el error que se obtiene es mucho más grande

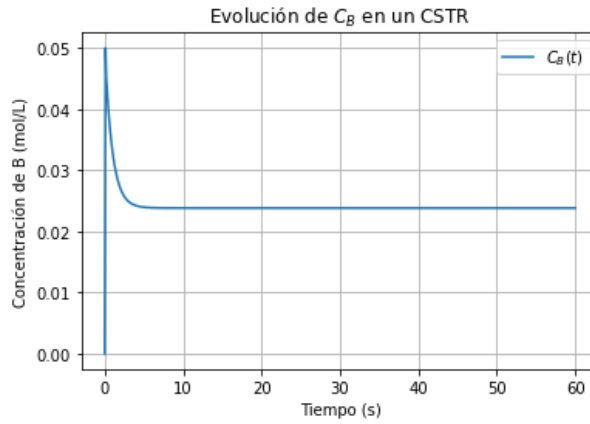


Figure 2: grafico productos en el tiempo

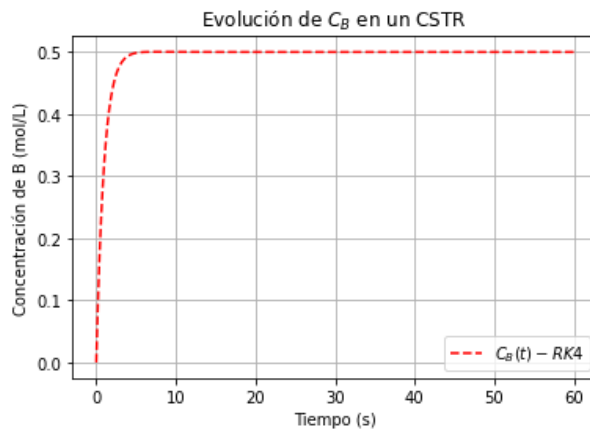


Figure 3: grafico productos en el tiempo

## 6 Conclusión

El proyecto propuesto demuestra la efectividad de los métodos numéricos como una herramienta excepcional para simular el comportamiento de un reactor de flujo continuo. En este, nos apoyamos en los métodos de Euler y Runge-Kutta. Su aplicación en Python permitió modelar con precisión la evolución de las concentraciones de los reactivos y productos a lo largo del tiempo, lo cual ratificó la viabilidad de usar estos métodos para resolver sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias que describen procesos químicos complejos.

Algo importante durante la práctica fue la comparación entre los dos métodos, Euler y Runge-Kutta. Este último demostró ser superior, aunque con una complejidad mayor a la hora de aplicarlo.

Los datos obtenidos fueron comparados con los comportamientos esperados de un CSTR, donde las concentraciones tienden a estabilizarse a medida que el sistema alcanza el estado estacionario. De esta manera, nos damos cuenta de que el uso de Python puede ser una herramienta muy importante para realizar simulaciones, optimizar, predecir procesos y otras utilidades.

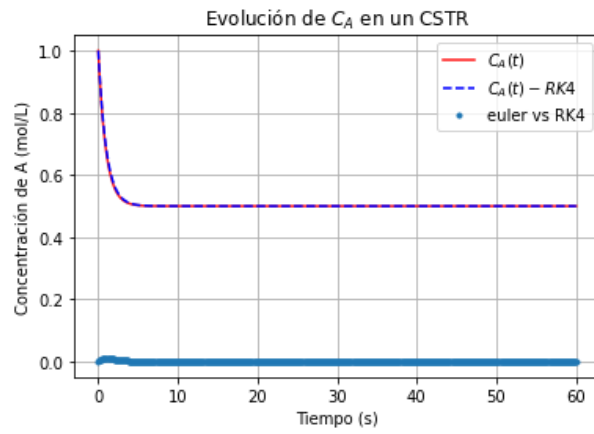


Figure 4: Error entre métodos

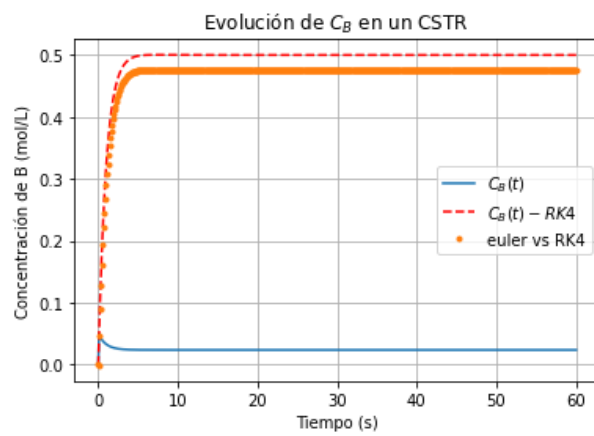


Figure 5: Error entre métodos