TEMA 3:

PROBLEMAS ORDINARIOS DEL VALOR INICIAL EN INGENIERÍA QUÍMICA: ESTUDIO Y COMPARACIÓN DE MÉTODOS NUMÉRICOS DE RESOLUCIÓN.

PROBLEMAS PROPUESTOS

Asignatura:	**Cálculo Avanzado de Procesos Químicos.**
Titulación:	**Ingeniería Química**
Curso:	**Cuarto**
Cuatrimestre:	**Primero**

PROBLEMAS PROPUESTOS

Problema 1:

Fuente: **Mathews, J. H., Kurtis, D. F.;** *Métodos Numéricos con MATLAB*. Prentice Hall. 2000. (Pág. 476).

Obtener, para el problema $\begin{cases} y' = \dfrac{t-y}{2} \\ y(0) = 1 \end{cases}$ en el intervalo $[0, 3]$ la solución aproximada mediante el método de Euler explícito para los casos: h=1, h=1/2. Comparar ambas aproximaciones con la solución exacta para cuantificar el error cometido.

Problema 2:

Dado el siguiente problema ODE-IVP de primer orden:

$$\begin{cases} y' = (x+1)\sqrt{y} \\ y(0) = 1.0 \\ \Delta x = 0.2 \end{cases}$$

Comparar la aproximación numérica obtenida en el intervalo (0-1) utilizando dos algoritmos de RK de segundo orden con la solución exacta.

Problema 3:

Fuente: **Riggs, J.B.;** *An Introduction to Numerical Methods for Chemical Engineers*. Texas Tech University Press. 1994. (Pág. 170).

Resolver el problema $\begin{cases} y' = x^2 * y \\ y(0) = 1 \end{cases}$ en el intervalo $[0, 1]$utilizando el método trapezoidal para los casos h=0,5, h=0,1. Compararlo con el resultado exacto.

Problema 4:

Fuente: **Riggs, J.B.;** *An Introduction to Numerical Methods for Chemical Engineers*. Texas Tech University Press. 1994. (Pág. 171).

Resolver el problema $\begin{cases} y' = x \quad * e^{y} \\ y(0) = 1 \end{cases}$ en el intervalo $[0, \ 0,3]$ utilizando el método trapezoidal para h=0,1.

Problema 5:

Fuente: **Zill, D.G.;** *Ecuaciones Diferenciales con Aplicaciones de Modelado*. TeEd Int. Thomson 6ªEd. 1997. (Pág. 94).

La profundidad, h, del agua al vaciarse un tanque cilíndrico vertical por un agujero en su fondo está descrita por: $\frac{dh}{dt} = -\frac{A_0}{A_w}\sqrt{2gh}$, donde: $g = 32$ ft/s^2

A_W y A_0 son las áreas transversales del tanque y del agujero respectivamente. Resolver la ecuación para una profundidad inicial h_0= 20ft con A_W = 50 ft$_2$ y A_0 = 0,5 ft$_2$:

a) Utilizando un método de Runge Kutta de orden 4

b) Utilizando el método de Adams-Bradford-Multon

Problema 6:

Fuente: **Davis, M.E.;** *Métodos y Modelos Numéricos para Ingenieros Químicos.* Compañía Editorial Continental de C.V. México, México D.F. 1990. (Pág. 19).

Los investigadores Kehole y Butt estudiaron la cinética de hidrogenación de benceno sobre catalizador con soporte Ni-kieselgurh. En presencia de un gran exceso de H_2 y a temperaturas inferiores a 200ºC la reacción es de pseudo primer orden con una velocidad dada por:

$$-r = Pk_0 K_0 T \exp\left[\frac{(-Q-E_0)}{R_g T}\right] * C_b$$

donde:	- R_g	=	constante de los gases: 1,987 cal / mol K
	- $Q\text{-}E_0$	=	2700 cal/mol
	- P	=	presión parcial de hidrógeno (torr)
	- k_0	=	4,22 mol/(gr cat s torr)
	- K_0	=	2,63 x 10-6 cm^3/(mol K)
	- T	=	Temperatura absoluta (K)
	- C_b	=	concentración de benceno (mol/cm^3).

Price y Butt han estudiado esta reacción en un reactor tubular. Si el reactor se considera isotérmico se pueden calcular fácilmente los perfiles adimensionales de concentración de benceno en su interior para un flujo dado. Dadas las siguientes condiciones de trabajo en el reactor tubular:

P=685 torr
Densidad del lecho del reacto r= 1,2 g cat/cm^3
θ = tiempo de contacto = 0,226 s
T= 150ºC

a) encontrar el tamaño de paso máximo para obtener el perfil de concentraciones mediante el algoritmo de Euler.
b) Aplicar un algoritmo de RK de segundo orden para la integración del problema.
c) Aplicar el algoritmo de Euler implícito para los tamaños de paso que no dan estabilidad con los métodos explícitos para demostrar que en este algoritmo son estables.