TEMA 6:

TRANSPORTE EN ESTADO ESTACIONARIO (II): PROBLEMAS ODE-BVP NO LINEALES Y SISTEMAS DE ODE-BVP

PROBLEMAS PROPUESTOS

Asignatura: **Cálculo Avanzado de Procesos Químicos.**

Titulación: **Ingeniería Química**

Curso: **Cuarto**

Cuatrimestre: **Primero**

PROBLEMAS PROPUESTOS

Problema 1:

Fuente: **Davis, M. E.**; *Métodos y Modelos Numéricos para Ingenieros Químicos*. Compañía Continental S.A. de C.V. México. 1990. (Pág 77).

Un problema importante en Ingeniería química es predecir la difusión y reacción de una partícula porosa de catalizador. La conservación de masa en un dominio esférico da:

$$D\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dc}{dr}\right)\right] = k\Phi(c), \quad 0 < r < R$$

donde:

r= coordenada radial (r_p = radio de la partícula)
D = difusividad del reactivo en la partícula de catalizador.
C = concentración del reactivo.
K= constante de velocidad de la reacción
$\Phi(c) =$ función de velocidad de la reacción.
Con:

$$\frac{dc}{dr}(0) = 0 \qquad \text{(simetria respecto al origen)}$$

$$c(r_p) = c_0 \qquad \text{(concentración fija en la superficie)}$$

Si el sistema es isotérmico no se necesita balance de energía.

Para una esfera de 5 mm de diámetro de γ-alúmina sobre la cual se dispersa platino a fin de catalizar la deshidrogenación de ciclohexano, a una temperatura de 700 K, la constante de velocidad es de k= 4 s^{-1}, y la difusividad D= 5 x10^{-2} cm^2/s. Se pide:

a) obtener la ODE de 2º orden que modela el perfil de concentración del reactivo en la partícula de catalizador en variables adimensionales.

b) Obtener el sistema de ODEs de 1º orden equivalente.

c) Indicar las condiciones IVP reales y supuestas necesarias para resolver el problema por el método del disparo, así como la condición que se utilizará para comprobar la bondad de la aproximación obtenida.

d) Aplicando la lógica de la Ingeniería Química, ¿qué forma le corresponde al perfil buscado?

e) Obtener una aproximación numérica a la solución de este problema.

Para dos casos 1º) R(c) =C, 2º) R(c) =C^2

Problema 2:

Fuente: **Riggs, J. B.;** *An Introduction to Numerical Methods for Chemical Engineers.* Texas Tech University Press. 1994. (Pág. 264)

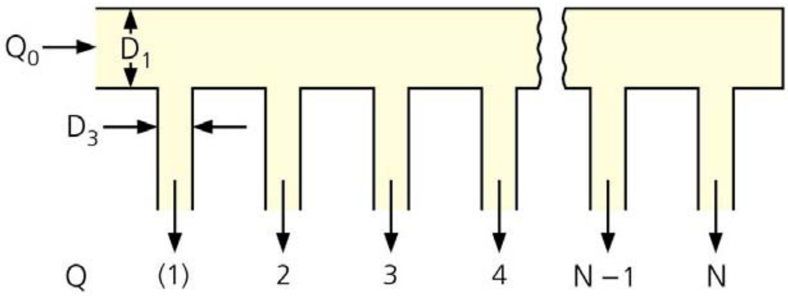
La distribución del flujo en un sistema dispersor como la de la figura se puede describir mediante la ecuación adimensional:

$$\begin{cases} Q'\,Q'' + \phi_1\, Q^2 + M_1 Q\, Q' = 0 \\ Q(0) = 1{,}0 \\ Q(1) = 0{,}0 \end{cases}$$

donde:

$$\phi_1 = \left(\frac{N^2 D_3^4}{H D_1^4}\right)\left(\frac{fL}{2D_1}\right)$$

$$M_1 = \left(\frac{N^2 D_3^4}{H D_1^4}\right)\Theta$$



N= número de bocas.

D_3=diámetro de las bocas (m)

D_1= diámetro de la tubería central (m)

f= factor de fricción (adimensional)

H= coeficiente de resistencia lateral (adimensional)

L=longitud de la tubería (m)

Θ= factor de corrección del momento global (adimensional)

Q= caudal de flujo volumétrico normalizado (adimensional)

X= longitud de tubería (adimensional)

Obtener el sistema general de ecuaciones algebraicas no lineales a resolver y la matriz jacobiana necesaria para la resolución del problema mediante técnicas de diferencias finitas.

Problema 3:

Fuente: **Davis, M. E.** *Métodos y Modelos Numéricos para Ingenieros Químicos.* Compañía Editorial Continental de C. V. México. 1990. (Pág 102).

Una clase de problemas concernientes a la difusión de oxígeno a una célula en la cual se efectúa una reacción catalizada enzimáticamente ha sido formulada y estudiada mediante la teoría de la perturbación singular por Murray et al. La ecuación de transporte que rige la concentración uniforme C de algún sustrato es una reacción catalizada por enzima que tiene la forma general: $\nabla(D\nabla C) = g(C)$. Aquí D es el coeficiente de difusión molecular del sustrato en el medio que contiene bacterias uniformemente distribuidas y g(C) es proporcional a la velocidad de reacción. Consideraremos un caso con coeficiente de difusión constante D0 en una célula esférica con una velocidad de reacción acorde con la teoría de Michaleis Menten. La ecuación de la cinética de difusión se puede escribir con variables adimensionales como:

$$(x^2 y')' = x^2 f(y), \qquad 0 < x < 1$$

donde:

$$x = \frac{r}{R}, \qquad y(x) = \frac{C(r)}{C_0}, \qquad \varepsilon = \left(\frac{D_0 C_0}{nqR^2}\right), \qquad f(y) = \varepsilon^{-1} \frac{y(x)}{y(x)+k}, \qquad k = \frac{k_m}{C_0}$$

siendo: R= radio de la célula

C_0= concentración constante del sustrato en r>R.

k_m= constante de Michaelis

q= velocidad máxima a la cual la célula puede operar.

n= número de células.

Las condiciones frontera de este problema se deducen de considerar que i) la membrana tiene una permeabilidad infinita por tanto y(1)=1 ii) de la continuidad y simetría de y(x) con respecto a x=0 se cumplirá que y’(0)=0.

Encontrar el sistema de ecuaciones algebraicas no lineales y el jacobiano de dicho sistema que permitirán obtener el perfil de concentración de oxígeno en la célula.