TEMA 8:

PROBLEMAS PARABÓLICOS:

TIPOS DE PROBLEMAS DEL VALOR INICIAL EN UNA (O MÁS) DIRECCIONES ESPACIALES EN INGENIERÍA QUÍMICA. MÉTODOS NUMÉRICOS DE RESOLUCIÓN

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 Editorial Continental S.A. de C. V. México. 1990. (Pág. 194).

Un problema general de difusión-convección se puede describir mediante la siguiente ecuación PDE:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} - \lambda \frac{\partial \theta}{\partial x}, \qquad 0<x<1,\ t>0 \text{ Con: } \begin{array}{ll} \theta(0,t) = 1, & t > 0 \\ \frac{\partial \theta}{\partial x}(1,t) = 0, & t > 0 \\ \theta(x,0) = 0, & 0 < x < 1 \end{array} \qquad \text{donde } \lambda \text{ es una constante.}$$

Físicamente el problema puede representar flujo de fluido, calor o masa en el cual se propaga un perfil inicial discontinuo por difusión y convección, este último proceso con una velocidad de λ.

Resolver el problema mediante el método de líneas con λ=25, $\Delta x = 0{,}25$ y Δt=1,0; Δt=0,01 e Δt==0,001 (utilizar el método de Euler para integrar el problema IVP).

Problema 2:

Fuente: **Gerald, C. F., Wheatley, P. O**.; *Applied Numerical Analysis.* Addison- Wesley Publishing Company. 1994. (Pág. 624).

Un tubo hueco de 20 cm de longitud está inicialmente lleno de aire con un 2% de vapor de alcohol etílico. En la parte inferior del tubo se sitúa una bandeja de alcohol que evapora hacia el gas que tiene encima (la transferencia de calor desde los alrededores permite que la temperatura en el tubo sea constante, 30ºC, temperatura a la cual la Pv es de 0,1 atm). En la parte superior del tubo los vapores de alcohol se disipan rápidamente hacia la atmósfera. Si se consideran sólo los efectos de la difusión molecular, la concentración de vapor de alcohol en el tubo en función del tiempo y de la posición longitudinal puede determinarse a partir de:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

donde D es el coeficiente de difusión, con unidades de cm^2/sec en el sistema cgs. Para el alcohol etílico D=0,119 cm^2/sec a 30ºC y la presión de vapor es tal que el aire del tubo en contacto con la superficie de la bandeja tiene un 10% en volumen de alcohol.

a) Indicar cuáles son las condiciones de integración de este problema.

b) Si Δx = 4 cm ¿Cuál es el valor máximo de Δt permisible para determinar las concentraciones de alcohol en el sistema mediante el método explícito?

c) Obtener la evolución de la $C_{alcohol}$ para los primeros 270 s mediante el método explícito (Δx = 4 cm).

d) Encontrar el sistema de ecuaciones para resolver el mismo problema mediante el método de Crank-Nicolson.

Problema 3:

Fuente**: Davis, M.E.;** *Métodos y Modelos Numéricos para Ingenieros Químicos*. Compañía Editorial Continental de C.V. México. 1990. (Pág. 160).

Considérese el problema de conducción de calor en una varilla sometida a entrada de calor en el punto x=0 y a pérdida de calor por convección en el punto x=1. El sistema se describe mediante la ecuación:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Las condiciones límite vienen expresadas por: $T = T_0$ para t=0, para 0<x<1

$$-k\frac{\partial T}{\partial x} = h_1(Ta - T) \text{ para x=0}$$

$$-k\frac{\partial T}{\partial x} = h_2(T - Tb) \text{ para x=1}$$

siendo: T= temperatura adimensional

T_0= temperatura inicial adimensional

h_1, h_2 = coeficientes de transferencia de calor por convección.

Ta, Tb= temperaturas de referencia adimensionales.

k = conductividad térmica de la varilla

ρCp= producto de densidad por capacidad calorífica de la varilla

Plantear el sistema de ecuaciones algebraicas que representa este problema (Δx=0,25 m, Δt=0,25 s, t_f=1 s)

Problema 4:

Fuente: **Schiesser, W.E., Silebi C.A.;** *Computational Transport Phenomena. Numerical Methods for the Solutions of Transport Probems*. Cambridge University Press. 1997. (Pág. 25).

Considérese la ecuación (PDE) presentada por Bird, Stewart and Lightfoot (1960, 126, eq.(4.1-21)) para flujo laminar en tubos circulares en estado no estacionario: $\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = 4 + \frac{1}{\xi}\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\xi \frac{\partial \phi}{\partial \xi}\right)$

donde: $\phi = \frac{v_z}{(p_0 - p_l)R^2/(4\mu L)} = \frac{v_z}{v_{max}}, \quad \xi = \frac{r}{R} \quad \tau = \frac{vt}{R}$

Las condiciones de integración: $\begin{cases} \phi(0,\xi) = 0 \\ \phi(\tau,1) = 0 \\ \frac{\partial \phi}{\partial \xi}(\tau,0) = 0 \end{cases}$

a) Presentar el sistema ODE-IVP que resulta de discretizar el radio en 5 incrementos.

b) Obtener el sistema de ecuaciones algebraicas resultante de aplicar el método implícito.