Profesor: Tomás Vargas **Auxiliar:** Melanie Colet

Tarea N° 2 (Coeficiente 2)

(Fecha de Entrega: Viernes 17 de Octubre de 2008)

PROBLEMA N° 1

Considere una reacción homogénea de equilibrio como la siguiente:

$$A + B \leftrightarrow C + D$$

, la cual ocurre al interior de un *reactor en flujo pistón*. El sistema anterior es <u>exotérmico</u>, de manera que al liberar calor es necesario contar con un sistema de enfriamiento del equipo mediante el uso de una chaqueta externa a través de la cual fluye un refrigerante. Si la temperatura en cualquier punto del reactor supera los 120 °C el producto de interés, C, se degrada, lo cual debe evitarse manteniendo el sistema bajo esta temperatura.

Considere las siguientes condiciones de operación y propiedades fisicoquímicas:

- Las dimensiones del reactor son: 4 cm de diámetro y 5 m de largo
- El coeficiente de transferencia de calor global entre la solución al interior del reactor y el refrigerante que circula por la chaqueta es igual a $110^{cal}/m^2$ -s-°K
- Capacidad calorífica de la solución al interior del reactor: 262.000 cal/m³.°K
- Capacidad calorífica del refrigerante 1.200.000 cal/m °K
- Entalpía de reacción: 120,7 Kcal/mol A
- La cinética de la reacción se rige de acuerdo a la expresión:

$$r = k_1 \cdot \exp(-15.000[^{\circ} \text{K}]/T) \cdot [A] \cdot [B] - k_2 \cdot \exp(-15.000[^{\circ} \text{K}]/T) \cdot [C] \cdot [D]$$

, donde:
$$k_1$$
 = 8,6 x $10^{12 \text{ m}3}/_{\text{s-mol}}$; k_2 = 8,6 x $10^{8 \text{ m}3}/_{\text{s-mol}}$

- 1) Plantee los balances de masa y energía a lo largo del reactor (es decir, en función de la variable x de posición) utilizando para ello un método de diferencias finitas. Con esto obtendrá un sistema de ecuaciones diferenciales a resolver.
 - HINT: Básicamente lo que debe hacer es tomar un volumen diferencial de reactor y desarrollar los balances sobre éste. Se recomienda consultar el capítulo 3 y 5 del Smith, "Ingeniería de la Cinética Química".
- 2) Explique teóricamente, mediante expresiones matemáticas. cómo se programa básicamente el método de Runge Kutta a través del cual es posible resolver este sistema. Solamente plantee las ecuaciones y la forma en que se calculan los parámetros del sistema justificando el por qué de su forma, no programe dicho código. (Infórmese al respecto en textos de cálculo numérico)
- 3) Resuelva el sistema anterior utilizando alguno de los métodos de Runge Kutta integrados en Matlab (ode45, ode23, etc).

Para la resolución considere las siguientes condiciones de operación:

Flujo de solución en el reactor: 250 cc/s

Flujo de agua: 500 cc/s

Concentraciones iniciales: $[A]_0 = 175^{\text{moles}}/_{\text{m}}^3$; $[B]_0 = 2.000^{\text{moles}}/_{\text{m}}^3$; $[C]_0 = [D]_0 = 0$

Temperatura inicial de la solución en el reactor: 373,15 °K

Temperatura inicial del refrigerante: 279,15 °K

Con la solución obtenida mediante las funciones integradas de Matlab verifique si el sistema cumple con las condiciones de operación requeridas, de no ser así plantee, <u>al menos</u>, dos formas de mejorar el funcionamiento variando los parámetros.

Sus resultados deben incluir gráficos asociados a los perfiles de conversión y temperatura a lo largo del reactor.

NOTA: El sistema debe ser modelado en el estado estacionario

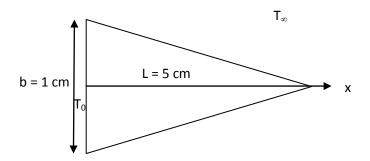
PROBLEMA N° 2

Considere una aleta de aleación de aluminio ($k = 180^{\text{W}}/\text{m} \cdot \text{c}$), de sección transversal triangular, con longitud L = 5 cm, espesor de la base b = 1 cm y ancho w muy grande en la dirección perpendicular al plano del papel. La base de la aleta se mantiene a una temperatura de $T_0 = 200$ °C. La aleta pierde calor hacia el medio circundante que está a $T_\infty = 25$ °C, con un coeficiente de transferencia de calor $h = 15^{\text{W}}/\text{m}^2$. Mediante el método de las diferencias finitas, con seis nodos igualmente espaciados a lo largo de la aleta en la dirección x, determine:

- a) Las temperaturas en los nodos. Grafique.
- b) La velocidad de la transferencia de calor desde la aleta para w = 1 m.
- c) Realice el mismo cálculo para cuatro, ocho, y diez nodos. Grafique sus resultados y determine el error relativo de ellos utilizando como valor comparativo el calor transferido.

Debe presentar el balance de calor realizado (en <u>estado estacionario</u>) y además especificar las suposiciones realizadas.

Se recomienda resolver los sistemas obtenidos con ayuda de Matlab, Excel u otro software matemático.



- TODOS LOS CÓDIGOS UTILIZADOS PARA RESOLVER LA TAREA DEBEN SER ENTREGADOS POR U CURSOS JUNTO CON EL INFORME DE RESULTADOS
- CUALQUIER CONSULTA A LOS AYUDANTES O AUXILIAR DEL CURSO