

MASA TOTAL EN REACTOR QUIMICO



PROBLEMA PROPUESTO

La integración proporciona un medio para calcular cuánta masa entra o sale de un reactor durante un periodo específico de tiempo, así:

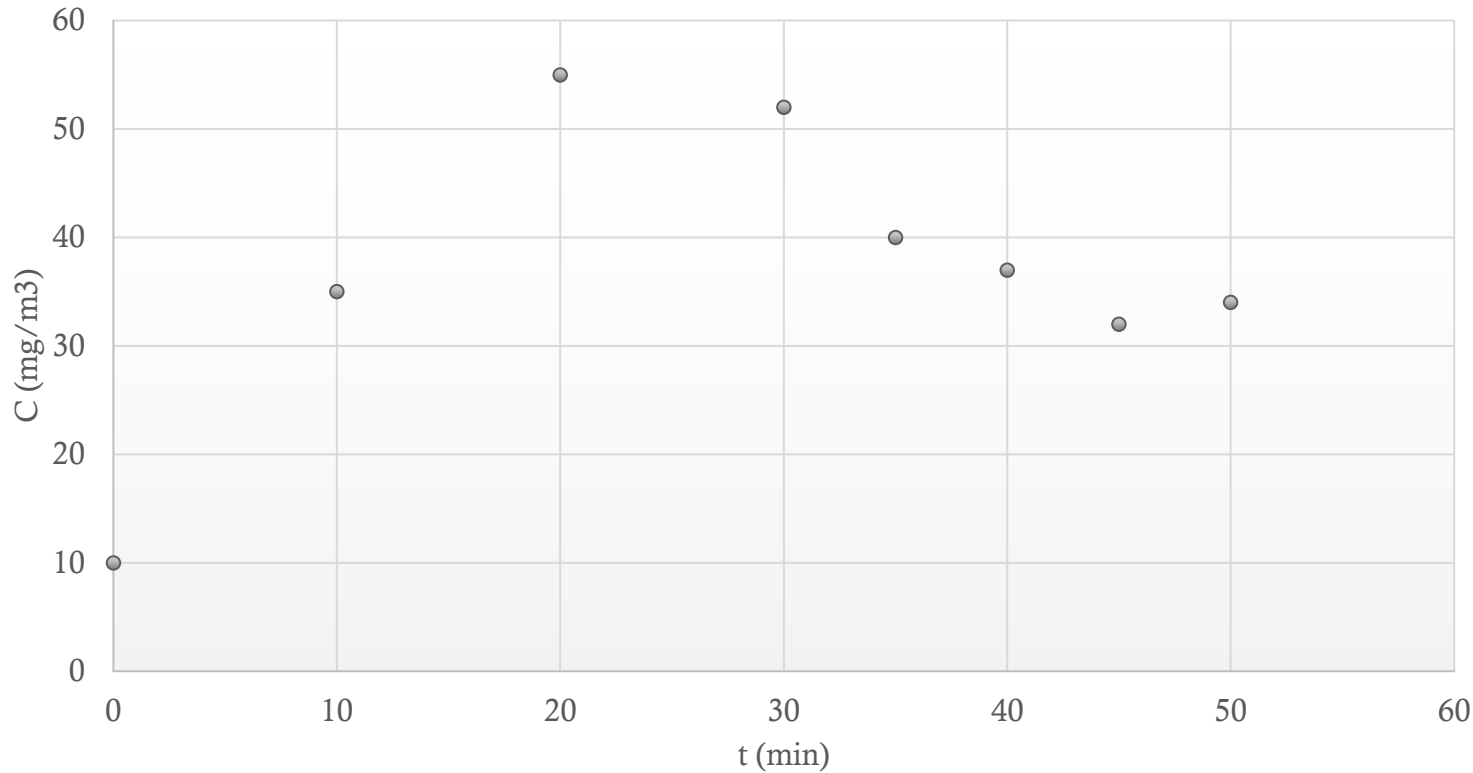
$$M = \int_{t_i}^{t_f} Q \cdot C \cdot dt$$

donde t_i y t_f : tiempo inicial y final, respectivamente. La integral representa la suma del producto del flujo por la concentración, lo que da la masa total que entra o sale de t_i a t_f . La tasa de flujo Q se puede considerar constante, $Q = 4 \text{ m}^3/\text{min}$. Calcular la Masa total entre 0 y 50 min.

t (min)	0	10	20	30	35	40	45	50
C, mg/m ³	10	35	55	52	40	37	32	34

ANALISIS DEL PROBLEMA

Concentración vs tiempo



- Q es constante

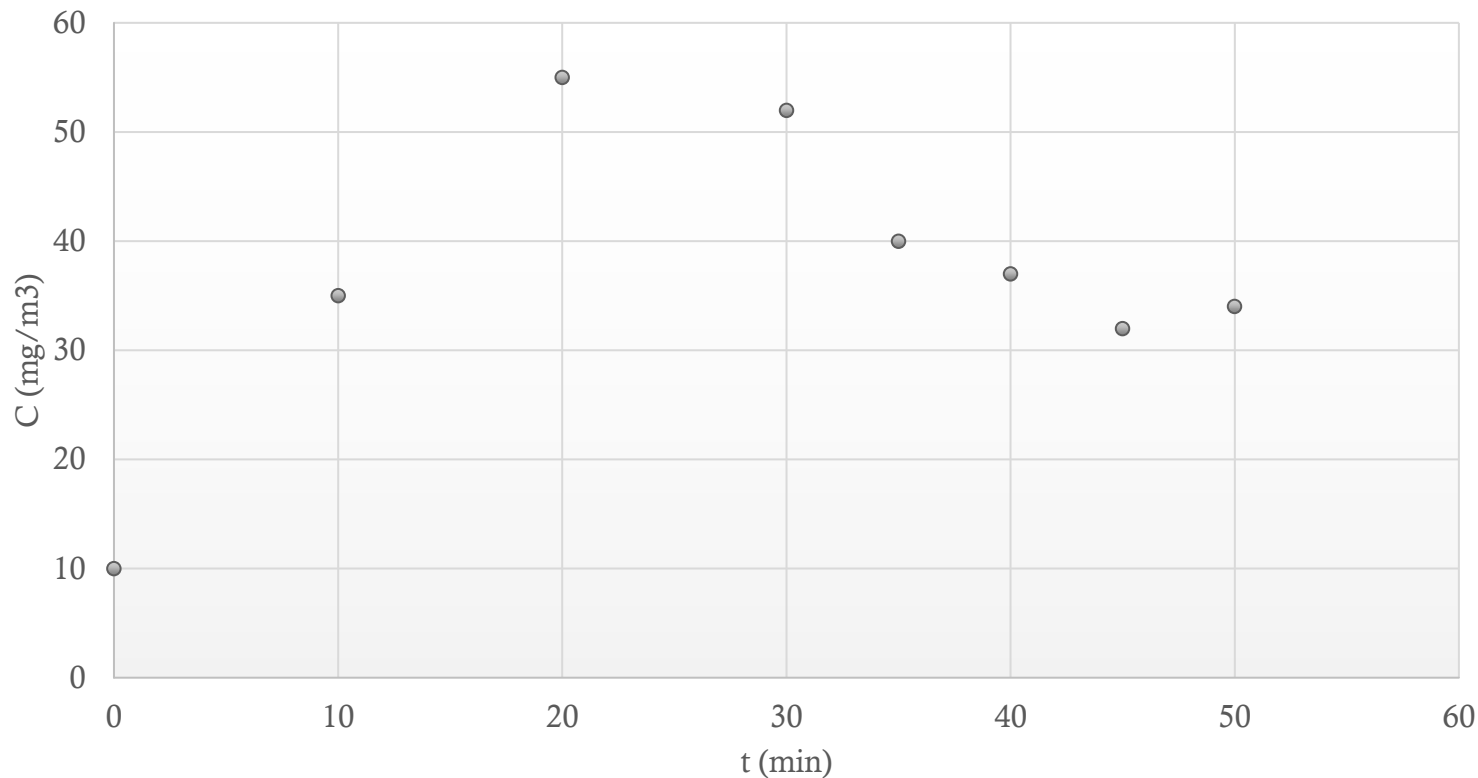
$$M = Q \int_{t_i}^{t_f} C \cdot dt$$

- Datos No equiespaciados
¿Cuál es el mejor método que podemos usar?



ANALISIS DEL PROBLEMA

Concentración vs tiempo

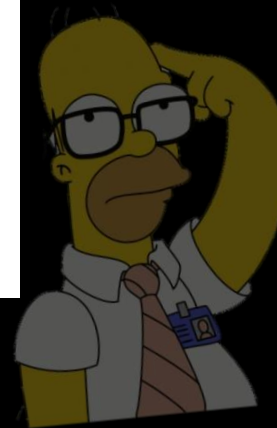


- Q es constante

$$M = Q \int_{t_i}^{t_f} C \cdot dt$$

- Datos No equiespaciados

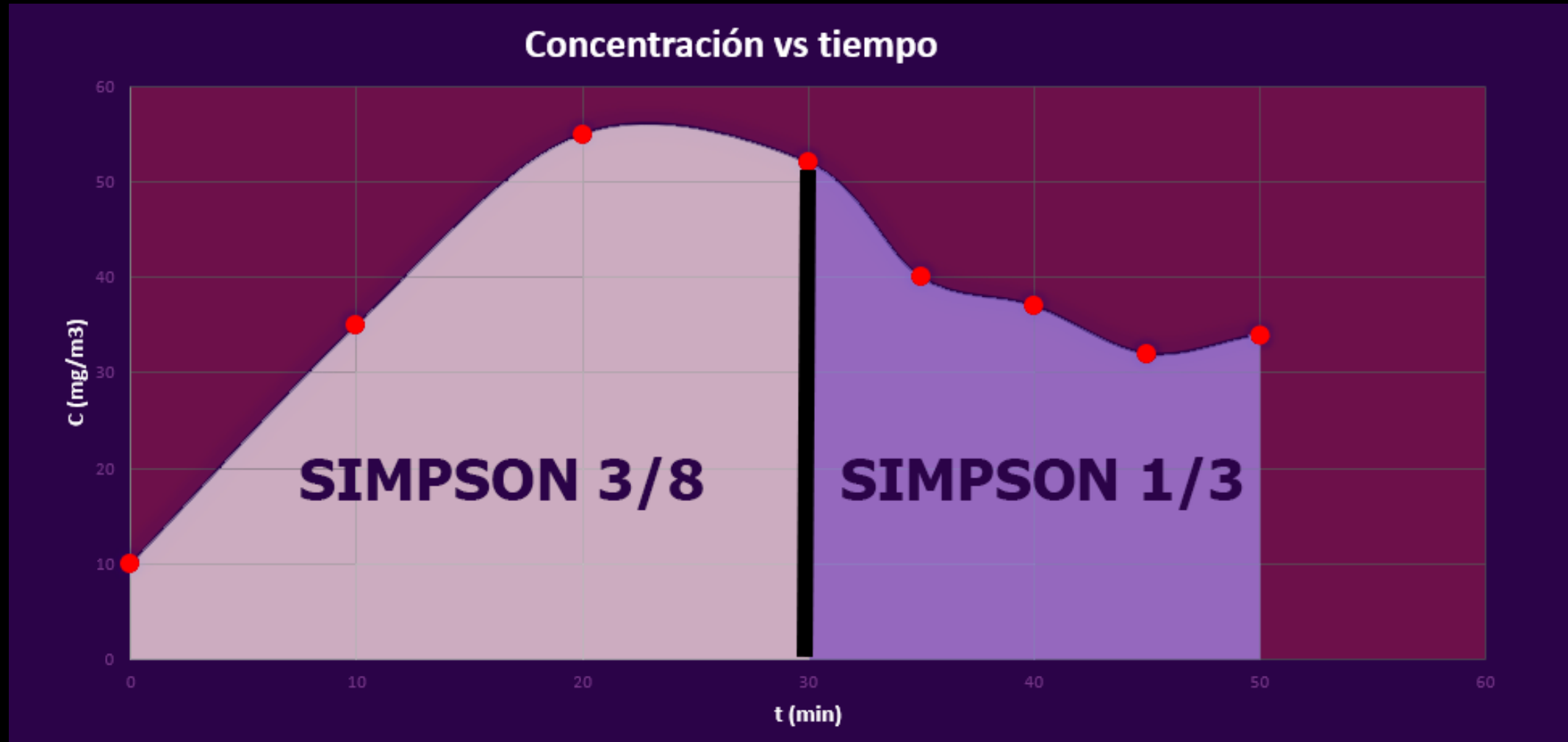
**Combinar
SIMPSON 1/3
y SIMPSON 3/8**



ANALISIS DEL PROBLEMA



ANALISIS DEL PROBLEMA



ESTRATEGIA DE RESOLUCION

- Aplicar *Simpson 3/8 Simple* usando los primeros cuatro puntos de la tabla $\rightarrow I_1$

$$I \cong \underbrace{(b-a)}_{\text{Ancho}} \underbrace{\frac{f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)}{8}}_{\text{Altura promedio}}$$

Regla de Simpson 3/8

- Aplicar *Simpson 1/3 Múltiple* para los puntos restantes $\rightarrow I_2$

Regla de Simpson 1/3 de aplicación múltiple

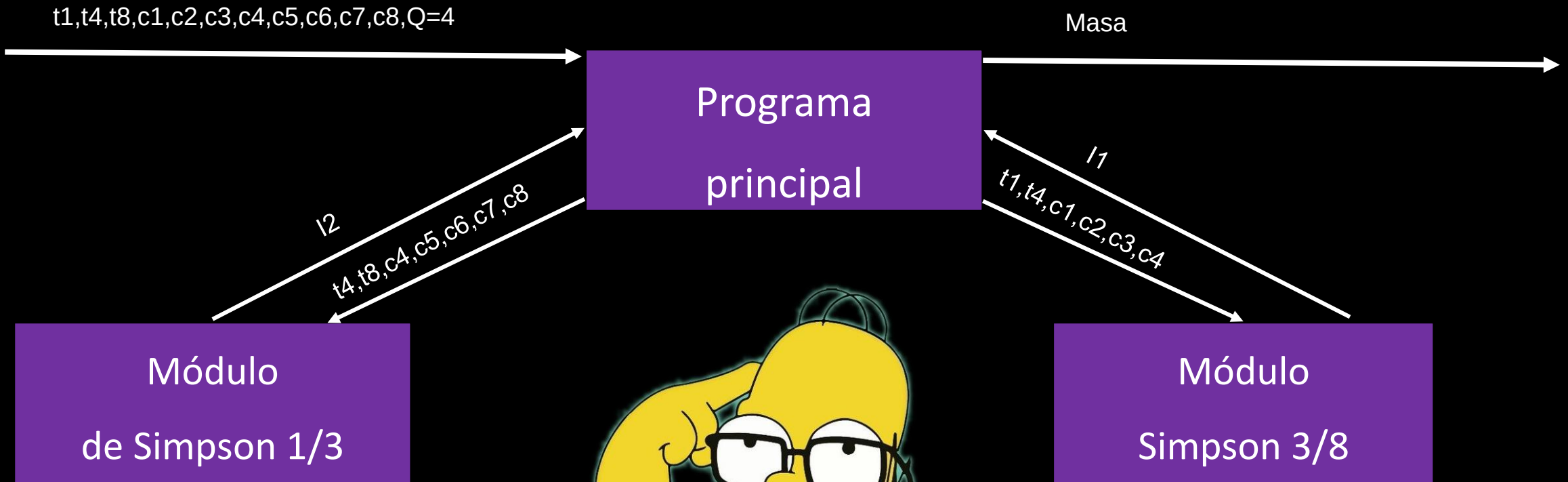
$$I \cong \underbrace{(b-a)}_{\text{Ancho}} \underbrace{\frac{f(x_0) + 4 \sum_{i=1,3,5}^{n-1} f(x_i) + 2 \sum_{j=2,4,6}^{n-2} f(x_j) + f(x_n)}{3n}}_{\text{Peso promedio}}$$

Se debe utilizar un número par de segmentos y por lo tanto $n+1$ puntos

- Sumar Los resultados Obtenidos $I = I_1 + I_2$
- Multiplicar el Resultado de la Integral por Q, para obtener M

$$M = Q \cdot I$$

Diagrama de estructura



ALGORITMO

#DATOS DE ENTRADA:

$Q = 4$ #Caudal

leer t_1

leer t_4

leer C_1

leer C_2

leer C_3

leer C_4

#CALCULO DE I_1 :

$$I_1 = (t_4 - t_1) \frac{(1 \cdot C_1 + 3 \cdot C_2 + 3 \cdot C_3 + 1 \cdot C_4)}{8}$$

leer t_8

leer C_5

leer C_6

leer C_7

leer C_8

#CALCULO DE I_2

$$I_2 = (t_8 - t_4) \frac{(1 \cdot C_4 + 4 \cdot C_5 + 2 \cdot C_6 + 4 \cdot C_7 + 1 \cdot C_8)}{12}$$

#CALCULO DE LA INTEGRAL Y M

$$I = I_1 + I_2$$

$$M = Q \cdot I$$

#DATOS DE SALIDA:

Mostrar M

CÓDIGO PYTHON

```
def simpson3_8(t1,t4,c1,c2,c3,c4):  
    return (t4-t1)*((1*c1+3*c2+3*c3+1*c4)/8)  
  
def simpson1_3(t8,t4,c4,c5,c6,c7,c8):  
    return (t8-t4)*((1*c4+4*c5+2*c6+4*c7+1*c8)/12)
```

```
Q=4  
t1 = int(input('ingrese t1: '))  
t4 = int(input('ingrese t4: '))  
t8 = int(input('ingrese t8: '))  
c1 = int(input('ingrese c1: '))  
c2 = int(input('ingrese c2: '))  
c3 = int(input('ingrese c3: '))  
c4 = int(input('ingrese c4: '))  
c5 = int(input('ingrese c5: '))  
c6 = int(input('ingrese c6: '))  
c7 = int(input('ingrese c7: '))  
c8 = int(input('ingrese c8: '))
```

```
I=simpson3_8(t1,t4,c1,c2,c3,c4) + simpson1_3(t8,t4,c4,c5,c6,c7,c8)
```

```
M=Q*I  
print('La masa es: ', round(M,1),'mg')
```

CALCULOS

$$I_1 = (t_4 - t_1) \frac{(1.C_1 + 3.C_2 + 3.C_3 + 1.C_4)}{8} = (30 - 0) \frac{(1.10 + 3.35 + 3.55 + 1.52)}{8}$$

$$I_1 = 1245$$

$$I_2 = (t_8 - t_4) \frac{(1.C_4 + 4.C_5 + 2.C_6 + 4.C_7 + 1.C_8)}{12} = (50 - 30) \frac{(1.52 + 4.40 + 2.37 + 4.32 + 1.34)}{12}$$

$$I_2 = 746,666666 \dots$$

$$I = I_1 + I_2 = 1991,66666 \dots$$

$$M = Q.I = 7966,6666 \dots$$

RESULTADOS

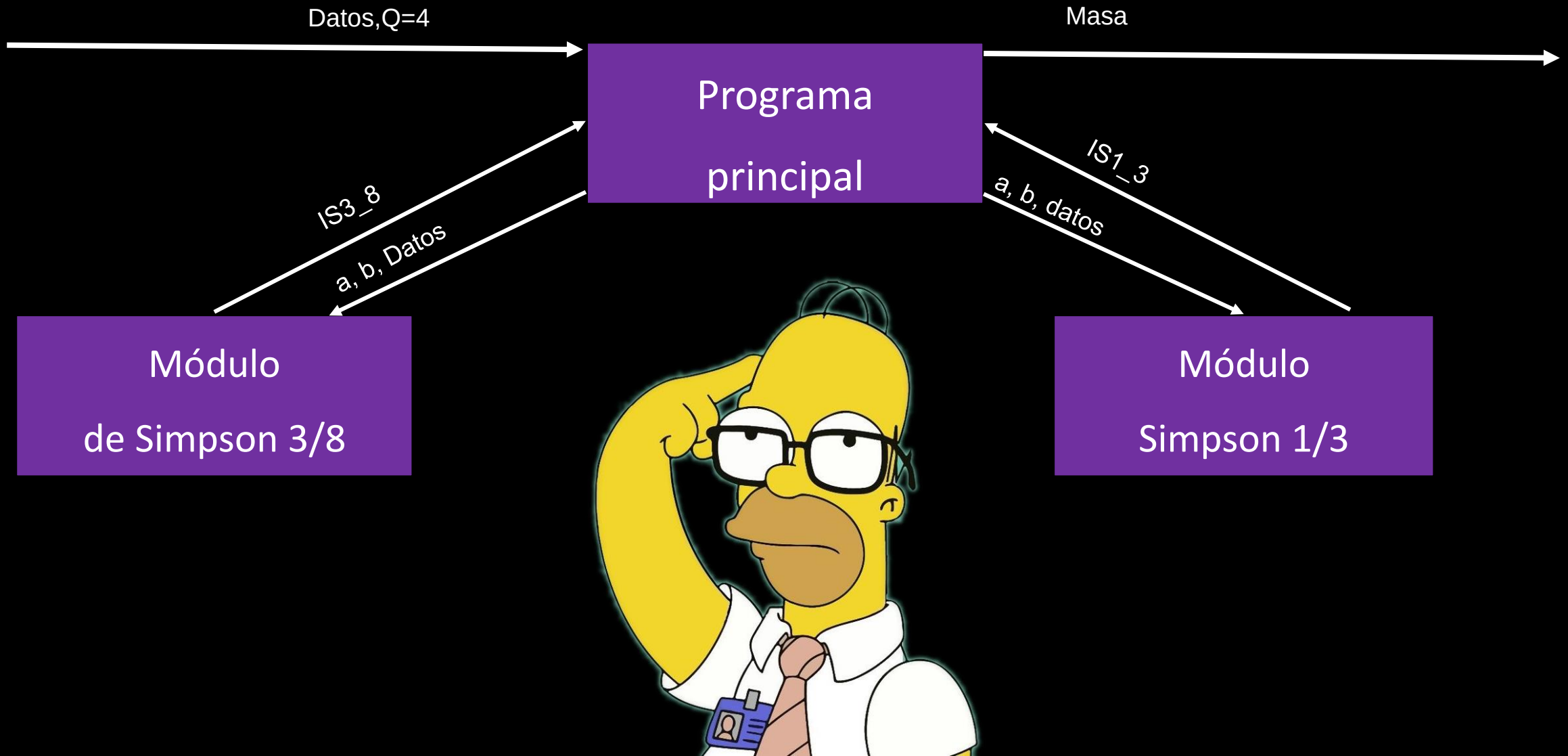
$$M = 7966,6666 \dots$$

¿Tiene sentido este resultado en el contexto de la problemática? ¿Cuántas cifras significativas uso?

Resultado contextualizado considerando 5 cifras significativas

$$M = 7966,6 \text{ mg}$$

Diagrama de estructura – Opción con estructura de datos



ALGORITMO

#ALGORITMO PRINCIPAL

```
Leer Q
Leer Datos en una lista
    0  1
0 [0,10]
1 [10,35]
2 [20,55]
3 [30,52]
4 [35,40]
5 [40,37]
6 [45,32]
7 [50,34]]
# Definir intervalos
x1=0
x2=3
x3=5
x4=7
#Calcular Integral
I=simpson3_8(x1,x2,datos) + simpson1_3(x2,x3,datos) + simpson1_3(x3,x4,datos)
#Calcular Masa
M=Q*I
Mostar M
```

#ALGORITMO SIMPSON 3/8

```
Retornar datos[b][0]-datos[a][0]) *
((datos[a][1]+3*datos[a+1][1]+3*datos[a+2][1]+1*datos[a+3][1])/8)
```

#ALGORITMO SIMPSON 1/3

```
Retornar datos[b][0]-datos[a][0]) *
((datos[a][1]+4*datos[a+1][1]+datos[a+2][1])/6)
```

CÓDIGO PYTHON

```
def simpson3_8(a,b,datos):  
    return (datos[b][0]-  
datos[a][0])*((datos[a][1]+3*datos[a+1][1]+3*datos[a+2][1]+1*datos[a+3][1])/8)  
  
def simpson1_3(a,b,datos):  
    return (datos[b][0]-datos[a][0])*((datos[a][1]+4*datos[a+1][1]+datos[a+2][1])/6)  
  
Q=4  
datos = [[0,10],[10,35],[20,55],[30,52],[35,40],[40,37],[45,32],[50,34]]  
x1=0  
x2=3  
x3=5  
x4=7  
I=simpson3_8(x1,x2,datos) + simpson1_3(x2,x3,datos) + simpson1_3(x3,x4,datos)  
M=Q*I  
print('La masa es: ', round(M,1),'mg')
```