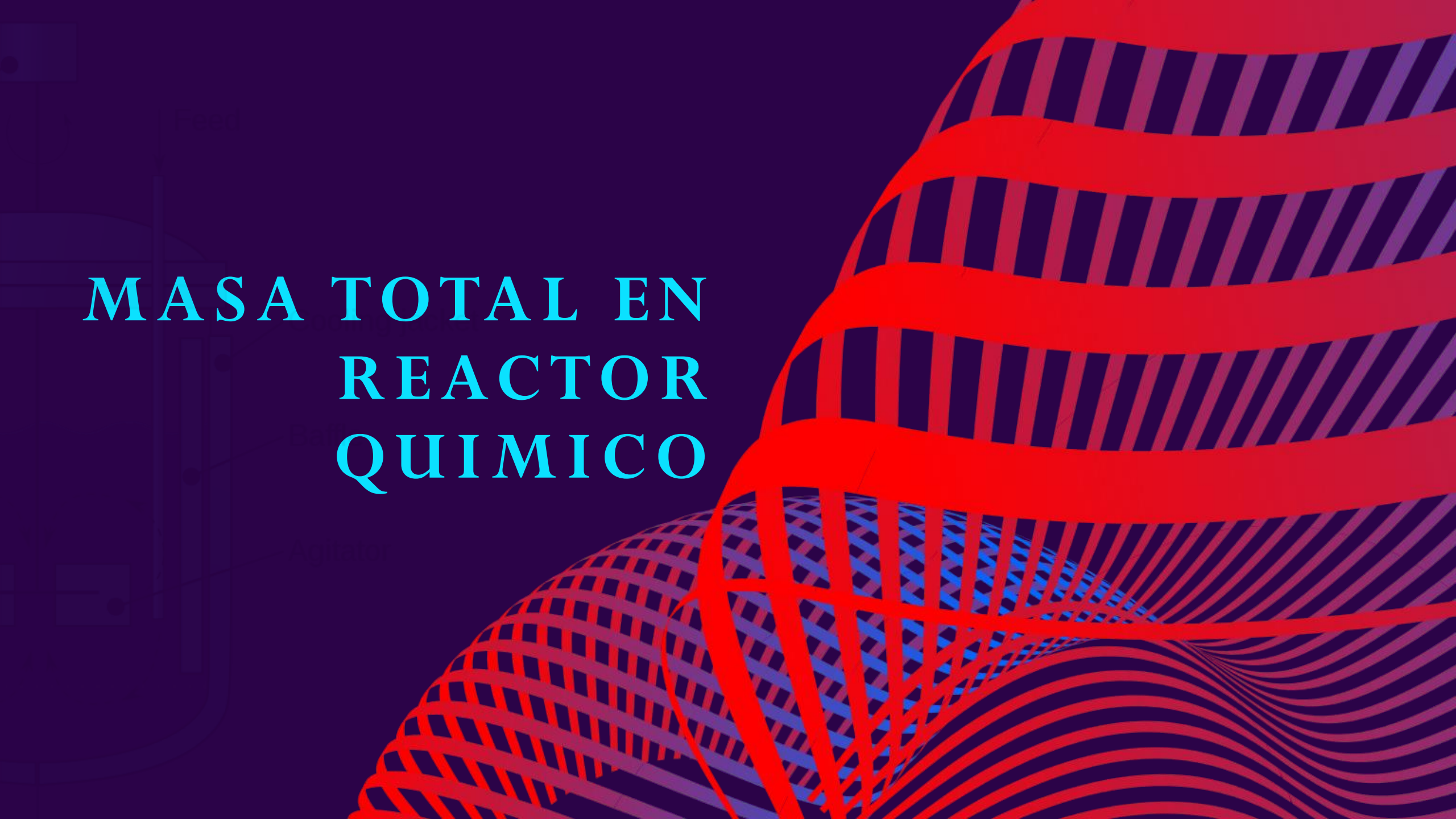


MASA TOTAL EN REACTOR QUIMICO



PROBLEMA PROPUESTO



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

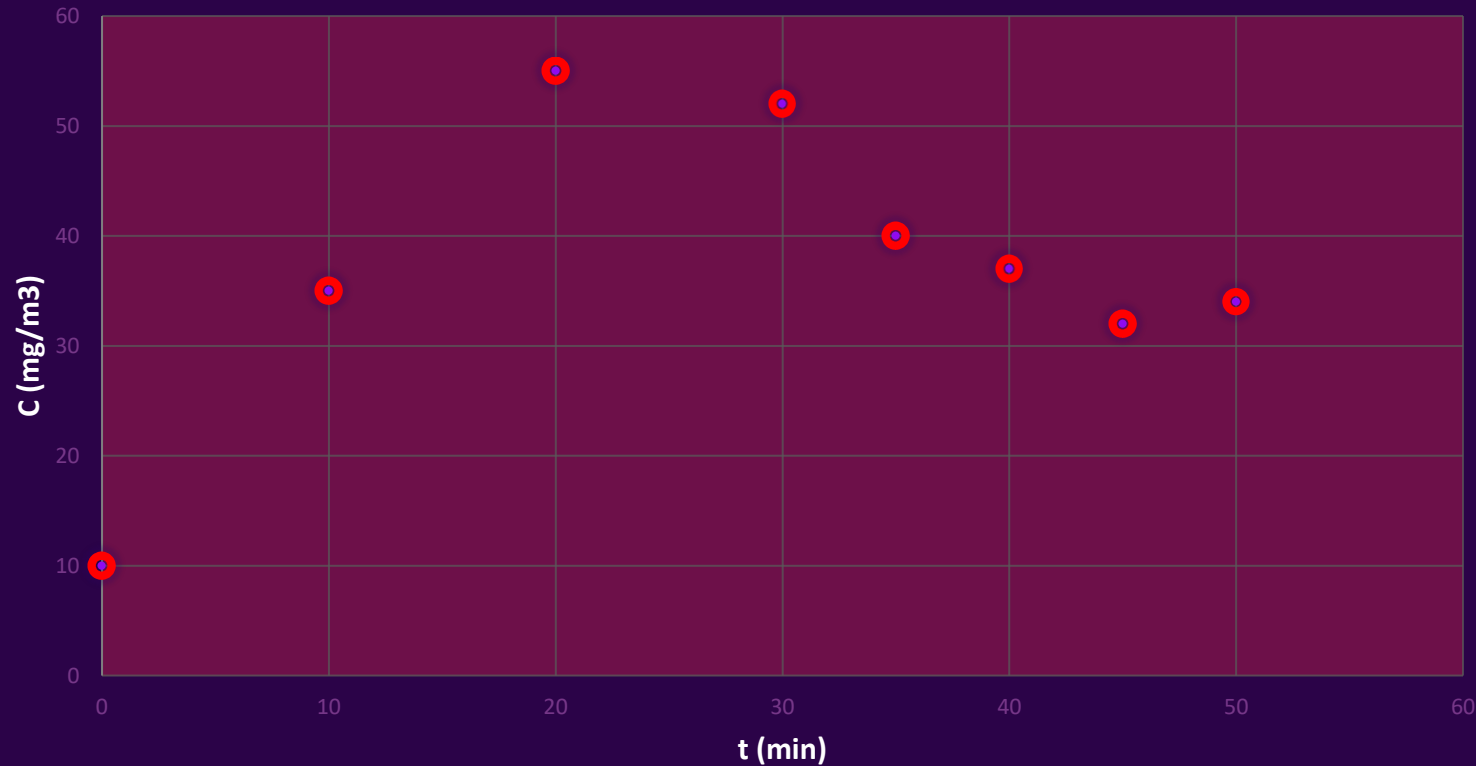
$$M = \int_{t_i}^{t_f} Q \cdot C \cdot dt$$

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

ANÁLISIS DEL PROBLEMA

Concentración vs tiempo

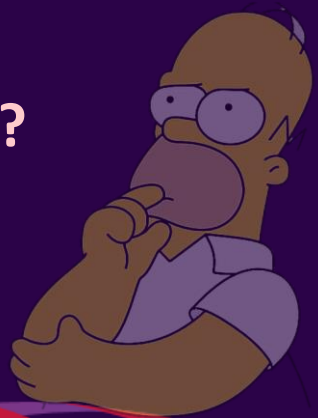


- Q es constante

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

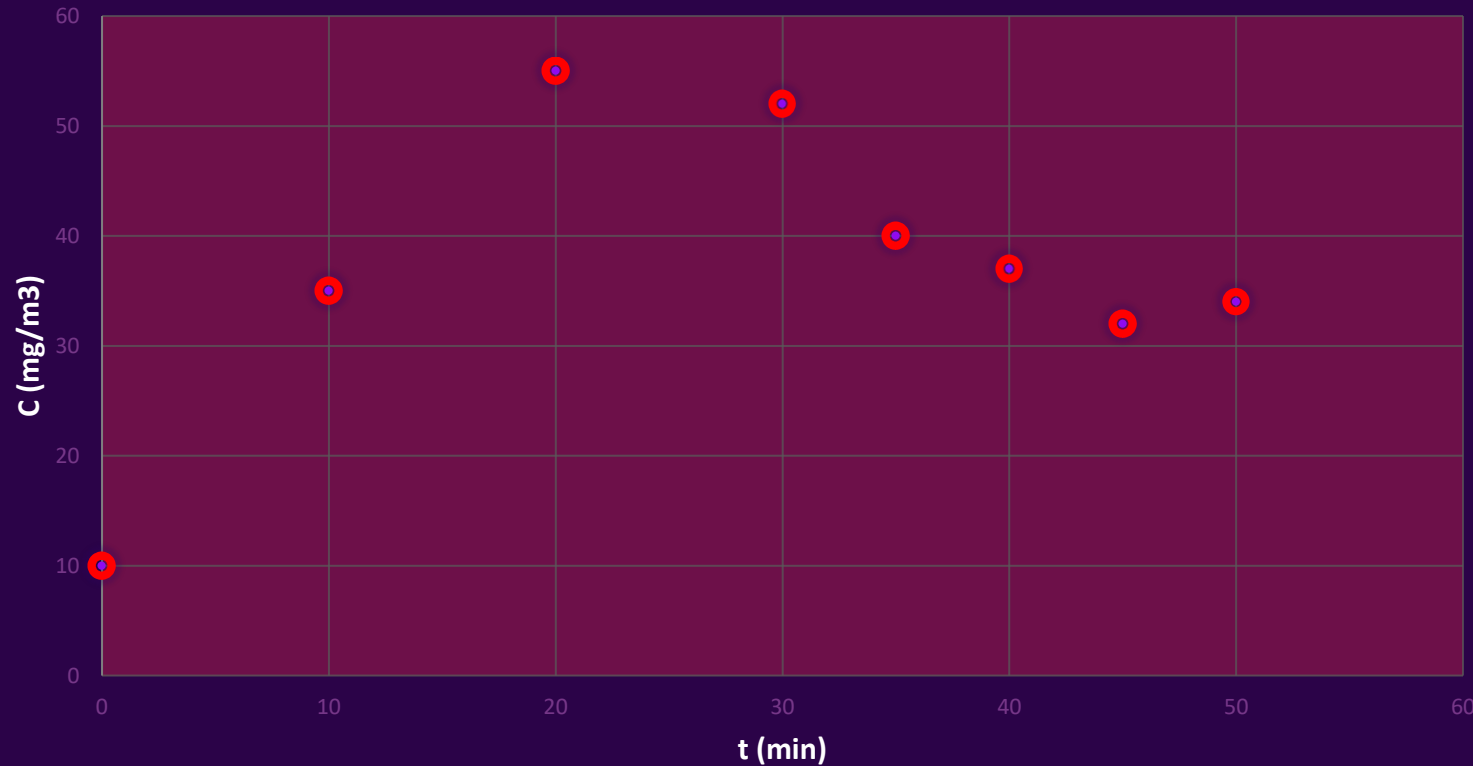
- Datos No equiespaciados

¿Cuál es el mejor
método que
podemos usar?



ANALISIS DEL PROBLEMA

Concentración vs tiempo



- Q es constante

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

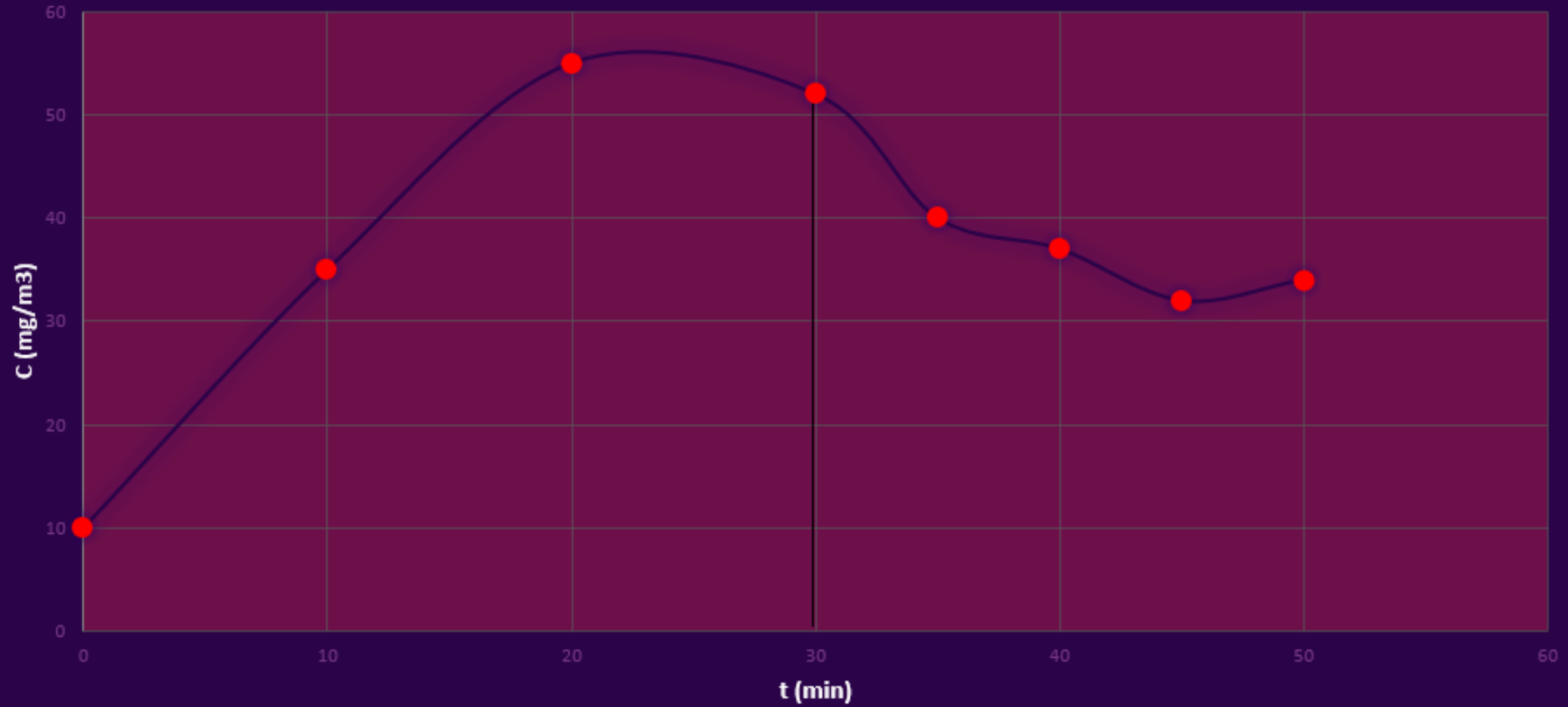
- Datos No equiespaciados

Combinar
SIMPSON 1/3
y SIMPSON 3/8



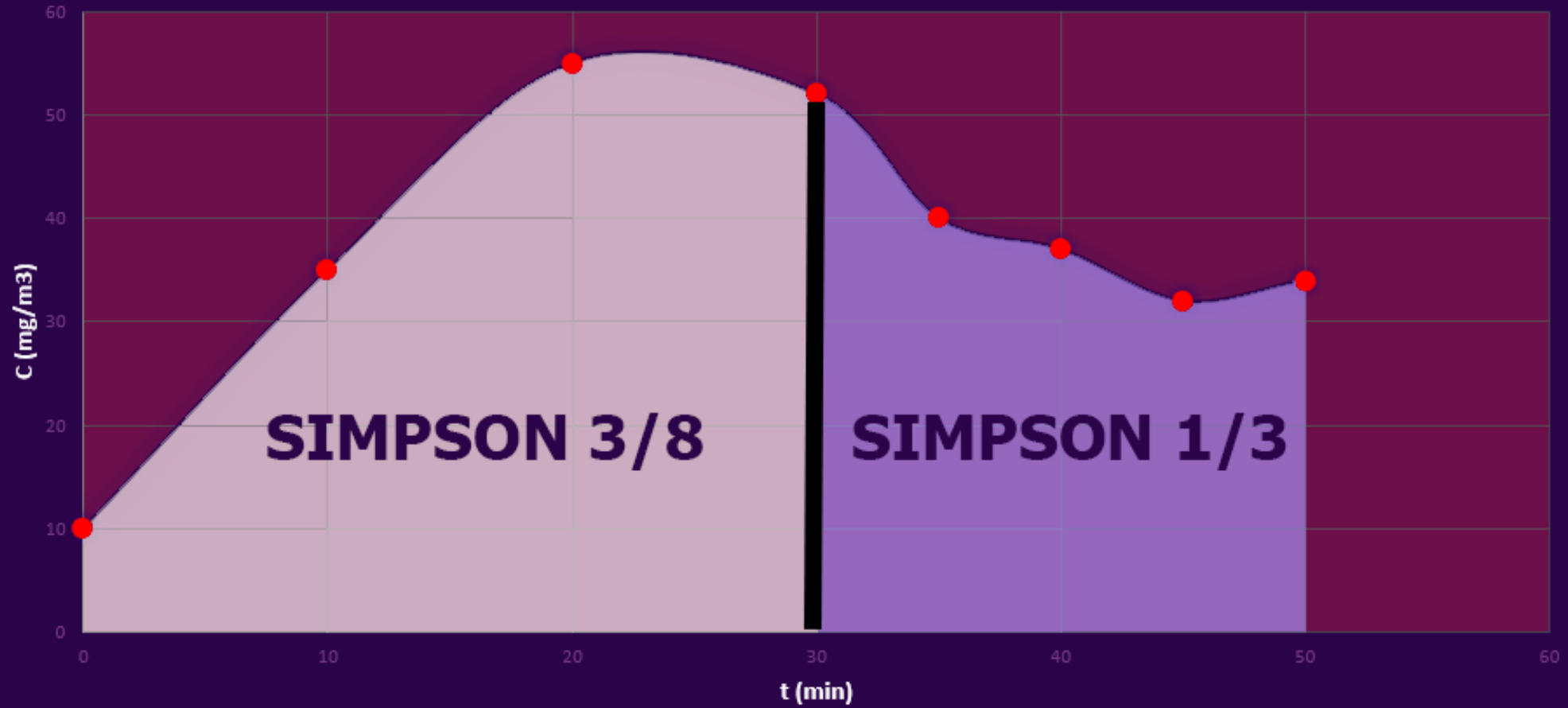
ANALISIS DEL PROBLEMA

Concentración vs tiempo



ANALISIS DEL PROBLEMA

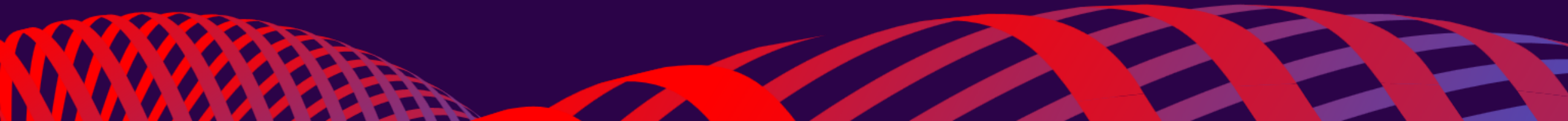
Concentración vs tiempo



ESTRATEGIA DE RESOLUCION

- Aplicar *Simpson 3/8 Simple* usando los primeros cuatro puntos de la tabla $\rightarrow I_1$
- Aplicar *Simpson 1/3 Múltiple* para los puntos restantes $\rightarrow I_2$
- Sumar Los resultados Obtenidos $I = I_1 + I_2$
- Multiplicar el Resultado de la Integral por Q, para obtener M

$$M = Q.I$$



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

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?

Resolución de una Balanza de precisión: 0,1 mg

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

ANALISIS DEL ERROR

- Error estimado en la regla de Simpson 1/3 de aplicación múltiple

$$E_a = -\frac{(b-a)^5}{180 \cdot n^4} \bar{f}^4$$

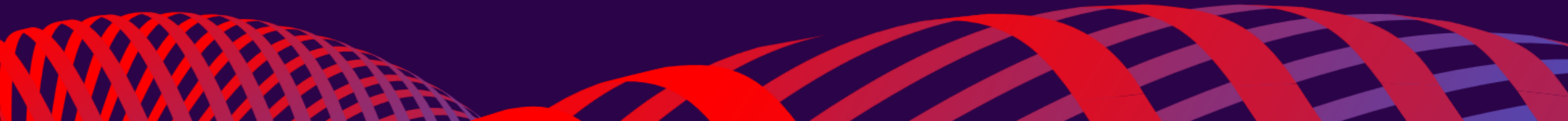
- Error estimado en la regla de Simpson 3/8 simple

$$E_a = -\frac{(b-a)^5}{6480} \bar{f}^4$$

¿ $\bar{f}^4$?  No tenemos la expresión analítica de la función integrada.



APROXIMACION DE LA DERIVADA CON DIFERENCIAS DIVIDIDAS FINITAS



ANALISIS DEL ERROR

Diferencias
divididas finitas
hacia adelante

Cuarta derivada

$$f''''(x_i) = \frac{f(x_{i+4}) - 4f(x_{i+3}) + 6f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^4} \quad O(h)$$

$$f''''(x_i) = \frac{-2f(x_{i+5}) + 11f(x_{i+4}) - 24f(x_{i+3}) + 26f(x_{i+2}) - 14f(x_{i+1}) + 3f(x_i)}{h^4} \quad O(h^2)$$

Diferencias
divididas finitas
hacia atras

Cuarta derivada

$$f''''(x_i) = \frac{f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + 6f(x_{i-2}) - 4f(x_{i-3}) + f(x_{i-4}))}{h^4} \quad O(h)$$

$$f''''(x_i) = \frac{3f(x_i) - 14f(x_{i-1}) + 26f(x_{i-2}) - 24f(x_{i-3}) + 11f(x_{i-4}) - 2f(x_{i-5}))}{h^4} \quad O(h^2)$$

Diferencias
divididas finitas
centradas

Cuarta derivada

$$f''''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + 6f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2}))}{h^4} \quad O(h^2)$$

$$f''''(x_i) = \frac{-f(x_{i+3}) + 12f(x_{i+2}) + 39f(x_{i+1}) + 56f(x_i) - 39f(x_{i-1}) + 12f(x_{i-2}) + f(x_{i-3}))}{6h^4} \quad O(h^4)$$

**MUCHAS
GRACIAS**

