Repartido 1

Modelado de procesos

1.1. Considere un tanque de 1 L con aislación, donde entra una corriente de agua caliente a 60 ºC que se mezcla con otra corriente de agua fría a 10 ºC. El caudal de salida es de 1 L/min.

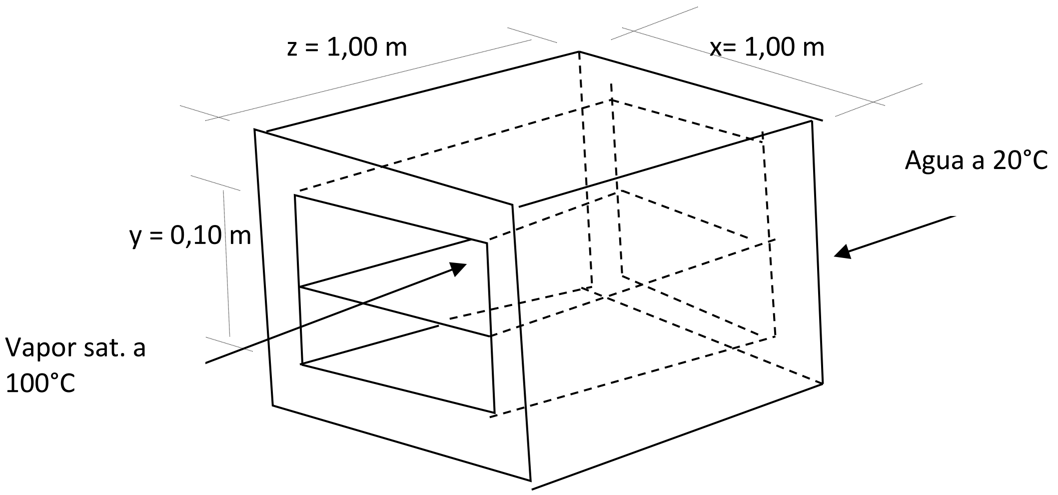
a. Realice el modelo del sistema y discuta los siguientes aspectos:

i. Definición del sistema y sus respectivas variables de entrada, estado y salida, así como sus parámetros.
ii. Hipótesis que va a aplicar al sistema.
iii. Sistema estacionario o dinámico.
iv. Sistema de parámetros globales o distribuidos.

b. Considerando el sistema en estado estacionario, represente en forma gráfica la temperatura de salida en función de la fracción del flujo de agua caliente.

c. Considerando el sistema en estado no estacionario, el volumen constante e igual al volumen total, y la temperatura de salida de partida de 35 ºC, grafique la evolución de dicha temperatura en el tiempo si hay un aumento del 20% en el flujo de agua caliente de entrada. Resolver T(t) de forma analítica.

1.2. Considere el siguiente sistema de intercambio de calor:



El caudal de agua es de 0,50 L/s, y el coeficiente de calor de la lámina del medio es U = 0,08 cal/(s.cm^2.ºC).

Determine y grafique el perfil de temperatura del agua desde la entrada a la salida en condiciones estacionarias.

1.3. Las ecuaciones de estado de un gas son relaciones entre la presión, el volumen y la temperatura. Por ejemplo, la ecuación de Van der Waals está dada por:

$$\left(P+\frac{a}{V^2}\right)(V-b)=RT \qquad a=\frac{27}{64}\left(\frac{R^2T_c^2}{P_c}\right) \qquad b=\frac{RT_c}{8P_c}$$

Con *P* presión en atm, *V* volumen molar en L/gmol, *T* temperatura en K, *R* constante de los gases (*R* = 0,082 L.atm/gmol.K), T_c temperatura crítica en K, P_c presión crítica en atm.

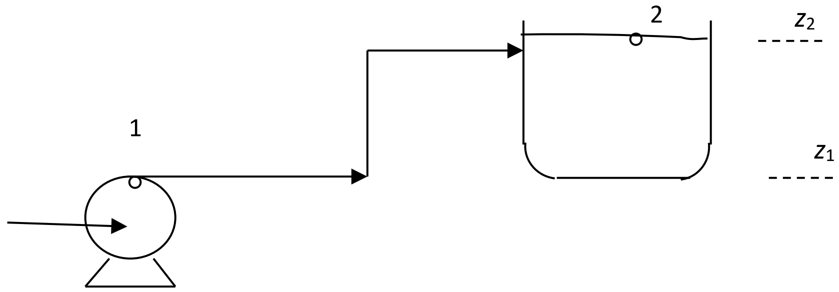
Se define la presión reducida como $P_r=\frac{P}{P_c}$, y el factor de compresibilidad como $Z=\frac{PV}{RT}$.

a. Para el amoníaco T_c = 405,5 K y P_c = 111,3 atm. Calcular el volumen molar y el factor de compresibilidad a una presión de 56 atm y a una temperatura de 450 K.
b. Graficar el factor de compresibilidad del amoníaco en función de la presión reducida, para una temperatura de 450 K. Considere valores de presión reducida entre 0 y 10.
c. Otra ecuación de estado es la de Redlich-Kwong.

$$P=\frac{RT}{V-b}-\frac{a}{V(V+b)\sqrt{T}} \qquad a=0{,}42747\frac{R^2T_c^{5/2}}{P_c} \qquad b=0{,}08664\frac{RT_c}{P_c}$$

Con P presión en atm, V volumen molar en L/gmol, T temperatura en K, R constante de los gases (R = 0,082 L.atm/gmol.K), Tc temperatura crítica en K, Pc presión crítica en atm.
Graficar en una misma figura el factor de compresibilidad para gas ideal, Van der Waals y Redlich-Kwong. Considere valores de presión reducida entre 0 y 10, para el amoníaco a 450 K.

1.4. En la figura se muestra una tubería que distribuye agua a una temperatura constante, *T* = 60 °F, desde el punto 1 donde la presión manométrica es p_1 = 150 psi y la elevación es z_1 = 0 ft hasta el punto 2 a presión atmosférica y elevación z_2 = 300 ft.



La densidad y la viscosidad del agua se pueden calcular a partir de las siguientes ecuaciones:

$$\rho=62{,}122+0{,}0122T-1{,}54\times10^{-4}T^2+2{,}65\times10^{-7}T^3-2{,}24\times10^{-10}T^4$$

$$\ln\mu=-11{,}0318+\frac{1057{,}51}{T+214{,}624}$$

Donde *T* se expresa en °F, ρ en lb_m/ft^3 y μ en lb_m/ft.s.

Se puede considerar el factor de fricción dependiente del Reynolds para régimen laminar y turbulento:

$$f_f = \begin{cases} \frac{16}{Re} & \text{si } Re < 2100 \\ \frac{1}{16}\left\{log\left[\frac{\varepsilon/D}{3,7} - \frac{5,02}{Re} log\left(\frac{\varepsilon/D}{3,7} + \frac{14,5}{Re}\right)\right]\right\}^{-2} & \text{si } Re > 2100 \end{cases}, \qquad \mathrm{Re} = \frac{v\rho D}{\mu}$$

Donde ε es la rugosidad del tubo (ε = 0,00015 ft para tubos de acero comercial).

Calcular la velocidad de flujo para una tubería con una longitud efectiva de L = 1000 ft y hecha de un tubo de acero comercial tipo 40 de 8 pulgadas de diámetro nominal. Considere estado estacionario.

1.5. Considere un reactor continuo agitado ideal con una cinética $r = kC/(1+K_S C)^2$, con q/V = 0,1 min^{-1}, C_{in} = 3,0 mol/L, k = 20 min^{-1} y K_s = 10 L/mol. Halle los puntos de estado estacionario del sistema. (Sugerencia: para verificar que se han encontrado todos los puntos de estado estacionario graficar la expresión de la función).

1.6. Considere la expresión de Van der Waals para los gases reales:

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT$$

Para el aire a 50 atm y –100 °C, a = 1,33 atm.L^2/gmol^2, b = 0,0366 L/gmol, R=0,08206 L.atm/gmol.K.

a. ¿Cuántas soluciones hay para V? (Sugerencia: transformar la relación a una forma polinómica)
b. Plantear el método de sustitución directa para hallar la raíz: $V_{k+1} = g(V_k)$ (escribir hasta tres alternativas), y proponga un valor inicial para la iteración.
c. Resuélvalo numéricamente con el método de sustitución directa. Graficar la evolución de V_k en función de k. Discutir sobre la estabilidad de los resultados.
d. Resolver el problema implementando el método de Newton.
e. Resolver el problema mediante la función *fsolve* y mediante la función *roots*.

1.7. Dados dos tanques de sección transversal constante conectados en serie (la salida del primero descarga por gravedad en el segundo):

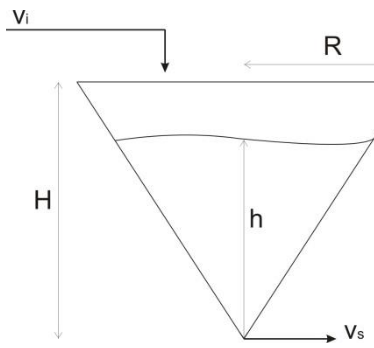
a. Desarrollar un modelo que, para un flujo de entrada v_{in}(t), describa la variación en el tiempo del nivel de líquido en el segundo tanque. Considere la aproximación de que el flujo de salida de cada tanque es linealmente dependiente del nivel del mismo ($v_1 = \beta_1 h_1$ y $v_2 = \beta_2 h_2$).
b. Considere los siguientes valores: v_{in} = 10 L/min, $A_1 = A_2$ = 1,5 m^2, $\beta_1 = \beta_2$ = 0,01 m^{2}min^{-1}. Calcule los valores de altura que se alcanzan en estado estacionario. Grafique la evolución de las alturas si se parte en ambos tanques de la mitad de dicha altura.

1.8. Los dos tanques de almacenamiento del ejercicio anterior se encuentran conectados en serie, pero ahora en el mismo nivel. Halle el modelo del sistema. Considere los siguientes casos:

- Proporcional ($v = \beta h$)
- Proporcional a la raíz cuadrada ($v = \beta\sqrt{h}$).

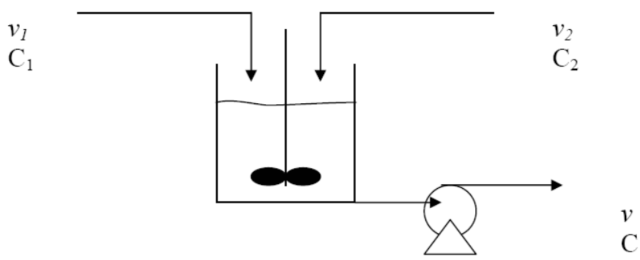
Con los valores del ejercicio anterior, grafique la evolución de las alturas si se parte de la mitad del valor de estado estacionario; en el segundo caso considere β = 0,01 $m^{5/2}$/min (verificar que el caudal es el mismo en ambas situaciones para el estado estacionario).

1.9. Considere un tanque de agua de geometría cónica como el de la figura. Escriba el modelo diferencial que rige el flujo de salida del mismo, si la dependencia de dicho flujo con la altura del líquido fuera: $v_S = \beta\sqrt{h}$. Señale las variables de estado, de entrada y los parámetros correspondientes. Grafique la altura del líquido partiendo del tanque vacío. Considere los siguientes valores: H = 1,0 m, R = 0,5 m, β = 0,0015 $m^{5/2}min^{-1}$ y una alimentación de 1 L/min.



1.10. Para el sistema de la figura, donde *C1* es la concentración del reactivo A en la corriente 1 (*v1*) y *C2* es la concentración de A en la corriente 2 (*v2*). Modelar los siguientes casos:

a) Volumen y densidad constante.
b) Volumen constante y $\rho = \rho_0(1+\alpha C)$.
c) Volumen variable y $\rho = \rho_0(1+\alpha C)$.



1.11. Un tanque de almacenamiento de gas es alimentado con una mezcla de dos componentes (H2 y CH4). Llámese y_i e y la fracción molar de metano presente en la alimentación y el tanque respectivamente. Hallar dP/dt y dy/dt si los flujos de entrada y salida pueden ser variables. Asuma que la mezcla gaseosa se comporta como gas ideal.

1.12. Sea un globo que se expande o contrae de forma tal que la presión interior en el mismo es aproximadamente la atmosférica.

a) Desarrolle un modelo matemático para el volumen del globo si este tuviera una pequeña pérdida, donde V es el volumen del globo y q el flujo molar de salida del mismo. Establezca las suposiciones que correspondan y enumere las variables de estado, de entrada y los parámetros.
b) Del globo con pérdidas se obtienen los siguientes datos:

t(min)	r(cm)
0	10
5	7,5

Prediga el momento para el cual el radio del globo alcanzará los 5 cm considerando:

i) Flujo molar de pérdidas constante.
ii) Flujo molar de pérdidas proporcional a la superficie del globo.

1.13. Sea un reactor semibatch (reactor agitado con una alimentación continua y sin salida), desarrolle las ecuaciones de modelado para una reacción irreversible de primer orden.

Sugerencia: tome como variables de estado el volumen del reactor (V) y la concentración del reactante A (C_A).

1.14. El COVID19 – "Achatar la curva"

En la transmisión de una enfermedad viral se suele considerar la existencia de tres tipos de poblaciones: la susceptible (S), la infectada (I) y la recuperada o inmunizada (R). La población susceptible se infecta en forma proporcional a la cantidad de infectados y a la fracción de susceptibles en la población total (N), siendo β el coeficiente de transmisión. La población infectada se recupera de la infección a una tasa γ por número de infectados. Parte de la población infectada muere; considere como **m** la fracción de muertos entre los infectados; una estimación primaria indica que se encuentra en torno al 3%.

a) Asumiendo que la población total no varía significativamente, escribir las ecuaciones del modelo.

b) Suele tomarse el parámetro γ como el inverso del tiempo medio de incubación de la enfermedad. Por ejemplo, en el caso del COVID19 se estima en unos 10 días en promedio (entre 7 y 14 días). El denominado "Basic Reproductive Number" refleja la relación entre la tasa de contagio β y la tasa de recuperación γ . Para este virus se estima un valor de Ro = 2.5 (no se tiene certeza, pero estaría entre 2 y 3). Considérese una ciudad de un millón de habitantes entre los que aparece un enfermo con COVID19. Graficar por un lado las cantidades de las distintas poblaciones (S, I, R) en el tiempo y por otro el número de muertes (M) (considerando como si fueran funciones continuas). Hacerlo en una sola figura (dos gráficas) con el mismo eje de tiempo.

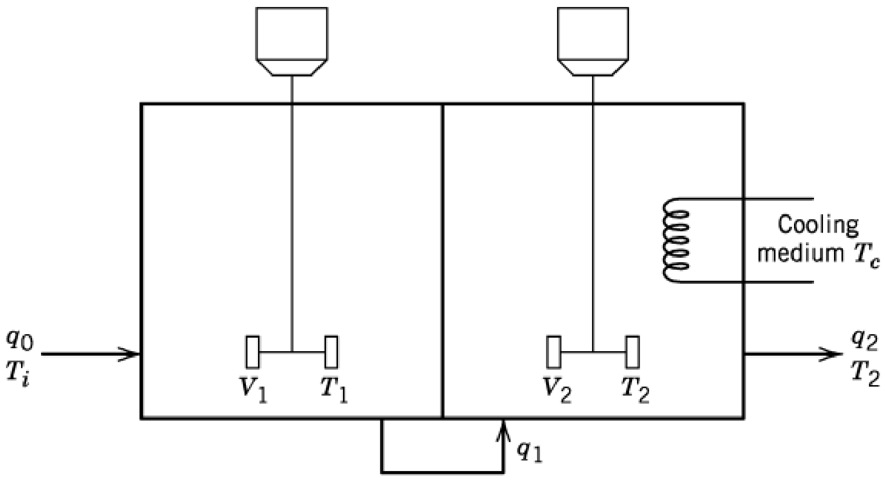
c) Determinar el tiempo en que aproximadamente el 50% de la ciudad ya pasó por la enfermedad.

d) Si se toman medidas para evitar el contacto entre las personas, el coeficiente de transmisión puede reducirse en un 40%. Grafique en una sola figura las curvas de infectados con y sin medidas.

e) Hay quien dice que, habiendo comenzado en el pico del invierno, la epidemia disminuirá naturalmente en el verano. Podría modelarse este efecto estacional asumiendo que la tasa de contagio varía cosinusoidalmente, considerando que existe un valor basal equivalente al 20% de la tasa máxima. Compare los resultados con las gráficas anteriores.

1.15. Un horno de proceso está calentando 150 lbmol/h de amonio en fase vapor. El calor aportado al horno es de 1,0 ×10^6 Btu/h y la temperatura de la alimentación es de 550 °R. Asumir comportamiento de gas ideal y que $C_p = a + bT + cT^{-2}$, con *a* = 7,11 Btu/lbmol.°R, *b* = 3,33×10^{-3} Btu/lbmol.°R^2, *c* = -1,20×10^5 Btu.°R/lbmol y recordando que $Q = \dot{n}\int_{T_{in}}^{T_{out}} C_p dT$, con $\dot{n}$ el flujo molar de gas.

a. Hallar la temperatura de salida del amonio utilizando *fsolve*.
b. Hallar la temperatura de salida del amonio implementando el método de Newton.
c. Un reactor continuo agitado con dos compartimentos, así como se muestra en la figura.



Por la entrada se alimentan los dos reactantes, los cuales reaccionan exotérmicamente y son precalentados en el primer compartimento. La pared que separa ambos reactores es fina, lo que permite la transferencia de calor de un compartimento a otro. Las paredes hacia el exterior están aisladas.

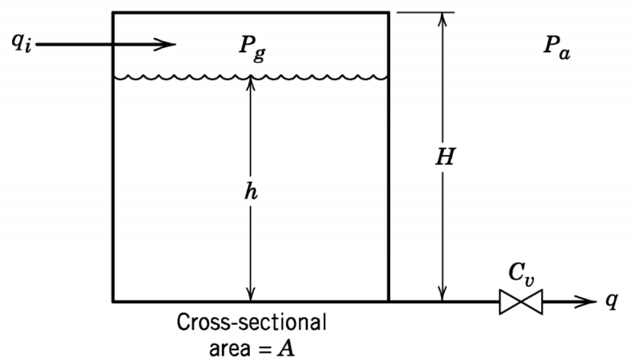
Desarrolle un modelo matemático para el sistema presentado. Indique variables de entrada, salida, estado, y parámetros.

Problemas complementarios:

1.16. Considere un tanque de almacenamiento de gas con flujos de entrada y salida variables. Asuma que se le agrega calor a una velocidad constante Q.

Desarrolle las ecuaciones del modelo que describan la variación de T y P con el tiempo. (No desprecie el término pV en el balance de energía).

1.17. Sea un tanque con gas no condensable por encima del líquido. Se presenta un esquema de la operación.

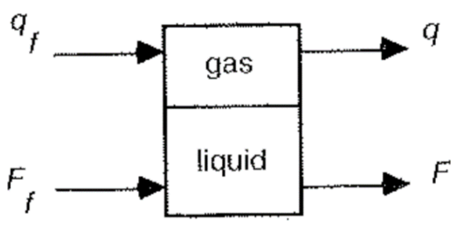


Realice un modelo dinámico que relacione el nivel del líquido (h) con el flujo de entrada (q_i)

Se puede realizar las siguientes suposiciones:

- El gas se comporta como gas ideal.
- Hay una cantidad contante de moles de gas en el tanque.
- El proceso es isotérmico.
- La relación para el flujo a través de la válvula es proporcional a la raíz cuadrada de la diferencia de presión.

1.18. Sea un tanque con gas no condensable por encima del líquido. Se presenta un esquema de la operación.



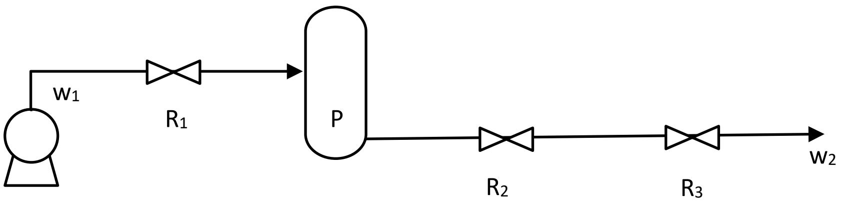
Realizar el modelo dinámico del proceso, con la presión del gas y el volumen del líquido como variables de estado. q_f y q son los flujos molares de entrada y salida del gas, respectivamente; y F_f y F los flujos volumétricos de entrada y salida del líquido, respectivamente.

El volumen total (*V*) es constante, V_L es el volumen del líquido y *P* es la presión del gas. Asumir que el gas se comporta como gas ideal. Realizando las suposiciones que considere necesaria, demuestre que las ecuaciones del modelo son las siguientes:

$$\frac{dV_L}{dt} = F_f - F$$

$$\frac{dP}{dt} = \frac{P}{V - V_L}(F_f - F) + \frac{RT}{V - V_L}(q_f - q)$$

1.19. El siguiente proceso isotérmico bombea un polímero líquido levemente compresible a un flujo másico w_1 constante. La densidad del líquido está dada por: $\rho = \rho_0 + \beta(P - P_0)$, con ρ_0, β y P_0 constante, ρ es la densidad y *P* es la presión.



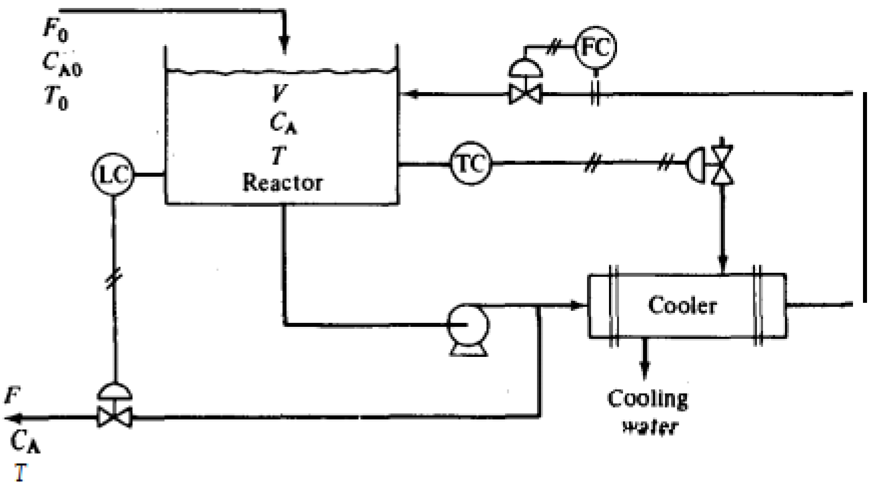
En las válvulas la presión cae siguiendo la relación: $AP = Rw^2$. El tanque entre R1 y R2 está lleno de líquido. La presión en w_2 es atmosférica.

i) Realice el modelo dinámico del sistema, el cual relaciona *P* con w_1.
ii) Halle el estado estacionario.

1.20. El siguiente sistema consiste en un reactor, en donde se lleva a cabo una reacción exotérmica, cuya velocidad de reacción es de primer orden (A→B). Para mantener la temperatura en un valor requerido se utiliza un intercambiador (En la figura *Cooler*) para enfriar parte de la salida del reactor.

En el intercambiador como líquido de enfriamiento se utiliza agua. F_w (agua agregada en el intercambiador) sigue una función de la temperatura seteada por el controlador, $F_w=f_1(T)$. El flujo dentro del intercambiador es constante.

El flujo F está seteado por el controlador el cual está dado por $F=f_2(h)$.



Realice el modelo dinámico del sistema. Considere las suposiciones que sean necesarias.