

## EJERCICIOS DE MODELACION DE PROCESOS

1- Considere el caso de un condensador vertical a presión constante en donde vapor saturado a una temperatura  $T_v$  condensa por el exterior de un haz de tubos de longitud  $H$ , dispuesto en posición horizontal. Por el interior de los tubos circula un fluido de enfriamiento que se mantiene a una temperatura constante  $T_f$ . La salida de condensado está localizada en el fondo del condensador con un flujo volumétrico que es proporcional a la altura del condensado ( $h$ ). El haz de tubos, de área externa  $A_t$ , presenta dos zonas: una expuesta al vapor donde se realiza la condensación y otra sumergida en el condensado, donde este se enfría. La resistencia a la transferencia de calor puede ser resumida en términos de coeficientes globales de  $T$ . de Calor para la condensación ( $U_v$ ) y enfriamiento ( $U_L$ ). La zona líquida puede ser considerada como perfectamente mezclada a una temperatura  $T$ . El condensador tiene una sección transversal neta  $A_c$  constante.

i ) Deducir un modelo matemático para la evolución de dinámica de la altura de condensado ( $h$ ) y la temperatura de salida del condensado  $T$

ii) Encontrar  $h$  y  $T$  de equilibrio para los siguientes datos:

$T_v=150\text{ }^\circ\text{C}$  ;  $T_f=40\text{ }^\circ\text{C}$  ;  $A_t= 20\text{ m}^2$  ;  $H = 5\text{ m}$  ;  $A_c= 1\text{ m}^2$  ;  $U_v= 10\text{ (cal/s m}^2\text{ }^\circ\text{C)}$  ;  
 $U_L=2\text{ (cal/s m}^2\text{ }^\circ\text{C)}$  ;  $\lambda = 500\text{ (Kcal/Kg)}$  ;  $\delta = 0.96\text{ (gr/cc)}$  ;  $\alpha = 3.3\text{E-4 (m}^2\text{/min)}$  ;  
 $C_pL=0.98\text{ (Kcal/Kg }^\circ\text{C)}$

2- El proceso de hemodiálisis consiste en retirar de la corriente sanguínea una serie de residuos metabólicos que son perjudiciales al organismo cuando se presentan en altas concentraciones. En forma artificial el proceso se realiza fundamentalmente poniendo en contacto el flujo sanguíneo con una membrana selectiva que deja difundir entre sus poros sólo a los contaminantes. Por la otra cara de la membrana una solución retira y elimina estos residuos.

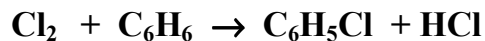
Para efectos de modelación y simulación de estos sistemas se hace uso de consideraciones fenomenológicas y diversos supuestos.

Se solicita la síntesis de un modelo matemático para este proceso bajo las siguientes consideraciones:

- Considere solo una porción del sistema compuesta por un tubo de sección circular cuyas paredes están compuestas por la membrana selectiva.
- Tome en cuenta dos componentes en la fase sanguínea ( soluto = contaminante , solvente= liquido portador)
- La fase sanguínea fluye en régimen laminar y el flujo no se ve afectado por la transferencia de masa.
- La concentración de contaminante en la entrada es constante, y no existe perfil en sentido radial.
- El contaminante se transfiere por las paredes de la membrana y además desaparece por reacción homogénea de primer orden en la fase sanguínea.
- La transferencia de contaminante a través de la membrana es por difusión molecular, existiendo un coeficiente de difusión efectivo. Se considera que no hay acumulación de contaminante en la membrana, y que la resistencia a la transferencia de masa por el lado de la sangre es despreciable.
- Por el lado de la solución desorbente existe una resistencia convectiva a la transferencia de materia. En el seno de esta fase se realiza una reacción química muy rápida que reduce totalmente a los contaminantes.
- Propiedades constantes.

ii) En el caso que exista acumulación de contaminantes en la membrana, ¿ como sería el nuevo modelo ( explique ) ? .

3- El clorobenceno se produce en un reactor batch burbujeando cloro puro sobre benceno líquido, según la siguiente reacción exotérmica.



Dentro del reactor el Cl<sub>2</sub> forma burbujas esféricas de diámetro **D<sub>p</sub>**, ocupando un 40% del volumen del reactor **V**, mientras que el 60% restante está ocupado por la fase líquida, manteniéndose esta proporción constante durante toda la reacción. La dinámica de la fase gaseosa es despreciable.

El paso de cloro gaseoso a la fase de reacción esta controlado por la transferencia de masa en la fase líquida. El coeficiente de T. de masa  $k_c$  puede considerarse constante, y la solubilidad del gas sigue una dependencia tipo Arrhenius con la temperatura de la solución  $T$ .

La reacción es exotérmica, homogénea y de primer orden con respecto a los reactivos. El calor de reacción puede considerarse constante, y la constante cinética con una dependencia tipo Arrhenius con la temperatura.

Con el fin de mejora la capacidad de extracción de calor, el líquido reaccionante es bombeado hacia un intercambiador de placas con un flujo  $Fr$ . El intercambiador de calor de flujo cruzado tiene un área de transferencia de calor  $Ap$  y un coeficiente global  $U$ . El flujo del fluido refrigerante es tan grande que se puede considerar que la temperatura de este fluido permanece constante e igual a  $Tr$ . También se puede despreñar la dinámica de enfriamiento de la mezcla reaccionante en este intercambiador. Deducir un modelo matemático para este proceso, indicando todas las suposiciones realizadas.

4 .- Se tiene un proceso de calentamiento de un fluido de propiedades constantes para ingresarlo a un proceso. El calentamiento de realiza en un estanque de  $2 \text{ m}^2$  de sección transversal y el calor es suministrado por un serpentín de vapor cuya temperatura se mantiene constante a  $100 \text{ }^\circ\text{C}$ . El fluido entra a una temperatura de  $25^\circ\text{C}$ . La salida de la corriente caliente esta regulada por una válvula que presenta un flujo másico proporcional a la carga hidrostática. Además, el coeficiente global de transferencia de calor entre el fluido y el serpentín ( $UA$ ) varía linealmente con la altura de líquido en el estanque.

Cuando al proceso ingresa un flujo de  $30 \text{ Kg/seg.}$ , se registra una altura estacionaria de  $3\text{m}$  y una temperatura de  $50^\circ\text{C}$ .

Se pide determinar:

- Modelo dinámico del proceso.

5 .,- El proceso de avance de una solidificación es un problema de gran interés industrial. Suponga que un liquido esta a su temperatura de fusión ( $T_s$ ) en un recipiente de área  $A$  y altura  $L$ . A partir de un tiempo cero, la superficie inferior se mantiene a una temperatura  $T_w$  comenzando el proceso de solidificación. Conforme el plano de solido

avanza, el calor extraído necesario para el proceso se debe transferir por conducción en la capa de sólido de espesor  $X(t)$ .

Consideraciones: propiedades constantes, Transferencia de calor por conducción en sentido  $x$ . No hay T. de Q. en los otros sentidos y  $T_s$  es constante. No hay acumulación de calor en la fase sólida.

- i) Se pide desarrollar un modelo matemático que relacione el avance del frente de sólidos  $X(t)$  como función de  $T_w$  y del tiempo.

6.- La **pervaporación** es un proceso de separación no convencional donde un componente de una mezcla líquida es recuperado mediante difusión en fase vapor a través de una membrana selectiva.

Considere un proceso de pervaporación compuesto por dos cámaras perfectamente agitadas de volumen  $V$  separadas por una membrana selectiva de área efectiva  $A_m$  y espesor  $\epsilon$ . En una de las cámaras se encuentra un líquido con un componente valioso que se desea recuperar, con concentración  $C_a$ , el que se mantiene a la temperatura de saturación  $T_s$ .

Por el lado del vapor, entra continuamente un flujo  $G$  de gas portador, libre de componente valioso y a temperatura  $T_{go}$ . El componente valioso que ha difundido por la membrana se incorpora a la corriente gaseosa que está a una temperatura  $T_g$  y tiene una composición en el seno de la fase  $y_a$  siendo retirado continuamente.

La transferencia de materia tiene dos resistencias: una difusional localizada en la membrana con un coeficiente de difusión efectivo  $D_{am}$  y una convectiva localizada en la interfase membrana-gas con un coeficiente local de T. de masa  $K_y$ . No existe resistencia en la interfase membrana-líquido y la relación de equilibrio está dada por una relación del tipo  $y_{ai} = H \cdot C_a$ .

El calor necesario para la vaporización del componente pervaporado es aportado por la transferencia de calor entre las cámaras a través de la membrana existiendo solo una resistencia por conducción en la membrana que tiene una conductividad térmica  $K_{em}$ .

Con esta descripción, formular un modelo dinámico para la variación de la composición del componente en la fase vapor  $y_a$  y la temperatura de fase vapor  $T_g$ .

Considere que las dinámicas en la fase líquida y en la membrana son despreciables.

Nota: Explicitar claramente las suposiciones realizadas.

7.- Los biosensores son pequeños microreactores biológicos en donde la reacción se lleva a cabo en un soporte sólido que contiene a los elementos biológicamente activos inmovilizados. Uno de los más usados son los detectores de alcohol o “alco-test”, en donde una enzima desarrolla una reacción exotérmica de oxidación del etanol. El aumento de la temperatura en la matriz sólida permite detectar la existencia de alcohol. Se pide desarrollar un modelo aproximado de un aparato de alco-test compuesto por dos volúmenes o fases, una gaseosa por la que circula el vapor y otra sólida donde esta la enzima inmovilizada para realizar la reacción. Por simplificación se asume que las dos fases se comportan como totalmente mezcladas. La porosidad del lecho es  $\epsilon$  y la superficie específica  $s$ .

Suponga que se sopla con una velocidad lineal  $v$  y una concentración de alcohol  $CA_o$  y una temperatura  $T_g$  que se mantiene constante en la fase gas. El alcohol se transfiere por un mecanismo convectivo hacia la fase sólida con un coeficiente de T. de masa  $K_c$ . En la interfase gas sólido la concentración de equilibrio (solubilidad del alcohol)  $CA_i$  es función de la temperatura del sólido  $T_s$  con una funcionalidad tipo Arrhenius.

En el sólido se asume que la concentración de alcohol es  $CA_i$  la que se puede considerar constante en toda la fase sólida, y la velocidad de reacción se puede asumir como homogénea de primer orden con constante cinética  $k$  y una dependencia tipo Arrhenius con la temperatura del sólido  $T_s$ . La reacción es exotérmica con calor de reacción  $\Delta H_r$ . Puede considerarse que el sistema no transfiere calor al exterior, pero si algo de calor se transfiere a la fase gas por convección.

Con esta descripción desarrolle las ecuaciones para un modelo dinámico que informe de la variación de la concentración de alcohol  $CA$  en la fase gas y de la temperatura de la matriz sólida  $T_s$ .

8.- Se tiene estanque separador líquido – gas al cual ingresan un flujo de líquido  $L$  y un flujo de gas  $G$ . El estanque tiene una altura total  $H$  y área transversal  $A$ . Los fluidos tienen propiedades constantes y el gas obedece a la ley de los gases ideales. El flujo másico de salida del líquido varía linealmente con la diferencia de presión en la válvula que tiene un coeficiente de resistencia  $\alpha$ . El flujo de salida del gas es proporcional a la raíz cuadrada de la caída de presión en la válvula de gas con un coeficiente de resistencia  $\beta$ . Ambos fluidos descargan a presión atmosférica  $P_o$

- i) Deducir el modelo matemático que describa las altura del líquido  $h$  y la presión del casquete de gas en el estanque  $P$ .

9.- La reducción de la Magnetita con carbono ( $\text{Fe}_3\text{O}_4 + \text{C} \rightarrow 3\text{FeO} + \text{CO}$ ) se realiza habitualmente en un horno eléctrico donde un electrodo de carbono provee simultáneamente el agente reductor y el calor necesario para mantener a la magnetita fundida. Producto de la reacción, el electrodo se va consumiendo en forma radial hasta un tamaño crítico donde es necesario reemplazarlo ya que no es capaz de generar el calor necesario.

Suponga un horno ideal compuesto por un electrodo cilíndrico de radio R y longitud L donde se lleva a cabo la reacción de reducción.

La reacción se lleva a cabo en la superficie del carbono donde la velocidad de reacción está controlada por la difusión molecular de la magnetita líquida hacia la superficie a través de una capa estancada constante de espesor " $\delta$ ". La concentración en el seno de la fase fundida también puede considerarse constante e igual a  $\text{Ca}^*$ . De esta forma la expresión cinética superficial puede describirse según:

$$-\mathbf{Ra} = \mathbf{Def} * \mathbf{Ca}^* / \delta \quad (\text{grs C/ m}^2\text{-s})$$

El coeficiente de difusión efectivo  $\text{Def}$  varía con la temperatura de acuerdo a una relación tipo Arrhenius:  $\mathbf{Def} = \mathbf{Do} * \exp(-E/T)$  con T la temperatura en la superficie del electrodo.

Por el electrodo circula una corriente eléctrica que es capaz de generar  $G_c$  Kilowatts / por  $M^2$  de sección transversal originando en el electrodo una temperatura  $T_c$  que intercambia calor con la magnetita fundida que se encuentra a una temperatura constante  $T_f$  mediante un mecanismo de transferencia convectiva con un coeficiente de transferencia de calor U. Por otra parte la reacción no consume ni genera calor en una magnitud que es despreciable para ser considerada en los balances.

- i) Con esta descripción plantear el modelo matemático que relaciona la variación del radio y la temperatura del electrodo ( $R, T_c$ ) con el tiempo.
- ii) Considerando los siguientes valores determinar el tiempo necesario para que el radio del electrodo se consuma hasta la mitad de su valor inicial.

---


$$L = 3 \text{ m}; R \text{ inicial} = 10 \text{ Cms}; \text{ Densidad} = 2,26 \text{ (gr/cc)}; C_p = 0.4 \text{ (Cal/gr } ^\circ\text{C)}$$

$$U = 100 \text{ (W/m}^2 \text{ } ^\circ\text{C)}; G_c = 220 \text{ (Kw/ m}^2\text{)}; T_f = 1250 \text{ } ^\circ\text{C};$$

$$\text{Ca}^* = 5\text{E-3 (gr/cc)}; \delta = 1\text{E-7 (m)}; T_c \text{ inicial} = 1800 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$\mathbf{Def} = 5\mathbf{E-7} * \mathbf{EXP}(-10000/(T_c+273)) \quad (\text{m}^2/\text{s})$$


---

10.- El proceso de extracción de un soluto valioso presente en un sólido mediante transferencia con un solvente adecuado es una de las operaciones más tradicionales en la industria de procesos. Suponga la extracción de una esencia A desde un lecho de volumen V de semillas con porosidad  $\epsilon$  y superficie específica  $a_p$  mediante un solvente líquido que percola en circuito cerrado con un flujo volumétrico L.

La concentración de la esencia en el seno del líquido es  $C_l$  y en el seno de la fase sólida es  $C_s$ . Se asume que hay resistencia a la transferencia de masa en las dos fases con coeficientes  $K_l$  en la fase líquida y  $K_s = (D/\phi)$  en la fase sólida (unidades consistentes). El equilibrio entre las fases puede ser representada por un coeficiente lineal según:

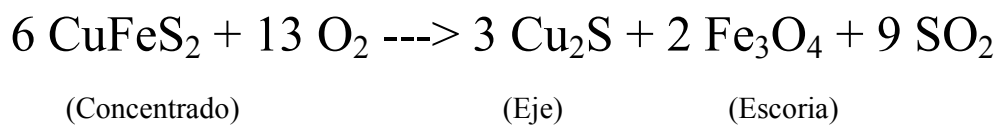
$$C_{s(i)} = H * C_{l(i)}$$

Donde el (i) denota condiciones de equilibrio. Para efectos de modelación se puede suponer que la extracción es a temperatura constante, y el lecho se puede dividir en "n" volúmenes iguales totalmente mezclados en ambas fases. Además, se pueden despreciar los efectos difusionales y de dispersión en todos los sentidos.

Para contabilizar la desnaturalización térmica de la esencia, se puede asumir que esta se descompone con una cinética homogénea de primer orden con respecto a la concentración de esencia en la fase líquida.

Con esta descripción formule un modelo matemático para este proceso capaz de describir la evolución de la concentración de esencia extraída  $C_{l_n}$  con el tiempo. Indique todas las suposiciones realizadas.

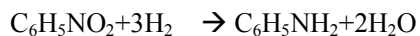
11.- El proceso de fusión Flash es una tecnología desarrollada para la conversión de concentrado de cobre con una alta eficiencia energética. En este proceso, el concentrado seco se mezcla con oxígeno en un quemador para realizar la reacción que es exotérmica y prácticamente instantánea formando una verdadera llama a 1500 °C. Los productos de la reacción son una fase rica en cobre llamado eje y otra rica en hierro llamada escoria que a la temperatura de reacción se mantienen fundidas. Estos productos se recogen en una zona de sedimentación y los gases se envían a tratamiento. La reacción de conversión está dada según:



En la zona de sedimentación que se mantiene a 1300°C, la fase eje tiene una densidad mayor que la escoria por lo que se asenta en el fondo, mientras que la escoria permanece en la superficie. Las fases son extraídas en forma discontinua para conversión final a través de toberas que se ubican a una altura adecuada. Este proceso llamado “sangrado” se realiza cada un tiempo dado para mantener niveles adecuados y no contaminar las fases. El determinar la altura de las fases y el tiempo de sangrado es vital para una correcta operación del convertidor. Con esta descripción y la figura que se adjunta, desarrollar un modelo matemático para predecir la evolución de los niveles de ambas fases con el tiempo cuando las fases se están acumulando y cuando se esta sangrando como función del flujo de concentrado. Suponga que la reacción es instantánea, con 100% de conversión y el oxígeno se alimenta en proporción estequiométrica. El sedimentador se puede considerar como perfectamente mezclado, propiedades constantes en ambas con flujos de salida proporcional a la carga estática

12.- Un Reactor de membrana catalítica es una innovación tecnológica para mejorar el rendimiento de reacciones heterogéneas. En este tipo de reactores una membrana catalítica cubierta por soportes adecuados separa la fase líquida y gaseosa. Los soportes entregan la selectividad necesaria para que solo los componentes que reaccionan entren a la membrana catalítica que proporciona las condiciones necesarias para llevar a cabo la reacción.

Suponga que la reacción de hidrogenación de nitrobenzono para dar anilina



se llevara a cabo en uno de estos reactores según se esquematiza en la figura. La cámara de líquido esta totalmente agitada y las concentraciones cambian con el tiempo a medida que ocurre la reacción en el interior de la membrana. Por el lado del líquido el soporte permite el paso de agua, anilina y nitrobenzono mediante difusión molecular y es impermeable al paso del gas. Por el lado del gas, fluye hidrogeno puro que atraviesa el soporte de la membrana con resistencia a la transferencia de masa despreciable. El soporte por el lado del gas no permite el paso de otros componentes. Se puede considerar que la reacción ocurre en fase líquida con cinética dada por  $(-R_a) = K \cdot C_H \cdot C_N$  con  $C_H$  la concentración de hidrógeno disuelto y  $C_N$  la concentración de nitrobenzono en la membrana. La solubilidad del hidrógeno en la mezcla sigue una relación tipo Henry, y el sistema se puede considerar isotérmico.

Con esta descripción deducir un modelo matemático para determinar la evolución de las especies con el tiempo en la fase líquida y en la fase de membrana catalítica.

Enumere claramente las suposiciones realizadas para deducir el modelo

13.- El proceso de electro-obtención de cobre en una celda electrolítica consiste en contactar un cátodo de acero con una solución ácida y someterlo a una corriente eléctrica continua. La celda puede ser discontinua o estar continuamente alimentada con solución.

La semireacción que ocurre en la superficie del cátodo es



La velocidad de electro-depositación depende fundamentalmente de la densidad de corriente circulante (I), y la concentración de electrolito en contacto con la fase sólida ( $\text{Cu}^{+2}$ ) de acuerdo a la relación cinética superficial de primer orden:

$$R_d = K'' * (\text{Cu}^{+2}) \quad [\text{moles/L}^2\text{S}]$$

Con  $K''$  la constante cinética expresada según:

$$K'' = \alpha * I$$

El electrolito en el seno de la solución tiene una concentración ( $\text{Cu}^{+2}$ ) existiendo una resistencia a la Transferencia de masa entre la superficie y el seno de la fase dada por un coeficiente de película  $k_c$ .

Si a tiempo cero se tiene un cátodo de área A libre de cobre, deducir un modelo matemático que describa el espesor de la película de cobre depositada y la variación de la concentración de electrolito en el seno de la fase como función del tiempo y la intensidad de corriente I. La celda es de tipo batch con volumen V

Informe las suposiciones realizadas.

14.- La poza de evaporación solar (PES) es la operación básica en la minería no-metálica. Consiste en una gran piscina de baja profundidad donde se alimenta una salmuera cruda la que se deja evaporar por efecto de las condiciones ambientales. Debido al aumento de concentración de la salmuera con el tiempo se alcanza el punto de saturación originando la precipitación de las sales primarias. Transcurrido un tiempo se drena la salmuera remanente y se “cosechan” las sales para purificación.

Se pide realizar un modelo dinámico de esta operación para predecir la cantidad de sal depositada en todo momento (altura del precipitado), la composición y temperatura de la salmuera (X,T) como función de los parámetros más importantes.

Las premisas del modelo son:

- Poza en operación batch, de área A y altura H inicialmente llena de salmuera de concentración  $X_0$  (fracción peso). Se considera mezcla perfecta en la fase líquida y no hay cambio de volumen cuando ocurre la precipitación.

- La concentración de saturación  $X_s$  de la salmuera presenta una relación lineal con la temperatura de la solución  $T$ . Cualquier exceso en concentración sobre la saturación se traduce en una precipitación del soluto.
- El agua (solvente) se evapora básicamente por transferencia de masa convectiva hacia el ambiente. La concentración interfacial (solución- aire)  $Y^*$  esta dada por una relación tipo “Antoine” con la temperatura de la solución. El coeficiente de  $T$  de masa  $K_y$  y la concentración del medio externo  $Y_\infty$  se pueden considerar constantes.
- La poza absorbe una cantidad de radiación solar  $G$  (W/m<sup>2</sup>) y pierde calor hacia el exterior por convección hacia el aire y por conducción en el fondo.

15 .- El proceso de extracción por solventes (SX) es una importante operación de separación. En la industria minera se utiliza un equipo extractor-sedimentador donde una fase acuosa con metal valioso disuelto se pone en contacto con una fase orgánica emulsionada que atrapa al mineral mediante un proceso de reacción química de superficie. Posteriormente las fases se dejan sedimentar por gravedad para separar las fases. El equipo tiene un aspersor que genera la emulsión con un tamaño de gotas adecuado para el proceso de separación.

Considere un esquema como el de la figura donde continuamente se alimentan la fase orgánica y acuosa con una razón de flujo constante (A/O) y una concentración de metal en la fase acuosa  $C_a$ . La fase orgánica no contiene mineral disuelto.

En la sección de extracción la razón de fases (A/O) y el volumen se mantienen constantes. El diámetro de gotas  $D_p$  se puede considerar que es inversamente proporcional a la velocidad de giro del aspersor  $D_p = m/RPM$  y son de forma esférica.

La transferencia del metal disuelto desde la fase acuosa a la orgánica se realiza por reacción de equilibrio iónico en la interfase según :



Donde el subíndice (i) significa condiciones de interfase en la superficie de la gota y  $K_e$  la constante de equilibrio.

Además, las especies deben difundir desde el seno de la fase a la interfase, sin embargo solo la difusión del metal en la fase acuosa es importante y se puede evaluar mediante un mecanismo convectivo con un coeficiente local  $k_c$ . La concentración de equilibrio en la fase orgánica se puede considerar igual al del seno de la gota.

En la sección de sedimentación los flujos de salida son proporcionales a la carga hidrostática. (Ver figura)

Con esta descripción desarrollar:

- i) Modelo dinámico para la concentración de metal en la fase orgánica y acuosa en la sección de extracción como función de los flujos de alimentación y RPM.
- ii) Expresión para la altura de interfase coalescente en la sección de sedimentación considerando estado estacionario.

16.- Se tiene un reactor RTAC donde se lleva a cabo la reacción exotérmica  $A \rightarrow \text{Productos}$  de primer orden, homogénea en fase líquida. El reactor es adiabático y opera a  $V$  constante por lo que solo la concentración y temperatura de entrada ( $C_{ao}$  y  $T_o$ ) se consideran como variables de entrada. Una condición de operación normal en el reactor esta dada por:  $C_{ao}=5$  (Kmol/m<sup>3</sup>),  $T_o=30$  (°C),  $V=0,2$  (m<sup>3</sup>),  $F=10$  (lt/min),  $C_a=3,8$  (Kmol/m<sup>3</sup>),  $T=50$  (°C).

Datos de la reacción:  $k_o = 6255$  (1/min),  $E^o=8250$  (Kcal/Kmol),  $\Delta H_r=16667$  (Kcal/Kmol)

Obtener el modelo matemático y solucionarlo en Simulink

17 Obtener un modelo para la altura de un estanque semiparabólico donde el radio se relaciona con la altura de nivel según  $R=2h^2$ . La descarga es lineal con respecto a la altura y la variable externa es el flujo de entrada  $F_o$ .