



Pontificia Universidad Católica de Chile
Departamento de Ingeniería Química y Bioprocesos
IIQ2003 - Fenómenos de transporte
Profesor Felipe Huerta
Ayudante IPCh Ignacio Tapia



Tarea 3

Modelamiento computacional de transferencia de masa y momentum

Fecha de entrega: 29 de noviembre de 2023, 18:30, vía Canvas.

Problema 1

La salmonicultura es una industria relevante en Chile, la cual ha generado más de 60000 empleos y se ha posicionado como el segundo sector de exportación más grande del país. Además, a nivel mundial, Chile se encuentra en la segunda posición de mayor relevancia en el mercado (Aquafeed, 2015). Sin embargo, el impacto ambiental que tiene esta industria amenaza a la flora y fauna de las costas.

Chucaotec es una *startup* que busca solucionar una problemática ambiental particular de la producción de salmones: la acumulación de residuos orgánicos en suelos marinos. Esto provoca un cambio de pH, transforma el suelo en anaeróbico y cambia las poblaciones de microorganismos, provocando un daño al ecosistema (Arenas, 2023). Para ello, implementaron un sistema de microburbujas que buscan oxigenar los suelos marinos, con el fin de que puedan crecer microorganismos y ocupen los desechos orgánicos depositados en los suelos como fuente de carbono.

Para el primer problema, a su equipo de ingenieros e ingenieras se les solicita modelar el perfil de concentración de oxígeno en una región de un suelo marino, para determinar tiempos de operación y el comportamiento esperado del sistema.

Considere para el análisis el sistema de la Figura 1, en donde se muestra una jaula de oxigenación. Las burbujas viajan verticalmente hacia abajo impulsadas por una gran diferencia de presión y disminuyen su diámetro a medida que transfieren oxígeno al mar. Simultáneamente, las fuerzas de flotación frenan y luego impulsan las burbujas hacia arriba. Para simplificar esta fenomenología, usted asumirá que la resistencia a la transferencia de masa de la fase gas dentro de la burbuja es despreciable. Esto produce que las burbujas colapsen instantáneamente al entrar en contacto con el agua, transfiriendo el oxígeno a la fase líquida. Esto se puede modelar como un flux de oxígeno de $9,4 \cdot 10^{-5} \text{ mol } m^{-2} s^{-1}$. Además, en el suelo marino se favorecerá el crecimiento de la bacteria *Vibrio splendidus*, la cual es capaz de degradar desechos orgánicos y se ubica en costas marinas. Considere la difusividad efectiva del oxígeno en agua como 10000 veces la difusividad en agua a temperatura ambiente, es decir de $2,49 \cdot 10^{-5} m^2/s$ (The Engineering Toolbox, 2008).

- a) Aplique un balance diferencial para derivar el modelo que gobierna la transferencia de oxígeno con reacción química en la jaula en estado no estacionario. La jaula tiene un alto, ancho y largo de 0.6 m, 1 m y 1.2 m, respectivamente. Además, considere que el consumo de oxígeno por el crecimiento microbiano es una reacción de primer orden, con una constante igual a $5 \cdot 10^{-4} s^{-1}$. Considere inicialmente un ambiente anaeróbico. En el suelo y en presencia de oxígeno, crece *Vibrio splendidus*. El consumo de oxígeno en el suelo marino se modela como una reacción de segundo orden con constante de reacción $2 \cdot 10^{-5} m^4 \cdot mol^{-1} \cdot s^{-1}$. Escriba todos sus supuestos y justifique la eliminación de cada término. **(1,0 p)**

- b) Discretice la ecuación diferencial parcial y las condiciones de contorno e iniciales correspondientes. Indique qué tipo de condición es cada una de ellas. **(0,5 p)**
- c) Resuelva el perfil transiente de concentración de oxígeno en la jaula de oxigenación utilizando el método FTCS. Presente sus resultados en uno o más gráficos. Seleccione un tiempo lo suficientemente largo para que el sistema llegue a un estado estacionario. ¿Cómo puede estimar este tiempo? **(1,0 p)**
- d) Si el crecimiento bacteriano en el volumen se modela con la siguiente ecuación:

$$\frac{dC_X}{dt} = \mu C_X \quad (1)$$

Con C_X la concentración de biomasa, y μ la velocidad de crecimiento específica dada por la ecuación de Monod respecto al oxígeno:

$$\mu = \mu_{max} \cdot \frac{C_A}{C_A + K_A} \quad (2)$$

Con μ_{max} la velocidad de crecimiento máxima igual a $1,2s^{-1}$ y K_A la constante de inhibición igual a $10^{-3}mol/m^3$. Además, inicialmente hay $0.2 mol/m^3$ de biomasa en el todo el volumen de control (considere también para las fronteras).

Determine la concentración de biomasa en el tiempo y el espacio. ¿Es consistente el resultado de este perfil considerando que la concentración de oxígeno depende de la concentración de biomasa? **(0,5 p)**

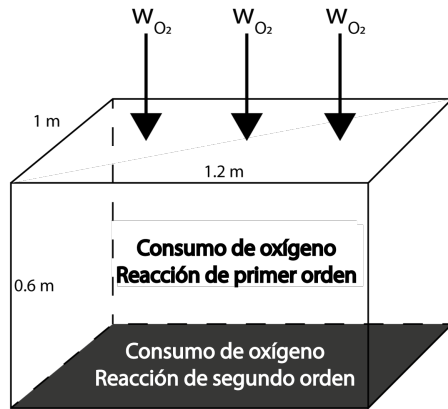


Figura 1. Esquema representativo del sistema a estudiar. Por la cara superior existe un flux de oxígeno, en el volumen hay crecimiento de biomasa de primer orden, y en el límite inferior hay crecimiento de biomasa de segundo orden.

Problema 2

La filtración es una operación unitaria ampliamente usada en la industria de bioprocesos, la cual ocupa como principio de separación la diferencia de tamaño de las partículas en una solución. Dentro de los tipos de equipos, existen los de flujo perpendicular al filtro, y los de flujo tangencial. En particular, estos últimos consisten en que el flujo circula en dirección axial y sale parte de él a través de las paredes permeables, cuyo líquido se llama permeado. Estos presentan beneficios en su uso al poder trabajar sin que la acumulación de

partículas en los poros de la membrana impida el paso del permeado y se requiera aplicar mayor presión. (Radoniqi, Zhang, Bardliving, Shamlou y Coffman, 2018).

En esta pregunta, se le solicitará modelar un equipo de filtración de fibras huecas utilizado para separar bacteriófagos, los cuales son producidos por PhageLab para el tratamiento de infecciones bacterianas sin el uso de antibióticos (más información de esta empresa biotecnológica en Phage-Lab web). Este equipo funciona circulando un fluido dentro de pequeñas tuberías con paredes permeables, saliendo el virus y partículas de menor tamaño a través del poro, y reteniendo material particulado mayor. Se genera una corriente que sale por las paredes (permeado) y una que no atraviesa la membrana y sale por el extremo de la tubería (retenido). Usted desea encontrar los perfiles de velocidad y concentración en estado estacionario de una de las fibras de este equipo.

- a) Realice un balance de momentum en una de las fibras de un equipo de filtración tangencial. Esta posee un radio interno de 0.02 m y un largo de 7 m. Considere que la velocidad promedio en z a la entrada de la fibra es de 3.6 m/h, la velocidad radial de salida del permeado es constante igual a 0.005 m/h y que la presión a la entrada es de 500 kPa.

Obtenga la ecuación diferencial parcial que gobierna el sistema y escriba las condiciones de borde. Aplique los supuestos que considere necesarios, considerando los siguientes supuestos adicionales que se cumplen para este sistema, los cuales relacionan las magnitudes de las componentes convectivas y difusivas dentro del balance de momentum **(0,4 p)**:

- $P(r, z) \approx P(z)$
- $\frac{\partial^2 V_z}{\partial z^2} \ll \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial V_z}{\partial r} \right)$
- $\rho V_r \frac{\partial V_z}{\partial r} \ll \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial V_z}{\partial r} \right)$
- $\rho V_z \frac{\partial V_z}{\partial z} \ll \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial V_z}{\partial r} \right)$

Asuma las propiedades de la solución iguales a las del agua a temperatura ambiente.

- b) Explique bajo qué justificación es posible realizar los supuestos entregados **(0,2 p)**.
- c) Obtenga y grafique los perfiles de velocidad radial $v_r(r, z)$, velocidad axial $v_z(r, z)$, de velocidad axial media $\langle v_z \rangle(z)$ y de presión $P(z)$ dentro de la tubería. **(0,4 p)**
- d) Suponga que al inicio del equipo la corriente tiene una concentración de 0.35 mol/m^3 de bacteriófagos que entran a la fibra hueca, cuya difusividad se puede aproximar $3,54 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$. Realice un balance diferencial de masa para los bacteriófagos y encuentre la ecuación diferencial parcial que gobierna el sistema, junto con las condiciones de borde. **(0,5 p)**

Importante: Para modelar correctamente este sistema, considere que en la pared de la fibra hueca existe un flux molar dado por la siguiente ecuación:

$$N_A|_{r=R,z} = K_A \Delta C_A \quad (3)$$

Donde K_A es el coeficiente global de transferencia de masa. En los cursos de Operaciones Unitarias II (IIQ2023) y bioseparaciones, usted aprenderá a calcular K_A a partir de las resistencias a la transferencia de masa en cada fase y la resistencia que proporciona la membrana. Para efectos de este curso, se utilizará $K_A = 10^{-4} \text{ m s}^{-1}$. Además, puede considerar que fuera de las paredes de la fibra hueca existe un flujo muy grande en comparación al permeado que sale de ella. Esto permite asumir que la concentración del bacteriófago en la pared externa de la membrana es aproximadamente igual a 0.

- e) Resuelva la ecuación diferencial parcial utilizando métodos computacionales estudiados en el MOOC. **(1,0 p)**

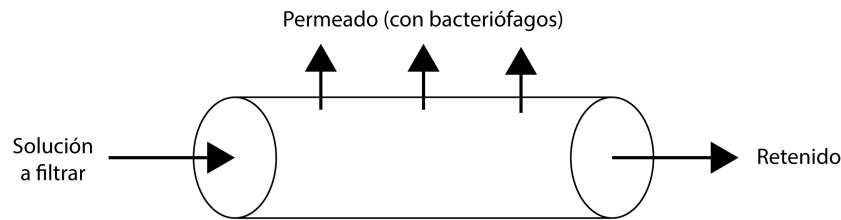


Figura 2. Esquema representativo del sistema a estudiar. Considere una tubería de paredes permeables al virus.

f) Grafique el perfil de concentración dentro de la tubería. **(0,5 p)**

Sugerencia: En caso de desarrollar el perfil de velocidad con método analítico, la velocidad media en z está dada por:

$$\langle v_z \rangle(z) = \langle v_z \rangle(0) - \frac{2v_w z}{R} \quad (4)$$

Donde $\langle v_z \rangle(0)$ es la velocidad media de entrada, v_w la velocidad radial en la pared y R el radio de tubería.

Referencias

- Aquafeed (2015). La historia de la Acuicultura y el Salmón en Chile. *AquaFeed Español*. <https://aquafeed.co/entrada/la-historia-de-la-acuicultura-y-el-salm-n-en-chile-20239/>
- Arenas, V. (2023). ChucaoTec y sus nanoburbujas: un millonario negocio para la industria acuícola y minera de Chile y el mundo. *Forbes*. <https://forbes.cl/negocios/2023-07-20/chucaotec-y-sus-nanoburbujas-un-negocio-sustentable-para-la-industria-acuicola-y-minera-de-chile-y-el-mundo>
- Radoniqi, F, Zhang, H, Bardliving, CL, Shamlou, P, Coffman, J. (2018). Computational fluid dynamic modeling of alternating tangential flow filtration for perfusion cell culture. *Biotechnology and Bioengineering*, 115, 2751–2759. <https://doi.org/10.1002/bit.26813>
- The Engineering ToolBox (2008). Gases Solved in Water - Diffusion Coefficients. Disponible en: https://www.engineeringtoolbox.com/diffusion-coefficients-d_1404.html.

Bibliografía para valientes:

- Deen, W. M. (William M. (2012). Analysis of transport phenomena (Second edition.). Oxford University Press. https://buscador.bibliotecas.uc.cl/permalink/56PUC_INST/bf8vpj/alma997371189403396