



## Pauta Tarea 3

### Modelamiento computacional de transferencia de masa y momentum

#### Pregunta 1

- a) Se plantea un balance diferencial en la dirección  $z$ , con  $z=0$  donde entra el oxígeno y  $z=L$  el suelo, donde el subíndice A corresponde al oxígeno:

$$(N_{Az} \cdot A)|_z - (N_{Az} \cdot A)|_{z+\Delta z} - k''' C_A A \Delta z = \frac{\partial(C_A A \Delta z)}{\partial t} \quad (1)$$

Nótese que el área corresponde a la longitud en  $x$  por la longitud en  $y$ , por lo que es independiente de  $z$ . De este modo, se divide la ecuación por  $A \Delta z$ :

$$\frac{(N_{Az}|_z - N_{Az}|_{z+\Delta z})}{\Delta z} - k''' C_A = \frac{\partial C_A}{\partial t} \quad (2)$$

Haciendo el límite cuando  $\Delta z$  tiende a cero, se obtiene:

$$-\frac{\partial N_{Az}}{\partial z} - k''' C_A = \frac{dC_A}{dt} \quad (3)$$

El flux molar se define como:

$$N_{Az} = -D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial z} + x_A (N_{Az} + N_{Bz}) \quad (4)$$

Se realiza el **supuesto de contradifusión equimolar** ( $N_{Bz} = -N_{Az}$ ), el cual es equivalente a convección despreciable, el flux molar se reduce a:

$$N_{Az} = -D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial z} \quad (5)$$

Reemplazando (5) en (3), se obtiene:

$$D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} - k''' C_A = \frac{\partial C_A}{\partial t} \quad (6)$$

Las condiciones de borde e iniciales del sistema son:

- Volumen anaeróbico inicial (Condición de Dirichlet):  $C_A(z, t = 0) = 0$
- Reacción heterogénea de segundo orden en el suelo (Condición de Robin):  $-D_{AB} \frac{\partial C_{Az}}{\partial z}|_{z=L} = k'' C_A^2|_{z=L}$
- Flux molar de oxígeno administrado por el difusor (Condición de Robin):  $-D_{AB} \frac{\partial C_{Az}}{\partial z}|_{z=0} = N_{A0}$

- b) Se discretiza la ecuación diferencial parcial utilizando el método FTCS (tiempo hacia adelante centrado en el espacio).

El primer término de la ecuación queda como:

$$D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \approx D_{AB} \frac{C_{A,i+1}^j - 2C_{A,i}^j + C_{A,i-1}^j}{(\Delta z)^2} \quad (7)$$

El término de reacción de primer orden solo se reemplaza  $k'''C_A$  por  $k'''C_{A,i}^j$ . Finalmente, la derivada temporal se aproxima con tiempo hacia adelante de primer orden:

$$\frac{C_{A,i}^{j+1} - C_{A,i}^j}{\Delta t} \quad (8)$$

La ecuación queda como:

$$D_{AB} \frac{C_{A,i+1}^j - 2C_{A,i}^j + C_{A,i-1}^j}{(\Delta z)^2} - k'''C_{A,i}^j = \frac{C_{A,i}^{j+1} - C_{A,i}^j}{\Delta t} \quad (9)$$

Reordenando términos:

$$C_{A,i}^{j+1} = C_{A,i+1}^j \left( \frac{\Delta t D_{AB}}{(\Delta z)^2} \right) + C_{A,i}^j \left( \frac{-2D_{AB}\Delta t}{(\Delta z)^2} - k''' \Delta t + 1 \right) + C_{A,i-1}^j \left( \frac{\Delta t D_{AB}}{(\Delta z)^2} \right) \quad (10)$$

Por otro lado, las condiciones de borde se discretizan según la ubicación del nodo.

La reacción heterogénea de segundo orden en el último nodo se realiza con una aproximación de segundo orden hacia atrás:

$$-D_{AB} \frac{3C_{A,N_z}^j - 4C_{A,N_z-1}^j + C_{A,N_z-2}^j}{2\Delta z} = k''(C_{A,N_z}^j)^2 \quad (11)$$

Se despeja el término  $C_{A,N_z}^j$  para determinar en cada iteración la concentración en  $z=L$ :

$$C_{A,N_z}^j = \frac{-\frac{3D_{AB}}{2\Delta z} + \sqrt{\left(\frac{3D_{AB}}{2\Delta z}\right)^2 + 4k''\frac{D_{AB}}{2\Delta z}(C_{A,N_z-2}^j - 4C_{A,N_z-1}^j)}}{2k''} \quad (12)$$

La condición de borde en  $z=0$  se discretiza con aproximación de segundo orden hacia adelante:

$$\frac{-3C_{A,0}^j + 4C_{A,1}^j - C_{A,2}^j}{2\Delta z} = -\frac{N_{A0}}{D_{AB}} \quad (13)$$

Se despeja el término  $C_{A,0}^j$ , llegando a la expresión:

$$C_{A,0}^j = \frac{1}{3} \left( \frac{2N_{A0}\Delta z}{D_{AB}} + 4C_{A,1}^j - C_{A,2}^j \right) \quad (14)$$

Por último, la condición inicial se utiliza para llenar posteriormente la matriz de la primera iteración con concentración igual a cero en todo el espacio.

- c) Se simula el proceso por un tiempo suficiente para alcanzar el estado estacionario. Se estima de la siguiente manera:

$$\delta_M = 4\sqrt{\mathfrak{D}_{AB}t} \rightarrow t = \frac{\delta_M^2}{16\mathfrak{D}_{AB}} = 903s \quad (15)$$

Entonces, se sobre estima el valor utilizando un tiempo de 1000 s, para ver la evolución completa del perfil. Se desarrolla en *jupyter notebook* (véase el *notebook* para tener el desarrollo y derivación completa). Se debe obtener la siguiente gráfica de concentración de oxígeno en el tiempo y espacio:

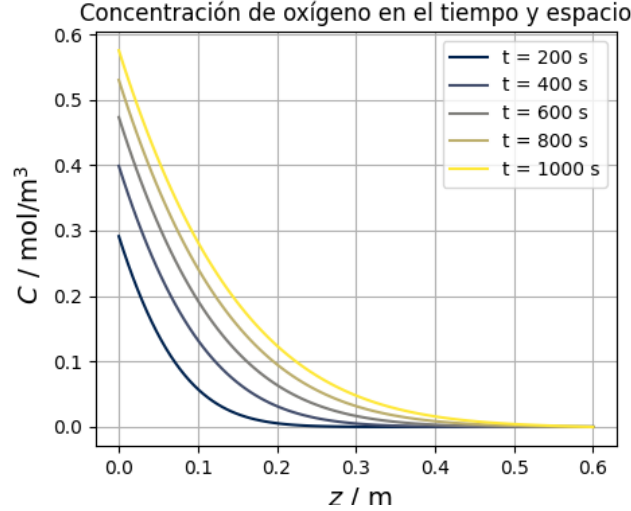


Figura 1. Perfil de concentración de oxígeno en función de la variable espacial  $z$  y temporal  $t$

- d) Para determinar el perfil de concentración de biomasa, uno de las formas de hacerlo es discretizando la ecuación entregada en el enunciado.

Nos dan por enunciado la ecuación de crecimiento de biomasa:

$$\frac{dX}{dt} = \mu X = \mu_{max} \frac{C_A}{K_A + C_A} X \quad (16)$$

Es posible discretizar esta ecuación como:

$$\frac{X_i^{j+1} - X_i^{j-1}}{2\Delta t} = \mu_{max} \frac{C_{A,i}^j}{K_A + C_{A,i}^j} X_i^j \quad (17)$$

Reordenando la ecuación se obtiene:

$$X_i^{j+1} = X_i^{j-1} + \left( \mu_{max} \frac{C_{A,i}^j}{K_A + C_{A,i}^j} X_i^j \right) \cdot 2\Delta t \quad (18)$$

La condición inicial es que hay  $0,2 \text{ mol/m}^3$  en el volumen donde se oxigena. Por ende  $X_i^0 = X_0 = 0,2 \text{ mol/m}^3$ .

Dado a que ya se tienen vectores de concentraciones de oxígeno para distintos intervalos de tiempo, se pueden utilizar para determinar en los mismos tiempos la concentración de biomasa. Para ello se inicia

con una lista con un vector con la concentración inicial, y a partir de ese se construyen los vectores de concentración en los tiempos siguientes (véase el *notebook* para mayor detalle en el procedimiento). Se debe obtener la siguiente figura:

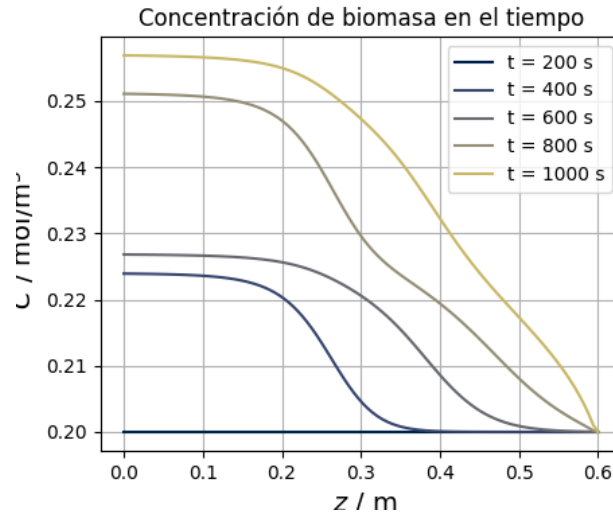


Figura 2. Perfil de concentración de biomasa en función de la variable espacial  $z$  y temporal  $t$

La ecuación de crecimiento de biomasa suele tener una forma exponencial en caso de que la concentración de oxígeno tenga ordenes de magnitud mayor a la constante de inhibición. Por ende, si se gráfica un nodo al interior, debe poder verse un crecimiento pseudo-exponencial, tal como se muestra a continuación probando en el nodo 70 de la grilla (se prueba con este para observar cómo cambia la concentración de biomasa desde un nodo que tarda tiempo en llegar el oxígeno desde el difusor):

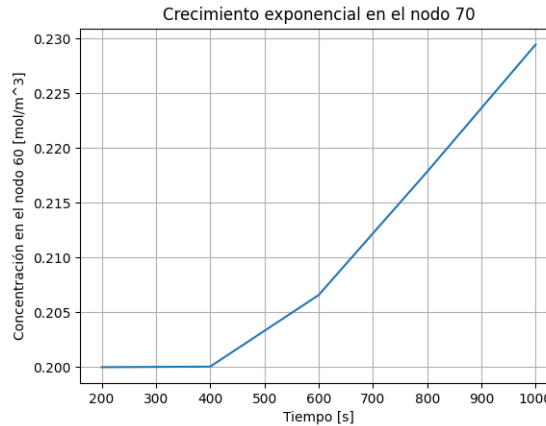


Figura 3. Crecimiento exponencial de biomasa en un nodo interno de la grilla.

Finalmente, es consistente este desarrollo debido a que el consumo de oxígeno por parte de la biomasa si se incluyó en el balance de oxígeno, aproximándolo como una reacción de primer orden homogénea. Por ende, está correcto graficar la biomasa a partir de datos de concentración de oxígeno. En caso de mejorar la precisión, sería recomendable resolver de forma acoplada ambos perfiles de concentración.

## Problema 2

- a) El sistema a modelar contiene una velocidad axial  $v_z$  que depende de  $z$  y  $r$ . Además, existe una velocidad radial  $v_r$  que también depende de  $z$  y  $r$ .

$$\rho \left( \frac{\partial v_z}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial z} + \mu \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) + \rho g_z \quad (19)$$

Se eliminan los siguientes términos:

- $\frac{\partial v_z}{\partial t}$  porque se asume estado estacionario
- $v_r \frac{\partial v_z}{\partial r}$  con el supuesto (3) del enunciado.
- $\frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \theta}$  porque no hay velocidad angular.
- $v_z \frac{\partial v_z}{\partial z}$  con el supuesto (4) del enunciado.
- $\frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2}$  porque la velocidad axial no depende de  $\theta$ .
- $\frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2}$  con el supuesto (2) del enunciado.
- $\rho g_z$  porque no hay componente de la gravedad en el eje axial al ser una tubería horizontal.

Queda la ecuación:

$$\frac{\partial P}{\partial z} = \frac{\mu}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) \quad (20)$$

Además, se utiliza la ecuación de continuidad en coordenadas cilíndricas:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r v_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial \rho v_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial \rho v_z}{\partial z} = 0 \quad (21)$$

Se tiene que la densidad es constante, por lo que se elimina el primer término y se puede dividir toda la ecuación por  $\rho$ . También no existe velocidad angular, por lo que se elimina el tercer término, resultando en:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_r) + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (22)$$

Las condiciones de borde son:

- Condición de no resbalar para  $v_z$ :  $v_z(R, z) = 0$
- Velocidad en  $z$  no indeterminada:  $v_z(0, z) \in \mathbb{R}$
- Velocidad en  $r$  no indeterminada:  $v_r(0, z) \in \mathbb{R}$
- Velocidad radial en la pared constante:  $v_r(R, z) = v_w$
- Velocidad promedio de entrada constante  $\langle v_z \rangle(0)$
- Presión de entrada constante:  $P(0) = P_0$

- b) Se pueden justificar los supuestos de la siguiente manera:

1.  $P(r, z) \approx P(z)$ : es un tubo de radio pequeño en comparación al largo, por lo que las diferencias de presión en el eje radial son despreciables. Entonces, se asume constante la presión en el eje radial.

2.  $\frac{\partial^2 V_z}{\partial z^2} \ll \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial V_z}{\partial r} \right)$  : se cumple para una tubería con un largo mucho más grande que el radio, provocando que los cambios de velocidad  $z$  en la dirección radial sean mucho mayores respecto a la componente axial.
  3.  $\rho V_r \frac{\partial V_z}{\partial r} \ll \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial V_z}{\partial r} \right)$ : se cumple con un fluido a baja velocidad, donde la convección es despreciable en comparación a los esfuerzos viscosos.
  4.  $\rho V_z \frac{\partial V_z}{\partial z} \ll \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial V_z}{\partial r} \right)$ : se cumple con un fluido a baja velocidad, donde la convección es despreciable en comparación a los esfuerzos viscosos.
- c) La ecuación (21) se puede integrar dos veces indefinidamente respecto a  $r$ , dado a que, según el supuesto (1) el perfil de presión es solo dependiente de  $z$ . Se obtiene:

$$v_z(r, z) = \frac{\partial P}{\partial z} \frac{r^2}{4\mu} + c_1 \ln r + c_2 \quad (23)$$

Dado a que en  $r=0$  la velocidad es un número real, necesariamente  $c_1 = 0$ . Además, en la pared existe la condición de no resbalar, por lo tanto:

$$v_z(r = R, z) = 0 = \frac{\partial P}{\partial z} \frac{R^2}{4\mu} + c_2 \quad (24)$$

$$c_2 = -\frac{\partial P}{\partial z} \frac{R^2}{4\mu} \quad (25)$$

Reemplazando el valor de las constantes, se tiene entonces:

$$v_z(r, z) = \frac{\partial P}{\partial z} \frac{R^2}{4\mu} \left( \left( \frac{r}{R} \right)^2 - 1 \right) \quad (26)$$

La velocidad promedio en  $z$  se calcula de la siguiente forma:

$$\langle v_z \rangle(z) = \frac{\pi \int_0^R v_z(r, z) \cdot r dr}{\pi R^2} \quad (27)$$

Resolviendo la integral, debe obtenerse:

$$\langle v_z \rangle(z) = \frac{-R^2}{8\mu} \frac{\partial P}{\partial z} \quad (28)$$

Se puede despejar la derivada de la presión, para poder utilizarla en la ecuación (26):

$$\frac{\partial P}{\partial z} = \langle v_z \rangle \frac{-8\mu}{R^2} \quad (29)$$

$$v_z(r, z) = 2\langle v_z \rangle \left( 1 - \left( \frac{r}{R} \right)^2 \right) \quad (30)$$

Luego, se reemplaza (30) en (22):

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_r) = -2 \frac{\partial \langle v_z \rangle}{\partial z} \left( 1 - \left( \frac{r}{R} \right)^2 \right) \quad (31)$$

Integrando en  $r$  y ocupando de condición para la constante de integración que  $v_r(r = 0)$  existe, se obtiene:

$$v_r(r, z) = -R \frac{\partial \langle v_z \rangle}{\partial z} \left( \frac{r}{R} - \frac{1}{2} \left( \frac{r}{R} \right)^3 \right) \quad (32)$$

Finalmente, en  $r=R$  se tiene que la velocidad es igual a  $v_w$  entregada por enunciado:

$$v_r(r = R, z) = v_w = -R \frac{\partial \langle v_z \rangle}{\partial z} \left( \frac{R}{R} - \frac{1}{2} \left( \frac{R}{R} \right)^3 \right) = -\frac{R}{2} \frac{\partial \langle v_z \rangle}{\partial z} \quad (33)$$

Finalmente, se obtiene una EDO para la velocidad promedio en  $z$ :

$$\frac{\partial \langle v_z \rangle}{\partial z} = \frac{-2v_w}{R} \quad (34)$$

Cuyo resultado es lo que aparece en el *hint* del enunciado:

$$\langle v_z \rangle(z) = \langle v_z \rangle(0) - \frac{2v_w z}{R} \quad (35)$$

Por lo tanto, los perfiles de velocidad y presión son los siguientes:

$$v_z(r, z) = 2 \left( \langle v_z \rangle(0) - \frac{2v_w z}{R} \right) \left( 1 - \left( \frac{r}{R} \right)^2 \right) \quad (36)$$

$$v_r(r, z) = 2v_w \left( \frac{r}{R} - \frac{1}{2} \left( \frac{r}{R} \right)^3 \right) \quad (37)$$

$$P(z) = P_0 + \frac{8v_w z^2 \mu}{R^3} - \frac{8\mu z \langle v_z \rangle(0)}{R^2} \quad (38)$$

Se grafican utilizando Python (véase el *notebook* subido como complemento a la pauta):

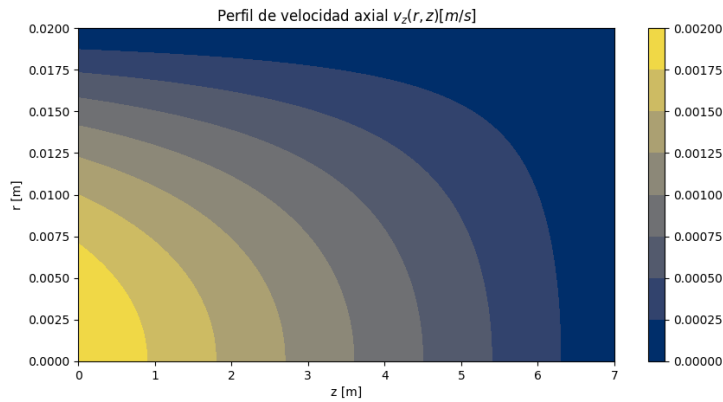
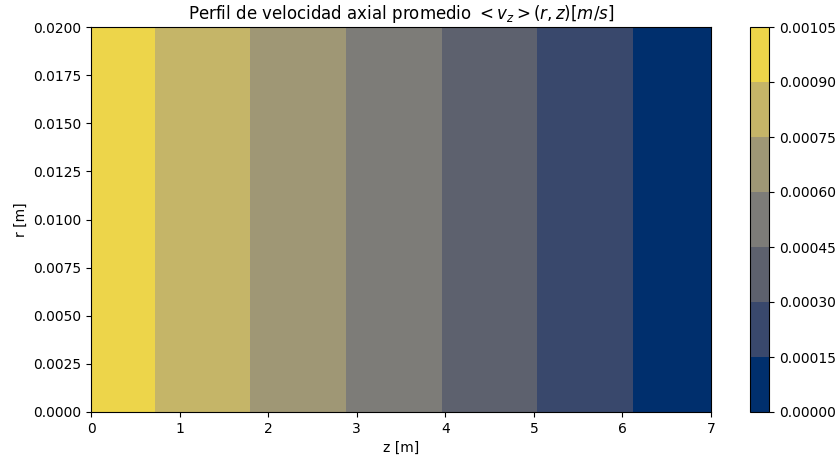
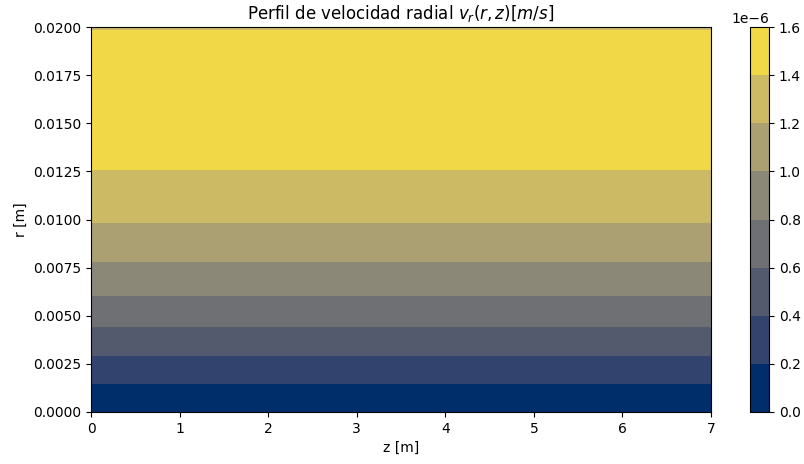


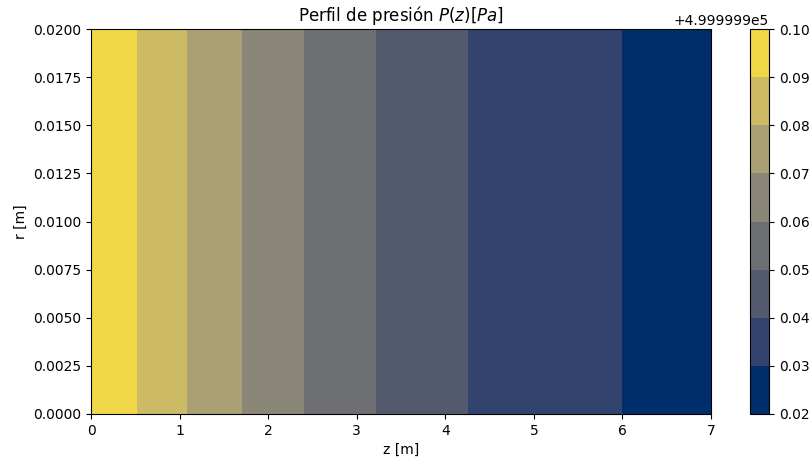
Figura 4. Perfil de velocidad axial en función de  $z$  y  $r$ .



(a) Perfil de velocidad axial promedio en función de  $z$  y  $r$ .



(b) Perfil de velocidad radial en función de  $z$  y  $r$ .



(c) Perfil de presión en función de  $z$ .

Figura 5. Perfiles de velocidades y de presión dentro de la fibra hueca.



d) Se utiliza la ecuación de continuidad para una mezcla binaria:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + v_r \frac{\partial C_A}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial C_A}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = D_{AB} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 C_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right] \quad (39)$$

Eliminando los términos con  $\theta$  y considerando estado estacionario, se obtiene:

$$v_r \frac{\partial C_A}{\partial r} + v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = D_{AB} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right] \quad (40)$$

Las condiciones de borde son:

1.  $C_A(r, z = 0) = C_0$
2.  $\frac{\partial C_A}{\partial z}|_{z=L} = 0$
3.  $\frac{\partial C_A}{\partial z}|_{r=0} = 0$
4.  $-D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial z}|_{r=R} = K_A \Delta C_A$

e) Primero se debe discretizar la ecuación diferencial parcial y las condiciones de borde.

La ecuación desarrollada queda como:

$$\frac{\partial C_A}{\partial r} \left( v_r - \frac{D_{AB}}{r} \right) + \frac{\partial C_A}{\partial z} v_z - \frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2} D_{AB} - \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} D_{AB} = 0 \quad (41)$$

Cada término de la ecuación se discretiza a continuación, considerando el subíndice i para la componente radial y el superíndice j para la componente axial:

$$\frac{\partial C_A}{\partial r} \left( v_r - \frac{D_{AB}}{r} \right) \approx \frac{(C_{i+1,j} - C_{i-1,j})}{2\Delta r} \left( v_r - \frac{D_{AB}}{r} \right) \quad (42)$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial z} v_z \approx \frac{(C_{i,j+1} - C_{i,j-1})}{2\Delta z} v_z \quad (43)$$

$$-\frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2} D_{AB} \approx -\frac{(C_{i+1,j} - 2C_{i,j} + C_{i-1,j})}{(\Delta r)^2} D_{AB} \quad (44)$$

$$-\frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} D_{AB} \approx -\frac{(C_{i,j+1} - 2C_{i,j} + C_{i,j-1})}{(\Delta z)^2} D_{AB} \quad (45)$$

Entonces, la ecuación discretizada resulta en:

$$\begin{aligned} & \frac{(C_{i+1,j} - C_{i-1,j})}{2\Delta r} \left( v_r - \frac{D_{AB}}{r} \right) \\ & + \frac{(C_{i,j+1} - C_{i,j-1})}{2\Delta z} v_z - \frac{(C_{i+1,j} - 2C_{i,j} + C_{i-1,j})}{(\Delta r)^2} D_{AB} - \frac{(C_{i,j+1} - 2C_{i,j} + C_{i,j-1})}{(\Delta z)^2} D_{AB} = 0 \end{aligned} \quad (46)$$

Por otro lado, las condiciones de contorno discretizadas son las siguientes:

1.  $C_{i,0} = C_0$
2.  $3C_{i,N_z} - 4C_{i,N_z-1} + C_{i,N_z-2} = 0$

3.  $-3C_{0,j} + 4C_{1,j} - C_{2,j} = 0$
4.  $-D_{AB} \frac{3C_{N_r,j} - 4C_{N_r-1,j} + C_{N_r-2,j}}{2\Delta r} = K_A(C_{N_r,j} - 0)$

Nótese que la última, relacionada al flux a través de la membrana, se considera que la concentración fuera de la fibra es nula debido a que, por enunciado, se indica que el flujo es mucho mayor que el permeado.

Se reordenan para despejar la concentración en el nodo frontera en función de los nodos interiores:

1.  $C_{i,0} = C_0$
2.  $3C_{i,N_z} = 4C_{i,N_z-1} - C_{i,N_z-2}$
3.  $C_{0,j} = \frac{1}{3}(4C_{1,j} - C_{2,j})$
4.  $C_{N_r,j} = \frac{(4C_{N_r-1,j} - C_{N_r-2,j})}{3 + 2\Delta r K_A / D_{AB}}$

Se resuelve el problema utilizando método iterativo con diferencias finitas, para obtener el siguiente perfil de concentración de bacteriófagos dentro de la fibra hueca.

**Perfil corregido con las difusividades correctas**

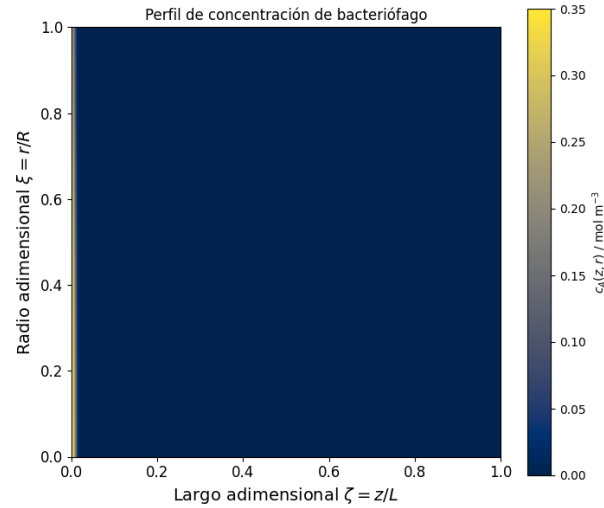


Figura 6. Perfil de concentración de bacteriófago en función de variables adimensionales.

**Perfil con el largo  $L = 0.7$  m**

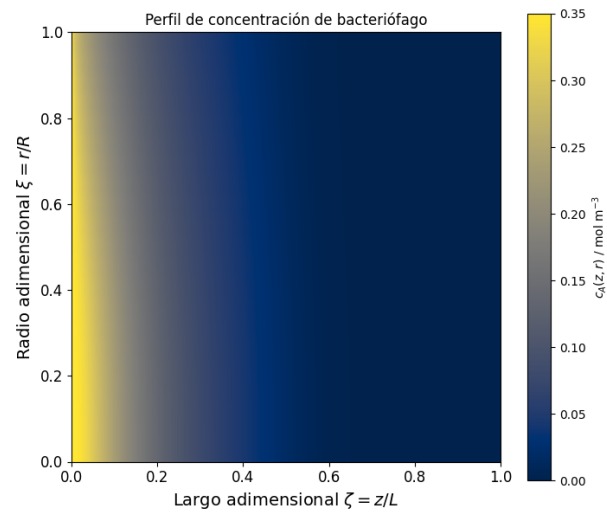


Figura 7. Perfil de concentración de bacteriófago en función de variables adimensionales.