



Curso : Fenómenos de Transporte  
Sigla : IIQ2003  
Profesor : Felipe Huerta

## Pauta Tarea 5 Problema 1

### Problema 1

1)

Separamos la integral en dos zonas:

$$\int_{r=0}^{r=R1} v \cdot r \, dr \, d\theta + \int_{r=R1}^{r=R2} v(r) \cdot r \, dr \, d\theta = 0 \quad (0,1 \text{ p})$$

Sabemos que ambas velocidades son constantes:

$$\int_{r=0}^{r=R1} v \cdot r \, dr \, d\theta = - \int_{r=R1}^{r=R2} v \cdot r \, dr \, d\theta \quad (0,1 \text{ p})$$

Integramos y evaluamos en sus respectivos límites:

$$v \cdot \left[ \frac{r^2}{2} \right]_0^{R1} 2\pi = -v_2 \cdot \left[ \frac{r^2}{2} \right]_{R1}^{R2} 2\pi$$

Finalmente despejamos  $v_2$ :

$$v_2 = -v \cdot \frac{R_1^2}{R_2^2 - R_1^2} = -v \cdot \frac{1}{(R_2/R_1)^2 - 1} = -4,16 \times 10^{-13} \text{ m/s} \quad (0,1 \text{ p})$$

2)

Partiendo por los supuestos, debemos considerar que

- Hay flux solo en el eje radial ( $r$ ) y axial ( $z$ ), con simetría azimutal en  $\theta$ , (0,1 p)
- Flux en  $z$  depende de difusión y convección, mientras que en  $r$  es solo difusión.
- El sistema se encuentra en estado estacionario (0,1 p)
- El contaminante  $A$  se encuentra muy diluido, por lo que es posible modelar la difusión mediante la Ley de Fick. También se asumirá contradifusión equimolar, lo que elimina el término  $x_A(N_A + N_B)$  del flux. No obstante, si habrá convección forzada. (0,1 p)

Consideramos un volumen diferencial del tipo cascarón cilíndrico con grosor  $\Delta r$  y altura  $dz$ .

- Volumen es  $2\pi r \Delta r \Delta z$
- Área basal es  $2\pi r \Delta r$

- Área manto interno es  $2\pi\Delta z \cdot r$
- Área manto externo es  $2\pi\Delta z \cdot (r + \Delta r)$

El balance de masa es: (0,1 p)

$$\frac{\partial C}{\partial t} \cdot 2\pi r \Delta r \Delta z = 2\pi\Delta z \cdot [j_r(r) \cdot r - j_r(r + \Delta r) \cdot (r + \Delta r)] + 2\pi r \Delta r [j_z(z) - j_z(z + \Delta z)] - 2\pi r \Delta r \Delta z \cdot k \cdot C$$

Al dividir por el volumen: (0,1 p)

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{[j_r(r) \cdot r - j_r(r + \Delta r) \cdot (r + \Delta r)]}{r \Delta r} - \frac{[j_z(z) - j_z(z + \Delta z)]}{\Delta z} - k \cdot C$$

Calculando el limite con  $\Delta r$  y  $\Delta z$  tendiendo a 0: (0,1 p)

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{1}{r} \frac{\partial(j_r \cdot r)}{\partial r} - \frac{\partial j_z}{\partial z} - k \cdot C$$

Expandimos la derivada de nuestro balance diferencial:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{1}{r} \left( \frac{\partial j_r}{\partial r} \cdot r + j_r \right) - \frac{\partial j_z}{\partial z} - k \cdot C$$

Recordando el flux másico en la dirección radial, que solo contiene el término difusivo:

$$j_r = -D_{a,b} \frac{\partial C}{\partial r}$$

$$\frac{\partial j_r}{\partial r} = -D_{a,b} \frac{\partial^2 C}{\partial r^2}$$

y ahora con el flux másico en la dirección z, que contiene un término convectivo y uno difusivo:

$$j_z = -D_{a,b} \frac{\partial C}{\partial z} + v_z \cdot C$$

$$\frac{\partial j_z}{\partial z} = -D_{a,b} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + v_z \cdot \frac{\partial C}{\partial z}$$

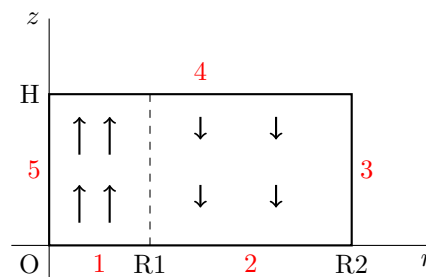
Ahora reemplazando en el balance diferencial: (0,1 p)

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{1}{r} \left( -D_{a,b} \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} \cdot r - D_{a,b} \frac{\partial C}{\partial r} \right) + D_{a,b} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v_z \cdot \frac{\partial C}{\partial z} - k \cdot C$$

Reordenando los términos y considerando que el sistema es estacionario:

$$D_{a,b} \left( \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial C}{\partial r} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) - k \cdot C = v_z \cdot \frac{\partial C}{\partial z}$$

3)



Las condiciones de borde para cada superficie son:

CB1: Fondo del tanque con burbujas

$$C(r \leq R_1, z = 0) = C_0 \quad (0,1 \text{ p}) \quad (1)$$

CB2: Fondo del tanque sin burbujas

$$\frac{\partial C}{\partial z}(r \geq R_1, z = 0) = 0 \quad (0,1 \text{ p}) \quad (2)$$

CB3: Pared exterior sin flux

$$\frac{\partial C}{\partial r}(r = R_2, z) = 0 \quad (0,1 \text{ p}) \quad (3)$$

CB4: Superficie con flux igual a 0

$$\frac{\partial C}{\partial z}(r, z = H) = 0 \quad (0,1 \text{ p}) \quad (4)$$

CB5: Centro del tanque

$$\frac{\partial C}{\partial z}(r = 0, z) = 0 \quad (0,1 \text{ p}) \quad (5)$$

4)

Ahora se discretiza, recordando que el término convectivo se debe discretizar aguas arriba (hacia atrás)

$$v_z \frac{C_{i,j} - C_{i,j-1}}{\Delta z} = D_{ab} \left( \frac{1}{r_{i,j}} \left[ \frac{C_{i+1,j} - C_{i-1,j}}{2\Delta r} + r_{i,j} \frac{C_{i-1,j} - 2C_{i,j} + C_{i+1,j}}{\Delta r^2} \right] + \frac{C_{i,j-1} - 2C_{i,j} + C_{i,j+1}}{\Delta z^2} \right) - k \cdot C_a \quad (0,5 \text{ p}) \quad (6)$$

Ahora reordenando los coeficientes:

$$C_{i+1,j} \left( -\frac{D_{ab}}{2r_{i,j}\Delta r} - \frac{D_{ab}}{\Delta r^2} \right) + C_{i-1,j} \left( \frac{D_{ab}}{2r_{i,j}\Delta r} - \frac{D_{ab}}{\Delta r^2} \right) + C_{i,j+1} \left( -\frac{D_{ab}}{\Delta z^2} \right) + C_{i,j-1} \left( -\frac{v_z}{\Delta z} - \frac{D_{ab}}{\Delta z^2} \right) + C_{i,j} \left( \frac{v_z}{\Delta z} + \frac{2D_{ab}}{\Delta r^2} + \frac{2D_{ab}}{\Delta z^2} + k \right) = 0 \quad (0,1 \text{ p})$$

Con respecto a las condiciones de borde, considerando  $N_i$  el nodo a la distancia  $i$  y que el orden de la matriz es  $C[\text{radio}, \text{altura}]$

CB1: Fondo del tanque con burbujas

$$C[1 : N_{R1}, 0] = C_0 \quad (0,1 \text{ p}) \quad (7)$$

CB2: Considerando la coordenada axial hacia arriba como positiva, la condición de borde para la concentración en el fondo del tanque sin burbujas es:

$$C[N_{R1} : -1, 0] = \frac{(4C[N_{R1} : -1, 1] - C[N_{R1} : -1, 2])}{3} \quad (0,2 \text{ p}) \quad (8)$$

CB3: Pared exterior sin flux

$$C[-1, :] = \frac{(4C[-2, :] - C[-3, :])}{3} \quad (0,2 \text{ p}) \quad (9)$$

CB4: Superficie con flux igual a 0

$$C[:, -1] = \frac{(4C[:, -2] - C[:, -3])}{3} \quad (0,2 \text{ p}) \quad (10)$$

CB5: Centro del tanque

$$C[0, :] = \frac{(4C[1, :] - C[2, :])}{3} \quad (0,2 \text{ p}) \quad (11)$$

5)

Transformamos de mg/L a mmol/m<sup>3</sup> para ser consistentes con las unidades de la difusividad y velocidad en la ecuación de continuidad.

$$8 \frac{mgO_2}{L} = 8 \frac{mgO_2}{L} \cdot \frac{mmolO_2}{32mgO_2} \cdot \frac{1000L}{1m^3} = 250 \frac{mmolO_2}{m^3} \quad (0,2 \text{ p})$$

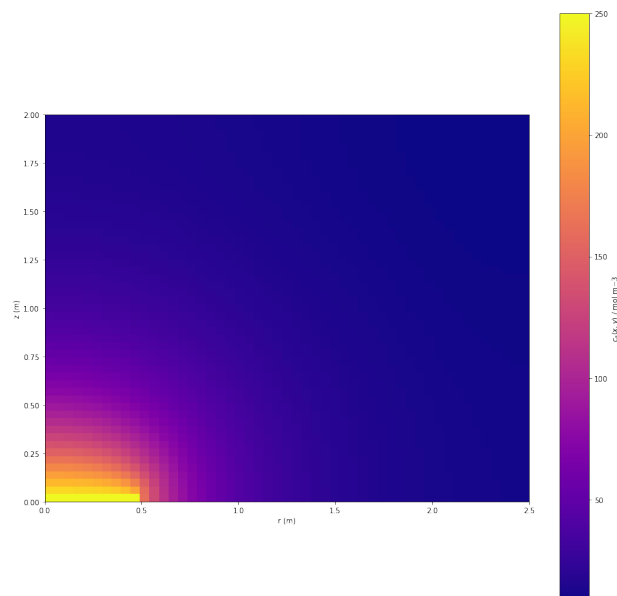
Adicionalmente, es importante que hayan definido dentro de la iteración un cálculo para los nodos en la zona 1 o zona 2

```
# Residuo
if (i>0) & (i<Nr-1) & (j>0) & (j<Nz-1):
    # caso donde r<R1
    if i<nr1:
        a = -D/(2*dr**i*dr) - D/dr**2
        b = D/(2*dr**i*dr) - D/dr**2
        # Coeficiente correspondiente a nodo vecino superior
        c = -D/dz**2
        # Coeficiente correspondiente a nodo vecino inferior
        d = -D/dz**2
        # Coeficiente correspondiente a nodo central
        e = -v_z1/dz**2 + v_z10/dz**2 + v_z1/dz + k
    # caso donde R1<r<R2
    else:
        a = -D/(2*dr**i*dr) - D/dr**2
        b = D/(2*dr**i*dr) - D/dr**2
        # Coeficiente correspondiente a nodo vecino superior
        c = -D/dz**2
        # Coeficiente correspondiente a nodo vecino inferior
        d = -D/dz**2
        # Coeficiente correspondiente a nodo central
        e = -v_z10/dz**2 + v_z10/dz**2 + v_z10/dz + k

residual = a * ca[i+1,j] + b * ca[i-1,j] + c * ca[i,j+1] + d * ca[i,j-1] + e * ca[i,j] - f
```

Se espera haber obtenido un gráfico de este estilo, que podría tener mayor o menor resolución.

- Se definen los parámetros en el código de manera correcta (0,2 p)
- Los espaciamentos en z y r se definen de manera correcta, y se utiliza el mismo número de nodos para ambas dimensiones. En otro caso, se justifica por qué utilizar un número distinto de nodos (0,2 p)
- Los coeficientes obtenidos al discretizar la PDE están definidos de manera correcta (0,2 p)
- La implementación de las condiciones de borde es correcta (0,2 p)
- El método converge en menos de 5 minutos (0,2 p)
- El perfil de concentración es cualitativa y cuantitativamente correcto (0,8 p)



6)

Se podría crear una nueva matriz con las mismas dimensiones que la matriz original, para luego iterar sobre cada punto y asignar un valor booleano si cumple o no con la restricción:

```

9. Calcular zona muerta

In [26]: c_lim= 1 / PM *1e3 # mol/m2
          print(c_lim)
          C_m=mp.ones((Nr,Nz))*0
          31.25

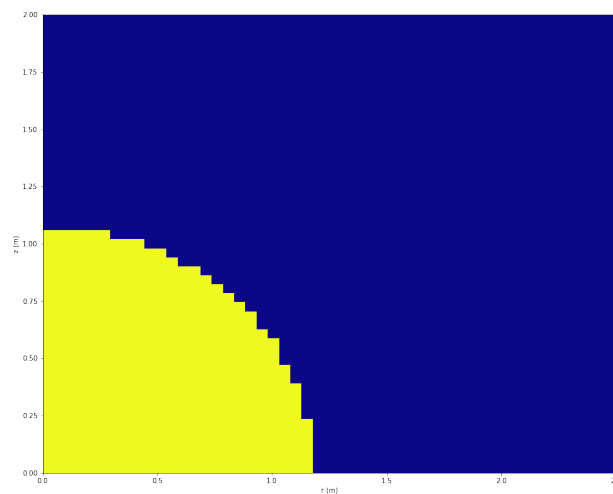
In [27]: for i in range(Nr):
          for j in range(Nz):
              if c[i,j]>=c_lim:
                  C_m[i,j]=1

In [30]: fig=plt.subplots(figsize=[15,15])
          plt.imshow(np.flipud(np.transpose(C_m)),origin="upper",extent=[0,R2,0,L2],cmap="plasma")
          plt.xlabel("r (m)")
          plt.ylabel("z (m)")
          plt.show()

```

**Evaluación:** Se define correctamente la condición para identificar la zona muerta como un subconjunto basado en los valores de concentración (0,3 p)

El gráfico obtenido es el siguiente, siendo la zona azul la "zona muerta" y la zona amarilla la zona con una concentración de oxígeno superior a 1 g/L:



**Evaluación:** Se aplica un mapa de colores que permite identificar visualmente la zona muerta (0,3 p)

Debido a que el gráfico muestra que la zona muerta incluye casi 3/4 del tanque, se podrían plantear varias soluciones, idealmente se podría haber planteado diversos escenarios modificando algunos parámetros del modelo:

- Aumentar la zona de burbujas para que todo el fondo del tanque las tenga.
- Disminuir altura del tanque
- Generar transferencia de oxígeno desde la superficie al fluido.

**Evaluación:** Se analiza el perfil de concentración obtenido y se proponen dos soluciones adecuadas (0,4 p)

## Problema 2

1)

Las condiciones de borde son:

CB1: La concentración inicial de contaminante es igual a 0 en toda la profundidad del dominio:

$$C_w(x, t = 0) = 0 \quad (0,2 \text{ p})$$

CB2: La concentración del contaminante en la frontera  $x = 0$  varía con el tiempo según:

$$C_w(x = 0, t) = C_0 \cdot \exp(-\beta t) \quad (0,2 \text{ p})$$

CB3: Flux igual a 0 en  $x = L$ :

$$\frac{\partial}{\partial x} C_w(x = L, t) = 0 \quad (0,1 \text{ p})$$

2)

Partimos con la ecuación

$$R * \frac{\partial C}{\partial t} = D_h \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda C \quad (12)$$

Ahora discretizamos

$$R \left( \frac{C_i^{t+1} - C_i^t}{\Delta t} \right) = D_h \frac{C_{i+1}^t - 2C_i^t + C_{i-1}^t}{\Delta x^2} - v \frac{C_i^t - C_{i-1}^t}{\Delta x} - \lambda C_i^t \quad (0,6 \text{ p}, 0,2 \text{ p por cada discretización correcta}) \quad (13)$$

Reordenando la ecuación en forma FTCS:

$$C_i^{t+1} = C_i^t + \Delta t \left[ \left( \frac{D_h}{R \Delta x^2} + \frac{v}{R \Delta x} \right) C_{i-1}^t + \left( -\frac{2D_h}{R \Delta x^2} - \frac{v}{R \Delta x} - \frac{\lambda}{R} \right) C_i^t + \left( \frac{D_h}{R \Delta x^2} \right) C_{i+1}^t \right] \quad (0,3 \text{ p}) \quad (14)$$

Ahora con las condiciones de borde:

CB1, el vector de concentraciones (en t=0) debe ser igual a 0:

$$C_w[:,] = 0 \quad (0,2 \text{ p}) \quad (15)$$

CB2, La concentración en  $x = 0$  tiene un decaimiento exponencial:

$$C_w[0] = C_0 \cdot \exp(-\beta t) \quad (0,2 \text{ p}) \quad (16)$$

CB3, el flux en  $x = L$  es igual a 0:

$$C_w[-1] = \frac{(4C_w[-2] - C_w[-3])}{3} \quad (0,2 \text{ p}) \quad (17)$$

Nótese que las condiciones de borde reescriben la condición inicial en el primer y último nodo. Esto es correcto, ya que la ecuación de conservación es válida exclusivamente para puntos dentro del dominio. En las fronteras, las condiciones de borde son las que establecen el valor de la variable dependiente.

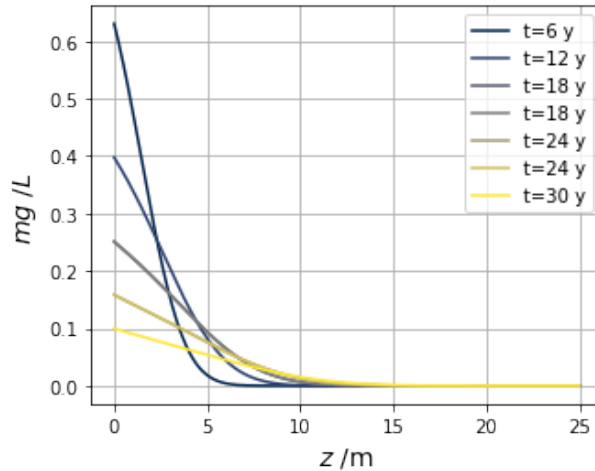
3)

Para escoger el espaciamiento entre nodos se puede utilizar el número de Fourier y Courant para asegurar la estabilidad del modelo. La condición es un número de Fourier menor a 0.5 y un número de Courant menor a 1:

$$Fo = \frac{D_h \cdot \Delta t}{R \cdot \Delta x^2} < 1/2$$

$$C = \frac{v_z \cdot \Delta t}{\Delta x} < 1$$

La solución del problema debe entregar un gráfico similar a este:



- Se definen los parámetros en el código de manera correcta (0,1 p)
- Los espaciamientos en z y t se definen de manera correcta (0,1 p)
- El espaciamiento temporal  $\Delta t$  cumple la condición de convergencia para el número de Fourier para el espaciamiento geométrico  $\Delta z$  seleccionado (0,1 p)
- La matriz de coeficientes y el vector del lado derecho obtenidos al discretizar la PDE están definidos de manera correcta (0,1 p)
- La implementación de las condiciones de borde son correctas (0,2 p)
- La implementación de la condición inicial es correcta (0,1 p)
- El método converge en menos de 5 minutos (0,2 p)
- El perfil de concentración es cualitativa y cuantitativamente correcto (0,8 p)

Adicionalmente, para obtener la concentración promedio sobre el dominio se podría haber realizado una iteración sobre cada elemento de la solución para  $t = 30 \text{ years}$ :

P3) Calcule la concentración promedio en el dominio después de 30 años

```
In [32]: # Sobre todo x
suma=0
len(C_num)
for i in range(len(C_num[-1])):
    suma=suma+C_num[-1][i]
|
prom=suma/len(C_num[-1])
print(prom)

0.023419985647042965
```

Se obtiene que la concentración promedio sobre todo el dominio a los 30 años es igual a 0.0234 mg/L (0,3 p) .

4)

Del gráfico obtenido en 3 se puede observar que a medida que pasa el tiempo, el contaminante se difunde a través del suelo llegando a una mayor profundidad. Al mismo tiempo, la disminución de la concentración ocurre debido a la condición de borde 2 y a que el contaminante está cada vez más "diluido" a lo largo del eje.

- Se visualizan cinco perfiles de concentración (0,1 p)
- Se llega a una conclusión correcta con respecto a la profundidad de transporte del contaminante (0,2 p)
- Se discute el efecto de la disminución de concentración temporal en el comienzo del dominio por volatilización y lixiviación (0,2 p)

5)

Si  $\lambda = 0$ , el contaminante posee el siguiente comportamiento

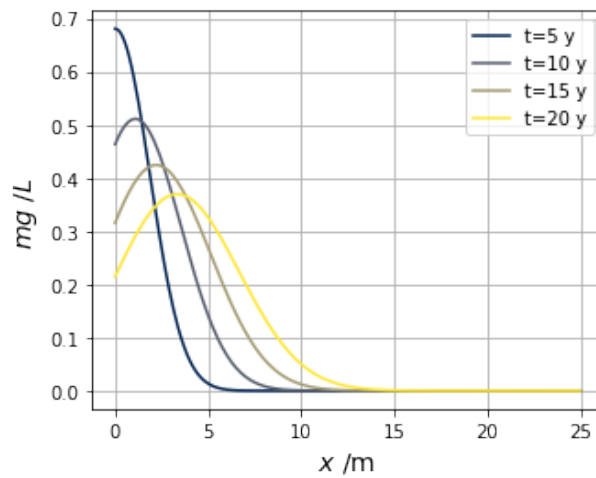
Se obtiene el perfil de concentración adecuado con la cúspide de concentración siendo más notoria que en el caso anterior y desplazándose hacia la derecha con el tiempo (0,3 p)

Utilizando las funciones de Python, se obtiene que la concentración máxima es de 0.369 mg/L (0,1 p) a una profundidad de 3.375 m (0,1 p) bajo la fuente del contaminante.

6)

Para calcular el flux másico que pasa hacia el acuífero debemos recordar que este se puede escribir como:

$$j = -\rho \cdot D_h \frac{\partial C_w}{\partial x} + C \cdot v = -D_h \frac{\partial C_w}{\partial x} + C \cdot v \quad (0,1 \text{ p})$$



Discretizando:

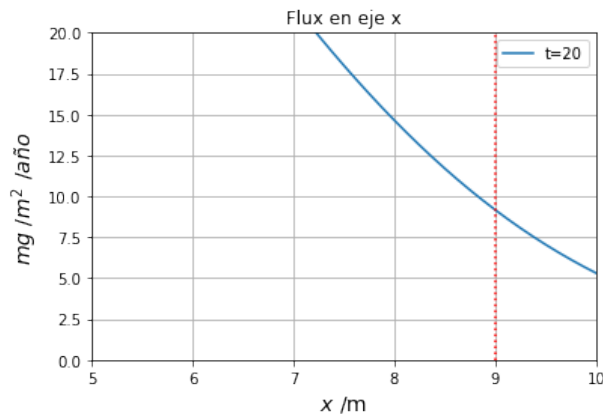
$$j = -D_h \frac{\partial C_w}{\partial x} = -D_h \cdot \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta x} + C_i \cdot v \quad (0,1 \text{ p})$$

Esta discretización es válida sólo para los puntos interiores, lo que es suficiente porque interesa el flux que cruza la ubicación  $z = 9 \text{ m}$ . Si el índice del vector de profundidad que corresponde a  $z = 9 \text{ m}$  es  $k$ , entonces el flux que cruza hacia el acuífero se obtiene utilizando el vector de concentraciones luego de  $t = 20$  años de simulación:

$$k = \text{round}\left(\frac{9}{L} \cdot n^\circ \text{ nodos}\right)$$

$$j|_{x=9m} = -D_h \cdot \frac{C_{k+1} - C_{k-1}}{2\Delta x} = 0.00916 \frac{mg}{L \cdot m} \cdot \frac{m^2}{\text{año}} \frac{1000L}{m^3} = 9.16 \frac{mg}{m^2 \cdot \text{año}} \quad (0,1 \text{ p})$$

Por lo tanto, el flux másico que pasará hacia el acuífero en 20 años será de  $9.16 \text{ mg } m^{-2} \text{ año}^{-1}$ . (0,2 p)



7)

De manera similar a la sección anterior, debemos encontrar el valor máximo de la siguiente expresión sobre todos los años:

$$\max j|_{z=9m} = \max \left[ -D_h \frac{\partial C_w}{\partial x} + C \cdot v \right]_{z=9m} = \max \left[ -D_h \cdot \frac{C_{k+1} - C_{k-1}}{2\Delta x} + C_k \cdot v \right]_{z=9m} \quad (0,1 \text{ p})$$

Para ser más precisos con lo que pide el enunciado, se podría realizar una nueva iteración en la que se escriba una nueva solución cada 1 año. De esta forma se itera sobre todos los años sobre el nodo  $x=9 \text{ m}$ . Se obtiene que el flux máximo se encuentra a los 25 años, con un valor de  $10.41 \text{ mg } m^{-2} \text{ año}^{-1}$  (0,4 p).