

Taller I

Andres Medina Juan Neisa Yeison Gonzalez
 amedinae@unal.edu.co jsneisav@unal.edu.co ylgonzalezhu@unal.edu.co
 Universidad Nacional de Colombia
 Departamento de ingeniería mecánica y mecatrónica
 Modelacion Matematica.

I. CASO 1: VUELO DE UN HIDRO COHETE

Resumen—En esta sección se presenta modelo matemático para el vuelo de un hidro cohete considerando 3 fases en su movimiento; propulsión por agua, propulsión por aire y caída libre. Se considero la variación de la densidad de la altura con respecto a la altura y la variación de la masa del cohete al ser propulsado.

Palabras clave—Agua, Cohete, Conservación de masa, energía y momento, Presión, Teorema de Reynolds.

I-A. Identificación y clasificación de variables

Tabla I

Clasificación de variables	
Tipo	Variable
Dependiente	Velocidad, Presión del aire interno (P_a), Masa del agua (m_w)
Independientes	Tiempo
Parámetro	Ángulo de la rampa (θ), Masas del cohete (m_b , m_a , m_w), Presión atmosférica (P_{atm}), Área de la sección transversal del tanque (S_b), Área del agujero de descarga (S) Coeficiente de arrastre (C_D) Constante de los gases ideales (R)
Despreciadas	Viscosidad del fluido

I-B. Principios de conservación

- Principio de conservación del momentum.
- Principio de conservación de masas.
- Principio de conservación de la energía.

I-C. Modelo Matemático

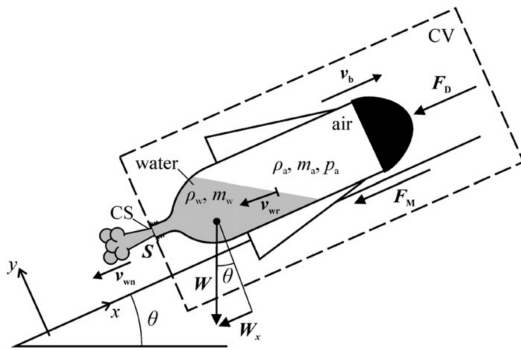


Figura 1: Diagrama de cuerpo libre del cohete. Figura tomada de [1].

I-C1. Propulsión por agua:

$$0 = \frac{d}{dt} \int_{CV} \rho dV + \int_{CS} \rho (v_r dS)$$

Las masas del aire y de la botella son constantes por lo tanto.

$$\frac{dm_w}{dt} = - \int_{CS} \rho (v_r dS)$$

Y sobre la superficie la velocidad proyectada en la superficie de la boquilla es llamada v_{wn} , por lo tanto.

$$\frac{dm_w}{dt} = -\rho_w v_{wn} S \quad (1)$$

Con el teorema de transporte de Reynolds para momentos:

$$\sum F = \frac{d}{dt} \int_{CV} \rho v dV + \int_{CS} \rho v (v_r dS)$$

Como se comento anteriormente las masas de aire y botella son constantes, pero el del agua no por lo tanto $\frac{d}{dt} \int_{CV} \rho v dV$, en el eje x:

$$\sum F_x = (m_b + m_a) \frac{dv_b}{dt} + \frac{d(m_w V_w)}{dt} + \int_{CS} \rho v (v_r dS)$$

$$\sum F_x = (m_b + m_a) \frac{dv_b}{dt} + m_w \frac{dv_w}{dt} + v_w \frac{dm_w}{dt} + \int_{CS} \rho v (v_r dS)$$

La velocidad relativa en el flujo en la superficie de intereses, es la velocidad del agua en la boquilla (v_{wn}), y la velocidad absoluta es la resta entre la velocidad absoluta del cohete y la velocidad relativa en la boquilla, por lo tanto:

$$\sum F_x = (m_b + m_a) \frac{dv_b}{dt} + m_w \frac{dv_w}{dt} + v_w \frac{dm_w}{dt} + \rho_w (v_b - v_{wn}) v_{wn} S$$

La velocidad del agua además se puede expresar como $v_b - v_{wr}$

$$\sum F_x = (m_b + m_a) \frac{dv_b}{dt} + m_w \frac{dv_w}{dt} + (v_b - v_{wr}) \frac{dm_w}{dt} + \rho_w (v_b - v_{wn}) v_{wn} S$$

Y $v_{wr} = v_{wn} \frac{S}{S_b}$ por lo tanto:

$$\sum F_x = (m_b + m_a) \frac{dv_b}{dt} + m_w \frac{dv_w}{dt} + (v_b - v_{wn} \frac{S}{S_b}) \frac{dm_w}{dt} + \rho_w (v_b - v_{wn}) v_{wn} S$$

Las fuerzas externas involucradas a lo largo del eje x son la fuerza de arrastre, la fuerza de fricción, y la componente en x del peso.

Cada una de estas componentes se puede expresar, como:

$$W_x = (m_b + m_a + m_w) g \cos(\theta)$$

$$F_M = \mu(m_b + m_a + m_w) g \sin(\theta)$$

$$F_D = 0,5 \rho_{atm} C_D S_b v_b^2$$

Se desea tener en cuenta en la fuerza de arrastre la variación de la densidad del aire con la altura. Con la ecuación de los gases ideales es posible definir la densidad en base a la altura como (Teniendo en cuenta $T = T_0 - Lh$, donde T_0 es la temperatura a nivel del mar, L el "temperature lapse rate" a la altura):

$$\rho = \frac{pM}{RT} = \frac{pM}{RT_0(1 - \frac{Lh}{T_0})}$$

M es la masa molar del aire seco. Y la presión dada una altura es:

$$p = p_0(1 - \frac{Lh}{T_0})^{\frac{gM}{RL}}$$

Por lo tanto:

$$\rho_{atm} = \frac{p_0 M}{RT_0} \left(1 - \frac{Lh}{T_0}\right)^{\frac{gM}{RL} - 1}$$

Con esto la fuerza de arrastre es:

$$F_D = 0,5 \frac{p_0 M}{RT_0} \left(1 - \frac{Lh}{T_0}\right)^{\frac{gM}{RL} - 1} C_D S_b v_b^2$$

De esta manera la ecuación de momento es:

$$F_D + F_M + W_x = (m_b + m_a) \frac{dv_b}{dt} + m_w \frac{dv_w}{dt} - \rho_w v_{wn} S [v_w - v_b + v_{wn}]$$

Reemplazando $v_w = v_b - v_{wn} \frac{S}{S_b}$, y arreglando la ecuación:

$$F_D + F_M + W_x - \rho_w v_{wn} S [v_{wn} (\frac{S}{S_b} - 1)] = \frac{dV_b}{dt} (m_b + m_a + m_w) + \frac{dv_{wn}}{dt} (-m_w \frac{S}{S_b})$$

Debido a que en esta fase de propulsión por agua el movimiento se puede considerar rectilíneo, el cambio de altura se puede modelar mediante la componente vertical de la velocidad del cohete:

$$\frac{dh}{dt} = v_b \sin \theta \quad (2)$$

El siguiente análisis a realizar es el de conservación de energía, con la ayuda del teorema de Reynolds tenemos:

$$\frac{dQ}{dt} - \frac{dW}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{CV} \rho e dV + \int_{CS} \rho (e + \frac{p}{\rho}) (v_r \cdot dS)$$

Para el caso isotérmico $\frac{dQ}{dt}$, puede ser modelado como.

$$\frac{dQ}{dt} = P_a v_{wn} S$$

Y el trabajo es:

$$-\frac{dW}{dt} = -v_b (F_D + F_M)$$

Es necesario modelar de igual manera la presión del aire a lo largo del tiempo, por lo que se utiliza la expresión de expansión isotérmica para un gas ideal (ver ecuación 3).

$$\frac{P_a}{\rho_a} = \frac{P_{a0}}{\rho_{a0}} \quad (3)$$

Donde se sabe que

$$\rho_a = \frac{m_a}{V_a} \\ V_a = V - V_w$$

obteniendo la expresión:

$$P_a = \frac{m_a P_{a0}}{(V - \frac{m_w}{\rho_w}) \rho_{a0}}$$

En donde luego de derivar con respecto al tiempo a ambos lados de la ecuación y despejar la expresión $\frac{dP_a}{dt}$

$$\frac{dP_a}{dt} = \frac{P_{a0} S}{\frac{\rho_{a0}}{\rho_w} m_w - \rho_{a0} V} v_{wn} P_a \quad (4)$$

De los principios de conservación de momento y energía se pueden derivar las expresiones para $\frac{dv_b}{dt}$ y $\frac{dv_{wn}}{dt}$:

$$\begin{aligned} \frac{dv_b}{dt} = & -\frac{1}{m_b + m_a}(F_D + F_M + W_x) \\ & + \frac{1}{m_b + m_a} \left(S_b(p_a - p_{atm}) \right. \\ & \left. - \frac{(S_b - S)^2}{2S_b} \rho_w v_{wn}^2 \right) \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \frac{dv_{wn}}{dt} = & -\frac{S_b^2(p_a - p_{atm})}{S} \left(\frac{1}{m_w} + \frac{1}{m_b + m_a} \right) \\ & - \frac{v_{wn}^2 \rho_w}{2S} \left(\frac{S_b^2 - S^2}{m_w} + \frac{(S_b - S)^2}{m_b + m_a} \right) \\ & - \frac{S_b}{S(m_b + m_a)}(F_D + F_M + W_x) \end{aligned} \quad (6)$$

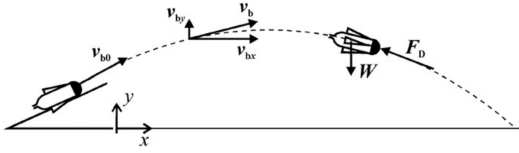


Figura 2: Diagrama de trayectoria del cohete con un comportamiento parabólico. Figura tomada de [1].

I-C2. Vuelo balístico: Para realizar el análisis del comportamiento del hidro cohete luego de la propulsión se utiliza el principio de conservación del momentum mediante la segunda ley de newton:

Para la componente x se tiene:

$$\begin{aligned} \sum F_x &= m_b a_{bx} \\ m_b a_{bx} &= \sum F_x \\ m_b \frac{dv_{bx}}{dt} &= -F_{Dx} \end{aligned}$$

La fuerza de arrastre está definida por la expresión:

$$F_D = 0,5 \rho_{atm} C_D S_b v_b^2$$

La componente en x de la fuerza de arrastre del aire (F_D) se expresa como el $F_D \cos(\theta)$ siendo θ el ángulo que forma la horizontal y por la definición del coseno se tiene que:

$$\cos(\theta) = \frac{v_{bx}}{v_b}$$

Finalmente la expresión de la velocidad en la componente x es:

$$\begin{aligned} \frac{dv_{bx}}{dt} &= -\frac{\rho_{atm} C_D S_b v_b^2}{2m_b} \cos(\theta) \\ \frac{dv_{bx}}{dt} &= -\frac{\rho_{atm} C_D S_b v_b^2}{2m_b} \frac{v_{bx}}{v_b} \end{aligned}$$

$$\frac{dv_{bx}}{dt} = -\frac{\rho_{atm} C_D S_b}{2m_b} v_{bx} v_b \quad (7)$$

De manera análoga se obtiene el comportamiento de la velocidad en el eje y y siendo W el peso del cohete sin agua:

$$\begin{aligned} \sum F_y &= m_b a_{by} \\ m_b a_{by} &= \sum F_y \\ m_b \frac{dv_{by}}{dt} &= -F_{Dy} - W_b \end{aligned}$$

teniendo en cuenta que:

$$\begin{aligned} W_b &= m_b g \\ F_{Dy} &= F_D \sin(\theta) \\ \sin(\theta) &= \frac{v_{by}}{v_b} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dv_{by}}{dt} &= -g - \frac{\rho_{atm} C_D S_b v_b^2}{2m_b} \sin(\theta) \\ \frac{dv_{by}}{dt} &= -g - \frac{\rho_{atm} C_D S_b v_b^2}{2m_b} \frac{v_{by}}{v_b} \end{aligned}$$

$$\frac{dv_{by}}{dt} = -g - \frac{\rho_{atm} C_D S_b}{2m_b} v_{by} v_b \quad (8)$$

El sistema de ecuaciones que define el comportamiento del modelo de propulsión del cohete está dado por las ecuaciones 1, 2, 4, 5 y 6. Luego, de obtener la velocidad del cohete (v_b) justo cuando el tanque se vacía y el cohete deja la rampa, se inicia el comportamiento del cohete como un proyectil, donde el modelo para este comportamiento consta de las ecuaciones 7 y 8.

I-D. Implementación y desarrollo

Utilizando el método numérico de Runge Kutta de cuarto orden, en las ecuaciones que conforman los dos casos modelados del cohete (propulsión de agua y vuelo balístico), se intentó observar como sería el comportamiento de la altura del cohete (h), la velocidad del cohete (v_b), la velocidad del agua respecto de la boquilla del cohete (v_{wn}), la masa

del agua al interior del cohete (m_w) y la presión del aire al interior del tanque (P_a).

Las condiciones iniciales y las características del modelo son:

Presión atmosférica: 101325 Pa Masa inicial de agua: 1 kg Masa del aire: 0.01 kg Masa de la botella: kg Densidad del agua: $\frac{kg}{m^3}$ Presión inicial del aire: Pa Altura inicial: m Volumen del tanque: m^3 Área transversal de la boquilla: $0.01 m^2$ Área transversal del tanque: $0.1 m^2$

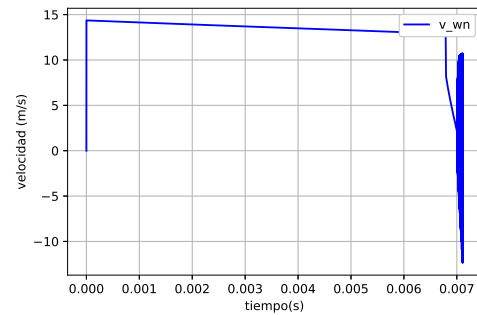


Figura 5: Velocidad del agua expulsada por la boquilla

I-E. Resultados

Para el caso de la propulsión del cohete se obtuvieron los siguientes comportamientos de las variables de interés:

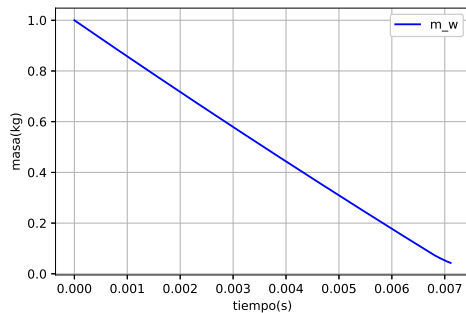


Figura 3: Masa del agua al interior del cohete

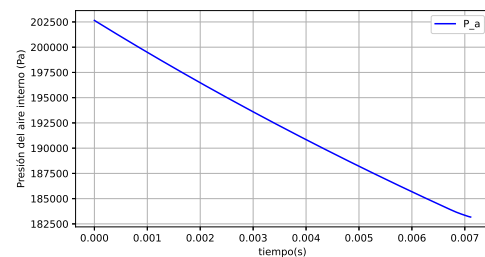


Figura 6: Presión del aire al interior del cohete

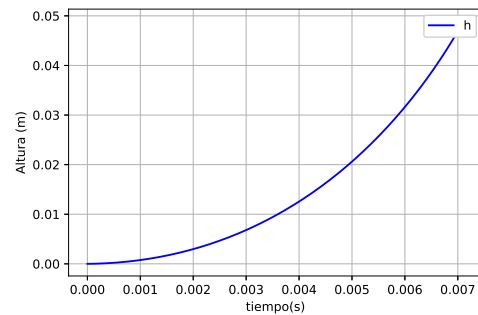


Figura 7: Altura del cohete

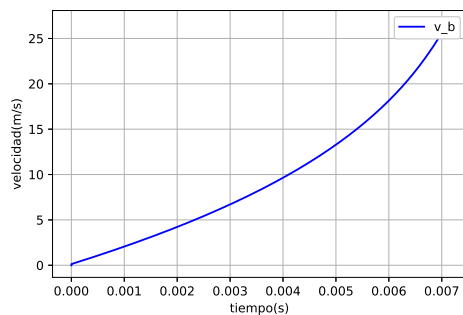


Figura 4: Velocidad absoluta del cohete

I-F. Conclusiones

- Utilizando las ecuaciones del modelo de propulsión cuando la masa del agua se hace muy cercana a cero, la aproximación mediante el método de Runge Kutta de 4to orden empieza a divergir, sin embargo, a medida que el valor del paso del tiempo para la aproximación se hace más pequeño, el valor de la masa puede acercarse aún más a cero, permitiendo simular el modelo por más tiempo, para este caso fue posible simular el modelo de propulsión hasta 0.007s.

II. CASO 2: SISTEMA DE TANQUES INTERCONECTADOS

Resumen—En esta sección se presenta un modelo matemático para un sistema de mezclado variable de un solvente y un soluto. Este sistema maneja 2 etapas, en la primera se modela el vaciado/llenado de un tanque en base a el principio de Bernoulli en estado transitorio y en la segunda se modela la cantidad de masa del soluto en cada tanque de un arreglo de tanques en estado estacionario.

Palabras clave—Bernoulli, Concentración, Estacionario, Flujo Volumétrico, Tanques.

II-A. Identificación y clasificación de variables

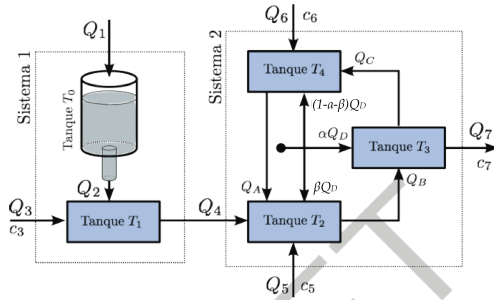


Figura 8: Diagrama de tanques.

Tabla II

Clasificación de variables	
Tipo	Variable
Dependiente	Caudal
Independientes	Tiempo
Parámetro	Densidad, Presión, Gravedad, Flujo volumétrico, Área de la sección transversal (A), Área del agujero de descarga (a)
Despreciadas	Viscosidad, Tensión superficial, Volatilidad, Temperatura, Nivel del reactivo, Geometría del agujero, Orientación del agujero, Rugosidad de las paredes del recipiente

II-A1. Vaciado de tanque:

II-B. Principios de conservación

- Principio de conservación del momentum
- Principio de conservación de masas

II-C. Modelo Matemático

Para el modelo matemático se dividió el sistema en dos partes:

II-C1. Vaciado de tanque: Tomando el principio de conservación del momentum en coordenadas de línea de corriente:

$$\frac{\partial(\rho v_s)}{\partial t} + v_s \frac{\partial \rho v_s}{\partial s} = -\frac{\partial p}{\partial s} + G \quad (9)$$

Como sobre la línea de corriente se busca mantener los niveles de energía constantes, de tal forma que G será una fuerza conservativa y se expresa

como el gradiente de un potencial u y para el caso del tanque cero, u es un potencial gravitacional y por tanto :

$$G = -\nabla u = -\nabla \rho g z = -\frac{\partial \rho g z}{\partial s}$$

Se considera una gravedad constante ya que la variación en la altura del tanque no es lo suficientemente relevante como para generar cambios en la gravedad. Además, la densidad (ρ) también se considera constante.

Utilizando la siguiente propiedad de las derivadas, se busca simplificar el modelo de la ecuación 9.

$$v_s \frac{\partial v_s}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{v_s^2}{2} \right)$$

Aplicando todo lo anterior la ecuación 9, queda así:

$$\rho \frac{\partial v_s}{\partial t} + \rho \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{v_s^2}{2} \right) = -\frac{\partial p}{\partial s} - \rho g \frac{\partial z}{\partial s}$$

$$\frac{\partial v_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{v_s^2}{2} \right) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial s} + g \frac{\partial z}{\partial s} = 0$$

$$\frac{\partial v_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{v_s^2}{2} + \frac{p}{\rho} + g z \right) = 0 \quad (10)$$

Finalmente, evaluando la integral con respecto a s en la ecuación 10 se obtiene la expresión base de la ecuación de Bernoulli en estado transitorio (ecuación 11)

$$\int_1^2 \frac{\partial v_s}{\partial t} ds + \int_1^2 \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{v_s^2}{2} + \frac{p}{\rho} + g z \right) ds = 0$$

$$\frac{\partial v_s}{\partial t} \int_1^2 ds + \left[\frac{v_s^2}{2} + \frac{p}{\rho} + g z \right]_1^2 = 0 \quad (11)$$

Luego, se implementan las condiciones del tanque en los puntos 1 y 2, con 1 ubicado en la superficie del nivel del fluido y 2 en la parte inferior del tanque donde se encuentra el orificio de salida. Lo anterior implica:

$$z_1 = h, \quad z_2 = 0, \quad p_1 = p_2 = P_{atm}$$

Evaluando las condiciones anteriores en la ecuación 11 se tiene:

$$-\frac{\partial v_1}{\partial t} h + \frac{v_2^2}{2} - \frac{v_1^2}{2} - g h = 0$$

$$v_2 = \sqrt{v_1^2 - 2h \left(g + \frac{dv_1}{dt} \right)} \quad (12)$$

Ahora, utilizando el principio de conservación de masas (ver ecuación 18) y la ecuación que define el caudal de un fluido en el punto 2 (ver ecuación 14), [2] se busca obtener la expresión para modelar el volumen del tanque a lo largo del tiempo.

$$\rho Q_1 - \rho Q_2 = \rho \frac{d Vol}{dt} \quad (13)$$

$$Q_2 = a v_2 \quad (14)$$

con a siendo el área transversal del orificio por donde sale el fluido del tanque. Utilizando las expresiones anteriores junto con la ecuación 11 se obtiene:

$$Q_1 = a \sqrt{v_1^2 - 2h \left(g + \frac{dv_1}{dt} \right)} \quad (15)$$

Finalmente, se busca que la expresión quede en términos del volumen, por lo que las variables h y v_1 se reemplazan por expresiones en función del volumen. Para h se sabe que $Vol = Ah$ con A como el área transversal del tanque (Nota: el área transversal del tanque es constante) y para v_1 se sabe que el caudal en el punto 1 es el flujo volumétrico del tanque, es decir la variable que se desea modelar, de modo que $\frac{dVol}{dt} = v_1 A$. De estas afirmaciones se tienen

$$h = \frac{Vol}{A} \quad (16)$$

$$v_1 = \frac{d Vol}{dt} \frac{1}{A} \quad (17)$$

Reemplazando las ecuaciones 16 y 17 en la expresión 15 queda:

$$Q_1 - \frac{d Vol}{dt} = a \sqrt{\left(\frac{d Vol}{dt} \frac{1}{A} \right)^2 - 2 \frac{Vol}{A} \left(g + \frac{d}{dt} \left(\frac{d Vol}{dt} \frac{1}{A} \right) \right)}$$

Luego de organizar la expresión anterior se obtiene una ecuación diferencial de segundo orden, no-lineal y no homogénea.

$$2Vol \left(\frac{a}{A} \right)^2 \frac{d^2 Vol}{dt^2} - \left(1 - \left(\frac{a}{A} \right)^2 \right) \left(\frac{d Vol}{dt} \right)^2 + 2Q_1 \frac{d Vol}{dt} + 2 \frac{2a^2}{A} g Vol + Q_1^2 = 0$$

Para resolver el sistema se plantea un sistema de ecuaciones de 2x2 de la forma:

$$\begin{aligned} \frac{d Vol}{dt} &= Q_x \\ \frac{d Q_x}{dt} &= \frac{1}{2Vol} \left(\left(\frac{A}{a} \right)^2 - 1 \right) \left(\frac{d Vol}{dt} \right)^2 - \frac{Q_1}{Vol} \left(\frac{A}{a} \right)^2 \frac{d Vol}{dt} + \left(\frac{A}{a} \right)^2 \frac{(Q_1)^2}{2Vol} + Ag \end{aligned}$$

Luego de resolver el sistema, nos remitimos a la ecuación 18, donde se calcula el flujo de salida del sistema Q_2 así:

$$Q_2 = Q_1 - Q_x \quad (18)$$

II-C2. Flujo entre compartimientos: La siguiente parte del modelo esta compuesto por compartimientos interconectados y por lo tanto se establecen relaciones entre lo que sale y entra de cada tanque; "Lo que sale de un tanque es igual a la entrada de otro", por ejemplo. Esto permite obtener un sistema de ecuaciones diferenciales con una cantidad proporcional de ecuaciones al numero de compartimientos. Al solucionar este sistema sabremos como es el comportamiento del sistema y de cada compartimiento.

En este caso se asumen unas ciertas consideraciones para obtener modelos simples que puedan ser solucionados. Estas consideraciones son:

- Mezclado perfecto en el compartimiento, es decir, su contenido es uniforme en todo momento debido a que lo que entra tiene un mezclado instantáneo.
- Cada compartimiento tiene un numero definido de entradas y salidas. Es decir no existen fugas de su contenido.
- El material transportado debe obedecer la ley de conservación de masa, es decir, las cosas no se pueden desaparecer.

Para el planteamiento de las ecuaciones de estos tanques se parte de que la masa del material que entra por unidad de tiempo es igual al volumen que entra por unidad de tiempo multiplicado por la concentración de masa en ese volumen.[3] La misma lógica es utilizada para salida de material, obteniendo:

$$\dot{m}_{in} = \dot{v}_{in} c_{in} \quad (19)$$

$$\dot{m}_{out} = \dot{v}_{out} c_{out} \quad (20)$$

Pero considerando mezclado perfecto dentro del compartimiento tenemos que la concentración en el recipiente y por tanto la concentración de salida

c_{out} es igual a la masa en el recipiente dividida por el volumen del recipiente:

$$c_{out} = \frac{m_r}{V_r} \quad (21)$$

Por otro lado el cambio de la masa de material en el recipiente viene dado por la diferencia entre la taza con que entra material y la taza con la que sale.

$$\dot{m} = \dot{m}_{in} - \dot{m}_{out} \quad (22)$$

Realizando este procedimiento para cada uno de los tanques de la figura 14 llegamos al siguiente sistema:

$$\frac{dx_1}{dt} = Q_3 c_3 - \frac{Q_4}{V} x_1 \quad (23)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = Q_5 c_5 + \frac{Q_4}{V} x_1 + \frac{Q_A}{V} x_4 \quad (24)$$

$$\frac{dx_3}{dt} = \frac{Q_B}{V} x_2 - 2 \frac{Q_C}{V} x_3 \quad (25)$$

$$\frac{dx_4}{dt} = Q_6 c_6 + \frac{Q_C}{V} x_3 - \frac{Q_A}{V} x_4 \quad (26)$$

Notese que Q_i representa caudal, esto es flujo volumétrico que entra (\dot{v}_{in}) o sale (\dot{v}_{out}) de los tanques. Para el caso de la ecuación 25 se asumió que las dos salidas del tanque tienen igual flujo, esto es $Q_C = Q_7$. Por ultimo mediante la consideración de estado estacionario podemos hallar las expresiones de los flujos Q_A , Q_B y Q_C en función de los flujos de entrada. Para esto igualamos las entradas y salidas de cada tanque.

Para el tanque 1:

$$Q_4 = Q_2 + Q_3$$

Para el tanque 2:

$$Q_B = Q_4 + Q_5 + Q_A + \beta Q_D$$

Para el tanque 3:

$$Q_C = Q_B + \alpha Q_D - Q_7$$

Para el tanque 4:

$$Q_A = Q_6 + (1 - \alpha - \beta) Q_D + Q_C$$

Reorganizando estas ecuaciones podemos llegar al siguiente sistema:

$$Q_B - Q_A = Q_4 + Q_5 + \beta Q_D \quad (27)$$

$$2Q_C - Q_D = \alpha Q_D \quad (28)$$

$$Q_A - Q_C = Q_6 + (1 - \alpha - \beta) Q_D \quad (29)$$

Resolviendo este sistema obtenemos:

$$Q_A = Q_4 + Q_5 + 2Q_6 + (2 - \alpha - \beta) Q_D \quad (30)$$

$$Q_B = 2Q_4 + 2Q_5 + 2Q_6 + (2 - \alpha) Q_D \quad (31)$$

$$Q_C = Q_4 + Q_5 + Q_6 + Q_D \quad (32)$$

II-D. Implementación y desarrollo

II-D1. Parametrización del modelo para evaluar el desempeño del tanque: Para realizar esto se realizo el análisis de estabilidad después de un tiempo t infinito, por lo tanto se llega a la siguiente ecuación:

$$V_{estable} = \frac{((\frac{A}{a})^2 (Q_1)^2)}{-2Ag}$$

Siendo A el área del tanque y a el área del agujero, de esta manera se puede evaluar cual es el volumen final del tanque, y al requerimiento de la situación (El volumen del tanque) se decide si con este flujo, se va a llenar, vaciar o rebosar.

Con el objetivo de desarrollo del modelo para realizar diseños se desea que este valor estable no supere un 10% del valor de volumen inicial del tanque.

II-D2. Diseño inicial sin variación de parámetros: Lo primero a definir son las unidades con las que se va a trabajar que en nuestro caso son kg para la masa de solvente, m^2 para las áreas transversales del tanque de vaciado y del orificio, Los caudales de entrada se encuentran en L/s .

De esta manera el primer diseño propuesto tiene los siguientes valores:

- $V_{inicial \text{ del tanque de vaciado}} = 70L$
- $A = 7.068 \text{ m}^2$ que son 0.75 m de radio.
- $a = 0.02 \text{ m}^2$ que son 0.08 m de radio.
- $Q_1 = 0.3 \text{ L/s}$
- $Q_3 = 2.7 \text{ L/s}$
- $Q_5 = 1.5 \text{ L/s}$
- $Q_6 = 1.4 \text{ L/s}$
- $c_3 = 0.25 \text{ kg/L}$
- $c_5 = 0.15 \text{ kg/L}$
- $c_6 = 0.14 \text{ kg/L}$
- $\alpha = 0,4$
- $\beta = 0,2$
- $Q_d = 3 \text{ L/s}$

Con estos valores obtenemos un modelo que muestra el Volumen, cantidad de soluto en cada uno de los tanques y la concentración de salida (c_7). Se decide observar el primer minuto y se anexa el valor de estabilidad del volumen.

Los resultados con estos valores son:

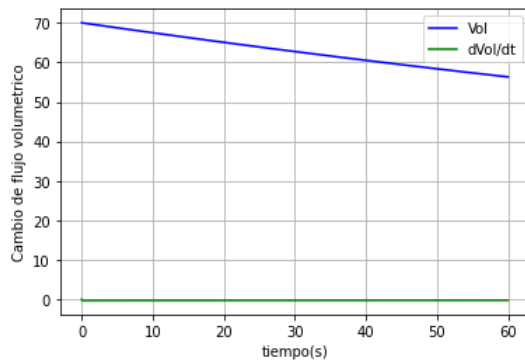


Figura 9: Volumen del tanque en el primer caso

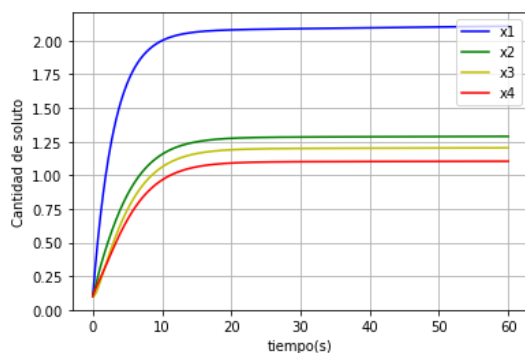
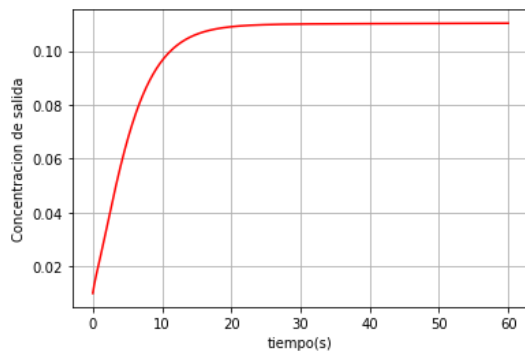


Figura 10: Cantidad de soluto en cada uno de los tanques

Figura 11: Concentración de salida(c_7)

En las figuras anteriores no se observa la estabilización del tanque T_0 este se encuentra en el valor aproximado de 20, pero debido a que el orificio de salida es mucho mas pequeño el tiempo que tarda en llegar al equilibrio es mayor a 1 minuto.

Otro dato interesante a mencionar es la concentración en x_1 que es mucho mayor que en los tanques del segundo sistema puesto estos están diluidos por el flujo Q_D .

II-E. Resultados

II-E1. Diseño y variación de parámetros:

- Analizando el Volumen de estabilidad(formula presentada anteriormente) observamos que a medida que la relación $\frac{A}{a}$ es mayor el volumen de estabilidad es mayor, igualmente dado por el caudal de entrada.
- El caudal de entrada al modelo de tanque de vaciado diluye la concentración en todo el sistema.
- Q_3 es un flujo que tiene una concentración c_3 esta afecta directamente todo el sistema.
- Todo el sistema 2 esta interconectado esto hace que Q_5 , c_5 , Q_6 , c afecten a todo el sistema 2.
- Alpha y Beta determinan la relación entre las concentraciones de los tanques pues determinan que tanque se diluye más aunque estén interrelacionados, por la salida del sistema existe una diferencia entre los tanques.
- A un mayor alpha se observa que la concentración en la salida menor que no se refleja en todo el sistema, pues este tanque también esta directamente afectado por la salida, debido a que tanto el flujo Q_C como Q_7 son iguales.
- En el caso de desear un proceso de dilución de la concentración de entrada se propone un valor de alpha mayor a 0.5 donde incluso a flujos c_5 y c_6 comparables al c_3 , se obtiene una difusión deseable a la salida. Se propone ademas un valor de Q_D mayor

Después de varias iteraciones se presenta una propuesta de diseño con estas consideraciones en cuenta:

- $V_{inicial\ del\ tanque\ de\ vaciado} = 2,7L$
- $A=0.8\ m^2$
- $a=0.02\ m^2$
- $Q_1= 0.8\ L/s$
- $Q_3= 1.4\ L/s$
- $Q_5= 1.2\ L/s$
- $Q_6= 2\ L/s$
- $c_3= 0.47\ kg/L$
- $c_5= 0.4\ kg/L$
- $c_6= 0.4\ kg/L$
- $\alpha = 0,8$
- $\beta = 0,1$
- $Q_d = 7\ L/s$

Los resultados para este caso son:

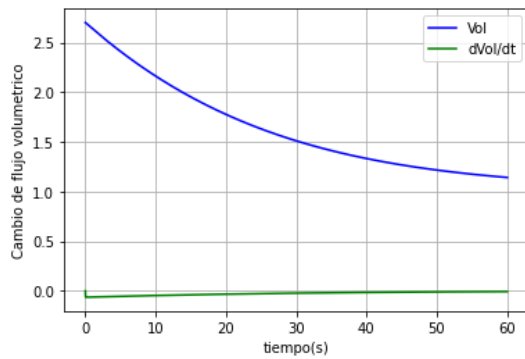


Figura 12: Volumen del tanque en el segundo caso

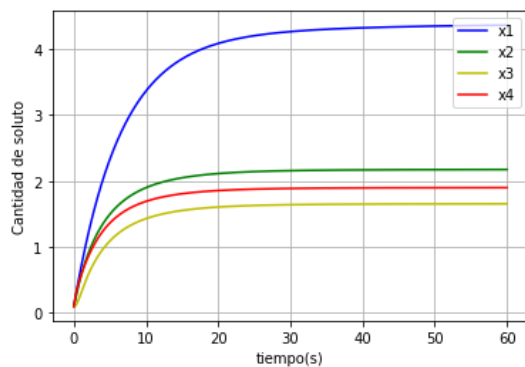
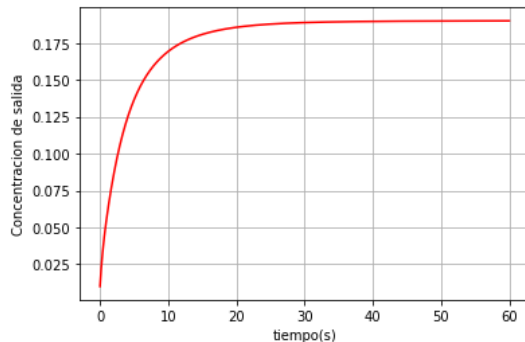


Figura 13: Cantidad de soluto en cada uno de los tanques en propuesta de diseño

Figura 14: Concentración de salida(c_7) en propuesta de diseño

II-F. Conclusiones

- La consideración de un sistema estacionario para el sistema 2, si bien facilita el modelo matemático y su solución numérica, presentan una limitante ya que no permite analizar llenado y vaciado de estos tanques.
- Este arreglo de tanques, siempre que tenga al menos una concentración de entrada y llegar al equilibrio, permite garantizar una concentración de soluto constante en el flujo

de salida del sistema. En el caso de no tener concentraciones de entrada se tiene el caso de una limpieza de los tanques al llegar a estabilidad.

- Mediante la expresión del volumen de líquido en el tanque cero al llegar a estabilidad es posible garantizar en los diseños un volumen de operación, hallar el tiempo de descarga, determinar si ocurrirá o no desbordamiento y en que tiempo.

III. CASO 3: MECANISMO DE OXIDACIÓN DE HIDRÓGENO

Resumen—En esta sección se presenta la elaboración del modelo matemático de 6 reacciones químicas reversibles para observar el comportamiento de las concentraciones de los compuestos al transcurrir el tiempo y para dos casos diferentes, el primero con una temperatura constante y el segundo con una variable que depende de la concentración de uno de los compuestos.

Palabras clave—Combustión, Ley de acción de masas, Modelo compartimental, Reacciones reversibles.

III-A. Identificación y clasificación de variables

Tabla III

Clasificación de variables	
Tipo	Variable
Dependiente	Fración molar
Independientes	Tiempo
Parámetro	Constantes de reacción, Energía de activación, Constante de los gases, Presión
Despreciadas	Tipo de reactor, transferencia de calor, Nivel de mezclado, Entalpía de reacción.

III-B. Principios de conservación

El modelo se encuentra basado en la ley de acción de masas y siendo similar a un modelo de compartimientos esta basado en un principio de conservación de masa. Por lo tanto:

- Principios de conservación de masa.
- Ley de acción de masas.

III-C. Modelo matemático

Se plantearon las siguientes ecuaciones para el modelo:

$$\begin{aligned} \frac{dx_0}{dt} = & -K_{f1}x_0x_1 + K_{r1}x_2x_3 + K_{f2}x_2x_4 \\ & -K_{r2}x_0x_3 + K_{f3}x_3x_4 - K_{r3}x_0x_5 \\ & -K_{f5}x_6x_0 + K_{r5}x_4x_1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} = & -K_{f1}x_0x_1 + K_{r1}x_2x_3 + K_{f5}x_6x_0 \\ & -K_{r5}x_4x_1 + K_{f6}x_6x_2 - K_{r6}x_3x_1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{dx_2}{dt} = & K_{f1}x_0x_1 - K_{r1}x_2x_3 - K_{f2}x_2x_4 \\ & + K_{r2}x_0x_3 - K_{f4}x_2x_5 + K_{r4}x_3^2 \\ & - K_{f6}x_6x_2 + K_{r6}x_3x_1\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{dx_3}{dt} = & K_{f1}x_0x_1 - K_{r1}x_2x_3 + K_{f2}x_2x_4 \\ & - K_{r2}x_0x_3 - K_{f3}x_3x_4 + K_{r3}x_0x_5 \\ & + 2K_{f4}x_2x_5 - 2K_{r4}x_3^2 + K_{f6}x_6x_2 \\ & - K_{r6}x_3x_1\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{dx_4}{dt} = & -K_{f2}x_2x_4 + K_{r2}x_0x_3 - K_{f3}x_3x_4 \\ & + K_{r3}x_0x_5 + K_{f5}x_6x_0 - K_{r5}x_4x_1\end{aligned}$$

$$\frac{dx_5}{dt} = K_{f3}x_3x_4 - K_{r3}x_0x_5 - K_{f4}x_2x_5 + K_{r4}x_3^2$$

$$\begin{aligned}\frac{dx_6}{dt} = & K_{f5}x_6x_0 + K_{r5}x_4x_1 - K_{f6}x_6x_2 \\ & + K_{r6}x_3x_1\end{aligned}$$

Donde k es modelado como:

$$k(t) = AT^b \exp\left(\frac{-E}{R_u T}\right)$$

Y representa la constante de velocidad, que es proporcional a la velocidad de la reacción.

III-D. Implementación y desarrollo

La implementación se realizó con Python, con el software de desarrollo Spyder, se utiliza un algoritmo de Runge Kutta de 4 grado y se modelan las ecuaciones.

Se utiliza un $R=0.08205746 \frac{\text{atm} \cdot \text{L}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$ a una presión de 1.2 atm. Con los valores iniciales entregados se calculan las respectivas fracciones molares, y se procede a calcular las concentraciones de los reactivos iniciales con la formula entregada a saber:

$$x_i = \frac{\bar{x}_i P_{mezcla}}{R_u T}$$

Los valores iniciales en $\frac{\text{mol}}{\text{cm}^3}$ son:

- $x_{O_2} = 2,81229 * 10^{-6} \frac{\text{mol}}{\text{cm}^3}$
- $x_{H_2} = 9,37429 * 10^{-6} \frac{\text{mol}}{\text{cm}^3}$

III-E. Resultados

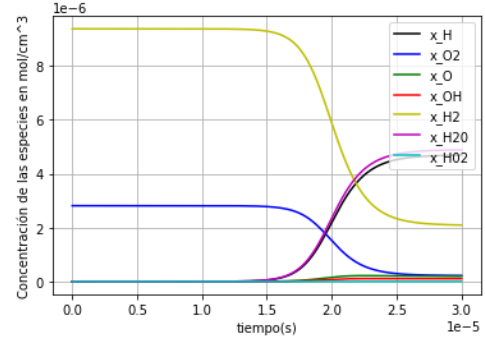


Figura 15: Concentración de cada especie a través del tiempo[Autoría propia]

III-E1. Resultados a temperatura constante:

Como se observa en la Figura 15, todos los componentes llegan a el equilibrio en un tiempo alrededor de $30\mu s$ y los valores en el punto de equilibrio son:

- $x_H = 4,68761 * 10^{-6} \frac{\text{mol}}{\text{cm}^3}$
- $x_{O_2} = 2,21885 * 10^{-7} \frac{\text{mol}}{\text{cm}^3}$
- $x_O = 1,94377 * 10^{-7} \frac{\text{mol}}{\text{cm}^3}$
- $x_{OH} = 1,04441 * 10^{-7} \frac{\text{mol}}{\text{cm}^3}$
- $x_{H_2} = 2,09628 * 10^{-6} \frac{\text{mol}}{\text{cm}^3}$
- $x_{H_2O} = 4,88199 * 10^{-6} \frac{\text{mol}}{\text{cm}^3}$
- $x_{HO_2} = 2,48304 * 10^{-17} \frac{\text{mol}}{\text{cm}^3}$

Se observa que se mantiene un cambio pequeño hasta los $15\mu s$ donde empieza a reaccionar a una velocidad mucho mas acelerada hasta alrededor de los $25\mu s$.

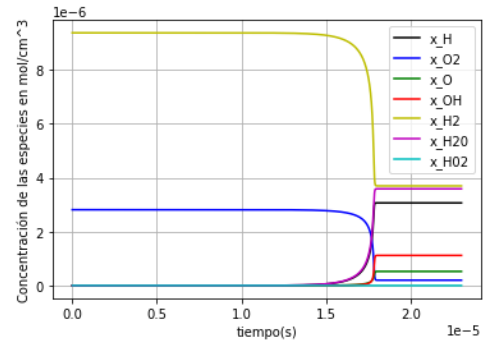


Figura 16: Concentración de cada especie a través del tiempo a temperatura no constante[Autoría propia]

III-E2. Resultados a temperatura no constante:

En la Figura 16, se observa que se llega al equilibrio en $18\mu s$, pero esta vez el comportamiento es mucho mas violento, una primera aproximación a explicar este comportamiento es debido a que como la temperatura sube aumenta exponencialmente la rapidez de la reacción, una prueba matemática debe ser realizada para verificar esto.

Observamos que a temperatura esta relacionada directamente con los coeficientes de velocidad de reacción(k), dado por la formula vista anteriormente un aumento en la temperatura aumenta el valor que esta a un exponente y en general se hace este mucho mayor.

III-F. Conclusiones

- Se observa que el modelo no es ideal para predecir la temperatura, una opción es que debido a la temperatura tan alta, el factor de flujo de temperatura con el ambiente sea importante.
- Considerar la naturaleza exotérmica de una reacción cambia los resultados de manera importante pues no solo se observa que la reacción es mucho mas rápida sino que además las concentraciones de las especies cambia, esto debido a que el efecto de la temperatura es diferente por los valores A y b que alteran la velocidad de cada reacción diferente(la temperatura no tiene el mismo efecto para todas las reacciones).
- Generalizar para todas las reacciones que la temperatura aumenta la velocidad de reacción puede ser acelerado y es necesario mirar cada caso por especifico.

REFERENCIAS

- [1] J. Fernández-Francos y M. Galdo-Vega R. Barrio-Perotti E. Blanco-Marigorta. "Theoretical and experimental analysis of the physics of water rockets". En: *IOPscience* (2010). DOI: <http://dx.doi.org/10.1088/0143-0807/31/5/015>.
- [2] Carlos Duque Daza. *Modelo para el vaciado de un recipiente*.
- [3] Carlos Duque Daza. *Modelación Basada en Ecuaciones Diferenciales Ordinarias- modelos compartimentales*.