



Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ingeniería
Departamento de Ingeniería Mecánica y Mecatrónica

Taller 01 Sem II - 2020 Modelación Matemática

MODELOS BASADOS EN ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS

Nombre estudiante	Código	Grupo

Puntos importantes:

Para el presente taller es importante que se sigan las siguientes indicaciones:

- En todos los casos de estudio, y donde corresponda, su grupo deberá presentar coherente y claramente los diferentes pasos del proceso de modelación, así como una clara argumentación de las simplificaciones o suposiciones usadas para la construcción y/o estudio de los diferentes casos y modelos.
- Debe **siempre** indicarse de forma explícita en el texto el o los **principios de conservación usados**

La calidad de la presentación de los informes escritos será especialmente considerada en la calificación. Esto incluye la calidad, resolución y claridad de los gráficos, así como de las conclusiones que se extraigan de ellos.

Los casos de estudio del presente taller, y sus respectivas ponderaciones de calificación son:

Caso de estudio	Ponderación
Sección Caso 1	30 %
Sección Caso 2	35 %
Sección Caso 3	35 %

Fecha límite de entrega virtual: Noviembre 01 de 2020 (Envío máximo hasta las 23:59 del 01/11/2020)

Entrega debe incluir:

- Carga en la plataforma virtual de un archivo, **EN FORMATO PDF**, con el documento/informe final. Este es el único archivo que deberá ser cargado por cada estudiante en el espacio suministrado para tal fin en el aula virtual. El archivo PDF debe tener los nombres de todos los miembros del grupo.
- Envío por correo electrónico de un (1) solo archivo comprimido, **EN FORMATO ZIP**, que incluya: (1) Documento de Informe Final; (2) Códigos de Implementaciones Computacionales; y (3) cualquier otro anexo que se considere pertinente.
- El nombre de los archivos **COMPRESO TIPO ZIP** deberán seguir el siguiente formato: <Apellido01>_<Apellido02>_<Apellido03>_Taller01-202002.zip, donde, por ejemplo, <Apellido01> debe ser apellido del primer miembro del grupo en orden alfabético, y así sucesivamente.
- Solo deberá enviarse un (1) archivo comprimido por grupo. Envíos adicionales simplemente NO se tendrán en cuenta y serán ignorados.

ES IMPORTANTE QUE OBSERVE ESTAS CONDICIONES DE ENTREGA. EN CASO QUE NO SE CUMPLAN, SE CONSIDERARÁ QUE EL TALLER NO SE ENTREGÓ.

Caso 1. Vuelo de un hidro cohete - 30 %

Como parte de un experimento educativo, se requiere que su equipo diseñe un cohete propulsado por agua y aire. En particular, se desea que este dispositivo tenga un alcance máximo para un lanzamiento de forma inclinada. Un modelo básico para estudiar el movimiento de un proyectil se logra con dos suposiciones fundamentales: despreciando el efecto del arrastre generado por el aire sobre el cuerpo en movimiento; y asumiendo una función constante de empuje del motor cohete. Sin embargo, los resultados ofrecidos por este modelo simplificado pueden distar mucho de las observaciones experimentales.

El principal problema a resolver cuando se desea mejorar la precisión de un modelo de lanzamiento balístico consiste en determinar de manera precisa la función el empuje, considerando a su vez el arrastre como función de la densidad variable del aire y la masa del cohete en función de la despresurización de la cámara del "motor cohete" (Ver Barrio-Perotti, Blanco-Marigorta, Fernández-Francos y Galdo-Vega 2010; Tomita, Watanabe y Nebylov 2007).

Se desea mejorar la exactitud de dicho modelo, de manera que las estimaciones de alcance horizontal del proyectil tengan una menor incertidumbre, integrando las consideraciones indicadas anteriormente. Para el presente caso de estudio asuma que:

- El aire dentro del cohete se comporta como gas ideal.
- El aire se expande de forma isotérmica durante el proceso de propulsión. (El proceso de propulsión existe mientras haya agua dentro del cohete).
- El volumen total del cohete (aire + agua) es de 2 lts.
- La presión dentro del cohete no podrá sobrepasar un valor de 4 atm.
- La masa del cohete vacío es de 85 gr.
- La fuerza de arrastre se debe considerar proporcional a la velocidad relativa entre el cohete y el aire que lo rodea. (La densidad del aire varía en función de la altura sobre el nivel del mar.)

Cualquier suposición adicional que su grupo considere necesaria debe ser claramente justificada y soportada.

Que se debe entregar?

Dadas las consideraciones anteriores su grupo debe:

- Construir un modelo matemático con el objetivo de encontrar la mejor relación de volúmenes de agua y aire, que permita lograr el alcance horizontal máximo del cohete analizado.
- Implementar el(los) modelo(s) computacional(es) para el caso planteado. El modelo computacional debe servir como herramienta de diseño del sistema completo.
- Hacer el análisis completo de la operación de tal dispositivo (realizar simulaciones, variación de parámetros, etc.)
- Usar su implementación computacional para sugerir diseños y sacar conclusiones acerca de la respuesta dinámica del dispositivo en cuestión.
- Presentar curvas de operación del sistema, bien sea del tipo de perfil temporal, o del tipo retrato de fase.

Caso 2. Sistema de tanques interconectados - 35 %

Arreglos de tanques interconectados son constantemente encontrados en aplicaciones de ingeniería, particularmente en plantas piloto químicas, así como en aplicaciones industriales de mezclado. Diferentes tipos de industrias recurren a arreglos de tanques para el control de flujos o de concentraciones de mezclado, así como para procesos de dosificación.

Uno de tales arreglos es mostrado en la Figura 1. Este sistema de tanques se está evaluando como sistema de mezclado variable de un solvente (por ejemplo, agua), con un reactivo x . En este sistema de tanques el denominado Tanque T_0 suministra un flujo variable de solvente al tanque T_1 , cuyo contenido está totalmente limpio (es decir con concentración nula), mientras que en los tanques T_1 , T_2 y T_4 se adiciona el reactivo x , con concentraciones c_3 , c_5 , y c_6 , respectivamente. Un flujo Q_D de solvente puro es es ingresado al sistema y distribuido entre los tanques T_2 , T_3 y T_4 , como se indica en la figura. La mezcla de reactivo es finalmente entregada por el sistema a través de Q_7

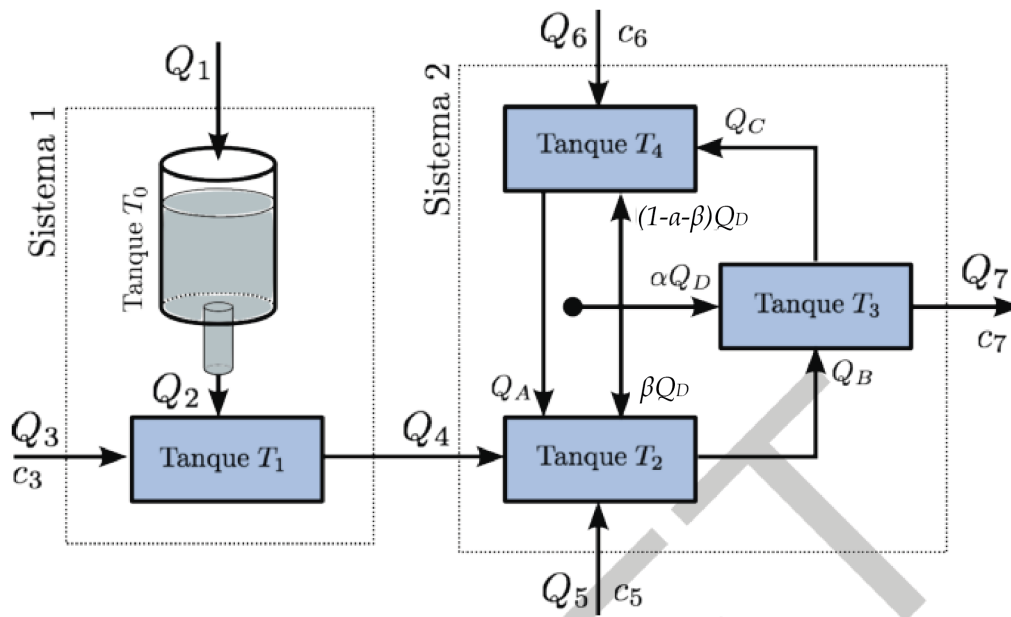


Figura 1: Esquema de un sistema de dosificación y mezclado

Que se debe entregar?

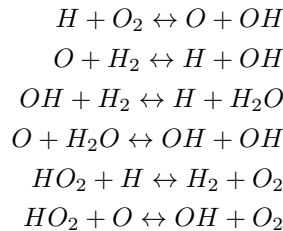
Dadas las consideraciones anteriores su grupo debe:

- Construir los modelos matemáticos para simular los flujos volumétricos (Caudales) y la evolución de la concentración de x en cada uno de los tanques y a la descarga del sistema (c_7). El modelo del tanque T_0 debe incluir consideraciones de movimiento de la superficie libre.
- Parametrizar el modelo de manera que permita diseñar el Tanque T_0 , esto es: Debe permitir evaluar condiciones de desempeño del tanque (rebosamiento, vaciado total ,etc), de acuerdo con dimensiones de la sección transversal del tanque y el agujero de descarga.
- Hacer la implementación computacional de los modelos anteriores, y realizar validación El modelo computacional debe servir como herramienta de diseño del sistema completo.
- Usar su implementación computacional para sugerir diseños y sacar conclusiones acerca de la respuesta dinámica del dispositivo en cuestión.
- Hacer el análisis completo de la operación de tal dispositivo (realizar simulaciones, variación de parámetros, etc), usando las consideraciones de operación dadas, y los coeficientes indicados. En caso de requerirlo, su grupo puede adoptar decisiones respecto al valor de alguna variable, siempre y cuando sean justificadas
- Presentar curvas de operación del sistema, bien sea del tipo de perfil temporal, o del tipo retrato de fase.

Cualquier suposición adicional que su grupo considere necesaria debe ser claramente justificada y soportada en el documento final. Se sugiere usar como material de apoyo la información presentada en Libii y Faseyitan 1997; Libii 2003, o cualquier otra bibliografía especializada.

Caso 3. Mecanismo de Oxidación de Hidrógeno - 35 %

Una de las reacciones químicas más importantes en ingeniería es la reacción de la combustión, la cual consiste en una reacción química exotérmica de una mezcla entre combustible y Oxígeno. Esta reacción es utilizada en los motores de combustión interna para transformar la energía térmica en trabajo mecánico. Los combustibles más utilizados están basados en compuestos de hidrocarburos, sin embargo, para comenzar a estudiar el proceso de oxidación de cierta especie, se propone el siguiente mecanismo reducido de oxidación del Hidrógeno, con apenas 6 reacciones elementales.



Suponga que inicialmente usted tiene una mezcla de combustible (H_2) y oxígeno (O_2) completamente mezclados en un reactor a una temperatura (T) de 1200 K y una presión (P_{mezcla}) de 1.2 atm, y que todas las reacciones de este mecanismo se llevan a cabo a una temperatura y presión constantes. Se sabe que inicialmente se tiene 1 mol de Hidrógeno y 0.3 moles de Oxígeno. Las concentraciones iniciales (x_i) de estas especies se pueden calcular con la siguiente expresión:

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

Donde \bar{x}_i es la fracción molar de la i -ésima especie. Por otro lado, suponga que las velocidades de reacción cambian en función de la temperatura con la forma matemática de Arrhenius, así:

$$k(T) = AT^b e^{\frac{-E_a}{R_u T}}$$

En las siguientes tablas se le proporcionan los tres parámetros de ajuste (A, b, E_a) para cada velocidad de reacción. No olvide realizar las conversiones necesarias, para que todas sus ecuaciones resulten con unidades unificadas.

$A(cm^3/mol.s)$	b	$E_A(Cal/mol)$
1.915E+14	0.00	1.644E+04
5.080E+04	2.67	6.292E+03
2.160E+08	1.51	3.430E+03
2.970E+06	2.02	1.340E+04
1.660E+13	0.00	8.230E+02
3.250E+13	0.00	0.000E+00

Tabla 1: Parámetros para la velocidad de reacción hacia adelante.

$A(cm^3/mol.s)$	b	$E_A(Cal/mol)$
5.481E+11	0.39	-2.930E+02
2.667E+04	2.65	4.880E+03
2.298E+09	1.40	1.832E+04
1.465E+05	2.11	-2.904E+03
3.164E+12	0.35	5.551E+04
3.252E+12	0.33	5.328E+04

Tabla 2: Parámetros para la velocidad de reacción hacia atrás.

Experimentalmente su reactor químico alcanza una temperatura de 3000 K al terminar la reacción (equilibrio químico), por lo tanto usted decide incluir en su modelo una ecuación que mida la tasa de variación de temperatura en el tiempo. Se sabe que su combustible es el Hidrógeno (H_2), por lo tanto el incremento de temperatura en su reactor debe ser proporcional a la tasa con la cual su combustible se destruye. Basado en esta suposición usted llega a la siguiente ecuación:

$$\frac{dT}{dt} = - \left(\frac{1}{x_{H_2}} \right) \frac{dx_{H_2}}{dt} T$$

Donde x_{H_2} representa la concentración de Hidrógeno. Incluya la anterior ecuación a su modelo matemático y suponiendo que la temperatura del reactor es igual a la temperatura de su mezcla, haga una nueva estimación de las concentraciones de las especies y calcule la temperatura en función del tiempo.

¿Qué se debe entregar?

Dadas las consideraciones anteriores su grupo debe:

- Construir un modelo matemático que permita calcular las concentraciones en función del tiempo, de las 7 especies presentadas en este mecanismo como función de las velocidades de reacción ($k(T)$), teniendo en cuenta que cada reacción ocurre de manera simultánea hacia adelante y hacia atrás.
- Obtenga las concentraciones de cada especie en equilibrio, suponiendo que la temperatura en su reactor constante. Presente gráficas de las concentraciones de cada especie en función del tiempo.
- ¿En qué intervalo de tiempo se presenta una considerable formación y destrucción de especies?
- Incluya en su modelo matemático la ecuación diferencial para la temperatura. Presente gráficas de las concentraciones de cada especie en función del tiempo.
- ¿Nota alguna diferencia en sus resultados al haber considerado cambio en la temperatura?
- Teniendo en cuenta la temperatura real final de su reactor, ¿Qué tan acertada considera su expresión matemática para la temperatura?. ¿Tiene otras consideraciones a tener en cuenta para que su ecuación de la temperatura sea más congruente con la realidad?, coméntelas.

Referencias

- [1] R. Barrio-Perotti, E. Blanco-Marigorta, J. Fernández-Francos y M. Galdo-Vega, «Theoretical and experimental analysis of the physics of water rockets,» *European journal of physics*, vol. 31, n.º 5, pág. 1131, 2010.
- [2] J. N. Libii, «Mechanics of the slow draining of a large tank under gravity,» *American Journal of Physics*, vol. 71, n.º 11, págs. 1204-1207, 2003.
- [3] J. N. Libii y S. O. Faseyitan, «'Data acquisition systems in the fluid mechanics laboratory: Draining of a tank,» En *Proceedings of the National Conference and Exposition of the American Society for Engineering Education (ASEE)*, 1997.
- [4] N. Tomita, R. Watanabe y A. V. Nebylov, «Hands-on education system using water rocket,» *Acta Astronautica*, vol. 61, n.º 11, págs. 1116-1120, 2007.