Ejercitación 2do cuatrimestre - 2023

1) Encuentre la raíz de la siguiente ecuación no lineal. Para eso:

a) Realizar dos iteraciones con algún método acotado.

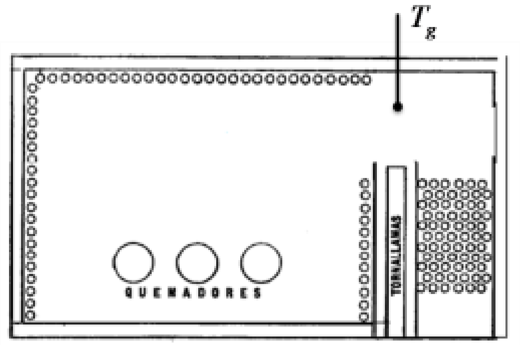
b) Con el mejor valor obtenido en a) como valor de arranque, usar un método abierto para obtener un error relativo no porcentual menor a 1×10^{-4}

$$F(x) = \ln(x) + e^{2x}$$

---

2) Para representar el comportamiento de un horno como el de la figura, se utiliza la ecuación de Lovo y Evans que aparece a continuación.

$$\frac{Q_R}{\alpha A_{cp} \mathcal{F}} = 0.173 \left(\left(\frac{T_g + 459.67}{100} \right)^4 - \left(\frac{T_s + 459.67}{100} \right)^4 \right) + 7(T_g - T_s)$$



El sensor de temperatura ubicado a la salida de la zona radiante indica Tg=1700 ºF y según el balance de energía correspondiente el calor intercambiado en esta sección es de QR=36.400.000 BTU/h. Además, según la geometría del horno el plano frio equivalente es aAcp=1500 pie2 y el factor de visión F=0.635.

Encontrar la temperatura de pared de los tubos (Ts) para ese caso.

---

3) A partir de la ecuación de Colebrook-White

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -2 \log_{10} \left(\frac{k/D}{3.7} + \frac{2.51}{Re\sqrt{f}} \right)$$

a) Calcular el factor de fricción f para una rugosidad relativa de k/D=0.005 y numero de Reynolds de Re=20000.

Ayuda: Como punto inicial podemos tomar el valor que nos brinda la ecuación de Barr:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -2\log_{10}\left(\frac{k/D}{3.7} + \frac{5.1286}{Re^{0.89}}\right)$$

b) Suponga que debe reducirse el factor de fricción al menos un 5%. ¿Qué medida tomaría? Calcule el factor de fricción para ese caso.

---

4) La ecuación de Peng-Robinson (1) suele expresarse como un polinomio de grado 3 en función del factor de compresibilidad z (2).

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a\alpha(T_r)}{\left(V^2 + 2bV - b^2\right)} \quad (1)$$

Dónde: $a = \frac{0.45724 R^2 T_c^{\,2}}{P_c}$; $b = \frac{0.07780 RT_c}{P_c}$; $\alpha(T) = \left[1 + \left(0.37464 + 1.54226\omega - 0.2699\omega^2\right)\left(1 - \sqrt{T/T_c}\right)\right]^2$

$$z^3 + (B'-1)z^2 + \left(\Theta' - 3B'^2 - 2B'\right)z + \left(B'^3 + B'^2 - \Theta' B'\right) = 0 \quad (2)$$

Dónde: $B' = \frac{bP}{RT}$; $\Theta' = \frac{a\alpha(T_r)P}{(RT)^2}$

Calcular el volumen molar del Metano a T=350 K y P=3 bar

Propiedades criticas del metano:
$T_c = 190.69900\ K;\ P_c = 46.40680\ bar;\ \omega = 0.0114984;\ R = 83.14472\frac{cm^3\,bar}{mol\,K}$

---

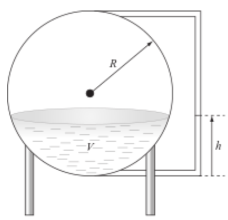
5) A partir del polinomio cubico de Peng-Robinson encontrar el volumen molar de ambas fases (líquido y vapor) para el propano saturado a 300 K. La presión de saturación corresponde a 9.98316 bar.

Propiedades criticas del propano:
$T_c = 369.89801\ K;\ P_c = 42.56660\ bar;\ \omega = 0.15240;\ R = 83.14472\frac{cm^3\,bar}{mol\,K}$

---

6) El volumen de líquido que puede almacenar un tanque esférico está dado por la siguiente expresión:

$$V = \pi h^2 \frac{(3R-h)}{3}.$$



Complete la tabla siguiente con la altura de líquido para cada volumen si se dispone de un tanque esférico con un radio de 3 m. Para cada volumen, use la gráfica de la función $V = f(h)$ como guía para encontrar un valor inicial y luego corroborar sus resultados.

Volumen (m^3)	Nivel del tanque (m)
20	
40	
60	
80	
100	
110	
130	

---

7) A partir de la ecuación ampliada de Antoine que se muestra a continuación, calcular la temperatura de saturación del metanol a 202.65 kPa.

$$\ln P_{sat} = a + \frac{b}{T+c} + d\ln T + eT^{f}$$

a = 59.8373 d = -6.37873
b = -6282.89 e = 4.61746e-6
c = 0 f = 2

P_{sat} [kPa] T [K]

---

8) Un gas que contiene 20% de CO y 80% de N_2 se quema con un exceso de 100% de aire, estando ambos reactivos, aire y gas, inicialmente a 25°C.

La temperatura de salida se puede conocer aplicando la ecuación de Kirchhoff:

$$q = \sum \Delta H_P + \sum \Delta H_{25°C} + \sum \Delta H_R$$

ΔH_P : Energía necesaria para calentar o enfriar los productos desde 25°C hasta su temperatura de salida.

$\Delta H_{25°C}$: Calor de reacción a 25°C.

ΔH_R : Energía necesaria para calentar o enfriar los reactivos desde su temperatura de entrada hasta 25°C.

q : Calor agregado/retirado.

Tomando como base un mol de CO que reacciona, la expresión de ΔH_P en cal/gmol y T [K] es:

$$\Delta H_P = 59.504T + 0.01125\,T^2 - 1.484\times10^{-6}\,T^3 - 18703$$

El proceso se considera adiabático y el calor de reacción a 25 ºC corresponde a $\Delta H_{25°C}$ = -67636 cal/gmol.

Realice el ejercicio suponiendo dos valores semilla de T, T_o=1000K y T_o=10000K.

a) Grafique la función para un intervalo de T donde puedan verse todas sus raíces reales.
b) Utilice un método numérico de resolución de ecuaciones no lineales y responda: ¿Cuál es la temperatura de salida de los gases? ¿Por qué?

Fuente: Ejemplo 20, página 370 del libro Principios de los Procesos Químicos de Hougen, Watson y Ragatz.

---

9) Se está estudiando el diseño de un reactor catalítico para la producción de Amoníaco. Éste será alimentado en proporciones estequimétricas de Nitrógeno e Hidrógeno y trabajará a 1.5 atmósferas. La constante de equilibrio Kp a las condiciones de trabajo es 0.8 atm^2.

$$N_{2(g)} + 3H_{2(g)} \overset{Cat}{\longleftrightarrow} 2NH_{3(g)}$$

Una vez alcanzado el equilibrio se cumple $\Delta G = 0$.

Aplicando el principio de Le Chatelier, en condiciones de equilibrio:

$$Kp = \frac{p_{N2}p_{H2}^3}{p_{NH3}^2} = \frac{n_{N2}n_{H2}^3}{n_{NH3}^2}\left(\frac{p_{tot}}{n_{tot}}\right)^2$$

n_{N2}, n_{H2} y n_{NH3} son los moles presentes de cada especie una vez alcanzado el equilibrio.

P_{tot} y n_{tot} son la presión y los moles totales presentes en el equilibrio.

Encontrar la conversión alcanzada en el equilibrio.

Ayuda: Para la base de 1 mol de N_2, se obtiene el siguiente balance de materia:

Especie	Inicio	Reaccionan	Equilibrio
N_2	1	-r	1-r
H_2	3	-3r	3-3r
NH_3	0	2r	0+2r
Total	4	-2r	4-2r

Recuerde que la conversión alcanzada en un determinado punto final se obtiene de la siguiente expresión:

$$X_{N_2} = \frac{n_{N_2\ inicial} - n_{N_2\ final}}{n_{N_2\ inicial}}$$

---

10) Resolver el siguiente sistema de ecuaciones utilizando el método de Newton:

$$\begin{cases} x_1^2 + x_1 x_2 = 10 \\ x_2 + 3x_1 x_2^2 = 57 \end{cases}$$

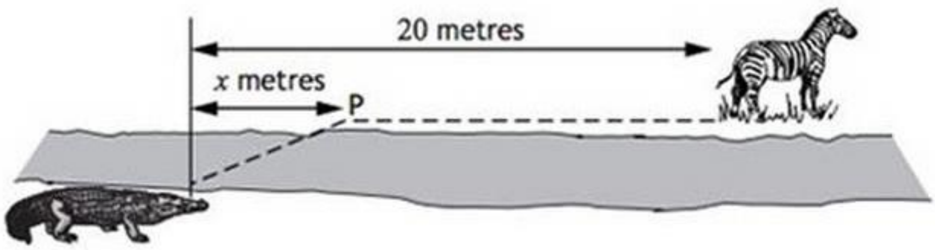
---

11) Resolver el siguiente sistema de ecuaciones utilizando el método de Newton:

$$\begin{cases} x_2 + {x_1}^2 - x_1 - 0.75 = 0 \\ x_2 + 5x_2 x_1 - {x_1}^2 = 0 \end{cases}$$

---

12) Un cocodrilo acecha a su presa situada en la otra orilla de un río. Los cocodrilos viajan a diferente velocidad en el agua que en tierra. El tiempo que tarda el cocodrilo en llegar a su presa puede reducirse si nada *x* metros corriente arriba hasta un punto P en la otra orilla como muestra el diagrama.



El tiempo que tarda (t) se mide en décimas de segundo y está dado por la fórmula:

$t(x) = 5\sqrt{36+x^2} + 4(20-x)$

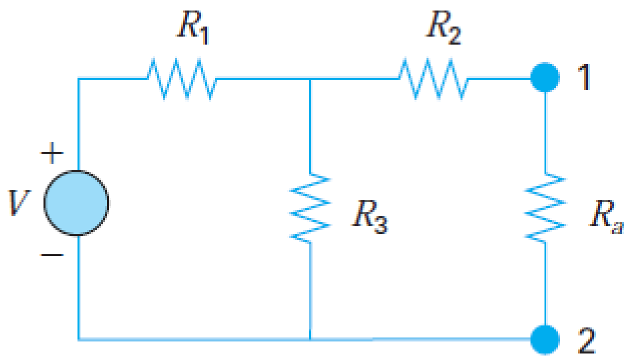
a) Calcular el tiempo transcurrido si el cocodrilo no viaja por tierra.
b) Calcular el tiempo transcurrido si el cocodrilo nada la distancia más corta posible.
c) Entre esos dos extremos, cuál es el valor de x que minimiza el tiempo transcurrido. Hallar ese valor para determinar cuál es el mínimo tiempo posible.

Fuente: Scottish Qualifications Authority (SQA) Higher Maths exam 2015: Crocodile and zebra question 'proved to be challenging'

---

13) El circuito de la figura contiene tres resistencias fijas (R_1, R_2 y R_3) y una variable (R_a).

V = 80 V; $R_1 = 8\ \Omega$; $R_2 = 12\ \Omega$; $R_3 = 10\ \Omega$



Encontrar el valor de R_a que maximiza la potencia disipada entre los terminales 1 y 2. Elegir alguno de los métodos de optimización vistos en clase para su resolución.

Ayuda: Utilizando las leyes de Kirchhoff podemos llegar a una expresión que relaciona la potencia con la resistencia R_a.

---

14) Encontrar un valor mínimo de las siguiente funciones en el intervalo propuesto:

$$f(x) = e^x - 1.5x^2 \ \ / \ x \in [1,2]$$

$$f(x) = x^3 - 3x \ / \ x \in [-3,3]$$

$$f(x) = 2x^2(x-2)(x+2) \ / \ x \in [-5,5]$$

$$f(x) = 0.1x^6 - 0.29x^5 + 2.31x^4 - 8.33x^3 + 12.89x^2 - 6.8x + 1 \ / \ x \in [-1,2]$$

---

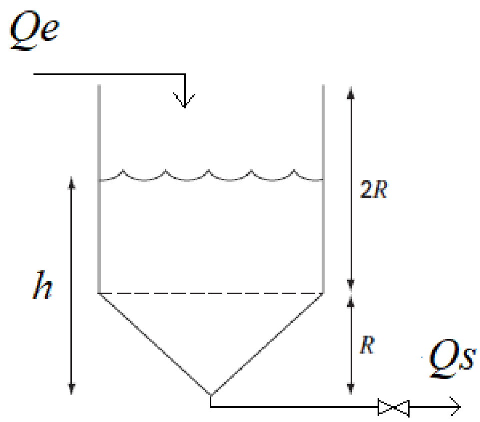
15) El costo total anual operativo de un motor en un determinado proceso es función de su tamaño. Encontrar el tamaño del motor x (Hp) que minimiza el costo total operativo C [$/año].

$$C = 500 + 0.9x + \frac{0.03}{x}150000$$

---

16) Para estudiar la dinámica de un sistema, debe realizarse un balance de materia en estado transitorio. Para el tanque de la figura se obtiene:

$$Qe\,\rho - Qs\,\rho = \rho\frac{dV}{dt}$$



ρ : Densidad del fluido.

Qe : Caudal de entrada.

Qs : Caudal de salida.

V : Volumen del fluido en el tanque.

Dividiendo ambos miembros por la densidad y considerando que

$$V = Ah$$

h : Altura del líquido. A : Área del tanque.

Reemplazando se obtiene:

$$Qe - Qs = \frac{d(Ah)}{dt}$$

El caudal de salida está dado por:

$$Qs = cv\,\sqrt{h\,g}$$

cv : Coeficiente de la válvula.

g : Constante de gravedad.

Grafique la evolución de la altura de líquido en un tanque cónico con el tiempo. Considere un tiempo final igual a 210 segundos y para el método numérico considere un Δt =1 segundo.

Datos:

Altura inicial del tanque: 4 m

Diámetro del tanque: 4 m

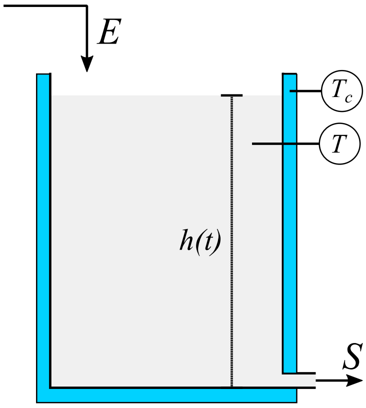
Coeficiente válvula: 0.0816 m^2

Caudal de entrada: 0.25 m^3/s

Ayuda: En un tanque de **sección no constante**, el área es función de la altura. Una vez conocida su funcionalidad, se reemplaza en la ecuación obteniendo la ecuación diferencial de interés.

---

17) Un tanque cilíndrico que cuenta con una camisa de calentamiento se comienza a alimentar con un caudal de fluido de 0.01 m^3/s. En el mismo instante se pone en funcionamiento su camisa calefactora. Encontrar cual es la temperatura de salida del fluido transcurrido 15 minutos.



Datos:

Altura inicial del tanque: 0.1 m
Diámetro del tanque: 1 m
Diámetro de orificio de salida: 0.0508 m
Densidad del fluido 1000 kg/m^3
Temperatura inicial 283.15 K
Temperatura de alimentación 283.15 K
Temperatura de la camisa 373.15 K
Calor especifico del fluido 4.2 kJ/(kg K)
Coeficiente de intercambio de calor 1 kW/(m^{2}K)

---

18) La búsqueda de línea nos permite encontrar el valor mínimo (o máximo) que toma una función sobre una dirección determinada de búsqueda. Partiendo del punto x_o y utilizando la dirección en el espacio d podemos encontrar el valor mínimo que toma la función mediante una optimización unidimensional.

Determinar ese valor mínimo de la función f en la dirección dada.

$$Min.\ f(\underline{x}) = 8x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2$$

$$\underline{x}^0 = \begin{bmatrix} -4 \\ -4 \end{bmatrix} \qquad \underline{d} = \begin{bmatrix} \cos(\pi/4) \\ sen(\pi/4) \end{bmatrix}$$

---

19) El trabajo producido por un proceso termodinámico a temperatura, presión y volumen constantes se calcula por medio de

$$W = \int p\,dV$$

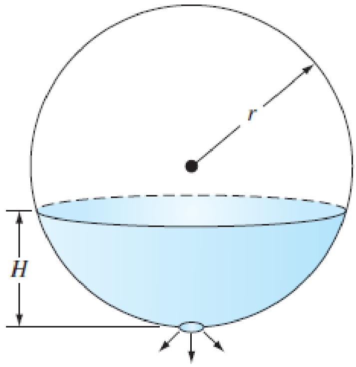
Donde W es el trabajo, p la presión, y V el volumen.
Con el empleo de la regla del trapecio, utilice los datos siguientes para calcular el trabajo en kJ:

Presión (kPa)	336	294.4	266.4	260.8	260.5	249.6	193.6	165.6
Volumen (m3)	0.5	2	3	4	6	8	10	11

---

20) Un tanque esférico tiene un orificio circular en el fondo a través del cual fluye líquido. La tasa de flujo a través del agujero se calcula como:

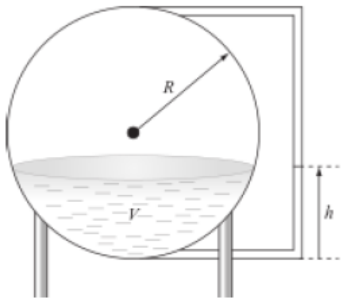
$$Q_{sal} = CA\sqrt{2gH}$$



Donde Q_{sal} es el flujo de salida (m3/s), C es un coeficiente obtenido en forma empírica, A es el área del orificio (m2), g es la constante gravitacional y H es la profundidad del líquido dentro del tanque. Determine cuántos minutos tomaría que el agua fluyera por completo de un tanque de 1 m de diámetro con altura inicial de 0.75 m. Observe que el orificio tiene un diámetro de 3 cm y C = 0.55.

Ayuda: El volumen de líquido que puede almacenar un tanque esférico está dado por la siguiente expresión

$$V = \pi h^2 \frac{(3R - h)}{3}$$



---

21) Una reacción homogénea en fase gaseosa $A \rightarrow 3R$ responde a la cinética

$$(-r_A) = k\, C_A^{\;0.5} \qquad k = 10^{-2}\left[\left(\frac{mol}{L}\right)^{0.5} s^{-1}\right]$$

Donde C_A es la concentración de A y k la constante de velocidad de reacción.

Para esta reacción, se determina que el volumen V del reactor flujo pistón necesario para una conversión X_A deseada se obtiene por medio del siguiente cálculo:

$$V = \frac{F_{A0}}{C_{A0}^{\;0.5}\, k} \int_{0}^{Xa\ deseada} \left(\frac{1 + X_A}{1 - X_A}\right)^{0.5} dX_A$$

Donde k es la constante de la velocidad de reacción, F_{A0} es el caudal molar en la entrada y C_{A0} la concentración de A en la entrada.

Calcular el volumen del reactor necesario para alcanzar una conversión de 0.8 en un reactor de flujo pistón alimentado con un caudal molar F_{A0} de 10 mol/s y una concentración C_{A0} de 0.0625 mol/L.

---

22) El tiempo necesario para la reacción en un reactor intermitente se calcula de la siguiente manera.

$$t = -\int_{C_{A0}}^{C_{Af}} \frac{dC_A}{(-r_A)}$$

Donde A es el reactivo, C_{A0} es la concentración de A al inicio de la reacción, C_{Af} es la concentración de A al final y $-r_A$ la velocidad de reacción de A.

Se está planeando la conversión de A en R en un reactor de este tipo. La reacción se efectúa en fase líquida, la estequiometria es $A \to R$ y la velocidad de reacción se indica en la Tabla 1. Calcular el tiempo que ha de reaccionar cada carga al reactor para que la concentración disminuya desde C_{A0} = 1.3 mol/L a C_{Af} = 0.3 mol/L.

C_A (mol/L)	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.8	1.0	1.3	2.0
$-r_A$ (mol/L min)	0.1	0.3	0.5	0.6	0.5	0.25	0.06	0.05	0.045	0.042

ENL.1: Para el flujo turbulento de un fluido a través de un tubo liso es posible establecer la siguiente relación entre el factor de fricción cf y el número de Reynolds Re:

$$\sqrt{\frac{1}{c_f}} = -0.4 + 1.74\, ln\left(R_e \sqrt{c_f}\right)$$

a) Partiendo de una primera estimación de la raíz x0 = 0.001, utilice el Método de Newton para calcular cf para Re = 104.

b) Determine el número de iteraciones que le permite encontrar la solución con una tolerancia de error ε<10-3.

ENL.2: Una mezcla equimolar de monóxido de carbono y oxígeno debe alcanzar el equilibrio a una temperatura de 3000 ºK y una presión de 5 bar. La reacción teórica es:

$$CO + ½\, O_2 \rightarrow CO_2$$

La reacción química real se escribe así:

$$CO + O_2 \rightarrow x\, CO + ½\ (1 + x)\, O_2 + (1 - x)\ CO_2$$

La ecuación de equilibrio químico para determinar la fracción de CO restante, o sea x, está dada por:

$$K_p = \frac{(1-x)\sqrt{3+x}}{x\sqrt{1+x}\sqrt{P/P_0}} \quad ; \ 0 < x < 1$$

donde $K_p=3.06$ es la constante de equilibrio para la reacción teórica a:

$T = 3000$ ºK, $P = 5bar$ y $P_0 = 1bar$.

a) Determine el valor de x utilizando el método de la bisección tomando como puntos iniciales $x_0 = 0.15$ y $x_1 = 0.20$ hasta reducir el intervalo de incertidumbre a un valor menor a 10^{-4}.

b) Haga lo mismo pero utilizando el método de la secante. Adopte como valor de arranque los mismos valores que en el Ítem (a). Estime el valor de x con un error absoluto inferior a 10^{-4}.

c) Compare el número de iteraciones que demanda cada uno de ellos.

ENL.3: Una reacción química reversible:

$$2A + B \leftrightarrow C$$

se puede caracterizar por la relación de equilibrio:

$$K = \frac{C_C}{C_A^2 C_B}$$

Donde la nomenclatura C_N indica la concentración del componente N**.** Suponga que se define una variable x que representa el número producido de moles del componente C. La conservación de materia se puede utilizar para reformular la relación de equilibrio como:

$$K = \frac{\left(C_{C,0} + x\right)}{\left(C_{A,0} - 2x\right)^2 \left(C_{B,0} - x\right)}$$

Donde el subíndice 0 indica la concentración inicial de cada componente.

Si $K = 0.015$, $C_{A,0} = 42$, $C_{B,0} = 30$ y $C_{C,0} = 4$,

a) Calcule x mediante el método de Newton Raphson adoptando como valor de arranque $x = 15$ para una tolerancia de error (no relativo) $\varepsilon < 10^{-6}$. Observe que la función presenta singularidades en $x = 30$ y en $x = 21$.

b) Determine el número de iteraciones para alcanzar x con el error especificado.