

Transferencia de masa

OCTAVIO MANERO BRITO

12 de febrero de 2025

Dedicated to Calvin and Hobbes.

Índice general

1. Capítulo 1	3
1.1. 1.1 y demas	3
1.2. Tarea 1	3
1.3. Apéndice A	6
1.4. Apéndice B	7
1.5. Apéndice C	8
2. Capítulo 2	15
2.0.1. Difusión con reacción química homogénea	15
2.0.2. Absorción de gas con reacción química en un tanque de agitación	17
2.0.3. Difusión con reacción química heterogénea	19
2.0.4. Difusión con reacción heterogénea lenta	20
2.0.5. Difusión con reacción química en medios porosos	21
2.0.6. Apéndice A	24
3. Capítulo 3	27
3.1. Capa límite binaria	27
3.2. Convección forzada con...	28
3.2.1. Flujo Turbulento con Reacción de Segundo Orden. Mezcla- do Turbulento	29

Prefacio

1

Capitulo 1

1.1. 1.1 y demas

AQUÍ va todo el capítulo

1.2. Tarea 1

Bird et all 17.A

1.- Predicción binaria a baja densidad. Estimar D_{AB} para el sistema metano-etano a 293°K y 1 atm por medio de los siguientes métodos.

a)- Ecuación 1.53

b)- Ecuación 1.53 y gráfica Fig 1.51 utilizando las T y P reducidas $T_r = \frac{T}{\sqrt{T_{CA}T_{CB}}}$, $P_r = \frac{P}{\sqrt{P_{CA}P_{CB}}}$

c)- Ecuación 1.46, 1.48 y 1.49, y los parámetros de Lennard-Joues del Apéndice C.

d)- Ecuación 1.46 en los parámetros de Lennard-Jones estimados a partir de las propiedades críticas siguientes:

$$\frac{\epsilon}{k_{13}} = 0.77\sqrt{T_{CA}T_{CB}}, T = \frac{2.44}{2} \left[\left(\frac{T_{CA}}{P_{CA}} \right)^{1/5} + \left(\frac{T_{CB}}{P_{CB}} \right)^{1/3} \right]$$

Respuestas (cm^2/s) : a)- 0.152; b)- 0.138; c)- 0.146; d)- 0.138

2.- Autodifusión de mercurio líquido Bird et all 17 A3. La difusividad del Hg^{203} en mercurio líquido normal se ha medido con datos de viscosidad y volumen másico. Comparar los datos experimentales con aquellos obtenidos por la ec. 160.

$T(K)$	$D_{AB} \text{ cm}^2/s$	$\mu \text{ cP}$	$\hat{V} \text{ cm}^3/s$
275.7	1.52×10^{-5}	1.68	0.0736
289.6	1.68×10^{-5}	1.56	0.0737
364.2	2.57×10^{-5}	1.27	0.0748

Bird et all 17.A.5

3.- Cálculo de la difusividad de una muestra binaria a alta densidad. Predecir pD_{AB} para una mezcla equimolar de N_2 y C_2H_6 a 288.2 K y 40 atm.

- a)- Usar el valor de D_{AB} a 1 atm de $0.148 \text{ cm}^2/s$ a $T=298.2 \text{ K}$ y la gráfica de la Fig.1.51
- b)- Usar la ecuación 1.55 y la Fig 1.51

Respuesta a).- $5.8 \times 10^{-6} \text{ gmol/cms}$; b).- $5.3 \times 10^{-6} \text{ gmol/cms}$

4.- Prob. 17.A.6 Bird Difusividad y número de Schmidt para mezclas cloro-aire.

- a)- Predecir D_{AB} para mezclas cloro-aire a 75°F y 1 atm. Utilizar los parámetros del Apéndice C.
- b)- Calcular (a) utilizando la ec. 1.53
- c)- Utilizar los resultados de (a) para estimar los valores del número de Schmidt para mezclas cloro-aire a 297 K y 1 atm para las siguientes fracciones mol y viscosidades: 0, $1.83 \times 10^{-4} \text{ poises}$; 0.25, $1.64 \times 10^{-4} \text{ poises}$; 0.5, $1.5 \times 10^{-4} \text{ poises}$; 0.75, $1.39 \times 10^{-4} \text{ poises}$; 1, $1.31 \times 10^{-4} \text{ poises}$

$$pD_{AB} = \frac{\rho}{RT} D_{AB}; Sc = \frac{\mu}{M_C D_{AB}} = \frac{\mu}{(x_A M_A + x_B M_B) p D_{AB}}$$

Respuestas: a).- 0.121 cm/s ; b).- 0.124 cm/s ; c).- $Sc=1.27, 0.832, 0.602, 0.463, 0.372$

5.- Probl. 17.A.8 Bird. Corrección para la difusividad a altas densidades. El valor medido para pD_{AB} de una mezcla de 80 % mol de CH_4 Y 20 % mol de C_2H_6 a 313 K y 136 atm es $6 \times 10^{-6} \text{ gmol/cms}$. Calcular pD_{AB} para esa mezcla a 136 atm y 351 K usando la Fig 1.51.

Respuesta $6.3 \times 10^{-6} \text{ gmol/cms}$. Observado $6.33 \times 10^{-6} \text{ gmol/cms}$

6.- Probl 17 A.10 Bird Cálculo de difusividad de líquidos

- a)- Calcular la difusividad de una solución diluida de ácido acético a 12.5°C utilizando la ec. 1.62. La densidad del ácido acético es 0.937 g/cm^3 en el punto de ebullición.

- b)- La difusividad de una solución diluida de metanol a 15°C es $1.28 * 10^{-5} cm^2/s$. Calcular la difusividad de esa solución a 100°C. Las viscosidades a 15°C y 100°C son 1.14 cp y 0.28cp. La viscosidad de la solución diluida es 1.22 cp.

Respuesta (b).- $6.7 * 10^{-5} cm^2/s$.

1.3. Apéndice A

Ecuaciones de continuidad en varios sistemas de coordenadas

Coordenadas rectangulares:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \left(\frac{\partial N_{Az}}{\partial x} + \frac{\partial N_{Ay}}{\partial y} + \frac{\partial N_{Ax}}{\partial z} \right) = R_A \quad (\text{A})$$

Coordenadas cilíndricas:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r N_{Ar}) + \frac{1}{r} \frac{\partial N_{A\theta}}{\partial \theta} + \frac{\partial N_{Az}}{\partial z} \right) = R_A \quad (\text{B})$$

Coordenadas esféricas:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 N_{Ar}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (N_{A\theta} \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial N_{A\phi}}{\partial \phi} \right) = R_A \quad (\text{C})$$

1.4. Apéndice B

Ecuación de continuidad de A con ρ y \mathcal{D}_{AB} constantes

Coordenadas rectangulares:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \left(v_x \frac{\partial c_A}{\partial x} + v_y \frac{\partial c_A}{\partial y} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right) = \mathcal{D}_{AB} \left(\frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right) + R_A \quad (\text{A})$$

Coordenadas cilíndricas:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_A}{\partial t} + \left(v_r \frac{\partial c_A}{\partial r} + v_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right) \\ = \mathcal{D}_{AB} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right) + R_A \end{aligned} \quad (\text{B})$$

Coordenadas esféricas:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_A}{\partial t} + \left(v_r \frac{\partial c_A}{\partial r} + v_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + v_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial c_A}{\partial \phi} \right) \\ = \mathcal{D}_{AB} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial c_A}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \phi^2} \right) + R_A \end{aligned} \quad (\text{C})$$

1.5. Apéndice C

Tablas de Lennard-Jones y gases de baja densidad

Cuadro 1.1: Parámetros Potenciales de Lennard-Jones y Propiedades Críticas

Susustancia	Parámetros Lennard-Jones				Propiedades Críticas ^{g,h}			
	Masa Molar <i>M</i>	σ (Å)	ϵ/K (K)	Ref.	<i>T_c</i> (K)	<i>p_c</i> (atm)	\tilde{V}_c (cm ³ /g-mole)	μ_c (g/cm·s×10 ⁶) <i>k_c</i> (cal/cm·s·K×10 ⁵)
Elementos ligeros:								
H ₂	2.016	2.915	38.0	a	33.3	12.80	65.0	34.7 —
He	4.003	2.576	10.2	a	5.26	2.26	57.8	25.4 —
Gases nobles:								
Ne	20.180	2.789	35.7	a	44.5	26.9	41.7	156. 79.2
Ar	39.948	3.432	122.4	b	150.7	48.0	75.2	264. 71.0
Kr	83.80	3.675	170.0	b	209.4	54.3	92.2	396. 49.4
Xe	131.29	4.009	234.7	b	289.8	58.0	118.8	490. 40.2
Gases poliatómicos simples:								
Aire	28.964	3.617	97.0	a	132.4	37.0	86.7	193. 90.8
N ₂	28.013	3.667	99.8	b	126.2	33.5	90.1	180. 86.8
O ₂	31.999	3.433	113.	a	154.4	49.7	74.4	250. 106.3
CO	28.010	3.590	110.	a	132.9	34.5	93.1	190. 86.5
CO ₂	44.010	3.996	190.	a	304.2	72.8	94.1	343. 122.
NO	30.006	3.470	119.	a	180.	64.	57.	258. 118.2

Continúa en la siguiente página

Cuadro 1.1 – Continuación

Susustancia	Parámetros Lennard-Jones				Propiedades Críticas ^{g,h}			
	Masa Molar <i>M</i>	σ (Å)	ϵ/K (K)	Ref.	<i>T_c</i> (K)	<i>p_c</i> (atm)	\tilde{V}_c (cm ³ /g-mole)	μ_c (g/cm-s×10 ⁶) <i>k_c</i> (cal/cm-s-K×10 ⁵)
N ₂ O	44.012	3.879	220.	a	309.7	71.7	96.3	332. 131.
SO ₂	64.065	4.026	363.	c	430.7	77.8	122.	411. 98.6
F ₂	37.997	3.653	112.	a	—	—	—	— —
Cl ₂	70.905	4.115	357.	a	417.	76.1	124.	420. 97.0
Br ₂	159.808	4.268	520.	a	584.	102.	144.	— —
I ₂	253.809	4.362	550.	a	800.	—	—	— —
Hidrocarburos:								
CH ₄	16.04	3.780	154.	b	191.1	45.8	98.7	159. 158.
CH≡CH	26.04	4.114	212.	d	308.7	61.6	112.9	237. —
CH ₂ =CH ₂	28.05	4.228	212.	b	282.4	50.0	124.	215. —
C ₂ H ₆	30.07	4.388	232.	b	305.4	48.2	148.	210. 203.
CH ₃ C≡CH	40.06	4.742	261	d	394.8	—	—	— —
CH ₃ CH=CH ₂	42.08	4.766	275.	b	365.0	45.5	181.	233. —
n-C ₄ H ₁₀	58.12	5.604	304.	b	425.2	37.5	295.	239. —
i-C ₄ H ₁₀	58.12	5.393	295.	b	408.1	36.0	263.	239. —
n-C ₅ H ₁₂	72.15	5.850	326.	b	469.5	33.2	311.	238. —
i-C ₅ H ₁₂	72.15	5.812	327.	b	460.4	33.7	306.	— —
C(CH ₃) ₄	72.15	5.759	312.	b	433.8	31.6	303.	— —
n-C ₆ H ₁₄	86.18	6.264	342.	b	507.3	29.7	370.	248. —
n-C ₇ H ₁₆	100.20	6.663	352.	b	540.1	27.0	432.	254. —
n-C ₈ H ₁₈	114.23	7.035	361.	b	568.7	24.5	492.	259. —

Continúa en la siguiente página

Cuadro 1.1 – Continuación

Sustancia	Parámetros Lennard-Jones				Propiedades Críticas ^{g,h}			
	Masa Molar <i>M</i>	σ (Å)	ϵ/K (K)	Ref.	T_c (K)	p_c (atm)	\tilde{V}_c (cm ³ /g-mole)	μ_c (g/cm·s×10 ⁶) k_c (cal/cm·s·K×10 ⁵)
n-C ₉ H ₂₀	128.26	7.463	351.	b	594.6	22.6	548.	265. —
Ciclohexano	84.16	6.143	313.	d	553.	40.0	308.	284. —
Benceno	78.11	5.443	387.	b	562.6	48.6	260.	312. —
Otros compuestos orgánicos:								
CH ₄	16.04	3.780	154.	b	191.1	45.8	98.7	159. 158.
CH ₃ Cl	50.49	4.151	355.	c	416.3	65.9	143.	338. —
CH ₂ Cl ₂	84.93	4.748	398.	c	510.	60.	—	— —
CHCl ₃	119.38	5.389	340.	e	536.6	54.	240.	410. —
CCl ₄	153.82	5.947	323.	e	556.4	45.0	276.	413. —
C ₂ N ₂	52.034	4.361	349.	e	400.	59.	—	— —
COS	60.076	4.130	336.	e	378.	61.	—	— —
CS ₂	76.143	4.483	467.	e	552.	78.	170.	404. —
CCl ₂ F ₂	120.91	5.116	280.	b	384.7	39.6	218.	— —

-
- ¹a) J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, and R. B. Bird, *Molecular Theory of Gases and Liquids*, corrected printing with notes added, Wiley, New York (1964).
- ²b) L. S. Tee, S. Gotoh, and W. E. Stewart, *Ind. Eng. Chem. Fundamentals*, **5**, 356–363 (1966). The values for benzene are from viscosity data on that substance. The values for other substances are computed from Correlation (iii) of the paper.
- ³c) L. Monchick and E. A. Mason, *J. Chem. Phys.*, **35**, 1676–1697 (1961); parameters obtained from viscosity.
- ⁴d) L. W. Flynn and G. Thodos, *AIChE Journal*, **8**, 362–365 (1962); parameters obtained from viscosity.
- ⁵e) R. A. Svehla, *NASA Tech. Report R-132* (1962); parameters obtained from viscosity. This report provides extensive tables of Lennard-Jones parameters, heat capacities, and calculated transport properties.
- ⁶f) Values of the critical constants for the pure substances are selected from K. A. Kobe and R. E. Lynn, Jr., *Chem. Rev.*, **52**, 117–236 (1962); *Amer. Petroleum Inst. Research Proj. 44*, Thermodynamics Research Center, Texas A&M University, College Station, Texas (1966); and *Thermodynamic Functions of Gases*, F. Din (editor), Vols. 1–3, Butterworths, London (1956, 1961, 1962).
- ⁷g) Values of the critical viscosity are from O. A. Hougen and K. M. Watson, *Chemical Process Principles*, Vol. 3, Wiley, New York (1947), p. 873.
- ⁸h) Values of the critical thermal conductivity are from E. J. Owens and G. Thodos, *AIChE Journal*, **3**, 454–461 (1957).
- ⁹i) For air, the molecular weight M and the pseudocritical properties have been computed from the average composition of dry air as given in COESA, *U.S. Standard Atmosphere 1976*, U.S. Government Printing Office, Washington, D.C. (1976).

Cuadro 1.2: Integrales de Colisión para su uso con los potenciales de Lennard-Jones para la predicción de propiedades de transporte de Gases de baja Densidad. ^{a,b,c}

KT/e	$\Omega_\mu = \Omega_k$ (por viscosidad y conductividad térmica)	$\Omega_{D_{AB}}$ (por difusividad)	KT/e o KT/ ε_{AB}	$\Omega_b = \Omega_k$ (por viscosidad y conductividad térmica)	$\Omega_{D_{AB}}$ (por difusividad)
0.30	2.840	2.649	2.7	1.0691	0.9782
0.35	2.676	2.468	2.8	1.0583	0.9682
0.40	2.531	2.314	2.9	1.0482	0.9588
0.45	2.401	2.182	3.0	1.0588	0.9500
0.50	2.284	2.066	3.1	1.0300	0.9418
0.55	2.178	1.965	3.2	1.0217	0.9340
0.60	2.084	1.877	3.3	1.0139	0.9267
0.65	1.999	1.799	3.4	1.0066	0.9197
0.70	1.922	1.729	3.5	0.9996	0.9131
0.75	1.853	1.667	3.6	0.9931	0.9068
0.80	1.790	1.612	3.7	0.9868	0.9008
0.85	1.734	1.562	3.8	0.9809	0.8952
0.90	1.682	1.517	3.9	0.9753	0.8897
0.95	1.636	1.477	4.0	0.9699	0.8845
1.00	1.593	1.440	4.1	0.9647	0.8796
1.05	1.554	1.406	4.2	0.9598	0.8748
1.10	1.518	1.375	4.3	0.9551	0.8703
1.15	1.485	1.347	4.4	0.9506	0.8659
1.20	1.455	1.320	4.5	0.9462	0.8617
1.25	1.427	1.296	4.6	0.9420	0.8576
1.30	1.401	1.274	4.7	0.9380	0.8577
1.35	1.377	1.253	4.8	0.9341	0.8499
1.40	1.355	1.234	4.9	0.9304	0.8463
1.45	1.334	1.216	5.0	0.9268	0.8428
1.50	1.315	1.199	6.0	0.8962	0.8129
1.55	1.297	1.183	7.0	0.8727	0.7898
1.60	1.280	1.168	8.0	0.8538	0.7711
1.65	1.264	1.184	9.0	0.8380	0.7555
1.70	1.249	1.141	10.0	0.8244	0.7422
1.75	1.235	1.128	12.0	0.8018	0.7202

Continúa en la siguiente página

Cuadro 1.2 – Continuación

KT/e	$\Omega_\mu = \Omega_k$ (por vis- cosidad y conduc- tividad térmica)	Ω_{DAB} (por difusividad)	KT/e o KT/ ε_{AB}	$\Omega_b = \Omega_k$ (por vis- cosidad y conduc- tividad térmica)	Ω_{DAB} (por difusividad)
1.80	1.222	1.117	14.0	0.7836	0.7025
1.85	1.209	1.105	16.0	0.7683	0.6878
1.90	1.198	1.095	18.0	0.7552	0.6781
1.95	1.186	1.085	20.0	0.7436	0.6640
2.00	1.176	1.075	25.0	0.7198	0.6414
2.10	1.156	1.058	30.0	0.7000	0.6235
2.20	1.138	1.042	35.0	0.6854	0.6088
2.30	1.122	1.027	40.0	0.6723	0.5964
2.40	1.107	1.013	50.0	0.6510	0.5763
2.50	1.0933	1.0006	75.0	0.6140	0.5415
2.60	1.0807	0.9890	100.0	0.5887	0.5180

$$\Omega_\mu = \Omega_k = \frac{1.16145}{T^{*0.14574}} + \frac{0.52487}{\exp(0.77320T^*)} + \frac{2.16178}{\exp(2.43787T^*)} \quad (\text{E.2-1})$$

$$\Omega_{DAB} = \frac{1.06036}{T^{*0.15610}} + \frac{0.19300}{\exp(0.47635T^*)} + \frac{1.03587}{\exp(1.52996T^*)} + \frac{1.76474}{\exp(3.89411T^*)} \quad (\text{E.2-2})$$

donde $T^* = \kappa T / \varepsilon$.

¹a) Los valores en esta tabla, aplicables para el potencial de Lennard-Jones, se han interpolado a partir de los resultados de L. Monchick y E. A. Mason, J. Chem. Phys., 35, 1676–1697 (1961). Se cree que la tabla de Monchick–Mason es ligeramente mejor que la tabla anterior de J. O. Hirschfelder, R. B. Bird y E. L. Spotz, J. Chem. Phys., 16, 968–981 (1948).

²b) Esta tabla ha sido extendida a temperaturas más bajas por C. F. Curtiss, J. Chem. Phys., 97, 7679–7686 (1992). Curtiss demostró que a bajas temperaturas, la ecuación de Boltzmann necesita ser modificada para tener en cuenta los "pares orbitantes" de moléculas. Solo haciendo esta modificación es posible obtener una transición suave del comportamiento cuántico al clásico. Las desviaciones son apreciables por debajo de temperaturas adimensionales de 0.30.

³c) Las integrales de colisión han sido ajustadas mediante curvas por P. D. Neufeld, A. R. Jansen y R. A. Aziz, J. Chem. Phys., 57, 1100–1102 (1972), de la siguiente manera:

2

Capítulo 2

2.0.1. Difusión con reacción química homogénea

En la fig 2.9, el gas A se disuelve en el líquido B. Al difundirse A en B, ocurre una reacción $A + B \rightarrow AB$. Por ejemplo, la absorción de CO_2 en una solución de NaOH. En este caso, el proceso es descrito por la ecuación (1.30), en la cual, no hay dependencia con el tiempo y el sistema está en reposo $\underline{v} = 0$.

Suponiendo una reacción de primer orden para la descomposición de A, la ecuación (1.30) se reduce a:

$$D_{AB} \frac{d^2(C_A)}{dz^2} + R_A = 0 \quad (2.1)$$

En donde:

$$R_A = \frac{d(C_A)}{dt} = -kC_A. \quad (2.2)$$

Este sistema otorga las siguientes condiciones de frontera:

$$C_A|_{z=0} = C_{A0} \quad (2.3)$$

$$\frac{d(C_A)}{dz}|_{z=L} = N_{Az}|_{z=L} = 0 \quad (2.4)$$

Se definen las siguientes variables adimensionales:

$$\Gamma = \frac{C_A}{C_{A0}}$$

Figura 2.1: Adsorción de A en B, con reacción homogénea en la fase líquida

$$\zeta = \frac{z}{L}$$

La ecuación (2.55) se transforma en:

$$\frac{d^2\Gamma}{d\zeta^2} - \left(\frac{k_1 L^2}{D_{AB}}\right)\Gamma = 0 \quad (2.5)$$

$$\frac{d^2\Gamma}{d\zeta^2} - \phi^2\Gamma = 0 \quad (2.6)$$

Defínase $\phi = \left(\frac{k_1 L^2}{D_{AB}}\right)^{\frac{1}{2}}$, el cual corresponde al módulo de Thiele.

Las nuevas condiciones de frontera adimensionales corresponden a :

$$\Gamma|_{\zeta=0} = 1 \quad (2.7)$$

$$\frac{d\Gamma}{d\zeta}|_{\zeta=1} = 0 \quad (2.8)$$

La solución de la ecuación (2.56) corresponde a:

$$\Gamma = C_1 \cosh(\phi\zeta) + C_2 \sinh(\phi\zeta) \quad (2.9)$$

Mediante las condiciones de frontera (eq 7,8), es posible obtener los valores de c_1 y C_2 : $C_1 = 1$ y $0 = \sinh(\phi) + C_2 \cosh(\phi) \longrightarrow C_2 = -\frac{\sinh(\phi)}{\cosh(\phi)} = -\tanh(\phi)$ Haciendo el álgebra correspondiente:

$$\Gamma = \cosh(\phi\zeta) - \frac{\sinh(\phi)}{\cosh(\phi)} \sinh(\phi\zeta)$$

$$\Gamma = \frac{\cosh(\phi\zeta) \cosh(\phi)}{\cosh(\phi)} - \frac{\sinh(\phi)}{\cosh(\phi)} \sinh(\phi\zeta)$$

Utilizando la siguiente identidad trigonométrica:

$$\cosh(a - b) = \cosh(a) \cosh(b) - \sinh(a) \sinh(b)$$

Se llega a la solución particular del problema:

$$\Gamma = \frac{\cosh[\phi(1 - \zeta)]}{\cosh(\phi)} \quad (2.10)$$

Se determina la concentración promedio de A en la fase líquida:

Figura 2.2: Perfil de concentración predicho en la película de líquido que rodea a una burbuja

$$\bar{\Gamma} = \frac{\int_0^1 \Gamma d\zeta}{\int_0^1 d\zeta} = \frac{1}{\cosh(\phi)} \left[\frac{\sinh[\phi(1-\zeta)]}{-\phi} \right]_0^1 = \frac{\tanh(\phi)}{\phi} \quad (2.11)$$

El flux molar en $z = 0$ es:

$$N_{Az}|_{z=0} = -D_{AB} \frac{d(C_A)}{dz} \Big|_{z=0} = -D_{AB} \frac{C_{A0}}{L} \frac{d\Gamma}{d\zeta} \Big|_{\zeta=0} = D_{AB} \frac{C_{A0}}{L} \phi \tanh(\phi) \quad (2.12)$$

2.0.2. Absorción de gas con reacción química en un tanque de agitación

Considere un sistema en el que el gas A disuelto se combina con el líquido B por una reacción química de primer orden. Por ejemplo, la absorción de SO_2 o H_2S en NaOH en solución acuosa.

¡Aquí van las figuras 2.10

Este sistema tiene las siguientes condiciones en la frontera:

$$C_A|_{z=0} = C_{A0} \quad (2.13)$$

$$C_A|_{z=\delta} = C_{A\delta} \quad (2.14)$$

Si estas condiciones se expresan en las siguientes variables adimensionales:

$$\Gamma|_{\zeta=0} = 1$$

$$\Gamma|_{\zeta=1} = B$$

En donde $\zeta = \frac{z}{\delta}$, $\Gamma = \frac{C_A}{C_{A0}}$, $B = \frac{C_{A\delta}}{C_{A0}}$ y $\phi^2 = \frac{k_1 \delta^2}{D_{AB}}$

La ecuación a resolver corresponde a la ecuación (2.59) con las condiciones nuevas; es decir:

$$\Gamma = C_1 \cosh(\phi\zeta) + C_2 \sinh(\phi\zeta)$$

Al evaluar la ecuación con las condiciones fronterizas, se obtiene el siguiente resultado:

$$\Gamma = \frac{\sinh(\phi) \cosh(\phi\zeta) + (B - \cosh(\phi)) \sinh(\phi\zeta)}{\sinh(\phi)} \quad (2.15)$$

Esta última ecuación (2.65) describe el perfil de la curva con reacción. Se supone que la concentración de A fuera de la película es $C_{A\delta}$, por lo que, si la superficie de todas las burbujas en la superficie es S, la cantidad de A consumida por la reacción química es:

$$SN_{Az}|_{z=\delta} = -SD_{AB} \frac{dC_A}{dz}|_{z=\delta} = Vk_1 C_{A\delta} \quad (2.16)$$

En donde V es el volumen de la fase líquida. Luego;

$$-\frac{dC_A}{dz}|_{z=\delta} = -\frac{C_{A0}}{\delta} \frac{d\Gamma}{d\zeta}|_{\zeta=1} = \frac{Vk_1 C_{A\delta}}{SD_{AB}} \longrightarrow -\frac{d\Gamma}{d\zeta}|_{\zeta=1} = \frac{V}{S\delta} \phi^2 B$$

Como $\cosh^2(\phi) - \sinh^2(\phi) = 1$, de la solución particular para Γ se obtiene:

$$\frac{B \cosh(\phi) - 1}{\sinh(\phi)} = -\frac{V}{S\delta} B \phi \longrightarrow B(\cosh(\phi) + \frac{V}{S\delta} \phi \sinh(\phi)) = 1$$

Substituyendo B en la solución para Gamma (ec 2.65), se obtiene:

$$\Gamma = \frac{\cosh(\phi) \cosh(\phi\zeta) - \cosh(\phi) \sinh(\phi\zeta)}{\sinh(\phi)} + \frac{\sinh(\phi)\zeta}{\sinh(\phi)} \left[\frac{1}{\cosh(\phi) + \frac{V\phi \sinh(\phi)}{S\delta}} \right] \quad (2.17)$$

El flux de masa absorbido con reacción química (normalizada) es:

$$\begin{aligned} \tilde{N} &= \frac{N_{Az}}{D_{AB} \frac{C_{A0}}{\delta}} = -\frac{D_{AB}}{D_{AB} \frac{C_{A0}}{\delta}} \frac{d(C_A)}{dz}|_{z=0} \Rightarrow -\frac{d\Gamma}{d\zeta}|_{\zeta=0} = \frac{\phi \cosh(\phi)}{\sinh(\phi)} - \left[\frac{\phi}{\sinh(\phi) [\cosh(\phi) + \frac{V\phi \sinh(\phi)}{S\delta}]} \right] \\ &= \frac{\phi}{\sinh(\phi)} \left[\cosh(\phi) - \frac{1}{\cosh(\phi) + \frac{V\phi \sinh(\phi)}{S\delta}} \right] \end{aligned} \quad (2.18)$$

La ecuación (2.68) se grafica en la figura 2.11.

Se puede observar en la fig (2.11) que:

1) \tilde{N} aumenta con ϕ para todo $\frac{V}{S\delta}$

2) $\tilde{N} = 1$ es la curva sin reacción que corresponde a la fig (2.10)

Cuando $\phi = 0 \rightarrow \tilde{N} \rightarrow 1$ ($B = 0$)

Figura 2.3: Adsorción de gas con reacción química

3) Cuando $\phi \rightarrow 0$, para $\frac{V}{S\delta}$ finito $\tilde{N} = 0$, se lidia con un líquido saturado con gas disuelto.

4) Si ϕ es grande, \tilde{N} se incrementa abruptamente ($B \rightarrow 0$) y la ec (2.68) revela que \tilde{N} es proporcional a ϕ . La reacción es muy rápida y el gas disuelto se consume dentro de la película.

5) Para valores intermedios de $\frac{V}{S\delta}$ y ϕ , $\tilde{N} \rightarrow 1$. La reacción es rápida y la solución se encuentra libre de soluto.

2.0.3. Difusión con reacción química heterogénea

Considérese un reactor catalítico, en donde se lleva a cabo la reacción $2A \rightarrow B$, de acuerdo a la figura (2.12)

Aquí va la figura 2.12

2 moles de A se mueven en dirección +z y un mol de B se mueve en dirección -z. Por lo tanto, a régimen permanente:

$$N_{Bz} = -\frac{1}{2}N_{Az} \quad (2.19)$$

Las ecs (1.25) y (1.19) en combinación con la ec (2.69) son:

$$N_{Az} = -\frac{cD_{AB}}{1 - \frac{x_A}{2}} \frac{d(x_A)}{dz} \quad (2.20)$$

y

$$\frac{d(N_A)}{dz} = 0 \quad (2.21)$$

Lo cual resulta en:

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{1}{1 - \frac{x_A}{2}} \frac{d(x_A)}{dz} \right) = 0 \quad (2.22)$$

Con las condiciones en la frontera:

$$x_A|_{z=0} = x_{A0}$$

$$x_A|_{z=\delta} = 0 \quad (2.23)$$

A partir de la ec (2.72), se obtiene:

$$\frac{1}{1 - \frac{x_A}{2}} \frac{d(x_A)}{dz} = C_1 \longrightarrow \int \frac{d(x_A)}{1 - \frac{x_A}{2}} = c_1 \int dz + c_2$$

Evaluando C_1 y C_2 con respecto a las condiciones (2.73), se obtiene:

$$N_{Az} = \frac{2cD_{AB}}{\delta} \ln\left(\frac{1}{1 - \frac{x_{A0}}{2}}\right) \quad (2.24)$$

La reacción ocurre instantáneamente en la superficie del catalizador, por lo que la conversión de A a B es un proceso regulado por la difusión en la capa de gas de grosor δ .

2.0.4. Difusión con reacción heterogénea lenta

En este caso, para el mismo sistema, la reacción no sucede instantáneamente en $z = \delta$, sino que la desaparición de A en la superficie del catalizador es proporcional a la concentración de A en la interfase:

$$N_{Az} = k_1 C_A = k_1 C x_A \quad (2.25)$$

En este caso, la condición de frontera en la superficie del catalizador es:

$$x_A|_{z=\delta} = \frac{N_{Az}}{k_1 c}$$

El cambio en la condición de frontera, resulta en el siguiente perfil de concentración:

$$\frac{1 - \frac{x_A}{2}}{(1 - \frac{x_{A0}}{2})^{1 - \frac{z}{\delta}}} = \left(1 - \frac{N_{Az}}{2k_1 c}\right)^{\frac{z}{\delta}} \quad (2.26)$$

Realizando el álgebra y derivando uestro perfil de concentración, podemos determinar el flux másico de A N_{Az}

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \ln\left(1 - \frac{x_A}{2}\right) - \frac{d}{dz} \left[\left(1 - \frac{z}{\delta}\right) \ln\left(1 - \frac{x_{A0}}{2}\right)\right] &= \frac{d}{dz} \left[\frac{z}{\delta} \ln\left(1 - \frac{N_{Az}}{2k_1 c}\right)\right] \\ -\frac{\frac{1}{2}}{1 - \frac{x_A}{2}} \frac{dx_A}{dz} + \frac{1}{\delta} \ln\left(1 - \frac{x_{A0}}{2}\right) &= \frac{1}{\delta} \ln\left(1 - \frac{N_{Az}}{2k_1 c}\right) \end{aligned} \quad (2.27)$$

Substituyendo la ec (2.77) en la ec (2.70), se obtiene:

$$N_{Az} = -\frac{cD_{AB}}{(1 - \frac{x_A}{2})}[(1 - \frac{x_A}{2})(\frac{-2}{\delta})\ln(\frac{1 - \frac{N_{Az}}{k_1c}}{1 - \frac{x_{A0}}{2}})]$$

Utilizando una aproximación de una serie de Taylor truncada en el primer término para $\ln(1 - \frac{N_{Az}}{2k_1c})$ asumiendo que k_1 es grande.

Recordando que la serie de Mclaurin para $\ln(1 - x)$ corresponde a:

$$\ln(1 - x) = -x - \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} \dots$$

Así, aproximamos $\ln(1 - \frac{N_{Az}}{2k_1c})$ a $-\frac{N_{Az}}{2k_1c}$ y se obtiene:

$$\begin{aligned} N_{Az} &= \frac{2cD_{AB}}{\delta}[-\frac{N_{Az}}{2k_1c} - \ln(1 - \frac{x_{A0}}{2})] \\ N_{Az}(1 + \frac{D_{AB}}{k_1\delta}) &= 2c\frac{D_{AB}}{\delta}\ln(\frac{1}{1 - \frac{x_{A0}}{2}}) \\ N_{Az} &= 2c\frac{D_{AB}}{\delta(1 + \frac{D_{AB}}{k_1\delta})}\ln(\frac{1}{1 - \frac{x_{A0}}{2}}) \end{aligned} \quad (2.28)$$

El número adimensional $\frac{k_1\delta}{D_{AB}} = Da$ es el número de Damköler, el cual describe la relación entre reacción y difusión. Si $Da \rightarrow \infty$, se obtiene el caso de reacción dominante y la ecuación toma la forma de la ec (2.74)

2.0.5. Difusión con reacción química en medios porosos

En este caso, se describe la difusión de los reactivos en un medio poroso en términos de una difusividad efectiva (D_A). Supóngase que la reacción tiene lugar en la superficie sólida de un catalizador cuya simetría es esférica y posee un radio R , la reacción es $A \rightarrow B$. Esta partícula esférica está sumergida en una corriente de gas con A y B presentes. A se difunde en los poros de la superficie esférica y ahí sucede la reacción. La ec (1.30) dentro del medio poroso en coordenadas esfericas es:

$$0 = D_A \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{d(C_A)}{dr}) - R_A \quad (2.29)$$

"a" se define como la superficie catalítica por unidad de volumen (sólido + huecos). Por ello, $R_A = -k_1ac_a$.

Haciendo un cambio de variable, $\frac{C_A}{C_{AR}} = \frac{f(r)}{r}$ en donde C_{AR} es la concentración de A en la superficie esférica, la ec (2.79) se transforma en:

$$\frac{d^2 f}{dr^2} - \frac{k_1 a}{D_A} f = 0 \quad (2.30)$$

Con condiciones en la frontera:

$$C_A|_{r=R} = C_{AR}$$

$$C_A|_{r=0} = \textit{finito} \quad (2.31)$$

o bien:

$$f|_{r=R} = R$$

y

$$f|_{r=0} = \textit{finito}$$

La solución a la ecuación (2.80) corresponde a:

$$f(r) = C_1 \cosh\left[\left(\frac{k_1 a}{D_A}\right)^{\frac{1}{2}} r\right] + C_2 \sinh\left[\left(\frac{k_1 a}{D_A}\right)^{\frac{1}{2}} r\right] \quad (2.32)$$

$$f(0) = C_1 = 0$$

$$f(R) = C_2 \sinh\left[\left(\frac{k_1 a}{D_A}\right)^{\frac{1}{2}} R\right] = R \longrightarrow C_2 = \frac{R}{\sinh\left[\left(\frac{k_1 a}{D_A}\right)^{\frac{1}{2}} R\right]}$$

Por lo tanto:

$$f(r) = \frac{R \sinh\left[\left(\frac{k_1 a}{D_A}\right)^{\frac{1}{2}} r\right]}{\sinh\left[\left(\frac{k_1 a}{D_A}\right)^{\frac{1}{2}} R\right]} \quad (2.33)$$

Definiendo el modulo de Thiele como $\phi = \left(\frac{k_1 a}{D_A}\right)^{\frac{1}{2}} R$, entonces:

$$f(r) = \frac{R \sinh\left[\phi\left(\frac{r}{R}\right)\right]}{\sinh[\phi]}$$

Luego entonces, $\frac{C_A}{C_{AR}} = \frac{R}{r} \frac{\sinh[\phi(\frac{r}{R})]}{\sinh[\phi]}$ y claramente, $\frac{C_A}{C_{AR}}|_{r=0} = \frac{\phi}{\sinh(\phi)}$
 El flujo molar en la superficie es: $W_{AR} = 4\pi R^2 N_{AR} = -4\pi R^2 D_A \frac{d(C_A)}{dr}|_{r=R}$

$$\begin{aligned} \frac{d(C_A)}{dr}|_{r=R} &= \frac{C_{AR}R}{\sinh(\phi)} \left[\frac{r}{r^2} \cosh\left[\frac{\phi r}{R}\right] \left(\frac{\phi}{R}\right) - \frac{1}{r^2} \sinh\left[\frac{\phi r}{R}\right] \right] \\ &= \frac{C_{AR}R}{\sinh(\phi)} \left[\frac{\phi}{R^2} \cosh(\phi) - \frac{\sinh(\phi)}{R^2} \right] = \frac{C_{AR}}{R} [\phi \coth(\phi) - 1] \end{aligned}$$

Por lo tanto:

$$W_{AR} = 4\pi R C_{AR} D_A [1 - \phi \coth(\phi)] \quad (2.34)$$

Definiendo al factor de efectividad η :

$$\eta = \frac{N_{AR}}{N_{AR0}} \quad (2.35)$$

En donde N_{AR0} es el flujo molar sin efectos difusionales, es decir:

$$N_{AR0} = \frac{4\pi R^3}{3} a(-k_1 C_{AR}) \quad (2.36)$$

Substituyendo las ecs (2.85) y (2.87) en la ec (2.86) resulta en:

$$\eta_A = \frac{3}{\phi^2} [\phi \coth(\phi) - 1] \quad (2.37)$$

Físicamente, η_A es el factor tal que $\eta_A W_{AR0}$ representa la resistencia difusional del proceso. Para partículas no esféricas, el radio R_{ne} se define como:

$$R_{ne} = 3 \left(\frac{V_p}{S_p} \right) \quad (2.38)$$

De tal forma que para partículas esféricas: $\frac{V_p}{S_p} = \frac{\frac{4\pi R^3}{3}}{4\pi R^2} = \frac{R}{3}$

En este caso, el valor de conversión absoluto en la reacción corresponde a:

$$|W_{AR}| = V_p a k_1 C_{AR} \eta_A$$

y donde ahora:

$$\eta_A = \frac{1}{3\Lambda^2} (3\Lambda \coth 3\Lambda - 1) \quad (2.39)$$

y

$$\Lambda = \left(\frac{k_1 a}{D_A}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{V_p}{S_p}\right) \quad (2.40)$$

Es el modulo de Thiele generalizado. La variación de η_A en función de Λ se grafica en la fig (2.13) para diferentes geometrías

Aquí va la fig 2.13

2.0.6. Apéndice A

Difusión debido a una fuente puntual en una corriente de fluido. Un fluido B fluye a una velocidad constante v_0 . en algún punto, la especie A se inyecta a un flujo W_A (gmol/s) que es suficientemente pequeño. A se difunde axial y radialmente.

Como este es un problema de convección-difusión, en coordenadas cilíndricas (vea la ec B en el apéndice B), en la dirección z, se tiene:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = D_{AB} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right] \quad (2.41)$$

en donde $dt = \frac{dz}{v_0}$.

Ahora, se realiza un cambio de variable $C_A(r, z) = C_A(s, z)$, en la cual $s^2 = r^2 + z^2$ (ver fig A.1)

Aquí va la fig A.1

El diferencial dC_A por regla de la cadena, corresponde a:

$$dC_A = \left(\frac{\partial C_A}{\partial s}\right)_z ds + \left(\frac{\partial C_A}{\partial z}\right)_s dz$$

Luego:

$$\left(\frac{\partial C_A}{\partial z}\right)_r = \left(\frac{\partial C_A}{\partial s}\right)_z \frac{ds}{dz} + \left(\frac{\partial C_A}{\partial z}\right)_s$$

Recordando que $s^2 = r^2 + z^2$, por lo tanto, $\frac{\partial s}{\partial z} = \frac{z}{s}$

$$\left(\frac{\partial C_A}{\partial z}\right)_r = \left(\frac{\partial C_A}{\partial s}\right)_z \frac{z}{s} + \left(\frac{\partial C_A}{\partial z}\right)_s$$

$$\left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}\right)_r = \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\frac{\partial C_A}{\partial z}\right)_r \right)$$

$$\begin{aligned}
(\frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2})_r &= [\frac{\partial}{\partial s}((\frac{\partial C_A}{\partial s})_r) \frac{\partial s}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z}((\frac{\partial C_A}{\partial s})_r)]_s \\
(\frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2})_r &= \frac{\partial}{\partial s}[(\frac{\partial C_A}{\partial s})_z \frac{z}{s} + (\frac{\partial C_A}{\partial z})_s] \frac{z}{s} + \frac{\partial}{\partial z}[(\frac{\partial C_A}{\partial s})_z \frac{z}{s} + (\frac{\partial C_A}{\partial z})_s] \\
(\frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2})_r &= \frac{z}{s}[(\frac{\partial^2 C_A}{\partial s^2})_z \frac{z}{s} - (\frac{\partial C_A}{\partial s})_z \frac{z}{s^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial s \partial z}] \\
&+ [(\frac{\partial^2 C_A}{\partial z \partial s}) \frac{z}{s} + (\frac{\partial C_A}{\partial s})_s \frac{1}{s} + (\frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2})_s]
\end{aligned}$$

Se calculan ahora, las derivadas radiales:

$$\begin{aligned}
(\frac{\partial C_A}{\partial r})_z &= (\frac{\partial C_A}{\partial s})_z (\frac{\partial s}{\partial r})_z = (\frac{\partial C_A}{\partial s})_z (\frac{r}{s}) = (\frac{\partial C_A}{\partial s})_z (\frac{(s^2 - z^2)^{\frac{1}{2}}}{s}) \\
r(\frac{\partial C_A}{\partial r})_z &= (\frac{\partial C_A}{\partial s})_z (\frac{s^2 - z^2}{s}) \\
\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r(\frac{\partial C_A}{\partial r})_z) &= \frac{1}{s} \frac{\partial}{\partial s} [(\frac{s^2 - z^2}{s})(\frac{\partial C_A}{\partial s})_z] \\
&= \frac{1}{s} [(\frac{s^2 - z^2}{s})(\frac{\partial C_A}{\partial s})_z] + (\frac{s^2 - z^2}{s})(\frac{\partial^2 C_A}{\partial s^2})_z
\end{aligned}$$

Sumando, se obtiene:

$$\frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} + 2\frac{z}{s} \frac{\partial^2 C_A}{\partial s \partial z} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial s^2} + \frac{z}{s} (\frac{\partial C_A}{\partial s})$$

O de manera equivalente:

$$\frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} + 2\frac{z}{s} \frac{\partial^2 C_A}{\partial s \partial z} + \frac{1}{s^2} \frac{\partial}{\partial s} (s^2 \frac{\partial C_A}{\partial s}) = f(s, r, z)$$

Al insertar en la ecuación (A.1), se obtiene:

$$v_0 (\frac{z}{s} \frac{\partial C_A}{\partial s} + \frac{\partial C_A}{\partial z}) = D_{AB} f(s, r, z)$$

Cuya solución es:

$$C_A = [\frac{W_A}{4\pi D_{AB} s}] e^{\frac{-v_0(s-z)}{2D_{AB}}} \quad (2.42)$$

Que satisface las condiciones de frontera:

$$1) C_A|_{z \rightarrow \infty} = 0$$

La concentración de A lejos de la fuente es 0

$$2) - \frac{\partial C_A}{\partial s} \Big|_{s \rightarrow 0} = \frac{W_A}{4\pi D_{AB} s^2}$$

Este corresponde al sitio de la fuente

$$\frac{\partial C_A}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial s} \left[\frac{a}{s} e^{b(s-z)} \right] = a \left[-\frac{b}{s^2} e^{b(s-z)} - \frac{1}{s^2} e^{b(s-z)} \right] = a e^{b(s-z)} \left[-\frac{b}{s} - \frac{1}{s^2} \right]$$

En donde $a = \frac{W_A}{4\pi D_{AB}}$, entonces. Si $s \rightarrow 0$, recordando que $s^2 = z^2 + r^2$, tanto r como z deben tender a 0, por lo tanto:

$$\frac{\partial C_A}{\partial s} \Big|_{s \rightarrow 0} = \lim_{s \rightarrow 0} a e^{b(s-z)} \left[-\frac{b}{s} - \frac{1}{s^2} \right]$$

Se toma la siguiente consideración, en el límite $\frac{1}{s^2} \gg \frac{b}{s}$ y $e^{b(s-z)} = 1$. Por lo tanto:

$$\frac{\partial C_A}{\partial s} \Big|_{s \rightarrow 0} = a \left(-\frac{1}{s^2} \right)$$

y finalmente:

$$- \frac{\partial C_A}{\partial s} \Big|_{s \rightarrow 0} = \frac{W_A}{4\pi D_{AB} s^2}$$

$$3) \frac{\partial C_A}{\partial r} \Big|_{r \rightarrow 0} = 0$$

Lo cual implica que la concentración máxima está en el eje z

$$\frac{\partial C_A}{\partial r} = \frac{\partial C_A}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial r} = \frac{r}{s} \frac{\partial C_A}{\partial s} = \frac{r}{s} \left(a e^{b(s-z)} \left[-\frac{b}{s} - \frac{1}{s^2} \right] \right)$$

si $r \rightarrow 0$, $s \rightarrow z$ y el valor de la derivada es igual a 0, lo que nos dice que el máximo de la función C_A está en el eje z. A partir de datos de v_0 y W_A dados, se puede plantear un modelo de regresión lineal para la determinación de D_{AB} .

$$\ln(C_A s) = \ln\left(\frac{W_A}{4\pi D_{AB}}\right) - v_0 \frac{(s-z)}{2D_{AB}}$$

En donde $s - z$ es la variable independiente y $C_A s$ la variable dependiente.

Aquí va la gráfica

3

Capítulo 3

Capa Límite con Difusión, Dispersión de Taylor y Flujo Turbulento con Difusión.

Este capítulo consta de las siguientes partes:

1. Capa límite.
2. Convección forzada con reacción química homogénea en una placa plana.
3. Convección forzada placa plana con transferencia de masa rápida.
4. Convección forzada placa plana con transferencia de masa lenta.
5. Dispersión de Tayloren flujo laminar.
6. Transferencia de masa con reacción de 1^{er} orden en flujo laminar turbulento.
7. Flujo turbulento en reacción de 2^o orden. Mezclado turbulento.

3.1. Capa límite binaria

Considerar un flujo binario a régimen permanente de un fluido binario. En la vecindad de la superficie sólida, las ecuaciones que gobiernan el proceso en ausencia de disipación viscosa son:

$$\text{Continuidad: } \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0 \quad (3.1)$$

$$\begin{aligned} \text{Movimiento: } \rho \left(v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) = & -\rho v_e \frac{\partial v_e}{\partial x} + \mu \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \\ & + \bar{\rho} g_x \beta (T - T_\infty) + \bar{\rho} g_x \bar{\zeta} (w_A - w_{A\infty}) \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$\text{Energía: } \rho \bar{C}_p \left(v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) = k \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} - \left(\frac{\bar{H}_A}{M_A} - \frac{\bar{H}_B}{M_B} \right) r_A \quad (3.3)$$

$$\text{Continuidad de A: } \rho \left(v_x \frac{\partial w_A}{\partial x} + v_y \frac{\partial w_A}{\partial y} \right) = \rho \mathcal{D}_{AB} \frac{\partial^2 w_A}{\partial y^2} + r_A \quad (3.4)$$

donde v_e es la velocidad en el límite externo de la capa límite de velocidad, T_∞ es la temperatura en el límite externo de la capa límite térmica y $w_{A\infty}$ es la concentración másica en el límite externo de la capa límite difusional. Los términos de flotación en la ec.(3.2) provienen del efecto térmico y del de concentración. En la ec.(3.3) se incluye el término de fuente de calor por reacción química. Las ecs.3.1-3.4 pueden ser integrados para dar

Ecs. continuidad+movimiento:

$$\begin{aligned} \mu \frac{du_x}{dy} \Big|_{y=0} &= \frac{d}{dx} \int_0^\infty \rho v_x (v_e - v_x) dy + \frac{dv_e}{dx} \int_0^\infty \rho (v_e - u_x) dy + \rho v_o v_e + \\ &\quad - \int_0^\infty \rho g_x \beta (T - T_\infty) dy - \int_0^\infty \rho g_x \bar{\zeta} (w_A - w_{A\infty}) dy \end{aligned} \quad (3.5)$$

Ecs. continuidad+energía:

$$k \frac{dT}{dy} \Big|_{y=0} = \frac{d}{dx} \int_0^\infty \rho v_x \bar{C}_p (T_\infty - T) dy - \int_0^\infty \left(\frac{\bar{H}_A}{M_A} - \frac{\bar{H}_B}{M_B} \right) r_A dy - \rho v_\infty \bar{C}_p (T_\infty - T_0) \quad (3.6)$$

Ecs. continuidad+continuidad de A:

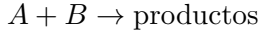
$$\rho \mathcal{D}_{AB} \frac{dw_A}{dy} \Big|_{y=0} = \frac{d}{dx} \int_0^\infty \rho u_x (w_{A\infty} - w_A) dy + \int_0^\infty r_A dy - \rho v_0 (w_{A\infty} - w_{A0}) \quad (3.7)$$

Estas ecuaciones son extensiones de los balances de von Kármán y de la integral de momentum expuestas en el libro 1, Cap. 5.

3.2. Convección forzada con...

3.2.1. Flujo Turbulento con Reacción de Segundo Orden. Mezclado Turbulento

Considerar dos casos en los que existen dos solutos A y B disueltos en un solvente S . En el primer caso no existe reacción, y en el segundo caso se produce la reacción:



En ambos casos se estudia el mezclado turbulento en dos sistemas: mezclador estático (a) y dinámico (b).

Figura 3.1: Mezclador estático (a) y mezclador dinámico (b)

El comportamiento de los solutos A y B se describe por medio de las siguientes ecuaciones de difusión:

$$\begin{aligned}\frac{\partial C_A}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla C_A &= \mathcal{D}_{AS} \nabla^2 C_A + R_A \\ \frac{\partial C_B}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla C_B &= \mathcal{D}_{BS} \nabla^2 C_B + R_B\end{aligned}\tag{3.8}$$

Condiciones de frontera:

$$\begin{aligned}C_A &= C_{A0}, \quad C_B = 0 \quad \text{para } z = 0, t = 0 \\ C_B &= C_{B0}, \quad C_A = 0 \quad \text{para } z = 0, t = 0\end{aligned}\tag{3.9}$$

Sin Reacción

Definiendo:

$$\Gamma = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}} = \frac{C_B}{C_{B0}}\tag{3.10}$$

Las ecuaciones 3.8 se reducen a:

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + v \cdot \nabla \Gamma = D_{is} \nabla^2 \Gamma\tag{3.11}$$

En las entradas (1) y (2):

$$\Gamma_1 = 0, \quad \Gamma_2 = 1$$

En flujo turbulento se propone que:

$$\Gamma = \bar{\Gamma} + \Gamma' \quad (3.12)$$

donde:

$$\bar{\Gamma} = \frac{C_{A0} - \bar{C}_A}{C_{A0}} = \frac{\bar{C}_B}{C_{B0}} \quad (3.13)$$

y Γ' (grado de ausencia de mezclado). Restando $\Gamma - \bar{\Gamma}$ y efectuando el cuadrático medio:

$$\left(\frac{C_A}{C_{A0}} \right)^2 - \left(\frac{\bar{C}_B}{C_{B0}} \right)^2 = d^2 \quad (3.14)$$

En donde d^2 es la función de decaimiento que tiende a cero a distancias z grandes o tiempos largos.

La administración de la función de decaimiento indica su dependencia funcional. Definiendo la longitud y velocidades características l_0 y v_0 , obtuvimos:

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + v_b \hat{\nabla} \Gamma = \frac{1}{ReSc} \hat{\nabla}^2 \Gamma \quad (3.15)$$

donde

$$\hat{t} = \frac{v_0 t}{l_0}, \quad \hat{v} = \frac{v}{v_0}, \quad \hat{\nabla} = l_0 \nabla, \quad Re = \frac{l_0 v_0}{\mu} \rho \quad (3.16)$$

En el caso de tanques de mezclado, l_0 es el diámetro del impulsor, $v_0 = l_0 N$ (N es la velocidad angular). En el caso del mezclado de dos corrientes de tubos concéntricos (HACER REFERENCIA AL DIAGRAMA DE ABAJO - FIG.3.9), la función de decaimiento resultante se grafica en función de la distancia axial. El mezclado a nivel molecular (micomezclado) se alcanza

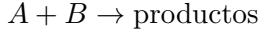
AQUI VA OTRO DIAGRAMA 3.9

En procesos industriales, normalmente $ReSc \sim 10^9$, por lo que la ecuación 3.15 se reduce a:

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + v_0 \hat{\nabla} \Gamma = 0 \quad (3.17)$$

Por lo que el grado de mezclado depende de \hat{t} y no de $ReSc$. Como $\hat{t} = Nt_{mix}$, el producto del tiempo de mezclado t_{mix} por la velocidad angular es constante, independiente de Re , o sea, $Nt_{mix} = K$, donde K depende de la geometría solamente.

Con Reacción



Definiendo

$$\Gamma_r = \frac{C_{A0} - (C_A - C_B)}{C_{A0} + C_{B0}} \quad (3.18)$$

Por la resta de las ecuaciones 3.8, la descripción del caso con reacción es la misma. Por ello:

$$\left[\frac{C_{A0} - (C_A - C_B)}{C_{A0} + C_{B0}} \right]_{\text{reac.}} = \left[\frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}} \cdot \frac{C_B}{C_{B0}} \right]_{\text{sin reac.}} \quad (3.19)$$

que tambien es válida para las fluctuaciones.

$$\left[\frac{C'_A - C'_B}{C_{A0} + C_{B0}} \right]_{\text{reac.}} = \left[\frac{C'_A}{C_{A0}} \right]_{\text{sin reac.}} \quad (3.20)$$

Esta ecuación sugiere que las fluctuaciones en C_A y C_B en problemas con reacción tienen lugar al mismo tiempo y escalas de distancia que los problemas sin reacción. Los casos particulares son:

a) Reacción rápida: La velocidad de la reacción es controlada por difusión de las especies. Durante la escala del micromezclado, en la que la difusión es lenta en comparación con la convección, el efecto de la reacción es pequeño. En este caso tenemos:

$$\left(\frac{C'_A}{C_{A0}} \right)_{\text{reac.}} = \left(\frac{C'_A}{C_{A0}} \right)_{\text{sin reac.}} \quad (3.21)$$

En la práctica, las reacciones rápidas son empleadas para determinar la eficiencia de los mezclados.

b) Reacciones lentas: Considerar el caso de reacciones de segundo orden irreversibles.

$$R_A = -k_2 C_A C_B \quad (3.22)$$

Promediando en el tiempo:

$$R_A = -k(\bar{C}_A \bar{C}_B + C'_A C'_B) \quad (3.23)$$

Esto indica que las fluctuaciones en C_A y C_B incrementan la velocidad de reacción. Por medio de un análisis de órdenes de magnitud, tenemos:

$$t_A = \frac{C_{A0}}{R_A} \sim \frac{1}{k_2 C_{B0}} \quad (3.24)$$

Para una reacción rápida $t_{mix} \gg t_A$

Para una reacción lenta $t_{mix} \ll t_A$

Apéndice A

a) Transferencia de masa lenta en una placa plana. Uso de la ecuación **HACER REFERENCIA A LA ECUACIÓN 3.46**

Estimación de la velocidad de evaporación, u_{A0} , como función de Sc , del secado de una placa plana porosa saturada de agua **HACER REFERENCIA A LA FIGURA 3.2** por medio de una corriente de aire bajo condiciones tal que $W_{A0} = 0.05$, $W_{A\infty} = 0.01$ y $Sc = 0.6$.

La ecuación **HACER REFERENCIA A LA ECUACIÓN 3.46** es:

$$\frac{j_{A0}}{\rho v_o(W_{A0} - W_{A\infty})} Sc^{2/3} = 0.332 \sqrt{\frac{\nu}{v_{\infty} x}}$$

Por medio de las ecuaciones **EC 1.24 Y 1.26**: