

# Proyecto Personal 2

## Fenómenos de Transferencia

**Entrega: 27/10/2025**

Leonardo Garro Mena

### Resumen

Con la siguiente asignación se pretende que usted se familiarice con el uso de los modelos para la transferencia de masa difusiva, reactiva y convectiva y los aplique, de manera acoplada, a un caso específico utilizando métodos numéricos.

---

### Introducción

El monóxido de carbono (CO) es uno de los contaminantes criterio establecidos en el Reglamento de Calidad del Aire de Costa Rica (Decreto Ejecutivo N.º 39951-S). Su presencia en la atmósfera es el resultado de procesos de combustión incompleta en motores de combustión interna, calderas y hornos industriales. En concentraciones elevadas, el CO representa un riesgo severo para la salud humana, ya que se combina con la hemoglobina y reduce la capacidad del cuerpo para transportar oxígeno.

El CO generado, por ejemplo, por los motores de combustión, es tratado mediante sistemas catalíticos, buscando reducir la concentración de CO antes de su liberación a la atmósfera. Estos sistemas utilizan catalizadores sólidos, donde la reacción de oxidación del CO a CO<sub>2</sub> se produce en la superficie del pellet poroso.

Desde el punto de vista ingenieril, el estudio de la transferencia de masa y la reacción química dentro de un pellet catalítico permite evaluar la eficiencia de la conversión, identificar limitaciones difusivas internas y comprender el papel de los defectos estructurales en la distribución de la concentración del reactivo. En este proyecto proponemos un modelo bidimensional (2D) de un pellet cilíndrico con un defecto interno donde no se lleva a cabo la reacción química, con el objetivo de analizar la interacción entre difusión y reacción en condiciones realistas de operación.

### Descripción del problema

Se considera la sección transversal de un pellet cilíndrico de radio  $R$ . En la región activa del pellet, la conservación de masa para el CO con difusión efectiva y cinética aparente de primer orden se escribe como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_{\text{eff}} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 C}{\partial \theta^2} \right] - k_{(\text{app})} C$$

En la región defectuosa (sin actividad catalítica), se anula el término reactivo:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_{\text{eff}} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 C}{\partial \theta^2} \right]$$

En condiciones de exceso de oxígeno y coberturas moderadas sobre catalizadores de platino, la reacción global de oxidación del CO puede representarse con una ley **aparente** de primer orden en CO (esto es una aproximación, en el curso de Cinética y reactores químicos se profundizará en modelos más elaborados):

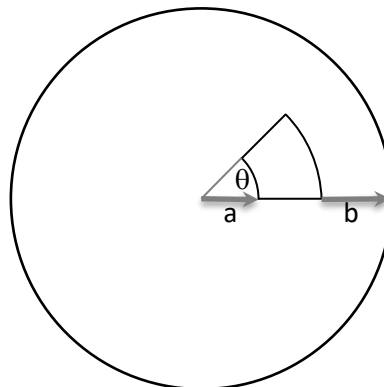
$$-r_{\text{CO}} = k_{\text{ap}} C_{\text{CO}}$$

$$k_{\text{ap}} = k_0 \left( -\frac{E_a}{RT} \right)$$

Puede utilizar los siguientes valores:

$$k_0 = 2.3 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$$

$$E_a = 100 \text{ kJ mol}^{-1}$$



Sección transversal

**Figura 1.** Corte transversal del pellet, el cual tiene un radio R, y un defecto en el cual no hay reacción química, que va desde  $R = 1/3$  hasta  $R = 2/3$  (entre secciones a y b), y desde  $\theta = 0$  hasta  $\theta = 45^\circ$ .

En este sistema el flujo de gas fluye constantemente alrededor del pellet, ingresa por difusión en su interior poroso, mientras El CO reacciona (excepto en el área defectuosa).

Para este caso asuma lo siguiente:

1. La concentración de CO en la corriente gaseosa es de 800 ppm.
2. En el tiempo  $t = 0$ , el pellet está libre de CO
3. La temperatura de la corriente gaseosa es de 400 °C.
4. Las dimensiones del pellet de catalizador son: diámetro = 4 mm (la longitud axial se considera, desde el punto de vista del fenómeno en estudio, infinita)
5. La velocidad del gas alrededor del pellet es de 0,3 m/s
6. La transferencia de masa no varía con el eje axial, por lo que esto se reduce a un problema 2D, como se presenta en la Figura 1. Esto es por la condición de infinitud del sistema, el cual, por supuesto, es finito, pero al ser mucho más largo que su diámetro es una suposición relativamente adecuada.
7. Hay muchas otras consideraciones que usted debe hacer, siempre debe de utilizar el criterio ingenieril y termodinámico. En caso de duda consulte a su profesor

## 1 Por hacer

Usted debe encontrar la distribución de concentración en el área transversal total del pellet, para ello:

- 1.1 Desarrolle una introducción en la que describe a profundidad este tipo de sistemas, dónde se utilizan, por qué son importantes, qué implicaciones ambientales tienen y toda la información necesaria para darle contexto al proyecto, citando de manera adecuada las fuentes (artículos científicos) y utilizando un mínimo de 10 fuentes (5 pts).
- 1.2 Desarrolle un algoritmo de cálculo completo y detallado para resolver el presente problema. Junto con el algoritmo de cálculo, presente una metodología, es decir, una descripción detallada de los pasos a seguir para resolver el problema, incluyendo el uso de LLMs en caso de que se apoye en ellos (10 pts).
- 1.3 Partiendo de la ecuación para la transferencia de masa estado no estacionario en las coordenadas brindadas, discretice dicha ecuación utilizando aproximaciones para las derivadas de tal forma que obtenga una expresión que pueda utilizar para resolver el problema (5 pts).

### Criterios de evaluación

10 pts: desarrollo completo y sin errores

8 pts desarrollo completo con errores menores

6 pts desarrollo completo con errores graves

4 pts desarrollo incompleto

2 pts comprende el problema, pero avanza poco en su solución

- 1.4 Liste los parámetros y variables que no le han sido dados en este enunciado y aproxímelos con base en alguna referencia confiable (este apartado es de investigación, usted debe citar las fuentes). Aquí usted necesita buscar valores apropiados que necesite para resolver el problema. Además, debe utilizar criterio ingenieril cuando sea pertinente (5 pts).
- 1.5 Mediante Python, programe el método numérico y encuentre el tiempo que tarda el sistema en llegar al estado estacionario partiendo de las condiciones iniciales. Considere que el sistema llega al estado estacionario cuando cumple con el criterio que usted, con base en aspectos técnicos y termodinámicos, definió. Presente, además, gráficos de superficie mostrando el perfil de concentración en el sistema al inicio (tiempo cero), cuando ha alcanzado el criterio de estado estacionario y al 50 % del tiempo para el estado estacionario. Además, presente gráficos intermedios u otro tipo de gráficos que considere convenientes para la discusión de los resultados (10 pts).

#### Criterios de evaluación

10 pts: desarrollo completo y sin errores (gráficos con la tendencia, con sentido físico y sin incoherencias)

8 pts desarrollo completo con errores menores

6 pts desarrollo completo con errores graves

4 pts desarrollo incompleto

2 pts comprende el problema pero avanza poco en su solución

- 1.5.1 Discuta las implicaciones del uso de este tipo de materiales, analice los gráficos, explique sus implicaciones, explique los perfiles de concentración. En general, analice en profundidad los resultados siguiendo las instrucciones que hemos visto en la clase y la práctica (10 pts).

#### Criterios de evaluación

10 pts: discute ampliamente. Cita artículos y compara los resultados. Analiza las implicaciones del defecto y todos los detalles que se encuentran en los resultados.

8 pts cita y discute, pero deja elementos sin analizar

6 pts discute los resultados pero no cita fuentes fiables o cita pero discute de forma muy limitada

4 pts no cita ni discute a profundidad

2 pts comprende el problema pero avanza poco en su solución

- 1.6 Presente el código que utilizó para la resolución, debidamente documentado y ordenado, con las tabulaciones y el formato que se ha visto en los ejemplos de clase (6 pts)

Acá se evalúa el formato del código. La funcionalidad ya se demostró en el cuerpo del documento

Se rebaja 0,5 por cada sección que no esté debidamente documentada o con el formato adecuado según las buenas prácticas que se han visto en clase.

## 2 Lo que deben presentar

Deberá entregar un documento en formato pdf en el link habilitado para ello en mediación virtual.

El nombre del documento debe ser el nombre de ustedes, seguido del apellido, la inicial y número de la actividad que mandan (E para entregables (tareas) y P para proyectos). Ejemplo para la siguiente entrega: Nombre\_Apellido\_P2.

El documento debe estar correctamente escrito mediante un procesador de texto, deben utilizarse unidades del SI y correcto español. Además, el desarrollo de la resolución debe ser lógico, fluido, coherente y coheso.

El código de Python debe integrarse al documento como un anexo y debe estar documentado, ordenado y tabulado. Además, el archivo de código debe subirse junto con el pdf del informe.

NOTA 1: Explícite las suposiciones que realice, así como los pasos que desarrolla para llegar a una solución.

NOTA 2: Interprete y comente sus resultados.

NOTA 3: Hay muchos detalles que se deben analizar para resolver este proyecto, durante la resolución les estaré acompañando, facilitando recursos y brindando ejemplos adicionales, la idea es que lo resolvamos en conjunto.

**NOTA: Si para ayudarse en la solución utiliza un gran modelo de lenguaje u otro modelo de inteligencia artificial, tome en cuenta que esto es solo una herramienta, usted es el único ente responsable por lo que presenta y debe incluirlo en la metodología (al algoritmo de cálculo).**

**NOTA2: El formato para la presentación es como el que hemos visto en clase, debe tener una pequeña introducción y secciones donde se va desarrollando lo solicitado. Debe incluir, además, una metodología, como se indica en uno de los puntos.**