

Transferencia de masa

OCTAVIO MANERO BRITO

24 de junio de 2025

Índice general

1. Capítulo 1	3
1.1. Definiciones	3
1.2. Ecuaciones de Conservación	5
1.3. Ecuación constitutiva: Ley de Fick	6
1.4. Balance de Masa	6
1.5. Cálculo de la difusividad	7
1.5.1. Teoría de la difusión de gases a baja densidad.	7
1.5.2. Dependencia de la difusividad de la presión y temperatura (PyT)	10
1.6. Tarea 1	13
1.7. Apéndice C	17
2. Balances Diferenciales	23
2.1. Difusión en medios estacionarios	23
2.1.1. Modelo de la película en transferencia de masa	25
2.1.2. Difusión con interfase móvil	25
2.1.3. Determinación de la difusividad	26
2.2. Difusión-Convección de masa	27
2.2.1. Convección forzada. Absorción de gas A en una película descendente de líquido B	27
2.2.2. Disolución de sólidos en una película descendente	32
2.2.3. Perfil de concentración en un reactor tubular	34
2.3. Difusión con reacción química homogénea	35
2.3.1. Absorción de gas con reacción química en un tanque de agitación	37
2.4. Difusión con reacción química heterogénea	39
2.4.1. Difusión con reacción heterogénea lenta	41
2.5. Difusión con reacción química en medios porosos	42
3. Capítulo 3	59
3.1. Capa límite binaria	59

3.2. Convección forzada con reacción química homogénea en una placa plana	60
3.3. Convección forzada en placa plana con transferencia de masa rápida	64
3.4. Convección forzada en placa plana con transferencia de masa lenta	69
3.5. Difusión de Taylor en flujo laminar	69
3.6. Transferencia de masa con reacción de 1 ^{er} orden en flujo turbulento	69
3.7. Flujo Turbulento con Reacción de Segundo Orden. Mezclado Turbulento	69
3.7.1. Sin Reacción	70
3.7.2. Con Reacción	72

Prefacio

1

Capitulo 1

Introducción: Consta de las siguientes secciones:

1. Definiciones.
2. Ecuaciones de Conservación.
3. Ecuacione Constitutiva. Ley de Fick.
4. Balance de Masa.
5. Calculo de la Difusividad.

1.1. Definiciones

- ρ_i : Concentración másica de la especie i (masa de i/volumen)
- $C_i = \frac{\rho_i}{\mu_i}$: Concentración molar de la especie i (moles/volumen)
- $w_i = \frac{\rho_i}{\rho}$: fracción masica de i (ρ es la densidad de la solución)
- $x_i = \frac{C_i}{C}$: fracción molar (C es la densidad molar total de la solución)
- \underline{v}_i : velocidad de la especie i con respecto a un sistema de coordenadas fijo.
La velocidad promedio local \underline{v} se define como:

$$\underline{v} = \frac{\sum_{i=1}^n \rho_i \underline{v}_i}{\sum_{j=1}^n \rho_j} \quad (1.1)$$

$\rho \underline{v}$ = flux de masa. La velocidad promedio molar es:

$$\underline{v}^* = \frac{\sum_{i=1}^n C_i \underline{v}_i}{\sum_{i=1}^n C_i} \quad (1.2)$$

$C\underline{v}$ = flux molar de masa.

$$\underline{v}_i - \underline{v} = \text{velocidad de difusión de } i \text{ con respecto a } v. \quad (1.3)$$

$$\underline{v}_i - \underline{v}^* = \text{velocidad de difusión de } i \text{ con respecto a } \vec{v}^*. \quad (1.4)$$

Con respecto a ejes estacionarios, los flujos de masa se definen de la siguiente manera:

$$\underline{n}_i = \rho_i \underline{v}_i \quad \text{másico} \quad (1.5)$$

$$\underline{N}_i = C_i \underline{v}_i \quad \text{molar} \quad (1.6)$$

Con respecto a las velocidades promedio:

$$\underline{j}_i = \rho_i (\underline{v}_i - \underline{v}) \quad (1.7)$$

$$\underline{J}_i = C_i (\underline{v}_i - \underline{v}) \quad (1.8)$$

Con respecto a las velocidades molares promedio:

$$\underline{j}_i^* = \rho_i (\underline{v}_i - \underline{v}^*) \quad \text{másico} \quad (1.9)$$

$$\underline{J}_i^* = C_i (\underline{v}_i - \underline{v}^*) \quad \text{molar} \quad (1.10)$$

Relaciones entre los flujos molares. A partir de las ecs. **1.2** y **1.10** :

$$\underline{J}_i^* = C_i (\underline{v}_i - \underline{v}^*) = C_i \underline{v}_i^* - \frac{C_i}{C} \sum_{j=1}^n C_j \underline{v}_j \quad (1.11)$$

Por las relaciones (ecs. **1.6** y x_i):

$$\underline{J}_i^* = \underline{v}_i - x_i \sum_{j=1}^n x_j \underline{v}_j \quad (1.12)$$

Para un sistema binario $\underline{J}_A^* = \underline{N}_A - x_A (\underline{N}_A + \underline{N}_B)$

Para los fluxes másicos con respecto a \underline{v} tenemos que: $\underline{J}_A = \underline{n}_A - w_A (\underline{n}_A + \underline{n}_B)$

A partir de la ec. **1.12** se obtiene que:

$$\sum_{i=1}^n \underline{J}_i^* = 0 \quad (1.13)$$

y para una mezcla binaria se obtiene:

$$\underline{J}_A^* + \underline{J}_B^* = 0 \quad (1.14)$$

Igualmente, la ec. **1.1** puede ser escrita como:

$$\rho \underline{v} = \rho_A \underline{v}_A + \rho_B \underline{v}_B = \underline{n}_B + \underline{n}_B$$

y la ec. **1.7** puede ser expresada como:

$$\underline{j}_A = \rho_A \underline{v}_A + \rho_A \underline{v} \Rightarrow \underline{n}_A = \underline{j}_A + \rho_A \underline{v}$$

1.2. Ecuaciones de Conservación

Mezclas Binarias

La ecuación de continuidad para el componente A en una mezcla binaria está dada por la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot \underline{n}_A = r_A \quad (1.15)$$

donde $\underline{n}_A = \rho_A \underline{v}_A$ es el flujo de masa. Similarmente, para el componente B :

$$\frac{\partial \rho_B}{\partial t} + \nabla \cdot \underline{n}_B = r_B \quad (1.16)$$

La adición de **1.15** y **1.16** (en donde $\underline{n}_A + \underline{n}_B = \rho \underline{v}$ y $r_A + r_B = 0$)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \underline{v} = 0 \quad (1.17)$$

que es la ecuación de continuidad o conservación de masa de la mezcla. En caso en que ρ es constante:

$$\nabla \cdot \underline{v} = 0 \quad (1.18)$$

En términos de las variables molares:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + (\nabla \cdot \underline{N}_A) = R_A \quad (1.19)$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} + \nabla \cdot \underline{N}_B = R_B \quad (1.20)$$

Adicionando:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot C \underline{v}^* = R_A + R_B \quad (1.21)$$

La ecuación **1.21** supone que $\underline{N}_A + \underline{N}_B = C \underline{v}^*$ y $R_A + R_B \neq 0$ si los moles no se conservan. Para un fluido de C constante:

$$\nabla \cdot \underline{v}^* = \frac{1}{C}(R_A + R_B) \quad (1.22)$$

En el Apéndice A, la ecuación **1.19** se expresa en los tres sistemas de coordenadas.

1.3. Ecuación constitutiva: Ley de Fick

Definiendo la difusividad másica $\mathcal{D}_{AB} = \mathcal{D}_{BA}$ en un sistema binario, la expresión del flux de masa es:

$$\underline{J}_A^* = -C \mathcal{D}_{AB} \nabla x_A \quad (1.23)$$

Análogamente,

$$\underline{j}_A = -\rho \mathcal{D}_{AB} \nabla w_A \quad (1.24)$$

Esta es la primera ley de Fick de difusión. En términos de N_A relativo a coordenadas estacionarias,

$$\underline{N}_A = x_A(\underline{N}_A + \underline{N}_B) - C \mathcal{D}_{AB} \nabla x_A \quad (1.25)$$

$$\underline{n}_A = w_A(\underline{n}_A + \underline{n}_B) - \rho \mathcal{D}_{AB} \nabla w_A \quad (1.26)$$

1.4. Balance de Masa

Sustituyendo la ecuación **1.26** en la ecuación **1.15** se obtiene:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_A \underline{v} = \nabla \cdot \rho \mathcal{D}_{AB} \nabla w_A + r_A \quad (1.27)$$

Similarmente, sustituyendo la ecuación **1.25** en la ecuación **1.19** se obtiene:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \nabla \cdot C_A \underline{v}^* = \nabla \cdot C \mathcal{D}_{AB} \nabla x_A + R_A \quad (1.28)$$

Si ρ y \mathcal{D}_{AB} son constantes, entonces:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \rho(\nabla \cdot \underline{v}) + \underline{v} \cdot \nabla \rho_A = \mathcal{D}_{AB} \nabla^2 \rho_A + r_A \quad (1.29)$$

donde $\nabla \cdot v = 0$ (Ec. 1.18). Dividiendo 1.29 entre M se obtiene:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla C_A = \mathcal{D}_{AB} \nabla^2 C_A + R_A \quad (1.30)$$

Esta ecuación se emplea comúnmente en soluciones diluidas líquidas. Si C y \mathcal{D}_{AB} son constantes, la ecuación 1.28 se convierte en:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + C_A(\nabla \cdot \underline{v}^*) + \underline{v}^* \cdot \nabla C_A = \mathcal{D}_{AB} \nabla^2 C_A + R_A \quad (1.31)$$

Como: $\nabla \cdot \underline{v}^* = \frac{1}{c}(R_A + R_B)$ (Ver ec. 1.21)

Entonces:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \underline{v}^* \cdot \nabla C_A = \mathcal{D}_{AB} \nabla^2 C_A + R_A - \frac{C_A}{C}(R_A + R_B) \quad (1.32)$$

Si la velocidad es cero y no hay reacción química, se obtiene:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \mathcal{D}_{AB} \nabla^2 C_A \quad (1.33)$$

1.5. Cálculo de la difusividad

1.5.1. Teoría de la difusión de gases a baja densidad.

Considerar un gas con moléculas A y A* que tienen la misma masa m_A y el mismo tamaño y forma. Se plantea determinar la difusividad másica \mathcal{D}_{AA^*} de un sistema de moléculas rígidas de diámetro d_A . Utilizando las definiciones obtenidas en el libro y en la teoría cinética de gases:

Velocidad promedio:

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}} \quad (1.34)$$

k_B = Constante de Boltzman

Frecuencia de colisiones:

$$Z = \frac{1}{4} n \langle v \rangle \quad (1.35)$$

Trayectoria libre media

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2} \pi d^2 n} \quad (1.36)$$

Dado un dominio que contiene planos con encuadraciones diferentes separados por una distancia a , la relación entre a y λ es:

$$a = \frac{2}{3}\lambda \quad (1.37)$$

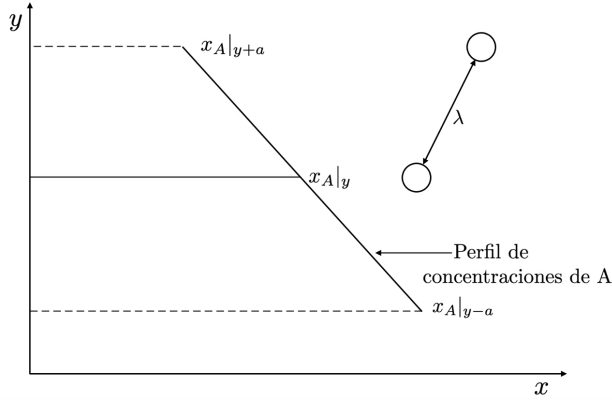


Figura 1.1: Transferencia molecular de A del plano $(y-a)$ al plano (y)

El flux de masa de A efectivo entre el plano $(y+a)$ y el plano $(y-a)$ es:

$$N_{A_y} = \frac{1}{\vec{N}} \left[nx_A v_y^* \Big|_y + \frac{1}{4} nx_A \langle v \rangle \Big|_{y-a} - \frac{1}{4} nx_A \langle v \rangle \Big|_{y+a} \right] \quad (1.38)$$

Si el perfil de concentraciones es lineal, entonces:

$$x_A \Big|_{y-a} = x_A \Big|_{y-a} - \frac{2}{3} \lambda \frac{dx_A}{dy} \quad (1.39)$$

$$x_A \Big|_{y+a} = x_A \Big|_{y+a} + \frac{2}{3} \lambda \frac{dx_A}{dy} \quad (1.40)$$

Ya que $Cv^* = N_A + N_B$, las ecs. **1.37**, **1.38**, **1.39** y **1.40** se combinan para dar:

$$N_{A_y} = x_A \left(N_{A_y} + N_{A_y}^* \right) - \frac{2}{3} C \langle v \rangle \lambda \frac{dx_A}{dy} \quad (1.41)$$

De acuerdo con la ley de Fick:

$$\mathcal{D}_{AB} = \frac{1}{3} \langle v \rangle \lambda \quad (1.42)$$

Utilizando la ley de los gases ideales ($P = CRT = nk_B T$) y las expresiones para $\langle v \rangle$ y λ , se obtiene para la autodifusión:

$$\mathcal{D}_{AA}^* = \frac{2}{3} \left(\frac{k_B^3}{\pi^3 m_A} \right)^{1/2} \frac{T^{3/2}}{P d_A^2} \quad (1.43)$$

La ecuación **1.42** representa la difusividad másica de una mezcla de dos especies de esferas rígidas de igual masa y diámetro. En el caso de diferentes masas y diámetros, la ecuación **1.43** se generaliza:

$$\mathcal{D}_{AB} = \frac{2}{3} \left(\frac{k_B^3}{\pi^3} \right) \left(\frac{1}{2m_A} + \frac{1}{2m_B} \right)^{1/2} \frac{T^{3/2}}{P \left(\frac{d_A + d_B}{2} \right)^2} \quad (1.44)$$

La teoría de Chapman-Enskog proporciona expresiones más exactas del coeficiente de difusión:

$$c\mathcal{D}_{AB} = (2.625 \times 10^{-5}) \frac{\sqrt{T \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)}}{\sigma_{AB}^2 \Omega_{\mathcal{D}_{AB}}} \quad (1.45)$$

Si C está dada por la ley de los gases ideales, entonces:

$$\mathcal{D}_{AB} = 0.00186 \sqrt{T^3 \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)} \frac{1}{P \sigma_{AB}^2 \Omega_{\mathcal{D}_{AB}}} \quad (1.46)$$

$\Omega_{\mathcal{D}_{AB}}$ es una función adimensional de la temperatura y del potencial intermolecular entre moléculas A y B . Este potencial se aproxima por el de Lennard-Jones:

$$\varphi_{AB} = 4\epsilon_{AB} \left[\left(\frac{\sigma_{AB}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{AB}}{r} \right)^6 \right] \quad (1.47)$$

En el Apéndice C se pueden encontrar tablas de $\Omega_{\mathcal{D}_{AB}}$ en función de k_B/ϵ_{AB} . Para esferas rígidas, $\Omega_{\mathcal{D}_{AB}} = 1$. En mezclas binarias:

$$\sigma_{AB} = \frac{1}{2} (\sigma_A + \sigma_B) \quad (1.48)$$

$$\epsilon_{AB} = \sqrt{\epsilon_A \epsilon_B} \quad (1.49)$$

Las constantes σ_{AB} y ϵ_{AB} pueden ser identificadas en el Apéndice. En el caso de pares isotópicos: $\sigma_{AA^*} = \sigma_A = \sigma_A^*$ y $\epsilon_{AA^*} = \epsilon_A = \epsilon_A^*$.

Si $M_A = M_B$, la ecuación 1.45 se reduce a:

$$C\mathcal{D}_{AA^*} = 3.2 \times 10^{-5} \sqrt{\frac{T}{M_A}} \frac{1}{\sigma_A \Omega_{\mathcal{D}_{AA^*}}} \quad (1.50)$$

Definiendo el número de Schmidt:

$$Sc = \frac{\mu/\rho}{\mathcal{D}_{AB}} = \frac{\nu}{\mathcal{D}_{AB}} \quad (0.2 - 5 \text{ en gases}) \quad (1.51)$$

Tenemos que:

$$\frac{\nu}{\mathcal{D}_{AA^*}} = \frac{5}{6} \frac{\Omega_{\mathcal{D}_{AA^*}}}{\Omega_\mu} \quad (1.52)$$

Por lo que: $\mathcal{D}_{AA^*} \approx 1.32\nu$

1.5.2. Dependencia de la difusividad de la presión y temperatura (PyT)

En sistemas de mezclas de gases a bajas presiones, \mathcal{D}_{AB} es inversamente proporcional a P, directamente proporcional a T e independiente de la concentración de un par de gases. Utilizando estados correspondientes y la teoría cinética, \mathcal{D}_{AB} está dado por la siguiente ecuación:

$$\frac{P\mathcal{D}_{AB}}{(P_{C_A}P_{C_B})^{1/5}(T_{C_B}T_{C_B})^{5/12}\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}\right)^{1/2}} = a \left(\frac{T}{T_{C_A}T_{C_B}}\right)^b \quad (1.53)$$

Gases no polares: $a = 2.745 \times 10^{-4}$ y $b = 1.823$

H₂O + gas no polar: $a = 3.64 \times 10^{-4}$ y $b = 2.334$

En la figura 1.51 se grafica $C\mathcal{D}_{AA^*}$ como función de T_R y P_R (T y P reducidas), $(C\mathcal{D}_{AA^*})_R = \frac{C\mathcal{D}_{AA^*}}{(C\mathcal{D}_{AA^*})_c}$. ((\mathcal{D})_c es la cantidad crítica)

$(C\mathcal{D}_{AA^*})_c$ coeficiente de difusión crítico puede ser estimado por la siguiente ecuación:

$$(C\mathcal{D}_{AA^*})_c = 2.96 \times 10^{-6} \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_{A^*}} \right)^{1/2} \frac{P_{cA}^{1/3}}{T_{cA}^{1/6}} \quad (1.54)$$

En el caso de gases A y B , la ecuación **1.54** puede reducirse a la aproximación siguiente:

$$(C\mathcal{D}_{AA^*}) = 2.96 \times 10^{-6} \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{1/2} \frac{(P_{cA}P_{cB})^{1/3}}{(T_{cA}T_{cB})^{1/12}} \quad (1.55)$$

Correspondientemente, en el caso de A y B en la figura **1.51** $T_R = \frac{T}{\sqrt{T_{cA}T_{cB}}}$ y $P_R = \frac{P}{\sqrt{P_{cA}P_{cB}}}$

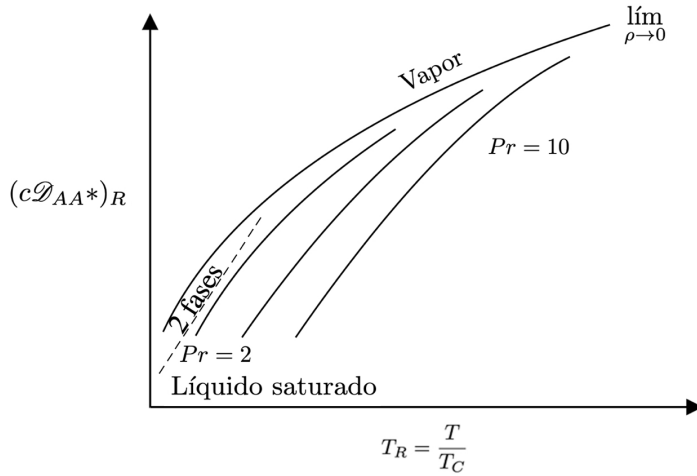


Figura 1.51: Mezclador estático (a) y mezclador dinámico (b)

Teoría de la difusión en líquidos binarios

La teoría hidrodinámica se basa en la ecuación de Nernst-Einstein, que postula que la difusividad de una partícula A (el soluto) en un medio estacionario B está expresado como:

$$\mathcal{D}_{AB} = k_B T \frac{U_A}{F_A} \quad (1.56)$$

en donde U_A/F_A es la movilidad de la partícula A . Si A es esférica y además existe deslizamiento en la interfase sólido-fluido, se obtiene:

$$\frac{U_A}{F_A} = \frac{(3\mu_B + R_A\beta_{AB})}{(2\mu_B + R_A\beta_{AB})} \frac{1}{6\pi\mu_B R_A} \quad (1.57)$$

en donde μ_B es la viscosidad del solvente, R_A es el radio de la partícula y β_{AB} es el coeficiente de fricción interfacial. Hay 2 casos:

a)-. ($\beta_{AB} = \infty$) (sin deslizamiento). En este caso, la ecuación **1.56** se reduce a la ecuación de Stokes-Einstein:

$$\mathcal{D}_{AB} = \frac{k_B T}{6\pi\mu_B R_A} \quad (1.58)$$

b)-. $\beta_{AB} = 0$ (con deslizamiento).

En este caso, la ecuación **1.56** se reduce a:

$$\mathcal{D}_{AB} = \frac{k_B T}{4\pi\mu_B R_A} \quad (1.59)$$

Si A y B son iguales, en un arreglo cúbico se obtiene:

$$2R_A = \left(\frac{\tilde{V}_A}{\tilde{N}_A} \right)^{1/3} \text{ y luego:}$$

$$\mathcal{D}_{AB} = \frac{k_B T}{2\pi\mu_A} \left(\frac{\tilde{V}_A}{\tilde{N}_A} \right)^{1/3} \quad (1.60)$$

La teoría de Eyring del "estado activado" postula un estado "cuasicristalino" del líquido. Esta teoría deduce el siguiente resultado dentro del contexto de mecánica estadística:

$$\frac{\mathcal{D}_{AB}\mu_B}{(\mathcal{D}_{AB}\mu_B)_{X_A \rightarrow 0}} = \left[1 + X_A \frac{\tilde{V}_A}{\tilde{V}_B} \right] \left(\frac{\partial \ln \gamma_A}{dX_A} \right)_{T,P} \quad (1.61)$$

en donde \tilde{V}_A y \tilde{V}_B son los volúmenes parciales molares de A y B, γ_A es el coeficiente de actividad de A y \mathcal{D}_{AB}, μ_A son la difusividad y viscosidad de la mezcla.

Expresiones empíricas sugeridas para situaciones reales han sido propuestas. Por ejemplo, la ec. de Wilke-Chang:

$$\mathcal{D}_{AB} = 7.4 \times 10^{-8} \frac{\sqrt{\psi_B M_B}}{\mu \tilde{V}_A^{0.6}} T \quad (1.62)$$

donde ψ_B es el "parametro de asociación" del solvente.

$\psi_B = 2.6$ para agua y 1.9 para metanol. $\psi_B = 1$ para solventes no asociativos. $\tilde{V}_A = M_A/\rho$ y μ esta dada en cp.

1.6. Tarea 1

Bird et all 17.A

1.- Predicción binaria a baja densidad. Estimar \mathcal{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]	\mathcal{D}_{AB} [cm^2/s]	μ [cP]	\hat{V} [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 $\rho\mathcal{D}_{AB}$ para una mezcla equimolar de N_2 y C_2H_6 a 288.2 K y 40 atm.

a)- Usar el valor de \mathcal{D}_{AB} a 1 atm de $0.148 \text{ cm}^2/s$ a T=298.2 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 \mathcal{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, 1.83×10^{-4} poises; 0.25, 1.64×10^{-4} poises; 0.5, 1.5×10^{-4} poises; 0.75, 1.39×10^{-4} poises; 1, 1.31×10^{-4} poises

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

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 $p\mathcal{D}_{AB}$ de una mezcla de 80 % mol de CH_4 Y 20 % mol de C_2H_6 a 313 K y 136 atm es 6×10^{-6} gmol/cms. Calcular $p\mathcal{D}_{AB}$ para esa mezcla a 136 atm y 351 K usando la Fig. **1.51**.

Respuesta 6.3×10^{-6} gmol/cms. Observado 6.33×10^{-6} 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/cm³ en el punto de ebullición.
- b)- La difusividad de una solución diluida de metanol a 15°C es 1.28×10^{-5} cm²/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} cm²/s.

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:

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

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:

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

1.7. 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 M	σ (Å)	ϵ/K (K)	Ref.	T_c (K)	p_c (atm)	\tilde{V}_c (cm ³ /g-mole)	μ_c (g/cm-s $\times 10^6$) k_c (cal/cm-s $\cdot K \times 10^5$)
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
N ₂ O	44.012	3.879	220.	a	309.7	71.7	96.3	332. 131.

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.	<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)
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. —
n-C ₉ H ₂₀	128.26	7.463	351.	b	594.6	22.6	548.	265. —

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)	
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 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)
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

Balances Diferenciales

Este capítulo consta de las siguientes partes:

1. Difusión en medios estacionarios.
2. Difusión-Convección de masa.
3. Difusión con reacción química homogénea.
4. Difusión con reacción química heterogénea.
5. Difusión con reacción química en medios porosos.

2.1. Difusión en medios estacionarios

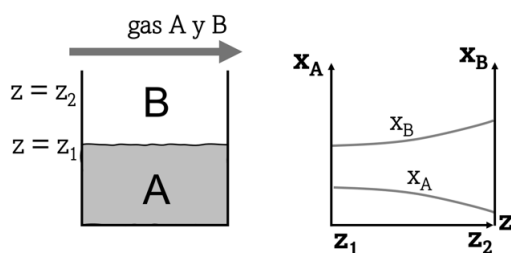


Figura 2.1: Columna de difusión. B no está en movimiento

A régimen permanente, la ec. **1.19** se reduce a:

$$\nabla \cdot \underline{N}_A = 0 \quad (2.1)$$

La ecuación **1.25** cuando $\underline{N}_B = 0$ se expresa como:

$$\underline{N_A}(1 - x_A) = -c\mathcal{D}_{AB}\nabla x_A \quad (2.2)$$

Si la difusión se da en una sola dirección (z), **2.1** y **2.2** requieren que:

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{c\mathcal{D}_{AB}}{1 - x_A} \frac{dx_A}{dz} \right) = 0 \quad (2.3)$$

Integrando con respecto a z

$$\frac{1}{1 - x_A} \frac{dx_A}{dz} = C_1$$

Integrando de nuevo:

$$-\ln(1 - x_A) = C_1 z + C_2 \quad (2.4)$$

Condiciones de frontera

$$\begin{cases} x_A|_{z=z_1} = x_{A1} \\ x_A|_{z=z_2} = x_{A2} \end{cases} \quad (2.5)$$

Se obtiene el siguiente perfil de concentraciones:

$$\frac{1 - x_A}{1 - x_{A1}} = \left(\frac{1 - x_{A2}}{1 - x_{A1}} \right)^{\frac{z - z_1}{z_2 - z_1}} \quad 1 - x_A = x_B \quad (2.6)$$

El flux de masa es:

$$N_{Az}|_{z=z_1} = \frac{-c\mathcal{D}_{AB}}{1 - x_A} \frac{dx_A}{dz} \Big|_{z=z_1} = \frac{c\mathcal{D}_{AB}}{x_B} \frac{dx_B}{dz} \Big|_{z=z_1} = \frac{c\mathcal{D}_{AB}}{z_2 - z_1} \ln \frac{x_{B2}}{x_{B1}} \quad (2.7)$$

que también puede ser expresado como:

$$N_{Az}|_{z=z_1} = \frac{c\mathcal{D}_{AB}}{(x_B)_{\ln}} \frac{(x_{A1} - x_{A2})}{z_2 - z_1} \quad (2.8)$$

donde

$$(x_B)_{\ln} = \frac{x_{B2} - x_{B1}}{\ln(x_{B2}/x_{B1})} \quad (2.9)$$

En términos de las presiones, la ec. (2.8) se puede expresar:

$$N_{Az}|_{z=z_1} = p \frac{\mathcal{D}_{AB}/RT}{z_2 - z_1} \ln \left(\frac{p_{B2}}{p_{B1}} \right) = p \frac{\mathcal{D}_{AB}/RT}{(p_B)_{\ln}} \frac{p_{A1} - p_{A2}}{z_2 - z_1} \quad (2.10)$$

2.1.1. Modelo de la película en transferencia de masa

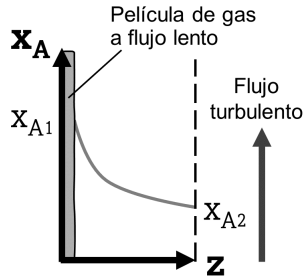


Figura 2.2: En este modelo, dentro de la película se produce la difusión de masa dentro de un medio a flujo lento.

2.1.2. Difusión con interfase movable

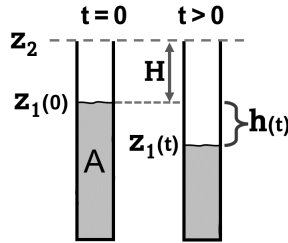


Figura 2.3: Evaporación con difusión cuasiestática. La mezcla de gases con concentración x_{A2} fluye arriba de los tubos.

Primero, se iguala la velocidad de evaporación de A con la velocidad a la que A entra en la fase gas.

$$-\frac{p_A}{M_A} \frac{Sdz}{dt} = \frac{c\mathcal{D}_{AB}}{(x_B)_{\ln}} \frac{x_{A1} - x_{A2}}{z_2 - z_1} S \quad (2.11)$$

Integrando la ec. **2.11**:

$$\int_0^h (H + h)dh = \frac{c\mathcal{D}_{AB}}{(p_A/M_A)} \frac{(x_{A1} - x_{A2})}{(x_B)_{\ln}} \int_0^t dt = \frac{1}{2}ct \quad (2.12)$$

en donde $h(t) = z_1(0) - z_1(t)$ y $H = z_2 - z_1(0)$ es la distancia inicial de la columna de gas. c es una constante.

Integrando:

$$h(t) = H \left[\sqrt{1 + ct/H^2} - 1 \right] \quad (2.13)$$

Este experimento puede aportar la difusividad de mediciones del nivel del líquido como función del tiempo.

2.1.3. Determinación de la difusividad

La difusividad del par de gases $O_2 - CCl_4$ puede ser determinada por medio de datos de evaporación del CCl_4 en un tubo que contiene O_2 (ver figura 2.1). La distancia entre el nivel del CCl_4 líquido y la parte superior del tubo es $z_2 - z_1 = 17.1 \text{ cm}$. La presión total del sistema es 755 mmHg . y la temperatura es 0°C . La presión de vapor del CCl_4 a 0°C es 33 mmHg . El área de sección del tubo es 0.82 cm^2 . Se midieron 0.0208 cm^3 de CCl_4 evaporados en 10 hrs en régimen permanente. ¿Cuál es la difusividad del par $O_2 - CCl_4$?

Solución:

Si $A = CCl_4$ y $B = O_2$. Entonces el flux molar de A es:

$$N_A = \frac{\rho \text{Vol}}{M_A A t} = \frac{(1.59)(0.0208)}{(154)(0.82)(36000)} = 7.26 \times 10^{-9} \text{ gmol/cm}^2 \text{ s}$$

De la ec. **2.10**:

$$N_{A_z}|_{z=z_1} = \frac{p}{RT} \mathcal{D}_{AB} \frac{\ln(p_{B_2}/p_{B_1})}{z_2 - z_1}$$

$$\mathcal{D}_{AB} = (7.2 \times 10^{-9}) \frac{(17.1)}{\ln(p_{B_2}/p_{B_1})} \frac{RT}{p}$$

donde $R = 82.06 \frac{\text{cm}^3 \text{ atm}}{\text{gmol K}}$, $T = 273 \text{ K}$

$$p = \frac{755}{760} \text{ atm}, \quad \frac{p_{B_2}}{p_{B_1}} = \frac{755}{755 - 33}$$

$$\mathcal{D}_{AB} = 0.0636 \text{ cm}^2/\text{s}$$

2.2. Difusión-Convección de masa

2.2.1. Convección forzada. Absorción de gas A en una película descendente de líquido B

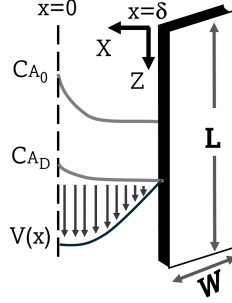


Figura 2.4: Absorción de A en una película descendente de líquido B .

El perfil de velocidades en una solución diluida (la viscosidad es la del solvente) es:

$$v_z(x) = v_{\text{máx}} \left(1 - \frac{x^2}{\delta^2} \right) \quad (2.14)$$

Si el perfil de concentraciones se da en la zona de velocidad máxima, se puede considerar una velocidad constante $v_{\text{máx}}$. Un ejemplo es la absorción de O_2 en H_2O .

Debido a que $C_A = C_A(x, z)$, existen dos fluxes N_{Ax} y N_{Az} . La ec. **2.1** a régimen permanente y sin reacción química se reduce a:

$$\nabla \cdot \underline{N}_A = 0 \rightarrow \frac{\partial N_{Ax}}{\partial x} + \frac{\partial N_{Az}}{\partial z} = 0 \quad (2.15)$$

A partir de la ec. **1.30** se obtiene:

$$\underline{v} \cdot \nabla C_A = \mathcal{D}_{AB} \nabla^2 C_A$$

que para $\underline{v} = (0, 0, v_z)$ tenemos:

$$v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = \mathcal{D}_{AB} \left[\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right] \quad (2.16)$$

Definiendo al número de Peclet de masa (Pe_M) como:

$$Pe_M = ReSch = \frac{uL}{\nu} \cdot \frac{\nu}{\mathcal{D}_{AB}} = \frac{uL}{\mathcal{D}_{AB}} \quad (2.17)$$

donde u y L son la velocidad y longitud características. En este caso $u = v_{\text{máx}}$. Se supone que a lo largo del eje z :

$$Pe_M = \frac{v_{\text{máx}}L}{\mathcal{D}_{AB}} > 1$$

El término convectivo predomina sobre el difusivo, por lo que

$$v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} > \mathcal{D}_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}$$

y la ec. **2.16** se simplifica:

$$v_{z\text{máx}} \frac{\partial C_A}{\partial z} = \mathcal{D}_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} \quad (2.18)$$

Como $dt = \frac{dz}{v_{\text{máx}}}$, entonces la ec. **2.18** se expresa como:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \mathcal{D}_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} \quad (2.19)$$

Las condiciones de frontera son:

$$\text{Condición inicial: } C_A|_{z=0} = 0 \quad (B \text{ puro}) \quad (2.20)$$

$$\text{Condición de interfase: } C_A|_{x=0} = C_{A0} \quad (\text{Solubilidad de } A \text{ en } B) \quad (2.21)$$

La condición $\left. \frac{\partial C_A}{\partial x} \right|_{x=\delta} = 0$ (flujo de masa es cero en la pared) se cambia por:

$$C_A|_{x \rightarrow \infty} = 0 \quad (2.22)$$

(el perfil de C_A se encuentra cerca de la interfase y lejos de la pared)
Considerando la concentración de C_A adimensional:

$$C'_A = \frac{C_A}{C_{A0}} \quad (2.23)$$

La solución de **2.19** se obtiene por el método de combinación de variables, que consiste en formar un grupo adimensional con las variables de la ecuación. Se sugiere la siguiente relación:

$$C'_A = C'_A(\eta) \quad \text{donde} \quad \eta = \frac{x}{\sqrt{4\mathcal{D}_{AB}t}} \quad (2.24)$$

de tal forma que:

$$\frac{dC'_A}{dt} = \frac{dC'_A}{d\eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{x}{\sqrt{4\mathcal{D}_{AB}}} \left(-\frac{1}{2} t^{-3/2} \right) = -\frac{1}{2} \frac{\eta}{t} \frac{dC'_A}{d\eta} \quad (2.25)$$

$$\frac{dC'_A}{dx} = \frac{dC'_A}{d\eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{4\mathcal{D}_{AB}t}} \frac{dC'_A}{d\eta}$$

$$\frac{\partial^2 C'_A}{\partial x^2} = \frac{d^2 C'_A}{d\eta^2} \frac{1}{4\mathcal{D}_{AB}t} \quad (2.26)$$

Sustituyendo **2.25** y **2.26** en la ec. **2.19** se obtiene:

$$\frac{d^2 C'_A}{d\eta^2} + 2\eta \frac{dC'_A}{d\eta} = 0 \quad (2.27)$$

Condiciones de frontera:

$$C'_A|_{\eta=0} = 1 \quad (2.28)$$

$$C'_A|_{\eta \rightarrow \infty} = 0 \quad (2.29)$$

La primera integración de la ec. **2.27** da:

$$\text{Si } \frac{dC'_A}{d\eta} = \phi \rightarrow \frac{d\phi}{d\eta} + 2\eta\phi = 0 \rightarrow \ln \phi = -\eta^2 + \ln C_1$$

$$\frac{dC'_A}{d\eta} = C_1 e^{-\eta^2} \quad (2.30)$$

La segunda integración da por resultado:

$$C'_A = C_1 \int_0^\eta e^{-\bar{\eta}^2} d\bar{\eta} + C_2 \quad (2.31)$$

La condición **2.28** implica que $C_2 = 1$. La condición **2.29** nos da:

$$0 = C_1 \int_0^\infty e^{-\bar{\eta}^2} d\bar{\eta} + 1 = C_1 \frac{\sqrt{\pi}}{2} + 1 \rightarrow C_1 = \frac{-2}{\sqrt{\pi}}$$

Sustituyendo C_1 y C_2 en la ec. **2.31** obtenemos:

$$C'_A = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\eta e^{-\bar{\eta}^2} d\bar{\eta} = 1 - \text{erf}(\eta) = \text{erfc}(\eta) \quad (2.30)$$

donde $\text{erf}(\eta)$ es la función error y $\text{erfc}(\eta)$ es la función complementaria (ver fig. 2.5).

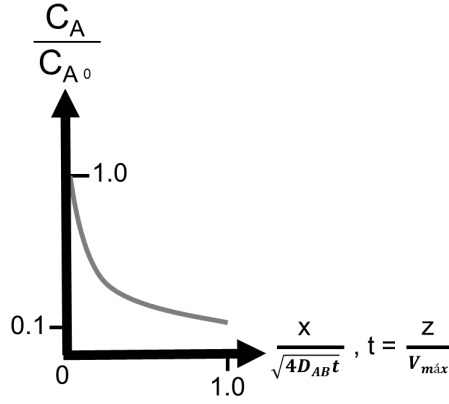


Figura 2.5: Perfil de concentraciones donde δ es la longitud característica para la difusión de A en B.

Cuando $\eta = 2$, $\frac{C_A}{C_{A0}} \sim 0.01$ se puede definir una capa límite de difusión de A en B $\frac{\delta}{\sqrt{4\mathcal{D}_{AB}t}} = 2 \rightarrow \delta = 4\sqrt{\mathcal{D}_{AB}t}$

El flux de masa local en la interfase se puede obtener:

$$N_{Ax}|_{x=0} = -\mathcal{D}_{AB} \left. \frac{\partial C_A}{\partial x} \right|_{x=0} = -\mathcal{D}_{AB} C_{A0} \left. \frac{\partial C'_A}{\partial \eta} \right|_{\eta=0} \frac{\partial \eta}{\partial x} = -\mathcal{D}_{AB} \left(\frac{-2}{\sqrt{\pi}} \right) \frac{C_{A0}}{\sqrt{\mathcal{D}_{AB}t}}$$

$$N_{Ax}|_{x=0} = C_{A0} \sqrt{\frac{\mathcal{D}_{AB}t}{\pi}} = C_{A0} \sqrt{\frac{\mathcal{D}_{AB}v_{\text{máx}}}{\pi z}} \quad (2.31)$$

El flujo de masa de A absorbido por B es la superficie LW es:

$$W_A = \int_0^W \int_0^L N_{Ax}|_{x=0} dz dy = W C_{A0} \sqrt{\frac{\mathcal{D}_{AB} v_{\text{máx}}}{\pi}} \int_0^L \frac{dz}{\sqrt{z}}$$

$$W_A = W L C_{A0} \sqrt{\frac{4 \mathcal{D}_{AB} v_{\text{máx}}}{\pi L}} \quad (2.32)$$

Este desarrollo se puede aplicar a la absorción de gas en burbujas ascendentes.

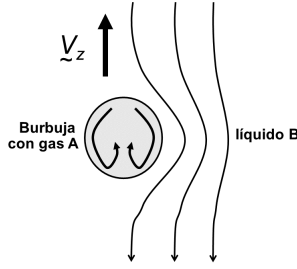


Figura 2.6: Burbuja de gas A ascendiendo en un líquido B a velocidad \underline{v}_t .

Se puede utilizar la ec. **2.32** para calcular la absorción de gas, reemplazando el tiempo de contacto

$$t_{\text{exp}} = \frac{L}{v_{\text{máx}}} = \frac{D \text{ (diámetro de la burbuja)}}{v_t \text{ (velocidad de la burbuja)}}$$

Si C_{A0} es la solubilidad de A en B , la rapidez de absorción molar es:

$$(N_A)_{\text{prom}} = C_{A0} \sqrt{\frac{4 \mathcal{D}_{AB} v_t}{\pi D}} \quad (2.33)$$

2.2.2. Disolución de sólidos en una película descendente

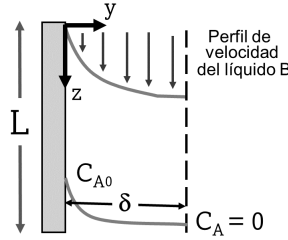


Figura 2.7: El sólido A se disuelve en el líquido B que desciende.

La concentración de A en el líquido B cambia dentro de una capa límite junto al sólido. El perfil de velocidades en una película descendente vertical, es:

$$v_z = \frac{\rho g \delta^2}{2\mu} \left[1 - \left(\frac{y'}{\delta} \right)^2 \right] \quad (2.34)$$

En la aproximación de capa límite, se puede linealizar el perfil cerca de la pared, definiendo una variable y de la forma: $y = \delta - y'$, de tal forma que: $1 - \left(\frac{y'}{\delta} \right)^2 = 1 - \left(\frac{\delta - y}{\delta} \right)^2 = 1 - \left(1 - 2\frac{y}{\delta} \right) = \frac{2y}{\delta}$. El perfil resultante es:

$$v_z = \left(\frac{\rho g \delta}{\mu} \right) y = ay \quad (2.35)$$

La ecuación de difusión en este caso es:

$$ay \frac{\partial C_A}{\partial z} = \mathcal{D}_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} \quad (2.36)$$

Las condiciones de frontera son:

$$C_A|_{z=0} = 0 \quad (2.37)$$

$$C_A|_{y=0} = C_{A0} \quad (2.38)$$

$$C_A|_{y \rightarrow \infty} = 0 \quad (\text{tiempo de contacto corto}) \quad (2.39)$$

Por el método de combinación de variables, se sugiere la siguiente combinación:

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = f(\eta) \quad \text{donde} \quad \eta = y \left(\frac{a}{9\mathcal{D}_{AB}z} \right)^{1/3} \quad (2.40)$$

$$\frac{\partial f}{\partial z} = \frac{\partial f}{\partial \eta} \left(\frac{\partial \eta}{\partial z} \right) = -y \left(\frac{a}{9\mathcal{D}_{AB}} \right)^{1/3} \left(-\frac{1}{3} \frac{z^{-1/3}}{z} \right) = -\frac{1}{3} \frac{\eta}{z} \frac{df}{d\eta} \quad (2.41)$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\eta}{y} \frac{df}{d\eta} = \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \frac{df}{d\eta}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = \frac{\eta}{y} \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{d^2 f}{d\eta^2} = \frac{\eta^2}{y^2} \left(\frac{d^2 f}{d\eta^2} \right) \quad (2.42)$$

Sustituyendo **2.40** y **2.42** en la ec. **2.36** resulta en:

$$\frac{d^2 f}{d\eta^2} + 3\eta^2 \frac{df}{d\eta} = 0 \quad (2.43)$$

con condiciones de frontera:

$$f|_{\eta=0} = 1 \quad (2.44)$$

$$f|_{\eta \rightarrow \infty} = 0 \quad (2.45)$$

La solución de **2.43** es:

$$f = C_1 \int_0^\eta e^{-\bar{\eta}^3} d\bar{\eta} + C_2 \quad (2.46)$$

La condición **2.44** determina $C_2 = 1$. La condición **2.45** determina

$$C_1 = \frac{-1}{\int_0^\infty e^{-\bar{\eta}^3} d\bar{\eta}} = -\frac{1}{\Gamma(\frac{4}{3})}$$

donde $\Gamma(x)$ es la función gamma de x. Como $\int_0^\eta = \int_0^\infty - \int_\eta^\infty$ entonces:

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = f = \frac{\int_{\eta}^{\infty} e^{-\bar{\eta}^3} d\bar{\eta}}{\Gamma(\frac{4}{3})} \quad (2.46)$$

$$\begin{aligned} N_{Ay}|_{y=0} &= -\mathcal{D}_{AB} \left. \frac{\partial C_A}{\partial y} \right|_{y=0} = -\mathcal{D}_{AB} C_{A0} \left[\frac{d}{d\eta} \left(\frac{C_A}{C_{A0}} \right) \frac{\partial \eta}{\partial y} \right]_{y=0} \\ &= -\mathcal{D}_{AB} C_{A0} \left[\frac{-e^{-\eta^3}}{\Gamma(\frac{4}{3})} \left(\frac{a}{9\mathcal{D}_{AB}z} \right)^{1/3} \right]_{y=0} = \frac{\mathcal{D}_{AB} C_{A0}}{\Gamma(\frac{4}{3})} \left(\frac{a}{9\mathcal{D}_{AB}z} \right)^{1/3} \end{aligned} \quad (2.47)$$

El flujo molar de A en $y = 0$ es:

$$\begin{aligned} W_A &= \int_0^W \int_0^L N_{Ay}|_{y=0} dz dx = W \frac{\mathcal{D}_{AB} C_{A0}}{\Gamma(\frac{4}{3})} \left(\frac{a}{9\mathcal{D}_{AB}} \right)^{1/3} \int_0^L z^{-1/3} dz \\ &= \left(\frac{3}{2} \right) \frac{\mathcal{D}_{AB} C_{A0} W}{\Gamma(\frac{4}{3})} \left(\frac{a}{9\mathcal{D}_{AB}} \right)^{1/3} L^{2/3} = \frac{2\mathcal{D}_{AB} C_{A0} W L}{\frac{4}{3}\Gamma(\frac{4}{3})} \left(\frac{a}{9\mathcal{D}_{AB}L} \right)^{1/3} \end{aligned} \quad (2.48)$$

donde $\frac{4}{3}\Gamma(\frac{4}{3}) = \Gamma(\frac{7}{3})$

2.2.3. Perfil de concentración en un reactor tubular

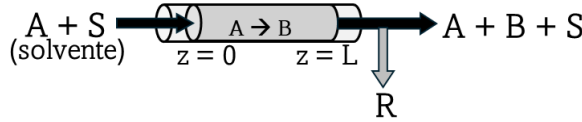


Figura 2.8: Reactor tubular

La situación es similar a las condiciones de la ec. **2.18** en coordenadas cilíndricas, esto es:

$$v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = \mathcal{D}_{AB} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) \right] \quad (2.49)$$

$$\text{donde } v_z = v_{z\text{máx}} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (2.50)$$

con condiciones:

$$C_A|_{z=0} = C_{A0} \quad , \quad C_A|_{r=R} = 0 \quad \text{y} \quad C_A|_{r=0} \neq 0 \quad (2.51)$$

La linealización del perfil de velocidades cerca de la pared procede definiendo una variable $y = R - r$:

Como $v_{\text{máx}} = \frac{\Delta P R^2}{2\mu L}$, entonces $v_z(y) = v_{\text{máx}} \frac{y}{R}$

La ec. **2.49** se transforma en:

$$2v_{\text{máx}} \frac{y}{R} = \mathcal{D}_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} \quad (2.52)$$

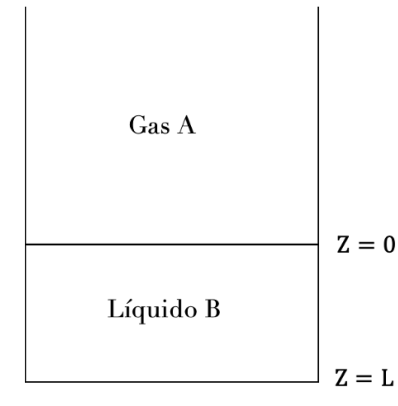
debido a que $\frac{y}{R} = 1 - \frac{r}{R}$, entonces $(\frac{r}{R})^2 = (1 - \frac{y}{R})^2 \approx 1 - \frac{2y}{R} + \dots$ por lo que $v_z = v_{z\text{máx}}(\frac{2y}{R})$ (ec. **2.50**) con nuevas condiciones:

$$C_A|_{z=0} = C_{A0} \quad , \quad C_A|_{y=0} = 0 \quad \text{y} \quad C_A|_{y \rightarrow \infty} = C_{A0} \quad (2.53)$$

La solución es similar a la ec. **2.46**, excepto que ahora $f|_{\eta=0} = 0$ y $f|_{\eta \rightarrow \infty} = 1$. Las constantes son: $C_2 = 0$ y C_1 es igual: $C_1 = \frac{-1}{\Gamma(\frac{4}{3})}$, por lo tanto:

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = \frac{\int_0^\eta e^{-\bar{\eta}^3} d\bar{\eta}}{\Gamma(\frac{4}{3})} \quad (2.54)$$

2.3. Difusión con reacción química homogénea



En la figura **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 $\underline{v} = 0$.

Figura 2.9: Absorción de A en B con reacción homogénea en la fase líquida

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

$$\mathcal{D}_{AB} \frac{d^2(C_A)}{dz^2} + R_A = 0 \quad (2.55)$$

En donde:

$$R_A = \frac{d(C_A)}{dt} = -kC_A \quad (2.56)$$

Este sistema otorga las siguientes condiciones de frontera:

$$C_A|_{z=0} = C_{A0}, \quad \left. \frac{d(C_A)}{dz} \right|_{z=L} = N_{Az}|_{z=L} = 0 \quad (2.57)$$

Se definen las siguientes variables adimensionales: $\Gamma = \frac{C_A}{C_{A0}}$ y $\zeta = \frac{z}{L}$
La ecuación **2.55** se transforma en:

$$\frac{d^2\Gamma}{d\zeta^2} - \left(\frac{k_1 L^2}{\mathcal{D}_{AB}} \right) \Gamma = 0 \quad (2.58)$$

donde

$$\phi = \left(\frac{k_1 L^2}{\mathcal{D}_{AB}} \right)^{1/2} \quad (2.59)$$

es el módulo de Thiele.

Las condiciones de frontera adimensionales son ahora:

$$\Gamma|_{\zeta=0} = 1 \quad \text{y} \quad \left. \frac{d\Gamma}{d\zeta} \right|_{\zeta=1} = 0 \quad (2.60)$$

La solución de la ecuación **2.58** corresponde a:

$$\Gamma = C_1 \cosh(\phi\zeta) + C_2 \sinh(\phi\zeta) \quad (2.61)$$

Aplicando **2.61** obtenemos C_1 y C_2 :

$C_1 = 1$ y $0 = \phi \sinh(\phi) + C_2 \phi \cosh(\phi) \longrightarrow C_2 = -\frac{\sinh(\phi)}{\cosh(\phi)} = -\tanh(\phi)$ La ec. **2.60** tiene la siguiente solución particular:

$$\Gamma = \frac{\cosh[\phi(1 - \zeta)]}{\cosh(\phi)} \quad (2.62)$$

La concentración promedio de A en la fase líquida es;

$$\bar{\Gamma} = \frac{\int_0^1 \Gamma d\zeta}{\int_0^1 d\zeta} = \frac{1}{\cosh(\phi)} \left[\frac{\sinh[\phi(1-\zeta)]_0^1}{-\phi} \right] = \frac{\tanh(\phi)}{\phi} \quad (2.63)$$

El flux molar en $z = 0$ es:

$$N_{Az}|_{z=0} = -\mathcal{D}_{AB} \frac{d(C_A)}{dz} \Big|_{z=0} = -\mathcal{D}_{AB} \frac{C_{A0}}{L} \frac{d\Gamma}{d\zeta} \Big|_{\zeta=0} = \mathcal{D}_{AB} \frac{C_{A0}}{L} \phi \tanh(\phi) \quad (2.64)$$

2.3.1. 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.

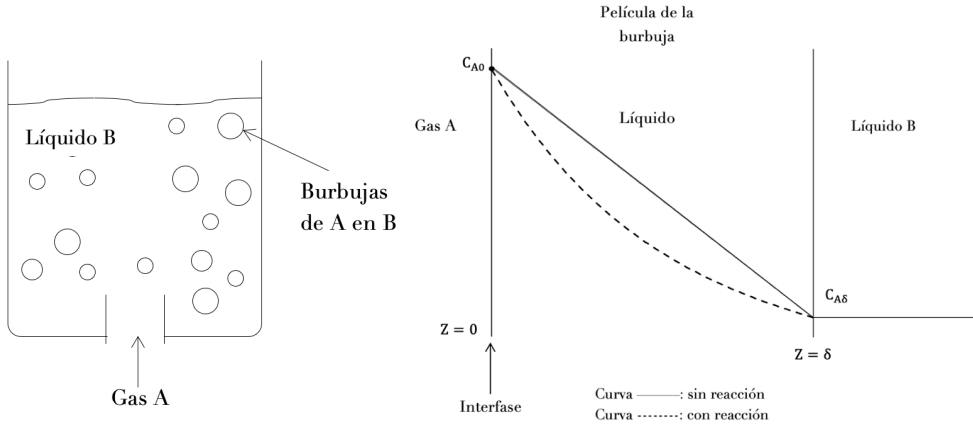


Figura 2.10: Perfil de concentración predicho en la película de líquido que rodea a una burbuja

Condiciones de frontera:

$$C_A|_{z=0} = C_{A0} \quad y \quad C_A|_{z=\delta} = C_{A\delta} \quad (2.65)$$

O en variables adimensionales:

$$\Gamma|_{\zeta=0} = 1 \quad y \quad \Gamma|_{\zeta=1} = B \quad (2.66)$$

En donde

$$\zeta = \frac{z}{\delta}, \quad \Gamma = \frac{C_A}{C_{A0}}, \quad B = \frac{C_{A\delta}}{C_{A0}}, \quad \phi^2 = \frac{k_1 \delta^2}{\mathcal{D}_{AB}}$$

La ecuación **2.61** con las condiciones **2.66** tiene la siguiente solución:

$$\Gamma = \frac{\sinh(\phi) \cosh(\phi\zeta) + (B - \cosh(\phi)) \sinh(\phi\zeta)}{\sinh(\phi)} \quad (2.67)$$

La ecuación **2.67** 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:

$$SN_{Az}|_{z=\delta} = -S\mathcal{D}_{AB} \frac{dC_A}{dz}|_{z=\delta} = Vk_1C_{A\delta} \quad (2.68)$$

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

$$-\frac{dC_A}{dz}|_{z=\delta} = -\frac{C_{A0}}{\delta} \frac{d\Gamma}{d\zeta}|_{\zeta=1} = \frac{Vk_1C_{A\delta}}{S\mathcal{D}_{AB}} \longrightarrow -\frac{d\Gamma}{d\zeta}|_{\zeta=1} = \frac{V}{S\delta} \phi^2 B$$

Como $\cosh^2(\phi) - \sinh^2(\phi) = 1$, de la ec. **2.67** 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 **2.67**, obtenemos:

$$\Gamma = \frac{\cosh(\phi) \cosh(\phi\zeta) - \cosh(\phi) \sinh(\phi\zeta)}{\sinh(\phi)} + \frac{\sinh(\phi)\zeta}{\sinh(\phi)} \left[\frac{1}{\cosh(\phi) + \frac{V\phi \sinh(\phi)}{S\delta}} \right] \quad (2.69)$$

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

$$\begin{aligned} \tilde{N} &= \frac{N_{Az}}{\mathcal{D}_{AB} \frac{C_{A0}}{\delta}} = -\frac{\mathcal{D}_{AB}}{\mathcal{D}_{AB} \frac{C_{A0}}{\delta}} \frac{d(C_A)}{dz} \Big|_{z=0} \\ &\Rightarrow -\frac{d\Gamma}{d\zeta} \Big|_{\zeta=0} = \frac{\phi \cosh(\phi)}{\sinh(\phi)} - \frac{\phi}{\sinh(\phi) \left(\cosh(\phi) + \frac{V\phi \sinh(\phi)}{S\delta} \right)} \\ &= \frac{\phi}{\sinh(\phi)} \left[\cosh(\phi) - \frac{1}{\cosh(\phi) + \frac{V}{S\delta} \phi \sinh \phi} \right] \end{aligned} \quad (2.70)$$

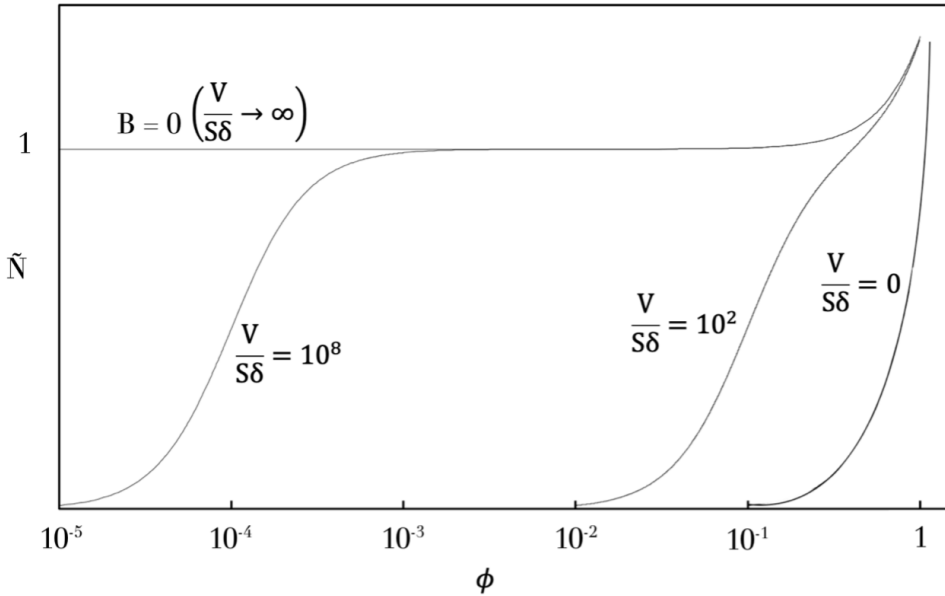


Figura 2.11: Absorción de gas con reacción química

La ecuación **2.70** se grafica en la fig. **2.11**. Se puede observar en la fig. **2.11**:

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 **2.10**. Cuando $\phi = 0$ $\tilde{N} \rightarrow 1$ ($B = 0$)
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 **2.70** 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.

2.4. 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**

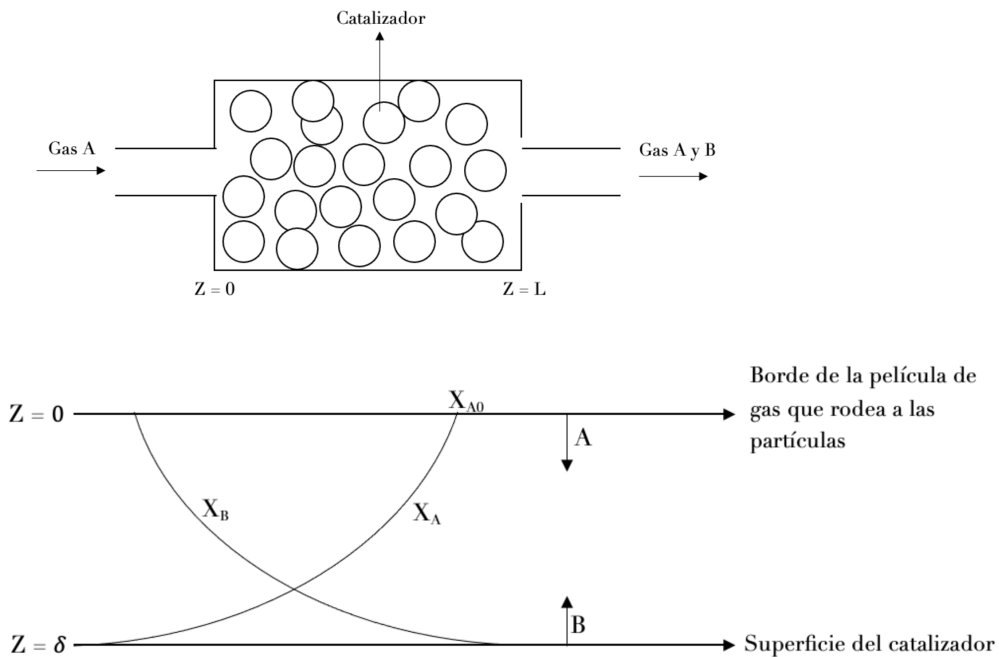


Figura 2.12: Reactor catalítico en donde $2A \rightarrow B$
Modelo de difusión cerca de la partícula de catalizador

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:

$$N_{Bz} = -\frac{1}{2}N_{Az} \quad (2.71)$$

Las ecs **1.25** y **1.19** en combinación con la ec **2.71** son:

$$N_{Az} = -\frac{c\mathcal{D}_{AB}}{1 - \frac{x_A}{2}} \frac{d(x_A)}{dz} \quad (2.72)$$

$$\text{y } \frac{d(N_A)}{dz} = 0 \quad (2.73)$$

que resulta en:

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{1}{1 - \frac{1}{2}x_A} \frac{dx_A}{dz} \right) = 0 \quad (2.74)$$

Con las condiciones en la frontera:

$$x_A|_{z=0} = x_{A0} \quad \text{y} \quad x_A|_{z=\delta} = 0 \quad (2.75)$$

A partir de la ec. **2.74**, se obtiene:

$$\frac{1}{1 - \frac{x_A}{2}} \frac{dx_A}{dz} = C_1 \longrightarrow \int \frac{dx_A}{1 - \frac{x_A}{2}} = C_1 \int dz + C_2$$

Evalando C_1 y C_2 con respecto a las condiciones **2.75**, se obtiene:

$$N_{Az} = \frac{2C\mathcal{D}_{AB}}{\delta} \ln \left(\frac{1}{1 - \frac{1}{2}x_{A0}} \right) \quad (2.76)$$

La reacción ocurre instantáneamente, por lo que la convección de A en B es un proceso controlado por difusión.

2.4.1. 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:

$$N_{Az} = k_1 C_A = k_1 C x_A \quad (2.77)$$

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:

$$\frac{1 - \frac{x_A}{2}}{\left(1 - \frac{x_{A0}}{2}\right)^{1 - \frac{z}{\delta}}} = \left(1 - \frac{N_{Az}}{2k_1 c}\right)^{\frac{z}{\delta}} \quad (2.78)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \ln \left(1 - \frac{x_A}{2}\right) - \frac{d}{dz} \left[\left(1 - \frac{z}{\delta}\right) \ln \left(1 - \frac{x_{A0}}{2}\right) \right] &= \frac{d}{dz} \left[\frac{z}{\delta} \ln \left(1 - \frac{N_{Az}}{2k_1 c}\right) \right] \\ -\frac{\frac{1}{2}}{1 - \frac{x_A}{2}} \frac{dx_A}{dz} + \frac{1}{\delta} \ln \left(1 - \frac{x_{A0}}{2}\right) &= \frac{1}{\delta} \ln \left(1 - \frac{N_{Az}}{2k_1 c}\right) \end{aligned} \quad (2.79)$$

Substituyendo la ec **2.79** en la ec **2.74**, se obtiene:

$$N_{Az} = -\frac{c\mathcal{D}_{AB}}{\left(1 - \frac{x_A}{2}\right)} \left[\left(1 - \frac{x_A}{2}\right) \left(\frac{-2}{\delta}\right) \ln \left(\frac{1 - \frac{N_{Az}}{k_1 c}}{1 - \frac{x_{A0}}{2}}\right) \right]$$

Aproximando $\ln\left(1 - \frac{N_{Az}}{2k_1 c}\right) \approx -\frac{1}{2} \frac{N_{Az}}{k_1 c}$, se obtiene:

$$N_{Az} = \frac{2C\mathcal{D}_{AB}}{\delta} \left[-\frac{N_{Az}}{2k_1 c} - \ln \left(1 - \frac{x_{A0}}{2}\right) \right]$$

$$N_{Az} \left(1 + \frac{\mathcal{D}_{AB}}{k_1 \delta}\right) = 2C\frac{\mathcal{D}_{AB}}{\delta} \ln \left(\frac{1}{1 - \frac{1}{2}x_{A0}}\right)$$

$$N_{Az} = 2c \frac{\mathcal{D}_{AB}}{\delta \left(1 + \frac{\mathcal{D}_{AB}}{k_1 \delta}\right)} \ln \left(\frac{1}{1 - \frac{1}{2}x_{A0}}\right) \quad (2.80)$$

El número adimensional $\frac{k_1 \delta}{\mathcal{D}_{AB}} = Da$ 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. **2.76**

2.5. 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 esféricas es:

$$0 = D_A \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d(C_A)}{dr} \right) - R_A \quad (2.81)$$

"a" se define como la superficie catalítica por unidad de volumen (sólido + huecos). Por ello, $R_A = -k_1 a c_a$.

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 **2.81** se transforma en:

$$\frac{d^2 f}{dr^2} - \frac{k_1 a}{D_A} f = 0 \quad (2.82)$$

Con condiciones en la frontera:

$$C_A|_{r=R} = C_{AR} \quad \text{y} \quad C_A|_{r=0} = \text{finito} \quad (2.83)$$

o bien:

$$f|_{r=R} = R \quad \text{y} \quad f|_{r=0} = \text{finito}$$

La solución a la ecuación **2.82** corresponde a:

$$f(r) = C_1 \cosh\left[\left(\frac{k_1 a}{D_A}\right)^{\frac{1}{2}} r\right] + C_2 \sinh\left[\left(\frac{k_1 a}{D_A}\right)^{\frac{1}{2}} r\right] \quad (2.84)$$

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

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

Por lo tanto:

$$f(r) = \frac{R \sinh\left[\left(\frac{k_1 a}{D_A}\right)^{\frac{1}{2}} r\right]}{\sinh\left[\left(\frac{k_1 a}{D_A}\right)^{\frac{1}{2}} R\right]} \quad (2.85)$$

Definiendo el modulo de Thiele como $\phi = \sqrt{\frac{k_1 a}{D_A}} R$, entonces: $f(r) = \frac{R \sinh[\phi(\frac{r}{R})]}{\sinh \phi}$
Luego,

$$\frac{C_A}{C_{AR}} = \frac{R}{r} \frac{\sinh[\phi(\frac{r}{R})]}{\sinh \phi} \quad (2.86)$$

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:

$$W_{AR} = 4\pi R C_{AR} D_A [1 - \phi \coth(\phi)] \quad (2.87)$$

Definiendo al factor de efectividad η :

$$\eta = \frac{N_{AR}}{N_{AR0}} \quad (2.88)$$

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

$$N_{AR0} = \frac{4\pi R^3}{3} a(-k_1 C_{AR}) \quad (2.89)$$

Sustituyendo las ecs **2.87** y **2.89** en la ec **2.88** resulta en:

$$\eta_A = \frac{3}{\phi^2} [\phi \coth(\phi) - 1] \quad (2.90)$$

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:

$$R_{ne} = 3 \left(\frac{V_p}{S_p} \right) \quad (2.91)$$

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:

$$\eta_A = \frac{1}{3\Lambda^2} (3\Lambda \coth 3\Lambda - 1) \quad (2.92)$$

y

$$\Lambda = \left(\frac{k_1 a}{D_A} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{V_p}{S_p} \right) \quad (2.93)$$

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

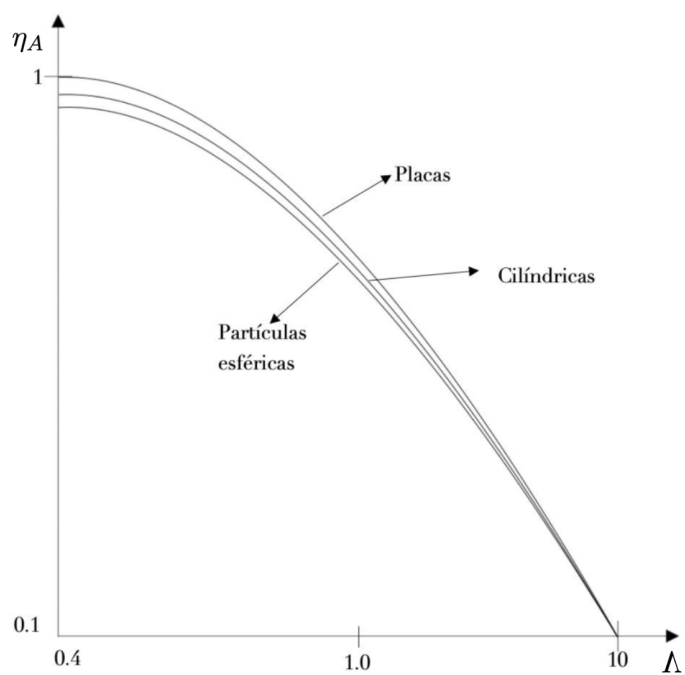


Figura 2.13: Factores de efectividad en catalizadores porosos de varias formas

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:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = \mathcal{D}_{AB} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right] \quad (\text{A.1})$$

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**)

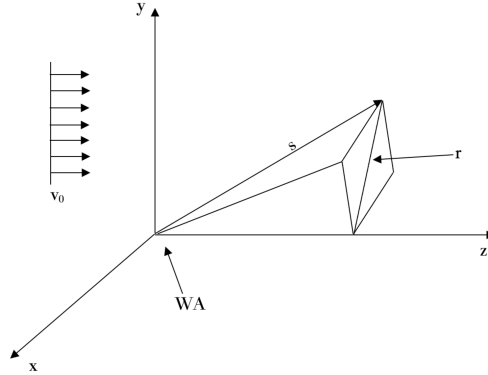


Figura A.1: Difusión de A desde una fuente puntual en una corriente de B que va a una velocidad v_0 constante

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, $\frac{\partial s}{\partial z} = \frac{z}{s}$

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

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

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:

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

Cuya solución es:

$$C_A = [\frac{W_A}{4\pi \mathcal{D}_{AB} s}] e^{\frac{-v_0(s-z)}{2\mathcal{D}_{AB}}} \quad (\text{A.2})$$

Que satisfice las condiciones de frontera:

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

La concentración de A lejos de la fuente es 0

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

Este corresponde al sitio de la fuente

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

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

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

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:

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

y finalmente:

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

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

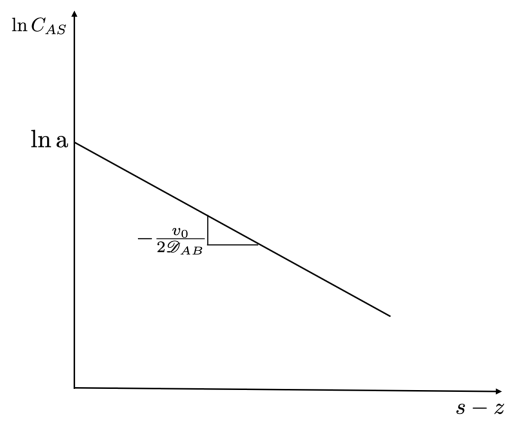
Lo cual implica que la concentración máxima está en el eje z

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

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 \mathcal{D}_{AB} .

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

En donde $s - z$ es la variable independiente y C_{AS} la variable dependiente.



Tarea 2

1. Absorción de cloro en una película descendente (Problema. 18A.4, Bird et al.)

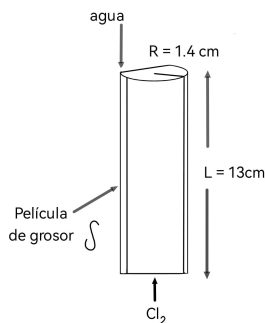
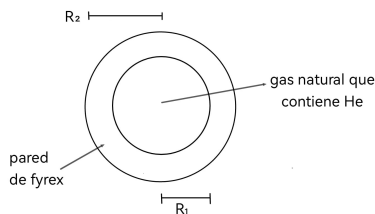


Fig. 2. 14. Columna de paredes mojadas

Cloro gaseoso se absorbe en agua de la columna de la Fig. 2.14. La velocidad del agua es 17.7 cm/s. La difusividad en la fase líquida del sistema $\text{Cl}_2\text{-H}_2\text{O}$ es de $1.26 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$ y la concentración de saturación es de 0.823 g $\text{Cl}_2/100 \text{ g H}_2\text{O}$. ¿Cuál es la velocidad de absorción en mol/hr?

Respuesta: 0.273 g/mol/hr

2. Método para separar helio del gas natural (Problema. 18.B.8, Bird et al.)

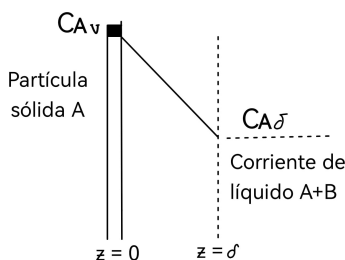


La pared de vidrio Pyrex es permeable solamente al He. Suponga que el He está contenido en el recipiente. Obtenga una expresión de la difusión del He a través de la pared, las concentraciones interfaciales del He en las paredes y las dimensiones del tubo.

Respuesta:

$$W_{\text{He}} = \frac{2\pi L \mathcal{D}_{\text{He}} (C_{\text{He1}} - C_{\text{He2}})}{\ln(R_2/R_1)}$$

3. Velocidad de lixiviación (Problema. 18.B.9, Bird et al.)



La solubilidad de A en B en C_{Au} , y su concentración en B en $C_{A\delta}$. En este proceso, A difunde en B a través de una película de grosor δ . Muestra que al perfil de concentraciones en lineal y que la velocidad de lixiviación es:

$$N_{Au} = \frac{\mathcal{D}_{AB}}{C_{Au} - C_{A\delta}}$$

4. Determinación de la difusividad del sistema éter-aire. (Problema. 18.A.6 Birt et al)

Datos de la evaporación del etil-éter con densidad del líquido de 0.7132 g/cm^3 . El tubo tiene 6.16 mm de diámetro y presión total de 747 mmHg a 22°C . El peso molecular del éter 74 y la presión de vapor a 22°C en 498 mmHg. (Véase Fig. 2.1)

- Suponer un promedio de las longitudes de $Z_2 - Z_1$ para encontrar \mathcal{D}_{AB} a 747 mmHg y 22°C a partir de los datos de evaporación.
- Utilizar la ecuación (1.53) para convertir los resultantes a 0°C y 760 mmHg .

Nivel del éter (mm)	Tiempo (s) para alcanzar el nivel del éter
9-11	590
14-16	845
19-21	1185
24-26	1480
34-34	2055
41-46	2655

Respuesta:

$$\mathcal{D}_{AB} = 0.0786 \text{ cm}^2/\text{s} \text{ a } 0^\circ\text{C} \text{ y } 760 \text{ mmHg}$$

Tarea 3

1. Mediciones de difusividad por el Método de fuente puntual. (Problema. 18.A.5 Birt et al.)

Una corriente de líquido B se dirige en dirección vertical, y la composición del gas se mide en varias posiciones. Calcular el gasto molar W_A (g-mol/s) requerido para producir $X_A = 0.01$ en el punto 1 cm abajo de la fuente a 1 atm y 800°C , si $V_0 = 50 \text{ cm}^3/\text{s}$ y $\mathcal{D}_{AB} = 5 \text{ cm}^2/\text{s}$.

Utilizar los resultados del **Apéndice A**.

2. Experimentos para medir la difusividad de gases en un aparato de dos recipientes (Prob. 18.B.6. Bird et al.)

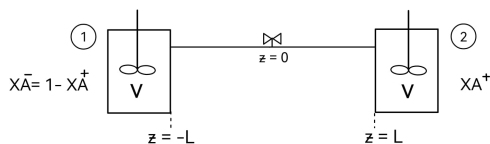


Fig. 2. 16. Sistema gaseoso a presión y temperatura constantes. Los agitadores mantienen concentraciones uniformes

El aparato tiene un gas A en el recipiente 1 y un gas B en el recipiente 2. La válvula se abre y la difusión comienza. Se mide x_A en función del tiempo, lo que permite medir \mathcal{D}_{AB} .

Las condiciones de frontera son: $x_A \Big|_{z=-L} = x_A^-$ y $x_A \Big|_{z=L} = x_A^+$

Calcular lo siguiente

(a)- Mostrar que N_A es constante.

(b)- Mostrar que el flujo de masa es: $N_{AZ} = -c\mathcal{D}_{AB} \frac{dx_A}{dz}$

(c)- Integrar la ecuación.

(d)- Evaluar la constante de integración.

(e)- Obtener: $N_{AZ} = \frac{(\frac{1}{2} - x_A^+)c\mathcal{D}_{AB}}{L}$

(f)- Hacer un balance de masa en el recipiente 2 para obtener:

$$S(\frac{1}{2} - x_A^+) \frac{c\mathcal{D}_{AB}}{L} = V_c \frac{dx_A^+}{dt}$$

(g)- Integrar la ecuación para obtener: $\ln\left(\frac{\frac{1}{2} - x_A^+}{\frac{1}{2}}\right) = \frac{-S\mathcal{D}_{AB}t}{LV}$

(h)- Hacer una gráfica para obtener \mathcal{D}_{AB}

3. Difusión desde una gota suspendida. (*Problema. 18.B.7. Bird et al.*)

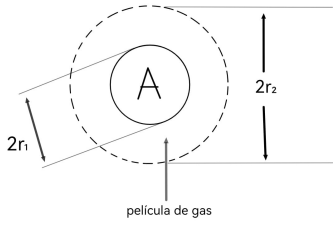


Fig. 2.17. Difusión a través de una película estática de gas que rodea a una gota de A.

Una gota de líquido A de radio r_1 está suspendida en una corriente de gas B. Supóngase la presencia de una película alrededor de la gota de radio r_2 . La concentración de A en la fase gas en x_A , en $r=r_1$ y x_{A2} en $r=r_2$.

Demuestra:

(a)- Que $r^2 N_A r$ es constante en la fase gas. Evaluar la constante en $r=r_1$ para obtener $r_1^2 N_A r$, en la superficie de la gota:

(b)- La ecuación (1.25) y el resultado anterior resulta en:

$$r_1^2 N_A r_1 = \frac{-c \mathcal{D}_{AB}}{1 - x_A} r^2 \frac{dx_A}{dr}$$

(c)- La integración entre r_1 y r_2 resulta en:

$$N_{Ar_1} = \frac{c \mathcal{D}_{AB}}{r_2 - r_A} \left(\frac{r_2}{r_1} \right) \ln \frac{x_{B2}}{x_{B1}}$$

(d) Obtener el límite de esta ecuación cuando $r_2 \rightarrow \infty$.

Tarea 4

1. Absorción de cloro en ciclohexeno. (Problema. 18.B.5 Birt et al.)

El cloro se puede absorber de una mezcla Cl_2 -aire por medio de olefinas disueltos en CCl_4 . La reacción de Cl_2 con ciclohexano (C_6H_{10}) es de segundo orden con respecto al cloro y de orden cero con respecto al C_6H_{10} . Por lo tanto, la desaparición de cloro por unidad de volumen es $k_2 C_A^2$ ($A = \text{Cl}_2$).

Modificar el problema de la sección (2.3) donde $B = \text{C}_6\text{H}_{12}-\text{CCl}_4$, suponiendo que la reacción puede pseudobinaria. Suponer que el aire es insoluble en B y que $L \rightarrow \infty$.

(a)- Demostrar que el perfil de concentraciones está expresado como:

$$\frac{C_{A0}}{C_A} = \left[1 + \sqrt{\frac{k_2 C_{A0}}{6 \mathcal{D}_{AB}}} Z \right]^{-1}$$

(b)- Obtener la rapidez de absorción de Cl_2 por el líquido.

(c)- Suponiendo que A se disuelve y reacciona con B , de tal forma que la rapidez de desaparición de A es una función de la concentración $f(C_A)$. Mostrar que el flux de masa de A es:

$$N_{A2} \Big|_{z=0} = \sqrt{2\theta_{A0} \int_0^{C_{A0}} f(C_A) dC_A}$$

Usa este resultado para verificar (b)

2. Difusión con reacción química de segundo orden (Problema 18.B.11. Bird et al.)

El sólido A se disuelve en una corriente S líquida isotérmicamente. De acuerdo con el modelo de la película (sección 2.1.1), la superficie de A está cubierta por una película de líquido estática de grosor δ (Fig. 2.2).

(a)- Desarrollar una expresión de la rapidez de disolución de A en S si la concentración de A en S es pequeña.

(b)- Si S contiene una sustancia B , tal que en el plano $z = k\delta$ reacciona con A ($A + B \rightarrow P$). Por ejemplo, la disolución de ácido benzoico en una solución de NaOH . La corriente de líquido consiste en $S + B$, donde la fracción mol de B es $x_{B\infty}$ (Ver Fig. 2.18). Es necesario suponer que A y B se difunden a través de una capa pequeña. (zona de reacción en la Fig. 2.18)

Respuesta:

$$(a)- \quad N_{Az} \Big|_{z=D} = \frac{c \mathcal{D}_{AS} x_{AD}}{\delta}$$

$$(b)- \quad N_{A2} \Big|_{z=D} = \frac{c \mathcal{D}_{AS} x_{AD}}{\delta} \left(1 + \frac{x_{BD} \mathcal{D}_{BS}}{x_{AD} \mathcal{D}_{AS}} \right)$$

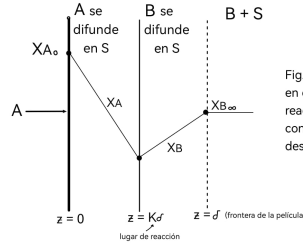


Fig. 2.18. Perfiles de concentración en el proceso de difusión con reacción rápida de 2º orden. La concentración de P es despreciable.

3. Demanda de oxígeno por agregados de bacterias (Problema 18.B.19. Bird et al.)

Supongan un agregado de bacterias esférico de R. Se desea determinar la demanda de O_2 del agregado como función su tamaño, concentración de O_2 (ρ_0) en la superficie del agregado, la actividad metabólica de las células y el comportamiento difusional del O_2 . Supone que la difusión de O_2 está expresada como $r_{O_2} = -k_0$ y el comportamiento difusional está gobernado por la ley de Fick condifusividad D_{v_2m}

(a)- Demostrar que el perfil de concentración de O_2 se describe por medio de la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{dx}{d\xi} \right) = N \quad \text{donde} \quad X = \frac{\rho_{O_2}}{\rho_0}, \quad \xi = \frac{r}{R} \quad y \quad \nu = \frac{k_R^2}{\rho_0 D_{O_2m}}$$

(b)- Si N es grande, tal que $x = 0$ para $\xi < \xi_0$, existe zona central en el agregado sin O_2 . Se reconoce que X y $\frac{dX}{d\xi}$ son cero en $\xi = \xi_0$. ¿Cuál es el significado físico de estas suposiciones?

(c)- Integrar la ecuación anterior con las condiciones de frontera apropiadas.

Respuesta:

$$x = 1 - \frac{N}{6} (1 - \xi^2) + \frac{N}{\xi} \xi_0^2 \left(\frac{1}{\xi} - 1 \right) \quad \text{donde} \quad \xi_0 \quad \text{es determinado por la siguiente ecuación:} \quad \xi_0^3 - \frac{3}{2}$$

Tarea 5

1. Difusión y reacción heterogénea en el tubo con un extremo cerrado. (Problema. 18.B.15 Birt et al.)

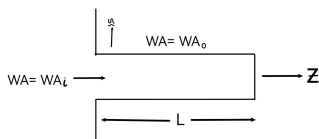


Fig. 2.19. Difusión y reacción heterogénea dentro de un cilindro.

Un poro cilíndrico de longitud L y sección S está en contacto con un fluido en su extremo abierto. El fluido contiene A y B , en donde A desaparece dentro del poro, se difunde a lo largo y reacciona sobre las paredes. El flux normal a la superficie es función de la fracción masa W_{AU} de A sobre la superficie y depende de z . La temperatura y densidad son constantes, ya que la concentración de A es pequeña. Como el poro es largo, los gradientes de concentración normales a z son pequeños.

- Mostrar que el régimen es permanente. $\frac{dWA}{dz} = \frac{P}{S} f(WA)$
- Demostrar que la velocidad promedio másica V_z es cero para este sistema.
- Sustituir la ley de Fick $J_A = -\rho \mathcal{D}_{AB} \nabla WA$ en la ecuación anterior e integrar la expresión resultante para el caso $f(WA) = k_i W_{A0}$. La condición de frontera en $z = L$ supone que no hay reacción en ese extremo.
- Desarrolla una expresión para W_A en el cilindro.

Respuesta:

$$(c)- \quad \frac{WA}{WA_i} = \frac{\cosh N \left[1 - \frac{z}{L} \right]}{\cosh N} \quad \text{donde} \quad N = \sqrt{\frac{PL^2 k_i}{S \rho \mathcal{D}_{AB}}}$$

$$(d)- \quad W_A = \left(\frac{S \rho \mathcal{D}_{AB} W_{Ai}}{L} \right) N \tanh N$$

2. Cálculo de la longitud de un reactor isotérmico. (Problema 18.C.4 - Bird et al.)

Sea a el área de la superficie de un catalizador y S la sección del reactor. Suponer que el flujo másico es w (en lbm/hr).

- Mostrar que el balance a régimen permanente de A a una distancia L está dado por:

$$\frac{dW_{A0}}{dL} = -SaNA$$

(b)- Utilizar la ecuación (2.74) y el resultado anterior para obtener una expresión de la longitud L necesaria para convertir la composición a la entrada $X_A(0)$ en la de la salida $X_A(L)$. Utilizar la relación: $\gamma_\alpha = M_\alpha N_\alpha$

Respuesta:

$$L = \frac{w\delta M_B}{25ac\mathcal{D}_{AB}} \int_{X_A(0)}^{X_A(L)} \frac{dX_{A_0}}{[M_A X_{A_0} + M_B(1 - X_{A_0})]^2 \ln\left(1 - \frac{1}{2}X_{A_0}\right)}$$

3. Difusión y reacción química en un líquido (Problema 19.B.6 - Bird et al.)

(a)- Una esfera sólida de A está suspendida en un líquido B en el que A es ligeramente soluble y en donde A reacciona con constante cinética. Mostrar que el perfil de concentraciones es:

$$\frac{C_A}{C_{A_s}} = \frac{R}{r} \frac{e^{-b\frac{r}{R}}}{e^{-b}}, \quad b^2 = \frac{k_1 R^2}{\mathcal{D}_{AB}}$$

R es el radio de la esfera y C_{A_s} es la solubilidad molar de A en B .

(b)- En régimen cuasiestático, calcular la disminución del diámetro de la esfera a medida que se disuelve y reacciona. Mostrar que la relación radio/ tiempo en:

$$\sqrt{\frac{k_1}{\mathcal{D}_{AB}}}(R - R_0) - \ln \frac{1 + \sqrt{\frac{k_1}{\mathcal{D}_{AB}}}R}{1 + \sqrt{\frac{P_B}{\mathcal{D}_{AB}}}R_0} = -\frac{k_1 C_{A_0} M_A (t - t_0)}{\rho_s}$$

en donde R_0 es el radio de la esfera en t_0 y ρ_s es la densidad de la esfera.

Tarea C

1. Factor de efectividad en discos delgados (*Problema 18.B.14 - Bird et al.*)

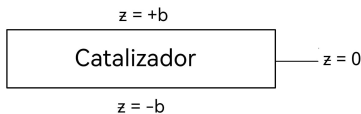


Fig. 2.20. Partícula de catalizador en forma de disco.

Considerar en este caso que el área del grosor del disco es muy pequeña en comparación con el área de los discos. Demostrar que el perfil de concentraciones es:

$$\frac{C_A}{C_{A_s}} = \frac{\cosh\left(\frac{\lambda}{\mathcal{D}_{AB}}z\right)}{\cosh\left(\frac{\lambda}{\mathcal{D}_{AB}}b\right)}$$

Mostrar que el flujo másico en las superficies $z = \pm b$ es:

$$|W_A| = 2\pi R^2 C_{A_s} \mathcal{D}_{AB} \lambda \tanh \lambda b, \quad \lambda = \sqrt{\frac{k_1 a}{D_A}}$$

Mostrar que si el disco es cortado paralelo al plano $x - y$ en varios cortes o rebanadas n , el flujo másico total sería:

$$|W A^{(n)}| = 2\pi R^2 C_{A_s} \mathcal{D}_{AB} \lambda n \tanh\left(\frac{\lambda b}{n}\right)$$

Obtener la expresión del factor de efectividad tomando el límite:

$$\eta_A = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|W_A|}{|W A^{(n)}|} = \frac{\tanh(\lambda b)}{\lambda b}$$

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 reacción química homogénea en una placa plana

En este caso, la concentración en la placa es C_{A_0} y lejos de la placa es $C_{A\infty} \rightarrow 0$. La reacción está dada por $R_A = -k_n C_A^n$. La concentración de A disuelta es pequeña por lo que μ, ρ y D_{AB} son constantes en el fluido. EL sistema esquematizado en la figura 3.1

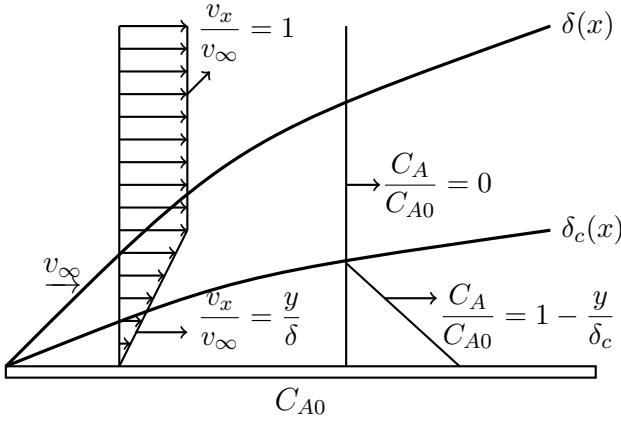


Fig (3.1) Perfiles de concentración y velocidad para un capa límite laminar con reacción química homogénea

Las condiciones en la frontera son:

$$\frac{v_x}{v_\infty} \Big|_{y \leq \delta(x)} = \frac{y}{\delta}$$

$$\frac{v_x}{v_\infty} \Big|_{y \geq \delta(x)} = 1 \quad (3.8)$$

$$\frac{C_A}{C_{A0}} \Big|_{y \leq \delta_c(x)} = 1 - \frac{y}{\delta}$$

$$\frac{C_A}{C_{A0}} \Big|_{y \geq \delta_c(x)} = 0 \quad (3.9)$$

Definiendo $\Delta = \frac{\delta_c}{\delta}$ y suponiendo que $\Delta \leq 1$ (La capa límite de concentración se encuentra dentro de la capa límite de velocidad). Además $v_o = v_y|_{y=0} \rightarrow 0$, la ecuación (3.5) se aplica al perfil de $v_x = \frac{v_\infty y}{\delta}$:

$$\begin{aligned} \mu \frac{v_\infty}{\delta} &= \frac{d}{dx} \int_0^\infty \rho(v_x v_\infty - v_x^2) dy = \rho v_\infty^2 \frac{d}{dx} \int_0^\infty \left(\frac{v_x}{v_\infty} - \frac{v_x^2}{v_\infty^2} \right) dy \\ &= \frac{d}{dx} [\rho v_\infty^2 \int_0^\infty \left(\frac{y}{\delta} - \frac{y^2}{\delta^2} \right) dy] = \frac{d}{dx} \rho v_\infty^2 \left(\frac{y^2}{2\delta} - \frac{y^3}{3\delta^2} \right) \Big|_0^\infty = \frac{d}{dx} [\rho v_\infty^2 \delta \left(\frac{1}{6} \right)] \quad (3.10) \end{aligned}$$

En términos de cantidades molares, la ec (3.7) aplica a al perfil $\frac{C_A}{C_{A0}} = 1 - \frac{y}{\delta_c}$

$$-\frac{D_{AB} C_{A0}}{\Delta \delta} = \frac{d}{dx} \int_0^\infty v_x (C_{A\infty} - C_A) dy + \int_0^\infty R_A dy$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{d}{dx} \left[\frac{v_\infty}{\delta} \int_0^\infty y \left(-1 + \frac{y}{\delta_c} \right) C_{A_0} dy \right] = \frac{d}{dx} \left[\frac{v_\infty C_{A_0}}{\delta} \delta_c^2 \left(\frac{-1}{2} + \frac{1}{3} \right) \right] \\
&- \frac{D_{AB} C_{A_0}}{\Delta \delta} = \frac{d}{dx} \left[v_\infty C_{A_0} \delta \Delta^2 \left(-\frac{1}{6} \right) \right] + k_n C_{A_0}^n \int_0^\infty \left(1 - \frac{y}{\delta_c} \right)^n dy \\
&- \frac{D_{AB} C_{A_0}}{\Delta \delta} = \frac{d}{dx} \left[-\frac{1}{6} v_\infty C_{A_0} \delta \Delta^2 \right] - \frac{k_n C_{A_0}^n}{n+1} \delta \Delta
\end{aligned} \tag{3.11}$$

La Ec (3.10) se integra: $\frac{6\mu v_\infty}{\rho \nu^2} = \delta \frac{d(\delta)}{dx}$

$$\delta \frac{d}{dx}(\delta) = \frac{1}{2} \frac{d}{dx}(\delta^2) \rightarrow 12 \frac{\nu}{v_\infty}(x) = \delta^2 \tag{3.12}$$

Multiplicando la ec (3.11) por $-\frac{\Delta \delta}{C_{A_0} \nu}$, se obtiene:

$$\frac{D_{AB}}{\nu} = \frac{1}{6} \frac{v_\infty}{\nu} (\Delta \delta) \frac{d}{dx}(\delta \Delta^2) + \frac{k_n}{\nu} \left(\frac{C_{A_0}^{n-1}}{n+1} \right) \delta^2 \Delta^2$$

Definiendo al número de Schmidt como $Sc = \frac{\nu}{D_{AB}}$, se obtiene:

$$\frac{1}{Sc} = \frac{v_\infty}{6\nu} (\Delta \delta) \left(\Delta^2 \frac{d\delta}{dx} + 2\Delta \delta \frac{d\Delta}{dx} \right) + \frac{k_n}{\nu} \left(\frac{C_{A_0}^{n-1}}{n+1} \right) \left(\frac{12\nu x}{v_\infty} \right) (\Delta^2)$$

Como $\delta \frac{d}{dx}(\delta) = \frac{1}{2} \frac{d(\delta^2)}{dx} = 6 \frac{\nu}{v_\infty}$ y $\Delta^2 \frac{d\Delta}{dx} = \frac{1}{3} \frac{d}{dx}(\Delta^3)$, luego entonces:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{Sc} &= \Delta^3 + \frac{v_\infty}{6\nu} \left(\frac{12\nu x}{v_\infty} \right) \left[\frac{2}{3} \frac{d}{dx} \Delta^3 \right] + 12 \frac{k_n C_{A_0}^{n-1}}{n+1} \left(\frac{x}{v_\infty} \right) \Delta^2 \\
\frac{1}{Sc} &= \Delta^3 + \frac{4}{3} x \frac{d}{dx}(\Delta^3) + 12 \frac{k_n C_{A_0}^{n-1}}{n+1} \left(\frac{x}{v_\infty} \right) \Delta^2
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Si la reacción no ocurre, entonces $k_n = 0$ y la ec (3.15) se reduce a:

$$\frac{4}{3} x \frac{d}{dx}(\Delta^3) + \Delta^3 - \frac{1}{Sc} = 0 \tag{3.14}$$

Cuya solución es:

$$\Delta^3 = \left[c + \int \frac{1}{Sc} \left(\frac{3}{4x} \right) \exp \left(\int \frac{3}{4x} dx \right) dx \right] \exp \left(- \int \frac{3}{4x} dx \right)$$

Donde c es la constante de integración. Efectuando las operaciones:

$$\Delta^3 = \left[c + \frac{3}{4Sc} \int \frac{1}{x} (x^{\frac{3}{4}}) dx \right] x^{-\frac{3}{4}}$$

$$\Delta^3 = \frac{c}{x^{3/4}} + \frac{3}{4Sc} x^{\frac{3}{4}} \left(\frac{4}{3}\right) x^{-\frac{3}{4}}$$

$$\Delta^3 = \frac{c}{x^{\frac{3}{4}}} + \frac{1}{Sc} \quad (3.15)$$

La constante se determina con la condición $\Delta|_{x \rightarrow 0} = finito$, que implica que:

$$c = 0 \rightarrow \Delta = Sc^{-\frac{1}{3}}; \forall \Delta < 1 \quad (3.16)$$

Esta última ecuación a su vez implica que, puesto que $\Delta \equiv \frac{\delta_c}{\delta}$, cuando no hay reacción, el cociente de los grosores de la capa límite de concentración y la capa límite de velocidad es constante. Los límites de reacción lenta y rápida pueden obtenerse a partir de la ecuación (3.13). Para reacción lenta (x pequeño), se propone la siguiente serie:

$$\Delta = Sc^{-\frac{1}{3}}(1 + a_1\xi + \dots) \quad (3.17)$$

En donde:

$$\xi = 12[k_n \frac{C_{A_0}^{m-1}}{n+1} \frac{x}{v_\infty}] \quad (3.18)$$

Substituyendo la ecuación (3.17) en la ecuación (3.13)

$$\frac{1}{Sc} = \frac{1}{Sc}(1 + a_1\xi)^3 + 4x\Delta^2 \frac{d\Delta}{dx} + \xi\Delta^2$$

Como $\frac{d\Delta}{dx} = \frac{d}{dx}[Sc^{-\frac{1}{3}}(1 + a_1\xi)] = Sc^{-\frac{1}{3}}a_1 \frac{d\xi}{dx}$ y si $x \frac{d\xi}{dx} = \xi$

$$\frac{1}{Sc} = \frac{1}{Sc}(1 + a_1\xi)^3 + Sc^{-\frac{2}{3}}(1 + a_1\xi)^2[4Sc^{-\frac{1}{3}}a_1\xi + \xi]$$

$$\frac{1}{Sc} = \frac{1}{Sc}(1 + a_1\xi)^3 + \frac{4}{Sc}a_1\xi(1 + a_1\xi)^2 + \frac{Sc^{\frac{1}{3}}}{Sc}\xi(1 + a_1\xi)^2$$

Multiplicando toda la expresión por Sc

$$1 = (1 + a_1\xi) + \xi(1 + a_1\xi)^2(4a_1 + Sc^{\frac{1}{3}})$$

Linealizando:

$$0 = 3a_1\xi + \xi(4a_1 + Sc^{\frac{1}{3}}) \rightarrow 0 = 7a_1\xi + \xi Sc^{\frac{1}{3}}$$

Lo que implica que:

$$a_1 = -\frac{Sc^{\frac{1}{3}}}{7} \quad (3.19)$$

Las ecuaciones (3.16) y (3.17) quedan así:

Sin reacción:

$$\Delta = Sc^{-\frac{1}{3}}$$

Con reacción lenta:

$$\Delta = Sc^{-\frac{1}{3}}(1 - \frac{1}{7}Sc^{\frac{1}{3}}\xi) \quad (3.20)$$

Donde ξ está dado por en la ecuación (3.18). La ecuación (3.20) implica que el grosor de la capa límite de concentración disminuye con la reacción química. Para una reacción rápida, se propone que $\Delta \sim \xi^{-\frac{1}{2}}$, es decir, que $\Delta = c\xi^{-\frac{1}{2}}$ en donde c es una constante. Sustituyendo esta expresión de Δ en la ecuación (3.13), se tiene:

$$\frac{1}{Sc} = \frac{4xc^3}{3} \frac{d}{dx}(\xi^{-\frac{3}{2}}) + c^3\xi^{-\frac{3}{2}} + \xi c^2\xi^{-1}$$

Lo cual implica que el valor dominante de la serie a medida que ξ aumenta corresponde a:

$$\frac{1}{Sc} = c^2 \rightarrow c = Sc^{-\frac{1}{2}}$$

Y así, para ξ grande:

$$\Delta = (Sc\xi)^{-\frac{1}{2}} \quad (3.21)$$

La ecuación (3.21) implica que $\frac{\delta_c}{\delta} = \frac{1}{(Sc\xi)^{-\frac{1}{2}}}$, que junto con la ecuación (3.12) revela que:

$$\delta_c = \frac{1}{(Sc\xi)^{\frac{1}{2}}} \left(\frac{12\nu x}{v_\infty} \right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{12\nu x}{Sc\xi v_\infty}}$$

Cuando x es grande, δ_c es constante.

3.3. Convección forzada en placa plana con transferencia de masa rápida

Considerar un flujo a régimen permanente, bidimensional y de un fluido binario, como aparece en la figura 3.1.



Figura 3.1: Flujo tangencial a lo largo de una placa semi-infinita con transferencia de masa. La transición laminar-turbulenta ocurre a un Reynolds crítico $(xv_\infty/\nu)_c$ de $10^5 - 10^6$.

Las propiedades del fluido $\rho, \mu, \hat{C}_p, k, \mathcal{D}_{AB}$ son constantes.

Primeramente se considerará el régimen isotérmico.

$v_0(x)$ describe la distribución del flux de masa en la placa.

Las ecuaciones de capa límite en este caso son:

Continuidad:

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0 \quad (3.22)$$

Movimiento:

$$v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} = \nu \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \quad (3.23)$$

Continuidad de A:

$$v_x \frac{\partial w_A}{\partial x} + v_y \frac{\partial w_A}{\partial y} = \mathcal{D}_{AB} \frac{\partial^2 w_A}{\partial y^2} \quad (3.24)$$

Condiciones de frontera:

$$v_x|_{y \rightarrow \infty} = v_\infty, \quad w_A|_{y \rightarrow \infty} = w_{A\infty} \quad (3.25)$$

$$v_x|_{y=0} = 0, \quad w_A|_{y=0} = w_{A0}, \quad v_y|_{y=0} = v_0(x) \quad (3.26)$$

Integrando la ec. **3.22**:

$$v_y = v_0(x) - \frac{\partial}{\partial x} \int_0^y v_x dy \quad (3.27)$$

Definiendo:

$$\Pi_v = \frac{v_x}{v_\infty} \quad \text{y} \quad \Pi_w = \frac{w_A - w_{A0}}{w_{A\infty} - w_{A0}} \quad (3.28)$$

Las ecs. **3.23** y **3.24** toman la forma:

$$\Pi_v \frac{\partial \Pi_v}{\partial x} + \left(\frac{v_0(x)}{v_\infty} - \frac{\partial}{\partial x} \int_0^y \Pi_v dy \right) \frac{\partial \Pi_v}{\partial y} = \frac{\nu}{v_\infty} \frac{\partial^2 \Pi_v}{\partial y^2} \quad (3.29)$$

$$\Pi_v \frac{\partial \Pi_w}{\partial x} + \left(\frac{v_0(x)}{v_\infty} - \frac{\partial}{\partial x} \int_0^y \Pi_v dy \right) \frac{\partial \Pi_w}{\partial y} = \frac{\mathcal{D}_{AB}}{v_\infty} \frac{\partial^2 \Pi_w}{\partial y^2} \quad (3.30)$$

Con condiciones de frontera:

$$\Pi_v, \Pi_w|_{y \rightarrow \infty} = 1 \quad \text{y} \quad \Pi_v, \Pi_w|_{y=0} = 0 \quad (3.31)$$

Por medio del método del combinación de variables, se propone:

$$\eta = y \sqrt{\frac{1}{2} \frac{v_\infty}{\nu x}} \quad (3.32)$$

La ec. **3.29** se resuelve siguiendo la solución de Blasius. Se define la función de corriente Ψ de acuerdo a:

$$v_x = \frac{\partial \Psi}{\partial y}, \quad v_y = -\frac{\partial \Psi}{\partial x} \quad (3.33)$$

Las cuales satisfacen la ec. **3.22**. Idénticamente la ec. **3.23** en términos de Ψ se expresa como:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial y} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial y} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} = \nu \frac{\partial^3 \Psi}{\partial y^3} \quad (3.34)$$

Ahora, a partir de las ecs. **3.33** y **3.32**:

$$\Psi = \int v_x dy = \int v_x \sqrt{\frac{2\nu x}{v_\infty}} d\eta = \int \Pi_v \sqrt{2\nu x v_\infty} d\eta = \sqrt{2\nu x v_\infty} f(\eta) \quad (3.35)$$

donde $f(\eta) = \int_0^\eta \Pi_v d\eta$. También a partir de la ec. **3.27**:

$$\Psi = - \int v_y dx = - \int \left[v_0(x) - \frac{\partial}{\partial x} \int_0^y v_x dy \right] dx = - \int v_0(x) dx + \int_0^y v_x dy \quad (3.36)$$

Si $v_0 = 0$, recuperamos la ec. **3.35**. Si $v_0 \neq 0$, entonces, como $dx = \frac{-2x}{\eta} d\eta$ tenemos:

$$- \int v_0(x) dx = \frac{2x}{\eta} \int v_0(x) d\eta = \frac{2x}{y} \sqrt{2\nu x v_\infty} \int_0^\eta \frac{v_0}{v_\infty} d\eta \quad (3.37)$$

Luego, sustituyendo **3.36** y **3.37** en la ec. **3.35** obtenemos:

$$\Psi = \sqrt{2\nu x v_\infty} \left(f + \frac{2x}{y} \frac{v_0}{v_\infty} \eta \right)$$

si v_0 varía como $\frac{1}{\sqrt{x}}$ en **3.37** tenemos que:

$$\frac{2x\eta}{y} = -\sqrt{\frac{2v_\infty x}{\nu}} \quad , \quad \frac{v_0}{v_\infty} \sqrt{\frac{2v_\infty x}{\nu}} = -k \quad \text{constante} \quad (3.38)$$

Se requiere que k sea constante, de tal forma que las velocidades o derivadas de Ψ no sean función de k , sino de η . La ecuación de Ψ , por lo tanto, es:

$$\Psi = \sqrt{2\nu x v_\infty} (f - k), \quad f = \int_0^\eta \Pi_v d\eta \quad (3.39)$$

El desarrollo de la solución de Blasius *****

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial x} &= \sqrt{2\nu v_\infty} \frac{\partial}{\partial x} (\sqrt{x} f) = \sqrt{2\nu v_\infty x} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{1}{2} x^{-1/2} f \sqrt{2\nu v_\infty} \\ &= \sqrt{2\nu v_\infty x} \left(-\frac{1}{2} \frac{\eta}{x} f' \right) + \frac{1}{2} f \sqrt{\frac{2\nu v_\infty}{x}} \end{aligned}$$

ya que $\frac{\partial \eta}{\partial x} = -\frac{1}{2} \frac{\eta}{x}$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = -\frac{\eta^2}{y} \nu f' + \frac{\eta}{y} \nu f$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial y} = \frac{\partial \Psi}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} = \frac{\eta}{y} \frac{\partial \Psi}{\partial \eta} = \sqrt{\frac{v_\infty}{2\nu x}} \sqrt{2\nu x v_\infty} f' = v_\infty f'$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial y} = v_\infty \frac{\partial}{\partial x} f' = v_\infty f'' \frac{\partial \eta}{\partial x} = -\frac{1}{2} \frac{\eta}{x} v_\infty f''$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} = v_\infty \frac{\partial f'}{\partial y} = v_\infty \frac{\partial f'}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} = v_\infty \frac{\eta}{y} f''$$

$$\frac{\partial^3 \Psi}{\partial y^3} = v_\infty \frac{\eta^2}{y^2} f'''$$

Substituyendo en la ec. **3.34**:

$$(v_{\infty} f') \left(-\frac{1}{2} \frac{\eta}{x} v_{\infty} f'' \right) - \left[-\frac{\eta^2}{y} \nu f' + \frac{\eta}{y} \nu f \right] v_{\infty} \frac{\eta}{y} f'' = \nu v_{\infty} \frac{\eta^2}{y^2} f'''$$

$$v_{\infty} f' \left(-\nu \frac{\eta^3}{y^2} f'' \right) + v_{\infty} \frac{\eta^3}{y^2} \nu f' f'' - \frac{\eta^2}{y^2} \nu v_{\infty} f f'' = \nu v_{\infty} \frac{\eta^2}{y^2} f'''$$

Ya que $\frac{v_{\infty}}{2x} = \frac{\eta^2}{y^2} \nu$

Luego entonces:

$$f f'' + f''' = 0 \quad (3.40)$$

Con las condiciones de frontera:

$$\begin{cases} f'|_{\eta \rightarrow \infty} = 1 & (\text{Como } v_x = \frac{\partial \Psi}{\partial y} = v_{\infty} f', \text{ significa que } v_x = v_{\infty} \text{ cuando } y \rightarrow \infty) \\ f'|_{\eta=0} = 0 & (v_x = 0 \text{ en } \eta = 0) \\ f|_{\eta=0} = -k & (\text{En la superficie } \Psi = \sqrt{2\nu x v_{\infty}}(-k)) \end{cases} \quad (3.41)$$

Resolviendo para f, f', f'' y f''' es posible conocer el perfil de velocidades ($f' = v_x/v_{\infty}$) en función de η para ***** de k . La solución se da por métodos numéricos.

Resultados de interés obtenidos a partir de la solución incluyen la distribución del esfuerzo cortante a lo largo de la superficie. El esfuerzo cortante sobre la superficie está expresado por:

$$\tau_0(x) = \mu \frac{\partial v_x}{\partial y}(x, 0) = \mu \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2}(x, 0) = \mu v_{\infty} \frac{\eta}{y} f'' = \mu \sqrt{\frac{v_{\infty}^3}{2\nu x}} f''(0) \quad (3.42)$$

Adimensionalizando $\tau_0(x)$:

$$\frac{\tau_0}{\rho(v_{\infty} - 0)v_{\infty}} = \frac{\mu}{\rho} \sqrt{\frac{1}{2\nu x v_{\infty}}} f''(0) = \sqrt{\frac{\nu}{2v_{\infty} x}} f''(0) = \frac{1}{\sqrt{2Re}} f''(0) \quad (3.43)$$

donde Re es el número de Reynolds.

Numéricamente $f''(0) = 0.332$.

El mismo procedimiento se sigue para la resolución de la ec. **3.30** para el perfil de concentraciones. Ahora $f' = \Pi_w = \frac{w_A - w_{A0}}{w_{A\infty} - w_{A0}}$ y análogamente a la ec. **3.43** tenemos:

$$\frac{j_{A0}}{\rho v_{\infty}(w_{A0} - w_{A\infty})} = \frac{f''(0)}{Sc} \sqrt{\frac{\nu}{2v_{\infty}x}} \quad (3.44)$$

Los perfiles de velocidad y concentración se exhiben en la figura **3.1**, para diferentes valores de k y del número de Schmidt (Sc). $k = 0$ significa ausencia de transferencia de masa, k positivo o negativo significa transferencia de masa hacia el fluido (evaporización) o hacia la placa (condensación), respectivamente.



Figura 3.2: Perfiles de velocidades y concentraciones en capa límite laminar sobre placa plana con transferencia de masa en la superficie

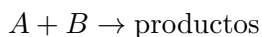
3.4. Convección forzada en placa plana con transferencia de masa lenta

3.5. Difusión de Taylor en flujo laminar

3.6. Transferencia de masa con reacción de 1^{er} orden en flujo turbulento

3.7. 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).

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

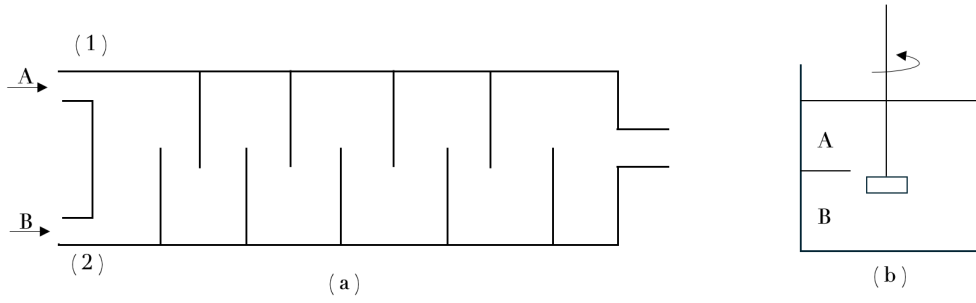


Figura 3.3: Mezclador estático (a) y mezclador dinámico (b)

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla C_A = \mathcal{D}_{AS} \nabla^2 C_A + R_A$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla C_B = \mathcal{D}_{BS} \nabla^2 C_B + R_B \quad (3.45)$$

Condiciones de frontera:

$$C_A = C_{A0}, \quad C_B = 0 \quad \text{para } z = 0, t = 0$$

$$C_B = C_{B0}, \quad C_A = 0 \quad \text{para } z = 0, t = 0 \quad (3.46)$$

3.7.1. Sin Reacción

Definiendo:

$$\Gamma = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}} = \frac{C_B}{C_{B0}} \quad (3.47)$$

Las ecuaciones **3.45** se reducen a:

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + v \cdot \nabla \Gamma = D_{is} \nabla^2 \Gamma \quad (3.48)$$

En las entradas (1) y (2):

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

En flujo turbulento se propone que:

$$\Gamma = \bar{\Gamma} + \Gamma' \quad (3.49)$$

donde:

$$\bar{\Gamma} = \frac{C_{A0} - \bar{C}_A}{C_{A0}} = \frac{\bar{C}_B}{C_{B0}} \quad (3.50)$$

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

$$\left(\frac{C_A}{C_{A0}} \right)^2 - \left(\frac{\bar{C}_B}{C_{B0}} \right)^2 = d^2 \quad (3.51)$$

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:

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + v_b \hat{\nabla} \Gamma = \frac{1}{ReSc} \hat{\nabla}^2 \Gamma \quad (3.52)$$

donde

$$\hat{t} = \frac{v_0 t}{l_0}, \quad \hat{v} = \frac{v}{v_0}, \quad \hat{\nabla} = l_0 \nabla, \quad Re = \frac{l_0 v_0}{\mu} \rho \quad (3.53)$$

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 **3.4**, la función de decaimiento resultante se grafica en función de la distancia axial. El mezclado a nivel molecular (micromezclado) se alcanza. En procesos industriales, normalmente $ReSc \sim 10^9$, por lo que la ecuación **3.52** se reduce a:

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + v_0 \hat{\nabla} \Gamma = 0 \quad (3.54)$$

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

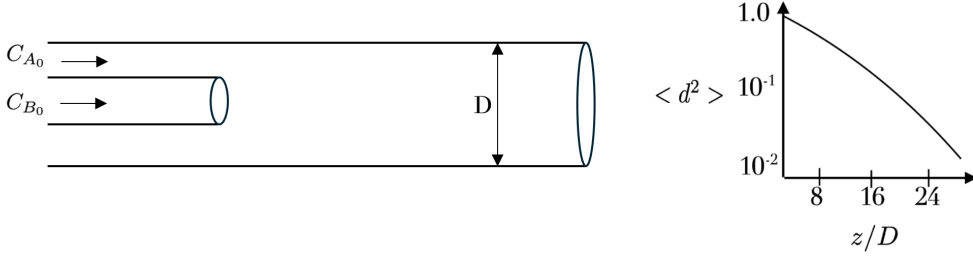
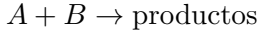


Figura 3.4: Mezclado de 2 corrientes de A y B en tubos concéntricos y su función de decaimiento

3.7.2. Con Reacción



Definiendo

$$\Gamma_r = \frac{C_{A0} - (C_A - C_B)}{C_{A0} + C_{B0}} \quad (3.55)$$

Por la resta de las ecuaciones **3.45**, la descripción del caso con reacción es la misma. Por ello:

$$\left[\frac{C_{A0} - (C_A - C_B)}{C_{A0} + C_{B0}} \right]_{\text{reac.}} = \left[\frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}} \cdot \frac{C_B}{C_{B0}} \right]_{\text{sin reac.}} \quad (3.56)$$

que también es válida para las fluctuaciones.

$$\left[\frac{C'_A - C'_B}{C_{A0} + C_{B0}} \right]_{\text{reac.}} = \left[\frac{C'_A}{C_{A0}} \right]_{\text{sin reac.}} \quad (3.57)$$

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:

$$\left(\frac{C'_A}{C_{A0}} \right)_{\text{reac.}} = \left(\frac{C'_A}{C_{A0}} \right)_{\text{sin reac.}} \quad (3.58)$$

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.

$$R_A = -k_2 C_A C_B \quad (3.59)$$

Promediando en el tiempo:

$$R_A = -k(\bar{C}_A \bar{C}_B + C'_A C'_B) \quad (3.60)$$

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:

$$t_A = \frac{C_{A0}}{R_A} \sim \frac{1}{k_2 C_{B0}} \quad (3.61)$$

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 **1.24**: $n_{B0} = w_{A0}(n_{A0} + n_{B0}) + j_{A0}$ ya que $n_{B0} = 0$, sustituyendo esta ecuación en la **HACER REFERENCIA A LA EC 3.46**

$$\frac{n_{A0}(1 - w_{A0})}{\rho v_{\infty}(w_{A0} - w_{A\infty})} = 0.332 Sc^{-2/3} \sqrt{\frac{\gamma}{v_{\infty} x}}$$

$$n_{A0} = 0.332 Sc^{-2/3} \frac{(w_{A0} - w_{A\infty})}{1 - w_{A0}} \rho v_{\infty} \sqrt{\frac{\mu}{v_{\infty} x \rho}} = (0.332)(0.6)^{-2/3} \frac{(0.05 - 0.01)}{1 - 0.05} \sqrt{\frac{\rho v_{\infty} \mu}{x}}$$

$$n_{A0} = 0.0196 \sqrt{\frac{\rho v_{\infty} \mu}{x}}$$

b) Transferencia de momentum, calor y masa simultáneos

Las ecuaciones **HACER REFERENCIA A LA EC 3.43** y **EC 3.44** se pueden generalizar para incluir la transferencia de calor:

$$\frac{q_0}{\rho \hat{C} p v_{\infty} (T_0 - T_{\infty})} = \frac{f''(0)}{Pr} \sqrt{\frac{J}{2 v_{\infty} x}} \quad (\text{A-1})$$

Las ecuaciones **A-1**, **HACER REFERENCIA A LA EC 3.43** **3.44** se pueden utilizarse en las transferencias simultáneas generalizando la expresión de k **HACER REFERENCIA A LA EC 3.38**

$$K = \frac{\rho_0 v_0(x)}{\rho v_{\infty}} \sqrt{\frac{2 v_{\infty} x}{\gamma}} \quad (\text{A-2})$$

donde ρ , μ , $\hat{C}p$ y \mathcal{D}_{AB} sean evaluadas a las condiciones de referencias siguientes: $T_f = \frac{1}{2}(T_0 + T_{\infty})$ y $W_{Af} = \frac{1}{2}(W_{A0} + W_{A\infty})$

La resolución de problemas de transferencia simultáneas se facilita por medio de las siguientes relaciones de los fluxes:

$$R_v = \frac{(n_{A_0} + n_{B_0})(v_\infty - e)}{\tau_0}$$

$$R_T = \frac{(n_{A_0} + n_{B_0})\hat{C}_p(T_o - T_\infty)}{q_0} \quad (\text{A-3})$$

$$R_w = \frac{(w_{A_0} + w_{a_\infty})(n_{A_0} + n_{B_0})}{n_{A_0} - w_{A_0}(n_{A_0} + n_{B_0})}$$

Los R son independientes de x y se relacionan a los números de $\Lambda = (Re, Sc, Pr)$ de acuerdo a:

$$R = \frac{K\Lambda}{f''(0)} \quad (\text{A-4})$$

Ejemplo: Utilizar las ecuaciones **A-3** y **A-4** para obtener ecuaciones implícitas del flux de masa K en la superficie porosa. Para ello, se analizaran 3 casos:

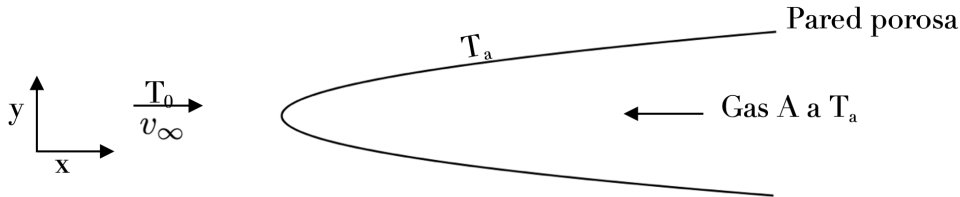


Figura 3.5: Enfriamiento por transpiración en una placa porosa.

1. Evaporación de un líquido A en una corriente de A y B. B es insoluble en A.
Como $n_{B_0} = 0$, R_w en **A-3** se puede calcular: $R_w = \frac{w_{A_0} - w_{A_\infty}}{1 - w_{A_0}}$, donde
 $K = \frac{R_w f''(0)}{Sc} = \frac{1}{Sc} \frac{w_{A_0} - w_{A_\infty}}{1 - w_{A_0}} f''(0)$
2. Reacción irreversible de A (gas) en C (sólido) \rightarrow B (gas) de acuerdo a $A + C \rightarrow 2B$. Pesos moleculares de A y B son iguales. Como $n_{B_0} = -2n_{A_0}$ y $w_A = 0$, $R_w = \frac{0 - w_{A_\infty}}{-1} = w_{A_\infty}$, donde $K = \frac{1}{Sc} w_{a_\infty} f''(0)$

3. Enfriamiento por transpiración. Gas A solamente
Balance de energía:

$$q_0 = v_0 \hat{C}_p \rho_0 (T_a - T_0) = n_{A_0} \hat{C}_p (T_a - T_0)$$

De las ecuaciones **A-3**: $R_T = \frac{n_{A_0} \hat{C}_p (T_o - T_\infty)}{n_{A_0} \hat{C}_p (T_a - T_0)}$

El valor de K es:

$$K = \frac{1}{Pr} \left(\frac{T_0 - T_\infty}{T_a - T_0} \right) f''(0)$$