



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

---

---

**FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES  
ZARAGOZA**

**Material de apoyo para estudiantes que cursan la  
asignatura de transferencia de masa para la mayor  
comprensión de los temas**

**TESIS PROFESIONAL**

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE**

**INGENIERO QUÍMICO**

**P R E S E N T A:**

**RUIZ DE LA CRUZ JUAN CARLOS**

**DIRECTOR DE TESIS:  
DR. LUIS ALBERTO VERDUZCO MORA**

**CIUDAD DE MÉXICO, 2022**





Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



## INDICE DE PAGINAS

### CAPITULO 1

#### FUNDAMENTOS DE TRANSFERENCIA DE MASA “LEY DE FICK “

- Introducción.....10
- Transferencia de masa molecular.....10
- Ley de la difusión.....11
- Segunda ley de Fick.....14
- Transferencia de masa por convección.....15
- Problemas.....17

### CAPÍTULO 2

#### VELOCIDADES DE REFERENCIA EMPLEADAS EN LA TRANSFERENCIA DE MASA

- Introducción.....18
- Velocidad másica promedio.....18
- Velocidad molar promedio.....18
- Problemas.....28

#### 2.1 DIFERENTES EXPRESIONES DE LA RAPIDEZ DE TRANSFERENCIA DE MASA PARA SISTEMAS MULTICOMPONENTES Y LA RELACIÓN ENTRE ELLAS.....22

### CAPITULO 3

#### MÉTODOS EMPÍRICOS PARA LA ESTIMACIÓN DEL COEFICIENTE DE DIFUSIÓN

- Introducción.....30
- Método de Chapman-Enskog.....31
- Método de Guilliland.....36
- Método de Fuller, Shelter y Gidings.....34
- Estimación del coeficiente de difusión de un componente en una mezcla.....37
- Problemas.....42

### CAPÍTULO 4

#### ECUACIÓN DE CONTINUIDAD Y SUS DIFERENTES EXPRESIONES EN UNIDADES MÁSICAS Y MOLARES.

- Introducción.....44
- La ecuación diferencial para la transferencia de masa.....44
- Balances de materia.....45
- Ecuacion de continuidad para la especie a en unidades másicas...46
- Ecuacion de continuidad para la especie a en unidades molares...47



- Ecuación de continuidad para diferentes geometrías.....48
- Ecuación de continuidad de (a) para  $\rho$  y  $D_{AB}$  constantes.....49
- Problemas.....53

## CAPÍTULO 5

### DIFERENTES EXPRESIONES DE LA “ECUACIÓN GENERAL DE TRANSFERENCIA DE MASA POR DIFUSIÓN “Y CASOS PARTICULARES

- Introducción.....58
- Contradifusión equimolar..... 69
- Contradifusión no equimolar.....72
- Difusión a través de un gas estancado.....59
- Difusión en estado pseudoestacionario a través de una película de gas estancada.....65
- Problemas.....

## CAPITULO 6

### ECUACIONES DIFERENCIALES MÁS COMUNES EN LA SOLUCIÓN DE PROBLEMAS DE TRANSFERENCIA DE MASA EN ESTADO ESTACIONARIO.

- Introducción.....82
- Difusión con reacción química homogénea.....83
- Difusión y reacción química en el interior de un catalizador poroso: “el factor de eficacia.....86
- Problemas.....104

## CAPITULO 7

### SOLUCIONES ANALÍTICAS DE PROBLEMAS DE DIFUSIÓN EN ESTADO NO ESTACIONARIO EN DIFERENTES GEOMETRÍAS

- Introducción.....106
- Método de la variable de similitud.....111
- Método de separación de variables.....107
- Método de transformadas de Laplace.....120
- Graficas de concentración-tiempo para formas geométricas simples.124
- Soluciones gráficas de problemas de difusión en estado no estacionario.....130.



- Problemas.....134

## TRANSFERENCIA DE MASA INTERFACIAL

### 8.- DIFERENTES TEORIAS DE LA TRANSFERENCIA DE MASA INTERFACIAL

- Introducción.....141
- Teoría de la doble película.....142
- Teoría de la penetración de Higbie.....143
- Teoría de la renovación de la superficie.....145
  - Teoría de la renovación de la superficie de Danckwerts.....145
  - Teoría combinada de la renovación de la superficie de la película de Dobbins.....146

#### 8.1 COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA DE MASA INDIVIDUALES Y TOTALES EMPLEADOS EN LA ESTIMACIÓN DE LA RAPIDEZ DE TRANSFERENCIA DE MASA INTERFACIAL.

- Coeficientes individuales de transferencia de masa.....147
- Coeficientes totales de transferencia de masa.....149

#### 8.2 TRANSFERENCIA DE MASA A TRAVÉS UNA COLUMNA DA ABSORCIÓN Y ESTIMACIÓN DE LA ALTURA Y NUMERO DE UNIDADES DE TRANSFERENCIA.....153

#### 8.3 DISEÑO DE COLUMNAS DE ABSORCIÓN

- Ecuación de la línea de operación.....162
  - Flujo a contracorriente.....162
  - Flujo concurrente o paralelo.....167
- Ecuación de la línea de equilibrio.....159
- Problemas.....170

## CAPITULO 9

### TRANSFERENCIA SIMULTÁNEA DE CALOR Y MASA

- Transferencia simultanea de calor y masa.....178
- Diseño de torres de enfriamiento.....181
- Problemas.....189

## CAPITULO 10

### COEFICIENTES DE CONVECCION EN REACTORES DE LECHO FLUIDIZADO

- Introducción.....191
- Enfoque de lecho homogéneo.....191
- Transferencia entre esferas individuales y gas circundante.....192
  - Transferencia entre partículas de lecho fijo y gas que fluye...193
  - Coeficiente medio de transferencia de masa  $k_{g(lecho)}$ .....194
  - Superficies exteriores totales de partículas  $S_{ex,particulas}$ .....195
- Transferencia entre partículas de lecho fluidizante y gas fluidizante.200
  - Coeficiente de transferencia de masa promedio,  $k_{g(lecho)}$ .....200
- Transferencia entre esferas aisladas sumergidas y un lecho fluidizado.202
- Enfoque de lecho burbujeante.....204
  - Modelo de Kunii y Levenspiel (1991) .....205
  - Relación entre  $K_{GB}$  y  $k_{g,lecho}$ .....205
  - $K_{GB}$  para partículas no porosas y no absorbentes.....210
  - $K_{GB}$  para partículas altamente adsorbentes.....212
  - $K_{GB}$  para partículas porosas o parcialmente adsorbentes.....213
- Modelo de partridge y rowe.....214
- Modelo de chavarie y grace (1976<sup>a</sup>) .....215
- Problemas.....217

### INDICE DE FIGURAS

- Figura 1.1 Ley de Fick: Dibujo esquemático de los efectos de la difusión de moléculas a través de una membrana celular. ....11
- Figura 1.2 Representación gráfica de la concentración vs altura.....13
- Figura 1.3 Representacion grafica de la segunda ley de Fick.....15
- Figura 1.4 Proceso de conveccion natural.....15
- Figura 2.1 Distribución de concentración en un determinado instante en un sistema de difusión.....20
- Figura 4.1 Volumen de Control Diferencial.....45
- Figura 5.1 Celda de Difusión de Arnold.....59



Figura 5.2 Celda de difusión de Arnold con una superficie líquida en movimiento.....	65
Figura 5.3 Fenómeno de contradifusión equimolar.....	69
Figura 5.4 Fenómeno de contradifusión no equimolar.....	73
Figura 5.5 Fenómeno de difusión a través de una película esférica.....	75
Figura 6.1 Difusión con reacción química homogénea.....	83
Figura 6.2 Partícula esférica de un catalizador poroso.....	86
Figura 6.3 Factores de eficacia para catalizadores sólidos porosos; la curva superior corresponde a partículas planas, la intermedia a larga a partículas cilíndricas, y la inferior a partículas esféricas.....	89
Figura 6.4 Absorción desde una burbuja gaseosa.....	89
Figura 7.1 Régimen no estacionario: difusión simple en un sistema semiinfinito. Isomerización catalítica instantánea.....	107
Figura 7.2 Difusión transitoria en un medio semiinfinito.....	120
Figura 7.3 Grafica de Schmidt en una pared infinitamente gruesa.....	132
Figura 7.4 Grafica solución para el ejemplo 4.....	134
Figura 8.1 Gradientes de concentración entre dos fases de contacto.....	142
Figura 8.2 Composiciones interraciales predichas por la teoría de las 2 resistencias.....	143
Figura 8.3 Fuerzas impulsoras de concentración para la teoría de las dos resistencias.....	143
Figura 8.4 Teoría de la penetración de Higbie.....	144
Figura 8.5 Evaluación de $(Y_A - Y_A^*)$ , la fuerza impulsora total.....	155
Figura 8.6 Evaluación grafica de la integral $\int_{Y_{A1}}^{Y_{A2}} \frac{dY_A}{(Y_A - Y_A^*)}$ .....	155
Figura 8.7 Línea de operación para el ejemplo 2.....	157
Figura 8.8 Evaluación grafica de la integral del ejemplo 2.....	159
Figura 8.9 Proceso a contracorriente en estado estacionario.....	162
Figura 8.10(a) Proceso a contracorriente es estado estacionario, transferencia de la fase G a la fase L.....	162
Figura 8.11 (b) Proceso a contracorriente en estado estacionario, transferencia de la fase L a la fase G.....	162
Figura 8.12 Grafica solución del ejemplo 3.....	167



Figura 8.13 Proceso en flujo concurrente o paralelo en estado estacionario.	167
Figura 8.14 proceso en flujo concurrente o paralelo en estado estacionario, transferencia de la fase L a la fase G.....	168
Figura 8.15 Proceso en flujo concurrente o paralelo en estado estacionario, transferencia de la fase G a la fase L.....	168
Figura 8.16 Grafica solución del ejemplo 4.....	169
Figura 9.1 Condensación de vapor sobre una superficie fría.....	179
Figura 9.2 Diagrama de evaporación del agua.....	183
Figura 9.3 Torre de enfriamiento del ejemplo 1.....	186
Figura 9.4 Grafica solución del ejemplo 1.....	187
Figura 10.1 coeficiente de transferencia de masa partícula-gas para partículas de lecho fijo.....	195
Figura 10.2(a) Coeficiente de transferencia de masa partícula-gas para partículas de lecho fluidizado.....	202
Figura 10.2(b) Comparación del coeficiente de transferencia de masa en lecho fijo y fluidizado.....	202
Figura 10.3 Coeficientes de transferencia de masa entre partículas activas aisladas sumergidas y un lecho fluidizado de partículas inertes. (Área sombreada: rango del coeficiente de transferencia de masa partícula-gas medido en un lecho fluidizado de solo partículas activas.....	204
Figura 10.4 Resumen del coeficiente de transferencia de masa partícula-gas.....	205
Figura 10.5 Descripción grafica de $K_G$ y $K_{GC}$ .....	206
(a) Nube de Burbujas intercambio.....	206
(b) Intercambio nube-emulsión.....	206
Figura 10.6 Nomenclatura ocupada en el desarrollo del modelo de Kunii y Levenspiel.....	209

## INDICE DE TABLAS

Tabla 1.1 Simbología.....	14
Tabla 2.1 Notación de velocidades en sistemas binarios.....	21
Tabla 2.2 Notación de concentraciones en sistemas binarios.....	21
Tabla 2.3 Densidades de flujo de masa y molar en sistemas binarios.....	22



Tabla 3.1 Volúmenes de difusión atómica que se utilizan en la estimación $D_{AB}$ por el método de Fuller, Scheltter y Giddings.....	35
Tabla 3.2 Integrales de colisión de $\Omega_{\mu}$ y $\Omega_D$ basadas en el potencial de Lennard-jones.....	39
Tabla 3.3 Constantes de la fuerza de Lennard-Jones calculadas con datos de viscosidad.....	40
Tabla 3.4 Difusividades binarias de masa en gases.....	41
Tabla 7.1 Valores de la función error.....	117
Tabla 8.1 coeficientes individuales de transferencia de masa.....	148
Tabla 8.2 composiciones del gas en el ejemplo 2.....	157
Tabla 9.1 Bases: $1 m^2$ de sección transversal, $G'_S = 2.0 \frac{Kg}{m^2 seg}$ . La fuerza motriz $(H^* - H)$ se obtiene a intervalos frecuentes de $t_L$ en la figura 9.4 de la siguiente forma.....	186
Tabla 10.1 Esfericidad de las partículas.....	195
Tabla 10.2 Propiedades de las partículas de Naftaleno.....	196
Tabla 10.3 Experimentos de transferencia de masa incluidos en la figura 2.....	197
Figura 10.4 Efecto de $\eta_a \gamma_a$ sobre $K_{GB}$ .....	210
Tabla 10.5 Modelos de transferencia de masa entre fases y coeficientes para el intercambio de ozono en un lecho bidimensional de aire fluidizado.....	212

## RESUMEN

El siguiente material se realizó en base a una determinada situación presentada en las clases de la materia de transferencia de masa en la que básicamente en el momento de presentarse los temas del mapa curricular de la materia se omitían determinadas cuestiones matemáticas debido a que posiblemente el profesor en cuestión consideraba que no hacía falta presentar los temas de manera tan detallada matemáticamente hablando, sino solo directamente las ecuaciones con las que se daba solución al problema sin tanta deducción matemática correspondiente.

El correspondiente trabajo muestra aquellos temas vistos en la clase de transferencia de masa desde la ecuación de inicio hasta el resultado final, resultado que se aplica en problemas propuestos al final de cada capítulo para su correspondiente resolución y hacer práctica de las ecuaciones de cada tema.

Se entiende por material didáctico al conjunto de medios materiales que intervienen y facilitan el proceso de enseñanza-aprendizaje. Estos materiales pueden ser tanto físicos como virtuales, asumen como condición, despertar el interés de los estudiantes, adecuarse a las características fisicoquímicas de los mismos, además que facilitan la actividad docente al servir de guía; asimismo, tienen la gran virtud de adecuarse a cualquier tipo de contenido (Morales Muñoz, 2012).

La asignatura de Transferencia de Masa se encuentra ubicada en el séptimo semestre de la carrera de Ingeniería Química, en el módulo de “Procesos de Separación” del ciclo terminal. Los temas principales del programa de asignatura comprenden los siguientes:

- 1.- Difusión molecular
- 2.-Ecuaciones de transferencia para difusión molecular
- 3.-Difusión turbulenta
- 4.-Transferencia de masa a través de interfaces
- 5.-Transferencia de masa con reacción química
- 6.-Transferencia simultánea de calor y masa

En esta tesis se presentan los conceptos esenciales en la transferencia de masa, de cada uno de los temas incluidos en el programa de asignatura, así como un conjunto de ejercicios resueltos y otros que son propuestos para ser resueltos por el alumno. Además, se introduce un tema adicional al establecido en el programa, éste se enfoca en los fenómenos de transferencia de masa involucrados en la técnica de fluidización.

Cada uno de los capítulos presenta una breve introducción teórica, una serie de ejercicios resueltos y ejercicios propuestos para que el alumno verifique que los conocimientos del tema han sido adquiridos.

Los aspectos teóricos, ejercicios resueltos y propuestos, se obtuvieron de libros de texto clásicos en el estudio de fenómenos de transporte como son:

- 1.- “Fenómenos de transporte”, Bird
- 2.- “Fundamentos de Transferencia de Momento, Calor y Masa”, Welty



3.- “Operaciones de transferencia de masa”, Treybal  
Así como de artículos especializados en el área de la fluidización.

## **MOTIVACIÓN Y PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA**

### **OBJETIVOS**

#### **OBJETIVO GENERAL**

Crear material didáctico para el estudio de la asignatura de Transferencia de Masa, de séptimo semestre del módulo de procesos de separación de la carrera de Ingeniería Química, de la Facultad de Estudios Superiores Zaragoza

#### **OBJETIVOS PARTICULARES**

- 1.-Conocer a detalle el programa de asignatura de la materia de Transferencia de Masa
- 2.-Presentar de manera detallada las diversas ecuaciones matemáticas que intervienen en los diferentes fenómenos fisicoquímicos tomados en cuenta por el fenómeno de transporte conocido como transferencia de masa, de tal manera que el alumno no encontrara ninguna dificultad en la revisión de las ecuaciones debido a que se encuentran completamente desarrolladas
- 3.-Resolver ejercicios que ejemplifiquen la aplicación de cada uno de los conceptos desarrollados en el programa de asignatura
- 4.-Elegir una serie de ejercicios y proponerlos como ejercicios de reforzamiento.
- 5.-Establecer las bases en el cálculo de los coeficientes de transferencia de masa aplicados a la técnica de fluidización.

## **CAPÍTULO 1**

### **FUNDAMENTOS DE TRANSFERENCIA DE MASA “LEY DE FICK “**

#### **INTRODUCCIÓN**

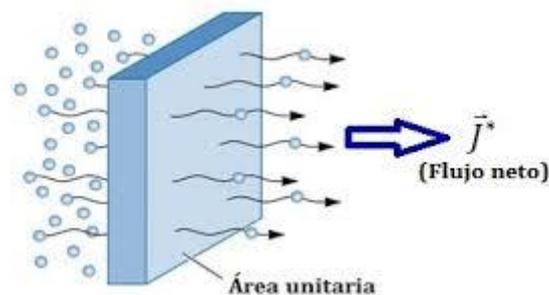
La transferencia de masa interviene en muchas de las experiencias de la vida diaria. Un terrón de azúcar que se agrega a una taza de café negro llega finalmente a disolverse y entonces llega a difundirse de manera uniforme en todo el café. El agua se evapora de las lagunas para incrementar la humedad de la corriente de aire que pasa sobre ellas. El perfume presenta una agradable fragancia que llega a toda la atmosfera del entorno.

La transferencia de masa juega un papel muy importante en muchos procesos industriales: la eliminación de contaminantes de las corrientes de descarga de las plantas por absorción, la separación de los gases del agua residual, la difusión de neutrones dentro de los reactores nucleares, la difusión de sustancias absorbidas dentro de los poros del carbón activado, la

rapidez de las reacciones químicas y biológicas catalizadas y acondicionamiento del aire son ejemplos de este tipo de fenómeno de transferencia de masa. (Welty, 2015, pág. 560)

## TRANSFERENCIA DE MASA MOLECULAR

Las leyes de la transferencia de masa muestran la relación entre el flujo de la sustancia que se difunde y el gradiente de concentración responsable de esta transferencia de masa. Desafortunadamente, la descripción cuantitativa de la difusión molecular es bastante más compleja que las descripciones análogas de la transferencia molecular de momento y de energía que ocurren en un componente de una sola fase. Puesto que la transferencia de masa molecular o difusión, como también se llama, solo ocurre en mezclas, su evaluación debe requerir un examen del efecto de cada componente. Por ejemplo, con frecuencia se deseará conocer la rapidez de difusión de un componente específico en relación con la velocidad de la mezcla en la que se mueve. Puesto que cada componente debe tener movilidad diferente, la velocidad de la mezcla debe evaluarse tomando el promedio de las velocidades de todos los componentes presentes. (Welty, 2015, pág. 562)



*Figura 1.1 Ley de Fick: Dibujo esquemático de los efectos de la difusión de moléculas a través de una membrana celular. (Welty, 2015)*

Si se estudia el comportamiento del terrón de azúcar que se agrega a una taza de café, la experiencia indica que el lapso que se requiere para distribuir el azúcar dependerá de si el líquido se encuentra estático o si se agita en forma mecánica por medio de una cuchara. El mecanismo de transferencia de masa, como se observa en la transferencia de calor, depende de la dinámica del sistema en el que ocurre. La masa puede transferirse por el movimiento aleatorio de las moléculas en los fluidos estáticos, o puede transferirse desde una superficie hacia adentro del fluido en movimiento con ayuda de las características dinámicas del flujo. Existen dos modos distintos de transporte, la transferencia de masa molecular y la transferencia de masa convectivo, que son análogos a la transferencia de

calor por conducción y la transferencia de calor por convección. Cada una de estas formas de transferencia de masa se describirá y analizará en el presente capítulo. Como en el caso de la transferencia de calor, de inmediato es necesario darse cuenta que con frecuencia los dos mecanismos actúan de manera simultánea. Sin embargo, en la confluencia de las 2 formas de transferencia de masa, un mecanismo puede dominar cuantitativamente, de manera que es necesario utilizar soluciones aproximadas en el que intervenga solamente el modo dominante. (Welty, 2015, págs. 560-561)

### LEY DE LA DIFUSION (PRIMERA LEY DE FICK)

El flujo de masa o molar de una especie determinada es una cantidad vectorial que representa la cantidad de esta especie en particular, ya sea en unidades molares o de masa, que pasa durante un incremento determinado de tiempo a través de un área normal al vector. El flujo puede definirse haciendo referencia a coordenadas que se encuentran fijas en el espacio, a coordenadas que se mueven a la velocidad promedio molar. (Welty, 2015, págs. 567-568)

La relación básica para la difusión molecular define al flujo molar en relación con la velocidad promedio molar,  $J_A$ . Una relación empírica para este flujo molar, postulada en primer lugar por Fick y que por ello con frecuencia se conoce como la primera ley de Fick el cual define la difusión del componente  $A$  en un sistema isotérmico e isobárico. Para la difusión en la dirección  $z$  únicamente, la ecuación de rapidez de cambio de Fick es

$$\vec{J}_{A,z} = -D_{AB} \frac{dc_A}{dz} \quad (1.1)$$

Donde  $J_{A,z}$  es el flujo molar en la dirección  $z$  en relación con la velocidad promedio molar,  $\frac{dc_A}{dz}$  es el gradiente de concentración en la dirección  $z$  y  $D_{AB}$  es el factor de proporcionalidad, es la difusividad en masa o coeficiente de difusión para el componente  $A$  que se difunde a través del componente  $B$ . (Welty, 2015, pág. 568)

**Flujo = –(densidad total)(coeficiente de difusión)(gradiente de concentración)**  
o

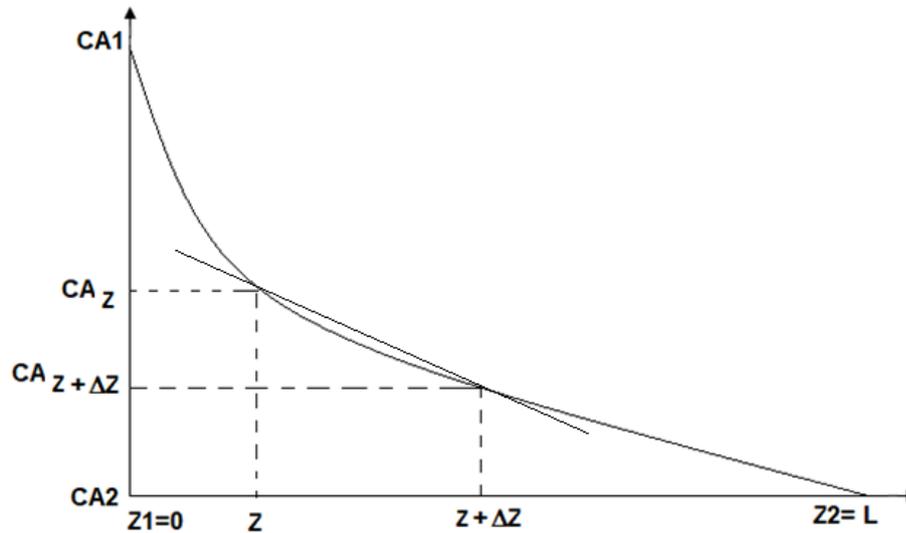
$$\vec{J}_{A,z} = -cD_{AB} \left( \frac{dy_A}{dz} \right) \quad (1.2)$$

Puesto que la concentración total  $c$  bajo condiciones isotérmicas e isobáricas es constante, la ecuación es una forma especial de la relación más general. Una expresión equivalente para  $j_{A,z}$ , el flujo de masa en la dirección  $z$  relativo a la velocidad promedio en masa, es

$$\vec{J}_{A,z} = -\rho D_{AB} \left( \frac{dw_A}{dz} \right) \quad (1.3)$$

donde  $\left(\frac{dw_A}{dz}\right)$  es el gradiente de concentración en términos de la fracción en masa. Cuando la densidad es constante, esta relación se simplifica a

$$\vec{J}_{A,z} = -D_{AB} \left(\frac{d\rho_A}{dz}\right) \quad (1.4)$$



*Figura 1.2 Representación gráfica de la concentración vs altura (Elaboración propia)*

- El gradiente de concentración que se establece entre los puntos  $z_1$  y  $z_2$  una vez que se haya alcanzado el régimen permanente.
- Y la longitud en donde A se difunde en B ( $z_2 - z_1$ )

$$\vec{J}_{A,z} = -D_{AB} \left[ \frac{c_{A_2} - c_{A_1}}{z_2 - z_1} \right] = -D_{AB} \left[ \frac{\Delta c_A}{\Delta z} \right] \quad (1.5)$$

Observar que la ecuación (1.5) es una estimación burda el flux molar del componente A en el espacio comprendido entre  $z$  y  $z + \Delta z$  al que le corresponde el gradiente de concentración  $(c_{A_2} - c_{A_1})$ , de tal manera que la expresión entre corchetes no es más que una pendiente de una línea recta que pasa por esos puntos que en todo caso la evaluación del flux molar por medio de la ecuación (1.5) representaría una aproximación del flux real representado por la trayectoria curva de la figura (1.1). Este error se vería minimizado haciendo que  $z$  y  $(z + \Delta z)$  sea lo más pequeño posible, lo que haría que el flux se evaluara en  $z$  exactamente, para esto será necesario tomar el límite del término entre corchetes de la ecuación 1.5 haciendo que  $\Delta z$  se aproxime a cero, dando lugar al concepto de derivada, es decir:

$$\vec{J}_{A,z} = -D_{AB} \left( \frac{\partial c_A}{\partial z} \right) = -cD_{AB} \left( \frac{\partial x_A}{\partial z} \right) \quad (1.6)$$

La ecuación (1.6) es la expresión de la ley de Fick, encargada de estimar el flux molar del componente  $A$  en un punto específico desde el punto de vista de un sistema de ejes coordenados estacionarios.

**Tabla 1.1 Simbología**

Símbolo	Nombre	Unidad
$\vec{J}_{A,z}$	Flujo difusivo	$\frac{mol}{m^2 s}$
$D_{AB}$	Coeficiente de difusión	$\frac{m^2}{s}$
$c$	Concentración	$\frac{mol}{m^3}$
$R$	Constante universal de los gases	$\frac{J}{mol^\circ K}$
$T$	Temperatura Absoluta	$K$
$\rho$	Densidad del fluido	$\frac{Kg}{m^3}$
$t$	Tiempo	$s$
$(x, y, z)$	Variables de Posición	$m$
$k_c$	Coeficiente de convección	$\frac{m}{s}$

## SEGUNDA LEY DE FICK

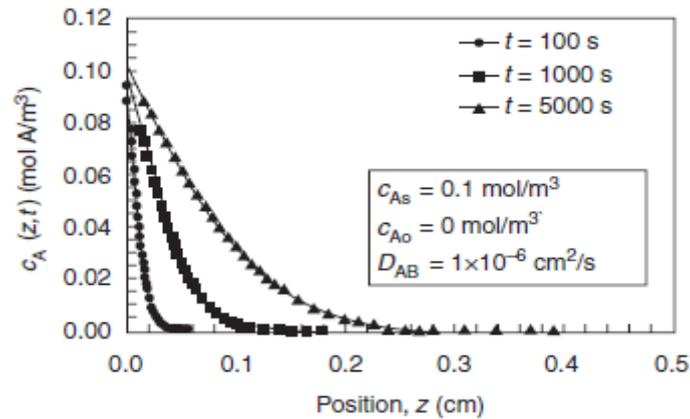
Los procesos transitorios en los que la concentración en un punto determinado varía con el tiempo se identifican como procesos dependientes del tiempo. Tal variación en concentración se asocia con una variación en el flujo de masa. Pueden citarse muchos ejemplos comunes de transferencias en estado transitorio. Estos generalmente caen dentro de dos categorías: el proceso en el que el estado transitorio es solo durante el arranque y el proceso en el que la operación es en un lote o en un sistema cerrado durante toda su duración. (Welty, 2015, pág. 676)

Se trata de una ecuación diferencial parcial que en una dimensión se escribe:

$$D_{AB} \frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} = \frac{\partial c_A}{\partial t} \quad (1.7)$$

Y su solución general mejor conocido como la función error

$$\left( \frac{c_{A_s} - c_A}{c_{A_s} - c_{A_0}} \right) = erf \left( \frac{x}{\sqrt{4D_{AB}t}} \right) \quad (1.8)$$

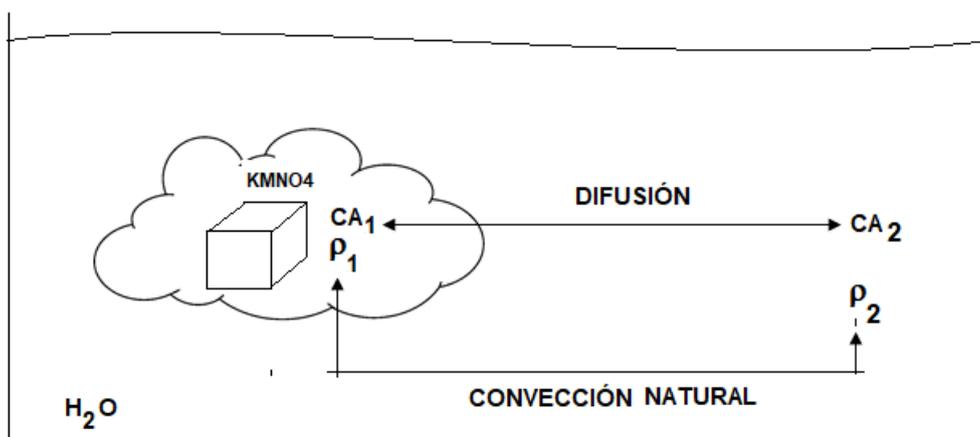


*Figura 1.3 Representación grafica de la segunda ley de Fick. (Welty, 2015)*

### TRANSFERENCIA DE MASA POR CONVECCIÓN

La transferencia de masa debido a la convección implica la transferencia entre un fluido que se mueve y una superficie o entre dos fluidos que se mueven y que son relativamente inmiscibles. Esta forma de transferencia depende tanto de las propiedades de transporte como de las características dinámicas del fluido que fluye. (Welty, 2015, pág. 594)

Como en el caso de la transferencia de calor por convección debe hacerse una distinción entre dos tipos de flujo. Cuando se utiliza una bomba externa o cualquier otro dispositivo similar para provocar el movimiento de un fluido, el proceso se conoce como convección forzada. Si el movimiento del fluido se debe a una diferencia de densidad, que puede resultar de una diferencia en concentración o en temperatura, el proceso se conoce como convección libre o natural. (Welty, 2015, pág. 594)



*Figura 1.4 Proceso de conveccion natural (Elaboracion Propia)*

$$\vec{J}_{A,z} = k_c(c_{A1} - c_{A2}) = \frac{D_{AB}}{z}(c_{A1} - c_{A2}) \quad (1.9)$$

$$k_c = \frac{\vec{J}_{A,z}}{(c_{A_1} - c_{A_2})} = \frac{\frac{\text{mol}}{\text{m}^2 \text{s}}}{\frac{\text{mol}}{\text{m}^3}} = \frac{\text{m}}{\text{s}} \quad (1.10)$$

Si existe cualquier variación de densidad dentro de una fase líquida o gaseosa se producirán corrientes de convección natural. La variación en densidad puede deberse a las diferencias de temperatura o diferencias de concentración relativamente altas.

### EJEMPLO 1 (Elaboración propia)

El gas hidrógeno se almacena a alta presión en un recipiente rectangular (10 mm de espesor en las paredes). La concentración de hidrógeno en la pared interior es  $1 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$  y esencialmente insignificante en la pared exterior. El  $D_{AB}$  para el hidrógeno en acero es de  $2.6 \times 10^{-13} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$ . ¿Cuál es el flujo molar del hidrógeno a través del acero?

$$\vec{J}_{A,z} = -D_{AB} \frac{dc_A}{dz}$$
$$\vec{J}_{A,z} \int_{z_1}^{z_2} dz = -D_{AB} \int_{c_{A_1}}^{c_{A_2}} dc_A$$
$$\vec{J}_{A,z} = \frac{D_{AB}(c_{A_1} - c_{A_2})}{(z_2 - z_1)} = \frac{\left(2.6 \times 10^{-13} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}\right)(1 - 0) \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}}{10 \times 10^{-3} \text{m}} = 2.6 \times 10^{-11} \frac{\text{mol}}{\text{m}^2 \text{s}}$$

### EJEMPLO 2 (Elaboración propia)

Considere el sistema (cloropirrina-aire) ( $\text{ClCl}_3\text{NO}_2 - \text{Aire}$ ) ¿Cuál es la velocidad de evaporación en  $\frac{\text{g}}{\text{hr}}$  de la ( $\text{ClCl}_3\text{NO}_2 - \text{Aire}$ ) considerando a este como una sustancia pura a  $25^\circ\text{C}$ ?

$$\vec{J}_{A,z} = -D_{AB} \frac{dc_A}{dz}$$
$$\vec{J}_{A,z} \int_{z_1}^{z_2} dz = -D_{AB} \int_{c_{A_1}}^{c_{A_2}} dc_A$$

$$\vec{J}_{A,z} = \frac{D_{AB}(c_{A1} - c_{A2})}{(z_2 - z_1)} = \frac{\left(2.6 \times 10^{-13} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}\right)(1 - 0) \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}}{10 \times 10^{-3} \text{m}} = 2.6 \times 10^{-11} \frac{\text{mol}}{\text{m}^2 \text{s}}$$

## PROBLEMAS

1. El etanol se difunde a través de una película estancada de 4 mm de agua. Las concentraciones de etanol de la entrada y la de los planos existentes se mantienen en  $0.1 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$  y  $0.02 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$ , respectivamente. Si la temperatura de la película de agua es  $283^\circ\text{K}$ , determine el flujo molar en estado estacionario del etanol en función de la posición  $z$  dentro de la película líquida. (Welty, 2015, pág. 665)
2. Determinar el tiempo que tarda un mol de etanol en difundirse en una película estancada de agua, de 4 mm de espesor, si la concentración de los planos de entrada y salida es  $100 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$  y  $0 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$ , respectivamente. Considérese que el área de transferencia de masa es de  $100 \text{ cm}^2$  y que la temperatura en la película de agua es de  $283^\circ\text{K}$ . Los resultados ayudaran a confirmar el concepto de profundidad de penetración. (Welty, 2015, pág. 665)

## CAPITULO 2

### MÉTODOS EMPÍRICOS PARA LA ESTIMACIÓN DEL COEFICIENTE DE DIFUSIÓN

- MÉTODO DE CHAPMAN-ENSKOG
- MÉTODO DE GUILLILAND
- MÉTODO DE FULLER, SHELTER Y GIDINGS
- ESTIMACIÓN DEL COEFICIENTE DE DIFUSIÓN DE UN COMPONENTE EN UNA MEZCLA

### INTRODUCCION

La ley de proporcionalidad de Fick,  $D_{AB}$ , se conoce como coeficiente de difusión. Sus dimensiones fundamentales, se pueden obtener a partir de la ecuación,

$$D_{AB} = \left( \frac{-J_{A,z}}{\frac{dc_A}{dz}} \right) = \left( \frac{M}{L^2 t} \right) \left\{ \frac{1}{\left( \frac{M}{L^3} \right) \left( \frac{1}{L} \right)} \right\} = \frac{L^2}{t} = \left( \frac{m^2}{s} \right) \quad (2.1)$$

Son idénticas a las ecuaciones fundamentales de las otras propiedades de transporte: la viscosidad cinemática,  $\nu$ , y la difusividad térmica,  $\alpha$ , o su relación equivalente  $\left( \frac{k}{\rho c_p} \right)$ . La difusividad en masa se registra en  $D_{AB} \left( \frac{cm^2}{s} \right)$ ; las unidades SI son  $D_{AB} \left( \frac{m^2}{s} \right)$ , que es un factor  $10^{-4}$  veces más pequeño. En el sistema inglés es más común emplear  $D_{AB} \left( \frac{pie^2}{s} \right)$ . La conversión entre estos sistemas implica las relaciones simples:

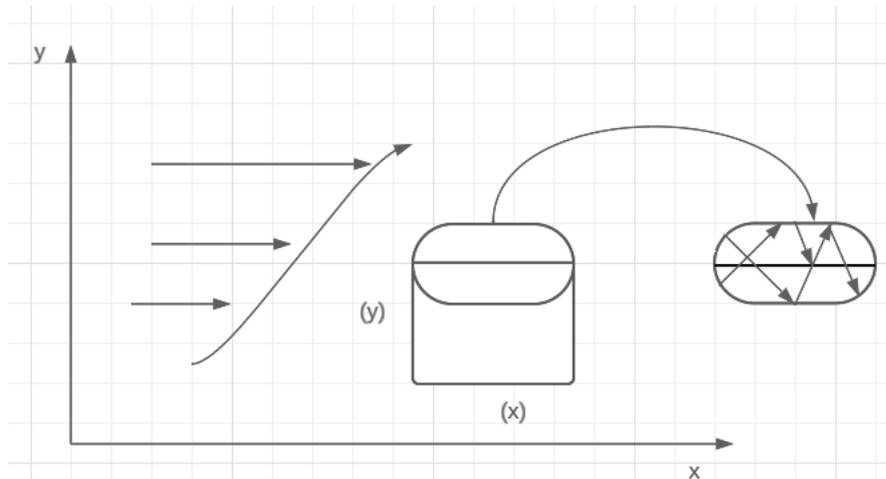
$$\left[ \begin{array}{l} \frac{D_{AB} \left( \frac{cm^2}{s} \right)}{D_{AB} \left( \frac{m^2}{s} \right)} = 10^4 \quad \rightarrow \quad D_{AB} \left( \frac{cm^2}{s} \right) = 10^4 \left\{ D_{AB} \left( \frac{m^2}{s} \right) \right\} \\ \frac{D_{AB} \left( \frac{pie^2}{s} \right)}{D_{AB} \left( \frac{cm^2}{s} \right)} = 3.87 \quad \rightarrow \quad D_{AB} \left( \frac{pie^2}{s} \right) = 3.87 \left\{ D_{AB} \left( \frac{cm^2}{s} \right) \right\} \end{array} \right] \quad (2.2)$$

El coeficiente de difusión depende de la presión, la temperatura y la composición del sistema. Como podría esperarse al considerar la movilidad de las moléculas, los coeficientes de difusión en general son más altos para gases (en el intervalo de  $5 \times 10^{-6} \frac{m^2}{s}$  a  $1 \times 10^{-5} \frac{m^2}{s}$ ), que para líquidos (en el intervalo de  $10^{-10} \frac{m^2}{s}$  a  $10^{-9} \frac{m^2}{s}$ ), que son más altos que los valores registrados para sólidos (en el intervalo  $10^{-14} \frac{m^2}{s}$  a  $10^{-10} \frac{m^2}{s}$ ).

En ausencia de datos experimentales, se han desarrollado expresiones semiteóricas que proporcionan aproximaciones, algunas veces tan validas como los valores experimentales debido a las dificultades que se encuentran en su determinación. (Welty, 2015, pág. 574)

## DIFUSIVIDAD DE MASAS GASEOSAS

Las expresiones teóricas para el coeficiente de difusión en mezclas gaseosas de baja



*Figura 2.1 movimiento molecular en la superficie de un volumen de control (Welty 2015)*

densidad en función de las propiedades moleculares del sistema fueron deducidas por Jeans, Chapman y Sutherland, utilizando la teoría cinética de los gases. Al utilizar el razonamiento de estos primeros científicos para explicar los fenómenos de transporte molecular, puede examinarse el movimiento de las moléculas de gas como se hace con los temas de viscosidad y conductividad térmica y después deducir una expresión que relaciona el coeficiente de difusión con las propiedades de los sistemas gaseosos.

Considere el volumen de control que aparece en la figura 2.1. si se especifica que hay un gas estático o un flujo laminar en la dirección ( $x$ ), puede considerarse que la transferencia de masa de la especie  $A$  en la dirección ( $y$ ) solo ocurre a escala molecular. Al aplicar la ecuación (1.2).

$$\iint \rho(\vec{v} * \vec{n})dA + \frac{\partial}{\partial t} \iiint \rho dV = 0 \quad (2.3)$$

$$\iint \rho(\vec{v} * \vec{n})dx dz + \frac{\partial}{\partial t} \iiint \rho dx dy dz = 0 \quad (2.4)$$

A un flujo permanente de masa a través de la cara superior del elemento, se obtiene

$$\iint \rho(\vec{v} * \vec{n})dA = \iint \rho(\vec{v} * \vec{n})dxdz = 0 \quad (2.5)$$

Esta ecuación simplemente establece que el flujo de masa hacia arriba debe ser igual al flujo de masa hacia abajo.

Como primera aproximación, considere un sistema que contiene moléculas de tamaño y masa igual y que tienen velocidades promedio iguales. Solo una mezcla formada por isotopos del mismo elemento podría parecerse aproximadamente a este sistema. Al examinar de nuevo la ecuación que se dedujo en base microscópica, puede concluirse que el número de moléculas que cruzan la cara superior desde abajo debe ser igual al número de moléculas que cruzan desde arriba. Puesto que como lo muestra la figura (2.1), existe una concentración de la especie A, mas moléculas de la especie A seran transportadas a través de la superficie de control desde arriba que desde abajo. Esto produce un flujo neto de A moléculas en la dirección y.

Como se ha realizado en los temas de viscosidad conductividad térmica, se utilizarán las siguientes ecuaciones deducidas de la teoría cinética de los gases con baja densidad:

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \quad (2.6)$$

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}(\pi)(d^2)(N)} \quad (2.7)$$

$$Z = \frac{1}{4} N\bar{c} \quad (2.8)$$

Donde  $\bar{c}$  es la velocidad molecular aleatoria promedio,  $\frac{\bar{c}}{4}$  es la velocidad de una molecula individual a medida que pasa a través del área  $\Delta x\Delta z$ ,  $\lambda$  es la trayectoria libre media,  $k$  es la constante de Boltzman,  $m$  es la masa de la molecula,  $d$  es el diámetro de las moléculas esféricas,  $N$  es la concentración molecular y  $Z$  es la frecuencia con que llegara una molecula al área  $\Delta x\Delta z$ . La ecuación de continuidad representada en términos de las moléculas que se mueven es, tomando de nuevo la ecuación (2.5)

$$\iint \rho(\vec{v} * \vec{n})dA = \iint \rho(\vec{v} * \vec{n})dxdz = 0 \quad (2.9)$$

y resolviendo la doble integral de superficie, obtenemos

$$\left\{ \sum_n m \left( \frac{\bar{c}}{4} \right) \Delta x \Delta z \right\}_{y^-} - \left\{ \sum_n m \left( \frac{\bar{c}}{4} \right) \Delta x \Delta z \right\}_{y^+} = 0 \quad (2.10)$$

o cuando se suma sobre las  $N$  moléculas en una unidad de volumen

$$\left\{ \rho \left( \frac{\bar{C}}{4} \right) \Delta x \Delta z \right\}_{y^-} - \left\{ \rho \left( \frac{\bar{C}}{4} \right) \Delta x \Delta z \right\}_{y^+} = 0 \quad (2.11)$$

Si solo van a contarse las moléculas de  $A$  que cruzan esta superficie, la ecuación debe tomar en cuenta un flujo neto de masa en la dirección  $y$ ,

$$\vec{J}_{A,z} = \left( \frac{\bar{C}}{4} \right) (\rho_A)_{y^-} - \left( \frac{\bar{C}}{4} \right) (\rho_A)_{y^+} \quad (2.12)$$

$$\vec{J}_{A,z} = \{ (\rho_A)_{y^-} - (\rho_A)_{y^+} \} \left( \frac{\bar{C}}{4} \right) \quad (2.13)$$

De nuevo como en los temas de viscosidad y conductividad térmica puede suponerse que el perfil de concentraciones es esencialmente lineal para una distancia de varias trayectorias libres medias. Entonces

$$(\rho_A)_{y^-} = \rho_A - \left( \frac{\partial \rho_A}{\partial y} \right) \delta \quad (2.14)$$

y

$$(\rho_A)_{y^+} = \rho_A + \left( \frac{\partial \rho_A}{\partial y} \right) \delta \quad (2.15)$$

donde

$$y^+ = y - \delta \quad (2.16)$$

y

$$y^- = y + \delta \quad (2.17)$$

La sustitución de estas relaciones para  $(\rho_A)_{y^-}$  y  $(\rho_A)_{y^+}$  en la ecuación (2.12) da como resultado

$$\vec{J}_{A,z} = -2 \left( \frac{\bar{C}}{4} \right) (\delta) \frac{\partial \rho_A}{\partial y} \quad (2.18)$$

donde  $\delta$  representa el componente  $y$  de la distancia entre choques. Se relaciona a la trayectoria libre media de una molécula,  $\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}(\pi)(d^2)(N)}$ , por la expresión

$$\delta = \frac{2}{3} \lambda = \frac{2}{3} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}(\pi)(d^2)(N)} \right\} \quad (2.19)$$

La ecuación ahora se convierte en  $\frac{2}{3} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}(\pi)(d^2)(N)} \right\}$ , sustituyendo en la ecuación (2.20)

$$\vec{J}_{A,z} = -2 \left( \frac{\bar{C}}{4} \right) (\delta) \frac{\partial \rho_A}{\partial y} = -2 \left( \frac{\bar{C}}{4} \right) \left( \frac{2}{3} \lambda \right) \frac{\partial \rho_A}{\partial y} = -2 \left( \frac{\bar{C}}{4} \right) \left\{ \frac{2}{3} \left( \frac{1}{\sqrt{2}(\pi)(d^2)(N)} \right) \right\} \frac{\partial \rho_A}{\partial y} \quad (2.20)$$

$$\vec{j}_{A,z} = -2 \left( \frac{\bar{C}}{4} \right) (\delta) \frac{\partial \rho_A}{\partial y} = - \left( \frac{1}{3} \right) \bar{C} \lambda \frac{\partial \rho_A}{\partial y} = -D_{AB} \frac{\partial \rho_A}{\partial y}$$

Si se compara la ecuación (2.20) con la ecuación  $\vec{j}_{A,z} = -\rho D_{AB} \frac{\partial w_A}{\partial y}$  es evidente que el coeficiente de difusión para una mezcla moléculas similares, es decir,  $A$  y su isotopo  $A^*$ , es

$$D_{AA^*} = - \left( \frac{1}{3} \right) \bar{C} \lambda = D_{AB} \quad (2.21)$$

Este coeficiente de difusión con transferencia se conoce como coeficiente de auto difusión y se utiliza para explicar la difusión de moléculas trazadoras.

La situación de los resultados cinéticos para  $\bar{C}$  y  $\lambda$  en la ecuación (2.21) lleva a

$$D_{AA^*} = \frac{2}{3\pi^2 d^2 N} \left( \frac{\kappa T}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.22)$$

Para un gas ideal,  $N$  puede sustituirse utilizando la relación

$$N\kappa T = cRT = P \quad (2.23)$$

Lo que da

$$D_{AA^*} = \frac{2}{3\pi^2 d^2 N} \left( \frac{\kappa^3 T^3}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.24)$$

La ecuación (2.24) muestra que el coeficiente de difusión puede expresarse totalmente en términos de las propiedades de los gases. A diferencia de los otros 2 coeficientes de transporte molecular, la viscosidad y la conductividad térmica, el coeficiente de difusión depende de la presión y, aunque en orden superior, de la temperatura absoluta. La importancia de este resultado no debe pasarse por alto, aunque en la deducción se utilizó un modelo muy simplificado.

Las expresiones teóricas para el coeficiente de difusión en mezclas gaseosas de baja densidad en función de las propiedades moleculares del sistema fueron deducidas por Jeans, Chapman y Sutherland, utilizando la teoría cinética de los gases. Las versiones modernas de la teoría cinética han intentado tomar en cuenta las fuerzas de atracción y repulsión entre las moléculas. Hirschfelder, Bird y Spotz utilizando el potencial de Lennard-Jones para evaluar la influencia de las fuerzas intermoleculares presentaron una ecuación para el coeficiente de difusión de pares de moléculas no polares y ni reactivas al estado gaseoso.

$$D_{AB} = \frac{0.001858 T^{\frac{3}{2}} \left( \frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{\frac{1}{2}}}{P \sigma_{AB}^2 \Omega_D} \quad (2.25)$$

donde  $D_{AB}$  es la difusividad de masa de  $A$  a través de  $B$ , en  $\frac{cm^2}{s}$ ;  $T$  es la temperatura absoluta, en  $^{\circ}K$ ;  $M_A$  y  $M_B$  son los pesos moleculares de  $A$  y  $B$ , respectivamente,  $P$  es la presión absoluta, en atmosferas;  $\sigma_{AB}$  es el diámetro de colisión, un parámetro de Lennard-Jones en Armstrong; y  $\Omega_D$  es la integral de choque para la difusión molecular, una función adimensional de la temperatura y el campo de potencial intermolecular para una molécula de  $A$  y una molécula de  $B$ . La tabla (2.2) registra  $\Omega_D$  en función de  $\frac{kT}{\epsilon_{AB}}$ ;  $k$  es la constante de Boltzman, que es  $1.38 \times 10^{-16} \frac{ergs}{K}$ ; y  $\epsilon_{AB}$  es la energía de interacción molecular para el sistema binario  $A$  y  $B$ , un parámetro de Lennard-Jones, en ergs; véase la ecuación (2.28). A diferencia de los otros dos coeficientes de transporte molecular, la viscosidad y la conductividad térmica, el coeficiente de difusión depende de la presión, así como, en un orden superior, de la temperatura absoluta. Cuando se examinó el proceso de transporte en una fase de un solo componente, no se encontró ninguna dependencia de la composición en la ecuación (2.24) o en las ecuaciones similares para viscosidad y conductividad térmica. Los parámetros de Lennard-jones,  $\sigma$  y  $\epsilon_A$ , por lo general se obtienen a partir de datos de viscosidad. Desafortunadamente, esta información solo se encuentra disponible para unos cuantos gases puros. La tabla (2.3) del apéndice al final del presente capítulo muestran estos valores. En ausencia de datos experimentales, los valores de los componentes pueden estimarse a partir de las siguientes relaciones empíricas:

$$\left[ \begin{array}{cc} \sigma = 1.18V_b^{\frac{1}{3}} & \sigma = 0.841V_c^{\frac{1}{3}} \\ \sigma = 2.44 \left( \frac{T_c}{P_c} \right)^{\frac{1}{3}} & \frac{\epsilon_{AB}}{k} = 0.77T_c \\ \frac{\epsilon_{AB}}{k} = 1.15T_b & 0 \end{array} \right] \quad (2.26)$$

donde  $V_b$  es el volumen molecular al punto normal de ebullición, en  $\frac{cm^3}{mol}$  (esto se evalúa utilizando la tabla (2.1));  $V_c$  es el volumen molecular crítico, en  $\frac{cm^3}{mol}$ ;  $T_c$  es la temperatura crítica, en  $^{\circ}K$ ;  $T_b$  es la temperatura de ebullición normal, en  $K$ ; y  $P_c$  es la presión crítica en atmosferas. (Welty, 2015, pág. 579)

Para un sistema binario compuesto de pares de moléculas no polares, los parámetros de Lennard-Jones del componente puro pueden combinarse empíricamente por las siguientes relaciones:

$$\sigma_{AB} = \frac{1}{2}(\sigma_A + \sigma_B) \quad (2.27)$$

$$\frac{\epsilon_{AB}}{k} = \sqrt{\epsilon_A \epsilon_B} \quad (2.28)$$

La ecuación de Hirschfelder (2.25) se ocupa con frecuencia para extrapolar los datos experimentales. En intervalos moderados de presión, hasta 25 atmosferas, el coeficiente actúa de manera inversa con la presión. Presiones más altas en apariencia requieren hacer correcciones para gases densos; desafortunadamente no se dispone de una correlación satisfactoria para presiones elevadas. La ecuación (2.25) también especifica que el coeficiente de difusión varía con la temperatura puesto que  $T^{\frac{3}{2}}\Omega_D$  varía. Al simplificar la ecuación (2.25), puede predecirse el coeficiente de difusión a cualquier temperatura y a cualquier presión inferior a 25 atmosferas a partir de un valor experimental conocido aplicando la expresión.

$$D_{ABT_2, P_2} = D_{ABT_1, P_1} \left(\frac{P_1}{P_2}\right) \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{\Omega_{D, T_1}}{\Omega_{D, T_2}}\right) \quad (2.29)$$

### EJEMPLO 1 (Welty, 2015, pág. 581)

Evaluar el coeficiente de difusión del dióxido de carbono en aire a 20°C y presión atmosférica. Comparar este valor con el valor experimental registrado en la tabla 3.4

De la tabla 2.3 se obtienen los valores  $\sigma$  y  $\frac{\epsilon}{k}$

$D_{AB}$	$\sigma$ en Å	$\frac{\epsilon_A}{k}$ en °K
<i>Dioxido de Carbono</i>	3.996	190
<i>Aire</i>	3.617	97

Los diversos parámetros para la ecuación (2.29) pueden evaluarse como sigue:

$$\left[ \begin{array}{l} \sigma_{AB} = \frac{1}{2}(\sigma_A + \sigma_B) = \frac{(3.996 + 3.617)}{2} = 3.806 \text{ Å} \\ \frac{\epsilon_{AB}}{k} = \sqrt{\epsilon_A \epsilon_B} = \sqrt{(190)(97)} = 136 \end{array} \right]$$

$$\left[ \begin{array}{lll} T = 293^\circ K & P = 1 \text{ atm} & \frac{\epsilon_{AB}}{kT} = \frac{136}{293} = 0.463 \\ \frac{kT}{\epsilon_{AB}} = 2.16 & \Omega_D(\text{Tabla 3.2}) = 1.047 & M_{CO_2} = 44 \frac{g}{mol} \\ M_{Aire} = 29 \frac{g}{mol} & 0 & 0 \end{array} \right]$$

Sustituyendo los valores en la ecuación, se obtiene

$$D_{AB} = \frac{0.001858T^{\frac{3}{2}} \left( \frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{\frac{1}{2}}}{P\sigma_{AB}^2\Omega_D}$$
$$D_{AB} = \frac{0.001858(293^\circ K)^{\frac{3}{2}} \left( \frac{1}{29} + \frac{1}{44} \right)^{\frac{1}{2}}}{(1 \text{ atm})(3.806)^2(1.047)} = 0.147 \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$$

De la tabla 2.4 para  $CO_2$  en el aire a  $273^\circ K$ ,  $1 \text{ atm}$ , se tiene

$$D_{AB} = 0.136 \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$$

La ecuación (2.29) se utilizará para corregir tomando en cuenta las diferencias en temperatura

$$\frac{D_{AB,T_1}}{D_{AB,T_2}} = \left( \frac{T_1}{T_2} \right)^{\frac{3}{2}} \left( \frac{\Omega_{D,T_2}}{\Omega_{D,T_1}} \right)$$

Los valores de  $\Omega_D$  pueden evaluarse de la siguiente manera

$$T_2 = 273^\circ K \quad \frac{\varepsilon_{AB}}{kT} = 0.498 \quad \Omega_{D,T_2} = 1.074$$

$$\text{Calculos previos } T_1 = 273^\circ K \quad \Omega_{D,T_1} = 1.047$$

El valor corregido del coeficiente de difusión a  $20^\circ C$  es:

$$D_{AB,T_1} = \left( \frac{293}{273} \right)^{\frac{3}{2}} \left( \frac{1.074}{1.047} \right) (0.136) = 0.155 \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$$

Se observa que la integral de choque depende muy poco de la temperatura. De acuerdo con esto, los cambios de escala de la difusividades en relación con la temperatura solo incluyen la relación  $\left( \frac{T_1}{T_2} \right)^{\frac{3}{2}}$ . (Welty, 2015, pág. 581)

## MÉTODO DE FULLER, SHELTER Y GIDDINGS

La ecuación (2.29) se desarrolló para gases diluidos formados por moléculas monoatómicas esféricas, no polares. Sin embargo, esta ecuación da buenos resultados para la mayoría de los sistemas gaseosos binarios no polares sobre un amplio intervalo de temperaturas. Se han propuesto otras ecuaciones empíricas para estimar el coeficiente de difusión en sistemas gaseosos binarios no polares a bajas presiones. La correlación empírica recomendada por Fuller, Schelster y Giddings permite la ovulación de la difusividad cuando no se dispone de los parámetros de Lennard-jones confiable,  $\sigma_i$  y  $\varepsilon_i$ . La correlación de Fuller es:

$$D_{AB} = \frac{0.001T^{1.75} \left( \frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{\frac{1}{2}}}{P \left[ (\sum v)_A^{\frac{1}{3}} + (\sum v)_B^{\frac{1}{3}} \right]^2} \quad (2.30)$$

Donde  $D_{AB}$  se encuentra en  $\frac{cm^2}{s}$ ,  $T$  en  $^{\circ}K$  y  $P$  en atmosferas. Para determinar los  $v$  términos, los autores recomiendan la adición de los incrementos de volumen atómico y estructural registrados en la tabla (2.1). (Welty, 2015, pág. 582)

**Tabla 2.1** Volúmenes de difusión atómica que se utilizan en la estimación  $D_{AB}$  por el método de Fuller, Scheltter y Giddings (Welty, 2015)

Incrementos en volúmenes de difusión, atómicos y estructurales, $v$					
C	16.5	Cl		19.5	
H	1.98	S		17	
O	5.48	Anillo Aromatico		-20.2	
N	5.69	Anillo heterociclico		-20.2	
Volúmenes de difusión para moléculas simples, $v$					
H <sub>2</sub>	7.07	Ar	16.1	H <sub>2</sub> O	12.7
D <sub>2</sub>	6.7	Kr	22.8	CClF <sub>2</sub>	114.8
He	2.88	CO	18.9	SF <sub>6</sub>	69.7
N <sub>2</sub>	17.9	CO <sub>2</sub>	26.9	Cl <sub>2</sub>	37.7
O <sub>2</sub>	16.6	N <sub>2</sub> O	35.9	Br <sub>2</sub>	67.2
Aire	20.1	NH <sub>3</sub>	14.9	SO <sub>2</sub>	41.1

### EJEMPLO 2 (Welty, 2015, pág. 583)

Volver a evaluar el coeficiente de difusión del dióxido de carbono en aire a  $20^{\circ}C$  y a presión atmosférica utilizando la ecuación de Scheltter, Fuller y Giddings y compararlo con el valor que se reportó en el ejemplo 1.

$$D_{AB} = \frac{0.001T^{1.75} \left( \frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{\frac{1}{2}}}{P \left[ (\sum v)_A^{\frac{1}{3}} + (\sum v)_B^{\frac{1}{3}} \right]^2}$$

$$D_{AB} = \frac{0.001(293)^{1.75} \left( \frac{1}{44} + \frac{1}{29} \right)^{\frac{1}{2}}}{(1) \left[ (26.3)^{\frac{1}{3}} + (20.1)^{\frac{1}{3}} \right]^2} = 0.152 \frac{cm^2}{s}$$

Este valor se compara de manera muy favorable con el valor obtenido en la ecuación de Hirschfelder,  $0.155 \frac{cm^2}{s}$  y determinación se llevó a cabo muy fácilmente

## MÉTODO DE GUILLILAND

Derivado de la teoría cinética de los gases en 1934

$$D_{AB} = \frac{(4.3E - 9)T^{1.75} \left( \frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{\frac{1}{2}}}{P \left[ (V)_A^{\frac{1}{3}} + (V)_B^{\frac{1}{3}} \right]^2} \quad (2.31)$$

Siendo solo una variante de la ecuación Scheltter, Fuller y Giddings ocupando las mismas variables y pudiendo calcular la difusividad del ejemplo anterior en donde el reactivo es dióxido de carbono.

### EJEMPLO 3 (Welty, 2015, pág. 583)

Volver a evaluar el coeficiente de difusión del dióxido de carbono en aire a 20°C y a presión atmosférica utilizando la ecuación de Guilliland y compararlo con el valor que se reportó en el ejemplo 1.

$$D_{AB} = \frac{(4.3E - 9)T^{1.75} \left( \frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{\frac{1}{2}}}{P \left[ (V)_A^{\frac{1}{3}} + (V)_B^{\frac{1}{3}} \right]^2}$$
$$D_{AB} = \frac{(4.3E - 9)(293)^{1.75} \left( \frac{1}{44} + \frac{1}{29} \right)^{\frac{1}{2}}}{(1) \left[ (26.3)^{\frac{1}{3}} + (20.1)^{\frac{1}{3}} \right]^2} = 0.152 \frac{cm^2}{s}$$

Este valor se compara de manera muy favorable con el valor obtenido en la ecuación de Hirschfelder,  $0.155 \frac{cm^2}{s}$  y determinación se llevó a cabo muy fácilmente.

## ESTIMACIÓN DEL COEFICIENTE DE DIFUSIÓN DE UN COMPONENTE EN UNA MEZCLA

La transferencia de masa en mezclas gaseosas de varios componentes puede describirse por ecuaciones teóricas en que intervienen los coeficientes de difusión para los diversos pares binarios presentes en la mezcla. Hirschfelder, Curtis y Bird presentan una expresión en su forma más general. Wilke ha simplificado la teoría y ha demostrado que la relación (Welty, 2015, pág. 584)

$$D_{1-\text{mezcla}} = \frac{1}{\frac{y'_2}{D_{1-2}} + \frac{y'_3}{D_{1-3}} + \dots + \frac{y'_n}{D_{1-n}}} \quad (2.32)$$

es una buena aproximación a la forma correcta; aquí,  $D_{1-\text{mezcla}}$  es la difusividad en masa para el componente 1 en la mezcla de gases;  $D_{1-n}$  es la difusividad para el par binario del componente 1 que se difunde a través del componente  $n$ ; y  $y'_n$  es la fracción mol del componente  $n$  en la mezcla de gases evaluado en una base libre del componente 1, es decir,

$$y'_2 = \frac{y_2}{y_2 + y_3 + \dots + y_n} \quad (2.33)$$

#### EJEMPLO 4 (Welty, 2015, pág. 585)

Determinar la difusividad del monóxido de carbono a través de una mezcla de gases en donde las fracciones mol de cada componente son

$$y_{O_2} = 0.2$$

$$y_{N_2} = 0.7$$

$$y_{CO} = 0.1$$

La mezcla de gases está a  $298^\circ K$  y  $2 \text{ atm}$  de presión total.

De la tabla 3.4 se encuentra que

$$D_{CO-O_2} = 0.185 \times 10^{-4} \frac{m^2}{s} \text{ a } 273^\circ K \text{ y } 1 \text{ atm}$$

$$D_{CO-N_2} = 0.192 \times 10^{-4} \frac{m^2}{s} \text{ a } 288^\circ K \text{ y } 1 \text{ atm}$$

Los dos coeficientes de difusión binaria pueden corregirse para tomar en cuenta las diferencias de temperatura y presión utilizada en la ecuación (2.29),

$$\frac{D_{AB \text{ Condicion 1}}}{D_{AB \text{ Condicion 2}}} = \left(\frac{T_1}{T_2}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{P_1}{P_2}\right)$$

Para  $298^\circ K$  y  $2 \text{ atm}$ , se tiene

$$D_{CO-O_2} = \left(\frac{298}{273}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{1}{2}\right) \left(0.185 \times 10^{-4} \frac{m^2}{s}\right) = 0.105 \times 10^{-4} \frac{m^2}{s}$$

$$D_{CO-N_2} = \left(\frac{298}{288}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{1}{2}\right) \left(0.192 \times 10^{-4} \frac{m^2}{s}\right) = 0.101 \times 10^{-4} \frac{m^2}{s}$$

Las composiciones del oxígeno y del nitrógeno en una base libre de  $CO$  son

$$y'_{O_2} = \frac{0.20}{1 - 0.1} = 0.22$$

TABLA 2.2 INTEGRALES DE COLISIÓN DE  $\Omega_\mu$  Y  $\Omega_D$  BASADAS EN EL POTENCIAL DE LENNARD-JONES (Welty, 2015)

$\kappa T/\epsilon$	$\Omega_\mu = \Omega_k$ (for viscosity and thermal conductivity)	$\Omega_D$ (for mass diffusivity)	$kT/\epsilon$	$\Omega_\mu = \Omega_k$ (for viscosity and thermal conductivity)	$\Omega_D$ (for mass diffusivity)
0.30	2.785	2.662	1.75	1.234	1.128
0.35	2.628	2.476	1.80	1.221	1.116
0.40	2.492	2.318	1.85	1.209	1.105
0.45	2.368	2.184	1.90	1.197	1.094
0.50	2.257	2.066	1.95	1.186	1.084
0.55	2.156	1.966	2.00	1.175	1.075
0.60	2.065	1.877	2.10	1.156	1.057
0.65	1.982	1.798	2.20	1.138	1.041
0.70	1.908	1.729	2.30	1.122	1.026
0.75	1.841	1.667	2.40	1.107	1.012
0.80	1.780	1.612	2.50	1.093	0.9996
0.85	1.725	1.562	2.60	1.081	0.9878
0.90	1.675	1.517	2.70	1.069	0.9770
0.95	1.629	1.476	2.80	1.058	0.9672
1.00	1.587	1.439	2.90	1.048	0.9576
1.05	1.549	1.406	3.00	1.039	0.9490
1.10	1.514	1.375	3.10	1.030	0.9406
1.15	1.482	1.346	3.20	1.022	0.9328
1.20	1.452	1.320	3.30	1.014	0.9256
1.25	1.424	1.296	3.40	1.007	0.9186
1.30	1.399	1.273	3.50	0.9999	0.9120
1.35	1.375	1.253	3.60	0.9932	0.9058
1.40	1.353	1.233	3.70	0.9870	0.8998
1.45	1.333	1.215	3.80	0.9811	0.8942
1.50	1.314	1.198	3.90	0.9755	0.8888
1.55	1.296	1.182	4.00	0.9700	0.8836
1.60	1.279	1.167	4.10	0.9649	0.8788
1.65	1.264	1.153	4.20	0.9600	0.8740
			4.30	0.9553	0.8694

$$y'_{N_2} = \frac{0.7}{1 - 0.7} = 0.78$$

Al sustituir estos valores en la ecuación (2.32), se tiene

$$D_{CO-N_2,O_2} = \frac{1}{\left(\frac{0.22}{0.105 \times 10^{-4} \frac{m^2}{s}}\right) + \left(\frac{0.78}{0.101 \times 10^{-4} \frac{m^2}{s}}\right)} = 0.102 \times 10^{-4} \frac{m^2}{s}$$

TABLA 2.3 CONSTANTES DE LA FUERZA DE LENNARD-JONES  
CALCULADAS CON DATOS DE VISCOSIDAD (Welty, 2015)

Compound	Formula	$\epsilon_A/k$ , in (K)	$\sigma$ , in Å
Acetylene	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	185	4.221
Air		97	3.617
Argon	A	124	3.418
Arsine	AsH <sub>3</sub>	281	4.06
Benzene	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	440	5.270
Bromine	Br <sub>2</sub>	520	4.268
<i>i</i> -Butane	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	313	5.341
<i>n</i> -Butane	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	410	4.997
Carbon dioxide	CO <sub>2</sub>	190	3.996
Carbon disulfide	CS <sub>2</sub>	488	4.438
Carbon monoxide	CO	110	3.590
Carbon tetrachloride	CCl <sub>4</sub>	327	5.881
Carbonyl sulfide	COS	335	4.13
Chlorine	Cl <sub>2</sub>	357	4.115
Chloroform	CHCl <sub>3</sub>	327	5.430
Cyanogen	C <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	339	4.38
Cyclohexane	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>	324	6.093
Ethane	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	230	4.418
Ethanol	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	391	4.455
Ethylene	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	205	4.232
Fluorine	F <sub>2</sub>	112	3.653
Helium	He	10.22	2.576
<i>n</i> -Heptane	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	282 <sup>†</sup>	8.88 <sup>3</sup>
<i>n</i> -Hexane	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	413	5.909
Hydrogen	H <sub>2</sub>	33.3	2.968
Hydrogen chloride	HCl	360	3.305

Compound	Formula	$\epsilon_A/k$ , in (K)	$\sigma$ , in Å
Hydrogen iodide	HI	324	4.123
Iodine	I <sub>2</sub>	550	4.982
Krypton	Kr	190	3.60
Methane	CH <sub>4</sub>	136.5	3.822
Methanol	CH <sub>3</sub> OH	507	3.585
Methylene chloride	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	406	4.759
Methyl chloride	CH <sub>3</sub> Cl	855	3.375
Mercuric iodide	HgI <sub>2</sub>	691	5.625
Mercury	Hg	851	2.898
Neon	Ne	35.7	2.789
Nitric oxide	NO	119	3.470
Nitrogen	N <sub>2</sub>	91.5	3.681
Nitrous oxide	N <sub>2</sub> O	220	3.879
<i>n</i> -Nonane	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub>	240	8.448
<i>n</i> -Octane	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	320	7.451
Oxygen	O <sub>2</sub>	113	3.433
<i>n</i> -Pentane	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	345	5.769
Propane	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	254	5.061
Silane	SiH <sub>4</sub>	207.6	4.08
Silicon tetrachloride	SiCl <sub>4</sub>	358	5.08
Sulfur dioxide	SO <sub>2</sub>	252	4.290
Water	H <sub>2</sub> O	356	2.649
Xenon	Xe	229	4.055

TABLA 2.4 DIFUSIVIDADES BINARIAS DE MASA EN GASES (Welty, 2015)

System	T (K)	$D_{AB}P$ (cm <sup>2</sup> atm/s)	$D_{AB}P$ (m <sup>2</sup> Pa/s)
Ethanol	273	0.0693	0.702
Ethyl ether	273	0.0541	0.548
Hydrogen	273	0.550	5.572
Methane	273	0.153	1.550
Methanol	298.6	0.105	1.064
Nitrogen	298	0.165	1.672
Nitrous oxide	298	0.117	1.185
Propane	298	0.0863	0.874
Water	298	0.164	1.661
Carbon monoxide			
Ethylene	273	0.151	1.530
Hydrogen	273	0.651	6.595
Nitrogen	288	0.192	1.945
Oxygen	273	0.185	1.874
Helium			
Argon	273	0.641	6.493
Benzene	298	0.384	3.890
Ethanol	298	0.494	5.004
Hydrogen	293	1.64	16.613
Neon	293	1.23	12.460
Water	298	0.908	9.198
Hydrogen			
Ammonia	293	0.849	8.600
Argon	293	0.770	7.800
Benzene	273	0.317	3.211
Ethane	273	0.439	4.447
Methane	273	0.625	6.331
Oxygen	273	0.697	7.061
Water	293	0.850	8.611
Nitrogen			
Ammonia	293	0.241	2.441
Ethylene	298	0.163	1.651
Hydrogen	288	0.743	7.527
Iodine	273	0.070	0.709
Oxygen	273	0.181	1.834
Oxygen			
Ammonia	293	0.253	2.563
Benzene	296	0.0939	0.951
Ethylene	293	0.182	1.844

TABLA 2.4 (CONTINUACIÓN)

System	T (K)	$D_{AB}P$ (cm <sup>2</sup> atm/s)	$D_{AB}P$ (m <sup>2</sup> Pa/s)
Air			
Ammonia	273	0.198	2.006
Aniline	298	0.0726	0.735
Benzene	298	0.0962	0.974
Bromine	293	0.091	0.923
Carbon dioxide	273	0.136	1.378
Carbon disulfide	273	0.0883	0.894
Chlorine	273	0.124	1.256
Diphenyl	491	0.160	1.621
Ethyl acetate	273	0.0709	0.718
Ethanol	298	0.132	1.337
Ethyl ether	293	0.0896	0.908
Iodine	298	0.0834	0.845
Methanol	298	0.162	1.641
Mercury	614	0.473	4.791
Naphthalene	298	0.0611	0.619
Nitrobenzene	298	0.0868	0.879
n-Octane	298	0.0602	0.610
Oxygen	273	0.175	1.773
Propyl acetate	315	0.092	0.932
Sulfur dioxide	273	0.122	1.236
Toluene	298	0.0844	0.855
Water	298	0.260	2.634
Ammonia			
Ethylene	293	0.177	1.793
Argon			
Neon	293	0.329	3.333
Carbon dioxide			
Benzene	318	0.0715	0.724
Carbon disulfide	318	0.0715	0.724
Ethyl acetate	319	0.0666	0.675

## PROBLEMAS (Welty, 2015, págs. 599-601)

2.1 Predecir  $D_{AB}$  para el sistema metano-etano a  $40^{\circ}\text{C}$  y  $1 \text{ atm}$  utilizando la teoría de Chapman-Enskog.

2.2 Determinar el valor de las siguientes difusividades gaseosas:

- Dióxido de carbono/Aire a  $310^{\circ}\text{K}$  y  $1.5 \times 10^5 \text{ Pa}$ ;
- Etanol/Aire a  $325^{\circ}\text{K}$  y  $2 \times 10^5 \text{ Pa}$ ;
- Monóxido de carbono/Aire a  $298\text{K}$  y  $1 \times 10^5 \text{ Pa}$ ;
- Tetracloruro de carbono/Aire  $298^{\circ}\text{K}$  y  $1.013 \times 10^5 \text{ Pa}$ .

2.3 Determinar la difusividad del dióxido de carbono a través de una mezcla de gases que tiene la siguiente composición:

$$\text{O}_2 \quad 7\%$$

$$\text{CO} \quad 10\%$$

$$\text{CO}_2 \quad 15\%$$

$$\text{N}_2 \quad 68\%$$

La mezcla de gases estará a  $273^{\circ}\text{K}$  y  $1.5 \times 10^5 \text{ Pa}$ .

2.4 Determinar la difusividad del metano en aire utilizando

- La ecuación de Hirschfelder
- La ecuación de Wilke para una mezcla de gases.

El aire está a  $100^{\circ}\text{C}$  y a una presión de  $1.5 \text{ atm}$ .

2.5 Con frecuencia las bolas repelentes de polillas se hacen con naftaleno. Al sublimarse, el naftaleno se difunde al aire circundante. Estimar la difusividad del naftaleno en aire a  $1 \text{ atm}$  y  $70^{\circ}\text{F}$  utilizando la ecuación de Hirschfelder, Bird y Spatz. Corregir el valor que se registra en el apéndice A para este sistema si especificado a  $70^{\circ}\text{F}$  y  $1 \text{ atm}$  y comparar el valor previamente evaluado. Las propiedades críticas del naftaleno son

$$V_c = 3.1847 \frac{\text{ml}}{\text{g}}$$

$$T_c = 469^{\circ}\text{C}$$

$$P_c = 29792 \text{ Torr}$$

2.6 Se ha propuesto una torre de absorción para eliminar selectivamente dos contaminantes, sulfuro de hidrogeno y dióxido de azufre de una corriente gaseosa residual que contiene

$$\text{H}_2\text{S} \quad 2\%$$

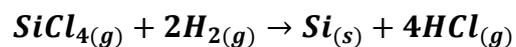
**$SO_2$  4%**

**Aire 96%**

Estimar la difusividad de

- El sulfuro de hidrogeno en la mezcla de gases y
- El dióxido de azufre en la mezcla de gases si la mezcla de gases se encuentra a  $373\text{ }^\circ K$  y  $1.013 \times 10^5\text{ Pa}$ .

**2.7** Se hace reaccionar gas tetraclorosilano altamente purificado con gas hidrógeno para producir silicio policristalino de grado electrónico a  $800^\circ C$  y  $1\text{ atm}$  de presión de acuerdo con la ecuación.



Existe la preocupación de que la reacción experimente limitaciones de difusión en la superficie sólida del silicio de crecimiento. Estime el coeficiente de difusión molecular para (a)  $SiCl_4$  en  $H_2$  y (b)  $SiCl_4$  en una mezcla de fase gaseosa que contiene 40% en mol de  $SiCl_4$ , 40% en mol de  $H_2$  y 20% en moles de HCl. los parámetros de Lennard-Jones para  $SiCl_4$  son  $\frac{\epsilon_A}{k} = 358^\circ K$  y  $\sigma_A = 5.08\text{ \AA}$

## CAPÍTULO 3

### VELOCIDADES DE REFERENCIA EMPLEADAS EN LA TRANSFERENCIA DE MASA

- VELOCIDAD MÁSCICA PROMEDIO
- VELOCIDAD MOLAR PROMEDIO

### 2.1 DIFERENTES EXPRESIONES DE LA RAPIDEZ DE TRANSFERENCIA DE MASA PARA SISTEMAS MULTICOMPONENTES Y LA RELACIÓN ENTRE ELLAS.

#### INTRODUCCION

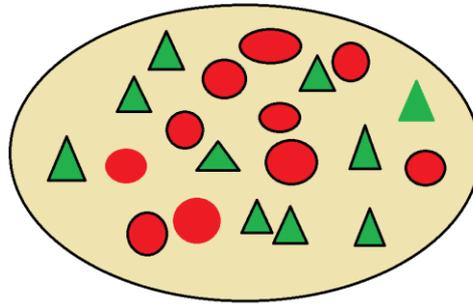
El movimiento de una especie química desde una región de concentración elevada hacia otra de baja concentración puede observarse a simple vista colocando un pequeño cristal de permanganato de potasio en un vaso de agua, y en las inmediaciones del cristal se forma un intenso color violeta correspondiente a la solución concentrada del permanganato.

Debido al gradiente de concentración que se establece, el permanganato de potasio difunde alejándose del cristal. La marcha de la difusión puede seguirse observando el crecimiento de la región de color violeta intenso cuando la concentración del permanganato es elevada y débil coloración por las bajas concentraciones.

La difusión es más compleja que el flujo viscoso o la conducción de calor, debido a la innovación de tener que operar con mezclas. En una mezcla que difunde, las velocidades de los componentes individuales son distintas, y existen varios métodos adecuados para promediar las velocidades de los componentes con el fin de obtener la velocidad local de la mezcla. La elección de esta velocidad es necesaria para poder definir las velocidades de difusión. (Bird, 1992, págs. 16-3)

**Concentraciones:** En una mezcla de multicomponentes, la concentración de una especie molecular puede expresarse en muchas formas. La figura 2.1 muestra un volumen elemental  $dV$  que contiene una mezcla de componentes en el que se incluye la especie  $A$ . puesto que cada molecula de cada una de las especies tiene una masa, puede definirse una *concentración másica* para cada especie, lo mismo que para la mezcla. Para la especie  $A$ , la *concentración másica*,  $\rho_A$ , se define como la masa de  $A$  por unidad de volumen de la mezcla. La concentracion masica total o *densidad*,  $\rho$ , es la masa total de la mezcla contenida en la unidad de volumen; es decir:

$$\rho = \sum_{i=1}^n p_i$$



*Figura 3.1 Volumen elemental que contiene una mezcla de multicomponentes (Welty 2015)*

donde  $n$  es el número de especies en la mezcla. La *fracción en masa*,  $w_A$ , es la concentración másica de la especie  $A$  dividida entre la densidad masica total

$$w_A = \frac{\rho_A}{\sum_{i=1}^n \rho_i} = \frac{\rho_A}{\rho} \quad (3.1)$$

Por definición, la suma de las fracciones debe ser 1

$$\sum_{i=1}^n w_i = 1 \quad (3.2)$$

La concentración molar de la especie  $A$ ,  $c_A$ , se define como el número de moles de  $A$  presentes por unidad de volumen de la mezcla. Por definición, una mol de cualquier especie contiene una masa equivalente en masa a su peso molecular; los términos de concentración másica y concentración molar se relacionan por la siguiente expresión

$$c_A = \frac{\rho_A}{M_A} \quad (3.3)$$

donde  $M_A$  es el peso molecular de la especie  $A$ . Al tratar con una fase gaseosa, las concentraciones con frecuencia se expresan en términos de las presiones parciales. Bajo condiciones en que se aplica la ley de los gases ideales,  $p_A V = n_A R T$ , la concentración molar es

$$c_A = \frac{n_A}{V} = \frac{p_A}{R T} \quad (3.4)$$

donde  $p_A$  es la presión parcial de la especie  $A$  en la mezcla,  $n_A$  es el número de moles de la especie  $A$ ,  $V$  es el volumen del gas,  $T$  es la temperatura absoluta y  $R$  es la constante de los gases. La concentración molar total,  $c$ , son las moles totales de la mezcla que están contenidas en la unidad de volumen; es decir

$$c = \sum_{i=1}^n c_i \quad (3.5)$$

o para una mezcla gaseosa que obedece la ley de los gases ideales,  $c = \frac{n_{Total}}{V} = \frac{P}{RT}$ , donde  $P$  es la presión total. La fracción mol para mezclas líquidas o sólidas  $x_A$  y para mezclas gaseosas,  $y_A$ , son las concentraciones molares de la especie  $A$  divididas entre la densidad molar total

$$x_A = \frac{c_A}{c} \quad (\text{liquidos y solidos}) \quad (3.6)$$

$$y_A = \frac{c_A}{c} \quad (\text{Gases})$$

Para una mezcla gaseosa que obedece la ley de los gases ideales, la fracción mol,  $y_A$ , puede representarse en términos de presiones,

$$y_A = \frac{c_A}{c} = \frac{\frac{p_A}{RT}}{\frac{P}{RT}} = \frac{p_A}{P} \quad (3.7)$$

La ecuación (3.7) es una representación algebraica de la ley de Dalton para mezclas gaseosas. Por definición, la suma de las fracciones mol debe ser 1;

$$\sum_{i=1}^n x_i = 1 \quad (3.8)$$
$$\sum_{i=1}^n y_i = 1$$

En la tabla (3.1) se da un resumen de los diversos términos de las concentraciones y de las interrelaciones para un sistema binario que contiene las especies  $A$  y  $B$ .

TABLA 3.1 NOTACIÓN DE CONCENTRACIONES EN SISTEMAS BINARIOS (Welty, 2015)

$\rho$ = total mass density of the mixture $\rho_A$ = mass density of species A $\rho_B$ = mass density of species B $\omega_A$ = mass fraction of species A = $\rho_A/\rho$ $\omega_B$ = mass fraction of species B = $\rho_B/\rho$ $\rho = \rho_A + \rho_B$ $1 = \omega_A + \omega_B$	
Molar concentrations	
<p><i>Liquid or solid mixture</i></p> $c$ = molar density of mixture = $n/V$ $c_A$ = molar density of species A = $n_A/V$ $c_B$ = molar density of species B = $n_B/V$ $x_A$ = mole fraction of species A = $c_A/c = n_A/n$ $x_B$ = mole fraction of species B = $c_B/c = n_B/n$ $c = c_A + c_B$ $1 = x_A + x_B$	<p><i>Gas mixture</i></p> $c = n/V = P/RT$ $c_A = n_A/V = p_A/RT$ $c_B = n_B/V = p_B/RT$ $y_A = c_A/c = n_A/n = p_A/p$ $y_B = c_B/c = n_B/n = p_B/p$ $c = c_A + c_B = \frac{p_A}{RT} + \frac{p_B}{RT} = \frac{P}{RT}$ $1 = y_A + y_B$
Interrelations	
$x_A \text{ or } y_A = \frac{\rho_A = c_A M_A}{\omega_A/M_A + \omega_B/M_B} \quad \text{or} \quad \frac{y_A M_A}{y_A M_A + y_B M_B}$	

### EJEMPLO 1

La composición del aire con frecuencia se expresa en términos únicamente de las 2 especies principales de la mezcla gaseosa

$$\text{Oxígeno } O_2 \quad y_{O_2} = 0.21$$

$$\text{Nitrogeno } N_2 \quad y_{N_2} = 0.79$$

Determinar la fracción en masa para el oxígeno y el nitrógeno y el peso molecular medio del aire cuando se mantiene a  $25^\circ C$  o ( $298^\circ K$ ) y  $1 \text{ atm}$ . El peso molecular del oxígeno es  $0.032 \text{ Kg/mol}$  y el del nitrógeno es  $0.028 \text{ Kg/mol}$ . (Welty, 2015, pág. 564)

Como base para el cálculo, considérese 1 mol de mezcla gaseosa:

$$\text{Oxígeno presente} = (1 \text{ mol})(0.21) = 0.21 \text{ mol} \left( 0.032 \frac{\text{Kg}}{\text{mol}} \right) = 0.00672 \text{ Kg}$$

$$\text{Nitrogeno} = (1 \text{ mol})(0.79) = 0.79 \text{ mol} \left( 0.028 \frac{\text{Kg}}{\text{mol}} \right) = 0.0221 \text{ Kg}$$

$$\text{Masa total presente} = 0.00672 + 0.0221 = 0.0288 \text{ Kg}$$

$$w_{O_2} = \frac{0.00672 \text{ Kg}}{0.0288 \text{ Kg}} = 0.23$$

$$w_{N_2} = \frac{0.0221 \text{ Kg}}{0.0288 \text{ Kg}} = 0.77$$

Puesto que 1 mol de la mezcla gaseosa tiene una masa de 0.0288 Kg, el peso molecular medio del aire debe ser 0.0288 Kg. Cuando se toma en cuenta a los otros componentes presentes en el aire, el peso molecular medio del aire con frecuencia se redondea a un valor 0.029 Kg/mol. (Welty, 2015, pág. 566)

Este problema también podría haberse resuelto utilizando la ley de los gases ideales,  $PV = nRT$ . En condiciones ideales,  $0^\circ\text{C}$  o  $273^\circ\text{K}$  y 1 atm de presión, la constante de los gases ideales se evalúa como

$$R = \frac{PV}{nT} = \frac{(1 \text{ atm})(22.4 \text{ m}^3)}{(1 \text{ mol})(273^\circ\text{K})} = 8.314 \frac{(\text{Pa})(\text{m}^3)}{\text{mol}^\circ\text{K}}$$

El volumen de la mezcla gaseosa, a  $298^\circ\text{K}$ , es

$$V = \frac{nRT}{P} = \frac{(1 \text{ mol}) \left( 8.314 \frac{(\text{Pa})(\text{m}^3)}{\text{mol}^\circ\text{K}} \right) (298^\circ\text{K})}{1 \text{ atm}} = 0.0245 \text{ m}^3$$

Las concentraciones son:

$$c_{O_2} = \frac{0.21 \text{ mol}}{0.0245 \text{ m}^3} = 8.57 \frac{\text{mol } O_2}{\text{m}^3}$$

$$c_{N_2} = \frac{0.79 \text{ mol}}{0.0245 \text{ m}^3} = 32.3 \frac{\text{mol } N_2}{\text{m}^3}$$

$$c = \sum_{i=1}^n c_i = 8.57 + 32.3 = 40.9 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$$

La densidad total,  $\rho$ , es

$$\rho = \frac{0.0288 \text{ Kg}}{0.0245 \text{ m}^3} = 1.180 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$$

Y el peso molecular medio de la mezcla es (Welty, 2015, pág. 566)

$$M = \frac{\rho}{c} = \frac{1.180 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}}{40.9 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}} = 0.0288 \frac{\text{Kg}}{\text{mol}}$$

**Velocidades:** En un sistema de multicomponentes las diferentes especies por lo general se mueven a diferentes velocidades; de acuerdo con esto, la evaluación de la velocidad de la

mezcla gaseosa requiere obtener el promedio de las velocidades de cada una de las especies presentes.

La **velocidad promedio en masa** para una mezcla de multicomponentes se define en términos de las densidades en masa y de las velocidades de todos los componentes por la expresión

$$v = \frac{\sum_{i=1}^n \rho_i v_i}{\sum_{i=1}^n \rho_i} = \frac{\sum_{i=1}^n \rho_i v_i}{\rho} \quad (3.9)$$

donde  $v_i$  representa la velocidad absoluta de la especie  $i$  en relación con los ejes de coordenadas fijas. Esta es la velocidad que debe medirse con un tubo de pitot y es la velocidad que previamente se encontró en las ecuaciones de transferencia de momento. La **velocidad promedio molar** de una mezcla de multicomponentes se define en términos de las concentraciones molares de todos los componentes como (Welty, 2015, pág. 567)

$$\bar{V} = \frac{\sum_{i=1}^n c_i v_i}{\sum_{i=1}^n c_i} = \frac{\sum_{i=1}^n c_i v_i}{c} \quad (3.10)$$

La velocidad de una especie en particular en relación con la velocidad promedio en masa o la velocidad promedio molar se denomina velocidad de difusión. Pueden definirse dos velocidades de difusión distintas

$v_i - v =$  la velocidad de difusión de la especie  $i$  en relación con la velocidad promedio en masa

$v_i - \bar{V} =$  la velocidad de difusión de la especie  $i$  en relación con la velocidad molar promedio

TABLA 3.2 NOTACIÓN DE VELOCIDADES EN SISTEMAS BINARIOS (Bird, 1992)

Definiciones básicas	$v_A \equiv$ velocidad de la especie $A$ relativa a coordenadas estacionarias	(A)
	$v_A - v \equiv$ velocidad de difusión de la especie $A$ relativa a $v$	(B)
	$v_A - v^* \equiv$ velocidad de difusión de la especie $A$ relativa a $v^*$	(C)
	$v =$ velocidad media de masa $= (1/\rho)(\rho_A v_A + \rho_B v_B) = \omega_A v_A + \omega_B v_B$	(D)
	$v^* =$ velocidad media molar $= (1/c)(c_A v_A + c_B v_B) = x_A v_A + x_B v_B$	(E)
Relaciones adicionales	$v - v^* = \omega_A(v_A - v^*) + \omega_B(v_B - v^*)$	(F)
	$v^* - v = x_A(v_A - v) + x_B(v_B - v)$	(G)

De acuerdo con la ley de Fick, una especie puede tener una velocidad relativa a la velocidad promedio en masa o a la velocidad promedio molar solo si existen gradientes en la concentración. (Welty, 2015, pág. 567).

En la tabla 3.2 se hace un resumen de la notación de las velocidades en sistemas binarios, y se indican algunas relaciones útiles entre las distintas velocidades.

Es muy importante que el lector comprenda perfectamente el significado de las distintas clases de velocidades. Con este fin vamos a estudiar un sistema concreto, siguiendo gráficamente su comportamiento. En la figura 3.2 se analiza lo que ocurre cuando un líquido *A* se evapora y se difunde hacia a través de un tubo largo que inicialmente esta lleno del

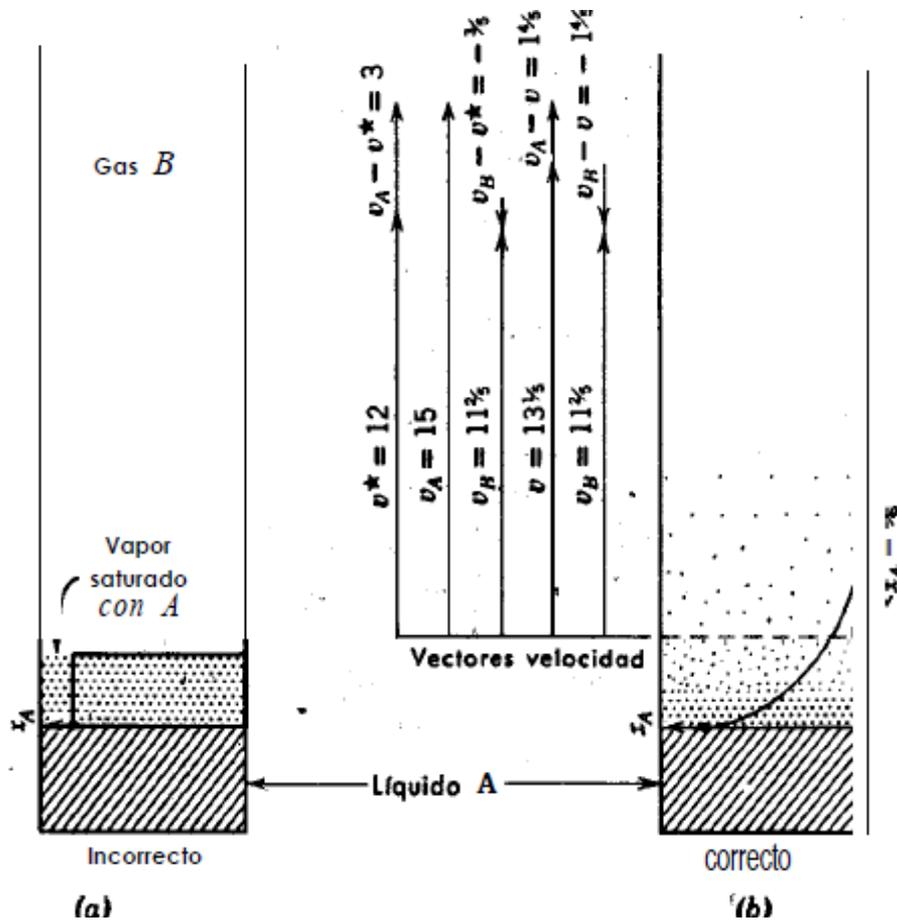


Figura 3.2 Distribución de concentración en un determinado instante en un sistema de difusión. (Bird, 1992)

vapor *B*. Al evaporarse *A*, empuja al vapor *A* hacia arriba. Sin embargo, no existe una línea recta de separación entre los vapores de *A* y *B* puros, si no que el desplazamiento ascendente del vapor *B* va a acompañado de una mezcla mutua de los 2 vapores. por lo tanto, debido a la difusión, en un punto cualquiera del tubo, *A* se mueve hacia arriba mas

rápida de lo que corresponde al movimiento medio global, y en cambio  $B$  se mueve mas lentamente. (Bird, 1992, págs. 16-5)

## 2.1 DIFERENTES EXPRESIONES DE LA RAPIDEZ DE TRANSFERENCIA DE MASA PARA SISTEMAS MULTICOMPONENTES Y SU RELACION ENTRE ELLAS

TABLA 2.3 DENSIDADES DE FLUJO DE MASA Y MOLAR EN SISTEMAS BINARIOS (Bird, 1992)

	Magnitud	Con respecto a ejes estacionarios	Con respecto a $v$	Con respecto a $v^*$
Definiciones básicas	Velocidad de la especie $A$ (cm seg <sup>-1</sup> )	$v_A$ (A)	$v_A = v$ (B)	$v_A = v^*$ (C)
	Densidad de flujo de masa de la especie $A$ (g cm <sup>-2</sup> seg <sup>-1</sup> )	$n_A = \rho_A v_A$ (D)	$j_A = \rho_A (v_A - v)$ (E)	$j_A^* = \rho_A (v_A - v^*)$ (F)
	Densidad de flujo molar de la especie $A$ (g-mol cm <sup>-2</sup> seg <sup>-1</sup> )	$N_A = c_A v_A$ (G)	$J_A = c_A (v_A - v)$ (H)	$J_A^* = c_A (v_A - v^*)$ (I)
Suma de las densidades de flujo de masa (g cm <sup>-2</sup> seg <sup>-1</sup> )	$n_A + n_B = \rho v$ (J)	$j_A + j_B = 0$ (K)	$j_A^* + j_B^* = \rho (v - v^*)$ (L)	
	Suma de las densidades de flujo molares (g-mol cm <sup>-2</sup> seg <sup>-1</sup> )	$N_A + N_B = cv^*$ (M)	$J_A + J_B = c(v^* - v)$ (N)	$J_A^* + J_B^* = 0$ (O)
Relaciones entre las densidades de flujo en función de $n_A$ y $n_B$	Densidades de flujo en función de $n_A$ y $n_B$	$N_A = \frac{n_A}{M_A}$ (P)	$J_A = n_A - \omega_A (n_A + n_B)$ (Q)	$j_A^* = n_A - x_A \left( n_A + \frac{M_A}{M_B} n_B \right)$ (R)
	Densidades de flujo en función de $N_A$ y $N_B$	$n_A = N_A M_A$ (S)	$J_A = N_A - \omega_A \left( N_A + \frac{M_B}{M_A} N_B \right)$ (T)	$J_A^* = N_A - x_A (N_A + N_B)$ (U)
	Densidades de flujo en función de $j_A$ y $v$	$n_A = j_A + \rho_A v$ (V)	$J_A = \frac{j_A}{M_A}$ (W)	$j_A^* = \frac{M}{M_B} j_A$ (X)
	Densidades de flujo en función de $J_A^*$ y $v^*$	$N_A = J_A^* + c_A v^*$ (Y)	$J_A = \frac{M_B}{M} J_A^*$ (Z)	$j_A^* = J_A^* M_A$ (AA)

En la tabla 3.3 se hace un resumen de la notación de las densidades de flujo en sistemas binarios, y se indican algunas relaciones entre las distintas densidades de flujo. Es preciso resaltar que una densidad de flujo de masa no queda completamente definida mientras no se especifiquen las unidades y el sistema coordinado.

Desde el punto de vista matemático cualquiera de las 6 notaciones anteriores de la densidad de flujo sirve para tratar todos los problemas de difusión, pero cada una de ellas tiene ciertas ventajas y de hecho se encuentran todas ellas en la tabla. La densidad de flujo  $\vec{N}_i$  (y menos frecuentemente  $\vec{n}_i$ ) se utiliza ampliamente en ingeniería, debido a que en los cálculos de los procesos resulta en general conveniente referirse a un sistema coordinado. Las densidades

de flujo  $\vec{j}_i$  y  $\vec{J}_i^*$  se utilizan habitualmente para medir las velocidades de difusión y resultan adecuadas para formular las ecuaciones de variación en sistemas de varios componentes. Las densidades de flujo  $\vec{j}_i$  y  $\vec{J}_i^*$  apenas si se utilizan, pero las hemos incluido para dar una visión completa. En la mayor parte de los casos utilizaremos  $\vec{N}_i$ . (Bird, 1992, págs. 16-9)

El flujo de masa o molar de una especie determinada es una cantidad vectorial que representa la cantidad de esta especie en particular, ya sea en unidades molares o de masa, que pasa durante un incremento determinado de tiempo a través de un área normal al vector. El flujo puede definirse haciendo referencia a coordenadas que se encuentran fijas en el espacio, a coordenadas que se mueven a la velocidad promedio en masa o a coordenadas que se mueven con la velocidad promedio molar.

La relación básica para la difusión molecular define al flujo molar en relación con la velocidad promedio molar,  $\vec{J}_A$ . Una relación empírica para este flujo molar, postulada en primer lugar por Fick y que con ello con frecuencia se conoce como la primera ley de Fick, define la difusión del componente  $A$  en un sistema isotérmico e isobárico. Para la difusión en la dirección  $z$  únicamente, la ecuación de rapidez de Fick es

$$\vec{J}_{A,z} = -D_{AB} \frac{dc_A}{dz} \quad (3.11)$$

donde  $\vec{J}_{A,z}$  es el flujo molar en la dirección  $z$  en relación con la velocidad promedio molar,  $\frac{dc_A}{dz}$  es el gradiente de concentración en la dirección  $z$  y  $D_{AB}$  es el factor de proporcionalidad, es la *difusividad en masa o coeficiente de difusividad para el componente A* que se difunde a través del componente  $B$ .

Sin embargo, se propuso una relación de flujo más general que no se restringe a los sistemas isotérmicos e isobáricos, la cual es

$$\vec{J}_{A,z} = -cD_{AB} \frac{dc_A}{dz} \quad (3.12)$$

Puesto que la concentración total,  $c$ , bajo condiciones isotérmicas e isobáricas es constante, la ecuación (3.11) es una forma especial de la relación mas general (3.12). una expresión equivalente para  $\vec{J}_{A,z}$ , el flujo en masa en la dirección  $z$  relativo a la velocidad promedio en masa, es

$$\vec{J}_{A,z} = -\rho D_{AB} \frac{dw_A}{dz} \quad (3.13)$$

donde  $\frac{dw_A}{dz}$  es el gradiente de concentración en términos de la fracción en masa. Cuando la densidad es constante, esta relación se simplifica a

$$\vec{J}_{A,z} = -D_{AB} \frac{d\rho_A}{dz} \quad (3.14)$$

Para un sistema binario con una velocidad promedio constante en la dirección  $z$ , el flujo molar en la dirección  $z$ , en relación con la velocidad promedio molar, también puede expresarse como

$$\vec{J}_{A,z} = c_A(v_{A,z} - \bar{V}_{A,z}) \quad (3.15)$$

Al igualar expresiones se obtiene

$$\vec{J}_{A,z} = c_A(v_{A,z} - \bar{V}_{A,z}) = -cD_{AB} \left( \frac{dy_A}{dz} \right) \quad (3.16)$$

que, al reordenar, lleva a

$$c_{A,z}v_{A,z} = -cD_{AB} \left( \frac{dy_A}{dz} \right) + c_A\bar{V}_{A,z} \quad (3.17)$$

Para este sistema binario,  $\bar{V}_{A,z}$  puede evaluarse por medio de la ecuación como

$$\bar{V}_{A,z} = \left( \frac{1}{c} \right) (c_{A,z}v_{A,z} + c_{B,z}v_{B,z}) = \frac{\sum_{i=1}^n c_i v_i}{\sum_{i=1}^n c_i} = \frac{\sum_{i=1}^n c_i v_i}{c} \quad (3.18)$$

Al sustituir dicha relación en la ecuación anterior

$$c_{A,z}v_{A,z} = -cD_{AB} \left( \frac{dy_A}{dz} \right) + \left( \frac{c_A}{c} \right) (c_{A,z}v_{A,z} + c_{B,z}v_{B,z}) \quad (3.19)$$

$$c_{A,z}v_{A,z} = -cD_{AB} \left( \frac{dy_A}{dz} \right) + y_A(c_{A,z}v_{A,z} + c_{B,z}v_{B,z}) \quad (3.20)$$

Puesto que las velocidades componentes  $v_{A,z}$  y  $v_{B,z}$  son velocidades relativas al eje fijo, las cantidades  $c_{A,z}v_{A,z}$  y  $c_{B,z}v_{B,z}$  son flujos de los componentes  $A$  y  $B$  relativos a una coordenada fija; en consecuencia este nuevo tipo de flujo, relativo a un conjunto de ejes fijos, se representa como (Welty, 2015, pág. 569)

$$\vec{N}_A = c_A v_A \quad (3.21)$$

$$\vec{N}_B = c_B v_B \quad (3.22)$$

Al sustituir tales símbolos en la ecuación, se obtiene una relación para el flujo del componente  $A$  en relación para el flujo del componente  $B$  en relación al eje  $z$ ,

$$\vec{N}_{A,z} = -cD_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A(\vec{N}_{A,z} + \vec{N}_{B,z}) \quad (3.23)$$

Esta relación puede generalizarse y representarse en forma vectorial como

$$\vec{V} * y_A = \left( \frac{\partial y_A}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial y_A}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial y_A}{\partial z} \hat{k} \right) \quad (3.24)$$

Sustituyendo la ecuación anterior en la ecuación de rapidez queda de la siguiente manera

$$\vec{N}_A = -cD_{AB}\vec{\nabla}y_A + y_A(\vec{N}_A + \vec{N}_B) \quad (3.25)$$

$-cD_{AB}\vec{\nabla}y_A$ : El flujo molar,  $\vec{J}_A$ , que resulta del gradiente de concentración. Este término se conoce la contribución del gradiente de concentración; (Welty, 2015, pág. 570)

$y_A(\vec{N}_{A,z} + \vec{N}_{B,z}) = c_A\vec{V}$ : Flujo molar que se debe al transporte del componente  $A$  por el flujo aparente del fluido. Este término de flujo se denomina la contribución del movimiento aparente. (Welty, 2015, pág. 570)

Cualquiera de tales cantidades, o ambas, pueden ser parte importante del flujo molar total,  $\vec{N}_A$ , siempre que se aplican las ecuaciones para describir la difusión molar, debe considerarse la naturaleza vectorial de los flujos individuales,  $\vec{N}_{A,z}$  y  $\vec{N}_{B,z}$ , en su momento, debe evaluarse la dirección de las 2 cantidades vectoriales. (Welty, 2015, pág. 570)

Si la especie  $A$  se difundiera en una mezcla de multicomponentes, la expresión equivalente a la ecuación sería:

$$\vec{N}_A = -cD_{AB}\vec{\nabla}y_A + y_A \sum_{i=1}^n \vec{N}_i \quad (3.26)$$

Del cálculo vectorial, ocupamos una de las propiedades del producto punto entre dos vectores diferentes entre el operador nabla ( $\vec{\nabla}$ ) y la composición ( $y_A$ ), en este caso la composición ( $y_A$ ) al considerarse un escalar el operador nabla lo que hace es convertir esa composición escalar en un campo vectorial.

El operador nabla, que se denota con  $\vec{\nabla}$ , es una criatura extraña, tiene una doble vida, es un operador diferencial al mismo tiempo que es un vector. En coordenadas cartesianas sobre  $R^3$  nabla se define por la curiosa expresión siguiente

$$\vec{\nabla} = \left( \frac{\partial}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{k} \right) \quad (3.27)$$

Las derivadas parciales “vacías” son las componentes de un vector que esperan campos escalares y vectoriales sobre las cuales actuar. Nabla opera, es decir, transforma, sobre campos por medio de la “multiplicación” de vectores interpretados utilizando diferenciación parcial

$$\vec{\nabla} * y_A = k\vec{a} = (y_A) * \left( \frac{\partial}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{k} \right) = \left( \frac{\partial y_A}{\partial x} + \frac{\partial y_A}{\partial y} + \frac{\partial y_A}{\partial z} \right)$$

$$\vec{N}_A = -cD_{AB} \left( \frac{\partial y_A}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial y_A}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial y_A}{\partial z} \hat{k} \right) + y_A \sum_{i=1}^n \vec{N}_i \quad (3.27)$$

donde  $D_{AB}$  es el coeficiente de difusión de  $A$  en la mezcla.

El flujo de masa,  $\vec{n}_A$ , relativo al sistema de coordenadas espaciales fijo, se define en términos de la densidad de masa y de la fracción en masa para un sistema binario por medio de:

$$\vec{\nabla} * \mathbf{w}_A = \left( \frac{\partial w_A}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial w_A}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial w_A}{\partial z} \hat{k} \right) \quad (3.28)$$

$$\vec{n}_A = -\rho D_{AB} \vec{\nabla} w_A + w_A (\vec{n}_A + \vec{n}_B) \quad (3.29)$$

donde

$$\vec{n}_A = \rho_A \mathbf{v}_A \quad (3.30)$$

y

$$\vec{n}_B = \rho_B \mathbf{v}_B \quad (3.31)$$

Para una sola coordenada fija

$$\vec{n}_A = -\rho D_{AB} \frac{dw_A}{dz} + w_A (\vec{n}_A + \vec{n}_B) \quad (3.32)$$

Bajo condiciones isotérmicas e isobáricas, esta relación se simplifica a

$$\vec{n}_A = -D_{AB} \vec{\nabla} \rho_A + w_A (\vec{n}_A + \vec{n}_B) \quad (3.33)$$

y

$$\vec{n}_A = -D_{AB} \frac{d\rho_A}{dz} + w_A (\vec{n}_A + \vec{n}_B) \quad (3.34)$$

Como se hizo notar antes, el flujo es una resultante de las 2 cantidades vectoriales:

$$-\rho D_{AB} \vec{\nabla} w_A \quad (3.35)$$

El flujo de masa,  $\vec{j}_A$ , que resulta de un gradiente de concentración, la contribución del gradiente de concentración.

$$w_A (\vec{n}_A + \vec{n}_B) \quad (3.34)$$

El flujo de masa que resulta a medida que el componente  $A$  es transportado en el flujo aparente del fluido, la contribución del movimiento aparente. (Welty, 2015, pág. 571)

## EJEMPLO 2 (Bird, 1992, págs. 16-9)

- ¿Cómo están relacionadas  $\vec{J}_i^*$  y  $\vec{N}_i$  en un sistema de  $n$  componentes?
- Demostrar que la suma de las densidades de flujo  $\vec{J}_i^*$  es cero

Solución a) Combinando las definiciones de  $v^*$  y  $\vec{J}_i^*$  se llega a

$$\vec{J}_i^* = (v_i - v^*) = c_i v_i - \left(\frac{c_i}{c}\right) \sum_{j=1}^n c_j v_j$$

Teniendo en cuenta las definiciones de  $\vec{J}_i$  y  $x_i$  se obtiene

$$\vec{J}_i^* = \vec{N}_i - x_i \sum_{j=1}^n \vec{N}_j$$

Esto indica que la densidad de flujo de difusión  $\vec{J}_i^*$  es sencillamente la diferencia entre la densidad de flujo molar  $\vec{N}_i$  y la velocidad de transporte (flujo global) de la especie  $i$  debido a la densidad de flujo molar local de la mezcla. La ecuación 3.8 puede interpretarse de una forma similar.

Solución b)

$$\sum_{i=1}^n \vec{J}_i^* = \mathbf{0}$$

Lo que demuestra que la suma de las densidades de flujo molares de difusión relativas a la velocidad media molar en cualquier mezcla es cero. Por consiguiente, en una mezcla binaria las densidades de flujo de difusión  $\vec{J}_A^*$  y  $\vec{J}_B^*$  son iguales y en sentido contrario:

$$\vec{J}_A^* = -\vec{J}_B^*$$

## PROBLEMAS

**3.1 (Welty, 2015, pág. 596)** Se va a embarcar gas natural licuado, de la península de Kenai en Alaska hasta un punto en Newport, Oregón, utilizando un transportador marítimo. La composición molar del gas natural comercial es

**Metano  $CH_4$  93.5 mol%**

**Etano  $C_2H_6$  4.6 mol%**

**Propano  $C_3H_8$  1.2 mol%**

**Dioxido de Carbono  $CO_2$  0.7 mol%**

Determinar

- Fracción en peso del metano
- Peso molecular promedio de la mezcla de gas natural
- Densidad de la mezcla de gases cuando se calienta a  $207^{\circ}K$  y  $1.4 \times 10^5 Pa$
- La presión parcial del metano cuando la presión total del sistema es  $1.4 \times 10^5 Pa$
- La fracción en masa del dióxido de carbono en partes por millón

**3.2** (Welty, 2015, pág. 597) En un recipiente de  $1500 pie^3$  se encuentra aire a  $250^{\circ}F$  y  $1.5 atm$  de presión. Determinar las siguientes propiedades de la mezcla de gas seco.

- Fracción mol del oxígeno
- Fracción en volumen del oxígeno
- Peso de la mezcla
- Densidad en masa del nitrógeno
- Densidad en masa del oxígeno
- Densidad en masa de la mezcla
- Densidad molar de la mezcla
- Peso molecular promedio de la mezcla
- Presión parcial de oxígeno

**3.3** (Welty, 2015, pág. 597) A partir de la ecuación de la ley de Fick para la difusión de A a través de una mezcla binaria A y B

$$\vec{N}_A = -cD_{AB}\nabla y_A + y_A(\vec{N}_A + \vec{N}_B)$$

deducir las siguientes relaciones, especificando las deducciones que se hagan durante la deducción:

- $\vec{n}_A = -D_{AB}\nabla \rho_A + w_A(\vec{n}_A + \vec{n}_B)$
- $\vec{J}_A = -D_{AB}\nabla c_A$
- $\vec{J}_A = -\rho D_{AB}\nabla w_A$

**3.4** (Welty, 2015, pág. 597) A partir de la ecuación de Fick para la difusión de A a través de una mezcla binaria gaseosa de A y B, probar que

- $\vec{N}_A + \vec{N}_B = c\vec{V}$
- $\vec{n}_A + \vec{n}_B = \rho\vec{V}$
- $\vec{J}_A + \vec{J}_B = 0$



**3.5 (Welty, 2015, pág. 597)** Se almacena aire en un recipiente de  $1000 \text{ pies}^3$  a  $150^\circ\text{F}$  y  $1 \text{ atm}$  de presión y se satura con vapor de agua. Determinar las siguientes propiedades de la mezcla de gases:

- Fracción mol del oxígeno
- Peso de la mezcla de gases
- Densidad en masa del nitrógeno
- Densidad en masa de la mezcla
- Densidad molar de la mezcla
- Peso molecular promedio de la mezcla
- Presión parcial del oxígeno

**3.6 (Welty, 2015, pág. 598)** Para una mezcla binaria de A y B que utiliza solo las definiciones de las concentraciones, velocidades y flujos, demostrar que

a) 
$$x_A = \frac{\frac{w_A}{M_A}}{\frac{w_A}{M_A} + \frac{w_B}{M_B}}$$

b) 
$$dx_A = \frac{dw_A}{M_A M_B \left( \frac{w_A}{M_A} + \frac{w_B}{M_B} \right)^2}$$

c) 
$$dw_A = \frac{M_A M_B dx_A}{(x_A M_A + x_B M_B)^2}$$

## CAPÍTULO 4

### ECUACIÓN DE CONTINUIDAD Y SUS DIFERENTES EXPRESIONES EN UNIDADES MÁSICAS Y MOLARES.

#### INTRODUCCION

En el presente capítulo se describirá la transferencia de masa en estado estacionario desde un punto de vista diferencial. Para esto, deben establecerse la ecuación diferencial y las condiciones de frontera que describen la situación física. Durante el estudio, se utilizarán dos tipos de presentación: 1) definir el volumen de control para una situación específica que generara la ecuación diferencial que lo gobierna y 2) utilizar las ecuaciones diferenciales generales para la transferencia de masa, se eliminarán los términos que no tienen importancia y, al hacerlo, se obtendrá la ecuación diferencial que lo gobierna. Aplicando ambos procedimientos, estudiante se familiarizará con los diversos términos de la ecuación diferencial general de transferencia de masa.

Si se considera la ecuación diferencial de transferencia de masa

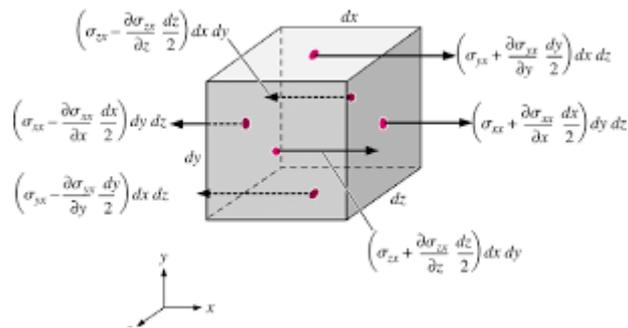
$$\vec{\nabla} * \vec{N}_A + \frac{\partial c_A}{\partial t} - R_A = 0 \quad (4.1)$$

Se reconocerán 3 términos que pueden intervenir en la transferencia de masa:  $R_A$ : la rapidez de la producción química de la especie  $A$  dentro de la fase a través de la cual se transfiere la masa;  $\frac{\partial c_A}{\partial t}$ , la acumulación de  $A$  dentro de la fase y  $\vec{\nabla} * \vec{N}_A$ , la rapidez neta de emisión de masa de la especie  $A$ . Estos términos pueden o no intervenir en un proceso de transferencia de masa en particular; por ejemplo, la transferencia de masa en estado estacionario, la concentración en un punto determinado no varía con el tiempo de manera que  $\frac{\partial c_A}{\partial t}$  es cero. Para adquirir práctica al tratar los procesos de transferencia de masa, se considerará inicialmente el caso más simple, la difusión en estado estacionario libre de producción química. (Welty, 2015, pág. 620)

#### LA ECUACION DIFERENCIAL PARA LA TRANSFERENCIA DE MASA

Considere el volumen de control,  $\Delta x \Delta y \Delta z$ , a través de la cual fluye una mezcla que incluye el componente  $A$  como lo muestra la figura 3.1. La expresión para el volumen de control para la conservación de la masa es

$$\iint \rho(\vec{v} * \vec{n}) dA + \iiint \rho dV = 0 \quad (4.2)$$



**Figura 4.1 Volumen de Control Diferencial**  
(Welty, 2015)

## BALANCE DE MATERIA

Que en palabras puede expresarse como

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Rapidez neta de emisión de masa} \\ \text{del volumen de control} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Rapidez neta de acumulación} \\ \text{de masa dentro del volumen de} \\ \text{control} \end{array} \right\} = 0$$

Si se considera la conservación de una especie determinada  $A$ , esta relación también incluiría un término que toma en cuenta la producción o desaparición de  $A$  por reacción química dentro del volumen de control. La relación general para un balance de masa de la especie  $A$  para el volumen de control puede expresarse como

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Rapidez neta de emisión de masa de } A \\ \text{del volumen de control} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Rapidez neta de acumulación} \\ \text{de } A \text{ dentro del volumen de} \\ \text{control} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{Rapidez de producción química de } A \\ \text{dentro del volumen de control} \end{array} \right\} = 0$$

A continuación, se evaluarán los términos individuales para el constituyente  $A$  y se dará una explicación de su significado. (Welty, 2015, págs. 602-603)

La rapidez neta de emisión de masa del volumen de control puede evaluarse si se considera la masa que se transfiere a través de las superficies de control. Por ejemplo, la masa de  $A$  que se transfiere a través del área  $\Delta y \Delta z$  en  $x$  será  $(\rho_A v_{A,x} \Delta y \Delta z)_x$  o en términos del vector de flujo  $\vec{n}_A = \rho_A \mathbf{v}_A$ , sería  $(\vec{n}_{A,x} \Delta y \Delta z)_x$ . La rapidez neta de emisión de masa del constituyente  $A$  será:

$$\text{dirección } x: (\vec{n}_{A,x} \Delta y \Delta z)_{x+\Delta x} - (\vec{n}_{A,x} \Delta y \Delta z)_x = \left\{ (\vec{n}_{A,x})_{x+\Delta x} - (\vec{n}_{A,x})_x \right\} \Delta y \Delta z \quad (4.3)$$

$$\text{dirección } y: (\vec{n}_{A,y} \Delta x \Delta z)_{y+\Delta y} - (\vec{n}_{A,y} \Delta x \Delta z)_y = \left\{ (\vec{n}_{A,y})_{y+\Delta y} - (\vec{n}_{A,y})_y \right\} \Delta x \Delta z \quad (4.4)$$

y

$$\text{dirección } z: (\vec{n}_{A,z}\Delta x\Delta y)_{z+\Delta z} - (\vec{n}_{A,z}\Delta x\Delta y)_z = \{(\vec{n}_{A,z})_{z+\Delta z} - (\vec{n}_{A,z})_z\}\Delta x\Delta y \quad (4.5)$$

La rapidez de acumulación de  $A$  en el volumen de control es:

$$\left(\frac{\partial \rho_A}{\partial t}\right)\Delta x\Delta y\Delta z \quad (4.6)$$

Si dentro del volumen de control se produce  $A$ , con una rapidez  $r_A$  por alguna reacción química, donde  $r_A$  tiene las unidades  $\frac{\text{masa de } A \text{ producida}}{(\text{volumen})(\text{tiempo})}$ , la rapidez de producción de  $A$  es:

$$r_A\Delta x\Delta y\Delta z = r_A\Delta V \quad (4.7)$$

Este término de producción es análogo al término de generación de energía que aparece en la ecuación diferencial de transferencia de energía. (Welty, 2015, pág. 604)

Del cálculo diferencial tenemos la definición de derivada por el método de los 4 pasos

$$y + \Delta y = f(x + \Delta x) \quad (4.8)$$

Por definición algebraica

$$y = f(x) \quad (4.9)$$

Sustituyendo la ecuación (3.9) en la ecuación (3.8)

$$f(x) + \Delta y = f(x + \Delta x) \quad (4.10)$$

Despejando  $f(x)$  de la ecuación (3.10)

$$\Delta y = f(x + \Delta x) - f(x) \quad (4.11)$$

Dividiendo entre  $\Delta x$

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (4.12)$$

Aplicando las definiciones anteriores, podemos representar las derivadas del flux dentro de la ecuación de continuidad en un sistema de coordenadas rectangular, quedando de la siguiente manera

$$\begin{aligned} & \{(\vec{n}_{A,x})_{x+\Delta x} - (\vec{n}_{A,x})_x\}\Delta y\Delta z + \{(\vec{n}_{A,y})_{y+\Delta y} - (\vec{n}_{A,y})_y\}\Delta x\Delta z + \{(\vec{n}_{A,z})_{z+\Delta z} - (\vec{n}_{A,z})_z\}\Delta x\Delta y \\ & + \left(\frac{\partial \rho_A}{\partial t}\right)\Delta x\Delta y\Delta z - r_A\Delta x\Delta y\Delta z = 0 \quad (4.13) \end{aligned}$$

Si se divide entre el volumen  $\Delta x\Delta y\Delta z$  y se cancelan los términos, se tiene

$$\begin{aligned} & \{(\vec{n}_{A,x})_{x+\Delta x} - (\vec{n}_{A,x})_x\} + \{(\vec{n}_{A,y})_{y+\Delta y} - (\vec{n}_{A,y})_y\} + \{(\vec{n}_{A,z})_{z+\Delta z} - (\vec{n}_{A,z})_z\} + \left(\frac{\partial \rho_A}{\partial t}\right) - r_A \\ & = 0 \quad (4.13) \end{aligned}$$

Al evaluar en el limite a medida que  $\Delta x$   $\Delta y$  y  $\Delta z$  se aproximan a cero, se llega a

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{(\vec{n}_{A,x})_{x+\Delta x} - (\vec{n}_{A,x})_x}{\Delta x} + \lim_{\Delta y \rightarrow 0} \frac{(\vec{n}_{A,y})_{y+\Delta y} - (\vec{n}_{A,y})_y}{\Delta y} + \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{(\vec{n}_{A,z})_{z+\Delta z} - (\vec{n}_{A,z})_z}{\Delta z} + \left(\frac{\partial \rho_A}{\partial t}\right) - r_A = 0 \quad (4.14)$$

Quedando de la siguiente manera

$$\left( \frac{\partial \vec{n}_{A,x}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{n}_{A,y}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{n}_{A,z}}{\partial z} + \frac{\partial \rho_A}{\partial t} - r_A \right) = 0 \quad (3.15)$$

La ecuación (4.15) es la ecuación de continuidad para el componente  $A$ . Puesto que  $\vec{n}_{A,x}$ ,  $\vec{n}_{A,y}$ ,  $\vec{n}_{A,z}$  son los componentes rectangulares del vector de flujo de masa,  $\vec{n}_A$ , la ecuación (3.15) puede escribirse como

$$\vec{\nabla} * \vec{n}_A + \frac{\partial \rho_A}{\partial t} - r_A = 0 \quad (4.16)$$

En la misma forma puede desarrollarse una ecuación similar de continuidad para el segundo componente  $B$ . Las ecuaciones diferenciales son

$$\frac{\partial \vec{n}_{A,x}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{n}_{A,y}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{n}_{A,z}}{\partial z} + \frac{\partial \rho_B}{\partial t} - r_B = 0 \quad (4.17)$$

y

$$\vec{\nabla} * \vec{n}_B + \frac{\partial \rho_B}{\partial t} - r_B = 0 \quad (4.18)$$

donde  $-r_B$  es la rapidez con que se producirá la especie  $A$  dentro del volumen de control diferencial por medio de una reacción química. Si se suman las ecuaciones (4.16) y (4.18)

$$\vec{\nabla} * (\vec{n}_A + \vec{n}_B) + \frac{\partial (\rho_A + \rho_B)}{\partial t} - (r_A + r_B) = 0 \quad (4.19)$$

Para una mezcla binaria de  $A$  y  $B$ , se tiene

$$\vec{n}_A + \vec{n}_B = \rho_A \mathbf{v}_A + \rho_B \mathbf{v}_B = \rho \mathbf{v} \quad (4.20)$$

$$\rho_A + \rho_B = \rho$$

y

$$r_A = -r_B$$

Por la ley de la conservación de la masa. Si se sustituyen estas relaciones en la ecuación (4.8), se obtiene

$$\vec{\nabla} * \rho \mathbf{v} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (4.21)$$

Esta es la ecuación de continuidad para la mezcla.

## ECUACION DE CONTINUIDAD PARA LA ESPECIE A EN UNIDADES MOLARES

Podría seguirse el mismo desarrollo en términos de unidades molares. Si  $R_A$  representa la rapidez de producción molar de  $A$  por unidad de volumen y  $R_B$  representa la rapidez de producción molar de  $B$  por unidad de volumen, las ecuaciones equivalentes molares son:

Para el componente  $A$ ,

$$\vec{\nabla} * \vec{N}_A + \frac{\partial c_A}{\partial t} - R_A = 0 \quad (4.22)$$

Para el componente  $B$ ,

$$\vec{\nabla} * \vec{N}_B + \frac{\partial c_B}{\partial t} - R_B = 0 \quad (4.23)$$

Y para la mezcla

$$\vec{\nabla} * (\vec{N}_A + \vec{N}_B) + \frac{\partial (c_A + c_B)}{\partial t} - (R_A + R_B) = 0 \quad (4.24)$$

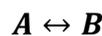
Para la mezcla binaria de  $A$  y  $B$ , se tiene

$$\vec{N}_A + \vec{N}_B = c_A \mathbf{v}_A + c_B \mathbf{v}_B = c \mathbf{V}$$

Y

$$c_A + c_B = c$$

Sin embargo, solo cuando la estequiometría de la reacción corresponde a



que estipula que se produce una molécula de  $B$  por cada molécula de  $A$  que desaparece, puede especificarse que  $R_A = -R_B$ . En general, la ecuación de continuidad para la mezcla en unidades molares es

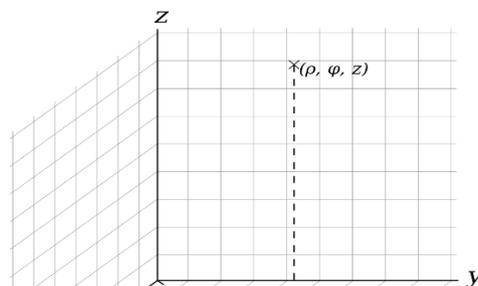
$$\vec{\nabla} * c \vec{V} + \frac{\partial c}{\partial t} - (R_A + R_B) = 0 \quad (4.25)$$

## ECUACION DE CONTINUIDAD PARA DIFERENTES GEOMETRIAS (Welty, 2015, pág. 610)

Coordenadas Rectangulares a Cilíndricas

$$\vec{\nabla} * \vec{N}_A = \left\{ \frac{\partial \vec{N}_{A,x}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{N}_{A,y}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} \right\} + \frac{\partial c_A}{\partial t} - R_A = 0 \quad (4.26)$$

Para transformar a coordenadas cilíndricas seguiremos los siguientes pasos:



**Figura 4.2 Comparación entre coordenadas rectangulares a coordenadas cilíndricas (Welty 2015)**

- En primer lugar, plantearemos los siguientes cambios de variables

$$\begin{bmatrix} x = r \cos \theta & y = r \sin \theta \\ \tan \theta = \frac{y}{x} & r = \sqrt{x^2 + y^2} \end{bmatrix} \quad (4.27)$$

- y posteriormente planteamos la matriz de derivadas utilizando la regla de la cadena

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \vec{N}_{A,x}}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) + \frac{\partial \theta}{\partial x} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) \\ \frac{\partial \vec{N}_{A,y}}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) + \frac{\partial \theta}{\partial y} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) \\ \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} \right)_{\text{Rectangular}} = \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} \right)_{\text{Cilindrico}} \end{bmatrix} \quad (4.28)$$

- Comenzaremos con la resolución de la primera derivada de la matriz

$$\frac{\partial r}{\partial x} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{x^2 + y^2} \frac{\partial}{\partial x} (x^2 + y^2) \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) \quad (4.29)$$

$$\frac{\partial r}{\partial x} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) \quad (4.30)$$

- Sustituyendo variables algebraicas a trigonométricas obtenemos el resultado de la primera derivada con respecto de  $x$

$$\frac{\partial r}{\partial x} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) = \frac{r \cos \theta}{r} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) = \cos \theta \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) \quad (4.31)$$

En la siguiente derivada tenemos que despejar  $\theta$  de la ecuación  $\tan \theta = \frac{y}{x}$ , quedando de la siguiente manera  $\theta = \arctan \left( \frac{y}{x} \right)$  y procedemos a resolver

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \arctan \left( \frac{y}{x} \right) \right\} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{y}{x} \right) \right\} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) \quad (4.32)$$

- Posteriormente, mediante el uso de identidades trigonométricas, en específico la identidad  $\sec^2 x - \tan^2 x = 1$  la cual despejamos para quedar de la siguiente forma  $\sec^2 x = 1 + \tan^2 x$ .
- Posteriormente derivaremos la función  $\theta = \arctan \left( \frac{y}{x} \right)$ , la cual quedaría de la siguiente manera

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \arctan \left( \frac{y}{x} \right) \right\} = \left( \operatorname{arcsec}^2 \frac{y}{x} \right) \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{y}{x} \right) = -\frac{y}{x^2} \left( \operatorname{arcsec}^2 \frac{y}{x} \right) \quad (4.33)$$

- Por identidad

$$\frac{1}{\sec^2 \frac{y}{x}} = \frac{1}{1 + \tan^2 \frac{y}{x}} = \frac{1}{1 + \left(\frac{y}{x}\right)^2} \quad (4.34)$$

- Sustituyendo

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) = \left\{ \frac{1}{1 + \left(\frac{y}{x}\right)^2} \right\} \left\{ -\frac{y}{x^2} \right\} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) \quad (4.35)$$

- Reacomodando la ecuación

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) = \left\{ \frac{1}{x^2 + y^2} \right\} \left\{ -\frac{y}{x^2} \right\} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) \quad (4.36)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) = \left\{ \frac{x^2}{x^2 + y^2} \right\} \left\{ -\frac{y}{x^2} \right\} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) = -\left\{ \frac{y}{x^2 + y^2} \right\} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) \quad (4.37)$$

- Cambiando a variables trigonométricas

$$-\left\{ \frac{y}{x^2 + y^2} \right\} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) = -\left\{ \frac{r \operatorname{sen} \theta}{r^2} \right\} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) = -\left\{ \frac{\operatorname{sen} \theta}{r} \right\} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) \quad (4.38)$$

- Teniendo así la primera parte de la matriz de derivadas con respecto a  $x$

$$\left[ \begin{array}{l} \frac{\partial \vec{N}_{A,x}}{\partial x} = \cos \theta \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) - \left\{ \frac{\operatorname{sen} \theta}{r} \right\} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) \\ \frac{\partial \vec{N}_{A,y}}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) + \frac{\partial \theta}{\partial y} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) \\ \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} \right)_{\text{Rectangular}} = \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} \right)_{\text{Cilindrico}} \end{array} \right] \quad (4.39)$$

Procederemos a obtener la segunda parte de la matriz de derivadas con respecto a  $y$

- Comenzando con la primera derivada

$$\frac{\partial r}{\partial y} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) = \frac{\partial}{\partial y} (\sqrt{x^2 + y^2}) \left\{ \frac{\partial}{\partial y} (x^2 + y^2) \right\} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) \quad (4.40)$$

- Resolviendo las derivadas obtenemos

$$\frac{\partial r}{\partial y} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) = \left( \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right) \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) = \operatorname{sen} \theta \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) \quad (4.41)$$

- Posteriormente resolveremos la siguiente derivación

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) = \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \arctan \left( \frac{y}{x} \right) \right\} \left\{ \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{y}{x} \right) \right\} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) \quad (4.42)$$

- Posteriormente

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) = \operatorname{arcsec}^2 \left( \frac{y}{x} \right) \left\{ \left( \frac{1}{x} \right) \frac{\partial}{\partial y} (y) \right\} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) \quad (4.43)$$

- Posteriormente

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) = \left( \frac{1}{x} \right) \operatorname{arcsec}^2 \left( \frac{y}{x} \right) \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) \quad (4.44)$$

- Posteriormente se realiza el cambio de variables algebraicas a trigonométricas

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) = \left\{ \frac{1}{1 + \left( \frac{y}{x} \right)^2} \right\} \left( \frac{1}{x} \right) \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) = \left( \frac{x}{x^2 + y^2} \right) \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) = \frac{\cos \theta}{r} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) \quad (4.45)$$

- Completando ahora la segunda parte de la matriz de derivadas

$$\left[ \begin{array}{l} \frac{\partial \vec{N}_{A,x}}{\partial x} = \cos \theta \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) - \left\{ \frac{\operatorname{sen} \theta}{r} \right\} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) \\ \frac{\partial \vec{N}_{A,y}}{\partial y} = \operatorname{sen} \theta \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) + \frac{\cos \theta}{r} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) \\ \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} \right)_{\text{Rectangular}} = \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} \right)_{\text{Cilindrico}} \end{array} \right] \quad (4.46)$$

Igualando la ecuación de continuidad en coordenadas rectangulares con la ecuación en coordenadas cilíndricas, obteniendo lo que se conoce gradiente en coordenadas cilíndricas

$$\vec{\nabla} * \vec{N}_A = \left\{ \frac{\partial \vec{N}_{A,x}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{N}_{A,y}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} \right\} = \left\{ \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) + \left( \frac{1}{r} \right) \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} \right\} \quad (4.47)$$

Para obtener la divergencia comenzaremos por utilizar el producto punto de dos vectores distintos como se muestra a continuación, comenzando por mostrar nuevamente la matriz de la derivada

$$\left[ \begin{array}{l} \left( \frac{\partial}{\partial x} \right) \hat{i} = \left[ \cos \theta \left( \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\operatorname{sen} \theta}{r} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \hat{i} \\ \left( \frac{\partial}{\partial y} \right) \hat{j} = \left[ \operatorname{sen} \theta \left( \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\cos \theta}{r} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \hat{j} \\ \left( \frac{\partial}{\partial z} \right)_{\text{Rectangular}} \hat{k} = \left( \frac{\partial}{\partial z} \right)_{\text{Cilindrico}} \hat{k} \end{array} \right] \quad (4.48)$$

Ya hemos introducido el gradiente por medio de fórmulas de coordenadas rectangulares a coordenadas cilíndricas, y ahora introduciremos la divergencia en coordenadas cilíndricas por medio de la siguiente fórmula

$$F_r e_r + F_\theta e_\theta + F_z e_z$$

Realizando un producto punto como se muestra a continuación

$$\begin{aligned} & \left[ \cos\theta \left( \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\text{sen}\theta}{r} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \hat{i} * (F_r \cos\theta - F_\theta \text{sen}\theta) \hat{i} + \left[ \text{sen}\theta \left( \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\cos\theta}{r} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \hat{j} \\ & * (F_r \text{sen}\theta + F_\theta \cos\theta) \hat{j} \\ & + \left( \frac{\partial}{\partial z} \right) \hat{k} \end{aligned} \quad (4.49)$$

Resolviendo

$$\begin{aligned} & \cos\theta \left( \frac{\partial}{\partial r} \right) (F_r \cos\theta - F_\theta \text{sen}\theta) - \frac{\text{sen}\theta}{r} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \right) (F_r \cos\theta - F_\theta \text{sen}\theta) \\ & + \text{sen}\theta \left( \frac{\partial}{\partial r} \right) (F_r \text{sen}\theta + F_\theta \cos\theta) + \frac{\cos\theta}{r} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \right) (F_r \text{sen}\theta + F_\theta \cos\theta) \\ & + \left( \frac{\partial}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (4.50)$$

Posteriormente

$$\begin{aligned} & \cos^2\theta \left( \frac{\partial F_r}{\partial r} \right) - \cos\theta \left( \frac{\partial}{\partial r} \right) (F_\theta \text{sen}\theta) - \frac{\text{sen}\theta}{r} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \right) (F_r \cos\theta) + \frac{\text{sen}\theta}{r} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \right) (F_\theta \text{sen}\theta) \\ & + \text{sen}\theta \left( \frac{\partial}{\partial r} \right) (F_r \text{sen}\theta) + \text{sen}\theta \left( \frac{\partial}{\partial r} \right) (F_\theta \cos\theta) + \frac{\cos\theta}{r} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \right) (F_r \text{sen}\theta) \\ & + \frac{\cos\theta}{r} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \right) (F_\theta \cos\theta) + \left( \frac{\partial}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (4.51)$$

En esta parte de la resolución de las derivadas para la obtención de la divergencia encontraremos algunas derivadas que automáticamente su valor es cero debido precisamente a una regla de derivación en la cual la derivada de una constante vale cero como lo muestra la ecuación  $\frac{d}{dx}(c) = 0$ , las derivadas que concuerdan con la regla de derivación son  $\cos\theta \left( \frac{\partial}{\partial r} \right) (F_\theta \text{sen}\theta) = 0$  y  $\text{sen}\theta \left( \frac{\partial}{\partial r} \right) (F_\theta \text{sen}\theta) = 0$

y posteriormente sustituiremos

$$\begin{aligned} & \cos^2\theta \left( \frac{\partial F_r}{\partial r} \right) - \frac{\text{sen}\theta}{r} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \right) (F_r \cos\theta) + \frac{\text{sen}\theta}{r} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \right) (F_\theta \text{sen}\theta) + \text{sen}\theta \left( \frac{\partial}{\partial r} \right) (F_r \text{sen}\theta) \\ & + \frac{\cos\theta}{r} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \right) (F_r \text{sen}\theta) + \frac{\cos\theta}{r} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \right) (F_\theta \cos\theta) + \left( \frac{\partial}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (4.52)$$

Resolviendo mediante reglas de derivación

$$\begin{aligned} & \cos^2\theta \left( \frac{\partial F_r}{\partial r} \right) - \frac{F_r \text{sen}\theta}{r} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \right) (\cos\theta) + \frac{\text{sen}\theta}{r} \left( F_\theta \cos\theta + \text{sen}\theta \frac{\partial F_\theta}{\partial \theta} \right) + \text{sen}^2\theta \left( \frac{\partial F_r}{\partial r} \right) \\ & + \frac{F_r \cos\theta}{r} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \right) (\text{sen}\theta) + \frac{\cos\theta}{r} \left( -F_\theta \text{sen}\theta + \cos\theta \frac{\partial F_\theta}{\partial \theta} \right) + \left( \frac{\partial}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (4.53)$$

Posteriormente

$$\begin{aligned} & \cos^2\theta \left( \frac{\partial F_r}{\partial r} \right) + \frac{F_r \sin^2\theta}{r} + \frac{F_\theta \sin\theta \cos\theta}{r} + \frac{\sin^2\theta}{r} \left( \frac{\partial F_\theta}{\partial \theta} \right) \\ & + \sin^2\theta \left( \frac{\partial F_r}{\partial r} \right) + \frac{F_r \cos^2\theta}{r} - \frac{F_\theta \cos\theta \sin\theta}{r} + \frac{\cos^2\theta}{r} \left( \frac{\partial F_\theta}{\partial \theta} \right) + \left( \frac{\partial F_z}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (4.54)$$

Eliminado términos similares y aplicando identidades trigonométricas como  $\sin^2\theta + \cos^2\theta = 1$  obtenemos la siguiente ecuación

$$(\sin^2\theta + \cos^2\theta) \left( \frac{\partial F_r}{\partial r} \right) + \frac{F_r}{r} (\sin^2\theta + \cos^2\theta) + \frac{1}{r} (\sin^2\theta + \cos^2\theta) \left( \frac{\partial F_\theta}{\partial \theta} \right) + \left( \frac{\partial F_z}{\partial z} \right) \quad (4.55)$$

Posteriormente

$$\left( \frac{\partial F_r}{\partial r} \right) + \frac{F_r}{r} + \frac{1}{r} \left( \frac{\partial F_\theta}{\partial \theta} \right) + \left( \frac{\partial F_z}{\partial z} \right) \quad (4.56)$$

Posteriormente lo que realizaremos es factorizar el término  $\left( \frac{1}{r^2} \right)$  y sustituir la siguiente regla

de derivación  $\frac{\partial}{\partial r} (r^2 F_r) = r^2 \frac{\partial F_r}{\partial r} + F_r \left( \frac{\partial r^2}{\partial r} \right) = r^2 \frac{\partial F_r}{\partial r} + r F_r$  obteniendo

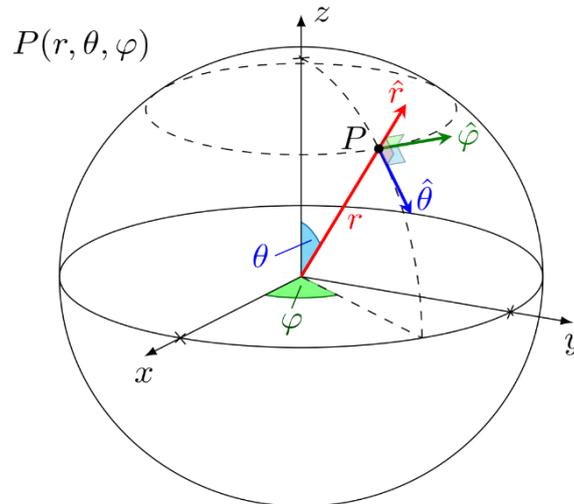
$$\left( \frac{1}{r^2} \right) \left\{ r^2 \frac{\partial F_r}{\partial r} + r F_r \right\} + \frac{1}{r} \left( \frac{\partial F_\theta}{\partial \theta} \right) + \left( \frac{\partial F_z}{\partial z} \right) \quad (4.57)$$

$$\left( \frac{1}{r^2} \right) \frac{\partial}{\partial r} (r^2 F_r) + \frac{1}{r} \left( \frac{\partial F_\theta}{\partial \theta} \right) + \left( \frac{\partial F_z}{\partial z} \right) \quad (4.58)$$

Obteniendo así la divergencia de las coordenadas cilíndricas

$$\vec{\nabla} * \vec{N}_A = \left\{ \left( \frac{1}{r^2} \right) \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \vec{N}_{A,r}) + \frac{1}{r} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) + \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} \right) \right\} + \frac{\partial c_A}{\partial t} - R_A = 0 \quad (4.59)$$

Ahora bien, ya que contamos con un procedimiento completo con el cual logramos obtener el gradiente y la divergencia de coordenadas cilíndricas, procederemos a obtener las mismas transformaciones de gradiente y divergencia, pero ahora de coordenadas esféricas de manera simplificada que en el procedimiento anterior para coordenadas cilíndricas.



**Figura 4.3 comparación entre coordenadas rectangulares frente a las coordenadas esféricas (Welty 2015).**

De la misma manera que el caso de las coordenadas cilíndricas, comenzaremos por establecer los cambios de variable de variables algebraicas a variables trigonométricas

$$\left[ \begin{array}{l} x = r \cos \theta \sin \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \varphi \end{array} \quad \begin{array}{l} r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \tan \theta = \left( \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z} \right) \rightarrow \theta = \arctan \left( \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z} \right) \\ \cos \varphi = \frac{z}{r} \rightarrow \varphi = \arccos \left( \frac{z}{r} \right) \end{array} \right] \quad (4.60)$$

Posteriormente procederemos a formar la matriz de las derivadas

$$\left[ \begin{array}{l} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,x}}{\partial x} \right) = \frac{\partial r}{\partial x} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) + \frac{\partial \theta}{\partial x} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\varphi}}{\partial \varphi} \right) \\ \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,y}}{\partial y} \right) = \frac{\partial r}{\partial y} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) + \frac{\partial \theta}{\partial y} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\varphi}}{\partial \varphi} \right) \\ \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} \right) = \frac{\partial r}{\partial z} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) + \frac{\partial \theta}{\partial z} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\varphi}}{\partial \varphi} \right) \end{array} \right] \quad (4.61)$$

Posteriormente realizaremos las derivadas y las sustuiremos en la matriz de la ecuación (3.61)

Comenzaremos con las derivadas con respecto de  $r$  como se muestran a continuación

$$\left[ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial \mathbf{r}} \right) = \cos \theta \sin \varphi \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial \mathbf{r}} \right) \\ \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial y} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial \mathbf{r}} \right) = \sin \theta \sin \varphi \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial \mathbf{r}} \right) \\ \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial z} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial \mathbf{r}} \right) = \cos \varphi \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial \mathbf{r}} \right) \end{array} \right]$$

Posteriormente continuaremos con las derivadas con respecto de  $\theta$  y en el que ocuparemos de manera básica identidades trigonométricas inversas, como se muestra a continuación

$$\theta = \arctan \left( \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z} \right)$$

- Derivando con respecto a  $x$  y ocupando para esto la regla de la cadena

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \arctan \left( \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z} \right) \right\} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z} \right) \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) = \operatorname{arcsec}^2 \left( \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z} \right) \left( \frac{1}{z} \right) \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{x^2 + y^2} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) \quad (4.62)$$

- Posteriormente

$$\begin{aligned} & \left( \frac{1}{z} \right) \operatorname{arcsec}^2 \left( \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z} \right) \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{x^2 + y^2} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) \\ &= \left( \frac{1}{z} \right) \operatorname{arcsec}^2 \left( \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z} \right) \left( \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right) \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) \quad (4.63) \end{aligned}$$

Habiendo llegado hasta este punto comenzaremos a ocupar identidades trigonométricas de funciones inversas, también conocidas como funciones de arco las cuales se muestra a continuación

$$\left[ \begin{array}{ll} \operatorname{arcsen} x = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} & \operatorname{arccot} x = \frac{1}{\sqrt{x^2-1}} \\ \operatorname{arccos} x = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} & \operatorname{arcsec} x = \frac{1}{\sqrt{x^2-1}} \\ \operatorname{arctan} x = \frac{1}{\sqrt{1+x^2}} & \operatorname{arccsc} x = \frac{1}{\sqrt{1+x^2}} \end{array} \right] \quad (4.64)$$

y posteriormente sus correspondientes derivaciones

$$\left[ \begin{array}{ll} \frac{d}{dx}(\arcsen x) = \frac{-1}{\sqrt{1-x^2}} & \frac{d}{dx}(\operatorname{arccot} x) = -\frac{1}{1+x^2} \\ \frac{d}{dx}(\operatorname{arccos} x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} & \frac{d}{dx}(\operatorname{arcsec} x) = \frac{1}{x\sqrt{x^2-1}} \\ \frac{d}{dx}(\arctan x) = \frac{1}{1+x^2} & \frac{d}{dx}(\operatorname{arccsc} x) = -\frac{1}{x\sqrt{x^2-1}} \end{array} \right] \quad (4.65)$$

Aquí en este caso la que ocuparemos es la derivada del  $\arctan x$  la cual da como resultado  $\frac{d}{dx}(\arctan x) = \frac{1}{1+x^2} \left(\frac{dx}{dx}\right)$ , como se muestra a continuación

$$\left(\frac{1}{z}\right) \left\{ \frac{1}{1 + \left(\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}\right)^2} \right\} \left(\frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right) \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) = \left(\frac{1}{z}\right) \left\{ \frac{z^2}{x^2 + y^2 + z^2} \right\} \left(\frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right) \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) \quad (4.66)$$

Eliminando y acomodando términos, queda de la siguiente manera

$$\left\{ \frac{z}{x^2 + y^2 + z^2} \right\} \left(\frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right) \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) = \left(\frac{z}{r^2}\right) \left(\frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right) \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) \quad (4.67)$$

Aquí lo que haremos posteriormente es realizar los correspondientes cambios de variable de funciones algebraicas a funciones trigonométricas

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\cos \varphi}{r}\right) \left(\frac{r \cos \theta \sin \varphi}{\sqrt{r^2 \cos^2 \theta \sin^2 \varphi + r^2 \operatorname{sen}^2 \theta \sin^2 \varphi}}\right) \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) \\ & = (\cos \varphi) \left(\frac{\cos \theta \sin \varphi}{\sqrt{r^2 \cos^2 \theta \sin^2 \varphi + r^2 \operatorname{sen}^2 \theta \sin^2 \varphi}}\right) \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) = \frac{\cos \varphi}{r} \left(\frac{\cos \theta \sin \varphi}{\sin \varphi}\right) \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) \end{aligned} \quad (4.68)$$

Obteniendo así el resultado de la primera derivada con respecto de  $x$ ,

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) = \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) \quad (4.69)$$

Posteriormente seguiremos con la derivada con respecto de  $y$

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) = \left(\frac{1}{z}\right) \operatorname{arcsec}^2 \left(\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}\right) \left(\frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right) \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) \quad (4.70)$$

Realizando las siguientes conversiones de variables algebraicas a variables trigonométricas, obtenemos lo siguiente

$$\left(\frac{1}{z}\right) \left\{ \frac{1}{1 + \left(\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}\right)^2} \right\} \left(\frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right) \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) = \left(\frac{1}{z}\right) \left\{ \frac{z^2}{x^2 + y^2 + z^2} \right\} \left(\frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right) \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) \quad (4.71)$$

Posteriormente seguiremos realizando los cambios de variable

$$\left\{ \frac{z}{x^2 + y^2 + z^2} \right\} \left(\frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right) \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) = \frac{\cos \varphi}{r} \left\{ \frac{r \sin \theta \sin \varphi}{\sqrt{r^2 \cos^2 \theta \sin^2 \varphi + r^2 \sen^2 \theta \sin^2 \varphi}} \right\} \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) \quad (4.72)$$

Obteniendo así el resultado de la derivada con respecto de  $y$

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) = \left(\frac{\cos \varphi}{r}\right) \left(\frac{\sin \theta \sin \varphi}{\sin \varphi}\right) \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) = \left(\frac{\cos \varphi \sin \theta}{r}\right) \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) \quad (4.73)$$

y posteriormente continuaremos con la derivada respecto de  $z$ ,  $\frac{\partial \theta}{\partial z} \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right)$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left\{ \arctan \left(\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}\right) \right\} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}\right) \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) = \operatorname{arcsec}^2 \left(\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}\right) (\sqrt{x^2 + y^2}) \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{z}\right) \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) \quad (4.74)$$

Transformando términos algebraicos a trigonométricos

$$\left\{ \frac{1}{1 + \left(\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}\right)^2} \right\} (\sqrt{x^2 + y^2}) \left(-\frac{1}{z^2}\right) \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) = \left(-\frac{1}{z^2}\right) \left\{ \frac{z^2}{x^2 + y^2 + z^2} \right\} (\sqrt{x^2 + y^2}) \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) \quad (4.75)$$

Obtenemos el resultado de la tercera derivada con respecto de  $z$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) = - \left( \frac{\sqrt{r^2 \cos^2 \theta \sin^2 \varphi + r^2 \sen^2 \theta \sin^2 \varphi}}{r^2} \right) \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) = - \frac{\sin \varphi}{r} \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) \quad (4.76)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right) = - \frac{\sin \varphi}{r} \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta}\right)$$

Posteriormente resolveremos la  $\frac{\partial \varphi}{\partial z} \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\varphi}}{\partial \varphi}\right)$ , con la cual finalizaremos la realización de las correspondientes derivaciones para la formación de la matriz de las derivadas de la ecuación (3.61)

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\varphi}}{\partial \varphi}\right) = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \arccos \left(\frac{z}{r}\right) \right\} \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\varphi}}{\partial \varphi}\right) = - \left(\frac{1}{r}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{z}{r}\right)^2}}\right) \left(\frac{\partial \vec{N}_{A,\varphi}}{\partial \varphi}\right) \quad (4.77)$$

## CAPÍTULO 5

### DIFERENTES EXPRESIONES DE LA “ECUACIÓN GENERAL DE TRANSFERENCIA DE MASA POR DIFUSIÓN “Y CASOS PARTICULARES

#### 5.1 CONTRADIFUSIÓN EQUIMOLAR

#### 5.2 CONTRADIFUSIÓN NO EQUIMOLAR

#### 5.3 DIFUSIÓN A TRAVÉS DE UN GAS ESTANCADO

### INTRODUCCION

En el presente capítulo se describirá la transferencia de masa en estado estacionario desde un punto de vista diferencial. Para esto, deben establecerse la ecuación diferencial y las condiciones de frontera que describen la situación física. Durante el estudio, se utilizarán dos tipos de presentación: 1) definir el volumen de control para una situación específica que generara la ecuación diferencial que lo gobierna y 2) utilizar las ecuaciones diferenciales generales para la transferencia de masa, se eliminarán los términos que no tienen importancia y, al hacerlo, se obtendrá la ecuación diferencial que lo gobierna. Aplicando ambos procedimientos, estudiante se familiarizará con los diversos términos de la ecuación diferencial general de transferencia de masa.

Si se considera la ecuación diferencial de transferencia de masa

$$\vec{\nabla} * \vec{N}_A + \frac{\partial c_A}{\partial t} - R_A = 0$$

Se reconocerán 3 términos que pueden intervenir en la transferencia de masa:  $R_A$ : la rapidez de la producción química de la especie  $A$  dentro de la fase a través de la cual se transfiere la masa;  $\frac{\partial c_A}{\partial t}$ , la acumulación de  $A$  dentro de la fase y  $\vec{\nabla} * \vec{N}_A$ , la rapidez neta de emisión de masa de la especie  $A$ . Estos términos pueden o no intervenir en un proceso de transferencia de masa en particular; por ejemplo, la transferencia de masa en estado estacionario, la concentración en un punto determinado no varía con el tiempo de manera que  $\frac{\partial c_A}{\partial t}$  es cero. Para adquirir práctica al tratar los procesos de transferencia de masa, se considerará inicialmente el caso más simple, la difusión en estado estacionario libre de producción química. (Welty, 2015, pág. 620)

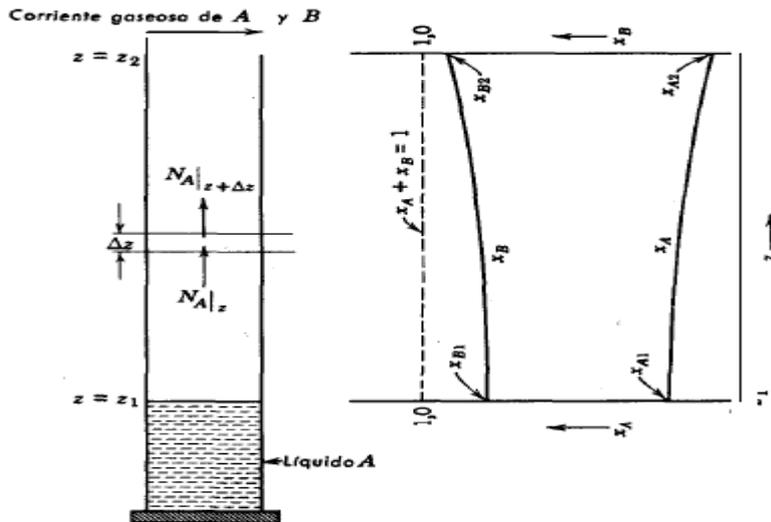


Figura 5.1 Celda de Difusión de Arnold (Welty, 2015)

## DIFUSION A TRAVES DE UNA PELICULA DE GAS ESTANCADA

El coeficiente de difusión o difusividad en masa para un gas puede medirse en forma experimental en una celda de difusión Arnold. Esta celda se muestra de manera

esquemática en la ilustración (5.1). En el tubo angosto, que se encuentra lleno

parcialmente con el líquido puro  $A$ , se mantiene a una temperatura y presión constantes. El gas  $B$ , que fluye a través del extremo abierto del tubo, tiene una solubilidad despreciable en el, líquido  $A$  y también es químicamente inerte respecto de  $A$ . El componente  $A$  se vaporiza y se difunde en la fase gaseosa; la rapidez de vaporización puede medirse en forma física y también expresarse en forma matemática en términos de flujo de masa molar.

(Welty, 2015, pág. 621)

Considérese el volumen de control  $S\Delta z$ , donde  $S$  es el área del tubo de sección transversal uniforme. Un balance masa en este volumen de control para una operación en estado estacionario da como resultado. (Welty, 2015, pág. 621)

$$(\vec{S}\vec{N}_{A,z})_{z+\Delta z} - (\vec{S}\vec{N}_{A,z})_z = 0 \quad (5.1)$$

Al dividir entre el volumen,  $S\Delta z$  y evaluarlo en el límite cuando  $\Delta z$  se aproxima a cero, se obtiene la ecuación diferencial

$$\frac{d\vec{N}_{A,z}}{dz} = 0 \quad (5.2)$$

Esta relación estipula un flujo molar constante de  $A$  a través de la fase gaseosa desde  $z_1$  hasta  $z_2$ .

La ecuación (5.2) podría haberse obtenido a través de la ecuación diferencial general para la transferencia de masa,

$$\vec{\nabla} * \vec{N}_A + \frac{\partial c_A}{\partial t} - R_A = 0 \quad (4.1)$$

o

$$\left\{ \frac{\partial \vec{N}_{A,x}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{N}_{A,y}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} \right\} + \frac{\partial c_A}{\partial t} - R_A = 0 \quad (5.4)$$

Para un proceso en estado estacionario,  $\frac{\partial c_A}{\partial t} = 0$  y cuando no hay producción química de  $A$ , se tiene  $R_A = 0$ . Para la difusión en la dirección  $z$  únicamente, se requiere tratar con el componente  $z$  del vector de flujo en masa,  $\vec{N}_A$ . Así para la situación física que se presenta, la ecuación (4.1) se reduce a la ecuación  $\frac{d\vec{N}_{A,z}}{dz} = 0$

También podría haberse generado una ecuación diferencial similar para el componente  $B$ ,

$$\frac{d\vec{N}_{B,z}}{dz} = 0 \quad (5.5)$$

Y, de acuerdo con ello, el flujo molar de  $B$  también es constante en toda la trayectoria de difusión desde  $z_1$  hasta  $z_2$ . Si se considera solo el plano en  $z_1$  y la restricción de que el gas  $B$  es insoluble en el líquido  $A$ , es posible darse cuenta de que  $\vec{N}_{B,z}$  en el plano  $z_1$  es cero y concluir que  $\vec{N}_{B,z}$ , el flujo neto de  $B$ , es cero a través de la trayectoria de difusión; de acuerdo con esto, el componente  $B$  es un gas estancado. (Welty, 2015, pág. 622)

El flujo molar constante de  $A$  se escribió en el capítulo 2 por medio de la ecuación

$$\vec{N}_{A,z} = -cD_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A(\vec{N}_{A,z} + \vec{N}_{B,z}) \quad (3.23)$$

Cuando  $\vec{N}_{B,z} = 0$ , esta ecuación se reduce a

$$\vec{N}_{A,z} = -cD_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A(\vec{N}_{A,z})$$

y despejando obtenemos

$$\begin{aligned} \vec{N}_{A,z}(1 - y_A) &= -cD_{AB} \frac{dy_A}{dz} \\ \vec{N}_{A,z} &= \frac{-cD_{AB} dy_A}{(1 - y_A) dz} \end{aligned} \quad (5.6)$$

Dicha ecuación puede integrarse entre las dos condiciones de frontera

$$\begin{bmatrix} z = z_1 & y_A = y_{A1} \\ z = z_2 & y_A = y_{A2} \end{bmatrix}$$

Si se supone que el coeficiente de difusión es independiente de la concentración  $y$ , al estudiar la ecuación (5.2), se advierte que  $\vec{N}_{A,z}$  es constante a lo largo de la trayectoria de difusión, al integrar se obtiene, (Welty, 2015, pág. 623)

$$\vec{N}_{A,z} \int_0^z dz = -cD_{AB} \int_{y_{A1}}^{y_{A2}} \frac{dy_A}{(1 - y_A)} \quad (5.7)$$

Resolviendo para  $\vec{N}_{A,z}$ , se obtiene

$$\vec{N}_{A,z}(z_2 - z_1) = -cD_{AB}\{\ln(1 - y_{A_2}) - \ln(1 - y_{A_1})\}$$

Aplicando la regla del logaritmo de un cociente

$$\frac{b^x}{b^y} = \frac{M}{N}$$

$$b^{x-y} = \frac{M}{N}$$

$$x - y = \log_b \frac{M}{N} = \log_b M - \log_b N$$

Obtenemos la ecuación que describe el fenómeno de difusión a través de una película de gas estancada

$$\vec{N}_{A,z} = -\frac{cD_{AB}}{(z_2 - z_1)} \ln \frac{(1 - y_{A_2})}{(1 - y_{A_1})} \quad (5.8)$$

De igual manera podemos tener una ecuación en términos de la concentración logarítmica media  $y_{B,lm}$  de la cual obtendremos su desarrollo

$$\vec{N}_{A,z} = \frac{cD_{AB}(y_{A_1} - y_{A_2})}{(z_2 - z_1)y_{B,lm}} \quad (5.9)$$

Comenzaremos con el desarrollo para la obtención de la ecuación del flux molar con la ecuación de transferencia de masa en coordenadas rectangulares

$$\left( \frac{\partial \vec{N}_{A,x}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{N}_{A,y}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} \right) + \frac{\partial c_A}{\partial t} - R_A = 0 \quad (4.1)$$

Eliminando los términos sin importancia obtendremos la ecuación para la obtención del flux molar de una película estancada en términos de la concentración logarítmica media

$$\frac{d\vec{N}_{A,z}}{dz} = 0 \quad (5.10)$$

Posteriormente definiremos el flux molar para una película de gas estancado como se realizó en la ecuación (3.23)

$$\vec{N}_{A,z} = -cD_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A(\vec{N}_{A,z} + \vec{N}_{B,z}) \quad (3.23)$$

Para un gas estancado el termino  $\vec{N}_{B,z} = 0$

$$\vec{N}_{A,z} = -cD_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A(\vec{N}_{A,z}) \quad (5.11)$$

Despejando la ecuación el termino  $y_A(\vec{N}_{A,z})$  al otro lado de la igualdad tenemos

$$\vec{N}_{A,z}(1 - y_A) = -cD_{AB} \frac{dy_A}{dz} \quad (5.12)$$

$$\vec{N}_{A,z} = \frac{-cD_{AB}dy_A}{(1-y_A)dz}$$

y posteriormente derivamos la ecuación con respecto de  $z$ , así de esta manera es como obtenemos la ecuación con la que obtendremos la ecuación del logaritmo medio de la concentración de  $B$

$$y_{B,lm} \rightarrow \frac{d\vec{N}_{A,z}}{dz} = cD_{AB} \int_{y_{A1}}^{y_{A2}} \frac{d^2y_A}{(1-y_A)dz^2} \quad (5.13)$$

$$cD_{AB} = 1.0$$

Posteriormente procederemos a integrar la ecuación diferencial la cual será una ecuación diferencial de segundo orden de la forma  $\frac{d^2y}{dx^2} = 0$

$$\frac{d\vec{N}_{A,z}}{dz} = \int \frac{d^2y_A}{(1-y_A)dz^2} \quad (5.14)$$

Separando términos, la primera parte de la solución de la ecuación diferencial de segundo orden es precisamente disminuir su orden lo cual hacemos integrando la ecuación diferencial e igualando a cero quedando de la siguiente manera

$$\frac{d\vec{N}_{A,z}}{dz} = \int \left( \frac{d}{dz} \right) \left\{ \frac{dy_A}{(1-y_A)dz} \right\} dz = \int 0 \quad (5.15)$$

Posteriormente resolveremos mediante el método de separación de variables siendo una ecuación de la forma  $\varphi(y)dx + \delta(x)dy = 0$ , la cual es posible separar de la siguiente manera

$$\frac{dx}{\delta(x)} + \frac{dy}{\varphi(y)} = 0 \text{ e integramos de la siguiente manera } \int \frac{dx}{\delta(x)} + \int \frac{dy}{\varphi(y)} = \int 0$$

$$\int_{y_{A1}}^{y_{A2}} \frac{dy_A}{(1-y_A)} = c_1 \int_{z_1}^{z_2} dz \quad (5.16)$$

Posteriormente obtenemos una solución general de las integraciones

$$\text{Ln} \left( \frac{1-y_{A2}}{1-y_{A1}} \right) = c_1(z_2 - z_1) \quad (5.17)$$

Posteriormente procederemos a evaluar la constante de integración de la siguiente manera

$$\frac{1}{(z_2 - z_1)} \text{Ln} \left( \frac{1-y_{A2}}{1-y_{A1}} \right) = c_1 \quad (5.18)$$

$$\text{Ln} \left( \frac{1-y_A}{1-y_{A1}} \right) = \left( \frac{z-z_1}{z_2-z_1} \right) \text{Ln} \left( \frac{1-y_{A2}}{1-y_{A1}} \right) \quad (5.18b)$$

Eliminaremos los logaritmos y colocaremos el cociente  $\left( \frac{z-z_1}{z_2-z_1} \right)$  como un exponente por medio de leyes de los logaritmos quedando de la siguiente manera

$$\left(\frac{1 - y_A}{1 - y_{A_1}}\right) = \left(\frac{1 - y_{A_2}}{1 - y_{A_1}}\right)^{\left(\frac{z - z_1}{z_2 - z_1}\right)} \quad (5.19)$$

Aplicaremos la definición  $y_A + y_B = 1$

$$\left(\frac{y_B}{y_{B_1}}\right) = \left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)^{\left(\frac{z - z_1}{z_2 - z_1}\right)} \quad (5.20)$$

Aplicaremos la definición  $\frac{dz}{dz} = 1$

$$\left(\frac{y_B}{y_{B_1}}\right) = \frac{\left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)^{\left(\frac{z - z_1}{z_2 - z_1}\right)} dz}{dz} \quad (5.21)$$

E integraremos

$$y_{B,lm} = \frac{y_{B_1} \int_{z_1}^{z_2} \left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)^{\left(\frac{z - z_1}{z_2 - z_1}\right)} dz}{\int_{z_1}^{z_2} dz} \quad (5.22)$$

Para la solución de la integral  $\int_{z_1}^{z_2} \left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)^{\left(\frac{z - z_1}{z_2 - z_1}\right)} dz$  tomaremos los siguientes ejemplos para mostrar cómo resolver la integral mostrada anteriormente

- Primer ejemplo

$$\int a^{2x} dx = \frac{1}{2} \left(\frac{a^{2x}}{\ln a}\right)$$

aplicaremos cambio de variable de la siguiente forma

$$\begin{aligned} u &= 2x & du &= 2dx \\ \frac{du}{2} &= dx & \int a^u du &= \frac{1}{2} \left(\frac{a^{2x}}{\ln a}\right) \end{aligned}$$

- En el segundo ejemplo resolveremos de la misma forma que en el ejemplo anterior

$$\int e^{2x} dx = \frac{1}{2} e^{2x}$$

En la cual también realizaremos un cambio de variable para poder resolver

$$\begin{aligned} u &= 2x & du &= 2dx \\ \frac{du}{2} &= dx & \int e^u du &= \frac{1}{2} \left(\frac{e^{2x}}{\ln e}\right) = \frac{1}{2} e^{2x} \end{aligned}$$

Regresando al problema original de la integral del logaritmo medio de la concentración de  $B$  procederemos a resolver

$$y_B = \frac{y_{B_1} \int_{z_1}^{z_2} \left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)^{\left(\frac{z-z_1}{z_2-z_1}\right)} dz}{\int_{z_1}^{z_2} dz} \quad (5.23)$$

Procederemos a realizar un cambio de variable como se muestra a continuación

$$\int_{z_1}^{z_2} \left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)^{\left(\frac{z-z_1}{z_2-z_1}\right)} dz$$

$$u = \left(\frac{z - z_1}{z_2 - z_1}\right) \quad (z_2 - z_1) du = dz$$

$$du = \frac{(z_2 - z_1) \frac{d}{dz}(z - z_1) - (z - z_1) \frac{d}{dz}(z_2 - z_1)}{(z_2 - z_1)^2} = \frac{dz}{(z_2 - z_1)}$$

$$\frac{y_{B_1} (z_2 - z_1) \int_{z_1}^{z_2} \left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)^{\left(\frac{z-z_1}{z_2-z_1}\right)} du}{(z_2 - z_1) \text{Ln}\left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)}$$

Teniendo como resultado la siguiente ecuación

$$\frac{y_{B_1} \int_{z_1}^{z_2} \left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)^{\left(\frac{z-z_1}{z_2-z_1}\right)} dz}{\text{Ln}\left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)} \quad (5.24)$$

y aplicando los límites obtenemos por fin la ecuación del comportamiento del gas  $B$  en la ecuación (5.9), en la cual sustituiremos este resultado para poder visualizarlo

$$\frac{y_{B_1} \left\{ \left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)^{\left(\frac{z_2-z_1}{z_2-z_1}\right)} - \left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)^{\left(\frac{z_1-z_1}{z_2-z_1}\right)} \right\}}{\text{Ln}\left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)} = \frac{y_{B_1} \left\{ \left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)^{(1)} - 1 \right\}}{\text{Ln}\left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)} = \left(\frac{y_{B_2} - y_{B_1}}{\text{Ln}\left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)}\right) \quad (5.25)$$

Sustituyendo el resultado de la ecuación (5.25) en la ecuación (5.9) obtenemos

$$\vec{N}_{A,z} = \frac{cD_{AB}(y_{A_2} - y_{A_1})}{(z_2 - z_1) \left(\frac{y_{B_2} - y_{B_1}}{\text{Ln}\left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)}\right)}$$

### EJEMPLO 1 (Welty, 2015, pág. 627)

Por la abertura accidental de una válvula, se derramo agua sobre el piso de una planta industrial en un área remota, difícil de alcanzar. Se desea estimar el tiempo que se requiere para evaporar el agua al aire circundante que esta estático. La capa de agua tiene 0.04 *pulg* de espesor y puede suponerse que permanece a una temperatura constante de 75°F. El aire también se encuentra a 75°F y 1 atm de presión, con una humedad absoluta

de  $0.002 \frac{\text{lbm de agua}}{\text{lbm de aire seco}}$ . Se supone que la evaporación se lleva a cabo por difusión molecular a través de una película de gas de  $0.2 \text{ pulg}$  de espesor.

$$\text{Volumen de agua evaporada} = (1 \text{ pie}^2) \left( \frac{0.04 \text{ in}}{12 \frac{\text{pulg}}{\text{pie}}} \right) = 0.0033 \text{ pie}^3$$

$$\text{Peso de agua evaporada} = (0.0033 \text{ pie}^3) \left( 7.48 \frac{\text{gal}}{\text{pie}^3} \right) \left( 8.34 \frac{\text{lbm}}{\text{gal}} \right) = 0.206 \text{ lbm}$$

$$\text{Moles de agua evaporada} = \left( \frac{0.206 \text{ lbm}}{18 \frac{\text{lbm}}{\text{lbmol}}} \right) = 0.0114 \text{ lbmol}$$

Los moles de agua evaporada por pie cuadrado por unidad de tiempo pueden expresarse como

$$\vec{N}_{A,z} = \frac{c D_{AB} (y_{A1} - y_{A2})}{\left( \frac{(y_{B2} - y_{B1})}{\ln \left( \frac{y_{B2}}{y_{B1}} \right)} \right) (z)}$$

La concentración molar total en la fase gaseosa,  $c$ , puede evaluarse por la ley de los gases ideales a la temperatura y presión especificadas.

$$PV = nRT$$

$$c = \frac{n}{V} = \frac{P}{RT}$$

Para evaluar la constante de los gases,  $R$ , se utilizarán las condiciones estándar, donde  $1 \text{ lbmol}$  ocupa  $359 \text{ pie}^3$  a  $1 \text{ atm}$  y  $492^\circ R$ ,

$$R = \frac{PV}{nT} = \frac{(1 \text{ atm})(359 \text{ pie}^3)}{(1 \text{ lbmol})(492^\circ R)} = 0.73 \frac{(\text{atm})(\text{pie}^3)}{(\text{lbmol})(^\circ R)}$$

Para las condiciones de  $1 \text{ atm}$  y  $75^\circ F$  o  $535^\circ R$ ,

$$c = \frac{P}{RT} = \frac{1 \text{ atm}}{\left( 0.73 \frac{(\text{atm})(\text{pie}^3)}{(\text{lbmol})(^\circ R)} \right) (535^\circ R)} = 0.00256 \frac{\text{lbmol}}{\text{pie}^3}$$

En el apéndice J se encuentra que el coeficiente de difusión gaseosa del vapor de agua en aire a  $298^\circ K$  y  $1 \text{ atm}$  es  $0.260 \frac{\text{cm}^2}{s}$ . Este valor puede extrapolarse hasta la temperatura de  $75^\circ F$  o  $535^\circ R$  por la ecuación siguiente

$$(D_{AB})_{T_2} = (D_{AB})_{T_1} \left( \frac{T_1}{T_2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

Puesto que  $T_1 = 298^\circ K$  o  $535^\circ R$

$$D_{AB \text{ a } 75^\circ F} = 0.260 \left( \frac{535}{537} \right)^{\frac{3}{2}} = 0.259 \frac{cm^2}{s}$$

Mediante conversión de unidades

$$D_{AB} = \left( 0.259 \frac{cm^2}{s} \right) \left( 3.87 \frac{pie^2}{hr} \frac{cm^2}{s} \right) = 1 \frac{pie^2}{hr}$$

Los valores de la concentración pueden evaluarse en una gráfica de agua-humedad del aire.

A  $75^\circ F$ , la humedad saturada es  $0.0189 \frac{lbm H_2O}{lbm \text{ aire seco}}$  o

$$\left( 0.0189 \frac{lbm H_2O}{lbm \text{ aire seco}} \right) \left( \frac{lbmol \text{ de } H_2O}{18 lbm H_2O} \right) \left( \frac{29 lbm \text{ de aire}}{lbmol \text{ aire}} \right) = 0.0304 \frac{lbmol \text{ de } H_2O}{lbmol \text{ aire}}$$

y, si se convierte en fracción mol,

$$y_{A_1} = \frac{0.0304}{1.0304} = 0.0295$$

La humedad de la corriente de aire es

$$\left( 0.002 \frac{lbm \text{ de } H_2O}{lbm \text{ aire seco}} \right) \left( \frac{lbmol \text{ de } H_2O}{18 lbm H_2O} \right) \left( \frac{29 lbm \text{ de aire}}{lbmol \text{ aire}} \right) = 0.00322 \frac{lbmol \text{ de } H_2O}{lbmol \text{ aire}}$$

o

$$y_{A_2} = \frac{0.00322}{1.00322} = 0.00322$$

De acuerdo con esto

$$y_{A_1} - y_{A_2} = 0.0263$$

Para un sistema binario

$$y_{B_1} = 1 - y_{A_1} = 0.9705$$

y

$$y_{B_2} = 1 - y_{A_2} = 0.9968$$

Por la ecuación (5.25)

$$\frac{(y_{B_2} - y_{B_1})}{\ln \left( \frac{y_{B_2}}{y_{B_1}} \right)} = \frac{0.9968 - 0.9705}{\ln \left( \frac{0.9968}{0.9705} \right)} = 0.983$$

La trayectoria de difusión,  $(z_2 - z_1)$ , es igual a  $\frac{0.2 \text{ pulg}}{\left( \frac{12 \text{ pulg}}{pie} \right)} = 0.0167 \text{ pies}$ . Si estos valores se

sustituyen en la ecuación (5.26), se obtiene

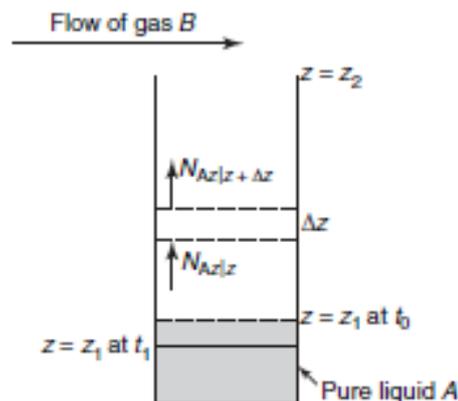
$$\vec{N}_{A,z} = \frac{cD_{AB}(y_{A1} - y_{A2})}{\left(\frac{y_{B2} - y_{B1}}{\ln\left(\frac{y_{B2}}{y_{B1}}\right)}\right)(z)} = \frac{\left(0.00256 \frac{\text{lbmol}}{\text{pie}^3}\right) \left(1 \frac{\text{pie}^2}{\text{hr}}\right) (0.0295 - 0.00322)}{\left(\frac{0.9968 - 0.9705}{\ln\left(\frac{0.9968}{0.9705}\right)}\right) \left(\frac{0.2 \text{ pulg}}{\left(\frac{12 \text{ pulg}}{\text{pie}}\right)} = 0.0167 \text{ pies}\right)} = 0.00410 \frac{\text{lbmol}}{\text{pie}^2 \text{hr}}$$

Puesto que tienen que evaporarse  $0.0114 \frac{\text{lbmol}}{\text{pie}^2 \text{hr}}$ , el tiempo que se requiere para la evaporación es

$$t = \frac{0.0114 \frac{\text{lbmol}}{\text{pie}^2 \text{hr}}}{0.00410 \frac{\text{lbmol}}{\text{pie}^2 \text{hr}}} = 2.78 \text{ hr}$$

### DIFUSION EN ESTADO PSEUDOESTACIONARIO A TRAVES DE UNA PELICULA DE GAS ESTANCADA.

En muchas operaciones de transferencia de masa, una de las fronteras puede moverse con el tiempo. Si la longitud de la trayectoria de difusión cambia en pequeña cantidad en un periodo de tiempo grande, puede utilizarse un modelo de difusión en estado pseudoestacionario. Cuando existe esta condición, la ecuación (5.28) describe el flujo en masa en la película de gas estancada. Se muestran dos niveles de la superficie, uno en el tiempo  $t_0$  y uno en el tiempo  $t_1$ . Si la diferencia en el nivel del líquido A en el intervalo de



*Figura 5.2 Celda de difusión de Arnold con una superficie líquida en movimiento (Welty, 2015)*

tiempo considerado solo es una pequeña fracción de la trayectoria de difusión total y  $t_1 - t_0$  es un periodo de tiempo relativamente largo, el flujo molar en la fase gaseosa puede evaluarse en cualquier instante de ese periodo por medio de (Welty, 2015, pág. 629)

$$\vec{N}_{A,z} = \frac{cD_{AB}(y_{A_1} - y_{A_2})}{\left(\frac{(y_{B_2} - y_{B_1})}{\ln\left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)}\right)(z)} \quad (5.26)$$

donde  $(z_2 - z_1)$  es igual a  $z$ , la longitud de la trayectoria de difusión en el tiempo  $t$ .

El flujo molar  $\vec{N}_{A,z}$  se relaciona con la cantidad de  $A$  que deja el líquido por medio de

$$\frac{\rho_{A,L}}{M_A} \left(\frac{dz}{dt}\right) = \vec{N}_{A,z} \quad (5.27)$$

donde  $\frac{\rho_{A,L}}{M_A}$  es la densidad molar de  $A$  en la fase líquida. En condiciones de estado pseudoestacionario, las ecuaciones (5.26) y (5.27) pueden combinarse para dar

$$\frac{\rho_{A,L}}{M_A} \left(\frac{dz}{dt}\right) = \frac{cD_{AB}(y_{A_1} - y_{A_2})}{\left(\frac{(y_{B_2} - y_{B_1})}{\ln\left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)}\right)(z)} \quad (5.28)$$

La ecuación (5.28) puede integrarse desde  $t = 0$  hasta  $t = t$  y desde  $z = z_0$  hasta  $z = z_1$  de la siguiente forma

$$\int_{z_1}^{z_2} z dz = \frac{cD_{AB}(y_{A_1} - y_{A_2})}{\left(\frac{(y_{B_2} - y_{B_1})}{\ln\left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)}\right)} \left(\frac{M_A}{\rho_{A,L}}\right) \int_{t=0}^t dt \quad (5.29)$$

Esto conduce a

$$t = \frac{\left(\frac{z_2^2 - z_1^2}{2}\right) (\rho_{A,L}) \left(\frac{(y_{B_2} - y_{B_1})}{\ln\left(\frac{y_{B_2}}{y_{B_1}}\right)}\right)}{cD_{AB}(y_{A_1} - y_{A_2})M_A} \quad (4.30)$$

### EJEMPLO 2 (Welty, 2015, pág. 631)

Para determinar la difusividad del cloro benceno en el aire se vaporiza el mismo isotérmicamente a  $332^\circ K$  en un tubo abierto  $3 \text{ mm}$  de diámetro parcialmente lleno del mismo. En dos experimentos sucesivos se obtuvieron los siguientes datos:

		Experimento 1	Experimento 2
Niveles de cloro benceno en el tubo	Inicial	4.1 cm	6.5 cm

(cm) contados desde la boca del mismo			
	Final	6.5 cm	7.6 cm
Duración del experimento (seg)		430000 seg	260000 seg

Calcular los valores de la difusividad del cloro benceno que resultan de estos 2 experimentos. Supuesta la insolubilidad del aire  $B$  en el clorobenceno  $A$ , se trata evidentemente de la difusión de este en el seno del aire que no se transfiere. Será aplicable la ecuación (5.17):

$$\vec{N}_{A,z} = \frac{\left(\frac{P}{RT}\right) D_{AB} (p_{A_1} - p_{A_2})}{\left(\frac{(p_{B_2} - p_{B_1})}{\ln\left(\frac{p_{B_2}}{p_{B_1}}\right)}\right) (z)}$$

Por otra parte, el flujo molar del clorobenceno vaporizado se puede expresar así

$$\frac{\rho_{A,L}}{M_A} \left(\frac{dz}{dt}\right) = \vec{N}_{A,z}$$

Siendo  $z$  el nivel del liquido en cada momento  $t$ .

Por tanto aplicando la ecuación (5.26) siempre entre la superficie interfásial clorobenceno-aire con presión parcial del primero  $p_{A_1}$ ; igual a su presión de vapor  $8.373 \frac{N}{m^2}$  y la boca del tubo barrida por la corriente de aire ( $p_{A_2} = 0$ ) y teniendo en cuenta la ecuación (5.18) se tendrá

$$\vec{N}_{A,z} = \frac{PD_{AB}}{RTZ} \ln\left(\frac{P - p_{A_2}}{P - p_{A_1}}\right)$$

$$\frac{p_{A,L}}{M_A} \left(\frac{dz}{dt}\right) = \frac{PD_{AB}}{RTZ} \ln\left(\frac{P - p_{A_2}}{P - p_{A_1}}\right)$$

$$\int_{z_1}^{z_2} z dz = \frac{PD_{AB}}{RT} \ln\left(\frac{P - p_{A_2}}{P - p_{A_1}}\right) \left(\frac{M_A}{p_{A,L}}\right) \int_0^t dt$$

$$\left(\frac{z_2^2 - z_1^2}{2}\right) = \frac{PD_{AB}}{RT} \ln\left(\frac{P - p_{A_2}}{P - p_{A_1}}\right) \left(\frac{M_A}{p_{A,L}}\right) t$$

$$D_{AB} = \frac{RT \left( \frac{z_2^2 - z_1^2}{2} \right)}{P \ln \left( \frac{P - p_{A_2}}{P - p_{A_1}} \right) \left( \frac{M_A}{p_{A,L}} \right) t}$$

Sustituyendo en la expresión obtenida

Datos

Experimento 1

$$\begin{aligned} R &= 8.2 \times 10^{-5} \frac{\text{atmm}^3}{\text{mol}^\circ\text{K}} & p_{A,L} &= 1100 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} & P &= 1 \text{ atm} \\ p_{A_1} &= 0.082 \text{ atm} & z_2 &= 0.065 \text{ m} & z_1 &= 0.041 \text{ m} \\ t &= 430000 \text{ seg} & M_A &= 0.1125 \frac{\text{Kg}}{\text{mol}} & &= 0 \end{aligned}$$

Sustitución

$$D_{AB} = \frac{RT \left( \frac{z_2^2 - z_1^2}{2} \right)}{P \ln \left( \frac{P - p_{A_2}}{P - p_{A_1}} \right) \left( \frac{M_A}{p_{A,L}} \right) t}$$

$$D_{AB} = \frac{\left( 8.2 \times 10^{-5} \frac{\text{atmm}^3}{\text{mol}^\circ\text{K}} \right) (332^\circ\text{K}) \left( \frac{(0.065\text{m})^2 - (0.041\text{m})^2}{2} \right)}{(1 \text{ atm}) \ln \left( \frac{1}{1 - 0.082} \right) (430000 \text{ seg}) \left( \frac{0.1125 \frac{\text{Kg}}{\text{mol}}}{1100 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}} \right)} = 9.2 \times 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$$

Experimento 2

Datos

$$\left[ \begin{array}{lll} R = 8.2 \times 10^{-5} \frac{\text{atmm}^3}{\text{mol}^\circ\text{K}} & p_{A,L} = 1100 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} & P = 1 \text{ atm} \\ p_{A_1} = 0.082 \text{ atm} & z_2 = 0.076 \text{ m} & z_1 = 0.065 \text{ m} \\ t = 260000 \text{ seg} & M_A = 0.1125 \frac{\text{Kg}}{\text{mol}} & 0 \end{array} \right]$$

Sustitución

$$D_{AB} = \frac{RT \left( \frac{z_2^2 - z_1^2}{2} \right)}{P \ln \left( \frac{P - p_{A_2}}{P - p_{A_1}} \right) \left( \frac{M_A}{p_{A,L}} \right) t}$$

$$D_{AB} = \frac{\left(8.2 \times 10^{-5} \frac{\text{atmm}^3}{\text{mol}^\circ\text{K}}\right) (332^\circ\text{K}) \left(\frac{(0.076\text{m})^2 - (0.065\text{m})^2}{2}\right)}{(1 \text{ atm}) \text{Ln}\left(\frac{1}{1 - 0.082}\right) (260000 \text{ seg}) \left(\frac{0.1125 \frac{\text{Kg}}{\text{mol}}}{1100 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}}\right)} = 9.27 \times 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$$

### CONTRADIFUSION EQUIMOLAR

Una situación física que se encuentra en la destilación de dos constituyentes cuyos calores latentes de vaporización molares son esencialmente iguales, estipula que el flujo de un componente gaseoso es igual a la del otro pero actúa en dirección opuesta; es decir,  $\vec{N}_{A,z} = -\vec{N}_{B,z}$ . Estableciendo las ecuaciones de continuidad para ambas especies (Welty, 2015, pág. 633)

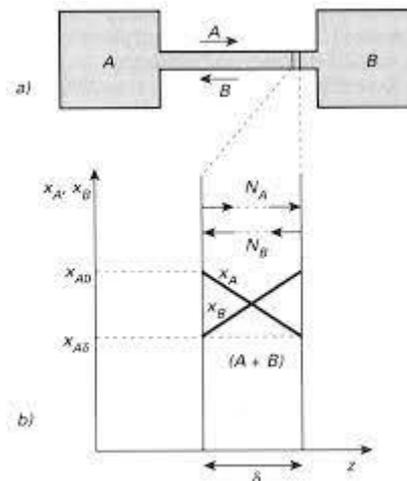


Figura 5.3 Fenómeno de contradifusión equimolar (Welty, 2015)

Es el fenómeno por el cual las moléculas de un gas B se distribuyen en sentido contrario en otro gas B dentro del proceso de difusión molecular. Se muestra un diagrama para dos gases, A y B, a presión total constante P, en dos cámaras grandes, conectadas por un tubo que sirve para que se verifique la difusión molecular en estado 16 estacionario. Una agitación en ambas cámaras mantiene uniformes sus concentraciones.

$$\vec{\nabla} * \vec{N}_A + \frac{\partial c_A}{\partial t} - R_A = 0 \quad (4.10)$$

$$\vec{\nabla} * \vec{N}_B + \frac{\partial c_B}{\partial t} - R_B = 0 \quad (4.11)$$

Para el caso de transferencia de masa en estado estacionario sin reacción química puede reducirse a

$$\nabla * \vec{N}_A = 0 \quad (5.31)$$

Para la transferencia en la dirección  $z$ , esta ecuación se reduce a

$$\frac{d\vec{N}_{A,z}}{dz} = 0 \quad (5.2)$$

Tal relación estipula que  $\vec{N}_{A,z}$  es constante a través de la trayectoria de transferencia. El flujo molar,  $\vec{N}_{A,z}$ , para un sistema binario a temperatura y presión constantes se describe por medio de

$$\vec{N}_{A,z} = -cD_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A(\vec{N}_{A,z} + \vec{N}_{B,z}) \quad (3.23)$$

Al sustituir la restricción,  $\vec{N}_{A,z} = -\vec{N}_{B,z}$  En la ecuación anterior se obtiene una ecuación que describe el flujo de  $A$  cuando existen condiciones de contradifusión equimolar.

$$\vec{N}_{A,z} = -cD_{AB} \frac{dy_A}{dz} \quad (5.32)$$

La ecuación (5.32) puede integrarse utilizando las condiciones de frontera

$$\begin{bmatrix} z = z_1 & c_A = c_{A1} \\ z = z_2 & c_A = c_{A2} \end{bmatrix}$$

Lo que da

$$\vec{N}_{A,z} \int_{z_1}^{z_2} dz = -D_{AB} \int_{c_{A1}}^{c_{A2}} dc_A \quad (5.33)$$

$$\vec{N}_{A,z} = \frac{D_{AB}(c_{A1} - c_{A2})}{z_2 - z_1} \quad (5.34)$$

Cuando se obedece la ley de los gases ideales, la concentración molar de  $A$  se relaciona con la presión parcial de  $A$  por

$$c_A = \frac{n_A}{V} = \frac{p_A}{RT}$$

Al sustituir esta expresión para  $c_A$  en la ecuación (5.2), se obtiene

$$\vec{N}_{A,z} = \frac{D_{AB}}{RT(z_2 - z_1)}(p_{A1} - p_{A2}) \quad (5.35)$$

Las ecuaciones (5.34) y (5.35) se conoce comúnmente como las ecuaciones para la contradifusión equimolar en estado estacionario. (Welty, 2015, pág. 634)

### EJEMPLO 3

Una torre de destilación simple está formada por un tubo vertical muy largo, el cual se alimenta desde abajo con un vapor binario de benceno y tolueno. Los vapores que salen en la parte superior del tubo se condensan y parte del producto regresa en forma de una película delgada líquida que fluye hacia abajo a través de la pared interior del tubo. En un plano en el tubo, el vapor contiene 85.3% en mol de benceno y la película de líquido adyacente contiene 70% en mol de benceno. La temperatura en este punto es 86.8°C. La resistencia difusional a la transferencia de masa entre la interface vapor líquido y las condiciones aparentes de la corriente de vapor se suponen equivalentes a la resistencia difusional de una película estancada de gas de 0.1 *pulg* de espesor. Puesto que el tubo es largo, dicha película relativamente delgada aparece como una película unidireccional, que no se encuentra afectada por la curvatura del tubo. Los calores molares latentes de vaporización del benceno y del tolueno son en esencia iguales, por lo tanto,  $\vec{N}_{Tolueno,z} = -\vec{N}_{Benceno,z}$ . Se desea calcular la rapidez de intercambio de benceno y tolueno entre vapor y líquido si la torre trabaja a presión atmosférica. (Welty, 2015, pág. 635)

La ecuación (5.22) es aplicable a la situación física que se presenta

$$\vec{N}_{A,z} = \frac{D_{AB}}{RT(z_2 - z_1)} (p_{A_1} - p_{A_2})$$

El coeficiente de difusión puede evaluarse por medio de la ecuación de Hirschfelder. A 86.8°C (359°K) y 1 atm de presión el valor del coeficiente es

$$D_{Benceno-Tolueno} = 5.06 \times 10^{-6} \frac{m^2}{s}$$

La presión parcial del tolueno, inmediatamente sobre la superficie del líquido, puede evaluarse por medio de la ley de Raoult,  $(p_{Tolueno})_{z_1} = (x_{Tolueno})_{z_1} P_{Tolueno}$ ; la presión de vapor del tolueno a 359°K es  $4.914 \times 10^4 Pa$  y la fracción mol de tolueno en el líquido es igual a  $(1 - 0.70)$ . De acuerdo con esto, se obtiene

$$(p_{Tolueno})_{z_1} = (0.30)(4.914 \times 10^4 Pa) = 1.474 \times 10^4 Pa$$

Por la ley de Dalton, la concentración de la corriente de vapor es

$$\begin{aligned} (p_{Tolueno})_{z_2} &= (y_{Tolueno})_{z_2} P = \{1 - (y_{Benceno})_{z_2}\} P = (0.147)(1.013 \times 10^4 Pa) \\ &= 1.487 \times 10^4 Pa \end{aligned}$$

La rapidez de transferencia de tolueno puede calcularse si se sustituyen los valores anteriores mencionados en el problema en la ecuación (5.22) (Welty, 2015, pág. 636)

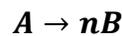
$$(N_{Tolueno})_z = \frac{D_{Tolueno-Benceno}}{RT(z_2 - z_1)} \{(p_{Tolueno})_1 - (p_{Tolueno})_2\}$$

$$= \frac{\left(5.06 \times 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{seg}}\right) (1.474 - 1.489) \text{Pa}}{\left(8.314 \frac{\text{Pam}^3}{\text{mol}^\circ\text{K}}\right) (359.8^\circ\text{K}) (2.54 \times 10^{-3} \text{m})} = -9.99 \times 10^{-5} \frac{\text{mol}}{\text{m}^2 \text{seg}}$$

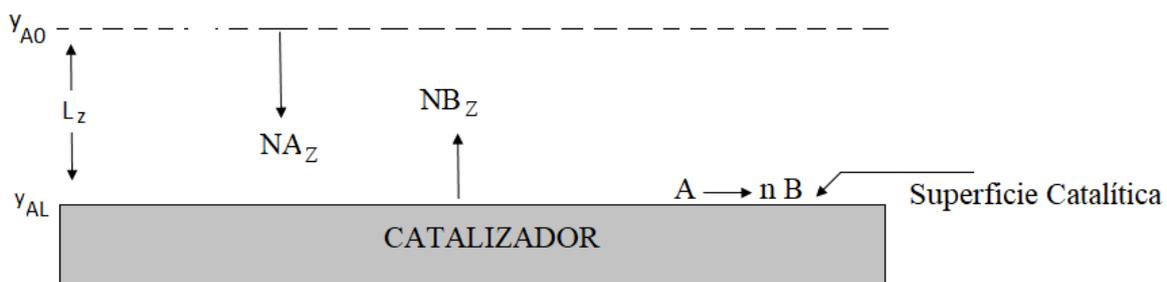
## CONTRADIFUSIÓN NO EQUIMOLAR

Sin lugar a dudas existe una condición en la que al menos dos especies están sujetas a un fenómeno de contra difusión, en la que el flux molar de cada una de ellas es diferente de cero, a este fenómeno se le conoce como contradifusión no equimolar, ejemplo de este fenómeno lo encontramos en la condensación o desintegración catalítica de especies, una característica de este fenómeno resulta ser la presencia de una reacción química, la que generalmente garantiza la producción de moles desigual de diferentes especies.

Para ejemplificar este caso de difusión equimolar, se considera la reacción de desintegración de la especie  $A$  sobre la superficie de un catalizador, en el cual se produce la siguiente reacción



La reacción es tan rápida que la producción de  $n$  moles de la especie  $B$  se llevan a cabo sobre la superficie del catalizador, pero estos moles se difunden hasta la zona de difusión como lo muestra la figura (5.4), en dirección contraria a como lo hace la especie  $B$ , por lo que este fenómeno se puede considerar como una contradifusión no equimolar.



*Figura 5.4 Fenómeno de contradifusión no equimolar*

## ECUACIONES DE CONTINUIDAD

Ecuación de continuidad para la especie  $A$

$$\left\{ \frac{\partial \vec{N}_{A,x}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{N}_{A,y}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} \right\} + \frac{\partial c_A}{\partial t} - R_A = 0 \quad (4.10)$$

Ecuación de continuidad para la especie  $B$

$$\left\{ \frac{\partial \vec{N}_{A,x}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{N}_{A,y}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} \right\} + \frac{\partial c_B}{\partial t} - R_B = 0 \quad (4.11)$$

Consideraciones:

- Fenómeno a régimen permanente.
- Fenómeno de difusión unidireccional.
- La especie  $A$  presenta difusión y reacción instantánea y la especie  $B$  solo presenta difusión, los términos de la ecuación  $R_A$  y  $R_B$  son iguales a cero debido a que en el desplazamiento de las especies no ocurre ninguna reacción química, la reacción química de la especie ocurre al momento de tocar la superficie del catalizador y produciéndose la especie  $B$ .

Las ecuaciones de continuidad de las distintas especies quedan reducidas de la siguiente manera

$$\frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} = 0 \quad (5.36)$$

y

$$\frac{\partial \vec{N}_{B,z}}{\partial z} = 0 \quad (5.37)$$

Las ecuaciones indican que los cambios del flux molar con respecto a un eje de coordenadas fijo se mantienen constante.

Estableciendo la ecuación general de transferencia de masa por difusión

$$\vec{N}_{A,z} = -cD_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A(\vec{N}_{A,z} + \vec{N}_{B,z}) \quad (3.23)$$

Ahora resulta importante observar que  $\vec{N}_{A,z} \neq 0$  y que como tal, la ecuación general de transferencia de masa no puede ser resuelta sin antes definir qué tan grande es  $\vec{N}_{B,z}$  de  $\vec{N}_{A,z}$  y esto lo proporciona la estequiometría de la reacción, para esto se debe plantear una relación de flujos

Reacción

$A \rightarrow nB$

No. de moles que aporta la Especie A

Despeje de la especie de interés

Relación entre ambas especies  $\rightarrow \frac{NA_z}{NB_z} = \frac{1}{-n} \Rightarrow NB_z = -nNA_z$

No. de moles que aporta la especie B

Especie B está en contradifusión

La ecuación general de transferencia de masa pasa a escribirse como

$$\vec{N}_{A,z} = -cD_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A(\vec{N}_{A,z} - n\vec{N}_{A,z}) \quad (5.38)$$

Se realiza el despeje

$$\vec{N}_{A,z} \{1 - (1 - n)y_A\} = -cD_{AB} \frac{dy_A}{dz} \quad (5.39)$$

$$\vec{N}_{A,z} = \frac{-cD_{AB} dy_A}{\{1 - (1 - n)y_A\} dz} \quad (5.40)$$

Obteniéndose una ecuación diferencial de separación de variables que puede resolverse por integración

$$\vec{N}_{A,z} \int_0^z dz = -cD_{AB} \int_{y_{A1}}^{y_{A2}} \frac{dy_A}{\{1 - (1 - n)y_A\}} \quad (5.41)$$

$$\alpha = (1 - n)$$

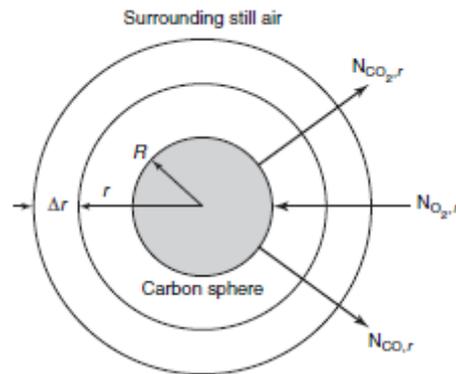
$$\vec{N}_{A,z} \int_0^z dz = -cD_{AB} \int_{y_{A1}}^{y_{A2}} \frac{dy_A}{\{1 - \alpha y_A\}} \quad (4.42)$$

Obteniendo como resultado

$$\vec{N}_{A,z} = \frac{cD_{AB}}{z\alpha} \ln \left( \frac{1 - \alpha y_{A2}}{1 - \alpha y_{A1}} \right) \quad (4.43)$$

## EJEMPLO 4

Para una nueva planta de energía se propone utilizar un reactor de carbón fluidizado. Si se trabaja a  $1145^{\circ}K$ , el proceso estará limitado por la difusión a contraflujo de oxígeno y de monóxido de carbono,  $CO$ , que se forma en la superficie de la partícula. Supóngase que el carbón es carbono puro con una densidad de  $1.28 \times 10^3 \frac{Kg}{m^3}$  y que la partícula es esférica con un diámetro inicial de  $1.50 \times 10^{-4} m$ . A una distancia de varios diámetros de la esfera hay aire ( $21\% O_2$  y  $79\% N_2$ ). Bajo las condiciones del proceso de combustión, la difusividad del



*Figura 5.5 Fenómeno de difusión a través de una película esférica. (Welty, 2015)*

oxígeno en la mezcla gaseosa puede evaluarse como  $1.3 \times 10^{-4} \frac{m^2}{seg}$  a la temperatura indicada. Si se supone que el proceso es en estado estacionario, calcular el tiempo necesario para reducir el diámetro del carbón a  $5 \times 10^{-5} m$ . (Welty, 2015, pág. 642)

$$W_{O_2} = 4\pi c D_{Oxigeno-Aire} R \ln \left( \frac{1 + (y_{O_2})_R}{1 + 0.21} \right)$$

La reacción en la superficie,  $2C + O_2 \rightarrow 2CO$  estipula que desaparecerán 2 átomos de carbono por cada mol de oxígeno que llegue a la superficie; de acuerdo con esto,

$$\begin{aligned} W_{Carbono,r} &= -2W_{Oxigeno,r} = 2 \left[ 4\pi c D_{Oxigeno-Aire} R \ln(1 + 0.21) \right] \\ &= 8\pi c D_{Oxigeno-Aire} R \ln(1 + 0.21) \end{aligned}$$

Si se escribe un balance total de carbono,  $\{entrada\} = \{Salida\} + \{Desaparicion\}$ , en términos de moles de carbono/tiempo, este estipula que

$$0 = 8\pi c D_{Oxigeno-Aire} R \ln(1 + 0.21) + \frac{p_c}{M_c} \left( \frac{dV}{dt} \right)$$

o

$$0 = 8\pi c D_{\text{Oxígeno-Aire}} R \ln(1 + 0.21) + \frac{p_c}{M_c} 4\pi R^2 \left(\frac{dR}{dt}\right)$$

Lo que se simplifica a

$$R \left(\frac{dR}{dt}\right) = \frac{4c D_{\text{Oxígeno-Aire}} \ln(1 + (0.21)) M_c}{p_c}$$

$$\int_{R_1}^{R_2} R dR = \frac{4c D_{\text{Oxígeno-Aire}} \ln(1 + (0.21)) M_c}{p_c} \int_0^t dt$$

Quedando de la siguiente manera

$$\left(\frac{R_2^2 - R_1^2}{2}\right) = \frac{4c D_{\text{Oxígeno-Aire}} \ln(1 + (0.21)) M_c}{p_c} (t)$$

$$t = \frac{\rho_c \left(\frac{R_2^2 - R_1^2}{2}\right)}{4c D_{\text{Oxígeno-Aire}} \ln(1 + (0.21)) M_c}$$

$$= \frac{\left(1280 \frac{Kg}{m^3}\right) \left(8.314 \frac{Pam^3}{mol^\circ K}\right) (1145^\circ K) \left\{\frac{(1.50 \times 10^{-4} m)^2 - (5 \times 10^{-5} m)^2}{2}\right\}}{4 \left(\frac{12g}{mol}\right) (1.013 \times 10^5 Pa) \left(1.3 \times 10^{-4} \frac{m^2}{seg}\right) \ln(1.21)} = 0.50 \text{ seg}$$

## PROBLEMAS (Welty, 2015, págs. 664-675)

**5.1** Una celda de Arnold en estado estacionario se utiliza para determinar la difusividad de metanol en aire a  $298^\circ K$  y  $101325 Pa$ . Si los resultados concuerdan con el valor que se registra en el **apéndice J.1** y la celda tiene una sección transversal de  $0.8 \text{ cm}^2$  y una trayectoria de difusión de  $16 \text{ cm}$ , ¿Cuánto metanol debe suministrarse a la celda para mantener un nivel de líquido constante? A  $298^\circ K$ , la presión de vapor del metanol es de  $1.7 \times 10^4 Pa$  y su peso específico es de  $0.7914$ .

**5.2** La celda de Arnold descrita en el problema 1 va a trabajar como una celda en estado pseudo estacionario. Si inicialmente el tubo se encuentra lleno hasta  $3 \text{ cm}$  del borde, ¿cuánto tardaría el nivel del metanol en descender a los siguientes valores?

a)  $4 \text{ cm}$

- b) 6 cm
- c) 12 cm

**5.3** La oxidación de un sólido S transcurre según una reacción que puede suponerse mono molecular respecto al oxígeno

$$r = k_s p_{O_2}$$

Se mide la velocidad de la misma, situando el sólido fundido en una probeta cilíndrica, en la que posteriormente solidifica a temperatura constante de  $473^\circ K$ , haciendo circular sobre la misma una corriente de oxígeno puro a  $2 atm$  y midiendo periódicamente el descenso de la superficie del sólido en contacto con el aire en la probeta. Se supone que la reacción solo tiene lugar en dicha superficie y que el caudal gaseoso es suficiente para mantener constante la concentración de oxígeno en el borde superior de la probeta.

Calcular el tiempo transcurrido en la experimentación de laboratorio cuando la distancia  $z$  entre el borde de la probeta y la superficie del sólido haya descendido de  $2 cm$  a  $10 cm$ .

**5.4** En la oxidación de muchos metales se forma sobre la superficie del metal una película de óxido. Para que la oxidación proceda, el oxígeno debe difundirse a través de la película de óxido, hasta la superficie del metal. El óxido que se produce tiene un volumen mayor que el metal que se consume; de acuerdo con esto, la trayectoria de difusión aumenta con el tiempo. Finalmente, la oxidación llega a estar controlada por la difusión y la concentración de oxígeno disuelto en la interface óxido-metal llega a ser esencialmente cero. Si puede suponerse que hay una condición de estado pseudoestacionario, desarrollar una expresión que indique la profundidad de la película en función del tiempo, la concentración del oxígeno en la superficie libre de la película y la difusividad del oxígeno a través del óxido.

**5.5** La difusividad del etanol a través del aire se determinó en una celda de evaporación de Arnold en estado estacionario. La celda que tiene un área de sección transversal de  $0.82 cm^2$ , se hizo funcionar a  $297^\circ K$  y  $1 atm$  de presión. El largo de la trayectoria de difusión es de  $15 cm$ .

Si se evaporaron  $0.0445 cm^3$  de etanol en 10 horas de operación en estado estacionario ¿Cuál será el valor de la difusividad del etanol en aire?

**5.6** En el caso de la difusión a través de un medio no difusor, el flujo de masa del componente A se describe por medio de la ecuación (5.17).

- a) ¿Cómo se modifica el flujo del componente A si se duplica la presión sobre el sistema?

- b) Para que el componente  $A$  se transfiera debe existir un gradiente de presión parcial y puesto que casi siempre la presión total para un sistema determinado permanece constante, también debe existir un gradiente de presión parcial para el componente  $B$ . Si esto es cierto, ¿Cómo es que el componente  $B$  puede considerarse un gas que no se difunde ( $N_{B,z} = 0$ )?

**5.7** Determinar el tiempo que tarda un mol de etanol en difundirse en una película estancada de agua, de  $4\text{ mm}$  de espesor, si la concentración de los planos de entrada y salida es  $100 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$  y  $0 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$ , respectivamente. Considérese que el área de transferencia de masa es de  $100\text{ cm}^2$  y que la temperatura en la película de agua es de  $283\text{ }^\circ\text{K}$ . Los resultados ayudaran a confirmar el concepto de profundidad de penetración.

**5.8** Se elimina amoníaco,  $\text{NH}_3$ , de forma selectiva de una mezcla de aire-amoníaco por absorción en agua. En este proceso en estado estacionario, el amoníaco se transfiere por difusión molecular a través de una película de gas estancada de  $2\text{ cm}$  de espesor y después a través de una película de agua estancada de  $1\text{ cm}$  de grueso. La concentración de amoníaco en el límite exterior de la película de gas es  $3.42\%$  en mol y la concentración en el límite inferior es esencialmente cero. La temperatura del sistema es de  $15^\circ\text{C}$  y la presión sobre el sistema es  $1\text{ atm}$ . La concentración en la interface entre las fases gaseosa y líquida está dada por los siguientes datos de equilibrio:

p NH3 (mmhg)	5	10	15	20	25	30
C NH3	6,1	11,9	20	32,1	53,6	84,8

Determinar la rapidez de difusión del amoníaco. A  $15\text{ }^\circ\text{C}$ , la difusividad del amoníaco en aire es  $0.215 \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$  y en agua líquida es  $1.77 \times 10^{-5} \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$ .

**5.9** En el tratamiento del agua residual, se hace burbujear cloro gaseoso a través del agua como agente desinfectante. Comparar el tiempo que requiere un mol de cloro en difundirse a través de una película de  $5\text{ mm}$  de grueso de:

- Aire a  $289^\circ\text{K}$  y
- Agua líquida a  $289^\circ\text{K}$

Cuando los niveles de concentración de cloro son  $0.04 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$  en un extremo de la película y  $0.01 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$  en el otro extremo. La presión sobre el sistema es  $1.012 \times 10^5 \text{ Pa}$ .

**5.10** La siguiente cápsula esférica ilustrada se utiliza para la liberación sostenida de medicamentos a largo plazo. Una solución líquida saturada que contiene el fármaco disuelto (solute  $A$ ) se encapsula dentro de una cubierta rígida similar a un gel. La solución saturada contiene un trozo de sólido  $A$ , que mantiene la concentración disuelta de  $A$  saturada dentro del núcleo líquido de la cápsula. El soluto  $A$  luego se difunde a través del revestimiento tipo gel (la fase de gel) hacia el entorno. Eventualmente, la fuente de  $A$  se agota, y la cantidad de soluto  $A$  dentro del núcleo líquido disminuye con el tiempo. Sin embargo, siempre que exista una masa de sólido  $A$  dentro del núcleo, la solución de origen está saturada en  $A$  y la concentración de  $c_A$  es constante. El coeficiente de difusión del soluto  $A$  en la fase de gel  $B$  es  $1.5 \times 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$ . Las concentraciones de soluto  $A$  en la fase de gel en los límites de la cáscara son:

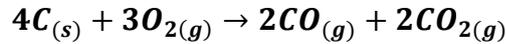
$$\left[ \begin{array}{ll} r = R_1 = 0.2 \text{ cm} & c_A = c_{As} = 0.01 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} \\ r = R_2 = 0.35 \text{ cm} & c_A = c_{A0} \end{array} \right]$$

- Indique las formas diferenciales de la ecuación de flujo y la ecuación diferencial para la transferencia de masa para este proceso de difusión.
- Desarrolle la ecuación integrada analítica final para determinar la tasa total de liberación de fármaco,  $W_A$ , de la cápsula en la condición en que la concentración de  $A$  dentro del núcleo líquido de la cápsula permanece constante.
- ¿Cuál es la velocidad máxima posible de liberación de fármaco de la cápsula, en unidades de gramo por litro de  $A$  por hora?

**5.11** En una cámara de combustión caliente se difunde oxígeno a través de aire hasta una superficie de carbón en donde reacciona para formar  $CO$  y  $CO_2$ . La fracción mol del oxígeno a  $z = 0$  es 0.21. La reacción en la superficie es instantánea. En la película gaseosa no se produce ninguna reacción.

Determinar la rapidez de difusión del oxígeno por hora a través de un metro cuadrado de área si:

- a) Solo se produce monóxido de carbono en la superficie del carbón
- b) Solo se produce dióxido de carbono en la superficie del carbón
- c) Se produce la siguiente reacción instantánea



**5.12** Una mezcla de etanol/vapor de agua se rectifica por contacto con una solución líquida alcohol/agua. El alcohol se transfiere desde la fase líquida hasta la fase vapor y el agua se transfiere en dirección opuesta. Ambos componentes se difunden a través de una película de gas de  $0.01 \text{ mm}$  de espesor. La temperatura es de  $368 \text{ }^\circ\text{K}$  y la presión es de  $1 \text{ atm}$ . A esa temperatura los calores latentes de vaporización del alcohol y del agua son  $1122 \times 10^6 \frac{\text{J}}{\text{Kg}}$  y  $2244 \times 10^6 \frac{\text{J}}{\text{Kg}}$ , respectivamente. La fracción mol del etanol es  $0.8$  en un lado de la película de gas y  $0.2$  en el otro lado de la película. Calcular la rapidez de difusión del etanol y del agua en  $\frac{\text{Kg}}{\text{seg}}$  a través de  $1 \text{ m}^2$  de área.

**5.13** En el siguiente diagrama se ilustra la difusión en fase gaseosa en la vecindad de una superficie catalítica. El componente  $A$  se difunde a través de una película estancada hasta la superficie catalítica donde instantáneamente se convierte en  $B$ . El producto  $B$  se difunde alejándose de la superficie catalítica, otra vez hasta la película estancada.

- a) Si la reacción sobre la superficie es  $A \rightarrow B$ , determinar una ecuación que predecirá el perfil de concentración; o sea,  $y_A$  a varios niveles de  $z$
- b) Si la reacción sobre la superficie es  $A \rightarrow 3B$ , Determinar una ecuación que predecirá el perfil de concentraciones.

**5.14** Una partícula de carbón pulverizado arde en aire a  $1145 \text{ }^\circ\text{K}$ . El proceso está limitado por la difusión en contraflujo de oxígeno al  $CO_2$  y  $CO$  que se forman en la superficie de la partícula. Se forma 2 veces más  $CO$  que al  $CO_2$ . Suponer que es carbono puro con una densidad de  $1280 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$  y que la partícula es esférica con un diámetro inicial  $0.015 \text{ cm}$ . A varios diámetros de distancia de la partícula existe 21% mol de oxígeno. Bajo las condiciones del proceso de combustión, puede suponerse que la difusividad del oxígeno en la mezcla de gases es de  $10^{-4} \frac{\text{m}^2}{\text{seg}}$

Determinar el tiempo que necesita para reducir el diámetro a  $0.005 \text{ cm}$ .

## CAPITULO 6

### ECUACIONES DIFERENCIALES MÁS COMUNES EN LA SOLUCIÓN DE PROBLEMAS DE TRANSFERENCIA DE MASA EN ESTADO ESTACIONARIO.

#### 6.1 TRANSFERENCIA DE MASA CON REACCIÓN QUÍMICA

##### INTRODUCCION

Muchas operaciones de difusión comprenden la difusión simultanea de especies moleculares y la desaparición o aparición de la especie a través de una reacción química que se lleva a cabo dentro de la fase de interés o en el límite de esta. Se distingue entre dos tipos de reacciones químicas, definiéndose la reacción que ocurre en forma uniforme en toda una fase como reacción homogénea y la reacción que se lleva a cabo en una región restringida dentro o en el límite de la fase como reacción heterogénea.

La reacción de aparición de la especie  $A$  en una reacción homogénea aparece en la ecuación general de transferencia de masa como el termino de generación,  $R_A$ .

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{N}_A + \frac{\partial c_A}{\partial t} - R_A = 0 \quad (4.1)$$

La rapidez de aparición de  $A$  por una reacción heterogénea no aparece en la ecuación diferencial general, puesto que la reacción no ocurre dentro del volumen de control; en vez de esto se introduce en el análisis como una condición de frontera.

##### DIFUSION CON REACCION QUIMICA HOMOGENEA

En la operación unitaria de absorción, uno de los constituyentes de una mezcla gaseosa se disuelve de forma preferente en el líquido con que hace contacto. Dependiendo de la naturaleza química de las moléculas que intervienen, la absorción puede o no implicar reacciones químicas. Cuando hay producción o desaparición del componente que se difunde la ecuación (4.1 del capítulo 4) puede utilizarse para analizar la transferencia de masa dentro de la fase líquida. El siguiente análisis ilustra la transferencia que se encuentra acompañada por

una reacción química homogénea. (Welty, 2015, pág. 643)

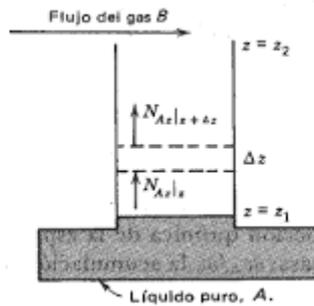


Figura 6.1 Difusión con reacción química homogénea (Welty, 2015)

Considere una capa del medio absorbente como lo ilustra la figura 6.1. En la superficie del líquido la composición de A es  $c_{A_0}$ . El grueso de la película,  $\delta$ , se define de manera que mas alla de esta película la concentración de A siempre es cero; es decir,  $c_{A_s} = 0$ . Si hay muy poco movimiento del fluido dentro de la película y si se supone que la concentración de A es muy pequeña, el flujo molar dentro de la película se describe como:

$$\vec{N}_{A,z} = -D_{AB} \frac{dc_A}{dz} \quad (6.1)$$

Para una transferencia unidireccional en estado estacionario, la ecuación diferencial general de transferencia de masa se reduce a

$$\frac{d\vec{N}_{A,z}}{dz} - R_A = 0 \quad (6.2)$$

La desaparición del componente A por una reacción de primer orden esta definida por

$$-R_A = k_1 c_A \quad (6.3)$$

donde  $k_1$  es la constante de rapidez de la reacción química. Al sustituir las ecuaciones (6.1) y (6.3) en la ecuacion (6.2) se obtiene una ecuacion diferencial de segundo orden que describe la transferencia simultanea de masa acompañada por una reacción química de primer orden

$$\frac{d}{dz} \left( -D_{AB} \frac{dc_A}{dz} \right) + k_1 c_A = 0 \quad (6.4)$$

quedando el coeficiente de difusión fuera de la derivación queda la ecuación de la siguiente manera

$$-D_{AB} \frac{d^2 c_A}{dz^2} + k_1 c_A = 0 \quad (6.5)$$

La ecuación diferencial de segundo orden se resuelve primeramente mediante el despeje del termino de aparición y desaparición del reactivo  $-R_A = k_1 c_A$ , quedando de la siguiente manera

$$-D_{AB} \frac{d^2 c_A}{dz^2} = -k_1 c_A \quad (6.6)$$

y posteriormente se tiene que despejar el coeficiente de difusión gaseosa quedando la ecuación de la siguiente manera

$$\frac{d^2 c_A}{dz^2} = \frac{k_1 c_A}{D_{AB}} \quad (6.7)$$

en el cual posteriormente realizaremos un cambio de variable con el cociente del término de la constante de reacción  $k_1$  y el coeficiente de difusividad gaseosa  $D_{AB}$ , utilizando una variable  $\alpha = \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}}$  tenemos

$$\frac{d^2 c_A}{dz^2} = \alpha c_A \quad (6.8)$$

El termino cuadrático por el cual la derivada se menciona que es de segundo orden se despejara utilizando una ecuación algebraica sustituta  $x^2 - a^2 = 0$ , la cual despejaremos para quedar de la siguiente manera  $x^2 = \pm a^2$  y así posteriormente es como se obtiene la ecuacion que queremos

$$\frac{dc_A}{dz} = \pm \alpha c_A \quad (6.9)$$

Posteriormente formaremos los 2 monomios independientes

$$\left\{ \left( \frac{dc_{A_1}}{dz} + \alpha c_{A_1} \right) \left( \frac{dc_{A_2}}{dz} - \alpha c_{A_2} \right) \right\} \quad (6.10)$$

Posteriormente resolveremos cada uno de los monomios de las ecuaciones diferenciales por el método lineal de ecuaciones diferenciales la cual deriva en el siguiente resultado general como se muestra en las literaturas sobre ecuaciones diferenciales en el tema de ecuaciones diferenciales de segundo orden, la solución es  $y = c_1 e^{-\int \psi(x) dx} + c_2 e^{-\int P(x) dx}$ , la cual aplicaremos

$$\left[ \begin{array}{l} \left( \frac{dc_{A_1}}{dz} - \alpha c_{A_1} = 0 \right) \\ \frac{dc_{A_1}}{c_{A_1}} = \alpha dz \\ \int \frac{dc_{A_1}}{c_{A_1}} = \alpha \int dz \end{array} \right] \left[ \begin{array}{l} Lnc_A = Lnc_1 + Lne^{\alpha z} \\ Lnc_A = Lnc_1 e^{\alpha z} \\ c_{A_1} = c_1 e^{\alpha z} \end{array} \right] \left[ \begin{array}{l} \left( \frac{dc_{A_2}}{dz} + \alpha c_{A_2} = 0 \right) \\ \frac{dc_{A_2}}{c_{A_2}} = -\alpha dz \\ \int \frac{dc_{A_2}}{c_{A_2}} = -\alpha \int dz \end{array} \right] \left[ \begin{array}{l} Lnc_A = Lnc_2 + Lne^{-\alpha z} \\ Lnc_A = Lnc_2 e^{-\alpha z} \\ c_{A_2} = c_2 e^{-\alpha z} \end{array} \right]$$

Obteniendo el resultado general en términos exponenciales y posteriormente transformándolo a funciones trigonométricas por medio de un cambio de variable en el cual existe una relación entre la función exponencial y las funciones trigonométricas como se muestra en las ecuaciones siguientes

$$c_A = c_{A_1} + c_{A_2} = c_1 e^{\alpha z} + c_2 e^{-\alpha z} \quad (6.11)$$

$$c_1 e^{\alpha z} = c_1 \cos \alpha z + c_1 \operatorname{sen} \alpha z$$

$$c_2 e^{-\alpha z} = c_2 \cos \alpha z - c_2 \operatorname{sen} \alpha z$$

$$c_A = c_1 e^{\alpha z} + c_2 e^{-\alpha z} = (c_1 + c_2) \cosh \alpha z + (c_1 - c_2) \operatorname{sen} \alpha z$$

$$c_A = c_1 \cosh \alpha z + c_2 \operatorname{sen} \alpha z \quad (6.12)$$

los límites en la evaluación para la obtención de las constantes de integración es la siguiente

$$\begin{cases} c_A = c_{A_0} & z = 0 \\ c_A = 0 & z = \delta \end{cases} \quad (6.13)$$

quedando la ecuación de la siguiente manera

$$c_A = c_{A_0} \cosh \alpha z - c_{A_0} \coth \alpha \delta \operatorname{sen} \alpha z \quad (6.14)$$

Derivando la ecuación con respecto de  $z$

$$\frac{dc_A}{dz} = \alpha c_{A_0} \operatorname{sen} \alpha z - \alpha c_{A_0} \coth \alpha \delta \cosh \alpha z \quad (6.15)$$

y evaluada en  $z = 0$ , tenemos

$$\left( \frac{dc_A}{dz} \right)_{z=0} = -\alpha c_{A_0} \coth \alpha \delta \cosh(0) = -\alpha c_{A_0} \coth \alpha \delta \quad (6.13)$$

$$\vec{N}_{A,z=0} = -D_{AB} \left( \frac{dc_A}{dz} \right)_{z=0} = \alpha c_{A_0} D_{AB} \coth \alpha \delta$$

Es interesante considerar la operación de transferencia de masa más simple en que interviene la absorción de  $A$  en el líquido  $B$  sin ninguna reacción química asociada. El flujo molar de  $A$  se determina fácilmente por integración de la ecuación (5.1) entre las dos condiciones de frontera, obteniéndose (Welty, 2015, pág. 645)

$$\vec{N}_{A,z} = \frac{D_{AB} c_A}{z} \quad (6.14)$$

Si se comparan las dos ecuaciones es evidente que el término  $\alpha \coth \alpha \delta$  muestra la influencia de la reacción química. Este término es una cantidad adimensional llamada el número de Hatta.

A medida que aumenta la rapidez de la reacción química, la constante de rapidez de reacción,  $k_1$ , se incrementa y el término de la cotangente hiperbólica,  $\coth \alpha \delta$ , se aproxima

al valor de 1.0. De acuerdo con lo anterior, la ecuación  $\{\vec{N}_{A,z=0} = \alpha c_{A_0} D_{AB} \coth \alpha \delta\}$  se reduce a

$$\vec{N}_{A,z} = D_{AB}^{\frac{1}{2}} k_1^{\frac{1}{2}} (c_{A_1}) \quad (6.15)$$

Al comparar esta ecuación con la ecuación del coeficiente de convección

$$\vec{N}_A = k_C (c_{A_s} - c_{A_0}) \quad (6.16)$$

## DIFUSION Y REACCION QUIMICA EN EL INTERIOR DE UN CATALIZADOR POROSO: “EL FACTOR DE EFICACIA

Considere concretamente una partícula esférica de un catalizador poroso de radio  $R$ . véase la imagen (6.2). esta partícula está en un reactor catalítico que es atravesado por una corriente gaseosa que contiene una sustancia reaccionante  $A$  y el producto de reacción  $B$ . En las inmediaciones de la partícula catalítica que estamos considerando se supone que la concentración de  $A$  es  $c_{A_s}$  moles por unidad de volumen. La especie  $A$  difunde a través del camino tortuoso existente en el catalizador y se convierte en  $B$  en la superficie del mismo véase la imagen (6.2).

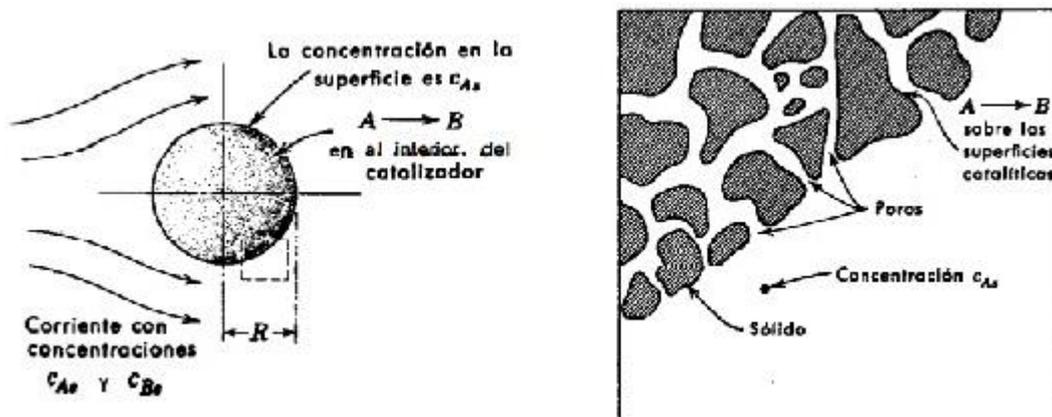


Figura 6.2 Partícula esférica de un catalizador poroso (Welty, 2015)

Comenzamos aplicando un balance de materia para la especie  $A$  en una envoltura esférica de espesor  $\Delta r$  situada en el interior de una partícula catalítica

$$(\vec{N}_{A,r})_r (4\pi r^2) - (\vec{N}_{A,r})_{r+\Delta r} 4\pi (r + \Delta r)^2 + R_A (4\pi r^2) \Delta r = 0 \quad (6.17)$$

Dividiendo por  $4\pi \Delta r$  y tomando  $\Delta r \rightarrow 0$ , se obtiene

$$\lim_{\Delta r \rightarrow 0} \frac{(r^2 \vec{N}_{A,r})_{r+\Delta r} - (r^2 \vec{N}_{A,r})_r}{\Delta r} = r^2 R_A \quad (6.18)$$

$$\frac{d}{dr} (r^2 \vec{N}_{A,r}) = r^2 R_A \quad (6.19)$$

Vamos a definir ahora una difusividad efectiva para la especie  $A$  en el medio poroso, mediante la expresión

$$\vec{N}_{A,r} = -D_{A,eff} \left( \frac{dc_A}{dr} \right) \quad (6.20)$$

En la que  $c_A$  es la concentración del gas  $A$  contenido entre los poros. La difusividad efectiva de  $D_{A,eff}$  puede medirse experimentalmente, y, en general, depende de la presión y la temperatura así como también la estructura de los poros del catalizador

Introduciendo la expresión anterior en la ecuación (6.21), para difusividad constante, se llega a

$$\frac{-D_{A,eff}}{r^2} \frac{d}{dr} \left\{ r^2 \left( \frac{dc_A}{dr} \right) \right\} = R_A \quad (6.21)$$

Consideremos ahora un caso en el que la especie  $A$  desaparece de acuerdo con una reacción química de primer orden en las superficies catalíticas que forman las paredes de los pasadizos tortuosos. Sea  $a$  el área de la superficie catalítica disponible por unidad de volumen (sólidos+huecos). Por lo tanto,  $R_A = -k_1 a c_A$  y la ecuación (6.21) se transforma en

$$\frac{-D_{A,eff}}{r^2} \frac{d}{dr} \left\{ r^2 \left( \frac{dc_A}{dr} \right) \right\} = -k_1 a c_A \quad (6.22)$$

Las ecuaciones diferenciales en la que aparece el operador  $\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left\{ r^2 \left( \frac{d}{dr} \right) \right\}$  pueden simplificarse frecuentemente mediante el cambio de variable del tipo  $\left( \frac{c_A}{c_{A,S}} \right) = \left( \frac{f(r)}{r} \right)$ . la ecuación correspondiente a  $f(r)$  es:

$$\frac{-D_{A,eff}}{r^2} \frac{d}{dr} \left\{ r^2 c_{A_s} \frac{d}{dr} \left( \frac{f(r)}{r} \right) \right\} = -k_1 a c_{A_s} \left\{ \frac{f(r)}{r} \right\} \quad (6.23)$$

Eliminando los términos  $\frac{c_{A_s}}{c_{A_s}} = 1$

$$\frac{-D_{A,eff}}{r^2} \frac{d}{dr} \left\{ r^2 \frac{d}{dr} \left( \frac{f(r)}{r} \right) \right\} = -k_1 a \left\{ \frac{f(r)}{r} \right\} \quad (6.24)$$

en la ecuación a (6.24) se empleó una regla de derivación conocida como la derivación de un cociente, una ecuación de la forma  $\frac{d}{dx} \left( \frac{u}{v} \right) = \frac{v \frac{d}{dx} u - u \frac{d}{dx} v}{v^2}$ , por medio de la cual la ecuación (5.24) queda de la siguiente manera

$$-\frac{D_{A,eff}}{r^2} \frac{d}{dr} \left\{ r \frac{d}{dr} f(r) - f(r) \right\} = -k_1 a \left\{ \frac{f(r)}{r} \right\} \quad (6.26)$$

volviendo a derivar nuevamente la ecuación (6.26), solo que ahora derivaremos un producto

$\frac{d}{dx}(uv) = u \frac{d}{dx}v + v \frac{d}{dx}u$  quedando de la siguiente manera

$$-\frac{D_{A,eff}}{r^2} \left\{ r \frac{d^2}{dr^2} f(r) \right\} = -k_1 a \left\{ \frac{f(r)}{r} \right\} \quad (5.27)$$

Eliminaremos los términos  $r$  y reacomodaremos los demás términos para obtener la ecuación diferencial de segundo orden que define el fenómeno en cuestión siguiendo los demás pasos a continuación

$$D_{A,eff} \left\{ \frac{d^2}{dr^2} f(r) \right\} = k_1 a f(r) \quad (6.28)$$

$$\frac{d^2 f(r)}{dr^2} = \left( \frac{k_1 a}{D_{A,eff}} \right) f(r) \quad (6.29)$$

A partir de este momento comenzaremos con la resolución de la ecuación (6.29) en la cual primeramente despejaremos el término cuadrático de la ecuación diferencial como se realizó con la ecuación (6.8) en coordenadas rectangulares, pero ahora en esta ocasión en términos esféricos como se obtiene a continuación

$$\frac{df(r)}{dr} = \pm \sqrt{\left( \frac{k_1 a}{D_{A,eff}} \right)} f(r) \quad (6.30)$$

Separándolos en monomios de la forma  $(x - a)(x + a)$

$$\left\{ \frac{df(r)}{dr} - \sqrt{\left( \frac{k_1 a}{D_{A,eff}} \right)} f(r) = 0 \right\} \left\{ \frac{df(r)}{dr} + \sqrt{\left( \frac{k_1 a}{D_{A,eff}} \right)} f(r) = 0 \right\} \quad (6.31)$$

la cual resolveremos como en el caso de una geometría rectangular empleando la solución general de toda ecuación diferencial homogénea de segundo orden

$$y = c_1 e^{-\int \psi(r) dr} + c_2 e^{-\int P(r) dr} \quad (6.32)$$

De igual manera que con el caso de la geometría rectangular de las ecuaciones (6.11) y (6.12) planteamos la solución de la ecuación (6.30) de la siguiente manera en términos del cambio de variable  $\frac{c_A}{c_{A_s}} = \frac{f(r)}{r}$  como se muestra en la ecuación (6.33)

$$f(r) = f(r)_1 + f(r)_2 = c_1 e^{\sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right)} r} + c_2 e^{-\sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right)} r} \quad (6.33)$$

y posteriormente como en las ecuaciones (6.11) y (6.12) realizamos los correspondientes cambios de variable de términos exponenciales a funciones trigonométricas

$$c_1 e^{\sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right)} r} = c_1 \cosh \sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right)} r + c_1 \sinh \sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right)} r \quad (6.34)$$

$$c_2 e^{-\sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right)} r} = c_2 \cosh \sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right)} r - c_2 \sinh \sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right)} r$$

y sustituyendo

$$f(r) = c_1 e^{\sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right)} r} + c_2 e^{-\sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right)} r} = (c_1 + c_2) \cosh \sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right)} r + (c_1 - c_2) \sinh \sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right)} r \quad (6.35)$$

y obteniendo como resultado general la siguiente ecuación

$$r \left( \frac{c_A}{c_{A_s}} \right) = c_1 \cosh \sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right)} r + c_2 \sinh \sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right)} r \quad (6.36)$$

Aplicando condiciones de frontera

$$\left[ \begin{array}{ll} c_A = c_{A_s} = c_{A_1} & r = R_1 \\ c_A = \infty = c_{A_2} & r = R_2 = 0 \end{array} \right]$$

$$R_1 \left( \frac{c_{A_1}}{c_{A_s}} \right) = c_1 \cosh \sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right)} R_1 + c_2 \sinh \sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right)} R_1 \quad (6.37)$$

$$R_2 \left( \frac{c_{A_2}}{c_{A_s}} \right) = c_1 \cosh \sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right)} R_2 + c_2 \sinh \sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right)} R_2 \quad (6.38)$$

Vemos que la primera constante es igual a cero

$$c_1 = 0$$

Sustituyendo en la ecuación (6.36), tenemos

$$R_1 \left( \frac{c_{A_1}}{c_{A_s}} \right) = c_2 \operatorname{senh} \sqrt{\left( \frac{k_1 a}{D_{A,eff}} \right)} R_1 \quad (6.39)$$

y así posteriormente obtenemos la siguiente constante

$$c_2 = \frac{R_1 c_{A_1}}{\operatorname{senh} \sqrt{\left( \frac{k_1 a}{D_{A,eff}} \right)} R_1}$$

Ya sustituidas las 2 constantes obtenemos la ecuación (6.40)

$$c_A = \frac{c_{A_1} R_1}{\operatorname{senh} \sqrt{\left( \frac{k_1 a}{D_{A,eff}} \right)} R_1} \left( \frac{\operatorname{senh} \sqrt{\left( \frac{k_1 a}{D_{A,eff}} \right)} r}{r} \right) \quad (6.40)$$

Posteriormente procedemos a la derivación de la ecuación (6.40) de la concentración  $c_A$  con respecto de  $r$  como se muestra a continuación

$$\frac{dc_A}{dr} = \frac{c_{A_1} R_1}{\operatorname{senh} \sqrt{\left( \frac{k_1 a}{D_{A,eff}} \right)} R_1} \frac{d}{dr} \left( \frac{\operatorname{senh} \sqrt{\left( \frac{k_1 a}{D_{A,eff}} \right)} r}{r} \right) \quad (6.41)$$

En la ecuación (6.41) procederemos a derivar el cociente de la siguiente manera

$$\frac{dc_A}{dr} = \frac{c_{A_1} R_1}{\operatorname{senh} \sqrt{\left( \frac{k_1 a}{D_{A,eff}} \right)} R_1} \left( \frac{r \frac{d}{dr} \operatorname{senh} \sqrt{\left( \frac{k_1 a}{D_{A,eff}} \right)} r - \operatorname{senh} \sqrt{\left( \frac{k_1 a}{D_{A,eff}} \right)} r \frac{dr}{dr}}{r^2} \right) \quad (6.42)$$

$$\left(\frac{dc_A}{dr}\right)_{r=R_1} = \frac{c_{A_1} R_1}{\sinh \sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right) R_1}} \left( \frac{R_1 \sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right)} \cosh \sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right) R_1} - \sinh \sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right) R_1}}{R_1^2} \right) \quad (6.43)$$

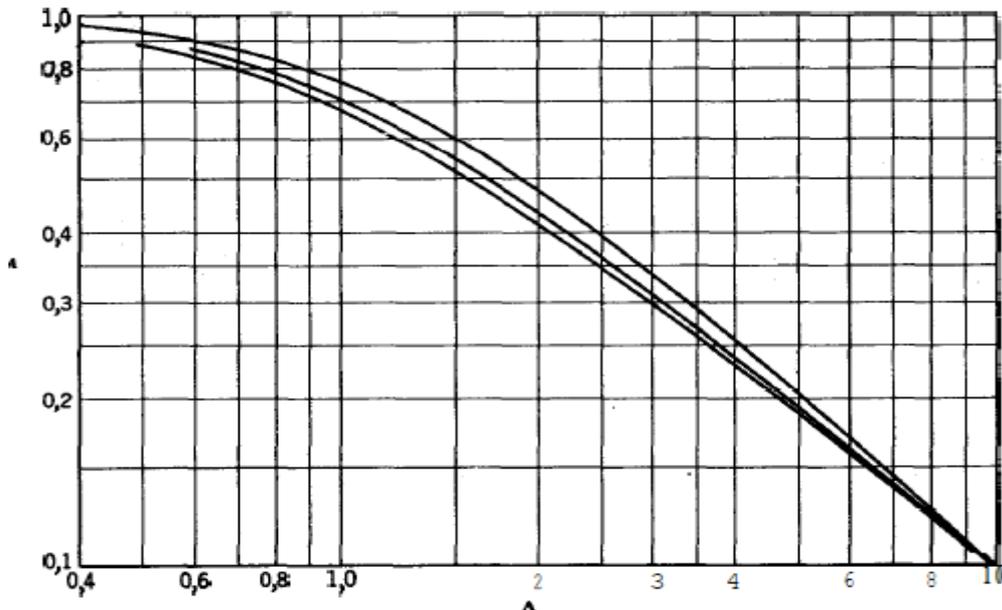
$$N_{A,r=R_1} = -D_{A,eff} \left(\frac{dc_A}{dr}\right)_{r=R_1} = D_{A,eff} c_{A_1} \left( \frac{1 - \sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right) R_1} \coth \sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right) R_1}}{R_1} \right) \quad (6.44)$$

$$W_{A,r=R_1} = -4\pi R_1^2 D_{A,eff} \left(\frac{dc_A}{dr}\right)_{r=R_1} = 4\pi R_1 D_{A,eff} c_{A_1} \left( 1 - \sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right) R_1} \coth \sqrt{\left(\frac{k_1 a}{D_{A,eff}}\right) R_1} \right) \quad (6.45)$$

Esta ecuación expresa la velocidad de conversión  $\frac{mol}{s}$  de  $A$  a  $B$  en una partícula catalítica de radio  $R$ , en función de los procesos difusionales que tienen lugar.

Si la superficie catalíticamente activa estuviese toda ella expuesta a la corriente de concentración  $c_{A_s}$ , la especie  $A$  no tendría que difundirse a través de los poros hasta un lugar de reacción, y la velocidad molar de conversión vendría dada por el producto de la superficie disponible por la velocidad de reacción superficial:

$$W_{A,0} = \frac{4}{3} \pi R_1^3 a R_A = -\frac{4}{3} \pi R_1^3 k_1 c_{A_s} \quad (6.46)$$



*Figura 6.3 Factores de eficacia para catalizadores sólidos porosos; la curva superior corresponde a partículas planas, la intermedia a larga a partículas cilíndricas, y la inferior a partículas esféricas. (Bird, 1992)*

Dividiendo la ecuación (6.40) por la ecuación (6.41), se obtiene

$$\varepsilon = \frac{3(\gamma \coth \gamma - 1)}{\gamma^2} \quad (6.47)$$

La relación entre el volumen y la superficie externa es  $\frac{R}{3}$ . Para partículas no esféricas vamos a definir  $R$ , correspondiente a la ecuación (6.42), de la siguiente forma

$$r_e = 3 \left( \frac{V_p}{A_p} \right) = \frac{3\pi R_1^2 L}{2\pi R_1 L + 2\pi R_1^2} = \frac{3R_1 L}{2(L + R_1)} \quad (6.48)$$

Siendo

$$W_{A,s} = 4\pi r_e D_{A,eff} c_{A_s} \left( 1 - \sqrt{\left( \frac{k_1 a}{D_{A,eff}} \right) r_e} \coth \sqrt{\left( \frac{k_1 a}{D_{A,eff}} \right) r_e} \right) \quad (6.49)$$

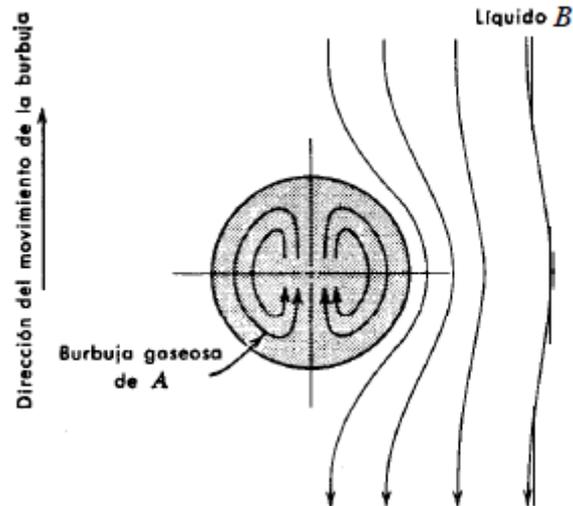


Figura 6.4 Absorción desde una burbuja gaseosa (Bird, 1992)

### EJEMPLO 1

En un reactor continuo de laboratorio termostatzado a  $373 \text{ }^\circ\text{K}$  se hace burbujear lentamente oxígeno puro a presión atmosférica en el seno de cumeno. En estas condiciones el oxígeno, poco soluble en el cumeno, al difundirse a través de la capa laminar del mismo alrededor de cada burbuja (que puede suponerse de 0.1 mm de espesor) reacciona irreversiblemente con él para formar hidroperóxido de cumeno y otros productos secundarios por una reacción química de pequeña tonalidad térmica, que puede suponerse de primer orden respecto al oxígeno y en la que cada molécula de este reacciona con otra de cumeno.

Calcúlese la velocidad con la que se consume el cumeno:

- suponiendo que el espesor de la capa laminar alrededor de cada burbuja es despreciable con respecto al radio de las mismas.
- Suponiendo que las burbujas tienen un radio medio de 1mm.

Datos

$$\left[ \begin{array}{ll} \alpha = 2143.5 \text{ m}^{-1} & D_{\text{Oxígeno-Cumeno}} = \left( 4.44 \times 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{seg}} \right) \\ c_{\text{Oxígeno}_1} = 875 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} & c_{\text{Oxígeno}_2} = 0 \\ a = 5 \frac{\text{m}^2}{\text{m}^3} & PM_{\text{cumeno}} = 128 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \end{array} \right]$$

Se plantea la ecuación de continuidad eliminando los términos que no se ocuparan en la resolución del problema

$$\left\{ \frac{\partial \vec{N}_{A,x}}{\partial x^2} + \frac{\partial \vec{N}_{A,y}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} \right\} + \frac{\partial c_A}{\partial t} - R_A = 0$$

Quedando de la siguiente manera

$$\frac{d\vec{N}_{Oxigeno,z}}{dz} - R_{Oxigeno} = 0$$

Despejando el coeficiente de difusividad

$$-D_{Oxigeno-Cumeno} \frac{d^2 c_{Oxigeno}}{dz^2} = -k_1 c_{Oxigeno}$$

$$\frac{d^2 c_{Oxigeno}}{dz^2} = \left( \frac{k_1}{D_{Oxigeno-Cumeno}} \right) c_{Oxigeno} = \alpha^2 c_{Oxigeno}$$

Se obtiene la ecuación diferencial que describe el proceso del cumeno - oxígeno

$$\frac{dc_{Oxigeno}}{dz} = \pm \alpha c_{Oxigeno}$$

Se obtiene la solución general a la ecuación diferencial de segundo orden

$$c_{Oxigeno} = c_1 e^{\alpha z} + c_2 e^{-\alpha z} = c_1 \cosh \alpha z + c_2 \sinh \alpha z$$

Se sustituyen las condiciones de frontera

$$\left[ \begin{array}{ll} c_A = c_{Oxigeno_1} & z = 0 \\ c_A = c_{Oxigeno_2} = 0 & z = \delta \end{array} \right]$$

Quedando la solución general de la siguiente forma

$$c_{Oxigeno} = c_{Oxigeno,1} \cosh \alpha z + (-c_{Oxigeno,1} \coth \alpha \delta) \sinh \alpha z$$

Derivando con respecto a "z"

$$\frac{dc_A}{dz} = \alpha c_{Oxigeno,1} \sinh \alpha z - \alpha c_{Oxigeno,1} \coth \alpha \delta \cosh \alpha z$$

Derivando con respecto a "z" en la superficie

$$\left( \frac{dc_{Oxigeno}}{dz} \right)_{z=0} = -\alpha c_{Oxigeno,1} \coth \alpha \delta$$

$$-D_{Oxigeno-Cumeno} \left( \frac{dc_{Oxigeno}}{dz} \right)_{z=0} = \alpha D_{Oxigeno-Cumeno} c_{Oxigeno,1} \coth \alpha \delta$$

$$\coth \alpha \delta = 1.0$$

$$N_{Oxigeno,z} = -D_{Oxigeno-Cumeno} \left( \frac{dc_{Oxigeno}}{dz} \right)_{z=0} = \alpha D_{Oxigeno-Cumeno} c_{Oxigeno,1} \coth \alpha \delta$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{k_1}{D_{\text{Oxígeno-Cumeno}}}}$$

$$\vec{N}_{\text{Oxígeno},z} = D_{\text{Oxígeno-Cumeno}} \sqrt{\frac{k_1}{D_{\text{Oxígeno-Cumeno}}}} (c_{\text{Oxígeno}_1} - c_{\text{Oxígeno}_2})$$

Sustituyendo los datos en la ecuación se obtiene así el resultado final

$$\vec{N}_{\text{Oxígeno},z} = \left( 4.44 \times 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{seg}} \right) (2143.5 \text{ m}^{-1}) \left( 875 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} - 0 \right) = 8.32 \times 10^{-3} \frac{\text{mol}}{\text{m}^2 \text{ s}}$$

b)

Se establece la ecuación de continuidad en coordenadas esféricas, eliminando de la ecuación los términos que no se ocuparan en la resolución del problema

$$\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \vec{N}_{A,r}) + \frac{1}{r \sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \varphi \vec{N}_{A,\theta}) + \frac{1}{r \sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} (\vec{N}_{A,\varphi}) \right\} + \frac{\partial c_A}{\partial t} - R_A = 0$$

Quedando de la siguiente manera

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \vec{N}_{A,r}) - R_A = 0$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \vec{N}_{\text{Oxígeno},r}) - R_{\text{Oxígeno}} = 0$$

Proponiendo una trayectoria lineal como lo sería con la ecuación de la línea recta  $y = mx + b$  pero en este caso en términos del radio ( $r$ ) y la concentración  $c_A$

$$y = r c_{\text{Oxígeno}} = r c_A = mx + b$$

$$\text{con } b = 0$$

Despejando

$$c_{\text{Oxígeno}} = \frac{y}{r}$$

se sustituye en la ecuación siguiente

$$\frac{-D_{\text{Oxígeno-cumeno}}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{dc_{\text{Oxígeno}}}{dr} \right) + k_1 c_{\text{Oxígeno}} = 0$$

$$\frac{-D_{\text{Oxígeno-cumeno}}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^2 \frac{d}{dr} \left( \frac{y}{r} \right) \right\} + k_1 c_{\text{Oxígeno}} = 0$$

y procedemos a derivar el cociente  $\frac{d}{dr} \left( \frac{y}{r} \right) = \frac{r \frac{dy}{dr} - y \frac{dr}{dr}}{r^2}$  obteniendo la siguiente ecuación

$$\frac{-D_{Oxigeno-cumeno}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r \frac{dy}{dr} - y \frac{dr}{dr} \right\} + k_1 c_{Oxigeno} = 0$$

Posteriormente procedemos a derivar la ecuación  $\frac{\partial}{\partial r} \left\{ r \frac{dy}{dr} - y \frac{dr}{dr} \right\}$  por medio de la regla del producto  $\frac{d}{dx} (uv) = (u) \frac{d}{dx} (v) + (v) \frac{d}{dx} (u)$ , quedando de la siguiente manera

$$\frac{-D_{Oxigeno-cumeno}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r \left( \frac{d^2 y}{dr^2} \right) + \frac{dy}{dr} \left( \frac{dr}{dr} \right) - \frac{dy}{dr} \right\} + k_1 c_{Oxigeno} = 0$$

Eliminando términos iguales en la derivación del producto anterior nos queda la ecuación diferencial de segundo orden que describe el fenómeno en cuestión

$$D_{Oxigeno-cumeno} \left( \frac{d^2 y}{dr^2} \right) = k_1 y$$

$$\left( \frac{d^2 y}{dr^2} \right) = \left( \frac{k_1}{D_{Oxigeno-cumeno}} \right) y$$

se realiza el cambio de variable por medio de la variable  $\alpha$  como se muestra en la siguiente ecuación

$$\left( \frac{d^2 y}{dr^2} \right) = \alpha^2 y$$

y se despeja el término cuadrático como se ha mostrado en párrafos anteriores

$$\frac{dy}{dr} = \pm \alpha y$$

$$\left( \frac{dy}{dr} - \alpha y = 0 \right) \left( \frac{dy}{dr} + \alpha y = 0 \right)$$

Obteniendo así la solución general a la ecuación de segundo orden

$$y = c_1 e^{\alpha r} + c_2 e^{-\alpha r}$$

$$r c_{Oxigeno} = c_1 e^{\alpha r} + c_2 e^{-\alpha r}$$

$$c_{Oxigeno} = \frac{c_1}{r} e^{\alpha r} + \frac{c_2}{r} e^{-\alpha r}$$

Condiciones de frontera

$$\left[ \begin{array}{ll} c_{Oxigeno} = c_{Oxigeno,1} & r = R_1 \\ \frac{dc_{Oxigeno}}{dr} = 0 & r = R_1 + l = R_2 \end{array} \right]$$

Obteniendo así la evaluación de las constantes de integración de la solución general

$$c_1 = \left\{ \frac{C_2(\alpha R_2 e^{-\alpha R_2} + e^{-\alpha R_2})}{(\alpha R_2 e^{\alpha R_2} - e^{\alpha R_2})} \right\}$$

y

$$c_2 = \frac{R_1 c_{Oxigeno,1}}{\left\{ \left[ \frac{(\alpha R_2 e^{-\alpha R_2} + e^{-\alpha R_2})}{(\alpha R_2 e^{\alpha R_2} - e^{\alpha R_2})} e^{\alpha R_1} \right] + e^{-\alpha R_1} \right\}}$$

Sustituyendo los datos

$$\left[ \begin{array}{ll} c_{Oxigeno_1} = 875 \frac{mol}{m^3} & \alpha = 2143.5 m^{-1} \\ R_1 = 1 \times 10^{-3} m & R_2 = 1.1 \times 10^{-3} m \\ D_{Oxigeno-Cumeno} = 4.44 \times 10^{-9} \frac{m^2}{seg} & 0 \end{array} \right]$$

Obteniendo el valor de las constantes de integración

$$\left[ \begin{array}{l} c_1 = 6.32 \times 10^{-2} \frac{mol}{m^2} \\ c_2 = 2.8586 \frac{mol}{m^2} \end{array} \right]$$

Se deriva la ecuación general con respecto a "r" ocupando la regla del cociente de derivación mostrada en párrafos anteriores

$$\frac{dc_{Oxigeno}}{dr} = (6.32 \times 10^{-2}) \frac{d}{dr} \left( \frac{e^{\alpha r}}{r} \right) + (2.8586) \frac{d}{dr} \left( \frac{e^{-\alpha r}}{r} \right)$$

Quedando de la siguiente manera y sustituyendo los valores de las constantes obtenidas anteriormente

$$\frac{dc_{Oxigeno}}{dr} = (6.32 \times 10^{-2}) \left( \frac{\alpha r e^{\alpha r} - e^{\alpha r}}{r^2} \right) - (2.8586) \left( \frac{\alpha r e^{-\alpha r} + e^{-\alpha r}}{r^2} \right)$$

$$\left( \frac{dc_{Oxigeno}}{dr} \right)_{r=R_1} = (6.32 \times 10^{-2}) \left( \frac{\alpha R_1 e^{\alpha R_1} - e^{\alpha R_1}}{R_1^2} \right) - (2.8586) \left( \frac{\alpha R_1 e^{-\alpha R_1} + e^{-\alpha R_1}}{R_1^2} \right)$$

Sustituyendo datos

$$\left(\frac{dc_{Oxigeno}}{dr}\right)_{r=R_1}$$

$$= (6.32 \times 10^{-2}) \left( \frac{(2143.5 m^{-1})(1 \times 10^{-3} m) e^{(2143.5 m^{-1})(1 \times 10^{-3} m)} - e^{(2143.5 m^{-1})(1 \times 10^{-3} m)}}{(1 \times 10^{-3} m)^2} \right)$$

$$- (2.8586) \left( \frac{(2143.5 m^{-1})(1 \times 10^{-3} m) e^{-(2143.5 m^{-1})(1 \times 10^{-3} m)} + e^{-(2143.5 m^{-1})(1 \times 10^{-3} m)}}{(1 \times 10^{-3} m)^2} \right)$$

$$\left(\frac{dc_{Oxigeno}}{dr}\right)_{r=R_1} = -437152.4 \frac{mol}{m^4}$$

Sustituyendo los datos en la ecuación obtenemos el resultado

$$N_{Oxigeno, r=R} = -D_{Oxigeno-Cumeno} \left(\frac{dc_{Oxigeno}}{dr}\right)_{r=R_1} = \left(4.44 \times 10^{-9} \frac{m^2}{seg}\right) \left(437152.4 \frac{mol}{m^4}\right)$$

$$= (1.94 \times 10^{-3}) \frac{mol}{m^2 s}$$

## EJEMPLO 2

En un reactor de lecho fijo de zeolita de elevada relación Si/Al que ocupa un volumen de 1L, con una porosidad de lecho  $\varepsilon = 0.45$ , se llevo a cabo la conversión de butanol a butiraldehido a 1 atm de presión, tres temperaturas y con una relación de recirculación de los productos gaseosos muy elevada, obteniéndose los siguientes resultados:

Butanol Convertido	Temperatura
0.000168	673
0.0000498	623
0.0000105	573

Aceptando que el butanol se deshidrogena a butiraldehido según una reacción de primer orden, calcular la energía de activación de la reacción y la variación del factor de eficacia del catalizador con la temperatura.

Datos

$$\text{Catalizador de Zeolita} \left\{ \begin{array}{l} \text{Particulas Esfericas: } R_1 = 1 \text{ mm} \\ \text{Porosidad} = 0.25 \end{array} \right\}$$

**Coefficiente de difusión efectivo del butanol en las partículas:**  $5.3 \times 10^{-9} \frac{m^2}{s}$

**Concentración del butanol en el gas de entrada al reactor:**  $(8.7 \times 10^{-5} \frac{g}{cm^3})$

Considérese que la resistencia a la transferencia de materia a través de la capa laminar alrededor de cada partícula es despreciable.

**Solución:**

Por tratarse de un reactor de lecho fijo con una elevada relación de recirculación de gas producto de reacción podemos considerarlo como un reactor de mezcla completa, con una concentración de butanol igual a la de entrada en la corriente de recirculación. Siendo despreciable la resistencia a la transferencia de materia externa, esta concentración será igual a la de la superficie de las partículas  $c_{A_1}$ .

El número total de partículas será:

$$n = (1 - \epsilon) \left( \frac{V}{\frac{4}{3}\pi R_1^3} \right) = (1 - 0.45) \left( \frac{1 \times 10^{-3} m^3}{\frac{4}{3}\pi (1 \times 10^{-3} m)^3} \right) = 131303 \text{ partículas}$$

Con lo cual tenemos que el butanol convertido por partícula de catalizador y unidad de tiempo, será:

(W_A)_(r=R_1) g/s Particula	Temperatura
1.28E-09	673
3.79E-10	623
7.99E-11	573

Por consiguiente, aplicando las ecuaciones el resultado obtenido para cada temperatura será:

Se establece la ecuación de continuidad en coordenadas esféricas, eliminando de la ecuación los términos que no se ocuparan en la resolución del problema

$$\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \vec{N}_{A,r}) + \frac{1}{r \sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \vec{N}_{A,\theta}) + \frac{1}{r \sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} (\vec{N}_{A,\varphi}) \right\} + \frac{\partial c_A}{\partial t} - R_A = 0$$

Quedando solo la ecuación en términos del radio

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \vec{N}_{A,r}) - R_A = 0$$

Se establece la ecuación de la ley de Fick

$$\vec{N}_{A,r} = -cD_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A(\vec{N}_{A,r} + \vec{N}_{A,r})$$

Se realiza la igualdad

$$\vec{N}_{A,r} = -\vec{N}_{B,r}$$

Quedando de la siguiente manera

$$\vec{N}_{A,r} = -cD_{AB} \frac{dy_A}{dr} = -D_{AB} \frac{dc_A}{dr}$$

Y se sustituye en la ecuación resultante en términos del radio

$$\left[ \begin{array}{l} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^2 \left( -D_{AB} \frac{dc_A}{dr} \right) \right\} - R_A = 0 \\ \frac{-D_{AB}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^2 \left( \frac{dc_A}{dr} \right) \right\} = -k_1 c_A \end{array} \right]$$

Proponiendo el siguiente cambio de variable

$$\left[ \begin{array}{l} y = r c_A \\ c_A = \frac{y}{r} \end{array} \right]$$

Sustituyendo en la ecuación de continuidad

$$\left[ \begin{array}{l} \frac{D_{AB}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^2 \left( \frac{d}{dr} \left( \frac{y}{r} \right) \right) \right\} = k_1 \frac{y}{r} \\ \frac{D_{AB}}{r^2} \left( r \frac{d^2 y}{dr^2} \right) = k_1 \frac{y}{r} \\ D_{AB} \frac{d^2 y}{dr^2} = k_1 y \end{array} \right]$$

Despejando el coeficiente de difusividad

$$\frac{d^2 y}{dr^2} = \frac{k_1}{D_{AB}} y$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}}$$

Sustituyendo en la ecuación anterior

$$\frac{d^2 y}{dr^2} = \alpha^2 y$$

Descomponiendo el polinomio se obtienen dos ecuaciones diferenciales lineales

$$\frac{dy}{dr} = \pm \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} y$$

$$\left[ \begin{array}{l} Lny_1 = Lnc_1 e^{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} r} \quad y_1 = c_1 e^{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} r} \\ Lny_2 = Lnc_2 e^{-\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} r} \quad y_2 = c_2 e^{-\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} r} \end{array} \right]$$

Obteniendo así la solución general a la ecuación de segundo orden

$$y = c_1 e^{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} r} + c_2 e^{-\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} r}$$

$$rc_A = c_1 e^{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} r} + c_2 e^{-\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} r}$$

$$c_A = \frac{c_1}{r} e^{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} r} + \frac{c_2}{r} e^{-\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} r}$$

En términos de funciones hiperbólicas

$$c_A = \frac{c_1}{r} \cosh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} r + \frac{c_2}{r} \sinh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} r$$

Planteando las condiciones de frontera

$$\begin{array}{ll} c_A = c_{A_1} & r = R_1 \\ c_A = c_{A_2} = 0 & r = R_2 = 0 \end{array}$$

Primera condición

$$c_{A_1} = \frac{c_1}{R_1} \cosh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1 + \frac{c_2}{R_1} \sinh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1$$

Segunda condición

$$0 = \frac{c_1}{0} \cosh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} (0) + \frac{c_2}{0} \sinh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} (0)$$

Obteniendo la primera constante

$$c_1 = 0$$

$$c_{A_1} = \frac{c_2}{R_1} \sinh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1$$

Despejando

$$c_2 = \frac{c_{A_1} R_1}{\sinh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1}$$

Sustituyendo en la solución general

$$c_A = \frac{c_{A_1} R_1}{\sinh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1} \left( \frac{\sinh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} r}{r} \right)$$

Derivando la ecuación con respecto a "r"

$$\frac{dc_A}{dr} = \frac{c_{A_1} R_1}{\sinh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1} \frac{d}{dr} \left( \frac{\sinh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} r}{r} \right)$$

$$\frac{dc_A}{dr} = \frac{c_{A_1} R_1}{\sinh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1} \left( \frac{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} r \cosh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} r - \sinh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} r}{r^2} \right)$$

$$\left(\frac{dc_A}{dr}\right)_{r=R_1} = \frac{c_{A_1} R_1}{\sinh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1} \left( \frac{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1 \cosh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1 - \sinh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1}{R_1^2} \right)$$

Multiplicando  $R_1$  por el paréntesis

$$\left(\frac{dc_A}{dr}\right)_{r=R_1} = \frac{c_{A_1}}{\sinh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1} \left( \frac{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1 \cosh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1 - \sinh \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1}{R_1} \right)$$

Realizando las identidades trigonométricas

$$\left(\frac{dc_A}{dr}\right)_{r=R_1} = c_{A_1} \left( \frac{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1 \coth \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1 - 1}{R_1} \right) = c_{A_1} \left( \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} \coth \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1 - \frac{1}{R_1} \right)$$

Multiplicando por la difusividad

$$\vec{N}_{A,r=R_1} = -D_{AB} c_{A_1} \left( \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} \coth \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1 - \frac{1}{R_1} \right)$$

Multiplicando por el área que corresponde al área de una esfera

$$W_{A,r=R_1} = 4\pi R_1^2 D_{AB} c_{A_1} \left( \frac{1}{R_1} - \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} \coth \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1 \right)$$

Multiplicando el paréntesis por  $R_1$

$$W_{A,r=R_1} = 4\pi R_1 D_{AB} c_{A_1} \left( 1 - \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1 \coth \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1 \right)$$

Despejando  $k_1$

$$\frac{W_{A,r=R_1}}{4\pi R_1 D_{AB} c_{A_1}} = \left( 1 - \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1 \coth \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1 \right)$$

$$\frac{\left(1 - \frac{W_{A,r=R_1}}{4\pi R_1 D_{AB} c_{A_1}}\right)}{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}} R_1}} = \coth \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}} R_1}$$

$$\operatorname{arccoth} \left\{ \frac{\left(1 - \frac{W_{A,r=R_1}}{4\pi R_1 D_{AB} c_{A_1}}\right)}{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}} R_1}} \right\} = \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}} R_1}$$

$$D_{AB} \left[ \frac{1}{R_1} \operatorname{arccoth} \left\{ \frac{\left(1 - \frac{W_{A,r=R_1}}{4\pi R_1 D_{AB} c_{A_1}}\right)}{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}} R_1}} \right\} \right]^2 = k_1$$

Primera iteración

$$W_{A,r=R_1} = 1.7255 \times 10^{-11} \frac{\text{mol}}{(\text{partícula})(\text{s})}$$

$$T = 673^\circ \text{K}$$

$$\left(5.3 \times 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}\right) \left[ \frac{1}{(1 \times 10^{-3} \text{m})} \operatorname{arccoth} \left\{ \frac{\left(1 - \frac{1.7255 \times 10^{-11} \frac{\text{mol}}{(\text{partícula})(\text{s})}}{4\pi(1 \times 10^{-3} \text{m}) \left(5.3 \times 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}\right) \left(1.1737 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}\right)}\right)}{\sqrt{\frac{k_1}{(5.3 \times 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{s}})} (1 \times 10^{-3} \text{m})}} \right\} \right]^2 = k_1$$

$$k_1 = 3.1242 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$$

Segunda iteración

$$W_{A,r=R_1} = 5.1132 \times 10^{-12} \frac{\text{mol}}{(\text{partícula})(\text{s})}$$

$$\left(5.3 \times 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}\right) \left[ \frac{1}{(1 \times 10^{-3} \text{m})} \operatorname{arccoth} \left\{ \frac{\left(1 - \frac{5.1132 \times 10^{-12} \frac{\text{mol}}{(\text{partícula})(\text{s})}}{4\pi(1 \times 10^{-3} \text{m}) \left(5.3 \times 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}\right) \left(1.1737 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}\right)}\right)}{\sqrt{\frac{k_1}{(5.3 \times 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{s}})} (1 \times 10^{-3} \text{m})}} \right\} \right]^2 = k_1$$

$$k_1 = 3.53 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$$

### Tercera iteración

$$W_{A,r=R_1} = 1.077 \times 10^{-12} \frac{\text{mol}}{(\text{particula})(s)}$$

$$\left( 5.3 \times 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{s} \right) \left[ \frac{1}{(1 \times 10^{-3} \text{m})} \operatorname{arccoth} \left( \frac{1 - \frac{1.077 \times 10^{-12} \frac{\text{mol}}{(\text{particula})(s)}}{4\pi(1 \times 10^{-3} \text{m}) \left( 5.3 \times 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{s} \right) \left( 1.1737 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} \right)}}{\sqrt{\frac{k_1}{\left( 5.3 \times 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{s} \right)} (1 \times 10^{-3} \text{m})}} \right) \right]^2 = k_1$$

$k_1$ (1/s)	T (°K)
0.0031242	673
0.00353	623
0.0036512	573

$$k_1 = 3.6512 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$$

$$k_1 = k_0 e^{-\frac{E_a}{RT}} = 3.4351 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$$

$$R = 1.987 \frac{\text{cal}}{\text{mol}^\circ\text{K}}$$

$$T = 623^\circ\text{K}$$

$$k_0 = 172941.08 \text{ s}^{-1}$$

$$E_a = -RT \ln \left( \frac{k_1}{k_0} \right) = - \left( 1.987 \frac{\text{cal}}{\text{mol}^\circ\text{K}} \right) (623^\circ\text{K}) \ln \left( \frac{3.4351 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}}{172941.08 \text{ s}^{-1}} \right) = 21955.28 \text{ s}^{-1}$$

$$k_1 = k_0 e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

$$W_{A,r=R_1} = 4\pi R_1 D_{AB} c_{A_1} \left( 1 - \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1 \operatorname{coth} \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} R_1 \right)$$

$$W_{A,T} = -\frac{4}{3} \pi R_1^3 k_1 n c_{A_1}$$

$$\mu = \frac{n(W_{A,r=r_e})}{n(W_{A,T})} = \frac{4\pi r_e D_{AB} c_{A_1} (1 - \gamma \operatorname{coth} \gamma)}{-\frac{4}{3} \pi R_1^3 k_1 c_{A_1}}$$

Finalmente, para obtener la ecuación del factor de eficacia

$$\mu = \frac{n(W_{A,r=r_e})}{n(W_{A,T})} = \frac{4\pi r_e D_{AB} c_{A_1} (1 - \gamma \coth \gamma)}{-\frac{4}{3} \pi R_1^3 k_1 c_{A_1}} = \frac{3(\gamma \coth \gamma - 1)}{\gamma^2}$$

Obteniéndose los valores del factor de eficacia

Eficacia	Temperatura
0.837	673
0.945	623
0.989	573

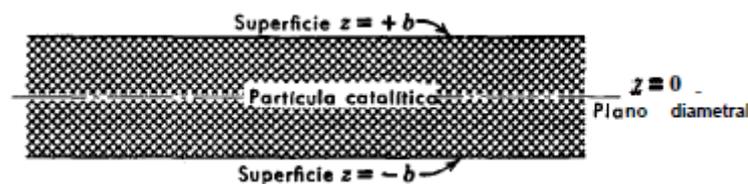
Observándose que el factor de eficacia aumenta al disminuir la velocidad de reacción, al hacerse la etapa de reacción química más lenta que la difusión en el interior de la partícula.

## PROBLEMAS

**6.1** El compuesto  $A$  se convierte en el compuesto  $B$  en los “sitios activos” dentro de una partícula porosa de catalizador que se fabrica en forma de discos delgados; el área superficial del borde de los discos es pequeña en comparación con la de las dos caras circulares. La rapidez de desaparición de  $A$  se relaciona con la concentración de  $A$  dentro del catalizador por la expresión

$$R_A = k_1 a c_A$$

donde  $a$  es la superficie catalítica disponible por unidad de volumen del catalizador.

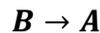


En términos de un coeficiente de difusión efectivo,  $D_{A,eff}$ , la concentración de  $A$  sobre la superficie,  $c_{A_s}$ , la constante de rapidez de reacción,  $k_1 a$ , y una mitad del espesor de los discos,  $L$ , desarrollar una expresión para

- El perfil de concentraciones dentro del catalizador;
- El flujo molar en la superficie  $z = \pm L$ .

**6.2** Reconsiderar el problema anterior para un catalizador de radio  $R$ .

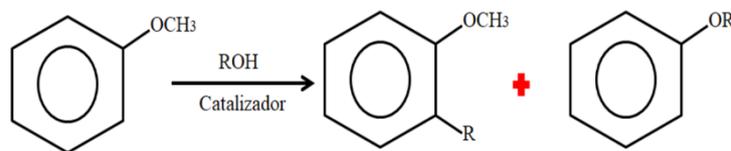
**6.3** El siguiente diagrama muestra la difusión en fase gaseosa en la vecindad de una superficie catalítica. El componente  $A$  se difunde a través de una película estancada que contiene solo  $A$  y  $B$ . Al alcanzar la superficie catalítica, instantáneamente se convierte en la especie  $A$  por la reacción  $A \rightarrow B$ . Cuando  $B$  se difunde nuevo hacia la película estancada, comienza a descomponerse por la reacción de primer orden:



La rapidez de formación del componente  $A$  dentro de la película es igual a  $R_A = k_1 y_B$  moles de  $A$  producidas/(tiempo)(volumen), donde  $y_A$  es la concentración de  $B$  expresada en fracciones mol.

Determinar la rapidez con la que  $A$  entra a la película de gas si este en un proceso en estado estacionario.

**6.4** En un reactor de berty, que puede suponerse de mezcla completa, de  $300 \text{ cm}^3$  de volumen, se transforma en anisol (metil-fenil-eter) en p-cresol a  $723^\circ\text{K}$  y  $1 \text{ atm}$  de presión sobre un catalizador de fosfato de aluminio.



Suponiendo que la transformación se desarrolla según una reacción de primer, calcular la velocidad de desaparición del anisol y el factor de eficacia del catalizador.

Datos

- Catalizador de fosfato de aluminio  $AlPO_4$ : partículas cilíndricas de 1.6 mm de radio y 3 mm de altura, con una porosidad  $\alpha = 0.2$
- Porosidad del lecho catalítico: 0.6
- Difusividad efectiva del anisol en las partículas:  $D_{A,eff} = 3.5 \times 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{seg}}$
- Constante de velocidad de reacción:  $k_1 = 0.003 \text{ s}^{-1}$



- Concentración de anisol en la superficie externa del catalizador:  $c_{A_1} = 7.2 \times 10^{-2} \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$

## CAPITULO 7

### SOLUCIONES ANALÍTICAS DE PROBLEMAS DE DIFUSIÓN EN ESTADO NO ESTACIONARIO EN DIFERENTES GEOMETRÍAS

- MÉTODO DE SEPARACIÓN DE VARIABLES
- MÉTODO DE TRANSFORMADAS DE LAPLACE
- DIFUSION CON REACCION QUIMICA HOMOGENEA EN ESTADO NO ESTACIONARIO EN GEOMETRIA RECTANGULAR

#### 7.1 SOLUCIONES GRÁFICAS DE PROBLEMAS DE DIFUSIÓN EN ESTADO NO ESTACIONARIO

##### INTRODUCCION

Los procesos transitorios en los que la concentración en un punto determinado varía con el tiempo se identifican como procesos en estado transitorio o procesos dependientes del tiempo. Tal variación en concentración se asocia con una variación en el flujo de masa. Pueden citarse muchos ejemplos comunes de transferencias en estado transitorio. Estos generalmente caen dentro de dos categorías: el proceso en el que el estado transitorio es solo durante el arranque y el proceso en el que operación es en un lote o un sistema cerrado durante toda su duración.

En el capítulo anterior se estudiaron los problemas en que interviene la transferencia molecular de masa en estado estacionario. Sin embargo, antes de que puedan alcanzarse las condiciones del estado estacionario, debe pasar cierto tiempo después de iniciarse el proceso de transferencia de masa antes de que desaparezcan por completo las condiciones transitorias. En las soluciones previas, simplemente se supuso que el periodo de transición había pasado y que se establecieron las condiciones del estado estacionario.

En este capítulo se considerarán los problemas que tratan con la difusión molecular en estado transitorio y sus soluciones. Es sencillo deducir las ecuaciones diferenciales dependientes del tiempo a partir de la ecuación diferencial para la transferencia de masa. La ecuación de continuidad para el componente A,

$$\vec{\nabla} * \vec{N}_A + \frac{\partial c_A}{\partial t} - R_A = 0$$

O

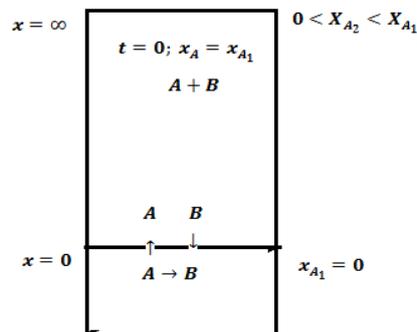
$$\vec{\nabla} * \vec{n}_A + \frac{\partial \rho_A}{\partial t} - r_A = 0$$

Contiene el término transitorio o dependiente del tiempo. Por lo general, la resolución de tales ecuaciones diferenciales parciales es difícil e involucra técnicas matemáticas un tanto avanzadas. En las secciones subsecuentes del presente capítulo se consideraran los métodos para resolver problemas prácticos de transferencia de masa en estado transitorio.

(Welty, 2015, pág. 678)

### METODO DE SEPARACION DE VARIABLES

Se desea el sistema representado en la figura (7.1). Un depósito cilíndrico alto contiene en su base un catalizador de isomerización con espesor reducido y constante, limitado por un tabique fácilmente eliminable. Supóngase que la parte superior del depósito está ocupada por una mezcla gaseosa de dos isómeros  $A$  y  $B$  a temperatura y presión constantes y que, dado su espesor, este puede considerarse semiinfinito. En un momento dado eliminado el tabique separador se ponen en contacto ambas fases con lo que el componente  $A$  se difunde en sentido descendente y al entrar en contacto con el catalizador  $S$  se isomeriza



*Figura 7.1 Régimen no estacionario: difusión simple en un sistema semiinfinito. Isomerización catalítica instantánea. (Elaboración Propia)*

instantáneamente en  $B$ , estableciéndose una contradifusión equimolar de ambos compuestos y manteniéndose constantes las condiciones en la superficie interfásial.

El modelo matemático para este caso estará constituido por la ecuación diferencial en derivadas parciales con las condiciones limite que se indican en la figura (7.1)

$$\frac{\partial x_A}{\partial t} = D_{AB} \frac{\partial^2 x_A}{\partial x^2} \quad (7.1)$$

$$\left[ \begin{array}{lll} t = 0 & 0 < x < \infty & x_A = x_{A_1} \\ t > 0 & x = 0 & x_A = x_{A_1} = 0 \\ t > 0 & x = 0 & x_A = x_{A_2} \quad (0 < x_{A_2} < x_{A_1}) \end{array} \right]$$

La ecuación diferencial en derivadas parciales (7.1) de este modelo puede resolverse mediante el método de combinación de variables. A tal fin se introducen las variables adimensionales:

$$Y = \frac{x_A - x_{A_0}}{x_{A_s} - x_{A_0}} \quad (7.2)$$

$$\varphi = \frac{x}{\sqrt{4D_{AB}t}} \quad (7.3)$$

Con lo que el modelo anterior se convierte en el siguiente

$$\frac{d^2Y}{d\varphi^2} + 2\varphi \frac{dY}{d\varphi} = 0 \quad (7.4)$$

ocupando las condiciones limite siguiente procederemos a realizar un correspondiente cambio de variable conocida como reducción de orden de la ecuación diferencial, la consigue obtener una ecuación diferencial de primer orden por medio de una ecuación diferencial de segundo orden y posteriormente resolver la ecuación por el método de separación de variables como se muestra a continuación

$$\left[ \begin{array}{ll} \varphi = 0 & Y = 1 \\ \varphi = \infty & Y = 0 \end{array} \right] \quad (7.5)$$

Posteriormente procedemos a separar las derivadas para realizar el cambio de variable, como se muestra a continuación

$$\frac{d}{d\varphi} \left( \frac{dY}{d\varphi} \right) + 2\varphi \frac{dY}{d\varphi} = 0 \quad (7.6)$$

$$\omega = \left( \frac{dY}{d\varphi} \right)$$

formando así la ecuación diferencial homogénea de primer orden la cual se resolverá por el método de separación de variables con una ecuación de la forma  $\frac{dy}{dx} + P(x)y = 0$  con un resultado de la forma  $y = c_1 e^{-\int P(x)dx}$

$$\frac{d\omega}{d\varphi} + 2\omega\varphi = 0 \quad (7.7)$$

Despejando

$$\frac{d\omega}{d\varphi} = -2\varphi\omega \quad (7.8)$$

Reacomodando variables y procedemos a integrar

$$\int \frac{d\omega}{\omega} = -2 \int \varphi d\varphi \quad (7.9)$$

Obteniendo el resultado general de la ecuación diferencial de la ecuación (7.6)

$$\ln\omega = -\varphi^2 \ln e + \ln c_1 \quad (7.10)$$

$$\ln\omega = \ln c_1 e^{-\varphi^2}$$

$$\omega = c_1 e^{-\varphi^2}$$

El término  $\omega = \left(\frac{dY}{d\varphi}\right)$  por lo que se sustituye en la solución de la ecuación diferencial de la ecuación (7.6) y procedemos a integrar obteniendo la ecuación

$$\left(\frac{dY}{d\varphi}\right) = c_1 e^{-\varphi^2} \quad (7.11)$$

$$\int dY = c_1 \int_0^\varphi e^{-\varphi^2} d\varphi \quad (7.12)$$

Constituido por una ecuación diferencial ordinaria que integrada repetidamente conduce a la ecuación:

$$Y = c_1 \int_0^\varphi e^{-\varphi^2} d\varphi + c_2 \quad (7.13)$$

Aplicando condiciones de frontera procederemos a la evaluación de las constantes de integración como se muestra a continuación

$$\begin{bmatrix} \varphi = 0 & Y = 1 \\ \varphi = \infty & Y = 0 \end{bmatrix}$$

En este paso conoceremos el valor de la constante  $c_2$  y sustituiremos posteriormente

$$1 = c_1 \int_0^0 e^{-\varphi^2} d(0) + c_2 \quad (7.14)$$

$$c_2 = 1$$

$$Y = c_1 \int_0^\varphi e^{-\varphi^2} d\varphi + 1 \quad (7.15)$$

Para la evaluación de la constante  $c_1$  ocuparemos en la evaluación de la integral  $\int_0^\infty e^{-\varphi^2} d\varphi$  una función conocida como función gamma  $\Gamma(\alpha)$  la cual contiene las siguientes propiedades

$$\left[ \begin{array}{l} \Gamma(1) = 1 \\ \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi} = \sqrt{2} \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx = 2\sqrt{\pi}\Phi(0) \rightarrow \Phi(0) = \frac{1}{2} \\ \text{Para cualquier } \alpha > -1 \text{ se cumple } \Gamma(\alpha) = (\alpha - 1)\Gamma(\alpha) \end{array} \right] \quad (7.16)$$

Procediendo así a evaluar la integral  $\int_0^{\infty} e^{-\varphi^2} d\varphi$  y posteriormente la constante  $c_1$  como se muestra a continuación

$$c_1 \int_0^{\infty} e^{-\varphi^2} d\varphi + 1 = c_1 \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) + 1 = c_1 \left(\frac{3}{2} - 1\right) \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) + 1 = c_1 \left(\frac{1}{2}\right) \sqrt{\pi} + 1 \quad (7.17)$$

$$c_1 \left(\frac{1}{2}\right) \sqrt{\pi} + 1 = 0$$

$$c_1 \left(\frac{1}{2}\right) \sqrt{\pi} = -1$$

Obteniendo así la constante de integración  $c_1$

$$c_1 = \frac{-1}{\left(\frac{1}{2}\right) \sqrt{\pi}} = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} \quad (7.18)$$

Posteriormente sustituiremos en la ecuación (7.15) obteniendo las siguientes ecuaciones

$$Y = 1 - \frac{\int_0^{\varphi} e^{-\varphi^2} d\varphi}{\int_0^{\infty} e^{-\varphi^2} d\varphi} = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\varphi} e^{-\varphi^2} d\varphi = 1 - \text{erf}\varphi = \text{erfc}\varphi \quad (7.19)$$

Sustituiremos a  $Y$  por el cambio de variable de la ecuación (7.2)

$$\frac{x_A - x_{A_0}}{x_{A_s} - x_{A_0}} = 1 - \text{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4D_{AB}t}}\right) = \left(\frac{c_A - c_{A_0}}{c_{A_s} - c_{A_0}}\right) \quad (7.20)$$

Reacomodando los términos de concentración obtenemos la siguiente ecuación la cual relaciona la función especial error con un determinado perfil de concentraciones

$$\left(\frac{c_{A_s} - c_A}{c_{A_s} - c_{A_0}}\right) = \text{erf}\left(\frac{z}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}}\right) \quad (7.21)$$

Despejando la concentración central para posteriormente derivar con respecto a  $z$

$$\theta = (c_A - c_{A_0}) = \left(\frac{c_{A_s} - c_{A_0}}{s}\right) \cosh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right) z \quad (7.22)$$

$$c_A = \left(\frac{c_{A_s} - c_{A_0}}{s}\right) \cosh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right) z + c_{A_0} \quad (7.23)$$

$$\frac{dc_A}{dz} = \left(\frac{s}{D_{AB}}\right) \left(\frac{c_{A_s} - c_{A_0}}{s}\right) \sinh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right) z \quad (7.24)$$

Nuevamente aplicando transformada inversa de Laplace a la ecuación  $\delta^{-1} \left\{ \frac{e^{-\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z}}{\frac{1}{s^2}} \right\} = \frac{z^2}{\sqrt{\pi t}} e^{-\frac{z^2}{4D_{AB}t}}$

y posteriormente sustituyendo

$$\frac{dc_A}{dz} = \left(\frac{s}{D_{AB}}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{c_{A_s} - c_{A_0}}{s}\right) \operatorname{senh}\left(\frac{s}{D_{AB}}\right) z \quad (7.25)$$

$$\frac{dc_A}{dz} = D_{AB}^{-\frac{1}{2}} (c_{A_s} - c_{A_0}) \delta^{-1} \left\{ \frac{e^{-\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z}}{s^2} \right\} \quad (7.26)$$

$$\frac{dc_A}{dz} = \frac{D_{AB}^{-\frac{1}{2}} (c_{A_s} - c_{A_0}) e^{-\frac{z^2}{4D_{AB}t}}}{\sqrt{\pi t}} \quad (7.27)$$

$$\vec{N}_{A,z=0} = -D_{AB} \left(\frac{dc_A}{dz}\right)_{z=0} = \frac{D_{AB}^{\frac{1}{2}} (c_{A_s} - c_{A_0})}{\sqrt{\pi t}} \quad (7.28)$$

Para obtener así el flux molar

$$\int_0^t \vec{N}_{A,z=0} dt = \frac{D_{AB}^{\frac{1}{2}} (c_{A_s} - c_{A_0})}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{dt}{\sqrt{t}} \quad (7.29)$$

$$\int_0^t \vec{N}_{A,z=0} dt = \frac{2D_{AB}^{\frac{1}{2}} (c_{A_s} - c_{A_0}) t^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{\pi}} \quad (7.30)$$

### EJEMPLO 1

Determinar el tiempo que se necesita para reducir el contenido de humedad en el centro a 10% en peso si una placa de arcilla de 5 cm de grueso se coloca sobre una banda que pasa a través de un secador continuo, lo que restringe el secado a una sola de las superficies planas. El contenido inicial de humedad será 15% en peso y el contenido de humedad en la superficie bajo condiciones de secado constante se mantendrá a 4% en peso. La difusividad efectiva del agua a través de la arcilla es  $1.3 \times 10^{-4} \frac{m^2}{s}$

$$\left(\frac{c_A - c_{A_0}}{c_{A_s} - c_{A_0}}\right) = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{z}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}}\right)$$

$$\left(\frac{c_{A_s} - c_A}{c_{A_s} - c_{A_0}}\right) = \operatorname{erf}\left(\frac{z}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}}\right) = \left(\frac{w_{A_s} - w_A}{w_{A_s} - w_{A_0}}\right)$$

Despejando la ecuación el tiempo de la ecuación

$$\operatorname{erf}\left(\frac{c_{A_s} - c_A}{c_{A_s} - c_{A_0}}\right)^{-1} = \left(\frac{z}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}}\right) = \operatorname{erf}\left(\frac{w_{A_s} - w_A}{w_{A_s} - w_{A_0}}\right)^{-1}$$

$$2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}} \operatorname{erf}\left(\frac{w_{A_s} - w_A}{w_{A_s} - w_{A_0}}\right)^{-1} = z$$

$$t = \left(\frac{1}{D_{AB}}\right) \left\{ \frac{z}{2 \operatorname{erf}\left(\frac{w_{A_s} - w_A}{w_{A_s} - w_{A_0}}\right)^{-1}} \right\}^2$$

$$\begin{bmatrix} w_{A_s} = 0.04 & w_A = 0.1 \\ w_{A_0} = 0.15 & z = 0.05 \end{bmatrix}$$

$$D_{AB} = 1.3 \times 10^{-8} \frac{m^2}{\text{seg}}$$

$$t = \left(\frac{1}{1.3 \times 10^{-8} \frac{m^2}{\text{seg}}}\right) \left\{ \frac{0.05m}{2 \operatorname{erf}\left(\frac{0.04 - 0.1}{0.04 - 0.15}\right)^{-1}} \right\}^2$$

Usando los valores de tabla 7.1, el valor de  $\operatorname{erf}(0.5454) = 0.5594$

$$t = \left(\frac{1}{1.3 \times 10^{-8} \frac{m^2}{\text{seg}}}\right) \left\{ \frac{0.05m}{2(0.5594)^{-1}} \right\}^2 = 15044.63 \text{ seg}$$

## MEDIO DE DIFUSION SEMIINFINITO

Un medio de difusión semiinfinito, se considera aquel en el que el fenómeno de difusión se encuentra acotado en uno de sus extremos, es decir se conocen sus condiciones como es aquí el tiempo  $t = 0$ ,  $z = 0$  y  $c_{A_0}$ , pero el otro lado se encuentra indefinido y no se conocen sus condiciones a la frontera.

Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + v_x \frac{\partial c_A}{\partial x} + v_y \frac{\partial c_A}{\partial y} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} = D_{AB} \left( \frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right) + R_A \quad (7.31)$$

Consideraciones:

1.- Fenómeno completamente difusivo

$$\begin{bmatrix} t = 0 \\ z = 0, c_{A_0} \\ z > 0, c_{A_\infty} \end{bmatrix}$$

Por lo que la ecuación (7.8) se reduce a

$$D_{AB} \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} = \frac{\partial c_A}{\partial t} \quad (7.32)$$

La cual debe ser resuelta bajo las siguientes condiciones

$$\left[ \begin{array}{l} \text{condiciones iniciales} \\ t = 0 \end{array} \right] \left[ \begin{array}{l} z = 0, c_{A_0} \\ z > 0, c_{A_\infty} \end{array} \right] \left[ \begin{array}{l} \text{condiciones finales} \\ t = 0 \end{array} \right] \left[ \begin{array}{l} z = 0, c_{A_0} \\ z > \infty, c_{A_\infty} \end{array} \right]$$

Definiendo una concentración adimensional

$$\Gamma = \left( \frac{c_A - c_{A_\infty}}{c_{A_0} - c_{A_\infty}} \right) \quad (7.33)$$

Resolviendo para  $c_A$

$$\begin{aligned} c_A &= \Gamma(c_{A_0} - c_{A_\infty}) + c_{A_\infty} \\ \frac{\partial c_A}{\partial \Gamma} &= (c_{A_0} - c_{A_\infty}) \frac{\partial \Gamma}{\partial \Gamma} \\ &= (c_{A_0} - c_{A_\infty}) \end{aligned} \quad (7.34)$$

Adimensionando el término de  $c_A$  de la izquierda de la ecuación (7.9)

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = \frac{\partial c_A}{\partial \Gamma} \left( \frac{\partial \Gamma}{\partial t} \right) = (c_{A_0} - c_{A_\infty}) \left( \frac{\partial \Gamma}{\partial t} \right) \quad (7.35)$$

Adimensionando  $c_A$  del término de la derecha de la ecuación (7.9)

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} &= \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\partial c_A}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\partial c_A}{\partial \Gamma} \left( \frac{\partial \Gamma}{\partial z} \right) \right) = \frac{\partial}{\partial z} \left[ (c_{A_0} - c_{A_\infty}) \left( \frac{\partial \Gamma}{\partial z} \right) \right] \\ &= (c_{A_0} - c_{A_\infty}) \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial z^2} \end{aligned} \quad (7.36)$$

Ya que:

$$\frac{\partial c_A}{\partial \Gamma} = (c_{A_0} - c_{A_\infty}) \quad (7.37)$$

Sustituyendo (7.15) y (7.13) en la ecuación (7.9) se llega finalmente a:

$$(c_{A_0} - c_{A_\infty}) \left( \frac{\partial \Gamma}{\partial t} \right) = D_{AB} (c_{A_0} - c_{A_\infty}) \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial z^2} \quad (7.38)$$

Al dividir toda la ecuación (7.17) entre  $(c_{A_0} - c_{A_\infty})$ , queda:

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} = D_{AB} \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial z^2} \quad (7.39)$$

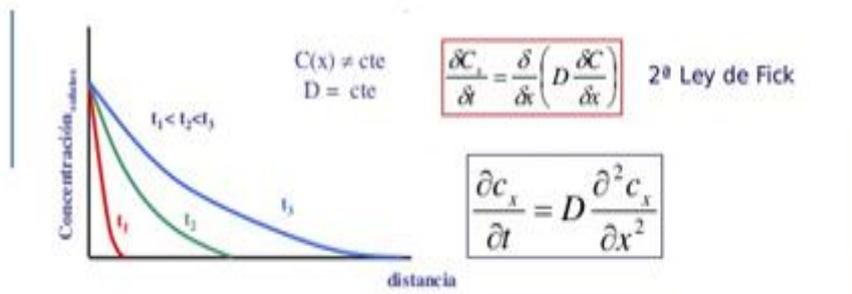
Que resulta ser la equivalente a la ecuación (7.9) solo que ahora en forma parcialmente adimensionada en el término de la concentración.

Ante esta nueva ecuación también deben ser modificadas las condiciones iniciales y a la frontera expresadas en la ecuación (7.13)

$$\left[ \begin{array}{l} \text{condiciones iniciales} \\ t = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} z = 0, \quad \Gamma = 1 \\ z > 0, \quad \Gamma = 0 \end{array} \right. \end{array} \right] \left[ \begin{array}{l} \text{condiciones a la frontera} \\ t > 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} z = 0, \quad \Gamma = 1 \\ z > \infty, \quad \Gamma = 0 \end{array} \right. \end{array} \right] \quad (7.40)$$

## METODO DE TRANSFORMADAS DE LAPLACE

Otro caso importante de difusión de masa en estado transitorio que puede someterse a una solución analítica es la transferencia de masa unidireccional hacia un medio continuo semiinfinito con una concentración fija en la superficie. Por ejemplo, se desearía describir la



*Figura 7.2 Difusión transitoria en un medio semiinfinito (Welty, 2015)*

absorción de oxígeno del aire en la aireación de un lago o el proceso de difusión en fase sólida que se produce en el endurecimiento superficial del acero dulce en una atmosfera carburante. La figura (7.2) representa los perfiles de concentración a medida que el tiempo aumenta para un medio semiinfinito que tiene una concentración inicial uniforme de  $c_{A_0}$  y que estaba sujeto a una concentración constante en la superficie de  $c_{A_s}$ . (Welty, 2015, pág. 680)

Tomando las siguientes consideraciones:

1. Fenómeno en estado transitorio.
2. No existe ninguna reacción química homogénea por lo tanto el término  $R_A = 0$ .
3. Fenómeno unidireccional y completamente difusivo

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{N}_A = \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,x}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{N}_{A,y}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} \right) + \frac{\partial c_A}{\partial t} - R_A = 0$$

Eliminando los términos que no ocuparemos incluyendo  $R_A$  lo que significa que no existe ninguna reacción química de transformación de reactivos a productos desplazándose quedando la ecuación de la siguiente manera.

$$\frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} + \frac{\partial c_A}{\partial t} = 0 \quad (7.41)$$

y despejando del otro lado de la igualdad

$$\frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z^2} = -\frac{\partial c_A}{\partial t} \quad (7.42)$$

Sustituyendo el flux de masa  $\vec{N}_{A,z} = -D_{AB} \frac{dc_A}{dz}$

$$D_{AB} \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} = \frac{\partial c_A}{\partial t} \quad (7.43)$$

Aplicando un cambio de variable y sustituyendo en la ecuación

$$\theta = c_A - c_{A_0} \quad (7.44)$$

$$D_{AB} \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} = \frac{\partial \theta}{\partial t}$$

La ecuación siguiente se resolverá mediante el método de transformada de Laplace por medio de una integral de la forma  $\delta\{f(t)\} = \int_0^\infty e^{-st} f(t) dt$  ocupando también el método de integración por partes como se muestra en las siguientes ecuaciones

$$\int_0^\infty e^{-st} \left( \frac{\partial \theta}{\partial t} \right) dt = D_{AB} \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} \quad (7.45)$$

El método de integración utilizado es el método de integración por partes el cual se presenta a continuación

$$\frac{d(uv)}{dx} = u \frac{dv}{dx} + v \frac{du}{dx}$$

$$d(uv) = u dv + v du$$

$$\int d(uv) = \int u dv - \int v du$$

Reordenando

$$\int u dv = uv - \int v du$$

Quedando la matriz de la siguiente manera

$$\left[ \begin{array}{l} u = e^{-st} \quad dv = \left(\frac{\partial \theta}{\partial t}\right) dt \\ du = -se^{-st} dt \quad v = \theta(t) \end{array} \right]$$

Obteniendo la siguiente ecuación diferencial de 2do orden

Despejando y resolviendo

$$\frac{d^2 \theta}{dz^2} = \left(\frac{s}{D_{AB}}\right) \theta \quad (7.46)$$

Resolviendo la ecuación diferencial

Despejando los exponentes en la ecuación diferencial nos queda la siguiente ecuación

$$\frac{d\theta}{dz} = \pm \left(\frac{s}{D_{AB}}\right) \theta \quad (7.47)$$

y posteriormente la ecuación en monomios y procedemos a resolver las ecuaciones diferenciales por el método anteriormente mostrado  $y = c_1 e^{-\int \psi(x) dx} + c_2 e^{-\int P(x) dx}$ ,

$$\left\{ \frac{d\theta}{dz} - \left(\frac{s}{D_{AB}}\right) \theta \right\} \left\{ \frac{d\theta}{dz} + \left(\frac{s}{D_{AB}}\right) \theta \right\} \quad (7.48)$$

Obteniendo así la solución general de la ecuación diferencial antes mostrada y después por medio de la equivalencia entre funciones exponenciales y funciones trigonométricas obtenemos la solución general en términos de funciones trigonométricas hiperbólicas

$$\theta = \theta_1 + \theta_2 = c_1 e^{\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z} + c_2 e^{-\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z} \quad (7.49)$$

$$\theta = c_1 \cosh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z + c_2 \sinh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z \quad (7.50)$$

Aplicando condiciones de frontera y calculando las constantes

$$\left[ \begin{array}{l} \theta = \theta_1 = \left(\frac{c_{A_s} - c_{A_0}}{s}\right) \quad z = 0 \\ \theta = \theta_2 = \infty \quad z = \infty \end{array} \right] \quad (7.51)$$

Obtenemos para esta ecuación las determinadas constantes de integración

$$\theta_1 = c_1 \cosh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)(0) + c_2 \sinh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)(0) \quad (7.52)$$

$$\theta_1 = \left(\frac{c_{A_s} - c_{A_0}}{s}\right) = c_1$$

$$\theta = \left(\frac{c_{A_s} - c_{A_0}}{s}\right) \cosh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z + c_2 \sinh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z$$

$$\theta = \left(\frac{c_{A_s} - c_{A_0}}{s}\right) \cosh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)(\infty) + c_2 \sinh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)(\infty)$$

$$c_2 = 0$$

$$\theta = \left(\frac{c_{A_s} - c_{A_0}}{s}\right) \cosh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z \quad (7.53)$$

En esta parte del cálculo aplicamos transformada inversa de Laplace con lo cual procedemos a obtener una función especial conocida como la función error

$$\left( \frac{c_A - c_{A_0}}{c_{A_s} - c_{A_0}} \right) = \delta^{-1} \left\{ \frac{\cosh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z}{s} \right\} \quad (7.54)$$

$$\left( \frac{c_A - c_{A_0}}{c_{A_s} - c_{A_0}} \right) = \delta^{-1} \left( \frac{e^{-\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z}}{s} \right) = \operatorname{erfc} \left( \frac{z}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}} \right)$$

$$\left( \frac{c_A - c_{A_0}}{c_{A_s} - c_{A_0}} \right) = \operatorname{erfc} \left( \frac{z}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}} \right) = 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{z}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}} \right) \quad (7.55)$$

Reacomodando los términos de concentración obtenemos la siguiente ecuación la cual relaciona la función especial error con un determinado perfil de concentraciones

$$\left( \frac{c_{A_s} - c_A}{c_{A_s} - c_{A_0}} \right) = \operatorname{erf} \left( \frac{z}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}} \right) \quad (7.56)$$

Despejando la concentración central para posteriormente derivar con respecto a  $z$

$$c_A = \left( \frac{c_{A_s} - c_{A_0}}{s} \right) \cosh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z + c_{A_0} \quad (7.57)$$

$$\frac{dc_A}{dz} = \left( \frac{s}{D_{AB}} \right) \left( \frac{c_{A_s} - c_{A_0}}{s} \right) \operatorname{senh}\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z \quad (7.58)$$

Nuevamente aplicando transformada inversa de Laplace a la ecuación  $\delta^{-1} \left\{ \frac{e^{-\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z}}{\frac{1}{s^2}} \right\}$

$$\frac{dc_A}{dz} = \left( \frac{s}{D_{AB}} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{c_{A_s} - c_{A_0}}{s} \right) \operatorname{senh}\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z$$

$$\frac{dc_A}{dz} = D_{AB}^{-\frac{1}{2}} (c_{A_s} - c_{A_0}) \delta^{-1} \left\{ \frac{e^{-\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z}}{\frac{1}{s^2}} \right\}$$

$$\frac{dc_A}{dz} = \frac{D_{AB}^{-\frac{1}{2}} (c_{A_s} - c_{A_0}) e^{-\frac{z^2}{4D_{AB}t}}}{\sqrt{\pi t}}$$

$$\vec{N}_{A,z=0} = -D_{AB} \left( \frac{dc_A}{dz} \right)_{z=0} = \frac{D_{AB}^{\frac{1}{2}} (c_{A_s} - c_{A_0})}{\sqrt{\pi t}} \quad (7.59)$$

Para obtener así el flux molar

$$\int_0^t \vec{N}_{A,z=0} dt = \frac{D_{AB}^{\frac{1}{2}} (c_{A_s} - c_{A_0})}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{dt}{\sqrt{t}}$$

$$\int_0^t \vec{N}_{A,z=0} dt = \frac{2D_{AB}^{\frac{1}{2}} (c_{A_s} - c_{A_o}) t^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{\pi}} \quad (7.60)$$

Tabla 7.1 valores de la función error (Welty, 2015)

$\phi$	erf $\phi$	$\phi$	erf $\phi$
0	0.0	0.85	0.7707
0.025	0.0282	0.90	0.7970
0.05	0.0564	0.95	0.8209
0.10	0.1125	1.0	0.8427
0.15	0.1680	1.1	0.8802
0.20	0.2227	1.2	0.9103
0.25	0.2763	1.3	0.9340
0.30	0.3286	1.4	0.9523
0.35	0.3794	1.5	0.9661
0.40	0.4284	1.6	0.9763
0.45	0.4755	1.7	0.9838
0.50	0.5205	1.8	0.9891
0.55	0.5633	1.9	0.9928
0.60	0.6039	2.0	0.9953
0.65	0.6420	2.2	0.9981
0.70	0.6778	2.4	0.9993
0.75	0.7112	2.6	0.9998
0.80	0.7421	2.8	0.9999

### EJEMPLO 3 (Welty, 2015, pág. 681)

Una pieza de acero dulce precalentado, que tiene una concentración inicial de carbón de 0.20% en peso, se expone a una atmosfera carburante durante 1 hora. Bajo las condiciones del proceso, la concentración de carbón en la superficie es 0.70%. Si la difusividad del carbón a través del acero es  $1 \times 10^{-11} \frac{m^2}{s}$  a la temperatura del proceso, determinar la composición del carbón a 0.01 cm, 0.02 cm y 0.04 cm por debajo de la superficie.

Puesto que la concentración total en el acero dulce es muy pequeña, su densidad puede considerarse constante, de acuerdo con

$$\left( \frac{c_{A_s} - c_A}{c_{A_s} - c_{A_o}} \right) = erf \left( \frac{z}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}} \right)$$

$$\left( \frac{c_{A_s} - c_A}{c_{A_s} - c_{A_0}} \right) = \left( \frac{w_{A_s} - w_A}{w_{A_s} - w_{A_0}} \right) = \operatorname{erf} \left( \frac{z}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}} \right)$$

$$\left( \frac{w_{A_s} - w_A}{w_{A_s} - w_{A_0}} \right) = \operatorname{erf} \left( \frac{z}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}} \right)$$

Sustituyendo valores

Inciso a)

$$\left[ \begin{array}{ll} w_{A_0} = 0.002 & w_{A_s} = 0.007 \\ z = 0.0001\text{m} & t = 3600\text{seg} \\ D_{AB} = 1 \times 10^{-11} \frac{\text{m}^2}{\text{s}} & 1 \end{array} \right]$$

$$\left( \frac{0.007 - w_A}{0.007 - 0.002} \right) = \operatorname{erf} \left[ \frac{0.0001\text{ m}}{2 \left\{ (3600\text{ seg}) \left( 1 \times 10^{-11} \frac{\text{m}^2}{\text{s}} \right) \right\}^{\frac{1}{2}}} \right]$$

$$\left( \frac{0.007 - w_A}{0.007 - 0.002} \right) = \operatorname{erf}(0.2635)$$

Usando los valores de la tabla 7.1, el valor de  $\operatorname{erf}(0.2635) = 0.2904$

$$w_A = 0.5548\%$$

Inciso b)

$$\left[ \begin{array}{ll} w_{A_0} = 0.002 & w_{A_s} = 0.007 \\ z = 0.007 & t = 3600\text{seg} \end{array} \right]$$

$$D_{AB} = 1 \times 10^{-11} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$$

$$\left( \frac{0.007 - w_A}{0.007 - 0.002} \right) = \operatorname{erf} \left[ \frac{0.0002\text{ m}}{2 \left\{ (3600\text{ seg}) \left( 1 \times 10^{-11} \frac{\text{m}^2}{\text{seg}} \right) \right\}^{\frac{1}{2}}} \right]$$

$$\left( \frac{0.007 - w_A}{0.007 - 0.002} \right) = \operatorname{erf}(0.5270)$$

Usando los valores de la tabla 7.1, el valor de  $\operatorname{erf}(0.5270) = 0.5476$

$$\left( \frac{0.007 - w_A}{0.007 - 0.002} \right) = (0.5476)$$

$$w_A = 0.4262\%$$

Inciso c)

$$\left[ \begin{array}{ll} w_{A_0} = 0.002 & w_{A_s} = 0.007 \\ z = 0.0004m & t = 3600 \text{ seg} \end{array} \right]$$

$$D_{AB} = 1 \times 10^{-11} \frac{m^2}{\text{seg}}$$

$$\left( \frac{0.007 - w_A}{0.007 - 0.002} \right) = \text{erf} \left[ \frac{0.0004 \text{ m}}{2 \left\{ (3600 \text{ seg}) \left( 1 \times 10^{-11} \frac{m^2}{\text{seg}} \right) \right\}^{\frac{1}{2}}} \right]$$

$$\left( \frac{0.007 - w_A}{0.007 - 0.002} \right) = \text{erf}(0.5270)$$

Usando los valores de la tabla 7.1, el valor de  $\text{erf}(0.5270) = 0.5476$

$$\left( \frac{0.007 - w_A}{0.007 - 0.002} \right) = (1.054)$$

$$w_A = 0.2685\%$$

## DIFUSION CON REACCION QUIMICA HOMOGENEA EN ESTADO NO ESTACIONARIO EN GEOMETRIA RECTANGULAR

Comenzaremos por la ecuación general de transferencia de masa en coordenadas rectangulares

$$\left( \frac{\partial \vec{N}_{A,x}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{N}_{A,y}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} \right) + \frac{\partial c_A}{\partial t} - R_A = 0$$

Eliminando los términos innecesarios nos queda la ecuación diferencial que describe el fenómeno de reacción química homogénea en estado no estacionario

$$\frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} + \frac{\partial c_A}{\partial t} - R_A = 0 \quad (7.61)$$

El término  $R_A$  es igual que en temas anteriores donde el tema en cuestión es desplazamiento de una reacción química en un sistema rectangular y viene siendo una reacción química de

primer orden  $R_A = -k_1 c_A$  la cual sustituiremos en la ecuación (7.61) quedando de la siguiente manera

$$\frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} + \frac{\partial c_A}{\partial t} + k_1 c_A = 0 \quad (7.61)$$

Despejaremos la ecuación del otro lado de la igualdad y posteriormente resolveremos la ecuación diferencial por el método de transformadas de Laplace, una ecuación de la forma  $\delta\{f(t)\} = \int_0^\infty e^{-st} f(t) dt$  con la cual comenzaremos a dar solución a la ecuación (7.61) y sustituiremos el flux molar en contradifusión equimolar como se muestra

$$D_{AB} \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} = \int_0^\infty e^{-st} \left( \frac{\partial c_A}{\partial t} \right) dt + k_1 \int_0^\infty e^{-st} c_A(t) dt \quad (7.62)$$

$$D_{AB} \frac{d^2 c_A}{dz^2} = \left\{ c_A(0)(e^{(\infty)} - e^{(0)}) + s \int_0^\infty e^{-st} c_A(t) dt \right\} + k_1 \int_0^\infty e^{-st} c_A(t) dt$$

$$D_{AB} \frac{d^2 c_A}{dz^2} = s \int_0^\infty e^{-st} c_A(t) dt + k_1 \int_0^\infty e^{-st} c_A(t) dt \quad (7.63)$$

$$D_{AB} \frac{d^2 c_A}{dz^2} = s c_A + k_1 c_A$$

$$\frac{d^2 c_A}{dz^2} = \left( \frac{s}{D_{AB}} \right) c_A + \left( \frac{k_1}{D_{AB}} \right) c_A \quad (7.64)$$

$$\frac{dc_A}{dz} = \sqrt{\left( \frac{s}{D_{AB}} \right) c_A} + \sqrt{\left( \frac{k_1}{D_{AB}} \right) c_A}$$

$$\frac{dc_A}{dz} = (\phi + \alpha) c_A \quad (7.65)$$

$$\frac{d^2 c_A}{dz^2} = \lambda^2 c_A \quad (7.66)$$

$$\frac{dc_A}{dz} = \pm \lambda c_A \quad (7.67)$$

$$c_A = c_1 \cosh \lambda z + c_2 \sinh \lambda z \quad (7.68)$$

$$\left[ \begin{array}{l} c_A = \frac{c_{A1}}{s} \quad z = 0 \\ c_A = \frac{c_{A2}}{s} \quad z = \infty \end{array} \right] \quad (7.69)$$

Sustituyendo condiciones limite

$$\frac{c_{A_1}}{s} = c_1 \cosh \lambda(0) + c_2 \sinh \lambda(0) \quad (7.70)$$

Teniendo así el valor de la primera constante

$$c_1 = \frac{c_{A_1}}{s} \quad (7.71)$$

Y sustituyendo en la ecuación general

$$c_A = c_2 \sinh \lambda z \quad (7.72)$$

Evaluando la segunda constante

$$\frac{c_{A_2}}{s} = c_2 \sinh \lambda(\infty) \quad (7.73)$$

$$c_2 = 0$$

La ecuación general queda de la siguiente manera

$$c_A = \frac{c_{A_1}}{s} \cosh \lambda z \quad (7.74)$$

Posteriormente lo convertiremos nuevamente a términos exponenciales para así poder realizar un inverso de la transformada de Laplace con la cual obtendremos una clase de función especial llamada la función error quedando así de la siguiente manera

$$c_A = \frac{c_{A_1}}{s} (e^{\lambda z}) = \frac{c_{A_1}}{s} e^{(\phi+\alpha)z} = \frac{c_{A_1}}{s} e^{\left\{ \sqrt{\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)} + \sqrt{\left(\frac{k_1}{D_{AB}}\right)} \right\} z} = \frac{c_{A_1}}{s} \left( e^{\sqrt{\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)} z} \right) \left( e^{\sqrt{\left(\frac{k_1}{D_{AB}}\right)} z} \right) \quad (7.75)$$

$$c_A = c_{A_1} \left( \frac{e^{\sqrt{\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)} z}}{s} \right) \left( e^{\sqrt{\left(\frac{k_1}{D_{AB}}\right)} z} \right) \quad (7.76)$$

Ocuparemos la igualdad  $\operatorname{erfc}\left(\frac{z}{2\sqrt{tD_{AB}}}\right) = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{z}{2\sqrt{tD_{AB}}}\right)$

$$c_A = c_{A_1} \left( e^{\sqrt{\left(\frac{k_1}{D_{AB}}\right)} z} \right) \delta^{-1} \left\{ \frac{e^{-\sqrt{\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)} z}}{s} \right\} = c_{A_1} \left( e^{\sqrt{\left(\frac{k_1}{D_{AB}}\right)} z} \right) \left\{ 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{z}{2\sqrt{tD_{AB}}}\right) \right\} \quad (7.77)$$

y posteriormente realizaremos la derivada de la concentración con respecto al eje fijo coordenado  $z$  para después obtener el flux molar al multiplicar por el coeficiente de difusión

$$\frac{dc_A}{dz} = c_{A_1} \frac{d}{dz} \left[ \left( e^{\sqrt{\left(\frac{k_1}{D_{AB}}\right)} z} \right) \left\{ 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{z}{2\sqrt{tD_{AB}}}\right) \right\} \right] \quad (7.78)$$

derivaremos ocupando la regla de la derivación de un producto  $\frac{d}{dx}(uv) = u \frac{d}{dx}v + v \frac{d}{dx}u$  como se muestra a continuación

$$\frac{dc_A}{dz} = c_{A1} \left\{ \left( e^{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}}z} \right) \frac{d}{dz} \left( 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{z}{2\sqrt{tD_{AB}}} \right) \right) + \left( 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{z}{2\sqrt{tD_{AB}}} \right) \right) \frac{d}{dz} \left( e^{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}}z} \right) \right\} \quad (7.79)$$

$$\frac{dc_A}{dz} = c_{A1} \left\{ \left( e^{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}}z} \right) \left( -\frac{d}{dz} \operatorname{erf} \left( \frac{z}{2\sqrt{tD_{AB}}} \right) \frac{d}{dz} \left( \frac{z}{2\sqrt{tD_{AB}}} \right) \right) + \left( 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{z}{2\sqrt{tD_{AB}}} \right) \right) \left( e^{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}}z} \right) \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} \frac{dz}{dz} \right\} \quad (7.80)$$

$$\frac{dc_A}{dz} = c_{A1} \left\{ \frac{\left( e^{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}}z} \right)}{2\sqrt{tD_{AB}}} \left( -\frac{d}{dz} \operatorname{erf} \left( \frac{z}{2\sqrt{tD_{AB}}} \right) \right) + \left( 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{z}{2\sqrt{tD_{AB}}} \right) \right) \left( e^{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}}z} \right) \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} \right\} \quad (7.81)$$

Evaluando en  $z = 0$

$$\left( \frac{dc_A}{dz} \right)_{z=0} = c_{A1} \left\{ \frac{\left( e^{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}}(0)} \right)}{2\sqrt{tD_{AB}}} \left( -\frac{d}{dz} \operatorname{erf} \left( \frac{(0)}{2\sqrt{tD_{AB}}} \right) \right) + \left( 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{(0)}{2\sqrt{tD_{AB}}} \right) \right) \left( e^{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}}(0)} \right) \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} \right\} \quad (7.82)$$

Al evaluar en  $z = 0$  la ecuación se reduce a la siguiente expresión a continuación la cual es igual a la solución de la ecuación diferencial  $\frac{dN_{A,z}}{dz} - R_A = 0$  la cual es una expresión que en primera instancia no toma en cuenta a la ecuación diferencial con respecto al tiempo  $\left( \frac{\partial c_A}{\partial t} \right)$  y por lo tanto arroja el mismo resultado que la ecuación (7.61) que si toma en cuenta al estado transitorio  $\left( \frac{\partial c_A}{\partial t} \right)$  pudiendo concluir que la ecuación  $\left( \frac{\partial c_A}{\partial t} \right)$  queda eliminada en el momento de evaluar a la ecuación en  $z = 0$ , por lo que la función error queda completamente anulada quedando solamente los términos relacionados con la reacción química homogénea de primer orden y siendo así obtendremos la siguiente solución

$$\vec{N}_{A,z=0} = -D_{AB} \left( \frac{dc_A}{dz} \right)_{z=0} = -D_{AB} c_{A1} \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} = k_c (c_{A1} - c_{As}) \quad (7.83)$$

## GRAFICAS DE CONCENTRACION-TIEMPO PARA FORMAS GEOMETRICAS SIMPLES

En la solución analítica, se encontró que el cambio que no se ha realizado,  $Y$ , es función del tiempo relativo,  $X_D$ . Las soluciones matemáticas para la transferencia de masa en estado estacionario en varias formas simples con ciertas condiciones restrictivas en la frontera se han presentado en una gran variedad de gráficas para facilitar su uso.

Las gráficas de Gurney-Lurie presentan soluciones para la placa plana, la esfera y el cilindro largo. Puesto que las ecuaciones diferenciales parciales que definen la conducción de calor y la difusión molecular son análogas, tales graficas pueden utilizarse para resolver cualquiera de estos fenómenos de transporte. Para la difusión molecular, las gráficas se encuentran en términos de cuatro relaciones adimensionales. (Welty, 2015, pág. 682)

$$Y = \text{cambio de concentracion que no se ha llevado a cabo} = \left( \frac{c_{As} - c_A}{c_{As} - c_{A0}} \right) \quad (7.84)$$

$$X_D = \text{tiempo relativo} = \frac{tD_{AB}}{x_1^2} \quad (7.85)$$

$$n = \text{posicion relativa} = \frac{x}{x_1} \quad (7.86)$$

$$m = \text{resistencia relativa} = \frac{D_{AB}}{k_c x_1} \quad (7.87)$$

La longitud característica,  $x_1$ , es la distancia desde el punto medio a la posición de interés. La resistencia relativa,  $m$ , es una relación entre la resistencia a la transferencia de masa por convección a la resistencia molecular interna y la transferencia de masa.

Estas graficas pueden usarse para evaluar los perfiles de concentración para casos en que hay transferencia molecular de masa que entra o sale de los cuerpos de las formas especificadas, si se satisfacen las siguientes condiciones:

- Se supone la segunda ley de la difusión de Fick; es decir, que no hay movimiento del fluido,  $v = 0$ , sin termino de producción,  $R_A = 0$  y difusividad de masa constante.
- El cuerpo tiene una concentración inicial uniforme,  $c_{A_0}$ .
- El limite se sujeta a una nueva condición que permanece constante con el tiempo.

(Welty, 2015, pág. 683)

Tabla 7.1 Valores de la funcion error (Welty, 2015)

$\phi$	erf $\phi$	$\phi$	erf $\phi$
0	0.0	0.85	0.7707
0.025	0.0282	0.90	0.7970
0.05	0.0564	0.95	0.8209
0.10	0.1125	1.0	0.8427
0.15	0.1680	1.1	0.8802
0.20	0.2227	1.2	0.9103
0.25	0.2763	1.3	0.9340
0.30	0.3286	1.4	0.9523
0.35	0.3794	1.5	0.9661
0.40	0.4284	1.6	0.9763
0.45	0.4755	1.7	0.9838
0.50	0.5205	1.8	0.9891
0.55	0.5633	1.9	0.9928
0.60	0.6039	2.0	0.9953
0.65	0.6420	2.2	0.9981
0.70	0.6778	2.4	0.9993
0.75	0.7112	2.6	0.9998
0.80	0.7421	2.8	0.9999

#### EJEMPLO 4 (Welty, 2015, pág. 692)

Una placa de arcilla de 5 cm de grueso se secó por sus dos superficies planas exponiéndola a una corriente a de aire de secado. El contenido inicial de humedad fue de 18% en peso y las 4 orillas delgadas se sellaron para prevenir la evaporación. Bajo las condiciones específicas de secado, este se controló por difusión interna de agua líquida a la superficie. La humedad en la superficie durante todo el proceso fue constante a 4% en peso. En 20000 segundos, el contenido de humedad en el centro se había reducido a 10% en peso. Si la resistencia relativa a la transferencia de masa en la superficie es esencialmente cero, calcular:

- La difusividad efectiva
- Bajo las mismas condiciones de secado, el tiempo necesario para reducir el contenido de humedad en el centro a 6% en peso.
- El tiempo que es necesario para disminuir el contenido de humedad en el centro de un cilindro de 0.1 m de largo y 0.1 m de diámetro de 18% a 10% en peso si el cilindro se construye con la misma arcilla de la parte a) y se seca bajo las mismas condiciones.
- Repetir c) para un cilindro que tiene 0.5m de largo y 0.1 m de diámetro.

Para el inciso a)

Podemos comenzar planteando la ecuación de continuidad en coordenadas rectangulares

$$\left\{ \frac{\partial \vec{N}_{A,x}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{N}_{A,y}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} \right\} + \frac{\partial c_A}{\partial t} - R_A = 0$$

Tomando las siguientes consideraciones:

- Fenómeno en estado transitorio.
- No existe ninguna reacción química homogénea por lo tanto el término  $R_A = 0$ .
- Fenómeno unidireccional y completamente difusivo

La ecuación diferencial que debe resolverse es:

$$\frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} + \frac{\partial c_A}{\partial t} = 0$$

Aplicando un cambio de variable y sustituyendo en la ecuación

$$\theta = c_A - c_{A_0}$$
$$D_{AB} \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} = \frac{\partial \theta}{\partial t}$$

Resolviéndose mediante transformada de Laplace.

$$\int_0^{\infty} e^{-st} \left( \frac{\partial \theta}{\partial t} \right) dt = D_{AB} \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2}$$

Obteniendo la siguiente ecuación diferencial de 2do orden

Despejando y resolviendo

$$D_{AB} \frac{d^2 \theta}{dz^2} = s\theta - 0$$

Obteniendo así la solución general a la ecuación diferencial de segundo orden

$$\theta = c_1 \cosh az + c_2 \sinh az$$

y las condiciones iniciales y en la frontera son

$$c_A = c_{A_0} \quad a \quad t = 0, \quad \text{para todo } z$$

$$c_A = c_{A_s} \quad a \quad z = 0, \quad \text{para todo } (t)$$

$$c_A = c_{A_s} \quad a \quad z \rightarrow \infty, \quad \text{para todo } (t)$$

La solución al problema puede alcanzarse en muy diversas formas, entre las cuales se encuentran la transformada de Laplace y la separación de variables. Inmediatamente puede escribirse la solución a este problema de difusión

$$\left( \frac{c_A - c_{A_0}}{c_{A,s} - c_{A_0}} \right) = 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{z}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}} \right)$$

$$\left( \frac{c_{A_s} - c_A}{c_{A,s} - c_{A_0}} \right) = \operatorname{erf} \left( \frac{z}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}} \right)$$

Sustituyendo valores

$$c_A = 0.1$$

$$c_{A_0} = 0.18$$

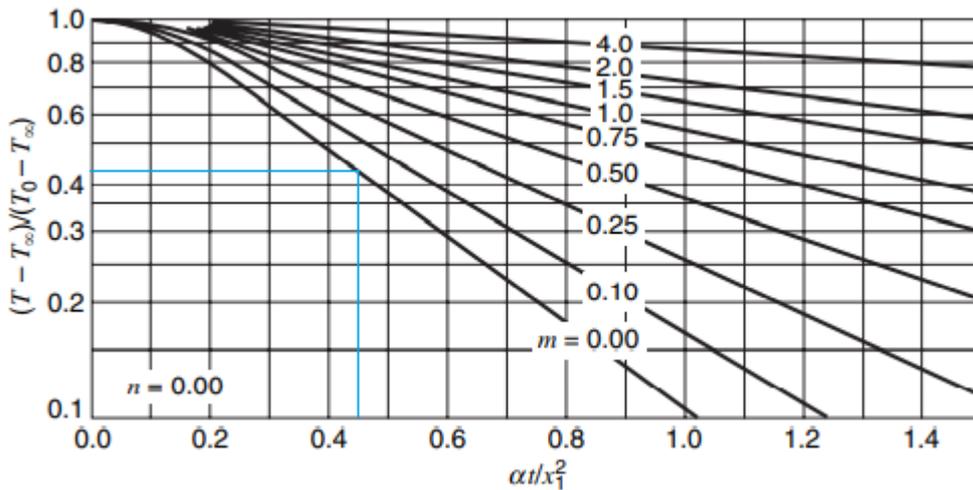
$$c_{A,s} = 0.04$$

$$\left( \frac{0.04 - 0.1}{0.04 - 0.18} \right) = \operatorname{erf} \left( \frac{z}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}} \right) = Y$$

$$Y = \left( \frac{0.04 - 0.1}{0.04 - 0.18} \right) = 0.4285$$

Mediante la siguiente tabla del apéndice se puede obtener el valor de  $X_D = 0.45$

Sustituyendo en la ecuación



$$X_D = \frac{t D_{AB}}{x_1^2}$$

$$0.45 = \frac{(20000 \text{ seg}) D_{AB}}{(0.05 \text{ m})^2}$$

$$D_{AB} = \frac{(0.45)(0.05 \text{ m})^2}{(20000 \text{ seg})} = 5.6 \times 10^{-8} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$$

Inciso b)

$$X_D = \frac{t D_{AB}}{x_1^2}$$

$$t = \frac{X_D x_1^2}{D_{AB}} = \frac{(0.45)(0.05 \text{ m})^2}{\left(5.6 \times 10^{-8} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}\right)} = 20089.28 \text{ seg}$$

Inciso c)

Aplicando la ecuación de continuidad en coordenadas cilíndricas

$$\left\{ \frac{1}{r} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \left( \frac{\partial \vec{N}_{A,\theta}}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} \right\} + \frac{\partial c_A}{\partial t} - R_A = 0$$

Eliminando los términos que no ocuparemos incluyendo  $R_A$  quedando la ecuación de la siguiente manera.

$$\left( \frac{1}{r} \right) \frac{\partial \vec{N}_{A,r}}{\partial r} = - \frac{\partial c_A}{\partial t}$$

Sustituyendo el flux de masa:

$$D_{AB} \frac{\partial^2 c_A}{\partial r^2} = \frac{\partial c_A}{\partial t}$$

Aplicando un cambio de variable y sustituyendo

$$\theta = c_A - c_{A_0}$$

$$D_{AB} \frac{\partial^2 \theta}{\partial r^2} = \frac{\partial \theta}{\partial t}$$

Resolviendo la ecuación diferencial nos lleva a obtener la función error

$$\left( \frac{c_A - c_{A_0}}{c_{A,s} - c_{A_0}} \right) = 1 - \operatorname{erf} \left\{ \frac{r}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}} \right\}$$

$$\left( \frac{c_A - c_{A_0}}{c_{A,s} - c_{A_0}} \right) = \operatorname{erf} \left\{ \frac{r}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}} \right\}$$

$$c_A = 0.1$$

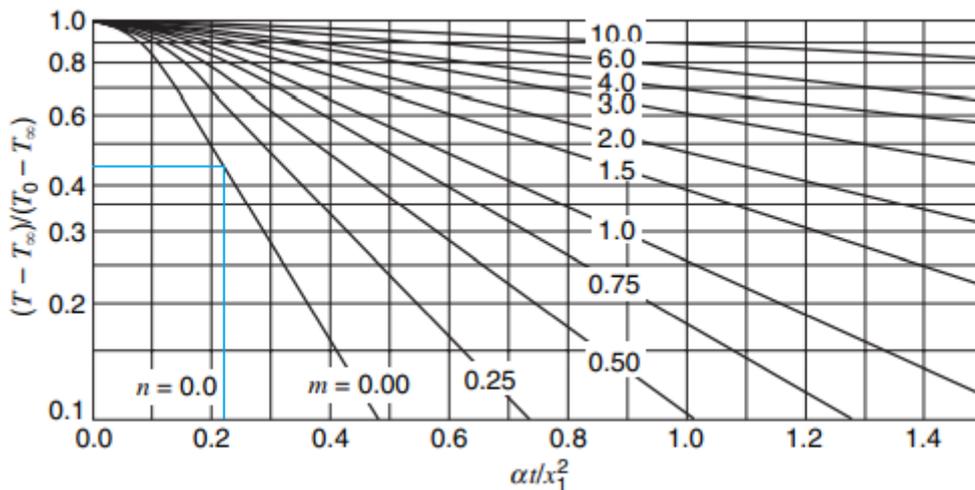
$$c_{A_0} = 0.18$$

$$c_{A,s} = 0.04$$

$$\left( \frac{0.04 - 0.1}{0.04 - 0.18} \right) = \operatorname{erf} \left( \frac{z}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}} \right) = Y$$

$$Y = \left( \frac{0.04 - 0.1}{0.04 - 0.18} \right) = 0.4285$$

Mediante la siguiente tabla del apéndice podemos encontrar el valor de  $X_D = 0.21$



$$X_D = \frac{tD_{AB}}{r^2}$$

$$t = \frac{X_D r^2}{D_{AB}} = \frac{(0.21)(0.01m)^2}{5.6 \times 10^{-8} \frac{m^2}{s}} = 375 \text{ seg}$$

Inciso d)

$$t = \frac{X_D r^2}{D_{AB}} = \frac{(0.21)(0.05m)^2}{5.6 \times 10^{-8} \frac{m^2}{s}} = 9375 \text{ seg}$$

### PROBLEMAS (Welty, 2015, págs. 690-696)

7.1 Un polímero de silicona de 4 mm de espesor recubre una superficie plana, no porosa e inerte. La película de polímero se expone a gas oxígeno al 100% estancado mantenido a 1.5 atm. El oxígeno gaseoso es escasamente soluble en la película de polímero de silicona, con la relación de solubilidad dada por

$$c_A = S p_A$$

con  $S = 3.16 \frac{\text{mol } O_2}{m^3}$  de oxígeno atmosférico de silicona a 298°K. Inicialmente, hay  $0.39 \frac{\text{mol } O_2}{m^3}$  disueltos uniformemente en la película. El coeficiente de difusión del oxígeno en la silicona es  $1 \times 10^{-11} \frac{m^2}{s}$  a 298°K

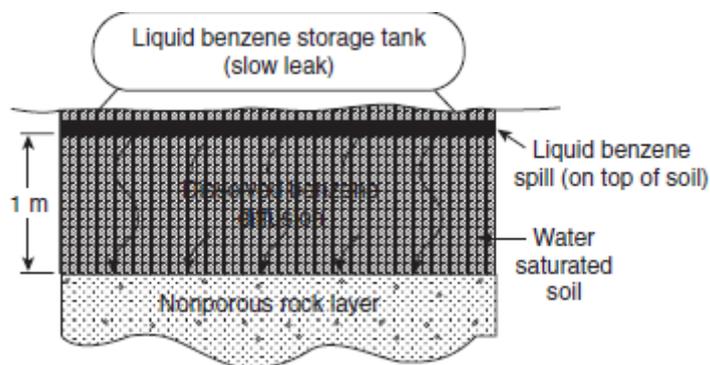
- En un tiempo muy corto de 10 seg, el oxígeno no penetra mucho en la película de polímero de silicona. En esta situación física, ¿cuál es el flujo de oxígeno hacia la superficie de la película de polímero de silicona en este momento?
- En un tiempo mucho más largo, la concentración de oxígeno disuelto en la película de polímero de silicona en la interfaz polímero / inerte es ahora de  $3.0 \frac{\text{mol}}{m^3}$ . ¿Cuánto tiempo llevará lograr esta concentración?

7.2 Estamos interesados en medir el coeficiente de difusión efectivo del colorante dextrano azul en un gel de agarosa. Una solución acuosa bien mezclada que contiene  $1.0 \frac{g}{L}$  del tinte descansa sobre el gel rígido de 2,0 cm de espesor, como se muestra a continuación. Las solubilidades del tinte tanto en agua como en gel son las mismas; es decir, la concentración del tinte en el lado del agua de la interfaz agua-gel es igual a la concentración de tinte en el lado del gel de la interfaz agua-gel. Inicialmente no hay tinte en el gel. Después de 24 horas, una pequeña sección del gel a 2 mm de la superficie se extrae con mucho cuidado con una aguja de jeringa, y la concentración del tinte dentro del gel, medida con un espectrofotómetro, es de 0,203. Un gel acuoso generalmente se considera un polímero

hidratado con agua, donde las moléculas de soluto se difunden a través de las regiones hidratadas.

- ¿Cuál es el coeficiente de difusión efectivo del tinte azul dextrano en gel según las mediciones experimentales?
- Enuncie al menos tres suposiciones que tuvo que hacer para llegar a su respuesta en el inciso a).
- Si la temperatura del sistema aumenta de  $20^{\circ}\text{C}$  a  $40^{\circ}\text{C}$  y el experimento se repite exactamente como se describe anteriormente, ¿cuál esperaría que fuera el nuevo coeficiente de difusión medido? La viscosidad del agua es  $9.93 \times 10^{-4} \frac{\text{Kg}}{\text{ms}}$  a  $20^{\circ}\text{C}$  y  $6.58 \times 10^{-4} \frac{\text{Kg}}{\text{ms}}$  a  $40^{\circ}\text{C}$ .

7.3 El benceno líquido,  $\text{C}_6\text{H}_6$ , un disolvente industrial común con una densidad de  $0.88 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$ , se filtró desde un tanque de almacenamiento a una velocidad al suelo. Como la densidad del benceno es menor que la densidad del agua, el benceno líquido formó una capa líquida ligera de fase no acuosa en la parte superior del suelo saturado de agua, como se muestra a continuación. A una profundidad de 1 m por debajo de la capa de suelo saturado de agua



hay una capa de roca impermeable no porosa. No hay flujo de agua subterránea a través de la capa de suelo saturada de agua, está completamente estancada.

Estamos interesados en el transporte de benceno a la capa de suelo saturada de agua, de modo que podamos identificar la cantidad de suelo que se debe desenterrar y tratar. Aunque el suelo saturado de agua es una mezcla compleja, como medio para la difusión del benceno se puede asumir que se aproxima a las propiedades de una sustancia homogénea.

En tiempos relativamente cortos o profundidades de penetración relativamente pequeñas, un medio de difusión de dimensión finita puede aproximarse mediante un medio de difusión semiinfinito. Calcule la concentración del benceno disuelto en una posición de 5 cm en la

capa de suelo saturada de agua después de 72 horas de derrame de benceno. El benceno líquido es escasamente soluble en agua y su límite de solubilidad es de  $24 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$  a  $293^\circ\text{K}$ . el coeficiente de difusión efectivo del benceno en el suelo saturado de agua es  $1 \times 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$  a  $293^\circ\text{K}$ . Inicialmente, no hay una capa de benceno descansando sobre el suelo, es esencialmente una fuente constante debido a la baja solubilidad del benceno en agua. Finalmente, puede suponer que el benceno no se difunde en la capa de roca no porosa.

**7.4** La agilización por hidrógeno debilita la resistencia mecánica del hierro fundido. Este fenómeno ocurre con frecuencia en recipientes a presión de hierro fundido que contienen un 100% de gas hidrógeno. El gas hidrógeno se disuelve en el hierro metálico y se difunde en el hierro no poroso sólido mediante un mecanismo de difusión intersticial. El gas hidrógeno no tiene que penetrar mucho en el hierro para tener un efecto negativo en la resistencia mecánica del hierro. En la situación actual, el 100% de gas hidrógeno a  $1 \text{ atm}$  y  $100^\circ\text{C}$  está contenido dentro de un recipiente de hierro cilíndrico de 1 m de diámetro interno y un espesor de pared de 2 cm. La solubilidad del hidrógeno en hierro a  $100^\circ\text{C}$  es  $2.27 \times 10^{-7} \frac{\text{mol de átomos de H}_2}{\text{g Fe}}$ . El coeficiente de difusión de los átomos de hidrógeno en el hierro sólido es  $124 \times 10^{-9} \frac{\text{cm}^2}{\text{seg}}$  a  $100^\circ\text{C}$ . Inicialmente, no hay átomos de H en el hierro sólido. ¿Cuántas horas tardará el nivel de hidrógeno dentro del metal de hierro en alcanzar  $1.76 \times 10^{-7} \frac{\text{átomos molares de H}_2}{\text{g Fe}}$  a una profundidad de 0.1 cm desde la superficie expuesta al gas hidrógeno?

**7.5** En la fabricación de un semiconductor de tipo p, el boro elemental se difunde una pequeña distancia en una oblea de silicio cristalino sólido. La concentración de boro dentro del silicio sólido determina las propiedades semiconductoras del material. Un proceso de deposición física mantiene la concentración de boro elemental en la superficie del agua igual a  $5 \times 10^{20} \frac{\text{átomos de boro}}{\text{cm}^3 \text{ de Silicio}}$ . En la fabricación de un transistor, se desea producir una película delgada de silicio dopado a una concentración de boro de al menos  $1.7 \times 10^{-9} \frac{\text{átomos de boro}}{\text{cm}^3 \text{ de silicio}}$  a una profundidad de 0,2 micrómetros desde la superficie de la oblea de silicio. Se desea lograr este objetivo en un tiempo de procesamiento de 30 minutos. La densidad del silicio sólido es de  $5 \times 10^{22} \frac{\text{átomos de silicio}}{\text{cm}^3}$  sólido. ¿A qué temperatura debe operarse el proceso de dopaje con boro? Se sabe que la dependencia de la temperatura del coeficiente de difusión del boro (A) en el silicio (B) viene dada por

$$D_{AB} = D_0 e^{-\frac{Q_0}{RT}}$$

donde  $D_0 = 0.019 \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$  y  $Q_0 = 2.74 \times 10^5 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$  para el boro elemental en estado sólido. La constante termodinámica  $R = 8.314 \frac{\text{J}}{\text{mol}^\circ\text{K}}$

**7.6** Una esfera porosa con un diámetro de  $\frac{1}{2}$  pulgada se satura con etanol. El espacio vacío en el sólido proporciona poros suficientes de manera que la difusión molecular puede llevarse a cabo a través del líquido en estos conductos. La esfera se deja caer en un depósito grande, bien agitado, que contiene agua pura. Si en 30 horas la concentración de etanol en el centro de la esfera disminuye a 27% de su concentración inicial, ¿Cuál sería la concentración de la esfera después de 37.4 horas?

**7.7** La concentración de oxígeno en un lago grande, de profundidad media, que inicialmente tenía un valor uniforme de  $2 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$ , se eleva en forma repentina en su superficie a  $9 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$  y se mantiene en este valor. Trazar el perfil de concentraciones,  $c_A$ , en función de la profundidad  $z$  para el periodo de

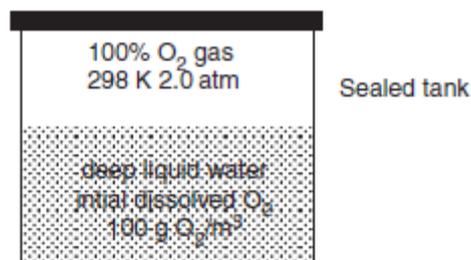
- a) 3600 seg
- b) 36000 seg
- c) 360 000 seg

Si el lago está a una profundidad de  $283^\circ\text{K}$

**7.8** Un camión cisterna de gran tamaño se vuelca y derrama un herbicida sobre un campo. Si la difusividad en masa del fluido en el suelo es  $1 \times 10^{-8} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$  y el fluido permanece sobre el suelo durante 1800 seg antes de evaporarse en el aire, determinar la profundidad a la cual es probable que se destruya la vida vegetal y los insectos si una concentración de 0.1% destruirá la mayor parte de la vida.

**7.9** Un aglomerado de carbón, aproximadamente esférico, con un radio de 2 cm, tiene un contenido de humedad inicial de  $400 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$ , se coloca en un secador con circulación forzada de aire, que produce una concentración de humedad en la superficie de  $10 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$ . Si la difusividad del agua en el carbón es  $1 \times 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$  y la resistencia de la superficie es despreciable, estimar el tiempo que se requiere para secar el centro del aglomerado de carbón hasta una concentración de humedad de  $50 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$ .

**7.10** Es extremadamente difícil airear el agua estancada. Considere el proceso que se muestra en la figura siguiente. Un tanque sellado consiste en agua líquida profunda y tranquila con gas oxígeno puro en el espacio superior. La temperatura y la presión del gas de oxígeno al 100% son  $298^\circ K$  y  $2 \text{ atm}$ , respectivamente. Inicialmente, la concentración de oxígeno disuelto del agua dentro del tanque es uniforme a  $10 \frac{\text{g}}{\text{m}^3}$ , el coeficiente de difusión del oxígeno disuelto en el agua es  $2.1 \times 10^{-5} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$  a  $298^\circ K$ , y la ley de Henry es constante para el oxígeno gaseoso en el agua líquida es de  $0.8 \frac{\text{atmm}^3}{\text{mol}}$  a  $298^\circ K$ . ¿Cuánto tiempo tardará la concentración de oxígeno disuelto en alcanzar los  $20 \frac{\text{g}}{\text{m}^3}$  a una profundidad de  $0,3 \text{ cm}$  desde la superficie del agua?



**7.11** El aluminio es el material conductor principal para la fabricación de dispositivos microelectrónicas. Considere la película delgada compuesta que se muestra en la figura siguiente. Se aplica una capa fina de aluminio sólido sobre una superficie de agua. Luego, se agrega una película delgada de silicio de  $0,5 \text{ micrómetros}$  sobre la deposición de vapor químico de silano de la película de aluminio. Este Si esta película sirve como capa eléctricamente aislante. Sin embargo, si se mantiene una temperatura alta durante el procesamiento, el aluminio puede difundirse en el

Si película delgada y cambia las características de los dispositivos micro electrónicos. Estime la concentración de Al a la mitad de la película delgada de Si si la temperatura se mantiene a  $1250^\circ K$

durante  $10 \text{ h}$ . Considere cuidadosamente si el proceso representa difusión dentro de un medio semi-infinito o un medio de dimensión finita. A  $1250^\circ K$ , la solubilidad máxima de Al en Si es de aproximadamente  $1\%$  en peso.

**7.12** Un cilindro poroso, de  $2,5 \text{ cm}$  de diámetro y  $80 \text{ cm}$  de largo, está saturado de alcohol. El espacio vacío en el sólido contiene suficientes poros para que la difusión molecular pueda tener lugar a través del líquido en el conducto. El cilindro se deja caer en un depósito grande

y bien agitado de agua pura. La agitación mantiene una concentración de 1% en peso de alcohol en la superficie del cilindro.

Si la concentración en el centro del cilindro cae del 30% en peso de alcohol al 18% en peso en 10 horas, determine la concentración en porcentaje en peso en el centro después de 15 horas.

**7.13** Un procedimiento común para aumentar el contenido de humedad del aire es burbujearlo a través de una columna de agua. Se supone que las burbujas de aire son esferas que tienen un radio de 1 mm y están en equilibrio térmico con agua a  $298^{\circ}\text{K}$ . Determine cuánto tiempo debe permanecer la burbuja en el agua para lograr una concentración de vapor en el centro que sea el 90% de la concentración máxima posible (saturación). Suponga que el aire está seco cuando entra en la columna de agua y que el aire dentro de la pequeña burbuja está estancado. La presión de vapor del agua está disponible en muchas fuentes, incluidas las tablas de corrientes.

**7.14** Una vara de roble rectangular, de 10 cm por 10 cm de ancho y 45 cm de largo que tiene un contenido de humedad uniforme inicial de 45% en peso, se coloca en un horno de secado donde se mantiene al 15% en peso. La velocidad de secado está controlada por la difusión interna del agua líquida a la superficie. Si el contenido máximo de humedad del poste seco se establece en 25% en peso, ¿cuánto tiempo se debe secar el poste cuando los extremos del poste están sellados con una barrera de vapor? En comparación, ¿cuánto tiempo se debe secar el mismo poste si las superficies laterales están selladas con una barrera de vapor y los extremos están expuestos?

A los efectos de este problema, puede asumir que la madera es un material anisotrópico. La difusividad de la humedad a través del roble es de  $1.04 \times 10^{-5} \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$  bajo las condiciones específicas de secado.

## TRANSFERENCIA DE MASA INTERFACIAL

### 8.- DIFERENTES TEORÍAS DE LA TRANSFERENCIA DE MASA INTERFACIAL

- TEORÍA DE LA DOBLE PELÍCULA
- TEORÍA DE LA PENETRACIÓN DE HIGBIE
- TEORÍA DE LA RENOVACIÓN DE LA SUPERFICIE

#### 8.1 COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA DE MASA INDIVIDUALES Y TOTALES EMPLEADOS EN LA ESTIMACIÓN DE LA RAPIDEZ DE TRANSFERENCIA DE MASA INTERFACIAL.

#### 8.2 TRANSFERENCIA DE MASA A TRAVÉS DE UNA COLUMNA DE ABSORCIÓN Y ESTIMACIÓN DE LA ALTURA Y NÚMERO DE UNIDADES DE TRANSFERENCIA.

### 8.- DIFERENTES TEORIAS DE LA TRANSFERENCIA DE MASA INTERFACIAL

#### TEORÍA DE LA DOBLE PELÍCULA

La transferencia de masa en la interface implica tres etapas de transferencia, la transferencia de masa desde las condiciones en el seno de una fase hasta la superficie interfásica, la transferencia a través de la interface hasta la segunda fase y, finalmente, la transferencia a las condiciones de una segunda fase. Con frecuencia, para explicar este proceso se utiliza una teoría de dos resistencias, sugerida en un principio por Whitman. La teoría tiene 2 hipótesis principales: la rapidez de transferencia de masa entre las dos fases está controlada por las rapidezces difusión a través de las fases a cada lado de la interfase y no se ofrece resistencia a la transferencia del componente que se difunde a través de la interfase. La

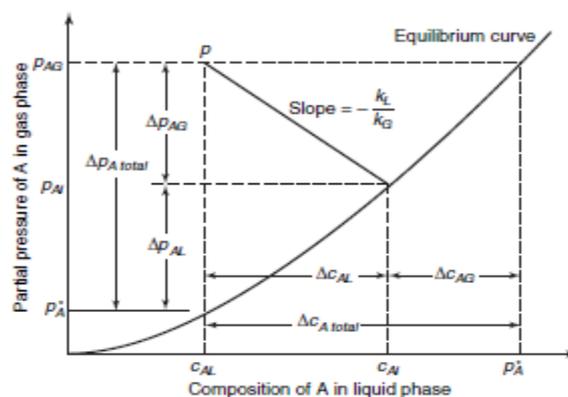
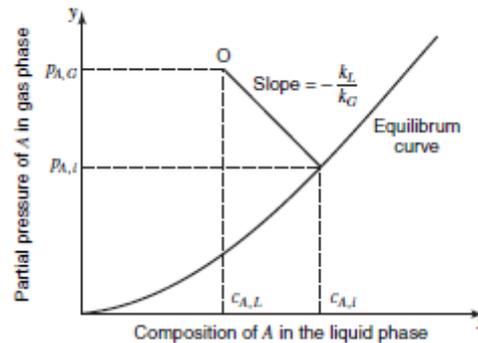
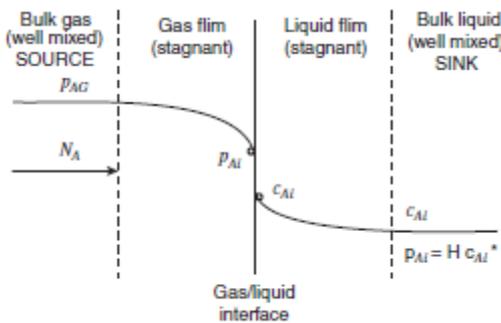


Figura 8.1 Gradientes de concentración entre dos fases de contacto. (Welty, 2015)

transferencia del componente  $A$  de la fase gaseosa a la fase líquida puede ilustrarse gráficamente como se indica en la figura 8.1, con un gradiente de presión parcial de la



**Figura 8.2 Composiciones interfaciales predichas por la teoría de las 2 resistencias. (Welty, 2015)**



**Figura 8.3 Fuerzas impulsoras de concentración para la teoría de las dos resistencias. (Welty, 2015)**

composición en el seno del gas,  $p_{A,G}$ , a la composición del gas en la interfaz,  $p_{A,i}$  y un gradiente de concentración en el líquido desde  $c_{A,i}$  en la interfase hasta la concentración en el seno del líquido,  $c_{A,L}$ . Si no existe resistencia a la transferencia de masa en la superficie interfasial,  $p_{A,i}$  y  $c_{A,i}$  son concentraciones de equilibrio; estos son los valores de la concentración que se obtendrían si las dos fases estuvieran en contacto durante un periodo de tiempo infinito. Las concentraciones  $p_{A,i}$  y  $c_{A,i}$  se relacionan por las relaciones termodinámicas en el equilibrio. La presión parcial interfasial,  $p_{A,i}$ , puede ser menor que, igual a, o mayor que  $c_{A,i}$  de acuerdo con las condiciones de equilibrio a la temperatura y presión del sistema. Cuando la transferencia es desde la fase líquida hasta la fase gaseosa,  $c_{A,L}$  será mayor que  $p_{A,i}$  y  $c_{A,i}$  y será mayor que  $p_{A,G}$ . (Welty, 2015, pág. 749)

## TEORÍA DE LA PENETRACIÓN DE HIGBIE

Higbie hizo hincapié en que en muchos casos es pequeño el tiempo de exposición de un fluido a la transferencia de masa, y que, por ende, no llega a desarrollarse el gradiente de concentración de la teoría de la película, característico del estado estacionario. (Treybal, 2012, pág. 68)

En realidad, su teoría fue concebida para describir el contacto entre dos fluidos, como en la figura 8.4. En esta, tal como Higbie lo describió en la figura 8.4(a), una burbuja de gas asciende a través de un líquido que absorbe al gas. Una partícula de líquido b, que se encuentra inicialmente en la parte superior de la burbuja, está en contacto con el gas durante el tiempo  $\theta$  que la burbuja requiere para ascender una distancia igual a su diámetro, mientras que la partícula líquida resbala a lo largo de la superficie de la burbuja. Una aplicación a los casos en los cuales el líquido este en movimiento turbulento, como en la figura 8.4(b), muestra un remolino b que asciende desde las profundidades turbulentas del líquido y que permanece expuesto un tiempo  $\theta$  a la acción del gas. En esta teoría, el tiempo de exposición se toma como una constante para todos los remolinos o partículas del líquido. (Treybal, 2012, pág. 68)

Al principio, la concentración del gas disuelto en el remolino es  $c_{A_0}$  invariablemente; se considera que internamente el remolino está estancado. Cuando el remolino se expone al gas en la superficie, la concentración en el líquido en la interfase gas-líquido es  $c_{A,i}$ , la cual puede tomarse como la solubilidad en el equilibrio del gas en el líquido. (Treybal, 2012, pág. 68)

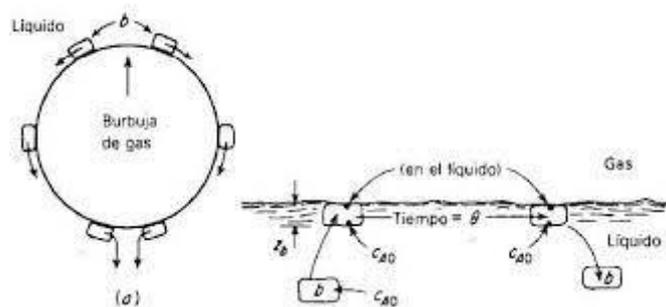


Figura 8.4(a) y Figura 8.4(b) Teoría de la penetración de Higbie. (Treybal, 2012)

$$\frac{\partial \vec{N}_{A,z}}{\partial z} + \frac{\partial c_A}{\partial t} = 0$$

Sustituyendo el flux de masa  $\vec{N}_{A,z} = -D_{AB} \frac{dc_A}{dz}$

$$-D_{AB} \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} + \frac{\partial c_A}{\partial t} = 0$$

Aplicando un cambio de variable y sustituyendo en la ecuación

$$\theta = c_A - c_{A_0} \quad (7.44)$$

$$D_{AB} \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} = \frac{\partial \theta}{\partial t}$$

La ecuación siguiente se resolverá mediante el método de transformada de Laplace por medio de una integral de la forma  $\delta\{f(t)\} = \int_0^\infty e^{-st} f(t) dt$  ocupando también el método de integración por partes como se muestra en las siguientes ecuaciones

$$\int_0^\infty e^{-st} \left( \frac{\partial \theta}{\partial t} \right) dt = D_{AB} \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} \quad (7.45)$$

El método de integración utilizado es el método de integración por partes el cual se presenta a continuación

Quedando la matriz de la siguiente manera

$$\left[ \begin{array}{ll} u = e^{-st} & dv = \left( \frac{\partial \theta}{\partial t} \right) dt \\ du = -se^{-st} dt & v = \theta(t) \end{array} \right]$$

Obteniendo la siguiente ecuación diferencial de 2do orden

Despejando y resolviendo

$$\frac{d^2 \theta}{dz^2} = \left( \frac{s}{D_{AB}} \right) \theta \quad (7.46)$$

Resolviendo la ecuación diferencial

Despejando los exponentes en la ecuación diferencial nos queda la siguiente ecuación

$$\frac{d\theta}{dz} = \pm \left( \frac{s}{D_{AB}} \right) \theta \quad (7.47)$$

y posteriormente la ecuación en monomios y procedemos a resolver las ecuaciones diferenciales por el método anteriormente mostrado  $y = c_1 e^{-\int \psi(x) dx} + c_2 e^{-\int P(x) dx}$ ,

$$\left\{ \frac{d\theta}{dz} - \left( \frac{s}{D_{AB}} \right) \theta \right\} \left\{ \frac{d\theta}{dz} + \left( \frac{s}{D_{AB}} \right) \theta \right\} \quad (7.48)$$

Obteniendo así la solución general de la ecuación diferencial antes mostrada y después por medio de la equivalencia entre funciones exponenciales y funciones trigonométricas obtenemos la solución general en términos de funciones trigonométricas hiperbólicas

$$\theta = \theta_1 + \theta_2 = c_1 e^{\left( \frac{s}{D_{AB}} \right) z} + c_2 e^{-\left( \frac{s}{D_{AB}} \right) z} \quad (7.49)$$

$$\theta = c_1 \cosh \left( \frac{s}{D_{AB}} \right) z + c_2 \sinh \left( \frac{s}{D_{AB}} \right) z \quad (7.50)$$

Cuando hay tiempos cortos de exposición y una difusión lenta en el líquido, las moléculas de soluto en solución nunca pueden alcanzar la profundidad  $z$  correspondiente al espesor del remolino; por ello, desde el punto de vista del soluto,  $z$  es básicamente infinito. Entonces, las condiciones en la ecuación (7.64) son

$$\begin{cases} c_{A_0} \text{ en } \theta = 0 \text{ para toda } z \\ c_{A,i} \text{ en } z = 0 \text{ para } \theta > 0 \\ c_{A_0} \text{ en } z = \infty \text{ para toda } \theta \end{cases}$$

Resolviendo la ecuación (7.64) y procediendo tal como se indicó con anterioridad respecto de una película descendente, se obtiene el flux promedio durante el tiempo de exposición.

$$\theta_1 = c_1 \cosh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)(0) + c_2 \sinh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)(0) \quad (7.52)$$

$$\theta_1 = \left(\frac{c_{A_s} - c_{A_0}}{s}\right) = c_1$$

$$\theta = \left(\frac{c_{A_s} - c_{A_0}}{s}\right) \cosh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z + c_2 \sinh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z$$

$$\theta = \left(\frac{c_{A_s} - c_{A_0}}{s}\right) \cosh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)(\infty) + c_2 \sinh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)(\infty)$$

$$c_2 = 0$$

$$\theta = \left(\frac{c_{A_s} - c_{A_0}}{s}\right) \cosh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z \quad (7.53)$$

En esta parte del cálculo aplicamos transformada inversa de Laplace con lo cual procedemos a obtener una función especial conocida como la función error

$$\left(\frac{c_A - c_{A_0}}{c_{A_s} - c_{A_0}}\right) = \delta^{-1} \left\{ \frac{\cosh\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z}{s} \right\} \quad (7.54)$$

$$\left(\frac{c_A - c_{A_0}}{c_{A_s} - c_{A_0}}\right) = \delta^{-1} \left( \frac{e^{-\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z}}{s} \right) = \text{erfc} \left( \frac{z}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}} \right)$$

$$\left(\frac{c_A - c_{A_0}}{c_{A_s} - c_{A_0}}\right) = \text{erfc} \left( \frac{z}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}} \right) = 1 - \text{erf} \left( \frac{z}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}} \right) \quad (7.55)$$

Reacomodando los términos de concentración obtenemos la siguiente ecuación la cual relaciona la función especial error con un determinado perfil de concentraciones

$$\left(\frac{c_{A_s} - c_A}{c_{A_s} - c_{A_0}}\right) = \text{erf} \left( \frac{z}{2(tD_{AB})^{\frac{1}{2}}} \right) \quad (7.56)$$

Despejando la concentración central para posteriormente derivar con respecto a  $z$

$$c_A = \left( \frac{c_{A_s} - c_{A_o}}{s} \right) \cosh \left( \frac{s}{D_{AB}} \right) z + c_{A_o} \quad (7.57)$$

$$\frac{dc_A}{dz} = \left( \frac{s}{D_{AB}} \right) \left( \frac{c_{A_s} - c_{A_o}}{s} \right) \sinh \left( \frac{s}{D_{AB}} \right) z \quad (7.58)$$

Nuevamente aplicando transformada inversa de Laplace a la ecuación  $\delta^{-1} \left\{ \frac{e^{-\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z}}{s^2} \right\}$

$$\frac{dc_A}{dz} = \left( \frac{s}{D_{AB}} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{c_{A_s} - c_{A_o}}{s} \right) \sinh \left( \frac{s}{D_{AB}} \right) z$$

$$\frac{dc_A}{dz} = D_{AB}^{-\frac{1}{2}} (c_{A_s} - c_{A_o}) \delta^{-1} \left\{ \frac{e^{-\left(\frac{s}{D_{AB}}\right)z}}{s^2} \right\}$$

$$\frac{dc_A}{dz} = \frac{D_{AB}^{-\frac{1}{2}} (c_{A_s} - c_{A_o}) e^{-\frac{z^2}{4D_{AB}t}}}{\sqrt{\pi t}}$$

$$\overrightarrow{N_{A,z=0}} = -D_{AB} \left( \frac{dc_A}{dz} \right)_{z=0} = \frac{D_{AB}^{\frac{1}{2}} (c_{A_s} - c_{A_o})}{\sqrt{\pi t}} \quad (7.59)$$

Para obtener así el flux molar

$$\int_0^t \overrightarrow{N_{A,z=0}} dt = \frac{D_{AB}^{\frac{1}{2}} (c_{A_s} - c_{A_o})}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{dt}{\sqrt{t}}$$

$$\int_0^t \overrightarrow{N_{A,z=0}} dt = \frac{2D_{AB}^{\frac{1}{2}} (c_{A_s} - c_{A_o}) t^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{\pi}} \quad (7.60)$$

$$k_L = \sqrt{\frac{D_{AB}}{\pi \theta}} \quad (8.1)$$

Con  $k_L$  proporcional a  $D_{AB}^{\frac{1}{2}}$  para diferentes solutos en las mismas circunstancias. La dependencia indicada de  $D_{AB}$  es típica de los tiempos cortos de exposición, en donde la profundidad de la penetración del soluto es pequeña con respecto a la profundidad de la fosa absorbente. (Treybal, 2012, pág. 69)

## TEORÍA DE LA RENOVACIÓN DE LA SUPERFICIE

### TEORÍA DE LA RENOVACIÓN DE LA SUPERFICIE DE DANCKWERTS

Señalo que la teoría de Higbie, con su tiempo constante de exposición de los remolinos de fluido en la superficie, es un caso especial de lo que puede ser un panorama más realista, en donde los remolinos estén expuestos a diferentes intervalos de tiempo. La interfase líquido-gas es entonces un mosaico de los elementos superficiales con diferentes registros de tiempo de exposición, la rapidez promedio por unidad de área superficial debe determinarse sumando los valores individuales. Danckwerts supuso que la posibilidad de que un elemento de la superficie fuera reemplazado por otro casi no dependía del tiempo que hubiese permanecido en la superficie; luego, tomando a  $S$  como la rapidez fraccionaria de reemplazo de los elementos, Danckwerts encontró (Treybal, 2012, pág. 70)

$$N_{A,pr} = (c_{A,i} - c_{A,0})\sqrt{D_{AB}S} \quad (8.2)$$

$$k_{L,pr} = \sqrt{D_{AB}S} \quad (8.3)$$

Danckwerts señalo que todas las teorías de este tipo, derivadas de las condiciones originales a la frontera en la ecuación (7.1), llevan a  $k_{L,pr}$  proporcional a  $D_{AB}^{0.5}$ , sin importar la naturaleza de la rapidez de renovación de la superficie  $S$  que se aplique. Subsecuentemente, ha habido muchas modificaciones a este enfoque. (Treybal, 2012, pág. 70)

### TEORÍA COMBINADA DE LA RENOVACIÓN DE LA SUPERFICIE DE LA PELÍCULA DE DOBBINS

Dobbins se interesó en la rapidez con que absorben oxígeno los arroyos y ríos en movimiento; señalo que la teoría de la película ( $k_L \propto D_{AB}$ ) supone que los elementos superficiales están lo suficientemente expuestos para que el perfil de concentración dentro de la película sea característico del estado estacionario; asimismo, indico que las teorías de penetración y de renovación de la superficie  $k_L \propto D_{AB}^{0.5}$  suponen, por el contrario, que los elementos superficiales se encuentran a una profundidad infinita y que el soluto, que se está difundiendo, nunca alcanza la región inferior de concentración constante. La dependencia observada,  $k \propto D_{AB}^n$  con  $n$  dependiente de las circunstancias, puede explicarse permitiendo que los elementos superficiales o remolinos tengan una profundidad finita. (Treybal, 2012, pág. 70)

De acuerdo con lo anterior, reemplazo la tercera condición a la frontera en la ecuación (7.64) por  $c_A = c_{A_0}$  para  $z = z_b$  en donde  $z_b$  es finita. Utilizando la rapidez de renovación de los elementos superficiales de Danckwerts, obtuvo

$$k_{L,pr} = \sqrt{D_{AB} \text{Sc} \text{th}} \sqrt{\frac{sz_b^2}{D_{AB}}} \quad (8.4)$$

Para penetración rápida  $D_{AB}$  es grande, para la rapidez de renovación superficial pequeña (s pequeña) o para elementos superficiales de poco espesor, los coeficientes de transferencia de masa adquieren el carácter descrito por la teoría de la película; por el contrario, para penetración lenta o renovación rápida, se sigue la ecuación (8.2). En consecuencia  $k \propto D_{AB}^n$ , en donde  $n$  puede tomar cualquier valor entre los límites 0.5 y 1.0, lo cual explicaría muchas observaciones. Torr y Marchello han hecho sugerencias similares. King ha propuesto modificaciones que integran la noción de renovación superficial con un amortiguamiento de las difusividades de remolino cerca de la superficie ocasionando esto por la tensión superficial; estas llevan a valores  $n$  menores de 0.5. (Treybal, 2012, pág. 70)

## 8.1 COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA DE MASA INDIVIDUALES Y TOTALES EMPLEADOS EN LA ESTIMACIÓN DE LA RAPIDEZ DE TRANSFERENCIA DE MASA INTERFACIAL

### COEFICIENTES INDIVIDUALES DE TRANSFERENCIA DE MASA

Si el estudio se limita solamente a la transferencia del componente  $A$  en estado estacionario, las rapidezces de difusión en la dirección ( $z$ ) a cada lado de la interfase pueden describirse por medio de las ecuaciones

$$N_A = k_G(p_{A,G} - p_{A,i}) \quad (8.5)$$

y

$$N_A = k_L(c_{A,i} - c_{A,L}) \quad (8.6)$$

donde  $k_G$  es el coeficiente convectivo de transferencia de masa en la fase gaseosa, en  $\left[ \frac{\text{moles de } A \text{ transferidos}}{(\text{tiempo})(\text{Area interfacial})(\Delta p_A \text{ unidades de concentracion})} \right]$ ; y  $k_L$  es el coeficiente convectivo de transferencia de masa en la fase líquida, en  $\left[ \frac{\text{moles de } A \text{ transferidos}}{(\text{tiempo})(\text{Area interfacial})(\Delta C_A \text{ unidades de concentracion})} \right]$ . La diferencia de presión parcial,  $(p_{A,G} - p_{A,i})$ , es la fuerza impulsora necesaria para transferir el componente  $A$  desde las condiciones en el seno del gas hasta la interfase que separa las dos fases. La diferencia de

concentración,  $(c_{A,i} - c_{A,L})$ , es la fuerza impulsora necesaria para continuar la transferencia de  $A$  a la fase líquida. (Welty, 2015, pág. 750)

Tabla 8.1 coeficientes individuales de transferencia de masa (Welty, 2015)

Gas phase		
Rate equation		Units of coefficient
Diffusion of $A$ through nondiffusing $B$	Equimolar counterdiffusion	
$N_A = k_G \Delta p_A$	$N_A = k_G^0 \Delta p_A$	$\frac{\text{moles of } A \text{ transferred}}{(\text{time})(\text{area})(\text{pressure})}$
$N_A = k_c \Delta c_A$	$N_A = k_c^0 \Delta c_A$	$\frac{\text{moles of } A \text{ transferred}}{(\text{time})(\text{area})(\text{mol/volume})}$
$N_A = k_y \Delta y_A$	$N_A = k_y^0 \Delta y_A$	$\frac{\text{moles of } A \text{ transferred}}{(\text{time})(\text{area})(\text{mole fraction})}$
$N_A = k_Y \Delta Y_A$		$\frac{\text{moles of } A \text{ transferred}}{(\text{time})(\text{area})(\text{mole } A/\text{mol } B)}$
$n_A = k_H \Delta \mathcal{H}_A$		$\frac{\text{mass of } A \text{ transferred}}{(\text{time})(\text{area})(\text{mass } A/\text{mass } B)}$
Gas phase		
	$k_G = \frac{k_y}{P} = \frac{k_c}{RT}$	$k_G^0 = \frac{k_G P_{B,lm}}{P}$
	$k_G^0 = \frac{k_y^0}{P} = \frac{k_c^0}{RT}$	$k_y^0 = k_y \frac{P_{B,lm}}{P}$
	$\mathcal{H} = \text{the specific humidity}$	$k_c^0 = k_c \frac{P_{B,lm}}{P} = k_c \frac{c_{B,lm}}{c}$
Liquid phase		
Rate equation		Units of coefficient
Diffusion of $A$ through nondiffusing $B$	Equimolar counterdiffusion	
$N_A = k_L \Delta c_A$	$N_A = k_L^0 \Delta c_A$	$\frac{\text{moles of } A \text{ transferred}}{(\text{time})(\text{area})(\text{mole/volume})}$
$N_A = k_x \Delta x_A$	$N_A = k_x^0 \Delta x_A$	$\frac{\text{moles of } A \text{ transferred}}{(\text{time})(\text{area})(\text{mole fraction})}$
	$k_L = \frac{k_x}{c}$	$k_L^0 = k_L \frac{c_{B,lm}}{c} = k_L x_{B,lm}$
	$k_L^0 = \frac{k_x^0}{c}$	$k_x^0 = k_x x_{B,lm}$

Bajo condiciones de estado estacionario, el flujo de masa de una fase debe ser igual al flujo de masa en la segunda fase. Al combinar las ecuaciones (8.6) y (8.7), se obtiene

$$N_{A,z} = k_G(p_{A,G} - p_{A,i}) = k_L(c_{A,i} - c_{A,L}) \quad (8.7)$$

La relación de los dos coeficientes convectivos de transferencia de masa puede obtenerse al reordenar la ecuación (8.6) (Welty, 2015, pág. 750)

$$-\frac{k_L}{k_G} = \frac{(p_{A,G} - p_{A,i})}{(c_{A,i} - c_{A,L})} \quad (8.8)$$

### COEFICIENTES TOTALES DE TRANSFERENCIA DE MASA

Puede definirse un coeficiente total de transferencia de masa en términos de una fuerza impulsora de presión parcial. Este coeficiente,  $K_G$ , debe tomar en cuenta toda la resistencia difusional en ambas fases; se halla definido por

$$\vec{N}_{A,z} = K_G(p_{A,G} - p_A^*) \quad (8.9)$$

donde  $p_{A,G}$  es la composición en el seno de la fase gaseosa;  $p_A^*$  es la presión parcial de  $A$  en equilibrio con la composición aparente en la fase líquida,  $c_{A,L}$  y  $K_G$  es el coeficiente total de transferencia de masa basado en una fuerza impulsora de presión parcial, en  $\left[ \frac{\text{moles de } A \text{ transferidos}}{(\text{tiempo})(\text{area interfacial})(\text{presion})} \right]$ . Puesto que la distribución del soluto  $A$  en el equilibrio entre las fases gaseosa y líquida es única a la temperatura y presión del sistema, entonces  $p_A^*$ , en equilibrio con  $c_{A,L}$ , es una medida de  $c_{A,L}$  tan buena como la misma  $c_{A,L}$  y se encuentra en la misma base que  $p_{A,G}$ . Un coeficiente total de transferencia de masa,  $K_L$ , que incluye la resistencia a la difusión en ambas fases en términos de la fuerza impulsora de la concentración en la fase líquida, se define por (Welty, 2015, pág. 753)

$$\vec{N}_{A,z} = K_L(c_A^* - c_{A,L}) \quad (8.10)$$

donde  $c_A^*$  es la concentración de  $A$  en equilibrio con  $p_{A,G}$  y de acuerdo con esto, es una buena medida de  $p_{A,G}$ ;  $K_L$  es el coeficiente total de transferencia de masa basado en una fuerza impulsora por la concentración del líquido, en  $\left( \frac{\text{moles de } A \text{ transferidos}}{(\text{tiempo})(\text{area interfacial})(\frac{\text{moles}}{\text{volumen}})} \right)$ . La figura 8.3 ilustra las fuerzas impulsoras asociadas con cada fase y las fuerzas impulsoras totales. La relación de la resistencia en una fase individual a la resistencia total puede determinarse por

$$\frac{\text{Resistencia en la fase gaseosa}}{\text{Resistencia total en ambas fases}} = \frac{\Delta p_{A,\text{película de gas}}}{\Delta p_{A,\text{Total}}} = \frac{\frac{1}{k_G}}{\frac{1}{K_G}} \quad (8.11)$$

y

$$\frac{\text{Resistencia en la fase líquida}}{\text{Resistencia total en ambas fases}} = \frac{\Delta p_{A,\text{película de líquido}}}{\Delta p_{A,\text{Total}}} = \frac{\frac{1}{k_L}}{\frac{1}{K_L}} \quad (8.12)$$

Cuando la relación de equilibrio es lineal como lo expresa (Welty, 2015, pág. 754)

$$p_{A,i} = mc_{A,i} \quad (8.13)$$

Puede obtenerse una relación entre tales coeficientes totales y coeficientes individuales de las fases. Esta condición siempre se encuentra a bajas concentraciones, en donde se obedece la ley de Henry,  $H$ . al utilizar la ecuación (8.12), pueden relacionarse las concentraciones de la fase gaseosa y líquida por medio de

$$p_{A,G} = mc_A^* \quad (8.14)$$

$$p_A^* = mc_{A,L} \quad (8.15)$$

$$p_{A,i} = mc_{A,i} \quad (8.16)$$

Al reordenar la ecuación (8.8), se obtiene

$$\frac{1}{K_G} = \left( \frac{p_{A,G} - p_A^*}{N_{A,z}} \right) = \left( \frac{(p_{A,G} - p_{A,i})}{N_A} + \frac{p_{A,i} - p_A^*}{N_{A,z}} \right) \quad (8.17)$$

O en términos de (m),

$$\frac{1}{K_G} = \frac{(p_{A,G} - p_{A,i})}{N_{A,z}} + \frac{m(c_{A,i} - c_{A,L})}{N_{A,z}} \quad (8.18)$$

Al sustituir las ecuaciones (8.4) y (8.5) en la ecuación anterior,  $K_G$  se relaciona con los coeficientes de las fases individuales por la expresión

$$\frac{1}{K_G} = \frac{1}{k_G} + \frac{m}{k_L} \quad (8.19)$$

De la siguiente manera puede describirse una expresión similar para  $K_L$ :

$$\frac{1}{K_L} = \frac{(c_A^* - c_{A,L})}{N_{A,z}} = \frac{(p_{A,G} - p_{A,i})}{mN_{A,z}} + \frac{(c_{A,i} - c_{A,L})}{N_{A,z}} \quad (8.20)$$

$$\frac{1}{K_L} = \frac{1}{mk_G} + \frac{1}{k_L} \quad (8.21)$$

### EJEMPLO 1 (Welty, 2015, pág. 756)

En un estudio experimental de la absorción de amoníaco en agua en una columna de pared húmeda, se encontró que el valor de  $K_G$  es de  $0.205 \text{ lbmol/hrpie}^2 \text{ atm}$ . En un punto de la columna, el gas contenía 8% en mol de  $NH_3$  y la concentración de la fase líquida fue de  $0.004 \frac{\text{lbmol de } NH_3}{\text{pie}^3 \text{ solución}}$ . La temperatura fue de  $68^\circ F$  y la presión total de  $1 \text{ atm}$ . Se encontró que el 85% de la resistencia total a la transferencia de masa correspondía a la fase gaseosa. Si la constante de Henry a  $68^\circ F$  es  $0.215 \frac{\text{atm}}{\text{lbmol de } NH_3 \text{ solución}}$ , calcular los coeficientes de película individuales y las composiciones interfaciales.

De acuerdo con la ecuación (8.10), la resistencia total en ambas fases es

$$\frac{1}{K_G} = \frac{1}{0.205 \text{ lbmol/hrpie}^2 \text{ atm}} = \left( 4.88 \frac{\text{hrpie}^2 \text{ atm}}{\text{lbmol de NH}_3} \right)$$

Puesto que la resistencia en la fase gaseosa,  $\frac{1}{k_G}$  es el 85% de la resistencia total, el coeficiente individual de la fase gaseosa puede evaluarse por medio de

$$\frac{1}{k_G} = (0.85) \left( 4.88 \frac{\text{hrpie}^2 \text{ atm}}{\text{lbmol}} \right) = \left( 4.15 \frac{\text{hrpie}^2 \text{ atm}}{\text{lbmol de NH}_3} \right)$$

y

$$k_G = \frac{1}{\left( 4.15 \frac{\text{hrpie}^2 \text{ atm}}{\text{lbmol de NH}_3} \right)} = 0.241 \frac{\text{lbmol de NH}_3}{\text{hrpie}^2 \text{ atm}}$$

El coeficiente de la fase líquida,  $k_L$ , puede evaluarse de la siguiente manera:

$$\frac{1}{K_G} = \frac{1}{k_G} + \frac{m}{k_L}$$

o

$$\left( 4.88 \frac{\text{hrpie}^2 \text{ atm}}{\text{lbmol de NH}_3} \right) = \left( 4.15 \frac{\text{hrpie}^2 \text{ atm}}{\text{lbmol de NH}_3} \right) + \frac{\left( 0.215 \frac{\text{atm}}{\text{lbmol de NH}_3} \right)}{k_L \frac{\text{pie}^3_{\text{solucion}}}}{k_L}$$

$$\frac{1}{k_L} = \frac{\left( 0.73 \frac{\text{hrpie}^2 \text{ atm}}{\text{lbmol de NH}_3} \right)}{\left( 0.215 \frac{\text{atm}}{\text{lbmol de NH}_3} \right)} = 3.3953 \left( \frac{\text{hrpie}^2}{\text{lbmol de NH}_3} \right) \left( \frac{\text{pie}^3_{\text{solucion}}}{\text{lbmol de NH}_3} \right)$$

$$k_L = \frac{\left( 0.215 \frac{\text{atm}}{\text{lbmol de NH}_3} \right)}{\left( 0.73 \frac{\text{hrpie}^2 \text{ atm}}{\text{lbmol de NH}_3} \right)} = 0.294 \left( \frac{\text{lbmol de NH}_3}{\text{hrpie}^2} \right) \left( \frac{\text{lbmol de NH}_3}{\text{pie}^3_{\text{solucion}}} \right)$$

En un punto de la columna, la concentración es totales de ambas fases son

$$p_{A,G} = y_A P = (0.08)(1 \text{ atm}) = 0.08 \text{ atm}$$

y

$$c_{A,L} = 0.004 \frac{\text{lbmol de } NH_3}{\text{pie}^3_{\text{solucion}}}$$

Al introducir la constante de la ley de Henry, se encuentra que la presión parcial  $p_A^*$ , en equilibrio con la concentración en el seno del líquido, es

$$p_A^* = mc_{A,L} = \left( 0.215 \frac{\text{atm}}{\frac{\text{lbmol de } NH_3}{\text{hrpie}^3_{\text{solucion}}}} \right) \left( 0.004 \frac{\text{lbmol de } NH_3}{\text{pie}^3_{\text{solucion}}} \right) = 0.00086 \text{ atm}$$

El flujo de masa, como lo expresa la ecuación (8.8), se transforma en

$$\vec{N}_A = K_G(p_{A,G} - p_A^*) = \left( 0.205 \frac{\text{lbmol de } NH_3}{\text{hrpie}^2 \text{ atm}} \right) (0.08 - 0.00086) \text{ atm} = 1.62 \times 10^{-2} \frac{\text{lbmol}}{\text{hrpie}^2}$$

La composición interfásial puede determinarse utilizando las ecuaciones (8.4) y (8.5), como sigue:

$$\vec{N}_{A,z} = k_G(p_{A,G} - p_{A,i})$$

Por lo tanto

$$\left( 1.62 \times 10^{-2} \frac{\text{lbmol}}{\text{hrpie}^2} \right) = \left( 0.241 \frac{\text{lbmol de } NH_3}{\text{hrpie}^2 \text{ atm}} \right) (0.08 - p_{A,i}) \text{ atm}$$

$$-\frac{\left( 1.62 \times 10^{-2} \frac{\text{lbmol}}{\text{hrpie}^2} \right)}{\left( 0.241 \frac{\text{lbmol de } NH_3}{\text{hrpie}^2 \text{ atm}} \right)} + 0.08 \text{ atm} = p_{A,i} = 0.01280 \text{ atm}$$

$$\vec{N}_{A,z} = k_L(c_{A,i} - c_{A,L})$$

$$\left( 1.62 \times 10^{-2} \frac{\text{lbmol}}{\text{hrpie}^2} \right) = \left[ 0.294 \left( \frac{\text{lbmol de } NH_3}{\text{hrpie}^2} \right) \left( \frac{\text{lbmol de } NH_3}{\text{pie}^3_{\text{solucion}}} \right) \right] \left( c_{A,i} - 0.004 \frac{\text{lbmol de } NH_3}{\text{pie}^3_{\text{solucion}}} \right)$$

$$\frac{\left( 1.62 \times 10^{-2} \frac{\text{lbmol}}{\text{hrpie}^2} \right)}{\left[ 0.294 \left( \frac{\text{lbmol de } NH_3}{\text{hrpie}^2} \right) \left( \frac{\text{lbmol de } NH_3}{\text{pie}^3_{\text{solucion}}} \right) \right]} + 0.004 \frac{\text{lbmol de } NH_3}{\text{pie}^3_{\text{solucion}}} = c_{A,i} = 0.117 \frac{\text{lbmol de } NH_3}{\text{pie}^3_{\text{solucion}}}$$

$$c_{A,i} = 0.117 \frac{\text{lbmol de } NH_3}{\text{pie}^3_{\text{solucion}}}$$

## ECUACIONES DE LA LINEA DE OPERACIÓN

### FLUJO A CONTRACORRIENTE

Considérese cualquier operación de transferencia de masa en estado estacionario que implique el contacto a contracorriente de dos fases insolubles como se muestra esquemáticamente en la figura (8.10). Las dos fases insolubles se identificarán como fase  $G$  y fase  $L$ . (Welty, 2015, pág. 797).

En el fondo de la torre de transferencia de masa, se definen las rapidezces de flujo y las concentraciones en la siguiente forma:

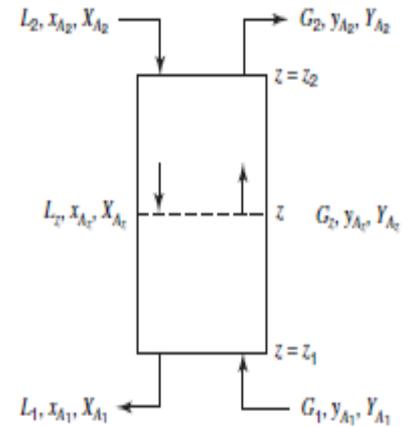


Figura 8.9 Proceso a contracorriente en estado estacionario. (Welty, 2015)

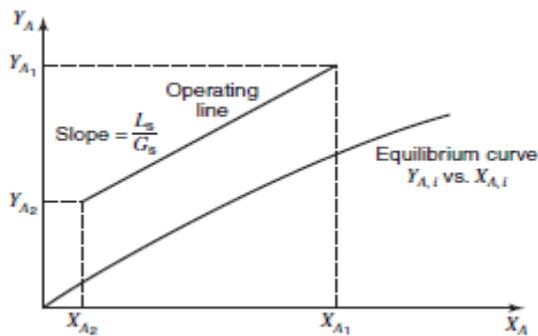


Figura 8.10 Proceso a contracorriente es estado estacionario, transferencia de la fase  $G$  a la fase  $L$ . (Welty, 2015)

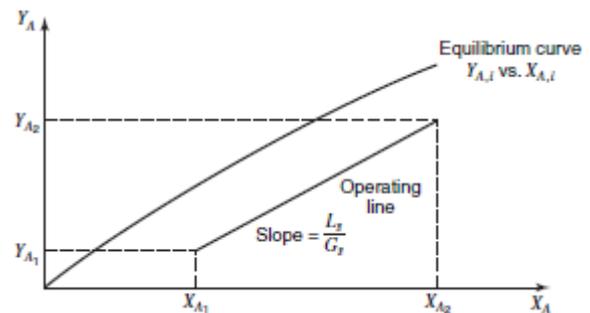


Figura 8.11 Proceso a contracorriente en estado estacionario, transferencia de la fase  $L$  a la fase  $G$ . (Welty, 2015)

$G_1$  = Son los moles totales de la fase  $G$  que entran a la torre por hora por área transversal de la torre;

$L_1$  = Son los moles totales de la fase  $L$  que salen de la torre por hora por área de la sección transversal de la torre;

$y_{A_1}$  = Es la fracción mol del componente  $A$  en  $G_1$ , expresada en moles de  $A$  por los moles totales de la fase  $G$ ;

$x_{A_1}$  = Es la fracción mol del componente  $A$  en  $L_1$ , expresada como moles de  $A$  por los moles totales de la fase  $L$ . (Welty, 2015, pág. 797)

De manera semejante, en la parte superior de la torre, o sea en el plano  $z_2$ , el total de moles de cada fase será  $G_2$  y  $L_2$  y las composiciones de cada fase serán  $y_{A_2}$  y  $x_{A_2}$ . Un balance de

masa macroscópico total del componente  $A$  en el intercambiador de masa en estado estacionario, cuando no existe producción o desaparición química de  $A$ , requiere que

$$[\text{moles de } A \text{ que entran a la torre}] = [\text{moles de } A \text{ que salen de la torre}]$$

$$G_1 y_{A_1} + L_1 x_{A_1} = G_2 y_{A_2} + L_2 x_{A_2} \quad (8.22)$$

Un balance de masa del componente  $A$  en el plano  $z = z_1$  y el plano arbitrario ( $z$ ) estipula que

$$G_1 y_{A_1} + L_z x_{A_z} = G_z y_{A_z} + L_2 x_{A_2} \quad (8.23)$$

Pueden expresarse relaciones más simples y ciertamente ecuaciones más fáciles de utilizar, en términos de unidades de concentración libres de soluto. La concentración de cada fase se definirá de la siguiente forma:  $Y_A$  son los moles de  $A$  en  $G$  por mol de  $A$  libre de  $G$ ; es decir,

$$Y_A = \frac{y_A}{1 - y_A} \quad (8.24)$$

y  $X_A$  son los moles de  $A$  en  $L$  por mol de  $A$  libre de  $L$ ; es decir,

$$X_A = \frac{x_A}{1 - x_A} \quad (8.25)$$

$$G_1 y_{A_1} + L_1 x_{A_1} = G_2 y_{A_2} + L_2 x_{A_2} \quad (8.26)$$

$$\left[ \begin{array}{ll} L_s = L_1(1 - x_{A_1}) & L_s = L_2(1 - x_{A_2}) \\ G_s = G_1(1 - y_{A_1}) & G_s = G_2(1 - y_{A_2}) \end{array} \right] \quad (8.27)$$

$$G_s \left( \frac{y_{A_1}}{(1 - y_{A_1})} \right) + L_s \left( \frac{x_{A_1}}{(1 - x_{A_1})} \right) = G_s \left( \frac{y_{A_2}}{(1 - y_{A_2})} \right) + L_s \left( \frac{x_{A_2}}{(1 - x_{A_2})} \right) \quad (8.28)$$

$$G_s \left( \frac{y_{A_1}}{(1 - y_{A_1})} \right) - G_s \left( \frac{y_{A_2}}{(1 - y_{A_2})} \right) = L_s \left( \frac{x_{A_2}}{(1 - x_{A_2})} \right) - L_s \left( \frac{x_{A_1}}{(1 - x_{A_1})} \right) \quad (8.29)$$

$$G_s Y_{A_1} + L_s X_{A_2} = G_s Y_{A_2} + L_s X_{A_1} \quad (8.30)$$

o

$$G_s (Y_{A_1} - Y_{A_2}) = L_s (X_{A_1} - X_{A_2})$$

Al reordenar, se obtiene

$$\frac{L_s}{G_s} = \frac{(Y_{A_1} - Y_{A_2})}{(X_{A_1} - X_{A_2})} \quad (8.31)$$

La ecuación (8.40) es una ecuación de una línea recta que pasa a través de los puntos  $(X_{A_1}, Y_{A_1})$  y  $(X_{A_2}, Y_{A_2})$  con una pendiente  $-\frac{L_S}{G_S}$ . Un balance de masa del componente  $A$  entre el plano  $z_1$  y el plano arbitrario  $z = z$  en términos libres de soluto es

$$G_S Y_{A_1} + L_S X_{A_z} = G_S Y_{A_z} + L_S X_{A_1} \quad (8.32)$$

o

$$G_S(Y_{A_1} - Y_{A_z}) = L_S(X_{A_1} - X_{A_z})$$

Al reordenar, se obtiene (Welty, 2015, pág. 799)

$$\frac{L_S}{G_S} = \frac{(Y_{A_1} - Y_{A_z})}{(X_{A_1} - X_{A_z})} \quad (8.33)$$

Como antes la ecuación (8.42) es una ecuación de la línea recta, que pasa a través de los puntos  $(X_{A_1}, Y_{A_1})$  y  $(X_{A_2}, Y_{A_2})$  con una pendiente  $\frac{L_S}{G_S}$ . Dos líneas rectas que tienen la misma pendiente y un punto en común se encuentran sobre la misma recta. Por lo tanto, la ecuación (8.40) es una expresión general que relaciona las composiciones aparentes de las dos fases en cualquier plano en el intercambiador de masa. Puesto que define las condiciones de operación dentro del equipo, se identifica como ecuación de la línea de operación para las operaciones a contracorriente. En los estudios de la transferencia de interfaces, el punto  $O$  de la figura (8.2) es uno de los muchos puntos que se encuentran sobre la línea de operación. Las figuras (8.10) y (8.11) muestran la ubicación de la línea de operación en relación con la línea de equilibrio cuando la transferencia es de la fase  $G$  a la fase  $L$  y de la fase  $L$  a la fase  $G$ . Es fácil obtener un balance de masa para el componente  $A$  en la longitud diferencial  $dz$  al diferenciar la ecuación (8.42). Esta ecuación diferencial,

$$L_S dX_A = G_S dY_A \quad (8.34)$$

relaciona las moles transferidas de una fase a la segunda fase por hora por área de sección transversal disponible en la sección  $dz$ .

#### EJEMPLO 4 (Welty, 2015, pág. 802)

Se va a absorber amoníaco en aire a  $68^\circ F$  y presión atmosférica a contracorriente en una torre empacada que utiliza agua a  $68^\circ F$  como absorbente. Se utilizará una rapidez de entrada del gas de  $1540 \frac{\text{pie}^3}{\text{hora}}$  y una rapidez de agua libre de amoníaco de  $75 \frac{\text{lbm}}{\text{hr}}$ . Si la

$X \frac{\text{kg mol NH}_3}{\text{kg mol H}_2\text{O}}$	0.0164	0.0252	0.0349	0.0455	0.0722
$Y \frac{\text{kg mol NH}_3}{\text{kg mol H}_2\text{O}}$	0.021	0.032	0.042	0.053	0.08

concentración de amoníaco,  $NH_3$ , se reduce de 3.52% a 1.29% en volumen, determinar la

relación  $\frac{\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{real}}{\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{minima}}$ . Los datos de equilibrio para el sistema a  $68^\circ F$  y  $1 atm$  son:

$$GA = \frac{VP}{RT} = \frac{\left(1540 \frac{pie^3}{hora}\right) (1 atm)}{\left(0.73 \frac{atmpie^3}{lbmol^\circ R}\right) (528^\circ R)} = 4 \frac{lbmol}{hr}$$

El gas que entra a la torre con una fracción mol de amoníaco igual a 0.0352. Si el área transversal de la torre se escoge como  $A pie^2$ , los moles de la fase G en una base libre de soluto pueden evaluarse como

$$G_S = G_1(1 - y_{A_1}) = \left(4 \frac{lbmol}{hr}\right) \left(\frac{(1 - 0.0352)}{A pie^2}\right) = 3.85 \frac{lbmol}{Ahrpie^2}$$

Los moles de la fase L en una base libre de soluto son

$$L_S = \left(75 \frac{lbm}{hr}\right) \left(\frac{lbmol}{18 lbm}\right) \left(\frac{1}{A pie^2}\right) = 4.17 \frac{lbmol}{A hr pie^2}$$

La relación de los valores reales  $L_S$  a  $G_S$  se evalúa como

$$\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{real} = \left(\frac{4.17 \frac{lbmol}{A hr pie^2}}{3.85 \frac{lbmol}{Ahrpie^2}}\right) = 1.08 \frac{lbmol \text{ de fase L libre de } NH_3}{lbmol \text{ de fase G libre de } NH_3}$$

Las composiciones de las corrientes conocidas,  $G_1$ ,  $G_2$  y  $L_2$ , en una base libre de soluto, se evalúan a partir de las fracciones mol conocidas como

$$(Y_{NH_3})_1 = \frac{(y_{NH_3})_1}{1 - (y_{NH_3})_1} = \frac{0.0352}{0.9648} = 0.0365$$

y

$$(Y_{NH_3})_2 = \frac{(y_{NH_3})_2}{1 - (y_{NH_3})_2} = \frac{0.0129}{0.9871} = 0.0131$$

$$(X_{NH_3})_2 = 0.0$$

La composición de salida,  $(X_{NH_3})_1$ , puede evaluarse por (Welty, 2015, pág. 803)

$$G_S(Y_{A_1} - Y_{A_2}) = L_S(X_{A_1} - X_{A_2})$$

$$3.85 \frac{lbmol}{Ahrpie^2} (0.0365 - 0.0131) = 4.17 \frac{lbmol}{A hr pie^2} (X_{A_1} - 0)$$

$$(X_{NH_3})_1 = 0.0216$$

La composición de la solución de equilibrio con  $(Y_{NH_3})_1 = 0.0365$  se obtiene a partir de las curvas de equilibrio como  $(X_{NH_3})_1 = 0.0216$ .

En la figura 8.10 aparecen las líneas de operación real y mínima. La pendiente de la línea de operación mínima

$$\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{minima} = \frac{(Y_{A1} - Y_{A2})}{(X_{A1} - X_{A2})} = \left(\frac{0.0365 - 0.0131}{0.0296 - 0}\right) = 0.79 \frac{\text{lbmol de fase L libre de NH}_3}{\text{lbmol de fase G libre de NH}_3}$$

La relación deseada,  $\left[\frac{\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{real}}{\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{minima}}\right]$ , es entonces una relación de los 2 valores  $\left(\frac{1.08}{0.79}\right) = 1.37$

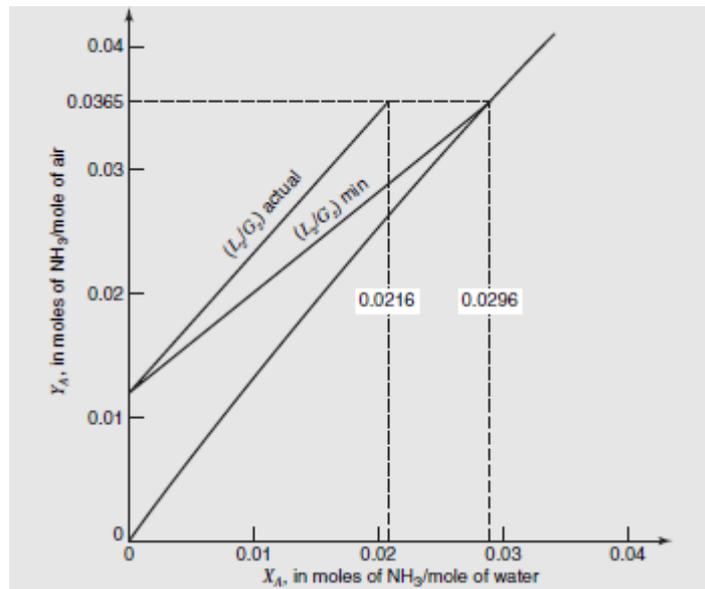


Figura 8.12 Grafica solución del ejemplo 4. (Welty, 2015)

### FLUJO CONCURRENTE O PARALELO (Welty, 2015, pág. 803)

Para las operaciones de transferencia de masa en estado estacionario que implican el contacto concurrente de dos fases insolubles, como lo muestra la figura (8.6), el balance de masa total para el componente A es

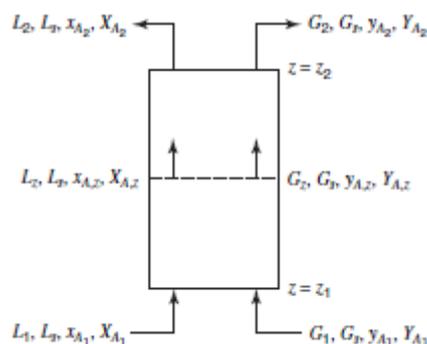


Figura 8.13 Proceso en flujo concurrente o paralelo en estado estacionario.

(Welty, 2015)

$$G_1 y_{A_1} + L_1 x_{A_1} = G_2 y_{A_2} + L_2 x_{A_2} \quad (8.35)$$

$$\left[ \begin{array}{ll} L_S = L_1(1 - x_{A_1}) & L_S = L_2(1 - x_{A_2}) \\ G_S = G_1(1 - y_{A_1}) & G_S = G_2(1 - y_{A_2}) \end{array} \right] \quad (8.27)$$

$$G_S \left( \frac{y_{A_1}}{(1 - y_{A_1})} \right) + L_S \left( \frac{x_{A_1}}{(1 - x_{A_1})} \right) = G_S \left( \frac{y_{A_2}}{(1 - y_{A_2})} \right) + L_S \left( \frac{x_{A_2}}{(1 - x_{A_2})} \right) \quad (8.28)$$

$$G_S \left( \frac{y_{A_1}}{(1 - y_{A_1})} \right) - G_S \left( \frac{y_{A_2}}{(1 - y_{A_2})} \right) = L_S \left( \frac{x_{A_2}}{(1 - x_{A_2})} \right) - L_S \left( \frac{x_{A_1}}{(1 - x_{A_1})} \right) \quad (8.29)$$

$$G_S Y_{A_1} + L_S X_{A_2} = G_S Y_{A_2} + L_S X_{A_1} \quad (8.30)$$

o

$$-G_S(Y_{A_1} - Y_{A_2}) = L_S(X_{A_1} - X_{A_2}) \quad (8.36)$$

Al reordenar, se obtiene

$$-\frac{L_S}{G_S} = \frac{(Y_{A_1} - Y_{A_2})}{(X_{A_1} - X_{A_2})} \quad (8.37)$$

El balance de masa para el componente  $A$  entre el plano  $z_1$  y un plano arbitrario  $z$  estipula que

$$G_S Y_{A_1} + L_S X_{A_z} = G_S Y_{A_z} + L_S X_{A_1} \quad (8.38)$$

o

$$G_S(Y_{A_1} - Y_{A_z}) = L_S(X_{A_z} - X_{A_1}) \quad (8.39)$$

Tanto (8.44) como (8.44a) son ecuaciones de líneas rectas que pasan a través del punto común  $(X_{A_1}, Y_{A_1})$  y tienen la misma pendiente  $-\frac{L_S}{G_S}$ . La ecuación (8.44a) es la expresión general que relaciona las composiciones de las 2 fases en contacto en cualquier plano en el equipo. Se identifica como la ecuación de la línea de operación para operaciones en flujo concurrente. Las gráficas (8.14) y (8.15) ilustran la posición de la línea de operación en relación con la línea de equilibrio. Un balance de masa para el componente  $A$  a lo largo de la longitud diferencial,  $dz$ , para flujo concurrente es (Welty, 2015, pág. 805)

$$L_S dX_A = -G_S dY_A \quad (8.40)$$

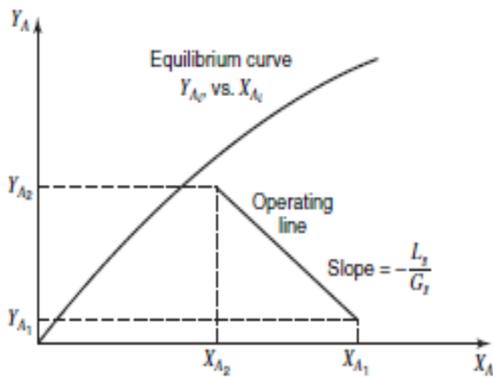


Figura 8.14 proceso en flujo concurrente o paralelo en estado estacionario, transferencia de la fase L a la fase G. (Welty, 2015)

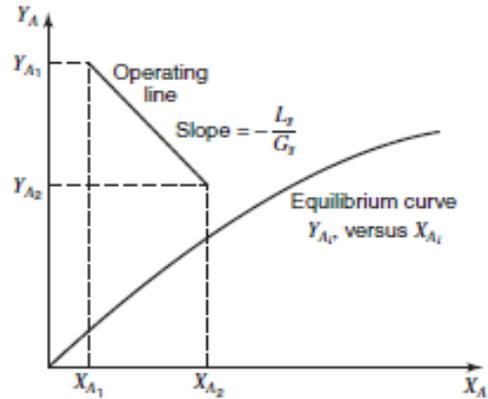


Figura 8.15 Proceso en flujo concurrente o paralelo en estado estacionario, transferencia de la fase G a la fase L. (Welty, 2015)

### EJEMPLO 5 (Welty, 2015, pág. 806)

La corriente de alimentación de amoniaco-aire descrita en el ejemplo 3 se va a alimentar en forma concurrente o paralela con una corriente de amoniaco libre de agua. La concentración de amoniaco debe reducirse de 3.52% a 1.29% en volumen, utilizando una corriente de agua que sea 1.37 veces la mínima. Determinar

- La relación  $\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{\text{mínima}}$
- La rapidez real del agua
- La concentración de la corriente acuosa de salida

En el ejemplo 3 se evaluaron las siguientes composiciones:

$$(Y_{NH_3})_1 = \frac{(y_{NH_3})_1}{1 - (y_{NH_3})_1} = \frac{0.0352}{0.9648} = 0.0365$$

y

$$(Y_{NH_3})_2 = \frac{(y_{NH_3})_2}{1 - (y_{NH_3})_2} = \frac{0.0129}{0.9871} = 0.0131$$

$$(X_{NH_3})_1 = 0.0$$

Se evaluaron los moles de G en una base libre de soluto como  $3.85 \frac{\text{lbmol}}{\text{Ahrpie}^2}$ . En la figura 8.14 se muestran las líneas de operación mínima y real. Para estas líneas de operación,

$$\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{\text{minima}} = \frac{\left[(Y_{NH_3})_1 - (Y_{NH_3})_2\right]}{\left[(X_{NH_3})_2 - (X_{NH_3})_1\right]} = \frac{0.0365 - 0.0131}{0.01}$$

$$= 2.34 \frac{\text{lbmol de fase L libre de NH}_3}{\text{lbmol de fase G libre de NH}_3}$$

y

$$\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{\text{real}} = 1.37 \left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{\text{minima}} = (1.37) \left(2.34 \frac{\text{lbmol de fase L libre de NH}_3}{\text{lbmol de fase G libre de NH}_3}\right)$$

$$= 3.21 \frac{\text{lbmol de fase L libre de NH}_3}{\text{lbmol de fase G libre de NH}_3}$$

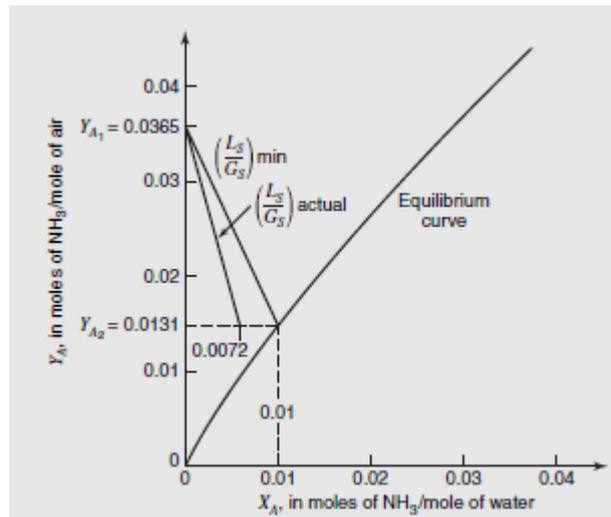


Figura 8.16 Grafica solución del ejemplo 4.  
(Welty, 2015)

La composición de la corriente líquida de salida puede evaluarse como la pendiente de la línea de operación real como

$$\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{\text{real}} = 3.21 = \frac{\left[(Y_{NH_3})_1 - (Y_{NH_3})_2\right]}{\left[(X_{NH_3})_2 - (X_{NH_3})_1\right]} = \frac{0.0365 - 0.0131}{(X_{NH_3})_2}$$

$$(X_{NH_3})_2 = \frac{0.0232}{3.21} = 0.0072 \frac{\text{lbmol NH}_3}{\text{lbmol de H}_2\text{O libre de NH}_3}$$

También se evalúan los moles de  $NH_3$  libre de agua que se alimentaron a la torre,  $L_S$ , utilizando el valor de  $\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{\text{real}}$

$$\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{\text{real}} = 3.21 \frac{\text{lbmol de fase L libre de NH}_3}{\text{lbmol de fase G libre de NH}_3}$$

Entonces

$$L_S = 3.21 G_S = 3.85 \frac{\text{lbmol}}{\text{Ahrpie}^2} = 12.4 \frac{\text{lbmol}}{\text{Ahrpie}^2}$$

## 8.2 TRANSFERENCIA DE MASA A TRAVÉS UNA COLUMNA DE ABSORCIÓN Y ESTIMACIÓN DE LA ALTURA Y NÚMERO DE UNIDADES DE TRANSFERENCIA

El coeficiente individual de transferencia de masa,  $k_G$ , se definió por la expresión

$$\vec{N}_{A,z} = k_G(p_{A,G} - p_{A,i}) \quad (8.40)$$

y el coeficiente total de transferencia de masa se definió por una ecuación similar en términos de la fuerza impulsora total en unidades de presión parcial,

$$\vec{N}_A = K_G(p_{A,G} - p_A^*) \quad (8.41)$$

En ambas expresiones, la transferencia de masa en la interfase se expresó como  $\left[ \frac{\text{moles de } A}{(\text{tiempo})(\text{unidad de área interfacial})(\text{Presión})} \right]$ . Para utilizar estas ecuaciones en el diseño de intercambiadores de masa, debe conocerse el área de contacto de la interfase. Aunque la columna de pared mojada tiene un área superficial interfásica definida, las áreas correspondientes en otros equipos son virtualmente imposibles de medir. Por esta razón se introduce el factor  $a$  que represente el área superficial de la interfase por unidad de volumen del equipo de transferencia de masa. La transferencia de masa dentro de una altura diferencial ( $dz$ ), por unidad de área de la sección transversal del intercambiador de masa es (Welty, 2015, pág. 809)

$$N_{A,z} \left[ \frac{\text{moles de } A \text{ transferidos}}{(\text{hr})(\text{Área interfacial})} \right] \left[ a \left( \frac{\text{área interfacial}}{\text{pie}^3} \right) \right] dz(\text{pie}) = \frac{\text{moles de } A \text{ transferidos}}{(\text{hr})(\text{área de sección transversal})}$$

o en términos de los coeficientes de transferencia de masa

$$\vec{N}_A a dz = k_G a (p_{A,G} - p_{A,i}) dz \quad (8.42)$$

y

$$\vec{N}_A a dz = K_G a (p_{A,G} - p_A^*) dz \quad (8.43)$$

Puesto que tanto el factor ( $a$ ) como los coeficientes de transferencia de masa dependen de la geometría del equipo de transferencia de masa y de las rapidezces de flujo de las dos corrientes inmiscibles en contacto, es común combinarlas en un solo producto. El coeficiente de capacidad individual,  $k_G a$ , y el coeficiente de capacidad total,  $K_G a$ , cada uno se evalúa experimentalmente como una variable de proceso combinada. Las unidades del coeficiente de capacidad de la fase gaseosa son

$$k_G a \left[ \frac{\text{moles de } A}{(\text{tiempo})(\text{unidad de área interfacial})(\text{Presión})} \right] \left[ \frac{\text{Área interfacial}}{\text{Volumen}} \right] = \frac{\text{moles de } A \text{ transferidos}}{(\text{hr})(\text{volumen})(\text{presión})}$$

las unidades que se encuentran con más frecuencia son  $\left(\frac{\text{mol de } A}{\text{m}^3 \text{segPa}}\right)$  o  $\left(\frac{\text{lbmol de } A}{(\text{hr})(\text{pie}^3)(\text{atm})}\right)$ . Los coeficientes de capacidad en términos de fuerzas impulsoras de concentración en líquidos se definen en forma similar por

$$\vec{N}_A a dz = k_L a (c_{A,i} - c_{A,L}) dz \quad (8.44)$$

y

$$\vec{N}_A a dz = K_L a (c_A^* - c_{A,L}) dz \quad (8.45)$$

Las unidades más comunes para los coeficientes de capacidad en la fase líquida son  $\left(\frac{\text{mol de } A}{(\text{seg})(\text{m}^3)\left(\frac{\text{moles de } A}{\text{m}^3 \text{ de solución}}\right)}\right)$  o  $\left(\frac{\text{lbmol de } A}{(\text{hr})(\text{pie}^3)\left(\frac{\text{lbmol de } A}{\text{pie}^3 \text{ de solución}}\right)}\right)$  las ecuaciones de capacidad de transferencia de masa en términos de  $k_y a, k_x a$  se definen de manera semejante. (Welty, 2015, pág. 810)

En equipos que implican el contacto continuo entre dos fases inmiscibles, estas dos ecuaciones pueden combinarse y la expresión resultante integrarse para proporcionar una definición de la altura desconocida del intercambiador de masa

Considérese un intercambiador de masa isotérmico, a contracorriente que se utiliza para alcanzar una separación en un sistema que tiene un coeficiente de capacidad total constante  $K_Y a$  en todo el intervalo de concentración en las operaciones de transferencia de masa. El balance de masa para el componente  $A$  a lo largo de la longitud diferencial  $dz$  se describe como (Welty, 2015, pág. 811)

$$\frac{\text{moles de } A \text{ transferidos}}{(\text{hr})(\text{sección de área transversal})} = \vec{N}_A a dz = L_S dX_A = G_S dY_A \quad (8.46)$$

La transferencia de masa del componente  $A$  en la longitud diferencial ( $dz$ ), se define por

$$\frac{\text{moles de } A \text{ transferidos}}{(\text{hr})(\text{sección de área transversal})} = \vec{N}_A a dz = K_Y a (Y_A - Y_A^*) dz \quad (8.47)$$

Al combinar estas ecuaciones y reordenar, se obtiene

$$\begin{aligned} G_S dY_A &= \vec{N}_A a dz & (8.48) \\ G_S dY_A &= K_Y a (Y_A - Y_A^*) dz \\ dz &= \frac{G_S dY_A}{K_Y a (Y_A - Y_A^*)} \end{aligned}$$

o, para la longitud del intercambiador de masa,

$$\int_0^z dz = \frac{G_S}{K_Y a} \int_{Y_{A1}}^{Y_{A2}} \frac{dY_A}{(Y_A - Y_A^*)} \quad (8.49)$$

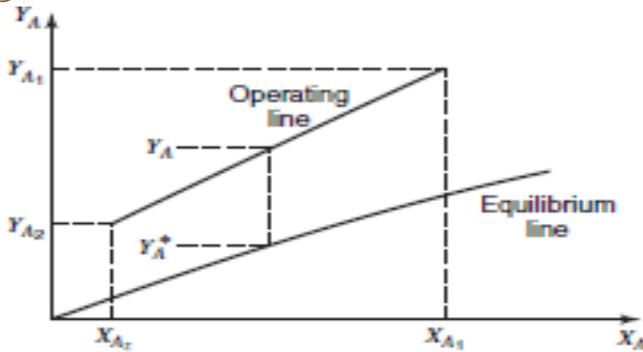


Figura 8.5 Evaluación de  $(Y_A - Y_A^*)$ , la fuerza impulsora total. (Welty, 2015)

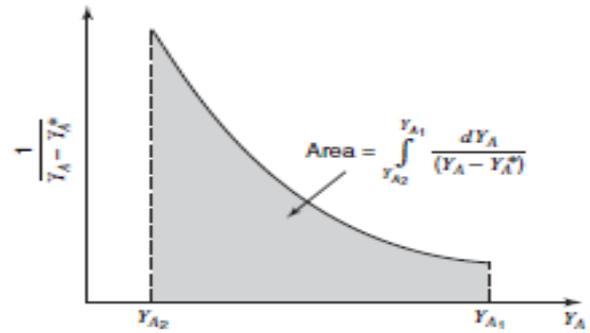


Figura 8.6 Evaluación gráfica de la integral  $\int_{Y_{A1}}^{Y_{A2}} \frac{dY_A}{(Y_A - Y_A^*)}$ . (Welty, 2015)

$$z = \frac{G_S}{K_Y a} \int_{Y_{A1}}^{Y_{A2}} \frac{dY_A}{(Y_A - Y_A^*)} \quad (8.50)$$

una técnica numérica para aproximar el valor de  $\int_a^b f(x)dx = \int_{Y_{A1}}^{Y_{A2}} \frac{dY_A}{(Y_A - Y_A^*)}$  con la que el lector se encuentra familiarizado es la regla de Simpson. Hacemos la partición del intervalo  $[a, b]$  en subintervalos iguales, solo que ahora se requiere que el número de ellos sea par, lo que escribiremos como  $2n$ . Por consiguiente, tomamos

$$\left[ \begin{array}{l} \Delta x = \frac{b - a}{2n} \\ a = x_0 < x_1 < \dots < x_{2n} = b \\ x_i = a + i\Delta x \end{array} \right] \quad (8.51)$$

Entonces la aproximación de la regla de Simpson  $S_{2n}$  es

$$\begin{aligned} S_{2n} &= \int_a^b f(x)dx \\ &= \left(\frac{\Delta x}{3}\right) \{f(a) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \dots + 2f(x_{2n-2}) + 4f(x_{2n-1}) + f(b)\} \\ S_{2n} &= \int_a^b f(x)dx = \left(\frac{\Delta x}{3}\right) \left\{ f(a) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i}) + 4 \sum_{i=1}^n f(x_{2i-1}) + f(b) \right\} \end{aligned} \quad (8.53)$$

$$S_{2n} = \int_{Y_{A1}}^{Y_{A2}} \frac{dY_A}{(Y_A - Y_A^*)} = \left(\frac{\Delta x}{3}\right) \left\{ f(a) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i}) + 4 \sum_{i=1}^n f(x_{2i-1}) + f(b) \right\} \quad (8.54)$$

### EJEMPLO 2 (Welty, 2015, pág. 816)

El amoníaco contenido en aire a  $68^{\circ}F$  y presión atmosférica va absorberse en una torre empacada con flujo a contracorriente, de 6.07 pulg de diámetro, utilizando como absorbente agua libre de amoníaco. La rapidez de entrada del será de  $390 \frac{pies^3}{min}$  y la rapidez de entrada del agua será de  $24.6 \text{ lbm}/min$ . Bajo estas condiciones, puede suponerse que el coeficiente de capacidad general,  $K_Y a$ , es  $4.60 \frac{lbmol}{hr pie^3 \Delta Y_{NH_3}}$ . La concentración de amoníaco se reducirá de 0.0825 fracción mol a 0.003 fracción mol. La torre se enfriará de manera que la operación se lleve a cabo esencialmente a  $68^{\circ}F$ .

Determinar el largo del intercambiador de masa.

$$(Y_{NH_3})_1 = \frac{(y_{NH_3})_1}{1 - (y_{NH_3})_1} = \frac{0.0825}{0.9175} = 0.09$$

$$(Y_{NH_3})_2 = \frac{(y_{NH_3})_2}{1 - (y_{NH_3})_2} = \frac{0.003}{0.997} = 0.003$$

y

$$(X_{NH_3})_2 = 0.0$$

El área de la torre es igual a  $\frac{\pi D^2}{4}$  o  $\left[ \frac{\pi (6.07)^2}{4} \right] = 0.201 \text{ pie}^2$ . El gas entra en el intercambiador en el plano 1 y su gasto y caudal es

$$G = \frac{\dot{V}P}{RT} \left( \frac{1}{A} \right) = \frac{\left( 390 \frac{pies^3}{min} \right) (1 \text{ atm})}{\left( 0.73 \frac{pie^2 \text{ atm}}{lbmol^{\circ}R} \right) (528^{\circ}R)} \left( \frac{1}{0.201 \text{ pie}^2} \right) = 503 \frac{lbmol \text{ gas}}{pie^2 min}$$

El gasto o caudal de agua libre de  $NH_3$  es

$$L_s = \frac{lbmol \text{ gas}}{pie^2 min} \left( \frac{0.9175 \text{ lbmol aire}}{lbmol \text{ gas}} \right) = 4.61 \frac{lbmol \text{ aire}}{pie^2 min}$$

El gasto caudal de agua libre de  $NH_3$  se evalúa utilizando el flujo que entra al intercambiador en el plano 2.

$$L_s = (24.6 \text{ lbm}/min) \left( \frac{lbmol}{18 \text{ lbm}} \right) \left( \frac{1}{0.201 \text{ pie}^2} \right) = 6.80 \frac{lbmol \text{ de } H_2O}{min \text{ pie}^2}$$

El líquido que sale del intercambiador en el plano 1; su concentración se evalúa utilizando la ecuación de balance de materiales a contracorriente,

$$G_S [(Y_{NH_3})_1 - (Y_{NH_3})_2] = L_S [(X_{NH_3})_1 - (X_{NH_3})_2]$$

o

$$4.61(0.09 - 0.003) = 6.80 ((X_{NH_3})_1 - 0)$$

La concentración de salida,  $(X_{NH_3})_1 = 0.059$ .

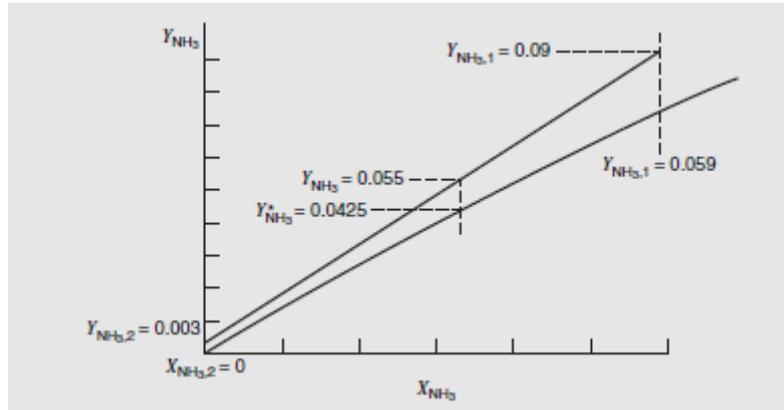


Figura 8.7 Línea de operación para el ejemplo 2. (Welty, 2015)

Puesto que en este caso las concentraciones de gas y líquido no son lo bastante diluidas para que pueda suponerse que las líneas de operación y de equilibrio sobre la gráfica de  $y$  en relación a  $x$  sean rectas, la altura de la torre debe evaluarse por el procedimiento de integración gráfica utilizando la expresión

$$z = \frac{G_S}{K_Y a} \int_{Y_{A1}}^{Y_{A2}} \frac{dY_A}{(Y_A - Y_A^*)} = \left( \frac{G_S}{K_Y a} \right) \left( \frac{\Delta x}{3} \right) \left\{ f(a) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i}) + 4 \sum_{i=1}^n f(x_{2i-1}) + f(b) \right\}$$

o

$$z = \frac{4.61 \text{ lbmol de gas libre de } NH_3/\text{hrpie}^2}{4.60 \frac{\text{lbmol}}{\text{hrpie}^3 \Delta Y_{NH_3}}} \int_{(NH_3)_1}^{(NH_3)_2} \frac{dY_{NH_3}}{(Y_{NH_3} - Y_{NH_3}^*)}$$

$$z = \left( \frac{4.61 \text{ lbmol de gas libre de } NH_3/\text{hrpie}^2}{4.60 \frac{\text{lbmol}}{\text{hrpie}^3 \Delta Y_{NH_3}}} \right) \left( \frac{0.09 - 0.003}{8} \right) \left\{ f(a) \right.$$

$$\left. + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i}) + 4 \sum_{i=1}^n f(x_{2i-1}) + f(b) \right\}$$

$$\left( \frac{\Delta x}{3} \right) \left\{ f(a) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i}) + 4 \sum_{i=1}^n f(x_{2i-1}) + f(b) \right\}$$

$$\left(\frac{0.09 - 0.003}{(8)(3)}\right) \{(333.33) + 2(296) + 4(212.5) + 2(133.33) + 4(80) + 2(68) + 4(58.9) + 47.6\}$$

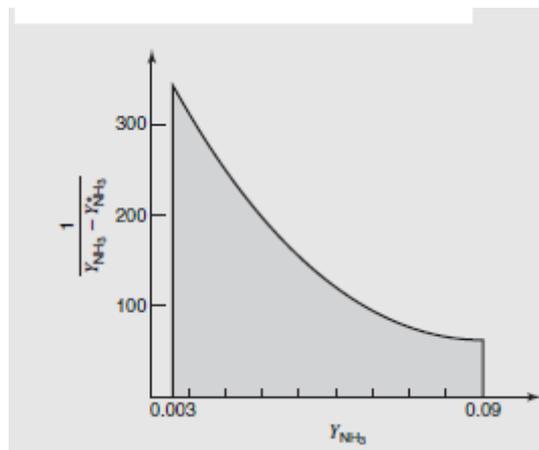
$$= 10.1$$

**Tabla 8.2 composiciones del gas en el ejemplo 2 (Welty, 2015)**

$Y_A$	$Y_A^*$	$Y_A - Y_A^*$	$1/(Y_A - Y_A^*)$
0.003	0	0.003	333.3
0.01	0.0065	0.0035	296
0.02	0.0153	0.0047	212.5
0.035	0.0275	0.0075	133.3
0.055	0.0425	0.0125	80.0
0.065	0.0503	0.0147	68.0
0.075	0.058	0.017	58.9
0.09	0.0683	0.0217	47.6

En la tabla (8.2),  $Y_{NH_3}$  es la composición evaluada en el punto sobre la línea de operación y  $Y_{NH_3}^*$  es la composición sobre la línea de equilibrio directamente debajo del valor  $Y_{NH_3}$ . En la figura (8.6) se muestra un ejemplo de tales composiciones. En la figura 8.7 se evalúa de forma gráfica la integral (Welty, 2015, pág. 818)

$$\int_{(NH_3)_1}^{(NH_3)_2} \frac{dY_{NH_3}}{(Y_{NH_3} - Y_{NH_3}^*)}$$



**Figura 8.8 Evaluación gráfica de la integral del ejemplo 2. (Welty, 2015)**

El área bajo la curva es el valor numérico de la integral. La longitud resultante del intercambiador de masa es

$$z = \frac{4.61 \text{ lbmol de gas libre de } NH_3 / \text{hrpie}^2}{4.60 \frac{\text{lbmol}}{\text{hrpie}^3 \Delta Y_{NH_3}}} \int_{(NH_3)_1}^{(NH_3)_2} \frac{dY_{NH_3}}{(Y_{NH_3} - Y_{NH_3}^*)} = \frac{4.61 \text{ lbmol de gas libre de } NH_3 / \text{hrpie}^2}{4.60 \frac{\text{lbmol}}{\text{hrpie}^3 \Delta Y_{NH_3}}} (10.95)$$

$$= 11 \text{ pies}$$

## PROBLEMAS (Welty, 2015, págs. 829-838)

**8.1** Para elevar el nivel de concentración de oxígeno en las aguas residuales, se inyecta aire a través de rociadores ubicados cerca del fondo de un tanque de aireación que contiene agua. El oxígeno se transfiere de las burbujas de aire liberadas a la fase acuosa circundante. Determine el coeficiente general de transferencia de masa líquida,  $K_L$ , y el porcentaje de resistencia encontrado en la fase líquida si los coeficientes individuales de transferencia de masa del oxígeno que se transfiere del aire al agua a  $293^\circ K$  son  $k_L = 2.15 \times 10^{-5} \frac{\text{mol}}{\text{m}^2 \text{seg}(\text{mol})}$  y

$k_G = 9.28 \times 10^{-8} \frac{\text{mol}}{\text{m}^2 \text{segPa}}$ . El coeficiente de la ley de Henry para el oxígeno a  $293^\circ K$  es  $1.36 \times 10^3 \frac{\text{Pa} \cdot \text{m}^3}{\text{mol}}$ .

**8.2** Se ha diseñado una torre empacitada para extraer el componente  $A$  de una corriente acuosa a una corriente de aire en contracorriente. En un plano dado de la torre, las concentraciones de las dos corrientes adyacentes son  $p_{A,G} = 4 \times 10^3 \text{ Pa}$  y  $c_{A,L} = 4 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3 \text{Solucion}}$ . En las condiciones de flujo dadas, el coeficiente general de transferencia de masa de gas,  $K_G$  es igual a  $2.46 \times 10^{-8} \frac{\text{mol}}{\text{m}^2 \text{segPa}}$  y el 60% de la resistencia a la transferencia de masa se encuentra en la fase gaseosa. En la condición de operación de la torre de  $290^\circ K$  y  $1 \text{ atm}$ , el sistema satisface la constante de la ley de Henry de  $1400 \frac{\text{m}^3 \text{Pa}}{\text{mol}}$ . Determinar

- El coeficiente de película de gas individual,  $k_G$
- El coeficiente de película del líquido individual,  $k_L$
- La concentración de gas interfásica,  $p_{A,i}$
- El coeficiente general de transferencia de masa líquido,  $K_L$

**8.3** En la absorción del componente  $A$  de una corriente de aire a una corriente acuosa, se analizó la composición aparente de las dos corrientes adyacentes encontrándose que  $p_{A,G}$  es igual  $0.1 \text{ atm}$  y  $c_{A,L}$  es igual a  $0.25 \frac{\text{lbmol}}{\text{pie}^3}$ . La constante de Henry para este sistema es  $0.265 \frac{\text{atm pie}^3 \text{Solucion}}{\text{lbmol}}$ . El coeficiente total gaseoso,  $K_G$ , fue igual a  $0.055 \frac{\text{lbmol}}{\text{hrpie}^2 \text{atm}}$ .

Si el 57% de la resistencia total de la transferencia de masa se encuentra en la película de gas, determinar

- El coeficiente de la película de gas,  $k_G$ ;
- La concentración en la interfase, del lado del líquido,  $c_{A,i}$ ;
- El coeficiente de la película líquida,  $k_L$ ;
- El flujo de masa de  $A$

**8.4** Una torre de absorción que trabaja a  $20^\circ\text{C}$  y  $1\text{ atm}$  se utilizó para absorber en agua el  $\text{SO}_2$  presente en una mezcla con aire. En un punto en el equipo la presión parcial del  $\text{SO}_2$  en la corriente de gas fue de 30 mmhg y la concentración en la corriente de líquido con que hace contacto fue de  $0.0344 \frac{\text{mol SO}_2}{\text{pie}^3_{\text{solucion}}}$ . Los coeficientes individuales de transferencia de masa en la película a  $20^\circ\text{C}$  y  $1\text{ atm}$ , fueron  $k_L = 1.3 \frac{\text{lbmol}}{\text{hrpie}^2 \frac{\text{lbmol}}{\text{pie}^3_{\text{Solucion}}}}$  y  $k_G = 0.295 \frac{\text{lbmol}}{\text{hrpie}^2 \text{atm}}$ .

Los datos de equilibrio a  $20^\circ\text{C}$  son los siguientes:

Presión parcial del $\text{SO}_2$ en mmhg	0.5	3.2	8.5	26	59
Concentración en $\text{lbmol SO}_2/\text{pie}^3$ de solución	0.0191	0.0911	0.1738	0.388	0.681

- Evaluar las concentraciones interfaciales,  $c_{A,i}$  y  $p_{A,i}$ ;
- Anotar los valores que faltan en la siguiente tabla, correspondientes a los diversos coeficientes y las fuerzas impulsoras asociadas a ellos

Coefficient	Driving Force
$k_G =$ _____	$P_{AG} - P_{Ai} =$ _____
$k_L =$ _____	$c_{Ai} - c_{AL} =$ _____
$K_G =$ _____	$P_{AG} - P_A^* =$ _____
$K_L =$ _____	$c_A^* - c_{AL} =$ _____

**8.5** En una torre de pared húmeda se extrajo amoníaco,  $\text{NH}_3$ , de una solución de amoníaco-agua absorbiéndolo en una corriente de aire; el coeficiente líquido total,  $K_L$ , fue de  $0.05 \frac{\text{lbmol}}{\text{hrpie}^2 \frac{\text{lbmol}}{\text{pie}^3_{\text{Solucion}}}}$ . En un plano en la torre, la concentración aparente de la corriente descendente de líquido fue de  $0.25 \frac{\text{lbmol}}{\text{pie}^3_{\text{Solucion}}}$  y la presión parcial del amoníaco en la corriente de gas fue de 0.03 atm. Para soluciones diluidas de amoníaco en agua a la temperatura de operación, la presión parcial en el equilibrio puede evaluarse por medio de la expresión

$$p_{A,i} = 0.215c_{A,i}$$

donde  $p_{A,i}$  es la presión parcial en atmósferas y  $c_{A,i}$  es la concentración de equilibrio de amoníaco en agua en  $\frac{\text{lbmol}}{\text{pie}^3 \text{Solucion}}$ . Si la fase gaseosa ofreciera el 75% de la resistencia total a la transferencia de masa, calcular

- El coeficiente individual de la película gaseosa,  $k_G$ ;
- El coeficiente total de transferencia de gaseosa,  $K_G$ ;
- Las concentraciones interfaciales,  $p_{A,i}$  y  $c_{A,i}$ .

**8.6** Para un sistema en que el componente  $A$  se transfiere de la fase gaseosa a la líquida, la relación de equilibrio está dada por

$$p_{A,i} = 0.75c_{A,i}$$

donde  $p_{A,i}$  es la presión parcial de equilibrio en atmósferas y  $c_{A,i}$  es la concentración de equilibrio en moles por litro. En un punto en el equipo atmosférico de transferencia de masa, la corriente de líquido contiene  $0.045 \frac{\text{mol}}{\text{L}}$  y la corriente de gas contiene 9% e mol de  $A$ . El coeficiente individual de la película de gas,  $k_G$ , en este punto en el aparato tiene un valor de  $2.7 \frac{\text{mol}}{\text{m}^2 \text{seg atm}}$ . Se sabe que el 30% de la resistencia total a la transferencia de masa se encuentra en la fase líquida. Evaluar:

- El flujo molar de  $A$
- La concentración interfacial de  $A$  en el líquido;
- El coeficiente total de transferencia de masa,  $K_G$ .

**8.7** En una torre de pared húmeda que se utiliza para la absorción de amoníaco,  $\text{NH}_3$ , en agua, extrayéndolo de una mezcla de aire-amoníaco, el coeficiente total de transferencia de masa en el gas,  $K_G$ , fue de  $0.191 \frac{\text{lbmol}}{\text{hrpie}^2 \text{atm}}$ . La torre trabaja a  $60^\circ\text{F}$  y  $2 \text{ atm}$  de presión. En la parte superior de la torre, el gas que sale contenía 0.5% en volumen de  $\text{NH}_3$ , y el líquido que entra con el que este gas hace contacto era agua pura. Si la fase gaseosa ofrecía el 80% de la resistencia a la transferencia de masa, calcular

- El coeficiente de la película gaseosa,  $k_G$ ;
- El coeficiente de la película líquida,  $k_L$ ;
- El coeficiente total de transferencia de masa en el líquido,  $K_L$ ;
- Las concentraciones interfaciales,  $p_{A,i}$  y  $c_{A,i}$ .

Para soluciones diluidas de amoníaco en agua a  $60^\circ\text{F}$ , la presión parcial de equilibrio está dada por

$$p_{NH_3,i} = 0.215c_{NH_3,i}$$

donde  $p_{NH_3}$  se da en atm y  $c_{NH_3,i}$  se da en  $\frac{lbmol}{pie^3_{Solucion}}$ .

**8.8** Se considera un esquema para la eliminación de  $H_2S$  de un gas por lavado con agua a  $293^\circ K$  y  $10 atm$ . La composición inicial del gas alimentado es de 2.5% en mol de  $H_2S$ . Se desea obtener una corriente gaseosa final que contenga únicamente 0.1% en mol de  $H_2S$ . El agua absorbente entrará a la torre de absorción libre de cualquier cantidad de  $H_2S$ . A la temperatura y presión dadas, el sistema seguirá la ley de Henry, de acuerdo con la siguiente relación;

$$Y_{H_2S} = 48.3X_{H_2S}$$

- Determinar, para un absorbedor a contracorriente, los moles de agua que se requieren por mol de aire portador, libre de  $H_2S$ , si se utiliza 1.5 veces la relación mínima.
- Determinar la composición del líquido de salida.

**8.9** El benceno libre de gas de huya en un lavador se recupera haciendo pasar solución de benceno y aceite para lavar a través de una torre en contacto con vapor. La corriente de líquido que entra contiene 8% en mol de benceno. Se desea recuperar 80% del benceno utilizando una relación de vapor que sea 1.4 veces la proporción mínima. Se utilizará un gasto en el aceite de lavado (disolvente líquido libre de benceno) de 6.94 mol/s. Determinar los moles requeridos de vapor por segundo si:

- Se utiliza una torre a contracorriente.
- Se utiliza una torre con corrientes paralelas.

Los datos de equilibrio para el sistema benceno-aceite de lavado-vapor son los siguientes:

**8.10** En un absorbedor empacado pasa aire que contiene 5% de amoníaco,  $NH_3$ , en

$X$	$\frac{\text{mole benzene}}{\text{mole wash oil}}$	0.00	0.02	0.04	0.06	0.08	0.10	0.12	0.14
$Y$	$\frac{\text{mole benzene}}{\text{mole steam}}$	0.00	0.07	0.14	0.22	0.31	0.405	0.515	0.65

contracorriente con agua. A la torre entran  $25 \frac{m^3}{min}$  de gas y  $28.6 \frac{Kg}{min}$  de agua. La torre trabaja a  $295^\circ K$  y  $1 atm$  de presión. Para concentraciones diluidas a  $295^\circ K$ , las concentraciones de equilibrio se relacionan por medio de  $y/x = 1.08$ . Si el gas de salida solo contiene 0.5% de  $NH_3$ , determinar

a) La relación  $\frac{\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{real}}{\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{minima}}$ ;

b) La concentración de la corriente líquida de salida.

**8.11** Dos corrientes gaseosas se tratan en la misma torre de absorción empacada. Al fondo de la torre se alimentan  $105 \frac{lbmol}{hr}$  que contienen 4% del componente A. Una segunda corriente gaseosa, que contiene 2% de A, se alimenta a razón de  $52 \frac{lbmol}{hr}$  en un punto de la columna donde la composición de la corriente de gas que se eleva dentro de la columna es también 2% de A. El gas de salida debe contener únicamente 0.5% A. En la parte superior de la torre se alimenta una corriente libre de agua a razón de  $116 \frac{lbmol}{hr}$ . A la temperatura y presión de la torre, los datos de equilibrio son los siguientes:

$X \left( \frac{lbmol \text{ de } A}{lbmol \text{ de } H_2S} \right)$	0	0.02	0.04	0.06	0.08	0.1
$Y \left( \frac{lbmol \text{ de } A}{lbmol \text{ de aire}} \right)$	0	0.055	0.102	0.155	0.205	0.260

Determinar

- a) La composición de la corriente líquida dentro de la torre en el nivel en que la segunda corriente de gas entra a la torre;
- b) La composición de la corriente líquida que sale del fondo de la torre.

**8.12** Una compañía industrial utiliza un absorbedor, empacado a la altura de 35 pies, como lavador de gases. A través de la torre se hace pasar una mezcla diluida de aire-amoniaco que contiene 4.93%  $NH_3$  a contracorriente de agua inicialmente libre de amoniaco. La rapidez de entrada del gas es  $100 \frac{lbmol}{hr \pi e^2}$  y la rapidez de entrada del agua libre de amoniaco proporciona una relación real  $\left(\frac{L_S}{G_S}\right)$  que es 1.4 veces la relación  $\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{Minima}$ . A la temperatura y presión del absorbedor, las concentraciones de equilibrio se relacionan por  $\frac{y}{x} = 1.075$ . Si la corriente de gas de salida solo contiene 0.2% de amoniaco, determinar

- a) Las libras de amoniaco que se absorben por hora por pie cuadrado de área de sección transversal;
- b) La composición de la corriente líquida de salida;
- c) El coeficiente total de transferencia de masa  $K_Y a$ ,  $\frac{lbmol}{hr \pi e^3 \Delta Y_A}$ .

**8.13** Un absorbedor empacado a la altura de 4.5m, se diseñó para reducir el nivel de concentración de un contaminante de mercaptano en una corriente gaseosa de desecho disminuyéndolo de 5% a 0.3%. A la parte superior de la torre se alimenta una corriente de disolvente no volátil libre de mercaptano que fluye a contracorriente con la corriente gaseosa de desecho de  $0.236 \frac{m^3}{seg}$ . La corriente de disolvente que sale del fondo de la torre con un contenido de 3.05% en mol de mercaptano. A la presión y temperatura de la torre,  $293^\circ K$  y  $1 atm$ , los datos de equilibrio para el sistema mercaptano-disolvente son los siguientes

$$X \left( \frac{\text{mol mercaptano}}{\text{mol de disolvente libre de mercaptano}} \right) \quad 0 \quad 0.01 \quad 0.02 \quad 0.03 \quad 0.04$$

$$Y \left( \frac{\text{mol mercaptano}}{\text{mol de aire libre de mercaptano}} \right) \quad 0 \quad 0.0045 \quad 0.0145 \quad 0.0310 \quad 0.0545$$

Determinar el coeficiente total de capacidad  $K_Y a$  por medio de integración grafica si el área de la sección transversal de la torre es  $0.2 m^2$ .

**8.14** Un absorbedor empacado a la altura de 2.4 m, se utiliza para reducir la concentración de A en una corriente gaseosa de 6.5% a 1.0%. Una corriente acuosa, que inicialmente contiene 1.0% de A, se alimenta a la parte superior de la torre. Se alimentan a la torre  $20000 \frac{pie^3}{hr}$  de la mezcla de gas a  $60^\circ F$  y  $1 atm$ . Los datos de equilibrio para este sistema son

XA	0	0.01	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07
YA	0	0.002	0.005	0.01	0.021	0.036	0.055	0.079

Determinar

- La cantidad de la corriente liquida que se requiere por hora si la torre trabaja a contracorriente con una relación  $\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{real}$  que es 1.5 veces el valor mínimo de  $\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{minima}$ .
- La cantidad de la corriente liquida que se requiere por hora si la torre trabaja en flujo paralelo con una relación  $\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{real}$  que es 1.5 veces el valor de  $\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{minima}$ .

**8.15** El gas de un horno Manheim contiene 12.5% de HCl en volumen y 87.5% de gases inertes. El gas se lava con agua libre de HCl a presión atmosférica y una temperatura de  $20^\circ C$ . Para recuperar el 97% del gas del horno se decidió hacer que la torre trabaje a 1.64 veces la relación mínima  $\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{minima}$ . La relación de equilibrio para soluciones de HCl en agua está dada por lo datos de equilibrio en la siguiente tabla.

X <sub>A</sub>	Y <sub>A</sub>
0.2658	0.0023
0.321	0.0095
0.4025	0.02197
0.4925	0.0551
0.5455	0.09313
0.6	0.156
0.666666	0.2547
0.7391	0.4749

- a) ¿Cuál será la concentración de salida de la corriente de ácido?
- b) La torre se va a construir en cerámica de 2 pulg de diámetro, se introducirán a la torre  $10000 \frac{\text{pie}^3}{\text{hr}}$  de gas de Manheim medidos a  $20^\circ\text{C}$  y  $1 \text{ atm}$  de presión. El coeficiente total de capacidad,  $K_G a$ , puede evaluarse como  $2.0 \frac{\text{lbmol}}{\text{pie}^3 \text{hr atm}}$ . Determinar la altura de la torre.

**8.16** Se utilizará una torre de 15 cm de diámetro para reducir la concentración de amoníaco,  $\text{NH}_3$ , en una corriente gaseosa de 3.6% a 0.3%. El agua se alimenta a razón de 14.5 mol/s y el gas se alimenta a contracorriente a razón de 8 mol/s. La torre trabaja de manera isotérmica a  $293^\circ\text{K}$  y  $1 \text{ atm}$  de presión. Puede suponerse que el coeficiente de capacidad total,  $K_Y a$ , es de  $71 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3 \text{seg} \Delta Y_{\text{NH}_3}}$ . Si los datos de equilibrio a  $293^\circ\text{K}$  son los siguientes

$$X_A \left( \frac{\text{mol NH}_3}{\text{mol H}_2\text{O}} \right) \quad 0 \quad 0.0164 \quad 0.0252 \quad 0.0349 \quad 0.0445 \quad 0.0722$$

$$Y_A \left( \frac{\text{mol de NH}_3}{\text{mol de aire}} \right) \quad 0 \quad 0.021 \quad 0.032 \quad 0.042 \quad 0.053 \quad 0.080$$

- a) Evaluar la altura de la torre que se requiere

- b) La relación  $\frac{\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{\text{real}}}{\left(\frac{L_S}{G_S}\right)_{\text{minima}}}$

## CAPITULO 9

### TRANSFERENCIA SIMULTÁNEA DE CALOR Y MASA

En general el proceso de difusión va acompañado por el transporte de energía, incluso dentro de un sistema isotérmico. Puesto que cada una de las especies que se difunden transporta su propia entalpia individual, el flujo de calor en un plano determinado esta descrito por (Welty, 2015, pág. 654)

$$\frac{q_D}{A} = \sum_{i=1}^n N_i \bar{H}_i \quad (9.1)$$

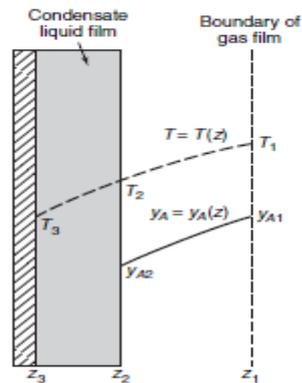
donde  $\frac{q_D}{A}$  es el flujo de calor debido a la difusión de la masa sobre el plano dado y  $\bar{H}_i$  es la entalpia molar parcial de la especie  $i$  en la mezcla. Cuando existe una diferencia de temperatura, también se transportará energía por uno de los 3 mecanismos de transferencia de calor; por ejemplo, la ecuación para el transporte de energía total por conducción y difusión molecular se convierte en (Welty, 2015, pág. 654)

$$\frac{q_D}{A} = -k\vec{\nabla}T + \sum_{i=1}^n \vec{N}_i \bar{H}_i \quad (9.2)$$

Si la transferencia de calor es por convección, el primer término de transporte de energía en la ecuación (9.2) se sustituirá por el producto del coeficiente convectivos de transferencia de calor y una fuerza impulsora  $\Delta T$ .

Un proceso importante en muchas operaciones de ingeniería lo mismo que en fenómenos cotidianos involucra a la condensación de un vapor sobre una superficie fría. Ejemplos de este proceso incluyen “el sudado” que se forma sobre tuberías de agua fría y la condensación de vapor húmedo sobre el cristal en una ventana fría. (Welty, 2015, pág. 654)

Para tal situación física en particular en estado estacionario, se estipularán las siguientes condiciones. El componente  $A$  puro se condensará de una mezcla gaseosa binaria.



**Figura 9.1 Condensación de vapor sobre una superficie fría. (Welty, 2015)**

Por ejemplo, en la fase gaseosa, cuando el gas portador es aire y el contenido de vapor de la especie que se difunde es relativamente bajo, puede estimarse el coeficiente de transferencia de calor para la convección natural por medio de la siguiente ecuación, (Welty, 2015, pág. 655)

$$Nu_{U,L} = \frac{0.670Ra_L^{\frac{1}{4}}}{\left[1 + \left(\frac{0.492}{Pr}\right)^{\frac{9}{16}}\right]^{\frac{4}{9}}} \quad (9.3)$$

Utilizando la ecuación diferencial general para la transferencia de masa, ecuación (5.2), puede verse que la ecuación diferencial que describe la transferencia de masa en la fase gaseosa es

$$\frac{d\vec{N}_{A,z}}{dz} = 0 \quad (5.2)$$

La ecuación (5.2) estipula que el flujo de masa en la dirección  $z$  es constante en la trayectoria de difusión. Para completar la descripción del proceso, debe elegirse la forma apropiada de la ley de Fick. Si el componente  $A$  se difunde a través de un gas estancado, el flujo está definido por la ecuación (Welty, 2015, pág. 655)

$$\vec{N}_{A,z} = \frac{-cD_{AB}dy_A}{(1-y_A)dz} \quad (5.6)$$

Puesto que existe un perfil de temperaturas dentro de la película y el coeficiente de difusión y la concentración total del gas varían con la temperatura, con frecuencia debe considerarse tal variación con  $z$ .

Cuando el perfil de concentraciones se conoce, o puede determinarse aproximadamente, puede tratarse tal variación en el coeficiente de difusión. Por ejemplo, si el perfil de temperatura es de la forma

$$\frac{T}{T_1} = \left(\frac{z}{z_1}\right)^n \quad (9.4)$$

puede determinarse la entre el coeficiente de difusión y el parámetro de longitud utilizando la ecuación

$$D_{ABT_2, P_2} = D_{ABT_1, P_1} \left(\frac{P_1}{P_2}\right) \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{\Omega_{D, T_1}}{\Omega_{D, T_2}}\right) \quad (2.29)$$

Y en la forma siguiente

$$D_{AB} = (D_{AB})_{T_1} \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^{\frac{3}{2}} = (D_{AB})_{T_1} \left(\frac{z}{z_1}\right)^{\frac{3n}{2}} \quad (9.5)$$

La variación en la concentración total debida a la variación en temperaturas puede evaluarse como

$$c = \frac{P}{RT} = \frac{P}{RT_1 \left(\frac{z}{z_1}\right)^n} \quad (9.6)$$

Ahora la ecuación de flujo se convierte en

$$\vec{N}_{A,z} = \frac{-P(D_{AB})_{T_1} \left(\frac{z}{z_1}\right)^{\frac{n}{2}} dy_A}{RT(1 - y_A) dz} \quad (9.7)$$

En un intervalo de temperaturas pequeño, puede utilizarse un coeficiente promedio de difusión y la concentración molar total. Introduciendo esta suposición, la ecuación (5.6) se simplifica a

$$\vec{N}_{A,z} = -\frac{(cD_{AB})_{avg} dy_A}{(1 - y_A) dz} \quad (9.8)$$

Dicha ecuación puede integrarse entre las dos condiciones de frontera (Welty, 2015, pág. 656)

$$z = z_1 \quad y_A = y_{A1}$$

$$z = z_2 \quad y_A = y_{A2}$$

Y se obtiene la relación

$$\vec{N}_{A,z} = -\frac{(cD_{AB})_{avg}(y_{A1} - y_{A2})}{\left(\frac{(y_{B2} - y_{B1})}{\ln\left(\frac{y_{B2}}{y_{B1}}\right)}\right)(z_1 - z_2)} \quad (9.9)$$

## DISEÑO DE TORRES DE ENFRIAMIENTO.

Sin duda esta es la operación más importante. El agua, entibiada por el paso a través de intercambiadores de calor, condensadores y similares, se enfría por contacto con el aire atmosférico para ser utilizada nuevamente. El calor latente del agua es tan grande que una cantidad pequeña de evaporación produce grandes efectos de enfriamiento. Puesto que la rapidez de transferencia de masa es generalmente pequeña, el nivel de temperatura es generalmente bastante pequeño y puesto que la relación de Lewis se aplica al sistema aire-agua en forma razonablemente adecuada, las relaciones de la sección anterior pueden simplificarse bastante mediante aproximaciones razonables. (Treybal, 2012, pág. 274)

Por lo tanto, los términos para el calor sensible en la ecuación (9.10) son despreciables en comparación con el calor latente, se tiene

$$L' c_{A,L} dt_L = G'_S \{ c_S dt + [C_A(t_G - t_0) - c_{A,L}(t_L - t_0) + \lambda_0] dY' \} \quad (9.10)$$

$$L' c_{A,L} dt_L = G'_S c_S dt + G'_S \lambda_0 dY' \approx G'_S dH' \quad (9.11)$$

En esta ecuación, el último término del lado derecho ignora la  $Y'$  que aparece en la definición de  $c_S$  integrando, con la suposición adicional de que  $L'$  es básicamente constante (poca evaporación)

$$L' c_{A,L} (t_{L2} - t_{L1}) = G'_S (H'_2 - H'_1) \quad (9.12)$$

Este balance de entalpia puede representarse graficando la entalpia del gas  $H'$  contra  $t_L$ , como en la figura (9.1). La línea  $ON$  sobre la gráfica representa la ecuación (9.12) y pasa a través de los puntos que representan las condiciones finales de los dos fluidos. Hasta ahora, como  $(L'_2 - L'_1)$  es pequeña en comparación con  $L'$ , la línea es recta con pendiente  $L' \frac{c_{A,L}}{G'_S}$ . La curva en el equilibrio en la figura se grafica para las condiciones del gas en la interfase gas-liquido, es decir, la entalpia del gas saturado a cada temperatura. (Treybal, 2012, pág. 275)

Si la rapidez de transferencia de masa es pequeña, como generalmente lo es, la ecuación

$$q_S G_H^a dz = \frac{N_A M_A c_A}{1 - e^{-\frac{N_A M_A c_A}{h_G}}} (t_G - t_i) a_H dz = h'_G a_H (t_G - t_i) dz \quad (9.13)$$

Y se puede escribir como

$$G'_S dY' = k_Y a_M (Y_i - Y^*) dz \quad (9.14)$$

y la ecuación

$$-G'_S c_S dt = h'_G a_H (t_G - t_i) dz \quad (9.15)$$

se puede escribir como

$$G'_S c_S dt_G = -h'_G a_H (t_G - t_i) dz \quad (9.16)$$

Ignorando el calor sensible del vapor transferido, la ecuación

$$q_{SL} a_H dz = h_L a_H (t_i - t_L) dz \quad (9.17)$$

se puede escribir como

$$L' c_{A,L} dt_L = h_L a_H (t_i - t_L) dz \quad (9.18)$$

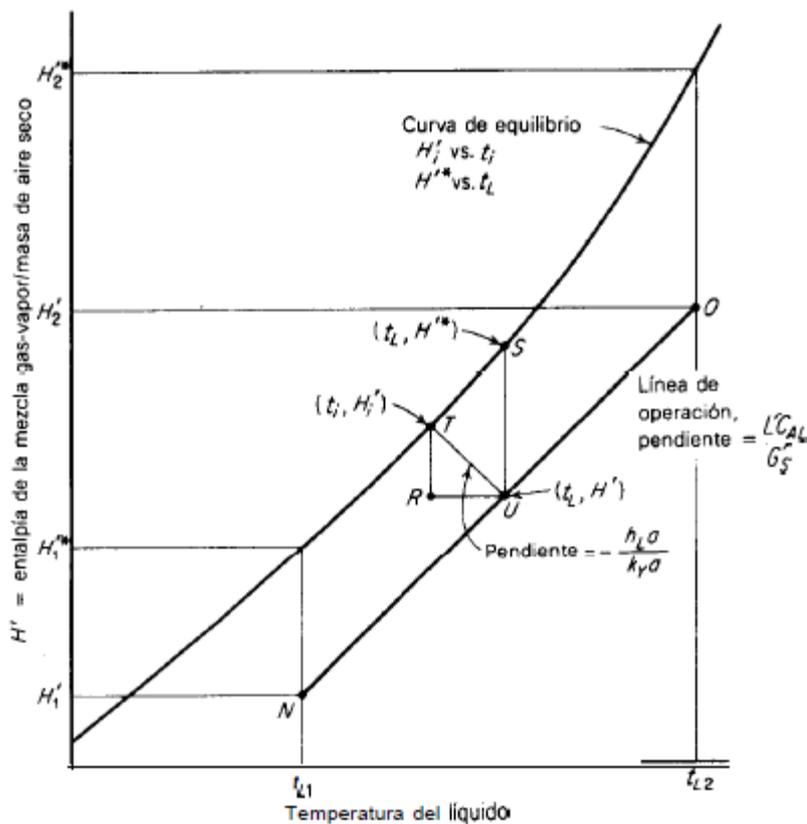


Figura 9.2 Diagrama de evaporación del agua. (Treybal, 2012)

Sustituyendo las ecuaciones (9.14) y (9.16) en la ecuación (9.11):

$$G'_S dH' = h'_G a_H (t_G - t_i) dz + \lambda_0 k_Y a_M (Y'_i - Y'^*) dz \quad (9.19)$$

Si  $\frac{h'_G a_H}{c_S k_Y a_M} = r$ , esto se transforma en

$$G'_S dH' = k_Y a_M [(C_S r t_i + \lambda_0 Y'_i) - (C_S r t_G + \lambda_0 Y')] dz \quad (9.20)$$

Para el caso especial en que ( $r = 1$ ) los términos entre paréntesis son las entalpías del gas. La restricción ( $r = 1$ ) requiere que  $Le = 1$  (aire-agua), y  $a_H = a_M = a$  (esto último será cierto solo en el caso de que el empaque de la torre este completamente irrigado; aun para el

contacto aire-agua, se han observado valores de  $r$  tan altos como 2, con flujos bajos del líquido). Comprendido lo anterior, la ecuación (9.20) es (Treybal, 2012, pág. 276)

$$G'_S dH' = k_Y a_M (H'_i - H') dz \quad (9.21)$$

que es notable por el hecho de que el coeficiente de transferencia de masa se utiliza con una fuerza motriz de entalpia. Combinando las ecuaciones (9.11), (9.18) y (9.21), se tiene

$$G'_S dH' = k_Y a_M (H'_i - H') dz = h_L a_H (t_i - t_L) dz \quad (9.22)$$

En el aparato, en la posición correspondiente al punto U sobre la línea de operación figura (9.1), el punto T representa las condiciones en la interfase; la distancia TR representa la fuerza motriz de entalpia ( $H'_i - H'$ ) dentro de la fase gaseosa. Preparando graficas como la del triángulo RTU en varios lugares a lo largo de la línea de operación, se pueden obtener los valores correspondientes de  $H'_i$  y  $H'$ . Entonces, suponiendo que  $k_Y a$  es constante, la ecuación (9.22) da (Treybal, 2012, pág. 276)

$$\frac{k_Y a}{G'_S} \int_{H'_1}^{H'_2} \frac{dH'}{(H'_i - H')} = \int_0^z dz \quad (9.23)$$

La integral puede calcularse gráficamente, al igual que la altura empacada  $z$ . Algunas veces, a la integral de la entalpia de la ecuación (9.23) se le da otra interpretación. Entonces,

$$\int_{H'_1}^{H'_2} \frac{dH'}{(H'_i - H')} = \frac{H'_2 - H'_1}{(H'_i - H')_{av}} = N_{tG} \quad (9.24)$$

En donde la parte media de la ecuación es el número de veces que la fuerza motriz promedio se divide entre el cambio en la entalpia. Esta es una medida de la dificultad de la transferencia de entalpia, llamada número de unidades de transferencia de entalpia del gas  $N_{tG}$ . En consecuencia,

$$Z = H_{tG} N_{tG} \quad (9.25)$$

En donde la altura de una unidad de transferencia de entalpia del gas  $H_{tG} = \frac{k_Y a}{G'_S}$ . Con frecuencia se prefiere  $H_{tG}$  en lugar de  $k_Y a$ , como una unidad de medida del comportamiento del empaque, puesto que depende menos de los flujos y tiene la sencilla dimensión de la longitud. (Treybal, 2012, pág. 277)

$$N_{tOG} = \int_{H_1}^{H_2} \frac{dH}{(H^* - H')} = \frac{k_Y a z}{G'_S} = \frac{z}{H_{tOG}} \quad (9.26)$$

### EJEMPLO 1 (Treybal, 2012, pág. 278)

Una planta requiere que  $15 \frac{Kg}{s}$  ( $1984 \frac{lb}{min}$ ) de agua refrigerante fluyan a través del equipo de condensación para la destilación; se eliminan así  $270 \text{ W}$  ( $55270 \frac{Btu}{min}$ ) de los condensadores. El agua sale de los condensadores a  $45^\circ\text{C}$ . Para volver al utilizar el agua, se planea enfriarla mediante el contacto con aire en una torre de enfriamiento de tiro inducido. Las condiciones de diseño son: aire entrante a  $30^\circ\text{C}$  temperatura de bulbo seco,  $24^\circ\text{C}$  temperatura de bulbo húmedo; el agua se va a enfriar a  $5^\circ\text{C}$  de la temperatura de bulbo húmedo del aire entrante, o sea, a  $29^\circ\text{C}$ ; una relación de aire/vapor de agua de 1.5 veces el mínimo. El agua de compensación va a entrar de una represa a  $10^\circ\text{C}$ , dureza de 500 ppm (partes por millón) de solidos disueltos. El agua circulante no debe tener una dureza superior a 2000 ppm. Respecto al empaque que se va a utilizar, se espera que  $k_Y a$  sea de  $0.9 \frac{Kg}{m^3 \cdot s \Delta Y}$  ( $202 \frac{lbm}{hr \cdot pie^2 \Delta Y}$ ),

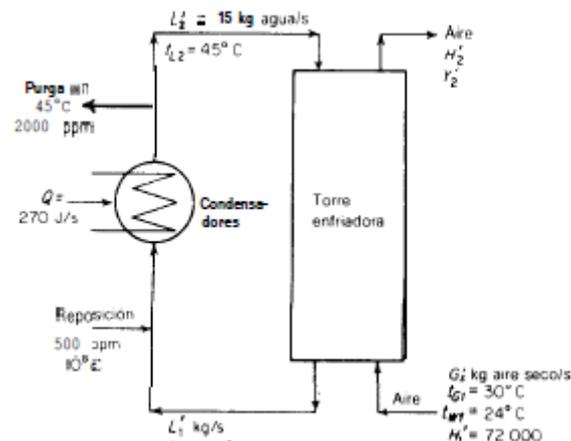


Figura 9.3 Torre de enfriamiento del ejemplo 1. (Treybal, 2012)

Para una rapidez de líquido como mínimo, de  $2.7 \frac{Kg}{m^2 \cdot s}$  ( $1991 \frac{lbm}{hr \cdot pie^2}$ ) y una rapidez del gas de  $2.0 \frac{Kg}{m^2 \cdot s}$  ( $1474 \frac{lbm}{hr \cdot pie^2}$ ). Calcular las dimensiones de la sección de empacada y las necesidades de agua de compensación.

### Solución (Treybal, 2012, pág. 279)

El diagrama de operación, figura (9.4) contiene la curva de la entalpia del aire a saturación; en esta grafica en punto N representa la condición en el fondo de la torre ( $t_{L_1} = 29^\circ\text{C}$ ,  $H_1' = 72000 \frac{\text{Nm}}{\text{Kg aire seco}}$ ). La línea de operación pasara a través de N y terminara en  $t_{L_2} = 45^\circ\text{C}$ . Para el valor mínimo de  $G_S'$ , la línea de operación tendrá pendiente mínima que toque a la curva en la línea de equilibrio, y en consecuencia pasara a través del punto O, en donde  $H_2' = 209500 \frac{\text{Nm}}{\text{Kg de aire seco}}$ . Por lo tanto, la pendiente de la línea O, N es

$$L' \frac{c_{A,L}}{G_S'} = \frac{(H_2' - H_1')}{(t_{L_2} - t_{L_1})} = \frac{\left(15 \frac{\text{Kg}}{\text{s}}\right) \left(4187 \frac{\text{KJ}}{\text{Kg}^\circ\text{C}}\right)}{G_{S' \min}} = \frac{(209500 - 72000) \frac{\text{Nm}}{\text{Kg de aire seco}}}{(45 - 29)^\circ\text{C}}$$

En donde  $G_{S' \min} = 7.31 \frac{\text{Kg de aire seco}}{\text{s}}$ . Para un flujo del gas de 1.5 veces el mínimo,  $G_S = 1.5 \left(7.31 \frac{\text{Kg de aire seco}}{\text{s}}\right) = 10.97 \frac{\text{Kg aire seco}}{\text{s}}$ . Por lo tanto,

$$\frac{H_2' - 72000 \frac{\text{Nm}}{\text{Kg de aire seco}}}{(45 - 29)^\circ\text{C}} = \frac{\left(15 \frac{\text{Kg}}{\text{s}}\right) \left(4187 \frac{\text{KJ}}{\text{Kg}^\circ\text{C}}\right)}{10.97 \frac{\text{Kg aire seco}}{\text{s}}}$$

y  $H_2' = 163600 \frac{\text{Nm}}{\text{Kg de aire seco}}$ , graficado en el punto O. Por lo tanto, la línea de operación es

ON. Para un flujo de líquido de cuando menos  $2.7 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^2\text{s}} \left(1991 \frac{\text{lbm}}{\text{hrpie}^2}\right)$ , la sección transversal

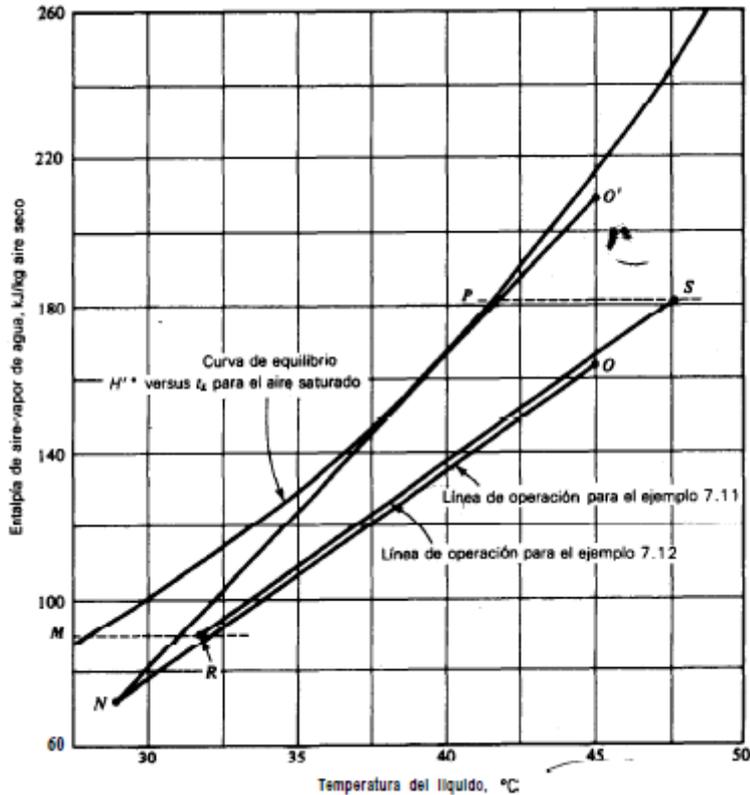
de la torre debe ser  $\frac{\left(15 \frac{\text{Kg}}{\text{s}}\right)}{2.7 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^2\text{s}}} = 5.56 \text{ m}^2$ . Para un flujo de gas de al menos

$2.0 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^2\text{seg}} \left(1474 \frac{\text{lbm}}{\text{hrpie}^2}\right)$ , la sección transversal será  $\frac{10.97 \frac{\text{Kg aire seco}}{\text{s}}}{2.0 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^2\text{seg}}} = 5.5 \text{ m}^2$ . Por lo tanto, se

utilizará la última, puesto que entonces el flujo del líquido excederá el mínimo para asegurar

que  $k_Y a = 0.9 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3\text{s}\Delta Y} \left(202 \frac{\text{lbm}}{\text{hrpie}^2\Delta Y}\right)$ .

Tabla 9.1 Bases:  $1 \text{ m}^2$  de sección transversal,  $G'_S = 2.0 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^2 \text{s}}$ . La fuerza motriz ( $H^* - H$ ) se obtiene a intervalos frecuentes de  $t_L$  en la figura 9.4 de la siguiente forma. (Treybal, 2012)



Los datos de las dos últimas columnas se grafican uno contra el otro, con  $H'$  como abscisa; el área bajo la curva es 3.25. De la ecuación

$$N_{tOG} = \int_{H_1}^{H_2} \frac{dH}{(H^* - H')} = \frac{k_Y a z}{G'_S} = \frac{z}{H_{tOG}} \quad (9.26)$$

$$3.25 = \frac{K_Y a Z}{G'_S} = \frac{0.9 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3 \text{s}} Z}{2.0 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^2 \text{s}}}$$

$z = 7.22 \text{ m de altura empacada}$

Necesidades de agua de compensación

$$E = \text{Rapidez de evaporacion, } \frac{\text{Kg}}{\text{h}}$$

$$W = \text{Pérdida por arrastre, } \frac{\text{Kg}}{\text{h}}$$

$$B = \text{Velocidad de eliminacion, } \frac{\text{Kg}}{\text{h}}$$

$$M = \text{Rapidez de compensacion, } \frac{\text{Kg}}{\text{h}}$$

$$x_a = \text{fracción peso de dureza en el agua circulante}$$
$$x_M = \text{fracción peso de dureza en el agua de compensación}$$

Considerando una compensación y eliminación continuas, un balance total de materia es

$$M = B + E + W$$

Un balance dureza es

$$Mx_M = (B + W)x_C$$

Eliminando  $M$ , se tiene en

$$B = E \left( \frac{x_M}{x_C - x_M} \right) - W$$

Suponiendo que el aire saliente ( $H'_2 = 163600 \frac{Nm}{Kg \text{ de aire seco}}$ ) está básicamente saturado,  $Y'$ , es 0.0475. Entonces la rapidez aproximada de evaporación es

$$E = \left( 2.0 \frac{Kg}{m^2 seg} \right) (5.50)(0.0475 - 0.0160) = 0.3465 \frac{Kg}{s}$$

Se calcula que la pérdida por arrastre es del 0.2% de la rapidez de circulación,

$$W = (0.002) \left( 15 \frac{Kg}{s} \right) = 0.03 \frac{Kg}{s}$$

Las fracciones de peso  $x_M$  y  $x_C$  son proporcionales a los valores correspondientes en ppm.

Por lo tanto, la rapidez de eliminación es

$$B = (0.3465) \left( \frac{500}{2000 - 500} \right) - 0.03 = 0.0855 \frac{Kg}{s}$$

Entonces, se calcula que la rapidez de compensación es

$$M = B + E + W = (0.0855 + 0.03 + 0.3465) \frac{Kg}{s} = 0.462 \frac{Kg}{s}$$

## PROBLEMAS (Treybal, 2012, pág. 305)

1. Una torre enfriadora de corriente inducida, instalada recientemente, está garantizada por el fabricante con respecto a que enfriara  $2000 \text{ U.S. } \frac{Gal}{min}$  ( $0.1262 \frac{m^3}{s}$ ) de agua a  $43^\circ C$  hasta  $30^\circ C$ , cuando el aire con el que se cuenta tenga una temperatura de bulbo

húmedo de  $24^{\circ}\text{C}$ . Una prueba en la torre, operada a la capacidad total del ventilador, proporcione los siguientes datos:

- Agua entrante:  $0.1262 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}$  a  $46^{\circ}\text{C}$
- Agua saliente:  $25.6^{\circ}\text{C}$
- Aire entrante:  $24^{\circ}\text{C}$  de temperatura de bulbo seco y  $15.6^{\circ}\text{C}$  temperatura de bulbo húmedo
- Aire saliente:  $37.6^{\circ}\text{C}$ , básicamente saturado

a) ¿Cuál es la capacidad del ventilador en  $\frac{\text{m}^3}{\text{s}}$ ?

b) ¿Esperaría usted que la torre cumpliera con las condiciones de la garantía? Observe que para lograrlo,  $N_{toG}$  debe ser al menos igual al valor de la garantía, si  $H_{toG}$  no cambia

2. Se desea deshumidificar  $1.2 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}$  ( $2540 \frac{\text{ft}^3}{\text{min}}$ ) de aire, que se tiene a las temperaturas de  $38^{\circ}\text{C}$  de bulbo seco y  $30^{\circ}\text{C}$  de bulbo húmedo, hasta una temperatura de bulbo húmedo de  $15^{\circ}\text{C}$ , en una torre a contracorriente, para la deshumidificación se utilizará agua enfriada a  $10^{\circ}\text{C}$ . El empaque va a ser de anillos Rasching de 50 mm (2 in). Para mantener el arrastre al mínimo,  $G'_S$  va a ser  $1.25 \frac{\text{Kg de aire}}{\text{m}^2\text{seg}}$  ( $992 \frac{\text{lbm}}{\text{hft}^2}$ ) y se va a utilizar un flujo de líquido de 1.5 veces el mínimo.

a) Especifique la sección transversal y la altura de la sección empacada de la torre.



## **CAPÍTULO 10**

# **COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA DE MASA EN REACTORES DE LECHO FLUIDIZADO.**

### **INTRODUCCION**

Los reactores de lecho fluidizado gas-sólido son ampliamente utilizados por la industria. Los ejemplos incluyen craqueo catalítico fluido (FFC), combustión y gasificación, procesamiento de uranio, tostado de mineral de sulfuro, reducción de minerales de hierro y secado. De todos los fenómenos que afectan el desempeño del lecho fluidizado burbujeante como reactores químicos, la transferencia de masa entre fases es probablemente de importancia primordial en la mayoría de los casos.

La transferencia de masa partículas-gas en un lecho fluidizado gas-sólido ha sido un tema esencial de investigación desde la invención de la tecnología de lecho fluidizado. Históricamente, ha habido dos enfoques para modelar la tasa de transferencia de masa en reactores de lecho fluidizado. Un enfoque, llamado enfoque de lecho homogéneo, considera que los reactores de lecho fluidizado se comportan como un lecho fijo y correlaciona el coeficiente de transferencia de masa del lecho fluidizado de manera similar a la de un lecho fijo basado en un modelo de flujo pistón. El otro enfoque, llamado enfoque de lecho burbujeante, considera que el lecho fluidizado consta de dos fases, una burbuja y una emulsión, y el intercambio de gases entre las dos fases constituye la tasa de transferencia de masa. El objetivo de este capítulo es revisar los dos enfoques.

### **ENFOQUE DE LECHO HOMOGENEO**

El enfoque de lecho homogéneo correlaciona el coeficiente de transferencia de masa en un lecho fluidizado de una manera similar a la de un lecho fijo basado en un modelo de flujo pistón. La ecuación de transferencia en este enfoque para un lecho fijo o fluidizado se parece mucho a la de una sola esfera suspendida en una corriente de gas. Sin embargo, la magnitud del coeficiente de transferencia de masa para estas diversas partículas del lecho puede ser significativamente diferente según el tamaño de las partículas y las condiciones de operación. Las siguientes subsecciones revisan por separado la transferencia de masa partícula-gas para varias partículas del lecho con base en este enfoque de lecho homogéneo.

### **TRANSFERENCIA ENTRE ESFERAS INDIVIDUALES Y GAS CIRCUNDANTE**

La tasa de transferencia de masa entre esferas individuales bien dispersas y el gas circundante se puede describir mediante la siguiente ecuación de transferencia de masa:

$$\frac{dN_A}{dt} = k_{g,individual} S_{ex,individual} (c_A^i - c_A) \quad (10.1)$$

donde  $\left(\frac{dN_A}{dt}\right)$  representa la tasa de transferencia de A desde la superficie de la partícula a la corriente de gas,  $k_{g,individual}$  representa el coeficiente de transferencia de masa de la partícula,  $S_{ex,individual}$  es la superficie exterior de la partícula,  $C_A^i$  es la concentración de A en la interfase gas-partícula, y  $C_A$  es la concentración de A en la corriente de gas. El coeficiente de transferencia de masa  $k_{g,individual}$  bajo esta condición de esfera única ha sido bien establecida, tanto teórica como experimentalmente, como

$$Sh_{individual} = \frac{(k_{g,individual})(d_{sph})(y)}{D} = 2 + 0.6(Re_{sph})^{0.5}(Sc)^{0.333} \quad (10.2)$$

En la ecuación anterior,  $Re_{sph}$  es el número de Reynolds de la partícula definido como

$$Re_{sph} = \frac{\rho_g u d_{sph}}{\mu} \quad (10.3)$$

$Sc$  es el número de Schmidt definido como

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D_{AB}} \quad (10.4)$$

y es fracción molar logarítmica media del componente inerte o que no se difunde, y  $D_{AB}$  es el coeficiente de difusión de la fase gaseosa. La ecuación (10.2) implica que el número de Sherwood tiene un mínimo teórico en  $Sh = 2.0$  incluso cuando la partícula se expone a un gas estacionario, es decir,  $u$  (o número de Reynolds) es igual a cero. La ecuación también indica que el coeficiente de transferencia de masa  $k_{g,individual}$  es proporcional al coeficiente de difusión del gas  $D_{AB}$ , y es inversamente proporcional al diámetro de la partícula  $d_{sph}$  y la fracción molar del componente inerte  $y$ . Tenga en cuenta que para partículas no esféricas,  $d_{sph}$  en las ecuaciones (10.2) y (10.3) pueden reemplazarse por el tamaño de pantalla  $d_p$  y las dos ecuaciones se convierten en las ecuaciones (10.5) y (10.6), respectivamente

$$Sh_{individual} = \frac{(k_{g,individual})(d_p)(y)}{D} = 2 + 0.6(Re_p)^{0.5}(Sc)^{0.333} \quad (10.5)$$

$$Re_p = \frac{\rho_g u d_p}{\mu} \quad (10.6)$$

Es esencial notar que la ecuación (10.2) o (10.5) es válido para una sola esfera o esferas individuales bien dispersas en una corriente de gas. Para partículas de lecho empacado o

de lecho fluidizado, el coeficiente de transferencia de masa partícula-gas puede ser mayor o inferior al estimado a partir de las ecuaciones (10.2) o (10.5), dependiendo del número de Reynolds de la partícula.

### Transferencia entre partículas de lecho fijo y gas que fluye

La tasa de transferencia de masa partícula-gas desde un segmento de lecho diferencial de un lecho fijo en la dirección axial puede representarse mediante una ecuación similar a la ecuación (10.1) basado en un modelo de flujo-pistón, es decir,

$$\frac{dN_A}{dt} = k_{g(\text{lecho})} S_{ex,(\text{particulas})} (c_A^i - c_A) \quad (10.7)$$

Sin embargo, esta ecuación,  $\frac{dN_A}{dt}$  representa la tasa de transferencia de masa combinada de todas las partículas en el segmento,  $k_{g(\text{lecho})}$  es el coeficiente de transferencia de masa promedio de las partículas, y  $S_{ex,(\text{particulas})}$  es la superficie exterior total de todas las partículas individuales en el segmento del lecho.

Vale la pena señalar que el coeficiente de transferencia de masa promedio para partículas de lecho fijo puede ser mayor o menor que el de esferas individuales a una velocidad de gas superficial idéntica. Por un lado, la baja porosidad del lecho fijo puede mejorar el coeficiente de transferencia de masa debido a la creación de velocidades de gas reales aumentadas en la interface gas-partícula para las partículas de lecho fijo. Por otro lado, las superficies reales de las partículas involucradas en la transferencia de masa de gas de partículas son más pequeñas para las de lecho fijo que para las partículas bien dispersas debido al bloqueo de partículas en la disposición de lecho fijo. El uso de superficies exteriores totales de todas las partículas individuales en la ecuación (10.7), por lo tanto, sobreestima las superficies activas involucradas en el proceso de transferencia de masa. El efecto neto de esta sobreestimación es disminuir el coeficiente de transferencia de masa promedio evaluado en base a la ecuación (10.7).

### Coeficiente medio de transferencia de masa $k_{g(\text{lecho})}$

Para números de Reynolds de partículas superiores a 80, Ranz (1952) informó que la siguiente ecuación describe el coeficiente de transferencia de masa de gas de partículas para partículas de lecho fijo:

$$Sh_{\text{lecho}} = \frac{(k_{g,\text{lecho}})(d_p)(y)}{D} = 2 + 1.8(Re_p)^{0.5} (Sc)^{0.333} \quad (10.8)$$

**para  $Re_p > 80$**

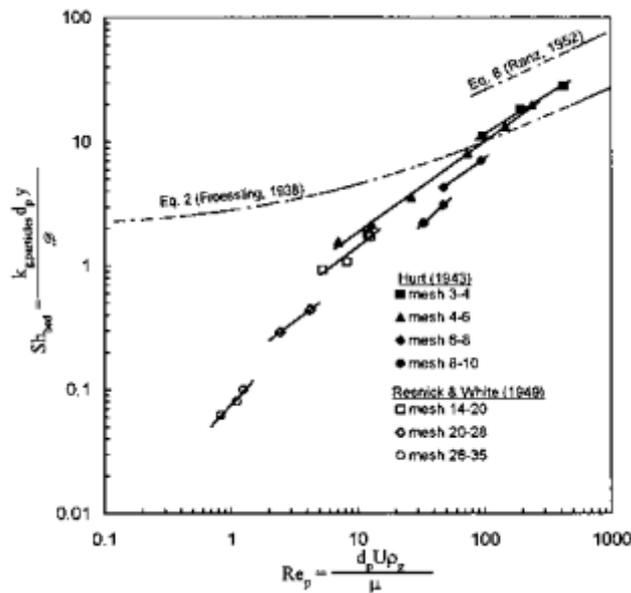
En la ecuación anterior,  $Re_e$  y  $Sc$  se definen de manera similar a las ecuaciones (10.6) y (10.4), pero en el cálculo de  $Re_p$  se utiliza la velocidad superficial del gas, es decir,

$$Re_p = \frac{\rho_g U d_p}{\mu} \quad (10.9)$$

Para partículas más pequeñas, tanto Hurta (1943) como Resnick y White (1949) informaron que el coeficiente de transferencia de masa partícula-gas para partículas de lecho fijo puede ser menor que el estimado a partir de la ecuación (10.2) para esferas individuales. Tenga en cuenta que sus resultados originales se informaron en forma de  $jp$ -factores; esos resultados, sin embargo, se pueden convertir fácilmente al número de Sherwood. El número de Sherwood convertido de los estudios anteriores junto con los de las ecuaciones (10.2) (para esferas individuales) y (10.8) (para partículas grandes de lecho fijo) se representan frente a los números de Reynolds de partículas en la figura (10.1). Como se indica en la figura, el número de Sherwood para partículas de lecho fijo puede ser menor o mayor que la estimada por la ecuación (10.2) para esferas individuales bien dispersas. Para partículas más pequeñas el número de Sherwood puede ser mucho menor que el mínimo teórico del número de Sherwood para esferas individuales, es decir,  $Sh_{individual} = 2.0$ .

### **Superficies exteriores totales de partículas $S_{ex,particulas}$**

Además del coeficiente de transferencia de masa promedio, otro aspecto esencial en la aplicación de la ecuación (10.7) para predecir la tasa de transferencia de masa es la estimación de las superficies exteriores totales de las partículas en el segmento del lecho. A continuación se analizan dos métodos para estimar  $S_{ex,particles}$ .



**Figura 10.1** coeficiente de transferencia de masa partícula-gas para partículas de lecho fijo. (Yang, 2003)

$$S_{ex,particulas} = V_{seg}(1 - \varepsilon_{lecho})a'' \quad (10.10)$$

donde  $V_{seg}$  es el volumen del segmento del lecho,  $\varepsilon_{lecho}$  es la porosidad del lecho y  $a''$  es la relación entre la superficie de la partícula y el volumen de la partícula definido como:

$$a'' = \frac{\pi d_{sph}^2 \Phi_s}{\pi \frac{d_{sph}^3}{6}} = \frac{6}{d_{sph} \Phi_s} \quad (10.11)$$

donde  $\Phi_s$  es la esfericidad de las partículas del lecho ( $\Phi_s = 1.0$  para partículas esféricas y  $0 < \Phi_s < 1.0$  para todas las otras partículas), y  $d_{sph}$  es el diámetro de las partículas esféricas que tienen el mismo el mismo volumen que las partículas del lecho. Las ecuaciones (10.10) y (10.11) se pueden combinar para producir

$$S_{ex,particles} = V_{seg} \left\{ \frac{6(1 - \varepsilon_{bed})}{\Phi_s d_{sph}} \right\} \quad (10.12)$$

La esfericidad para diferentes sólidos se ha calculado y se proporciona en la tabla (10.1). Tenga en cuenta que el término  $\Phi_s d_{sph}$  que aparece en la ecuación (10.12) se denomina diámetro efectivo de la partícula  $d_{eff}$  y se puede estimar de acuerdo con las siguientes aproximaciones:

- a) Para partículas grandes ( $< 1mm$ ),  $d_{sph}$  se puede calcular a partir del tamaño de las partículas con calibradores o un micrómetro si las partículas tienen forma regular, o

pensando un cierto número de partículas si se conoce su densidad, o por desplazamiento de fluido si las partículas no son porosas. La esfericidad  $\Phi_s$  puede medirse directamente, estimarse a partir de la tabla (10.1) o evaluarse mediante experimentos de caída de presión.

b) Para partículas intermedias ( $40\mu m < d_p < 1\text{ mm}$ ) el análisis de pantalla es la forma más conveniente de medir el tamaño de las partículas. El  $d_{eff}$  se estima en base a las siguientes sugerencias:

1. Para partículas irregulares sin una dimensión aparentemente más larga o más corta (por lo tanto, de forma isotrópica),

$$d_{eff} = \Phi_s d_{sph} \cong \Phi_s d_p \quad (10.13)$$

2. Partículas irregulares con una dimensión algo mayor, pero con una relación de longitud no superior a 2:1 (huevos, por ejemplo)

$$d_{eff} = \Phi_s d_{sph} \cong d_p \quad (10.14)$$

3. Partículas irregulares con una dimensión algo más corta, pero con una relación de longitud no superior a 1:2, entonces aproximadamente,

$$d_{eff} = \Phi_s d_{sph} \cong \Phi_s^2 d_p \quad (10.15)$$

4. Partículas muy planas o con forma de aguja, estime la relación entre  $d_p$  y  $d_{eff}$  a partir de los valores de  $\Phi_s$  para los discos y cilindros correspondientes. Un método alternativo para estas partículas es realizar los experimentos de caídas de presión para determinar el tamaño efectivo de las partículas.

c) Para partículas muy pequeñas ( $< 40\mu m$ ), hay dos métodos para determinar el tamaño efectivo de la partícula. Una es utilizar el escaneo de fotografías ampliadas de partículas y la otra es realizar experimentos de sedimentación de partículas en un fluido conocido; la velocidad terminal de estas partículas dará el diámetro de la esfera equivalente.

Tabla 10.1 Esfericidad de las partículas. (Yang, 2003)

Type of particles	Sphericity $\phi_s$	Source
Sphere	1.00	(a)
Cube	0.81	(a)
Cylinder		
$h = d$	0.87	(a)
$h = 5d$	0.70	(a)
$h = 10d$	0.58	(a)
Disks		
$h = d/3$	0.76	(a)
$h = d/6$	0.60	(a)
$h = d/10$	0.47	(a)
Activated carbon and silica gels	0.70–0.90	(b)
Broken solids	0.63	(c)
Coal		
anthracite	0.63	(e)
bituminous	0.63	(e)
natural dust	0.65	(d)
pulverized	0.73	(d)
Cork	0.69	(d)
Glass, crushed, jagged	0.65	(d)
Magnetite, Fischer–Tropsch catalyst	0.58	(e)
Mica flakes	0.28	(d)
Sand		
round	0.86	(e)
sharp	0.66	(e)
old beach	as high as 0.86	(f)
young river	as low as 0.53	(f)
Tungsten powder	0.89	(f)
Wheat	0.85	(d)

$$S_{ex,particulas} = (S)(L)(A) \quad (10.16)$$

cuando

$$S = S_a(1 - X) \quad (10.17)$$

Y

$$S_a = (14) \left[ \frac{X^3}{K_t(1 - X)^2} \right]^{0.5} \quad (10.18)$$

En esta ecuación,  $K_t$  se estima por

$$K_t = \frac{\mu L Q}{A(1 - \Delta P_p)} \quad (10.19)$$

La tabla (10.2) resume las diversas propiedades de las partículas en la investigación realizada por Resnick y White (1949) informaron que la siguiente ecuación se cumple

aproximadamente para una estimación rápida de  $S$  que aparece en la ecuación (10.16) para las partículas involucradas en sus experimentos, es decir,

$$S = \frac{S_d}{d_p} \quad (10.20)$$

donde se informó que  $S_d$  tenía un valor promedio de 4.476. los valores de  $S_d$  para partículas de varios tamaños en sus experimentos también se resumen en la tabla (10.2).

**Tabla 10.2 Propiedades de las partículas de Naftaleno.**  
(Yang, 2003)

Mesh size	$\rho$ (g/cm <sup>3</sup> )	$X$ (—)	$S_a$ (cm <sup>2</sup> /cm <sup>3</sup> )	$S$ (cm <sup>2</sup> /cm <sup>3</sup> )	$d_p$ (cm)	$S_d$ (—)
14–20	0.646	0.391	88.1	53.65	0.089	4.775
20–28	0.626	0.411	106.5	62.73	0.073	4.579
28–35	0.615	0.422	167.7	96.93	0.045	4.362
35–48	0.651	0.389	187.8	114.75	0.039	4.475
48–65	0.607	0.430	262.5	149.63	0.028	4.189
Average	0.629	0.409				4.476

## TRANSFERENCIA ENTRE PARTICULAS DE LECHO FLUIDIZANTE Y GAS FLUIDIZANTE

El enfoque de lecho homogéneo propone la misma ecuación de gobierno para un lecho fluidizado que para un lecho fijo. En este enfoque, la tasa de transferencia de masa partícula-gas para un segmento diferencial del lecho se expresa nuevamente en la siguiente ecuación de transferencia de masa:

$$\frac{dN_A}{dt} = k_{g(\text{lecho})} S_{ex,(\text{particulas})} (c_A^i - c_A) \quad (10.7)$$

En la ecuación anterior el termino  $S_{ex,(\text{particulas})}$  representa las superficies exteriores totales de las partículas fluidizadas en el segmento del lecho, y  $k_{g(\text{lecho})}$  representa el coeficiente de transferencia de masa promedio asociado con estas partículas fluidizadas. Como se mostrara a continuación, para el mismo grupo de partículas,  $k_{g(\text{lecho})}$  siempre es mayor en operaciones de lecho fluidizado que en operaciones de lecho fijo.

**Tabla 10.3 Experimentos de transferencia de masa incluidos en la figura 2 (Yang, 2003)**

Resnick and White (1949)	Air	s. naphthalene	Naphthalene	210–1700	2.2	1.3–2.5
	H <sub>2</sub>				4.4	
	CO <sub>2</sub>					
Kettenring et al. (1950)	Air	v. water	Silica gel Alumina	360–1000	5.9	10–15
Chu et al. (1953)	Air	s. naphthalene	Glass Lead Rape seed	710–1980	10.2	0.3–9.2
Richardson and Szekely (1961)	Air	a. CCl <sub>4</sub>	Active carbon	88–2580	3.0	5 <i>d<sub>p</sub></i>
	H <sub>2</sub>	a. water	Silica gel			
Thodos et al. (1961, 69, 72)	Air	s. dichlorobenzene	Alumina	1800–3100	3.8	0.6–7.0
		v. water	Celite		9.5	
		v. nitrobenzene			11.3	
		v. <i>n</i> -decane				

### **Coefficiente de transferencia de masa promedio, $k_g(\text{lecho})$**

Los coeficientes de transferencia de masa promedio informados para partículas de lecho fluidizado se resumen en la figura (10.2). Como se indica, el coeficiente de transferencia de masa promedio para partículas de lecho fluidizado, nuevamente, puede ser mayor o menor que el estimado por la ecuación (10.2) para esferas individuales bien dispersas. El número de Sherwood para las partículas de lecho fluidizado es generalmente más bajo que el de las esferas simples con números de Reynolds más bajos; sin embargo, puede ser mayor a números de Reynolds más altos ( $Re > 80$ ). Al igual que las partículas de lecho fijo, el número de Sherwood para partículas fluidizadas puede estar muy por debajo del mínimo teórico del número de Sherwood para esferas individuales, es decir,  $Sh_{Individual} = 2.0$ . Esto se debe a la sobreestimación potencial de superficies activas involucradas en la operación de transferencia de masa. En un lecho fluidizado burbujeante, se espera que la mayoría de partículas permanezcan en la fase de emulsión con  $c_A^i$  en equilibrio con  $c_A$  en el gas de emulsión. Muchas de estas partículas pueden considerarse inertes desde el punto de vista de la transferencia porque no contribuyen a una cantidad significativa de transferencia de masa al gas burbujeante. El hecho de que todas las superficies de las partículas se incluyan en el cálculo de la transferencia de masa como se describe en la ecuación (10.7), por lo tanto, sobrestima  $S_{ex,particulas}$ , lo que a su vez reduce el coeficiente de transferencia de masa promedio incluso a un valor por debajo.

Se hizo un intento de correlacionar el coeficiente de transferencia de masa promedio reportado por Resnick y White (1949) para partículas fluidizadas de pequeño tamaño y se obtienen las siguientes ecuaciones (para un sistema de aire,  $Sc = 2.35$ ).

1) Para partículas con tamaño de malla entre 14 y 20 ( $d_p = 1000 \mu m$ ),

$$Sh_{lecho} = 0.200Re_p^{0.937} \quad \text{para } 30 < Re_p < 90 \quad (10.21)$$

2) Para partículas con tamaño de malla entre 20 y 28 ( $d_p = 711 \mu m$ )

$$Sh_{lecho} = 0.274Re_p^{0.709} \quad \text{para } 15 < Re_p < 80 \quad (10.22)$$

3) Para partículas con tamaño de malla entre 28 y 35 ( $d_p = 570 \mu m$ )

$$Sh_{lecho} = 0.773Re_p^{1.107} \quad \text{para } 8 < Re_p < 60 \quad (10.23)$$

4) Para partículas con tamaño de malla entre 35 y 48 ( $d_p = 410 \mu m$ )

$$Sh_{lecho} = 0.071Re_p^{0.926} \quad \text{para } 6 < Re_p < 40 \quad (10.24)$$

5) Para partículas con tamaño de malla entre 48 y 65 ( $d_p = 275 \mu m$ )

$$Sh_{lecho} = 0.041Re_p^{1.036} \quad \text{para } 4 < Re_p < 15 \quad (10.25)$$

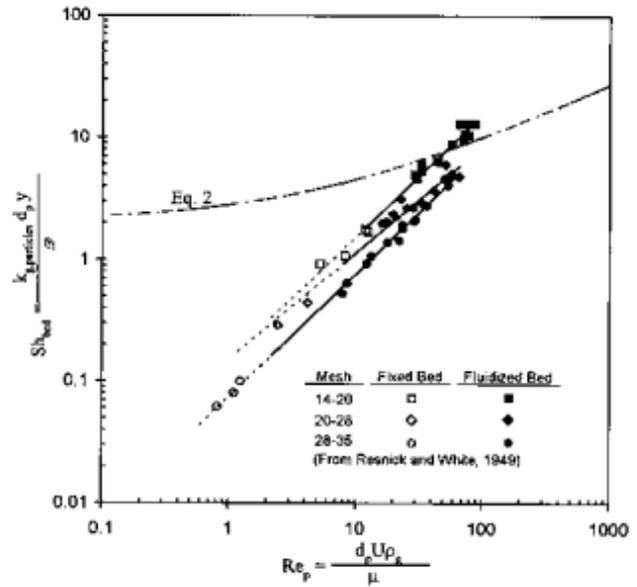
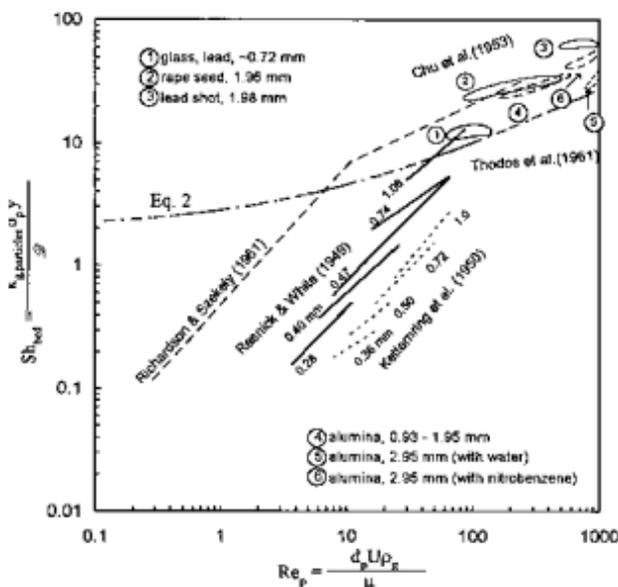


Figura 10.2(a) Coeficiente de transferencia de masa partícula-gas para partículas de lecho fluidizado. (Yang, 2003)

Figura 10.2(b) Comparación del coeficiente de transferencia de masa en lecho fijo y fluidizado. (Yang, 2003)

## TRANSFERENCIA ENTRE ESFERAS AISLADAS SUMERGIDAS Y UN LECHO FLUIDIZADO

Otro tipo de transferencia de masa que se encuentra en un lecho fluidizado implica la transferencia entre una partícula activa sumergida y un lecho fluidizado. Las cámaras de combustión de lecho fluidizado son un ejemplo típico en el que las partículas de carbón activo

se queman en la matriz de partículas químicamente inerte de arena y ceniza que constituyen del 97% al 99% de la masa total del lecho. Se espera que la transferencia de masa entre las partículas activas sumergidas y el gas fluidizante sea diferente a la de un lecho que consta solo de partículas activas, porque las partículas inertes pueden servir como una barrera impermeable para el flujo másico.

El tema de la transferencia de masa entre partículas activas aisladas y el gas fluidizante ha sido estudiado por varios grupos de investigadores Hsiung y Thodos (1977) midieron los coeficientes de transferencia de masa de un lote de partículas de naftaleno fluidizadas en un matriz de partículas inertes de tamaño y densidad similares. Vandershuren y Delvossalle (1980) estudiaron experimentalmente el proceso de secado de partículas húmedas en un lecho fluidizado de partículas secas similares. Palchonok y Tamarin (1983, 1985) midieron los coeficientes de transferencia de masa para una partícula activa aislada de varios tamaños ( $d_{p,a} = 3.5 - 30 \text{ mm}$ ) que se mueve libremente dentro de un lecho fluidizado de partículas inertes grandes ( $d_{p,i} = 1.2 - 6.3 \text{ mm}$ ).

En un intento de proporcionar una mejor correlación para el coeficiente de transferencia de masa, Palchonok (1992) derivó una fórmula de interpolación que acopla una ecuación derivada de Palchonok y Tamarin (1984), es decir,

$$Sh_a = 0.117Ar^{0.39}Sc^{0.33} \quad (10.26)$$

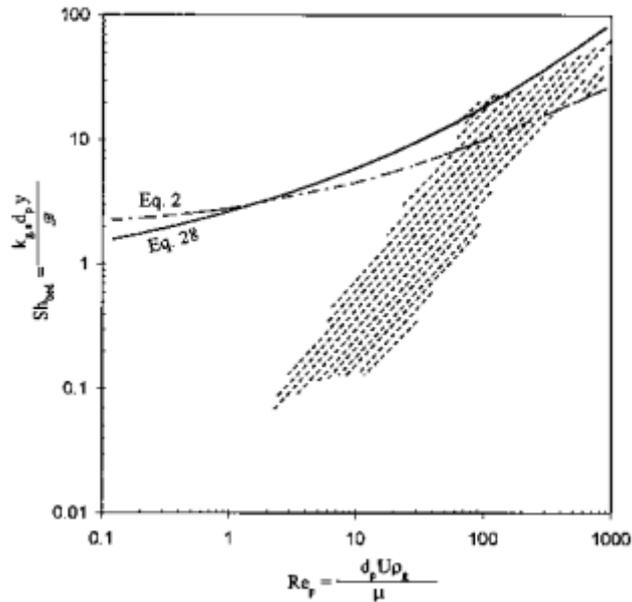
con una expresión sugerida por Avedesian (1972) para el número límite de Sherwood, es decir,

$$Sh_{limite} = \frac{k_{g,a}d_p y}{D} = 2\epsilon_{mf} \quad (10.27)$$

para convertirse

$$Sh_a = 2\epsilon_{mf} + 0.117Ar^{0.39}Sc^{0.33} \quad (10.28)$$

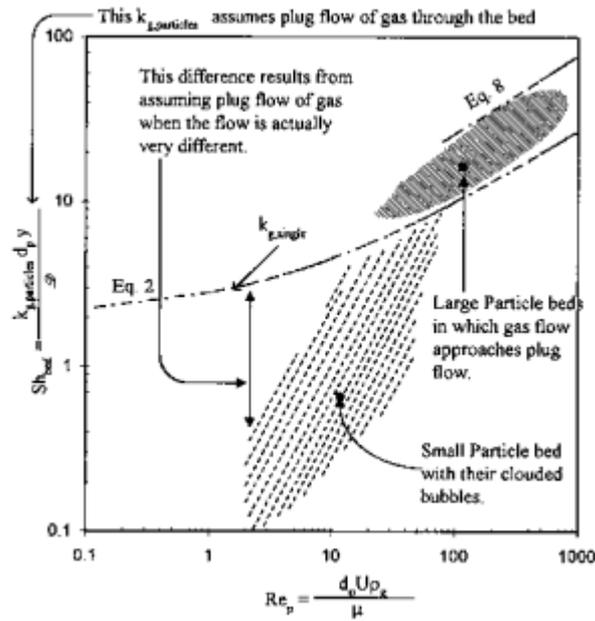
Los autores informaron que la ecuación (10.28) describe bien los resultados experimentales propios y de otros grupos de investigación. El número de Sherwood estimado a partir de la ecuación (10.28) se grafica contra  $Re_p$  en la figura (10.3)



*Figura 10.3 Coeficientes de transferencia de masa entre partículas activas aisladas sumergidas y un lecho fluidizado de partículas inertes. (Área sombreada: rango del coeficiente de transferencia de masa partícula-gas medido en un lecho fluidizado de solo partículas activas. (Yang, 2003)*

## ENFOQUE DE LECHO BURBUJEANTE

El enfoque de lecho burbujeante tiene en cuenta la naturaleza heterogénea de un lecho fluidizado, en particular, la coexistencia de las fases de burbuja y emulsión. En este enfoque se supone que la fase de burbuja consiste en burbujas esféricas rodeadas de nubes esféricas. Históricamente se han propuesto tres clases de modelos para describir el proceso de transferencia de masa en un lecho fluidizado basado en el lecho burbujeante.



*Figura 10.4 Resumen del coeficiente de transferencia de masa partícula-gas. (Iborra, 2013) (Yang, 2003)*

### Modelo de Kunii y Levenspiel (1991)

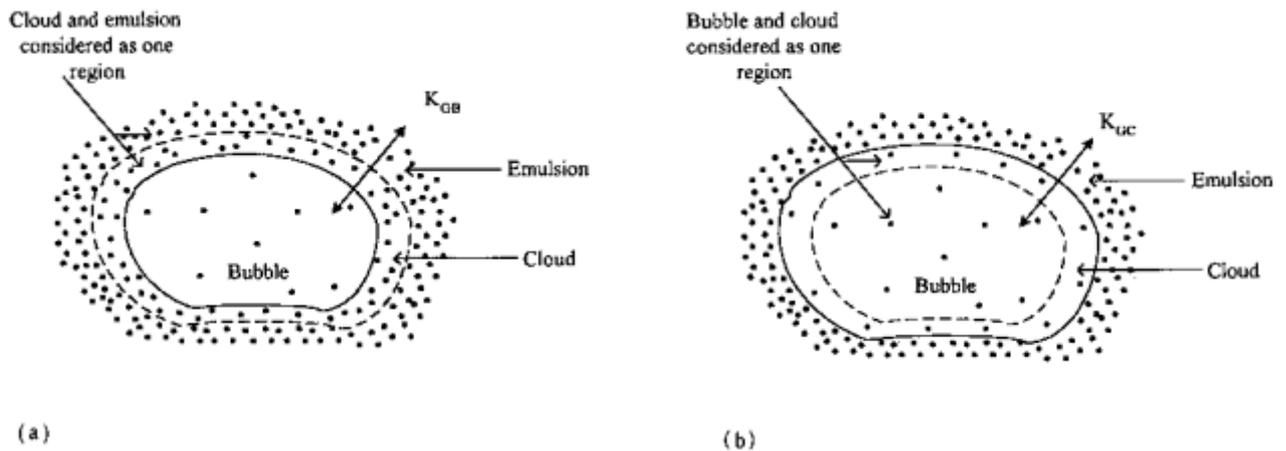
Kunii y Levenspiel consideraron la vaporización o sublimación de A de todas las partículas en el lecho. Asumieron que el gas fresco ingresa al lecho solo como burbujas, y que en el estado estacionario la medida de la sublimación de A viene dada por el aumento de  $C_A$  con la altura en la fase de burbuja. Asumieron además que el equilibrio se establece rápidamente entre  $C_A$  en la interfase gas-película y sus alrededores. Las suposiciones anteriores conducen a una ecuación de transferencia de masa en términos de un coeficiente de transferencia de masa de emulsión de burbujas,  $K_{GB}$ :

$$\frac{dN_A}{dt} = u_b V_{burbuja} \left( \frac{dc_{A,b}}{dz} \right) = K_{GB} V_{burbuja} (c_{A,c} - c_{A,b}) \quad (10.30)$$

### Relación entre $K_{GB}$ y $k_{g,lecho}$

La ecuación anterior propuesta por Kunii y Levenspiel (1991), es decir, la ecuación (10.30), se puede derivar la expresión de transferencia de masa tradicional descrita previamente con base en el enfoque de lecho homogéneo, es decir,

$$\frac{dN_A}{dt} = k_{g(lecho)} S_{ex,(particulas)} (c_A^i - c_A) \quad (10.7)$$



**Figura 10.5 Descripción grafica de  $K_G$  y  $K_{GC}$  (Yang, 2003)**  
**(a) Nube de Burbujas intercambio**  
**(b) Intercambio nube-emulsión**

Con la suposición de que el gas fresco ingresa al lecho solo como burbujas, la ecuación (10.7) se puede reescribir como sigue

$$\frac{dN_A}{dt} = k_{g(\text{lecho})} S_{ex,(\text{particulas})} (c_A^i - c_{A,b}) \quad (10.31)$$

donde  $c_{A,b}$  es la concentración de A en la fase burbuja. La ecuación (10.31) se puede reescribir de la siguiente manera

$$\frac{d(V_{Burbuja} c_{A,b})}{dt} = k_{g(\text{lecho})} S_{ex,(\text{particulas})} (c_A^i - c_A) \quad (10.32)$$

La ecuación anterior se puede reorganizar para convertirse

$$V_{Burbuja} \left( \frac{dc_{A,b}}{dt} \right) = k_{g(\text{lecho})} S_{ex,(\text{particulas})} (c_A^i - c_A) \quad (10.33)$$

O

$$\left( \frac{dc_{A,b}}{dt} \right) = k_{g(\text{lecho})} \left( \frac{S_{ex,(\text{particulas})}}{V_{Burbuja}} \right) (c_A^i - c_A) \quad (10.34)$$

Tenga en cuenta que la ecuación (10.32)

$$\frac{dN_A}{dt} = V_{Burbuja} \left( \frac{dc_{A,b}}{dt} \right) \quad (10.35)$$

O

$$\frac{dN_A}{V_{Burbuja} dt} = \left( \frac{dc_{A,b}}{dt} \right) \quad (10.36)$$

Entonces con la nomenclatura dada en la figura (10.6), para un segmento de lecho de altura  $dz$ , podemos escribir

$$dt = \frac{dz}{u_b} \quad (10.37)$$

Insertando la ecuación (10.37) en la ecuación (10.34)

$$\left(\frac{dc_{A,b}}{dt}\right) = u_b \left(\frac{dc_{A,b}}{dz}\right) = k_{g(\text{lecho})} \left(\frac{S_{ex,(\text{particulas})}}{V_{Bubble}}\right)_{\text{Segmento}} (c_A^i - c_A) \quad (10.38)$$

donde los términos  $S_{ex,(\text{particulas})}$  y  $V_{Bubble}$  en el segmento de lecho se pueden formular respectivamente por

$$S_{ex,(\text{particulas})} = Adz(1 - \varepsilon_f)a' \quad (10.39)$$

y

$$V_{Burbuja} = Adz\delta \quad (10.40)$$

En las ecuaciones anteriores,  $a'$  es la relación entre la superficie de la partícula y el volumen de la partícula definida previamente como

$$a' = \left(\frac{\text{Superficie de la partícula}}{\text{Volumen de la partícula}}\right) = \frac{\pi d_p^2 \Phi_s}{\pi \frac{d_p^3}{6}} = \frac{6}{d_p \Phi_s} \quad (10.11)$$

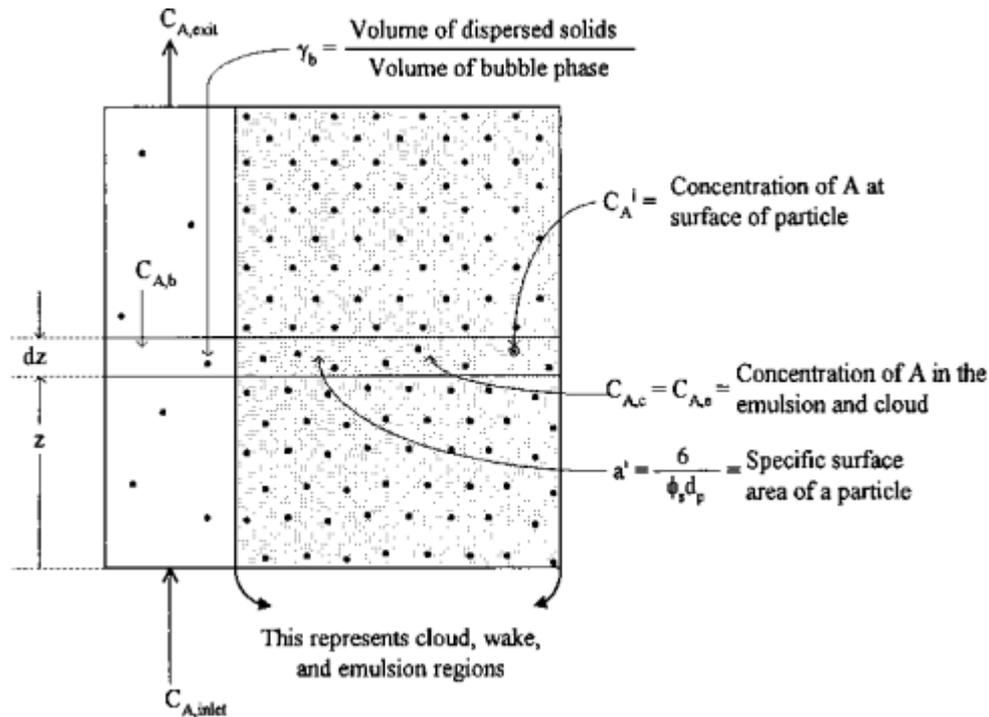


Figura 10.6 Nomenclatura ocupada en el desarrollo del modelo de Kunii y Levenspiel. (Yang, 2003)

$\varepsilon_f$  es la fracción vacía en un lecho fluidizado como un todo, y  $\delta$  es la fracción de burbujas en el segmento del lecho, las ecuaciones (10.39) y (10.40) se pueden combinar para producir

$$\left( \frac{S_{ex(particulas)}}{V_{Burbuja}} \right)_{Segment} = \frac{(1 - \varepsilon_f) a''}{\delta} \quad (10.41)$$

Insertando la ecuación (10.41) en la ecuación (10.38)

$$\left( \frac{dc_{A,b}}{dt} \right) = u_b \left( \frac{dc_{A,b}}{dz} \right) = k_{g(lecho)} \frac{(1 - \varepsilon_f) a''}{\delta} (c_A^i - c_A) \quad (10.42)$$

y al combinar la ecuación (10.36), la ecuación se convierte en

$$\frac{dN_A}{dt} = u_b \left( \frac{dc_{A,b}}{dz} \right) = k_{g(lecho)} \frac{(1 - \varepsilon_f) a''}{\delta} (c_A^i - c_A) \quad (10.43)$$

Con la suposición de que el equilibrio se establece rápidamente entre  $C_A$  en la interfase gas-partícula y sus alrededores, es decir,  $c_A^i = c_{A,e} = c_{A,c}$  en la ecuación (10.43) se puede expresar como

$$\frac{dN_A}{dt} = u_b V_{Burbuja} \left( \frac{dc_{A,b}}{dz} \right) = V_{Burbuja} k_{g(lecho)} \frac{(1 - \varepsilon_f) a''}{\delta} (c_A^i - c_A) \quad (10.44)$$

Una comparación entre las ecuaciones (10.44) y (10.30)

$$K_{GB} = k_{g(lecho)} \frac{(1 - \varepsilon_f) a''}{\delta} \quad (10.45)$$

Tenga en cuenta que la ecuación (10.45)

$$k_{g(lecho)} = \frac{K_{GB} \delta}{\{(1 - \varepsilon_f) a''\}} \quad (10.46)$$

Combinando con la ecuación (10.11), la ecuación da

$$Sh_{lecho} = \frac{k_{g,lecho} d_p y}{D} = \frac{\left( \frac{\delta}{(1 - \varepsilon_f) a''} \right) K_{GB} d_p y}{D} = \frac{y \Phi_s d_p^2 \delta}{6D(1 - \varepsilon_f)} K_{GB} \quad (10.47)$$

### $K_{GB}$ para partículas no porosas y no absorbentes

Para un lecho fluidizado con partículas no porosas y no absorbentes, las partículas dispersas de la fase de burbuja no contribuirán a ninguna transferencia de masa adicional, por lo que la transferencia de gas a través del límite burbuja-nube es la única forma de transferencia de masa, es decir,

$$K_{GB} = K_{bc} \quad (10.48)$$

donde  $k_{bc}$  es el coeficiente de intercambio nube-burbuja obtenido por Davidson y Harrison (1963), es decir,

$$K_{bc} = 4.5 \left( \frac{U_{mf}}{d_b} \right) + 5.85 \left( \frac{D^{0.5} g^{0.25}}{d_b^{1.25}} \right) \quad (10.49)$$

Tenga en cuenta que la expresión anterior para  $K_{bc}$  considera los efectos combinados de flujo gas ( $q$ ) y el coeficiente de transferencia de masa entre burbuja y nube ( $K_{bc}$ )

$$K_{bc} = q + k_{bc} S_{ex,burbuja} \quad (10.50)$$

cuando

$$q = \frac{3\pi}{4} U_{mf} d_b^2 \quad (10.51)$$

y

$$k_{bc} = 0.975 D^{0.5} \left( \frac{g}{d_p} \right)^{0.25} \quad (10.52)$$

Insertando la ecuación (10.48) en la ecuación (10.47)

$$Sh_{bed} = \frac{y \Phi_s d_p^2 \delta}{6D(1 - \varepsilon_f)} K_{bc} \quad (10.53)$$

La ecuación anterior proporciona una correlación para estimar  $Sh_{bed}$  (o  $k_{g,bed}$ ) en función de las propiedades de fluidización y partículas, que luego se pueden usar para determinar la tasa de transferencia de masa empleando la ecuación (10.7) basado en el enfoque de lecho homogéneo. En la aplicación, se necesitan las siguientes ecuaciones proporcionadas por Kunii y Levenspiel (1991) para calcular las propiedades de fluidización que aparecen en la ecuación (10.53).

$$\delta = \frac{U - U_{mf}}{u_b} \quad (10.54)$$

$$u_b = (U - U_{mf}) + u_{br} \quad (10.55)$$

$$u_{br} = 0.711(gd_b)^{0.5} \quad (10.56)$$

$$1 - \varepsilon_f = (1 - \varepsilon_{mf})(1 - \delta) \quad (10.57)$$

Las ecuaciones anteriores indican que, además de las propiedades del gas y de las partículas, las propiedades de fluidización son función únicamente del tamaño de la burbuja

#### **$K_{GB}$ para partículas altamente adsorbentes**

Para partículas altamente adsorbentes o sublimables, tanto las partículas dispersas en la fase de burbuja como el intercambio gas-nube de burbujas pueden contribuir a la transferencia de masa partícula-gas, y la expresión para  $K_{GB}$  toma la forma

$$K_{GB} = \gamma_b a' k_{ex,individual} + K_{bc} = \gamma_b \left( \frac{6}{d_p \Phi_s} \right) k_{ex,individual} + K_{bc} \quad (10.58)$$

dado que  $k_{ex,individual}$  puede estar relacionado con  $Sh_{individual}$  por

$$k_{ex,individual} = \frac{Sh_{individual} D}{d_p y} \quad (10.59)$$

La ecuación (10.58) se puede reorganizar para convertirse en

$$K_{GB} = \gamma_b \left[ \left( \frac{6}{d_p \Phi_s} \right) \left( \frac{Sh_{individual} D}{d_p y} \right) \right] + K_{bc} \quad (10.60)$$

Insertando la ecuación (10.60) en la ecuación (10.47) obtenemos

$$Sh_{bed} = \left( \frac{\delta}{1 - \varepsilon_f} \right) \left[ (\gamma_b) (Sh_{individual}) + \left( \frac{\Phi_s d_p^2 y}{6D} \right) K_{GB} \right] \quad (10.61)$$

Como la ecuación (10.53) esta ecuación proporciona una correlación para estimar  $Sh_{bed}$  (o  $k_{g,bed}$ ) en función de las propiedades de la fluidización y partículas, que luego se pueden ocupar para determinar la tasa de transferencia de masa empleando la ecuación (10.7). las ecuaciones (10.54) y (10.57) también son necesarias para calcular las propiedades de la

fluidización que aparecen en la ecuación (10.61). Una vez más, todas estas ecuaciones indican que, además de las propiedades del gas y de las partículas, las propiedades de fluidización son función únicamente del tamaño de la burbuja. Tenga en cuenta que, para un lecho dado de sólidos y tamaño de burbuja constante, la ecuación (10.61) se reduce a la forma de Kunii y Levenspiel (1991).

$$Sh_{lecho} = aRe_p + b \quad (10.62)$$

### $K_{GB}$ para partículas porosas o parcialmente adsorbentes

Para partículas porosas pero adsorbentes o parcialmente adsorbentes, Kunii y Levenspiel derivaron las siguientes ecuaciones involucrando  $\eta_d$

$$Sh_{bed} = \left( \frac{\delta}{1 - \varepsilon_f} \right) \left[ (\gamma_b)(Sh_{individual})\eta_d + \left( \frac{\Phi_s d_p^2 y}{6D} \right) K_{GB} \right] \quad (10.63)$$

cuando

$$\eta_d = \frac{1}{1 + \frac{\alpha}{m}} \quad (10.64)$$

y

$$\alpha = \frac{6k_{g,single} t_{p,mean}}{\Phi_s d_p} \quad (10.65)$$

Nótese que en la ecuación (10.64),  $m$  es el equilibrio de la adsorción constante definida como

$$c_{As} = mc_A^i \quad (10.66)$$

donde  $C_A$  es la concentración del trazador A dentro de la partícula en equilibrio con la concentración  $C_A^i$  del gas trazador en la interfase gas-partícula. Tenga en cuenta que para partículas no porosas y no adsorbentes,  $m = 0$  y  $\eta_d = 0$ , la ecuación (10.63) reduce a la ecuación (10.53). Para partículas altamente adsorbentes,  $m$  es del orden de miles, en cuyo caso  $\eta_d = 1.0$  y la ecuación (10.63) se convierte en la ecuación (10.61). Para partículas porosas pero no adsorbentes,  $m = \varepsilon_p$  y la ecuación (10.63) se puede ocupar para estimar  $Sh_{bed}$ .

## MODELO DE PARTRIDGE Y ROWE

En esta clase de modelos, la nube que rodea la burbuja se considera el límite primario de transferencia de masa, y las fases de la burbuja y la nube se consideran una sola fase perfectamente mezclada, como se indica en la figura (10.5b). La ecuación de transferencia de masa entonces tiene la forma

Figura 10.4 Efecto de  $\eta_d \gamma_d$  sobre  $K_{GB}$ . (Yang, 2003)

$d_{b,m}$ (m)	0.04	0.06	0.08	0.11
$K_{GB,measured}$ ( $s^{-1}$ )	11-16	9-18	8-14	7-11
calculated, with $\gamma_b \eta_d = 0$	5	3	2	1.6
$K_{GB}$ calculated, with $\gamma_b \eta_d = 4 \times 10^{-4}$	13	12	12	11

$$\frac{dN_A}{dt} = V_{cloud} \left( \frac{dc_{A,c}}{dt} \right) = k_{gc} S_{ex,cloud} (c_{A,e} - c_{A,c}) \quad (10.67)$$

donde  $V_{cloud}$  es el volumen de gas en la fase de nube de burbujas,  $k_{gc}$  es el coeficiente de transferencia de masa de la emulsión de la nube y  $S_{ex,cloud}$  el área de superficie exterior de la nube. Por la analogía con la transferencia de una gota de un líquido inmisible que sube a través de otro, Particle y Rowe propusieron que el coeficiente de transferencia de masa este correlacionado por la ecuación numérica de Sherwood.

$$Sh_c = \frac{k_{gc} d_c}{D} = 2.0 + 0.69 Sc^{0.33} Re_c^{0.5} \quad (10.68)$$

donde  $Sc$  es el número de Schmidt definido previamente como

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D} \quad (10.4)$$

y  $Re_c$  es un número de Reynolds definido en términos de la velocidad relativa,  $u_R$ , entre la nube ascendente y la emulsión ( $u_R = u_c u_e$ ), definido como

$$Re_c = \frac{u_R d_c \rho_g}{\mu} \quad (10.69)$$

En esta ecuación  $d_c$  es el diámetro de la esfera con el mismo volumen que la nube, mientras que  $D$ ,  $\mu$  y  $\rho_g$  representan la difusividad, la viscosidad y la densidad fluidificante, respectivamente.

La ecuación de transferencia de masa dada en la ecuación (10.67), también se puede expresar en términos del coeficiente de intercambio de nube a emulsión,  $K_{GC}$ , de la siguiente manera:

$$\frac{dN_A}{dt} = V_{cloud} \left( \frac{dc_{A,c}}{dt} \right) = K_{GC} V_{cloud} (c_{A,e} - c_{A,c}) \quad (10.70)$$

$$K_{GC} = \frac{k_{gc} \pi d_c^2 \varepsilon_{mf}}{V_{cloud}} = \frac{(3.9) \varepsilon_{mf} D S h_c}{(V_{cloud})^{0.67}} \quad (10.71)$$

### MODELO DE CHAVARIE Y GRACE (1976<sup>a</sup>)

Chavarie and Grace midieron las tasas de transferencias de masa de burbujas que contenían ozono inyectadas en un lecho bidimensional de aire fluidizado y propusieron la siguiente ecuación empírica para su resultado:

$$\frac{dN_A}{dt} = V_{cloud} \left( \frac{dc_{A,b}}{dt} \right) = k_{gt} S_{ex,burbuja} (c_{A,e} - c_{A,b}) \quad (10.72)$$

Midieron los  $k_{gt}$  medidos con las predicciones de varios modelos disponibles en la literatura y encontraron que aquellos que suponían una combinación de flujo continuo y difusión tenían que sobreestimar la tasa de transferencia, mientras que aquellos que suponían un mecanismo puramente difusivo la sobreestimaban. La tabla (10.5) ilustra los resultados de varios modelos. Llegaron a la conclusión de que la ecuación de flujo continuo propuesta por Murray (1965) se ajustaba mejor a sus datos, lo que conducía a

$$k_{gt} = \frac{U_{mf}}{\pi} \quad (10.73)$$

En un intento de seguimiento, Sit y Grace (1978) derivaron las siguientes ecuaciones para incluir el mecanismo de difusión en la expresión. Para una burbuja circular bidimensional, la ecuación tiene la forma

$$k_{gt} = \frac{U_{mf}}{\pi} + \left( \frac{4D\varepsilon_{mf}u_b}{\pi d_p} \right)^{0.5} \quad (10.74)$$

**Tabla 10.5 Modelos de transferencia de masa entre fases y coeficientes para el intercambio de ozono en un lecho bidimensional de aire fluidizado. (Yang, 2003)**

Model	Reference	Coefficient	$k_{gt}$ equivalent	Calculated $k_{gt}$ (m/s)
1. Penetration	Chavarie (1973)	$k_{gc} = \frac{4D\varepsilon_{mf}u_b}{\pi d_c}$	$k_{gc}$	0.0051
2. Cloud two film	Walker (1970)	$k_{gc} = \frac{0.93D\varepsilon_{mf}U_{mf}\sqrt{\alpha-1}}{d_c}$	$\frac{2}{3}k_{gc}$	0.0017
3. Partridge and Rowe	Partridge and Rowe (1966)	$k_{gc} = \frac{0.26DRe_c^{0.6}Sc^{0.33}}{d_c}$	$\varepsilon_{mf}k_{gc}$	0.0020
4. Chiba and Kobayashi	Chiba and Kobayashi (1970)	$k_{gc} = \sqrt{\frac{4D\varepsilon_{mf}^2u_b(\alpha-1)}{\pi d_c\alpha}}$	$k_{gc}$	0.0030
5. Kunii and Levenspiel	Kunii and Levenspiel (1969)	$k_{gb} = 0.6D^{1/2}(g/d_b)^{1/4}$ $q = 2U_{mf}d_bw$ $Q = q + k_{gb}S_b$ $k_{gc} = \frac{4D\varepsilon_{mf}u_b}{\pi d_c}$	$\frac{k_{gc}Q}{k_{gc}S_b + Q}$	0.0051
6. Toei et al.	Toei et al. (1969)	$k_{gc} = \frac{1.02\varepsilon_{mf}}{1 + 2\varepsilon_{mf}/(\alpha-1)} \sqrt{\frac{u_b D(\alpha-1)}{d_b\alpha}} \sqrt{\frac{\alpha-1}{\alpha+1}}$	$k_{gc} + k_{gs}$	0.0056
7. Murray through-flow, no diffusion	Murray (1965)	$k_{gb} = 0$ $q = U_{mf}d_bw$	$q/S_b$	0.0160
Empirical value (from Charvarie and Grace, 1976a)				0.0160

y para una burbuja tridimensional esférica, tiene la forma

$$k_{gt} = \frac{U_{mf}}{4} + \left( \frac{4D\varepsilon_{mf}u_b}{\pi d_p} \right)^{0.5} \quad (10.75)$$

La ecuación anterior se puede convertir a  $K_{GT}$ , el coeficiente de intercambio de masa por unidad de volumen de burbuja, en función de la relación adecuada de superficie a volumen, es decir,

$$K_{GT} = \frac{6}{d_p} k_{gt} = \frac{1.5U_{mf}}{d_b} + \left( \frac{12}{d_b^{1.5}} \right) \left( \frac{D\varepsilon_{mf}u_b}{\pi d_b} \right)^{0.5} \quad (10.76)$$

La correspondiente ecuación de transferencia de masa para  $K_{GT}$  aparece en la ecuación (10.76) es

$$\frac{dN_A}{dt} = V_{Bubble} \left( \frac{dc_{A,b}}{dt} \right) = K_{GT} V_{Bubble} (c_{A,e} - c_{A,b}) \quad (10.77)$$

## PROBLEMAS (Iborra, 2013, pág. Sección 3.6)

- Se está utilizando un reactor de lecho fluidizado a nivel de planta piloto para estudiar una determinada reacción química. El diámetro del reactor es  $91.4 \text{ cm}$  y se tratan  $28 \times 10^3 \frac{\text{cm}^3}{\text{s}}$  de un alimento gaseoso a las condiciones de operación de la reacción. El diámetro medio de las partículas es  $100 \mu\text{m}$ . La altura de lecho en condiciones de fluidización es  $91.4 \text{ cm}$ . El distribuidor es una placa porosa. Determinar la cantidad (kg) de catalizador presente en el lecho.

Datos adicionales:  $\Phi_s = 0.7$ ,  $\rho_F = 1.07 \times 10^{-3} \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$ ,  $\rho_P = 1.3 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$ ,  $\mu_F = 1.5 \times 10^{-4} \text{ poise } \left( \frac{\text{g}}{\text{cms}} \right)$

- En un reactor de relleno de laboratorio ( $L_{\text{relleno}} = 10 \text{ cm}$  y  $u_0 = 2 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$ ) la conversión es del 97% para la reacción de primer orden  $A \rightarrow B$ . Calcular la conversión en un lecho fluidizado más grande a escala planta piloto ( $L_{\text{relleno}} = 100 \text{ cm}$  y  $u_0 = 20 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$ ) en el que se ha estimado un tamaño de burbujas de  $8 \text{ cm}$ .

Datos:  $u_{mf} = 3.2 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$ ,  $\varepsilon_{mf} = \varepsilon_r = 0.5$ ,  $D_{AB} = 0.204 \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$ ,  $\alpha = 0.344$

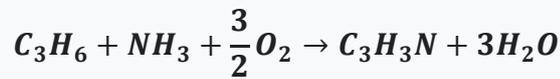
- Un gas reactivo que circula con una velocidad superficial,  $u_0 = 0.3 \frac{\text{m}}{\text{s}}$  y con un caudal volumétrico de  $0.3\pi \frac{\text{m}^3}{\text{s}}$  pasa a través de un lecho fluidizado de  $2 \text{ m}$  de diámetro que contiene  $7$  toneladas de catalizador de densidad  $2000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ . Las condiciones de fluidización son:  $u_{mf} = 0.03 \frac{\text{m}}{\text{s}}$  y  $\varepsilon_{mf} = 0.5$ . La reacción sigue la estequiometría  $A \rightarrow B$  y el modelo cinético es:  $-r_A = kC_A$  con  $k = 4 \times 10^{-4} \text{ m}^3 \frac{\text{fluido}}{(\text{kg} \cdot \text{s})}$ .

Comprobando que se puede aplicar el modelo de Kunii-Levenspiel ( $d_b \ll d_{b \text{ reactor}}$  y borboteo rápido,  $u_{br} \gg u_{mf}$ )

- Calcular la conversión del reactivo
- La altura del lecho fluidizado y la del lecho fijo ( $\varepsilon_r = 0.4$ )
- La conversión que se obtendría si operase como un lecho fijo de flujo en pistón ideal, y como un reactor con mezcla perfecta para el gas. Discutir los resultados, las causas y proponer una posible mejora para el reactor fluidizado.

Datos adicionales:  $C_{A_0} = 100 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$ ,  $D_{AB} = 2 \times 10^{-5} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$ ,  $\alpha = 0.33$ , medida estimada para la burbuja de gas:  $d_b = 0.32 \text{ m}$ ,  $y_b = 0.003$

- Estimar la cantidad de catalizador necesaria en un reactor de lecho fluidizado, según el modelo de borboteo de Kunii-Levenspiel, para producir  $6 \times 10^7 \frac{\text{Kg}}{\text{año}}$  de acrilonitrilo por amoxidación de propileno en presencia de aire



El alimento contiene  $\text{C}_3\text{H}_6$  y  $\text{NH}_3$  en proporción estequiométrica y con un 20% en exceso de aire (79% molar en  $\text{N}_2$  y 21% en  $\text{O}_2$ ). La conversión a alcanzar respecto al propeno es 70%, la temperatura de trabajo  $400^\circ\text{C}$ , la presión 2 bar y la fracción de días en operación 0,94. Calcular el diámetro y la altura del reactor fluidizado. Comparar con la cantidad de catalizador que haría falta si el reactor (suponer densidad constante) fuese:

1) flujo de pistón ideal

2) mezcla perfecta

Datos:  $d_b = 0.1$ ;  $d_p = 0.05 \text{ mm}$ ;  $\rho_p = 2500 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$ ;  $\mu = 1.44 \frac{\text{Kg}}{\text{hm}}$ ;  $u_{mf} = 0.002 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ ;  $\alpha = 0.6$ ;

$D_{AB} = 0.14 \frac{\text{m}^2}{\text{h}}$  a  $400^\circ\text{C}$ ;  $\varepsilon_r = 0.5$ ;  $\varepsilon_{mf} = 0.6$ ;  $k = 1 \frac{1}{\text{s}}$ ;  $u_0 = 720 \frac{\text{m}}{\text{h}}$ ;  $y_b = 0.004$

## CONCLUSIONES

- El desarrollo del siguiente trabajo académico puede permitir al alumno una mayor comprensión de los temas de la clase de transferencia de masa de la carrera ingeniería química.
- Permite al alumno el desarrollo de diferentes técnicas matemáticas con el cual el alumno se encontrará resolviendo problemas de aplicación de transferencia de masa y reforzando posteriormente su acervo literario matemático.

## Bibliografía

- Welty, J. R., Wicks, C. E., & Wilson, R. E. (2002). **Fundamentos de transferencia de momento, calor y masa.** Editorial Limusa S.A. De C.V.
- Bird, R. B., Stewart, W. E., & Lightfoot, E. N. (1982). **Fenómenos de transporte: un estudio sistemático de los fundamentos del transporte de materia, energía y cantidad de movimiento.** Reverte.
- Colley, S. J., & Brito, J. E. (2013). **Cálculo vectorial.**
- González, E. G., & Panteleeva, O. V. (2014). **Probabilidad y Estadística: aplicaciones a la ingeniería y ciencias.**
- Zill, D. G. (2009). **Ecuaciones diferenciales con aplicaciones de modelado.** Cengage Learning Editores.



- **Márquez, A. A. (2015). Matemáticas simplificadas.**
- **Levenspiel, O. (2004). Ingeniería de las Reacciones Químicas.**
- **Treybal, R. E. (1980). Mass-transfer operations.**
- **Yang, W. (2003). Handbook of Fluidization and Fluid-Particle Systems. CRC Press.**



