

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

---

FACULTAD DE QUÍMICA

DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO

APLICACIÓN DEL MÉTODO DE DIFERENCIA FINITA AL MODELADO DEL PROCESO DE TRANSPORTE DE MASA CON REACCIÓN QUÍMICA EN UNA PELÍCULA DE LÍQUIDO DESCENDENTE.

TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRO EN CIENCIAS (INGENIERÍA QUÍMICA) PRESENTA:

**JOSÉ BLAS MARTÍN GARCÍA CUEVAS**

**CIUDAD UNIVERSITARIA**

México, D.F., 2008





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.

## Resumen

El estudio del proceso de absorción con reacción química en una película de líquido descendente, es un problema de interés en el campo de la Ingeniería Química, porque en la mayoría de los casos, es importante conocer la influencia que tiene una reacción química sobre el proceso global de transferencia de masa.

En el presente trabajo, se evalúa la diferencia que existe entre la solución analítica obtenida por el método de separación de variables y la solución aproximada, resultado de la aplicación del método de diferencia finita centrada, cuando la expresión del término de velocidad de reacción en la ecuación diferencial parcial, es de primer orden. Debido a que es prácticamente imposible obtener la solución analítica de la ecuación diferencial parcial resultante, cuando la expresión de velocidad de reacción es no-lineal, en este trabajo se emplea el método numérico de diferencia finita centrada.

El método numérico de diferencia finita centrada, se basa en la discretización de los términos convectivo y de reacción, contenidos en la ecuación del balance de materia, alrededor de un punto de referencia, en donde los valores de concentración son conocidos. La aplicación de este método numérico, es de importancia relevante cuando se aplica a las condiciones de frontera, ya que se pueden encontrar casos, en los que la ecuación diferencial presenta un punto singular regular.

Las simulaciones realizadas, mostraron que la solución aproximada para el caso de una cinética de primer orden, proporciona resultados similares a los obtenidos mediante la solución analítica. Sin embargo, a medida que el número de Péclet aumenta, el método numérico presenta inestabilidad, por lo que fue necesario incrementar el número de nodos en la malla seleccionada para compensar dicho efecto.

<b>Indice</b>	<b>Página</b>
<b>I. Introducción</b>	1
<b>II. Absorción de un gas en una película de líquido descendente</b>	4
II.1 Antecedentes	4
II.2 Desarrollo del modelo para el proceso de absorción	5
II.3 Método analítico para la solución de la ecuación diferencial parcial	15
II.3.1 Método de separación de variables	15
<b>III. Absorción con reacción química de un gas en una película descendente</b>	28
III.1 Antecedentes.	28
III.2 Desarrollo del modelo para el proceso de absorción con reacción química	29
III.3 Método analítico para la solución de la ecuación diferencial parcial	36
III.3.1 Método de separación de variables	36
III.4 Transporte aumentado en películas líquidas	47
<b>IV. Solución aproximada al problema de absorción</b>	51
IV.1 Método de Diferencia finita	51

IV.2 Aplicación del método de diferencia finita a la ecuación de absorción sin reacción química.	58
IV.3 Análisis de resultados y comparación entre la solución analítica y la solución numérica.	61
IV.4 Aplicación del método de diferencia finita a la ecuación de absorción con reacción química.	65
IV.5 Análisis de resultados y comparación entre la solución analítica y la solución numérica para el caso de una reacción de primer orden	67
IV.6 Aplicación del método de diferencia finita a la ecuación de absorción con reacción química para un modelo cinético complejo	70
IV.7 Análisis de los resultados obtenidos por el método de diferencia finita para el caso de absorción con reacción química (modelo cinético complejo)	73
<b>Conclusiones</b>	<b>77</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>78</b>

## **AGRADECIMIENTOS**

### **A JESUCRISTO**

*“Por la oportunidad que me ha dado para poder realizar este trabajo y por la motivación que me da cada día para seguir viviendo”*

### **A MI FAMILIA**

*“Por su amor, ayuda y comprensión durante todos los años que hemos estado juntos. Mariana, Marian y Sebastián los AMO”*

### **AL PhD. RAFAEL HERRERA NÁJERA**

*“Por todo el apoyo que me ha brindado y su colaboración en la realización de este trabajo”*

### **A MIS AMIGOS**

*“Aranzazu Arenas, Jesús, Rojas, Rogelio Martínez, José Guadalupe (El Paisa) y a Rafael Olvera (a su Memoria) por todos sus consejos y su invaluable Amistad”*

## Capítulo I

## Introducción

La representación de los fenómenos físicos y químicos que se llevan a cabo durante un proceso de transformación, ya sea un proceso que se da en la naturaleza de manera espontánea o en un proceso de síntesis que se lleva a cabo en un laboratorio de pruebas para la obtención de un producto, han llevado a los estudiosos de las diferentes ramas de la ciencia a tratar de predecir el comportamiento de estos fenómenos fisicoquímicos mediante la implementación de teorías y modelos matemáticos abstractos cuyas soluciones sólo son una aproximación al comportamiento real del proceso que se está tratando de describir o predecir.

Durante muchos años, los procesos de fabricación que involucran la interacción de las reacciones químicas con los fenómenos de transporte han atraído la atención de los ingenieros químicos. Por ejemplo, es muy importante saber cuál es la influencia de las reacciones químicas sobre la rapidez de absorción de un gas en un líquido, como sucede en un proceso de destilación de un compuesto, que se encuentra formando parte de una mezcla líquida, y para que la separación se pueda llevar a cabo, se requiere de la participación de una reacción química.

El conocimiento claro y preciso de los procesos fisicoquímicos permite diseñar, operar y modelar óptimamente los recursos humanos, materiales y energéticos requeridos en los procesos de fabricación involucrados para la obtención de un producto.

El estudio de los procesos que involucran reacciones químicas no es una tarea fácil ya que conforme va aumentando la complejidad del modelo propuesto, la solución analítica (exacta) de la ecuación o las ecuaciones que constituyen dicho modelo no es simple, o es imposible de obtener. Los métodos analíticos únicamente se emplean para resolver situaciones sencillas o simplificadas en donde los esquemas de reacción

involucran cinéticas lineales. La ventaja importante del uso de las soluciones analíticas es que proporcionan relaciones explícitas entre los diferentes parámetros que intervienen en el proceso fisicoquímico permitiendo así un análisis completo y detallado del problema planteado, que finalmente se refleja en una optimización del proceso y ahorro en el consumo de recursos humanos y de computo para su evaluación.

A diferencia de los métodos analíticos, los métodos numéricos permiten manejar ecuaciones que contienen términos no lineales de las variables dependientes e independientes, geometrías y sistemas de ecuaciones, que son requeridos para un modelado eficiente de los sistemas que se llevan a cabo en la industria química, del petróleo, farmacéutica y otras.

En el presente trabajo, en los capítulos II, III y IV se reporta el uso de los métodos analítico y numérico, para hallar la solución de las ecuaciones diferenciales parciales que predicen el comportamiento de la velocidad de transferencia de masa de un gas hacia una película de líquido descendente sin y con reacción química, y se calculará el porcentaje de desviación que existe en la solución numérica con respecto a la solución analítica.

En el capítulo II se propone el modelo matemático para el proceso de absorción puramente físico y como parte fundamental de este trabajo, se hace un cambio de variable que permite simplificar la expresión del perfil de velocidad en la ecuación del balance de materia para hallar la solución al problema de absorción cuando los tiempos de contacto entre las fases gas y líquida son cortos, es decir, cuando el número de Péclet  $\gg 1$ . Para hallar la solución de la ecuación diferencial parcial resultante, se aplica el método de separación de variables.

En el capítulo III se estudia el fenómeno de transferencia de masa cuando además de la absorción del gas en la fase líquida, se da una reacción química de primer orden e irreversible entre una especie **A** que se encuentra en la fase gas y el líquido absorbente.

Al incremento en la transferencia de masa de una especie **A** desde la fase gas hacia una fase líquida **B** se le conoce como transporte aumentado.

Al igual que en el caso de la absorción física, se aplicará el método de separación de variables para hallar la solución analítica de la ecuación que gobierna el proceso de absorción con reacción química. Se hará el cálculo del factor aumento de la especie que se está absorbiendo para conocer la influencia que tiene la reacción química en la rapidez de absorción. El factor de aumento se define como la relación del flux de la especie que se absorbe cuando hay reacción química (amén de los procesos de transporte) y el flux de la especie que se absorbe sin reacción química (procesos físicos: difusión y convección). El valor del factor de aumento  $\Phi$ , se evaluó en función del número de Damköhler.

En el capítulo IV se aplica el método numérico conocido como diferencia finita centrada para hallar la solución aproximada de las ecuaciones diferenciales parciales que describen los siguientes procesos:

1).- Absorción sin reacción química

2).- Absorción con reacción química:

2.1. Expresión de la velocidad de reacción como ley de potencia.

2.2. Expresión de la velocidad de reacción del tipo Michaels-Menten

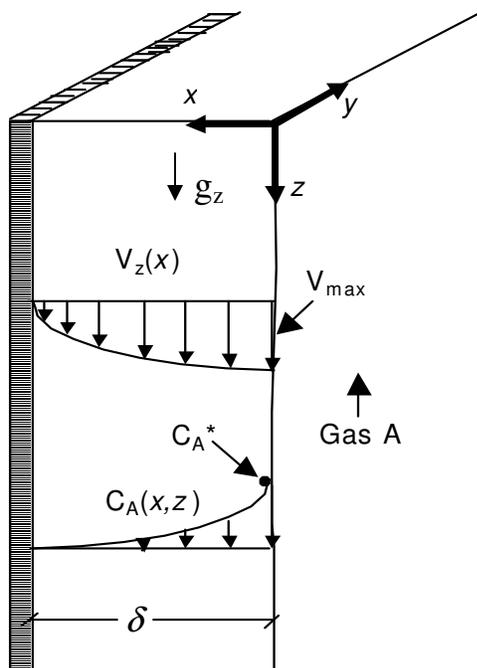
## Capítulo II

## Absorción de un gas en una película descendente

### II.1 Antecedentes

Los absorbedores o reactores de película descendente son ampliamente utilizados en la industria procesadora de alimentos<sup>1</sup>, en la industria química para la absorción de vapores y gases, en la industria de energía y en la industria de surfactantes. Debido a que estos equipos son altamente eficientes como intercambiadores de calor, su aplicación se extiende a procesos de sulfonación y sulfatación de alcoholes o alquilbencenos, donde se requiere remover el exceso de calor generado por las reacciones químicas que se llevan a cabo durante el proceso de absorción.

En este capítulo, el objetivo es hallar la solución analítica de la ecuación que describe el proceso de transferencia de masa para la absorción de la especie **A** transportada por un gas inerte hacia un líquido **B**. El líquido fluye de tal manera que forma una película a lo largo de la pared de la columna y permanece en contacto con el gas durante toda su trayectoria como se muestra en la figura II.1.



**Figura II.1.-** Diagrama esquemático de una columna de pared mojada, en donde se muestran los perfiles de concentración y velocidad esperados cuando una especie **A** presente en la fase gas, se absorbe en un líquido **B**

## II.2 Desarrollo del modelo para el proceso de absorción.

Antes de iniciar el planteamiento matemático para este proceso, es importante hacer las siguientes consideraciones:

II.2.1).- Las propiedades físicas de la fase líquida incluido el coeficiente de difusión de la especie **A** en el líquido **B**, permanecen constantes durante todo el proceso de absorción.

II.2.2).- Los cambios de temperatura en la fase líquida se pueden considerar despreciables, de tal manera que no es necesario tomar en consideración el balance de energía térmica.

II.2.3).- La fase líquida se encuentra en equilibrio con la fase gas, y por lo tanto, la concentración del gas en la superficie del líquido es la correspondiente al equilibrio termodinámico a las condiciones de temperatura y presión que se lleva a cabo la absorción.

II.2.4).- La fase líquida se comporta como un fluido incompresible, newtoniano y fluye en régimen laminar.

II.2.5).- La columna se encuentra trabajando en estado estable, de tal manera que el perfil de velocidad de la película líquida y la concentración de la especie **A** en el interior de la misma no cambian en función del tiempo.

II.2.6).- El proceso de absorción se realiza sin que exista reacción química entre la especie **A** y el líquido **B**.

II.2.7).- El líquido que entra a la columna de absorción es un líquido puro libre de la especie **A** o dicho de otra manera, la concentración de la especie **A** justo a la entrada de la fase líquida es cero.

II.2.8).- El espesor de la película formada por el líquido es muy pequeño comparado con el radio de la columna, por lo que se puede desprestigiar el efecto de la curvatura de la columna y, consecuentemente, emplear un sistema de coordenadas rectangulares en lugar de un sistema de coordenadas cilíndrico.

II.2.9).- Los efectos de entrada y salida relacionados con los patrones de flujo de la película líquida, no se consideran para el desarrollo del modelo

La ecuación del balance<sup>2,3</sup> de materia expresada en moles/volumen-tiempo para la especie **A** en el interior de la película de líquido se puede escribir de la siguiente manera:

$$\underline{V} \cdot \nabla C_A + \frac{\partial C_A}{\partial t} = D_{AB} \nabla^2 C_A + R_A \quad (\text{II.1})$$

Donde:

$\underline{V}$  = Vector velocidad de la película líquida

$C_A$  = Concentración de la especie **A** en el interior de la película líquida, expresada en [moles/volumen]

$D_{AB}$  = Coeficiente de difusión de la especie **A** en el líquido **B**

$R_A$  = Cantidad de la especie **A** que reacciona en la fase líquida

Aplicando a la ecuación II.1 las consideraciones hechas en los incisos II.2.1 a II.2.6, se obtiene la siguiente expresión:

$$\underline{V} \cdot \nabla C_A = D_{AB} \nabla^2 C_A \quad (\text{II.2})$$

Para el sistema de coordenadas rectangulares representado en la figura II.1, se tiene que la ecuación II.2 se puede reducir a:

$$V_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \quad (\text{II.3})$$

sujeta a las siguientes condiciones de frontera:

$$\text{CF}_1: \quad 0 \leq x \leq \delta \quad z = 0 \quad C_A = C_{A_0} = 0 \quad (\text{II.4a})$$

$$\text{CF}_2: \quad x = 0 \quad z > 0 \quad C_A = C_A^* \quad (\text{II.4b})$$

$$\text{CF}_3: \quad x = \delta \quad z > 0 \quad \frac{\partial C_A}{\partial x} = 0 \quad (\text{II.4c})$$

La condición a la frontera II.4a significa que el líquido **B** está entrando a la columna libre de la especie **A**, por lo que la concentración de **A** es cero.

La condición a la frontera II.4b significa que la concentración de la especie **A** en la fase líquida, es la concentración de equilibrio a las condiciones de temperatura y presión a las que se encuentra trabajando el sistema.

La condición a la frontera II.4c significa que la concentración de la especie **A** en la película líquida tiene un valor constante justo en  $x=\delta$ , es decir, no existe transferencia de masa a través de la pared de la columna. Algunos autores<sup>2</sup>, consideran que el espesor de la película líquida se puede considerar de valor infinito, debido a que el proceso de absorción esta siendo controlado por la fase líquida. Sin embargo, tal consideración tiene limitaciones para gases cuyo coeficiente de difusión es grande o cuando el proceso de absorción es acompañado de una reacción química.

Es importante tener presente que además del proceso de transferencia de masa, existe el proceso de transferencia de momento, cuya ecuación diferencial para un fluido newtoniano, incompresible y con viscosidad constante es de la forma siguiente:

$$\rho \frac{D\underline{V}}{Dt} = -\nabla P + \mu(\nabla \cdot \nabla \underline{V}) + \rho \underline{g} \quad (\text{II.5a})$$

donde:

$$\frac{D\underline{V}}{Dt} = \text{Derivada direccional de } \underline{V} = \frac{\partial}{\partial t} + V_x \frac{\partial}{\partial x} + V_y \frac{\partial}{\partial y} + V_z \frac{\partial}{\partial z}$$

$P$  = Presión del sistema

$\underline{g}$  = Aceleración de la gravedad

$\mu$  = Viscosidad de la fase líquida

A la ecuación II.5a, se le conoce como la ecuación de Navier-Stokes.

Para un fluido que fluye en estado estable, la ecuación II.5 se reduce a:

$$0 = -\nabla P + \mu(\nabla \cdot \nabla \underline{V}) + \rho \underline{g} \quad (\text{II.5b})$$

Para un fluido que fluye en régimen laminar y porque la única fuerza que actúa sobre el fluido es la componente en la dirección  $z$  del vector aceleración de la gravedad es decir  $\underline{g} = g_z = g$ , la ecuación II.5b se puede escribir de la siguiente manera:

$$0 = \mu \frac{\partial^2 V_z}{\partial y^2} + \rho g \quad (\text{II.5c})$$

La ecuación II.5c, está sujeta a las condiciones de frontera siguientes:

$$\text{CF}_1: \quad x = 0 \quad \frac{\partial V_z}{\partial x} = 0 \quad (\text{II.6a})$$

$$\text{CF}_2: \quad x = \delta \quad V_z = 0 \quad (\text{II.6b})$$

La condición de frontera II.6a, indica que la velocidad de la película de líquido en la superficie que está en contacto con el gas tiene un valor conocido y que es constante.

La condición a la frontera II.6b asegura que la velocidad de la película líquida en la superficie de la pared de la columna es cero.

Integrando la ecuación II.5c y empleando las condiciones a la frontera II.6, la expresión para el perfil de velocidad de la fase líquida queda expresado de la siguiente manera:

$$V_z = \frac{\rho g \delta^2}{2\mu} \left[ 1 - \left( \frac{x}{\delta} \right)^2 \right] \quad (\text{II.7})$$

En función de la velocidad promedio  $V_{prom}$  de la fase líquida, la ecuación II.7 se expresa de la siguiente manera:

$$V_z = V_{MAX} \left[ 1 - \left( \frac{x}{\delta} \right)^2 \right] = \frac{3}{2} V_{prom} \left[ 1 - \left( \frac{x}{\delta} \right)^2 \right] \quad (\text{II.8})$$

$$\text{Donde: } V_{prom} = 2/3 V_{MAX} \quad \text{y} \quad V_{MAX} = \rho g \delta^2 / 2\mu$$

Estudios experimentales<sup>3</sup> realizados para conocer el comportamiento del régimen de flujo en películas líquidas descendentes, han demostrado que existen tres regimenes de flujo, y que estos pueden ser clasificados de acuerdo a los valores del número de Reynolds de la siguiente manera:

$Re_{exp} < 20$  Flujo laminar con formación insignificante de rizos

**20 < Re<sub>exp</sub> < 1500** Flujo laminar con una marcada formación de rizos

**Re<sub>exp</sub> > 1500** Flujo turbulento

donde el número de Reynolds experimental se define como

$$\text{Re}_{\text{exp}} = \frac{4 \delta \rho V_{\text{prom}}}{\mu}$$

Para el presente caso de estudio, el número de Reynolds se definirá de la siguiente manera:

$$\text{Re}_T = \frac{\delta \rho V_{\text{MAX}}}{\mu} = \frac{3 \delta \rho V_{\text{prom}}}{2 \mu}$$

La relación entre ambos números de Reynolds teórico y experimental, se puede escribir como  $\text{Re}_T = 3/8 \text{Re}_{\text{exp}}$ . Por lo tanto y de acuerdo a resultados experimentales obtenidos por Emmet y Pgford<sup>8</sup>, el perfil de velocidad obtenido en la ecuación II.8 se puede utilizar hasta valores del número de Reynolds de 240. Es decir para valores de  $\text{Re}_T$  que varían de 8 a 75, donde los rizos formados en la interfase gas-líquido, crecen más lentamente de lo que tardan en viajar a lo largo de la columna.

Para facilitar el manejo de la ecuación diferencial II.3, es conveniente definir las siguientes variables adimensionales:

$$f = C_A / C_A^* \quad (\text{II.9a})$$

$$\zeta = z/L \quad (\text{II.9b})$$

$$\varepsilon = x/\delta \quad (\text{II.9c})$$

Realizando el cambio de variables y reordenando cada uno de los términos de la ecuación la II.3, la ecuación de conservación para la especie *A* en función de las nuevas variables adimensionales se puede escribir de la siguiente forma

$$\left[1 - \varepsilon^2\right] \frac{\partial f}{\partial \zeta} = \frac{\varphi}{Pe} \frac{\partial^2 f}{\partial \varepsilon^2} + \frac{1}{\varphi Pe} \frac{\partial^2 f}{\partial \zeta^2} \quad (\text{II.10})$$

donde: *Pe* es un número adimensional conocido como el número Péclet definido por el producto de los números adimensionales Reynolds (*Re<sub>T</sub>*) y Schmidt (*Sc*). La figura II.2.1, muestra el valor del rango, de los números adimensionales que se emplearan en la solución de la ecuación diferencial que describe el proceso de transferencia de masa de este trabajo.

$$Pe = Re_T Sc = \frac{\delta \rho V_{MAX}}{\mu} \cdot \frac{\mu}{\rho D_{AB}} = \frac{\delta V_{MAX}}{D_{AB}}$$

El parámetro  $\varphi = L/\delta$  es la relación adimensional que existe entre el espesor de la película líquida y la longitud total de la columna.

Figura II.2.1 Rango de valores para los números adimensionales, usados en el cálculo del perfil de concentración de la especie *A*

<i>Pe</i>	<i>Sc<sub>exp</sub></i>	
<i>Re<sub>T</sub></i>	300	500
7.5	<b>2250</b>	<b>3750</b>
75	<b>22500</b>	<b>37500</b>

Las condiciones a la frontera representadas por las ecuaciones II.4, se pueden expresar en función de las variables adimensionales de la siguiente manera:

$$CF_1: \quad 0 \leq \varepsilon \leq 1 \quad \zeta = 0 \quad f = 0 \quad (\text{II.11a})$$

$$\text{CF}_2: \quad \varepsilon = 0 \quad \zeta > 0 \quad f = 1 \quad (\text{II.11b})$$

$$\text{CF}_3: \quad \varepsilon = 1 \quad \zeta > 0 \quad \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} = 0 \quad (\text{II.11c})$$

En los procesos de absorción donde el número de Péclet  $\gg 1$ , el transporte de masa por convección es mucho mayor que el de difusión. Es decir,  $\delta V_{MAX} \gg D_{AB}$  lo que significa que conforme el número de Reynolds aumenta, el espesor de la película líquida se reduce de manera considerable para cada experimento. En tales casos, el análisis del comportamiento del proceso de absorción, se puede hacer introduciendo la variación del espesor de la película mediante el siguiente cambio de variable

$$\varepsilon^* = Pe^a \varepsilon \quad (\text{II.12a})$$

Sustituyendo la nueva variable en la ecuación II.10, tenemos que la expresión para el balance de materia es la siguiente:

$$\left[ 1 - \frac{\varepsilon^{*2}}{Pe^{2a}} \right] \frac{\partial f}{\partial \zeta} = \frac{\varphi}{Pe^{(1-2a)}} \frac{\partial^2 f}{\partial \varepsilon^{*2}} + \frac{1}{\varphi Pe} \frac{\partial^2 f}{\partial \zeta^2} \quad (\text{II.12b})$$

Analizando ambos términos de la ecuación II.12b, se puede observar que el valor del denominador del coeficiente de difusión en la dirección  $\varepsilon^*$  debe ser igual a 1 es decir  $\frac{1}{Pe^{(1-2a)}} = 1$ , de tal manera que el valor del número  $a = 1/2$ . Si los valores que toma  $a < 1/2$ , el espesor de la película líquida se incrementa, pero no de la manera que se requiere y por lo tanto, estos valores no son los esperados, ya que el espesor de la película líquida  $\varepsilon^*$ , deberá incrementarse a medida que el número de Péclet aumente. Para el caso cuando  $a > 1/2$ , el coeficiente del término de difusión en la dirección  $\varepsilon^*$  crece rápidamente a medida que el número de Péclet  $\gg 1$  y por lo tanto, dicha situación no

corresponde al fenómeno físico real que se está analizando. Por lo anteriormente analizado, el cambio de variable requerido es:

$$\varepsilon^* = Pe^{1/2} \varepsilon \quad (\text{II.12c})$$

El cambio de variable sugerido, permite reducir el efecto de la magnitud de la velocidad sobre el espesor de la película, ya que si el valor de Péclet se incrementa hasta en cuatro ordenes de magnitud, el valor de  $\varepsilon^*$  únicamente se incrementa en dos ordenes de magnitud. Sustituyendo la nueva variable ecuación II.12c en la ecuación II.12b, se obtiene la siguiente expresión para el balance de materia

$$\left[ 1 - \frac{\varepsilon^{*2}}{Pe} \right] \frac{\partial f}{\partial \zeta} = \varphi \frac{\partial^2 f}{\partial \varepsilon^{*2}} + \frac{1}{\varphi Pe} \frac{\partial^2 f}{\partial \zeta^2} \quad (\text{II.13})$$

Tomando el límite cuando el número de Péclet  $\gg 1$ , es decir para tiempos cortos de contacto entre el líquido y el gas, la transferencia de masa por difusión en la dirección del flujo  $\mathbf{z}$  es despreciable comparada con la transferencia de masa por convección en la misma dirección. Es decir, el valor de los términos que contienen el número de Péclet en el denominador de la ecuación II.13, se reducen rápidamente a valores muy pequeños y por lo tanto se puede considerar que

$$\frac{\varepsilon^{*2}}{Pe} \rightarrow 0 \quad ; \quad \frac{1}{\varphi Pe} \frac{\partial^2 f}{\partial \zeta^2} \rightarrow 0$$

por lo tanto, la ecuación II.13 se reduce a la siguiente expresión:

$$\frac{\partial f}{\partial \zeta} = \varphi \frac{\partial^2 f}{\partial \varepsilon^{*2}} \quad (\text{II.14})$$

Las condiciones de frontera II.11 correspondiente a la nueva función son como sigue:

$$\text{CF}_1: \quad 0 \leq \varepsilon^* \leq Pe^{1/2} \quad \zeta = 0 \quad f = 0 \quad (\text{II.15a})$$

$$\text{CF}_2: \quad \varepsilon^* = 0 \quad \zeta > 0 \quad f = 1 \quad (\text{II.15b})$$

$$\text{CF}_3: \quad \varepsilon^* = Pe^{1/2} \quad \zeta > 0 \quad \frac{\partial f}{\partial \varepsilon^*} = 0 \quad (\text{II.15c})$$

La ecuación diferencial parcial II.14 junto con sus condiciones a la frontera ecuaciones II.15, es el sistema de ecuaciones que se resolverán para encontrar el perfil de distribución de la concentración de la especie **A** en el líquido **B**.

## II.3 Método analítico para la solución de la ecuación diferencial parcial.

### II.3.1 Método de separación de variables.

El método de separación de variables se emplea con frecuencia para resolver una amplia gama de ecuaciones diferenciales parciales de segundo orden lineales homogéneas y no homogéneas. Para el caso de las ecuaciones no homogéneas, éstas se pueden resolver mediante un cambio de variable que permite transformarlas a homogéneas, así como también las condiciones a la frontera impuestas al sistema.

Antes de iniciar el procedimiento para hallar la solución de la ecuación diferencial parcial parabólica II.14 mediante el método de separación de variables, es importante observar que la condición en la frontera II.15b es no homogénea y por lo tanto, como se mencionó anteriormente es importante hacer un cambio de variable para convertirla en una condición a la frontera homogénea<sup>4</sup>. Para nuestro caso de estudio, el cambio de variable requerido es el siguiente:

$$f(\varepsilon^*, \zeta) = F(\varepsilon^*, \zeta) + \phi(\varepsilon^*) \quad (\text{II.16})$$

Derivando la ecuación II.16 dos veces con respecto a la variable  $\varepsilon^*$  y una vez con respecto a la variable  $\zeta$ , y posteriormente sustituyendo los resultados obtenidos y reagrupando los términos de la misma, se obtiene la siguiente expresión:

$$\frac{1}{\phi} \frac{\partial F}{\partial \zeta} = \frac{\partial^2 F}{\partial \varepsilon^{*2}} + \phi''(\varepsilon^*) \quad (\text{II.17})$$

La ecuación II.17 es no homogénea y para transformarla en una ecuación diferencial parcial homogénea, es importante que  $\phi''(\varepsilon^*) = 0$ , y además que la ecuación II.16 satisfaga las condiciones a la frontera II.15b y II.15c, es decir que:

$$f(0, \zeta) = F(0, \zeta) + \phi(0) = 1.0 \quad (\text{II.18b})$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial \varepsilon^*} \right|_{\varepsilon^* = Pe^{1/2}} = \left. \frac{\partial F}{\partial \varepsilon^*} \right|_{\varepsilon^* = Pe^{1/2}} + \phi'(Pe^{1/2}) = 0 \quad (\text{II.18c})$$

De la ecuación II.18 b y II.18c se concluye que:

$$F(0, \zeta) = 1 - \phi(0) = 0 \rightarrow \phi(0) = 1 \quad (\text{II.19b})$$

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \varepsilon^*} \right|_{\varepsilon^* = Pe^{1/2}} = -\phi'(Pe^{1/2}) = 0 \quad (\text{II.19c})$$

Considerando que  $\phi''(\varepsilon^*) = 0$  e integrando dos veces con respecto a  $\varepsilon^*$ , obtenemos la siguiente ecuación para  $\phi(\varepsilon^*)$

$$\phi(\varepsilon^*) = K_1 \varepsilon^* + K_2 \quad (\text{II.20})$$

Donde:  $K_1$  y  $K_2$  son las constantes de integración.

Para encontrar los valores de las constantes  $K_1$  y  $K_2$ , se evalúa la ecuación II.20 con las condiciones a la frontera II.19b y II.19c de tal manera que la expresión final para  $\phi(\varepsilon^*)$  queda de la siguiente forma:

$$\phi(\varepsilon^*) = 1.0 \quad (\text{II.21})$$

Sustituyendo el resultado obtenido ecuación II.21 en la ecuación II.16, se puede observar que el cambio de variable de la transformación deseada es:

$$f(\varepsilon^*, \zeta) = F(\varepsilon^*, \zeta) + 1.0 \quad (\text{II.22})$$

y la expresión final para la ecuación diferencial parcial no homogénea II.17 ahora como una ecuación homogénea está dada por

$$\frac{1}{\varphi} \frac{\partial F}{\partial \zeta} = \frac{\partial^2 F}{\partial \varepsilon^{*2}} \quad (\text{II.23})$$

Dado que la concentración adimensional  $F$  es una función de las coordenadas espaciales adimensionales  $\varepsilon^*$  y  $\zeta$ , la aplicación del método de separación de variables supone una solución producto de dos funciones; cada una de las cuales depende sólo una variable independiente es decir de las coordenadas  $\varepsilon^*$  y  $\zeta$ . Por lo tanto, la solución propuesta en este caso tiene la forma

$$F(\varepsilon^*, \zeta) = X(\varepsilon^*) Z(\zeta) \quad (\text{II.24})$$

Al derivar parcialmente la ecuación II.24 dos veces con respecto a  $\varepsilon^*$ , una vez con respecto a  $\zeta$  y aplicando el método de separación de variables, se llega a la siguiente expresión para la ecuación II.23:

$$\frac{1}{\varphi} \frac{Z'}{Z} = \frac{X''}{X} \quad (\text{II.25})$$

Como se puede observar en la ecuación II.25 cada lado de la ecuación tiene una sola variable dependiente que a su vez es función de su respectiva variable independiente, por lo que el método de separación de variables considera que la única manera de que esos dos términos sean iguales, es que sean iguales a una constante, la cual denotaremos por la letra griega  $\sigma$ , llamada constante de separación.

$$\frac{1}{\varphi} \frac{Z'}{Z} = \frac{X''}{X} = \sigma \quad (\text{II.26})$$

El problema ahora radica en encontrar el valor o valores que la constante  $\sigma$  debe tomar para que exista solución a la ecuación diferencial II.23. Iniciaremos por usar el término que contiene a la variable  $Z$ .

$$\frac{1}{\phi} \frac{Z'}{Z} = \sigma \quad (\text{II.27})$$

Integrando II.27 con respecto a  $\zeta$  y reordenando, se obtiene que la expresión para  $Z$  es de la forma:

$$Z(\zeta) = K \exp(\phi \sigma \zeta) \quad (\text{II.28})$$

Donde:  $K$  es la constante de integración.

La ecuación II.28 describe el comportamiento de la concentración de la especie  $A$  en el interior de la película de líquido conforme desciende por la pared de la columna de absorción. Si  $\sigma = 0$ , la ecuación II.28 nos indica que  $Z(\zeta) = K$  es decir que la concentración de la especie  $A$  permanece constante en la película líquida conforme desciende a lo largo de la columna. Esta primera consideración para el valor  $\sigma = 0$  físicamente no corresponde a la situación real que hemos planteado en este trabajo ya que la concentración de la especie  $A$  en el interior de la película va aumentando a medida que la película líquida desciende, por lo tanto, se puede eliminar esta primera consideración para el valor que toma  $\sigma$ .

Desde el punto de vista matemático, también es posible demostrar que no existe solución a la ecuación diferencial II.26, cuando  $\sigma = 0$  como se hará a continuación

De la ecuación II.26:

$$\frac{X''}{X} = 0 \quad (\text{II.29})$$

Integrando la ecuación II.29 dos veces con respecto a  $\varepsilon^*$  y reordenando términos, se obtiene la siguiente expresión

$$X(\varepsilon^*) = K_3 \varepsilon^* + K_4 \quad (\text{II.30})$$

donde:  $K_3$  y  $K_4$  son constantes de integración.

Aplicando la condición de frontera II.15b a la ecuación II.22, se tiene que

$$f(0, \zeta) = F(0, \zeta) + 1.0 = 1.0 \rightarrow F(0, \zeta) = 0 \rightarrow$$

$$F(0, \zeta) = X(0) \quad Z(\zeta) = 0 \rightarrow X(0) = K_3(0) + K_4 = 0$$

al mismo tiempo, aplicando la condición de frontera II.15c a la ecuación II.22 se obtiene

$$\left. \frac{\partial f}{\partial \varepsilon^*} \right|_{\varepsilon^* = Pe^{1/2}} = \left. \frac{\partial F}{\partial \varepsilon^*} \right|_{\varepsilon^* = Pe^{1/2}} = 0 \rightarrow F'(Pe^{1/2}, \zeta) = X'(Pe^{1/2}) \quad Z(\zeta) = 0$$

$$\rightarrow X'(Pe^{1/2}) = K_3 = 0 \rightarrow K_4 = 0$$

Como se puede observar, la única solución a la ecuación diferencial II.26 es la solución trivial, por lo tanto, se concluye que no existe solución a la ecuación diferencial cuando  $\sigma$  toma el valor de 0.

Ahora, para el caso donde  $\sigma > 0$  y por que  $\varphi \gg 1$ , se puede observar que el término exponencial  $\gg 1$ , por lo tanto, a medida que  $\zeta$  aumenta, los valores de concentración de la especie A en el líquido se incrementan, y esta situación, físicamente no es congruente con lo planteado inicialmente ya que la concentración de la especie A está acotada y varía de 0 al valor máximo correspondiente a la concentración de equilibrio a las condiciones de temperatura y presión a las que se realiza el proceso de

absorción. Para corroborar esta afirmación desde el punto de vista matemático, se repite el mismo procedimiento que se uso para  $\sigma = 0$  pero ahora considerando  $\sigma > 0$ .

La última posibilidad que ahora existe, es asegurar que  $\sigma$  tome valores negativos, por lo tanto se propone sustituir  $\sigma$  por  $-\lambda^2$ . Dicho cambio, permitirá asegurar que para cualquier número real (positivo o negativo) que tome el parámetro  $\lambda$ , su correspondiente valor  $\sigma$  será negativo. Sustituyendo esta nueva constante en la ecuación II.26 y reordenando términos, la expresión resultante para la variable dependiente  $X$  en función de la variable independiente  $\varepsilon^*$  es

$$X'' + \lambda^2 X = 0 \quad (\text{II.31})$$

La ecuación II.31 es una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden cuya solución es de la forma:

$$X(\varepsilon^*) = A \text{Sen}(\lambda \varepsilon^*) + B \text{Cos}(\lambda \varepsilon^*) \quad (\text{II.32})$$

donde  $A$  y  $B$  son constantes de integración.

Aplicando la condición de frontera II.15b a la ecuación II.22 y a la ecuación II.32 se tiene que

$$f(0, \zeta) = F(0, \zeta) + 1.0 = 1.0 \rightarrow F(0, \zeta) = 0 \rightarrow \quad (\text{II.33})$$

$$F(0, \zeta) = X(0) \quad Z(\zeta) = 0 \rightarrow X(0) = A \text{Sen}(0) + B \text{Cos}(0) = 0$$

La única posibilidad que existe para lograr que la igualdad en la ecuación II.33 se cumpla, es que el término  $B \text{Cos}(\lambda \varepsilon^*) = 0$  es decir, que  $B = 0$  ya que  $\text{Sen}(0) = 0$ . Sustituyendo el valor obtenido en la ecuación II.32 tenemos que:

$$X(\varepsilon^*) = A \text{Sen}(\lambda \varepsilon^*) \quad (\text{II.34})$$

Para encontrar una solución diferente a la solución trivial de ecuación II.34 es decir, que el valor de la constante  $A$  sea un número real diferente de cero, se aplica la condición de frontera II.15c de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f}{\partial \varepsilon^*} \right|_{\varepsilon^*=Pe^{1/2}} = \left. \frac{\partial F}{\partial \varepsilon^*} \right|_{\varepsilon^*=Pe^{1/2}} = 0 \rightarrow F'(Pe^{1/2}, \zeta) = X'(Pe^{1/2}) Z(\zeta) = 0 \\ \rightarrow X'(\varepsilon^*) = A\lambda \text{Cos}(\lambda \varepsilon^*) \rightarrow X'(Pe^{1/2}) = A\lambda \text{Cos}(\lambda Pe^{1/2}) = 0 \end{aligned} \quad (\text{II.35})$$

la única manera de que la igualdad en la ecuación II.35 se cumpla es

$$\begin{aligned} A\lambda \text{Cos}(\lambda Pe^{1/2}) = 0 \rightarrow \text{Cos}(\lambda Pe^{1/2}) = 0 \rightarrow \\ \lambda Pe^{1/2} = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \dots, \frac{(2n-1)\pi}{2} \end{aligned} \quad (\text{II.36})$$

de la ecuación II.36, se observa que  $\lambda$  toma tantos valores como el valor de  $n$  es decir

$$\lambda_n = \frac{(2n-1)\pi}{2Pe^{1/2}} \quad (\text{II.37})$$

Los valores de  $\sigma = -\lambda^2$  dados por la ecuación II.37, para los cuales existen soluciones no triviales, se llaman eigenvalores del problema con valores a la frontera II.15a, II.15b y II.15c. Las soluciones no triviales correspondientes  $X_n(\varepsilon^*)$ , que son proporcionales a  $\text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*)$  se conocen como eigenfunciones. Es importante mencionar que  $\text{Cos}(\lambda Pe^{1/2}) = 0$  es una función propia del problema y cada raíz es un valor característico. Por esta razón,  $\lambda$  no es una constante sino un conjunto de constantes; una para cada valor de  $n$ . Cada valor de  $\lambda$  genera una solución distinta de la ecuación diferencial, y es por esto que todos los valores característicos deben ser tomados en

cuenta para hallar la solución de la ecuación diferencial, es decir ahora la ecuación II.34 toma la forma:

$$X_n(\varepsilon^*) = A_n \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) \quad \text{para } n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{II.38})$$

De la misma manera, sustituyendo el valor de la constante de separación  $\sigma = -\lambda^2$  en la ecuación II.28, se tiene que la solución para la variable Z es de la forma

$$Z_n = K_n \exp(-\phi \lambda_n^2 \zeta) \quad \text{para } n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{II.39})$$

Multiplicando entre sí las soluciones para las variables X y Z se concluye que la ecuación resultante

$$F_n(\varepsilon^*, \zeta) = A_n \exp(-\phi \lambda_n^2 \zeta) \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) \quad \text{para } n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{II.40})$$

satisface la ecuación diferencial parcial y las condiciones de frontera desarrolladas en este caso de estudio para cada valor positivo de  $n$ . A las funciones  $F_n$ , se les conoce como soluciones fundamentales. Por el principio de superposición, se sabe que cualquier combinación lineal de las funciones  $F_n(\varepsilon^*, \zeta)$  también satisface la ecuación diferencial parcial y las condiciones de frontera II.15b y II.15c es decir:

$$\begin{aligned} F(\varepsilon^*, \zeta) &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n F_n(\varepsilon^*, \zeta) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \exp(-\phi \lambda_n^2 \zeta) \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) \end{aligned} \quad (\text{II.41})$$

en donde los coeficientes  $c_n$  aún no se han determinado y  $n$  es un entero positivo. Ahora lo que se requiere, es saber si para cualquier elección de los coeficientes  $c_n$ , la ecuación II.41 también satisface la condición a la frontera II.15a es decir

$$f(\varepsilon^*, 0) = F(\varepsilon^*, 0) + \phi(\varepsilon^*) = 0 \rightarrow F(\varepsilon^*, 0) = -\phi(\varepsilon^*) \quad (\text{II.42})$$

sustituyendo II.42 en II.41 se tiene:

$$F(\varepsilon^*, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) = -\phi(\varepsilon^*) \quad (\text{II.43})$$

Para describir una propiedad especial de las funciones  $\text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*)$  y  $\text{Cos}(\lambda_n \varepsilon^*)$ , es importante hacer la generalización del concepto de ortogonalidad de vectores.

El producto interno estándar<sup>5</sup>  $(u, w)$  de dos funciones  $u$  y  $w$  de valores reales sobre un intervalo  $\alpha \leq x \leq \beta$  se define por:

$$(u, w) = \int_{\alpha}^{\beta} u(x)w(x)dx \quad (\text{II.44})$$

Se dice que las funciones  $u$  y  $w$  son ortogonales sobre  $\alpha \leq x \leq \beta$  si el producto interno es cero; es decir, si

$$(u, w) = \int_{\alpha}^{\beta} u(x)w(x)dx = 0 \quad (\text{II.45})$$

Se dice que un conjunto de funciones es mutuamente ortogonal si cada pareja distinta de funciones dentro del conjunto es ortogonal.

Para este caso de estudio, las funciones  $\text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*)$  y  $\text{Cos}(\lambda_n \varepsilon^*)$  para  $n = 1, 2, 3, \dots$  forman un conjunto de funciones mutuamente ortogonales sobre el intervalo  $0 \leq \varepsilon^* \leq Pe^{1/2}$ . De hecho, satisfacen las siguientes relaciones de ortogonalidad

$$\int_0^{Pe^{1/2}} \text{Sen}(\lambda_m \varepsilon^*) \text{Cos}(\lambda_n \varepsilon^*) d\varepsilon^* = 0 \text{ para todo valor de } m, n \quad (\text{II.46a})$$

$$\int_0^{Pe^{1/2}} \text{Cos}(\lambda_m \varepsilon^*) \text{Cos}(\lambda_n \varepsilon^*) d\varepsilon^* = 0 \quad \text{para} \quad m \neq n \quad (\text{II.46b})$$

$$\int_0^{Pe^{1/2}} \text{Sen}(\lambda_m \varepsilon^*) \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) d\varepsilon^* = \frac{Pe^{1/2}}{2} \quad \text{para} \quad m = n \quad (\text{II.46c})$$

Ahora, para encontrar el valor de los coeficientes  $c_n$ , se toma el producto interior de la ecuación II.44 con la función  $\text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*)$  en el intervalo  $0 \leq \varepsilon^* \leq Pe^{1/2}$ , teniendo presente que el producto interno de todas las funciones es cero excepto para las funciones que tienen el mismo argumento en la función Seno,

$$\begin{aligned} \int_0^{Pe^{1/2}} F(\varepsilon^*, 0) \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) d\varepsilon^* &= \int_0^{Pe^{1/2}} c_n \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) d\varepsilon^* = \\ &= \int_0^{Pe^{1/2}} c_n \text{Sen}^2(\lambda_n \varepsilon^*) d\varepsilon^* = - \int_0^{Pe^{1/2}} \phi(\varepsilon^*) \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) d\varepsilon^* \end{aligned} \quad (\text{II.47})$$

sustituyendo el valor de  $\phi(\varepsilon^*) = 1$  y la ecuación II.46c ambos en la ecuación II.47, se obtiene la siguiente ecuación para  $c_n$

$$c_n = - \frac{\int_0^{Pe^{1/2}} \phi(\varepsilon^*) \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) d\varepsilon^*}{\int_0^{Pe^{1/2}} \text{Sen}^2(\lambda_n \varepsilon^*) d\varepsilon^*} \quad (\text{II.48})$$

Integrando ambos términos de la ecuación II.48, se tiene que el valor de la constante buscada es:

$$c_n = -\frac{2}{(\lambda_n Pe^{1/2})} \quad (\text{II.49})$$

Finalmente sustituyendo la ecuación II.49 en la ecuación II.16, la expresión final para la solución de la ecuación diferencial es

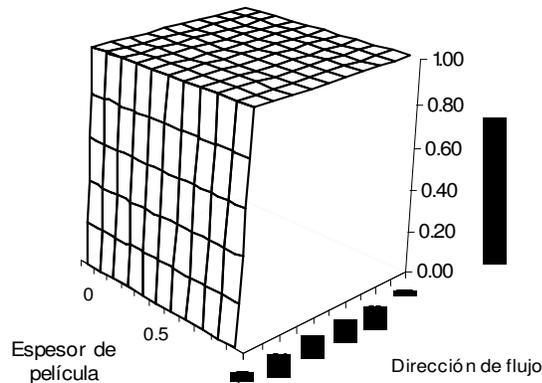
$$f(\varepsilon^*, \zeta) = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4}{\pi(2n-1)} [\exp(-\phi \lambda_n^2 \zeta)] \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) \quad (\text{II.50})$$

En función de las variables  $\varepsilon$  y  $\zeta$ , la ecuación II.50 se puede escribir de la siguiente manera:

$$f(\varepsilon, \zeta) = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4}{\pi(2n-1)} [\exp(-\phi \lambda_n^2 \zeta)] \text{Sen}(\lambda_n Pe^{1/2} \varepsilon) \quad (\text{II.51})$$

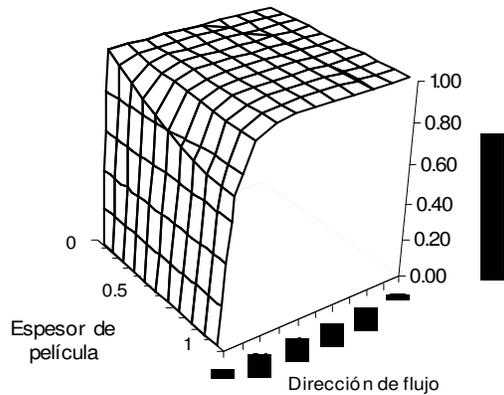
Las figuras II.3.1 a II.3.5, muestran los perfiles de concentración obtenidos a partir de la ecuación II.51 para la especie **A** que se absorbe en la película de líquido a diferentes valores del número de Péclet. En estas figuras, se puede apreciar cómo la concentración de **A** aumenta a lo largo de la dirección de flujo y hacia el interior de la película.

Figura II.3.1- Perfil de concentración de la especie **A** que se absorbe en una película líquida. Solución Exacta Pe = 0.1



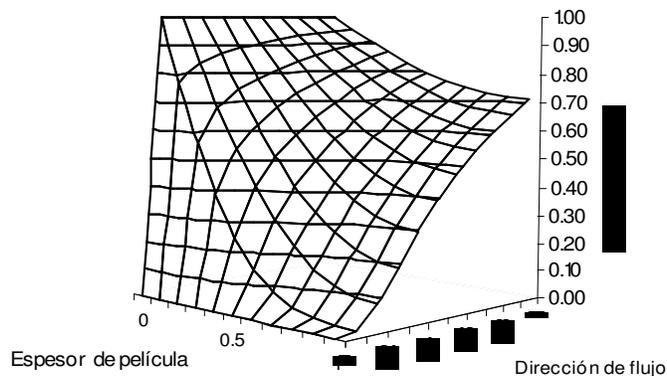
Los gráficos obtenidos cuando el número Péclet toma los valores de 1 y 10 son exactamente iguales a los obtenidos para Péclet=0.1.

Figura II.3.2.- Perfil de concentración de la especie **A** que se absorbe en una película líquida. Solución Exacta  $Pe = 100$



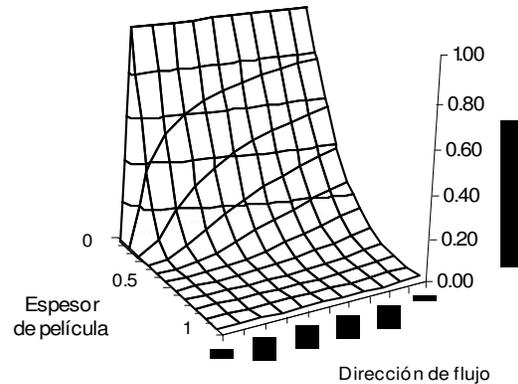
Se puede observar en las figuras II.3.2 y II.3.3 que conforme el número de Péclet aumenta, la concentración de la especie **A** en el interior de la película de líquido disminuye debido a que el tiempo de contacto entre las fases Líquido Gas se reduce en un orden de magnitud.

Figura II.3.3.- Perfil de concentración de la especie **A** que se absorbe en una película líquida. Solución Exacta  $Pe = 1000$



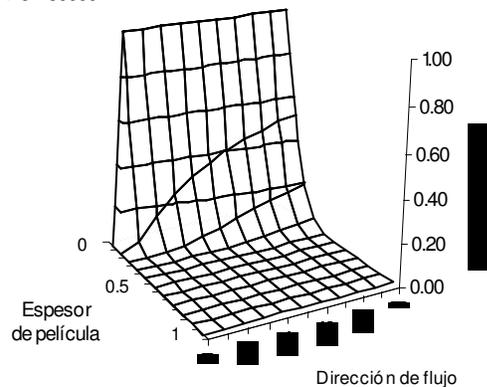
En la figura II.3.4, se puede observar que cuando el número de Péclet toma el valor de 10000, el perfil de concentración de la especie **A** en la región cercana a la pared de la columna, se vuelve prácticamente plano.

Figura II.3.3.- Perfil de concentración de la especie **A** que se absorbe en una película líquida. Solución Exacta  
 $Pe = 10000$



Para valores del número de Péclet mayores a 10000 (ver figura II.3.4), los perfiles de concentración de la especie **A** en el interior de la película se vuelven prácticamente planos, lo cual se debe a que los tiempos de contacto entre las fases gas-líquido son demasiado cortos y por lo tanto, el proceso global de transferencia de masa está controlado por la convección.

Figura II.3.4.- Perfil de concentración de la especie **A** que se absorbe en una película líquida. Solución Exacta  
 $Pe = 50000$



## Capítulo III                    Absorción con reacción química de un gas en una película descendente

### III.1 Antecedentes

Las operaciones de transferencia de masa en torres de pared mojada son de gran importancia y aplicación en la industria química ya que debido a su configuración geométrica estos equipos permiten liberar el calor generado por las reacciones químicas que se llevan a cabo durante el proceso de absorción del gas en la película de líquido. La aplicación de estos equipos es muy amplia en el procesamiento de alimentos, en la industria química donde se realizan reacciones de sulfonación, absorción de amoníaco, absorción de ácido clorhídrico, sulfatación de alcoholes grasos y alquilbencenos y en aquellos procesos de absorción donde ocurren reacciones altamente exotérmicas y es necesario remover el calor generado por dichas reacciones.

En este trabajo, el objetivo es conocer el incremento de la transferencia de masa a través de la película líquida, cuando existe una reacción irreversible de primer orden entre la especie **A** que se absorbe y el líquido **B** absorbente. A dicho proceso le llamaremos transporte de masa aumentado. El factor de aumento o de mejora, se define como el flux de la especie **A** absorbida en presencia de reacción química entre el flux de la especie absorbida **A** en ausencia de reacción química, a las mismas condiciones de temperatura y presión a las que se realiza el proceso.

El transporte aumentado ha recibido gran atención debido a su importancia en diversas ramas de la ciencia como la fisiología, la bioquímica, la ingeniería química y a su aplicación potencial en procesos de separación a escala industrial. Además de lo antes mencionado, el transporte de masa aumentado es reconocido también como una

tecnología potencialmente valiosa para la separación selectiva de los iones de metales preciosos y de los metales tóxicos.

Ahora cuando se estudian procesos de separación en los cuales están involucradas las torres de pared mojada y se pretende un mejor funcionamiento de éstas, el diseño y la optimización requiere de la solución de las ecuaciones que representan los fenómenos que ocurren dentro de las columnas para determinar su capacidad de transporte. En un proceso de transferencia de masa mediante torres de pared mojada donde ocurre transporte aumentado, necesariamente se deben considerar los fenómenos de transferencia de masa por difusión y convección acompañados de reacción química.

En este capítulo, se va a desarrollar un modelo para el proceso de absorción de un gas en un líquido en donde ocurre una reacción irreversible de primer orden de la forma  $A \rightarrow P$ , el cual puede servir para dos cosas. Primero, puede ser empleado para predecir las velocidades de absorción física de un gas llevada a cabo bajo diferentes condiciones de temperatura y presión de operación con la finalidad de calcular los valores de los coeficientes de transferencia de masa. Segundo, el modelo puede ser empleado para predecir, no únicamente la velocidad de absorción física del gas en la película de líquido, sino también el efecto que tiene una reacción química sobre la absorción.

### III.2 Desarrollo del modelo para el proceso de absorción con reacción química.

Se considera una película líquida de espesor  $\delta$  (ver figura III.2.1) a través de la cual se transporta la especie  $A$ . La fase gaseosa adyacente a la película líquida tiene una presión parcial  $p_A$ . La concentración de la especie  $A$  en la interfase líquido-gas se puede conocer mediante la ley de Henry.

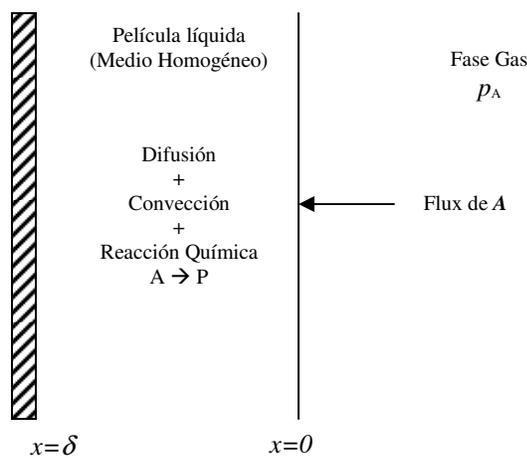


Figura III.2.1 Transporte de masa en una película líquida reactiva

De la misma manera que en el capítulo II, para el desarrollo del modelo que gobierna este proceso de absorción con reacción química, se harán las siguientes consideraciones:

III.2.1).- Las propiedades físicas de la fase líquida incluyendo el coeficiente de difusión de la especie  $A$  en el líquido  $B$  permanecen constantes durante todo el proceso de absorción.

III.2.2).- Los cambios de temperatura en la fase líquida se pueden considerar despreciables, de tal manera que no es necesario tomar en consideración el balance de energía térmica.

III.2.3).- La fase líquida se encuentra en equilibrio con la fase gas, es decir la concentración del gas en la superficie del líquido es la correspondiente al equilibrio termodinámico a las condiciones de temperatura y presión que se lleva a cabo la absorción.

III.2.4).- La fase líquida se comporta como un fluido incompresible, newtoniano y fluye en régimen laminar.

III.2.5).- La columna se encuentra trabajando en estado estable, de tal manera que el perfil de velocidad de la película líquida y la concentración de la especie A en el interior de la misma no cambian en función del tiempo.

III.2.6).- El líquido que entra a la columna de absorción es un líquido puro libre de la especie A o dicho de otra manera, la concentración de la especie A justo a la entrada de la fase líquida es cero.

III.2.7).- El espesor de la película formada por el líquido es muy pequeño comparado con el radio de la columna, por lo que se puede despreciar el efecto de la curvatura de la columna y emplear el sistema de coordenadas rectangulares en lugar de un sistema de coordenadas cilíndrico. De la ecuación de continuidad para la especie A

$$\underline{V} \cdot \nabla C_A + \frac{\partial C_A}{\partial t} = D_{AB} \nabla^2 C_A + R_A \quad (\text{III.1})$$

Aplicando a la ecuación III.1 las consideraciones hechas en los incisos III.2.1 a III.2.7, se obtiene la siguiente expresión:

$$\underline{V} \cdot \nabla C_A = D_{AB} \nabla^2 C_A + R_A \quad (\text{III.2})$$

Para el sistema de coordenadas rectangulares representado en la figura II.1, tenemos que la ecuación III.2 se reduce a la siguiente expresión

$$V_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} + R_A \quad (\text{III.3})$$

sujeta a las condiciones de frontera:

$$\text{CF}_1: \quad 0 \leq x \leq \delta \quad z = 0 \quad C_A = C_{A_0} = 0 \quad (\text{III.4a})$$

$$\text{CF}_2: \quad x = 0 \quad z > 0 \quad C_A = C_A^* \quad (\text{III.4b})$$

$$\text{CF}_3: \quad x = \delta \quad z > 0 \quad \frac{\partial C_A}{\partial x} = 0 \quad (\text{III.4c})$$

De la misma manera que para el problema de absorción sin reacción química, el significado físico de las condiciones se mantiene.

Para una reacción química irreversible de primer orden del tipo  $A \longrightarrow P$ , la expresión de velocidad de reacción para la especie  $A$  se puede escribir como

$$R_A = -k''' C_A \quad (\text{III.5})$$

donde:  $k'''$  = es la constante de velocidad de reacción expresada en [=] tiempo<sup>-1</sup>

$C_A$  = Concentración de la especie  $A$  que se absorbe y reacciona [=] mol/volumen

$R_A$  = Cantidad de la especie  $A$  que reacciona en la fase líquida

[=] moles/volumen-tiempo

Sustituyendo la ecuación III.5, expresión para los moles de **A** que reaccionan en el seno del líquido durante el proceso de absorción en la ecuación III.3 se tiene que

$$V_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} - k''' C_A \quad (\text{III.6})$$

Usando la expresión encontrada para el perfil de velocidad ecuación II.8 y las variables adimensionales definidas en II.9, la ecuación para el balance de materia de la especie **A** que se absorbe y reacciona en el seno de la película líquida es de la forma:

$$[1 - \varepsilon^2] \frac{\partial f}{\partial \zeta} = \frac{\varphi}{Pe} \frac{\partial^2 f}{\partial \varepsilon^2} + \frac{1}{\varphi Pe} \frac{\partial^2 f}{\partial \zeta^2} - \varphi N f \quad (\text{III.7})$$

donde :  $N$  es un número adimensional expresado como  $N = Da / Pe$

$Da =$  Número de Damkhöler expresado como  $Da = k''' \delta^2 / D_{AB}$

Las condiciones a la frontera III.4 en función de las variables adimensionales quedan de la siguiente manera:

$$\text{CF}_1: \quad 0 \leq \varepsilon \leq 1 \quad \zeta = 0 \quad f = 0 \quad (\text{III.8a})$$

$$\text{CF}_2: \quad \varepsilon = 0 \quad \zeta > 0 \quad f = 1 \quad (\text{III.8b})$$

$$\text{CF}_3: \quad \varepsilon = 1 \quad \zeta > 0 \quad \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} = 0 \quad (\text{III.8c})$$

Al igual que en capítulo II, se analizará el caso cuando el valor del número de Péclet es mucho mayor que 1. Es decir, cuando la velocidad de absorción de la especie **A** está limitada por el tiempo de contacto entre las fases debido a la velocidad con la que el líquido **B** viaja. Para este caso como ya se había mencionado anteriormente, en cada experimento que se realice, el espesor de la película de líquido disminuye cuando el

número de Péclet aumenta, de tal manera que para conocer el comportamiento del proceso de absorción en estas condiciones se hará el siguiente cambio de variable:

$$\varepsilon^* = Pe^{1/2} \varepsilon \quad (\text{III.9})$$

Haciendo el cambio de variable y aplicándolo a la ecuación III.7 se tiene:

$$\left[1 - \frac{\varepsilon^{*2}}{Pe}\right] \frac{\partial f}{\partial \zeta} = \varphi \frac{\partial^2 f}{\partial \varepsilon^{*2}} + \frac{1}{\varphi Pe} \frac{\partial^2 f}{\partial \zeta^2} - \varphi N f \quad (\text{III.10})$$

Tomando el límite cuando el número de Péclet toma valores  $\gg 1$ , es decir para tiempos cortos de contactos entre las fases líquido y gas, la transferencia de masa por difusión en la dirección del flujo  $z$  es despreciable comparada con la transferencia de masa por convección en la misma dirección por lo cual los términos siguientes tienden a tomar valores muy pequeños, es decir

$$\frac{\varepsilon^{*2}}{Pe} \quad \text{y} \quad \frac{1}{\varphi Pe} \frac{\partial^2 f}{\partial \zeta^2} \rightarrow 0$$

y por lo tanto ambos términos se pueden despreciar de la ecuación III.10. Ahora, analizando el término de reacción química en la ecuación III.10, es importante notar que el número adimensional  $N=Da/Pe$  no es despreciable debido a que el número de Damköhler puede tomar valores del mismo orden de magnitud que el número de Péclet, y por lo tanto este término es importante en la solución de la ecuación diferencial parcial, sin olvidar que el valor del parámetro  $\varphi$  también es de magnitud considerable. Por lo anterior, la ecuación III.10 ahora se puede escribir como

$$\frac{\partial f}{\partial \zeta} = \varphi \frac{\partial^2 f}{\partial \varepsilon^{*2}} - \varphi N f \quad (\text{III.11})$$

Nuevamente escribiendo las condiciones a la frontera II.15

$$\text{CF}_1: \quad 0 \leq \varepsilon^* \leq Pe^{1/2} \quad \zeta = 0 \quad f = 0 \quad (\text{III.12a})$$

$$\text{CF}_2: \quad \varepsilon^* = 0 \quad \zeta > 0 \quad f = 1 \quad (\text{III.12b})$$

$$\text{CF}_3: \quad \varepsilon^* = Pe \quad \zeta > 0 \quad \frac{\partial f}{\partial \varepsilon^*} = 0 \quad (\text{III.12c})$$

Hasta este momento se ha encontrado la ecuación diferencial parcial para el modelo de absorción con reacción química y la solución de esta ecuación III.11 junto con sus condiciones a la frontera (ecuaciones III.12), es el sistema de ecuaciones que se va a resolver para encontrar el perfil de la concentración de la especie **A** en el seno del líquido **B** donde se absorbe y reacciona.

### III.3 Método analítico para la solución de la ecuación diferencial parcial

#### III.3.1 Método de separación de variables.

Al igual que se hizo en el capítulo anterior, para resolver la ecuación diferencial parcial es necesario e importante tener presente que la ecuación III.11 es una ecuación diferencial parcial no homogénea y por lo tanto se requiere realizar el siguiente cambio de variable:

$$f(\varepsilon^*, \zeta) = F(\varepsilon^*, \zeta) + \phi(\varepsilon^*) \quad (\text{III.13})$$

Los valores de las derivadas parciales de las ecuaciones III.11 en función de la nueva variable dependiente son

$$\frac{\partial f}{\partial \zeta} = \frac{\partial F}{\partial \zeta} \quad \frac{\partial^2 f}{\partial \varepsilon^{*2}} = \frac{\partial^2 F}{\partial \varepsilon^{*2}} + \phi''(\varepsilon^*) \quad (\text{III.14})$$

sustituyendo dichos valores en la ecuación III.11, se tiene que

$$\frac{\partial F}{\partial \zeta} = \varphi \frac{\partial^2 F}{\partial \varepsilon^{*2}} - \varphi N F + \varphi \phi''(\varepsilon^*) - \varphi N \phi(\varepsilon^*) \quad (\text{III.15})$$

Como se puede observar, para que la ecuación III.15 sea una ecuación diferencial parcial homogénea se requiere que el siguiente término sea igual a cero, es decir que

$$\varphi \phi''(\varepsilon^*) - \varphi N \phi(\varepsilon^*) = 0 \quad (\text{III.16})$$

además de que la función  $\varphi$  debe cumplir la ecuación III.16, es importante que satisfaga las condiciones a la frontera II.15b y II.15c, es decir

$$f(0, \zeta) = F(0, \zeta) + \phi(0) = 1.0 \quad (\text{III.17b})$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial \varepsilon^*} \right|_{\varepsilon^*=Pe^{1/2}} = \left. \frac{\partial F}{\partial \varepsilon^*} \right|_{\varepsilon^*=Pe^{1/2}} + \phi'(Pe^{1/2}) = 0 \quad (\text{III.17c})$$

por lo tanto para que III.17b y III.17 sean condiciones a la frontera homogénea se requiere

$$F(0, \zeta) = 1 - \phi(0) = 0 \rightarrow \phi(0) = 1 \quad (\text{III.18b})$$

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \varepsilon^*} \right|_{\varepsilon^* = Pe^{1/2}} = -\phi'(Pe^{1/2}) = 0 \quad (\text{III.18c})$$

Para hallar la expresión de  $\phi(\varepsilon^*)$  se integra la ecuación III.16 dos veces con respecto  $\varepsilon^*$  dando la siguiente expresión

$$\phi(\varepsilon^*) = C_1 \exp(\sqrt{N}\varepsilon^*) + C_2 \exp(-\sqrt{N}\varepsilon^*) \quad (\text{III.19})$$

Donde:  $C_1$  y  $C_2$  son las constantes de integración.

Al aplicar las condiciones de frontera III.18b y III.18c a la ecuación III.19 para determinar los valores de las constante de integración  $C_1$  y  $C_2$  se tiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$\phi(0) = C_1 + C_2 = 1 \quad (\text{III.20b})$$

$$\phi(Pe^{1/2}) = C_1 \exp(\sqrt{N}Pe^{1/2}) + C_2 \exp(-\sqrt{N}Pe^{1/2}) = 0 \quad (\text{III.20c})$$

resolviendo el sistema de ecuaciones anterior para hallar los valores de  $C_1$  y  $C_2$  para posteriormente sustituir en III.19, la solución particular de la ecuación diferencial parcial no homogénea III.15 tiene la siguiente forma

$$\phi(\varepsilon^*) = \frac{\exp(-\sqrt{PeN})\exp(\sqrt{N}\varepsilon^*) + \exp(+\sqrt{PeN})\exp(-\sqrt{N}\varepsilon^*)}{\exp(-\sqrt{PeN}) + \exp(+\sqrt{PeN})} \quad (\text{III.21})$$

Ahora que se ha encontrado la expresión para  $\phi(\varepsilon^*)$  la cual satisface a la ecuación III.16, la ecuación III.15 se puede escribir como una ecuación diferencial parcial

homogénea que deberá satisfacer las condiciones a la frontera homogéneas III.18b y III.18c

$$\frac{\partial F}{\partial \zeta} = \varphi \frac{\partial^2 F}{\partial \varepsilon^{*2}} - \varphi N F \quad (\text{III.22})$$

Dado que la concentración adimensional  $F$  es una función de las coordenadas espaciales adimensionales  $\varepsilon^*$  y  $\zeta$ , nuevamente el método de separación de variables supone una solución producto de dos funciones; cada una de estas funciones depende sólo una variable independiente es decir de las coordenadas  $\varepsilon^*$  y  $\zeta$  respectivamente. Por lo tanto la solución propuesta en este caso tiene la forma:

$$F(\varepsilon^*, \zeta) = X(\varepsilon^*) Z(\zeta) \quad (\text{III.23})$$

Al derivar parcialmente la ecuación III.23 dos veces con respecto  $\varepsilon^*$ , una vez con respecto a  $\zeta$  y aplicando el método de separación de variables, se llega a la siguiente expresión para la ecuación III.15:

$$\frac{1}{\varphi} \frac{Z'}{Z} + N = \frac{X''}{X} \quad (\text{III.24})$$

Como se puede observar, ahora el lado izquierdo de la ecuación III.24 contiene el término de velocidad de reacción representado por el número  $N$  y cada lado de la misma ecuación contiene una sola variable dependiente que a su vez es función de su respectiva variable independiente. El método de separación de variables requiere que ambos términos de la ecuación sean iguales a una constante. Como en el capítulo II se usará la letra griega  $\sigma$ , llamada constante de separación.

$$\frac{1}{\varphi} \frac{Z'}{Z} + N = \frac{X''}{X} = \sigma \quad (\text{III.25})$$

Para hallar el valor o valores que toma  $\sigma$  y para los cuales exista solución a la ecuación diferencial III.18, se iniciará por usar el término que contiene a la variable  $Z$ .

$$\frac{1}{\varphi} \frac{Z'}{Z} + N = \sigma \quad (\text{III.26})$$

Integrando III.26 con respecto a  $\zeta$  obtenemos que la expresión para  $Z$  es de la siguiente forma:

$$Z(\zeta) = K \exp[ - (N - \sigma) \varphi \zeta ] \quad (\text{III.27})$$

donde:  $K$  es la constante de integración.

La ecuación III.27 describe el comportamiento de la concentración de la especie  $A$  en la película de líquido conforme desciende por la pared de la columna de absorción. Desde el punto de vista matemático, como se demostró en el capítulo II, para el caso de absorción con reacción química tampoco existe solución a la ecuación diferencial ordinaria cuando la constante de separación toma los valores positivos y cero. Por lo tanto ahora se enfocará la atención en buscar la solución cuando la constante de separación  $\sigma$  toma valores negativos.

Reordenando la ecuación III.24 y sustituyendo el valor de  $\sigma$  por  $-\lambda^2$  para asegurar que cualquier número real que tome el parámetro  $\sigma$  sea negativo. La expresión resultante para la variable dependiente  $X$  en función de la variable independiente  $\varepsilon^*$  queda de la siguiente manera:

$$X'' + \lambda^2 X = 0 \quad (\text{III.28})$$

La ecuación III.28 es una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden cuya solución es de la forma

$$X(\varepsilon^*) = A \text{Sen}(\lambda \varepsilon^*) + B \text{Cos}(\lambda \varepsilon^*) \quad (\text{III.29})$$

donde:  $A$  y  $B$  son constantes de integración.

Aplicando la condición de frontera III.18b a la ecuación III.29 se tiene que:

$$f(0, \zeta) = F(0, \zeta) + 1.0 = 1.0 \rightarrow F(0, \zeta) = 0 \rightarrow \quad (\text{III.30})$$

$$F(0, \zeta) = X(0) \quad Z(\zeta) = 0 \rightarrow X(0) = A \text{Sen}(0) + B \text{Cos}(0) = 0$$

La única posibilidad que existe para lograr que la igualdad en la ecuación III.30 se cumpla es que el término  $B \text{Cos}(\lambda \varepsilon^*) = 0$  es decir que  $B = 0$ , ya que  $\text{Sen}(0) = 0$ . Sustituyendo el valor obtenido en la ecuación III.30 tenemos que

$$X(\varepsilon^*) = A \text{Sen}(\lambda \varepsilon^*) \quad (\text{III.31})$$

Para obtener una solución no trivial de la ecuación III.31 es decir, que el valor de la constante  $A$  sea un número real, se aplica la condición de frontera III.18c

$$\left. \frac{\partial f}{\partial \varepsilon^*} \right|_{\varepsilon^* = Pe^{1/2}} = \left. \frac{\partial F}{\partial \varepsilon^*} \right|_{\varepsilon^* = Pe^{1/2}} = 0 \rightarrow F'(Pe^{1/2}, \zeta) = X'(Pe^{1/2}) \quad Z(\zeta) = 0$$

$$\rightarrow X'(\varepsilon^*) = A \lambda \text{Cos}(\lambda \varepsilon^*) \rightarrow X'(Pe^{1/2}) = A \lambda \text{Cos}(\lambda Pe^{1/2}) = 0$$

$$(\text{III.32})$$

Al igual que en condición a la frontera anterior, la única manera de que la igualdad en la ecuación III.32 se cumpla es que

$$A \lambda \text{Cos}(\lambda Pe^{1/2}) = 0 \rightarrow \text{Cos}(\lambda Pe^{1/2}) = 0 \rightarrow$$

$$\lambda Pe^{1/2} = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \dots, \frac{(2n-1)\pi}{2} \quad (\text{III.33})$$

de la ecuación III.33, se observa que  $\lambda$  nuevamente toma tantos valores como el valor de  $n$  es decir:

$$\lambda_n = \frac{(2n-1)\pi}{2Pe^{1/2}} \quad (\text{III.34})$$

Cada valor de  $\lambda$  genera una solución distinta de la ecuación diferencial parcial, y es importante que todos los valores característicos sean tomados en cuenta para hallar la solución de la ecuación diferencial, es decir ahora la ecuación III.34 toma la forma

$$X_n(\varepsilon^*) = A_n \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) \quad \text{para } n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{III.35})$$

Sustituyendo el valor de  $\sigma = -\lambda^2$  en la ecuación III.27, se tiene que la solución para la variable  $Z$  es de la forma

$$Z_n = K_n \exp[-(N + \lambda_n^2)\varphi\zeta] \quad \text{para } n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{III.36})$$

Multiplicando las soluciones obtenidas en las ecuaciones III.35 y III.36, se concluye que las ecuaciones de la forma

$$F_n(\varepsilon^*, \zeta) = A_n \exp[-(N + \lambda_n^2)\varphi\zeta] \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) \quad \text{para } n = 1, 2, 3 \quad (\text{III.37})$$

satisfacen la ecuación diferencial parcial y las condiciones a la frontera para cada valor positivo de  $n$  del modelo propuesto en este caso de estudio. A las funciones  $F_n$ , se les conoce como soluciones fundamentales de la ecuación diferencial. Por el principio de superposición, se sabe que cualquier combinación lineal de las funciones  $F_n(\varepsilon^*, \zeta)$  también satisface la ecuación diferencial parcial y las condiciones a la frontera representadas por las ecuaciones III.18b y III.18c es decir

$$F(\varepsilon^*, \zeta) = \sum_1^{\infty} c_n F_n(\varepsilon^*, \zeta) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \exp[-(N + \lambda_n^2)\phi\zeta] \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) \quad (\text{III.38})$$

donde los coeficientes  $c_n$  aún no se han determinado y  $n$  es un entero positivo. Ahora lo que se requiere es saber si para cualquier elección de  $c_n$ , la ecuación III.38 también satisface la condición a la frontera III.15a es decir:

$$f(\varepsilon^*, 0) = F(\varepsilon^*, 0) + \phi(\varepsilon^*) = 0 \rightarrow F(\varepsilon^*, 0) = -\phi(\varepsilon^*) \quad (\text{III.39})$$

sustituyendo III.39 en III.38 se tiene

$$F(\varepsilon^*, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) = -\phi(\varepsilon^*) \quad (\text{III.40})$$

Para encontrar el valor del coeficiente  $c_n$ , nuevamente se usará el concepto de ortogonalidad de funciones. Es decir, se desarrollará la ecuación III.40 en sus  $n$  términos de la siguiente manera

$$F(\varepsilon^*, \zeta) = c_1 \text{Sen}(\lambda_1 \varepsilon^*) + c_2 \text{Sen}(\lambda_2 \varepsilon^*) + c_3 \text{Sen}(\lambda_3 \varepsilon^*) + \dots + c_n \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) = -\phi(\varepsilon^*) \quad (\text{III.41})$$

Ahora se va a Multiplicar la ecuación III.41 por la función  $\text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*)$  y se tomará el producto interno entre estas dos funciones ortogonales en el intervalo  $0 \leq \varepsilon^* \leq Pe^{1/2}$ , por lo tanto se tiene que

$$\begin{aligned}
\int_0^{Pe^{1/2}} F(\varepsilon^*, 0) \text{Sen}(\lambda_m \varepsilon^*) d\varepsilon^* &= \int_0^{Pe^{1/2}} c_1 \text{Sen}(\lambda_1 \varepsilon^*) \text{Sen}(\lambda_m \varepsilon^*) d\varepsilon^* + \dots \\
\int_0^{Pe^{1/2}} c_m \text{Sen}(\lambda_m \varepsilon^*) \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) d\varepsilon^* + \dots + \int_0^{Pe^{1/2}} c_n \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) d\varepsilon^* + \dots + \\
&= - \int_0^{Pe^{1/2}} \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) \phi(\varepsilon^*) d\varepsilon^* \quad (III.42)
\end{aligned}$$

Recordando que el producto interno de todas las funciones ortogonales es cero para todo valor de  $m$  diferente de  $n$  es decir

$$\int_0^{Pe^{1/2}} \text{Sen}(\lambda_m \varepsilon^*) \text{Cos}(\lambda_n \varepsilon^*) d\varepsilon^* = 0 \quad (III.43)$$

y que el producto interno es diferente de cero cuando  $m = n$

$$\int_0^{Pe^{1/2}} \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) \text{Cos}(\lambda_n \varepsilon^*) d\varepsilon^* \neq 0 \quad (III.44)$$

Tomando en cuenta las propiedades de ortogonalidad descritas por las ecuaciones III.43 y III.44, la ecuación III.42 se puede reducir a la siguiente expresión

$$\int_0^{Pe^{1/2}} c_n \text{Sen}^2(\lambda_n \varepsilon^*) d\varepsilon^* = - \int_0^{Pe^{1/2}} \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) \phi(\varepsilon^*) d\varepsilon^* \quad (III.45)$$

Sustituyendo la ecuación obtenida para  $\phi(\varepsilon^*)$  despejando  $c_n$  en III.45, se tiene

$$c_n = - \frac{\int_0^{Pe^{1/2}} \frac{\exp(-\sqrt{PeN}) \exp(\sqrt{N}\varepsilon^*) + \exp(+\sqrt{PeN}) \exp(-\sqrt{N}\varepsilon^*)}{\exp(-\sqrt{PeN}) + \exp(+\sqrt{PeN})} \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) d\varepsilon^*}{\int_0^{Pe^{1/2}} \text{Sen}^2(\lambda_n \varepsilon^*) d\varepsilon^*} \quad (III.46)$$

Integrando el numerador y el denominador de la ecuación III.46 se obtiene

$$c_n = \frac{-\frac{\lambda_n}{(\lambda_n^2 + N)}}{\frac{Pe^{1/2}}{2}} = -\frac{2}{Pe^{1/2}} \frac{\lambda_n}{(\lambda_n^2 + N)} \quad (\text{III.47})$$

sustituyendo el valor de  $c_n$  en la ecuación III.38, se obtiene la siguiente expresión para la solución de la ecuación diferencial homogénea  $F(\varepsilon^*, \zeta)$

$$F(\varepsilon^*, \zeta) = -\frac{2}{Pe^{1/2}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda_n}{(\lambda_n^2 + N)} \exp[-(\lambda_n^2 + N)\varphi\zeta] \text{Sen}(\lambda_n \varepsilon^*) \quad (\text{III.48})$$

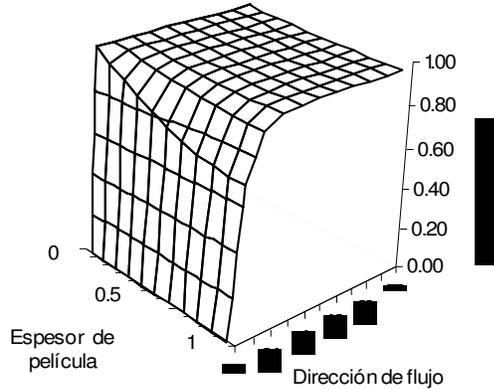
Para encontrar la expresión final de la variable dependiente  $f(\varepsilon, \zeta)$ , se van a sustituir las ecuaciones III.48 y III.29 en III.13, así como también el valor de  $N=Da/Pe$

$$f(\varepsilon, \zeta) = \frac{\exp(-\sqrt{Da}) \exp(\sqrt{Da} \varepsilon) + \exp(\sqrt{Da}) \exp(-\sqrt{Da} \varepsilon)}{\exp(-\sqrt{Da}) + \exp(+\sqrt{Da})} - \frac{2}{Pe^{1/2}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda_n}{(\lambda_n^2 + N)} \exp[-(\lambda_n^2 + N)\varphi\zeta] \text{Sen}(\lambda_n Pe^{1/2} \varepsilon) \quad (\text{III.49})$$

Las figuras III.3.1 a III.3.4 muestran las gráficas obtenidas para el perfil de concentración de la especie **A** en el interior de la película **B**, para diferentes valores de los números de Péclet y Damköhler.

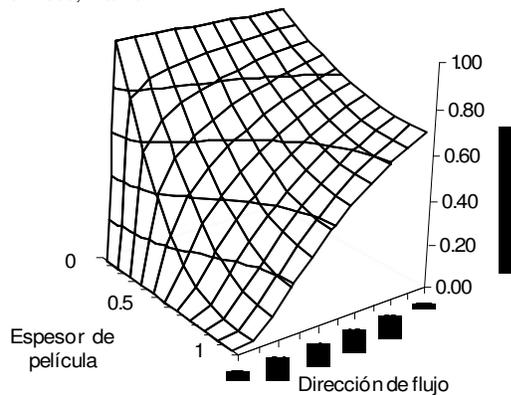
Comparando las figuras III.3.1 y III.3.2, se puede observar que la concentración de la especie **A** en el interior de la película líquida disminuye debido a lo siguiente:

Figura III.3.1.- Perfil de concentración de la especie **A** que se absorbe y reacciona en una película líquida. Solución Exacta  $Pe = 100$ ,  $Da = 0.1$



### III.3.1.1. Tiempo corto de contacto entre las fases.

Figura III.3.2.- Perfil de concentración de la especie **A** que se absorbe y reacciona en una película líquida. Solución Exacta  $Pe = 1000$ ,  $Da = 0.1$



III.3.1.2. A medida que la especie **A** se absorbe en la fase líquida, reacciona con la especie **B**.

Las figuras III.3.3 y III.3.4 Muestran la variación en la concentración de la especie **A** el interior de la película, cuando el número de Damköhler aumenta en un orden de magnitud.

Figura III.3.3.- Perfil de concentración de la especie **A** que se absorbe y reacciona en una película líquida. Solución Exacta  $Pe = 0.1$ ,  $Da = 1$

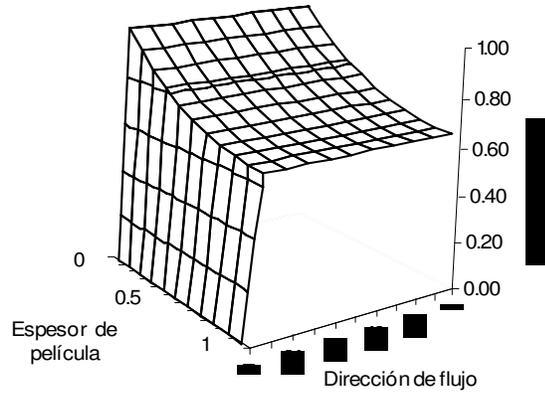
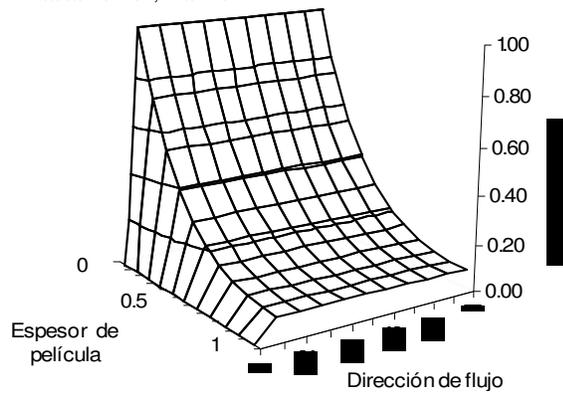


Figura III.3.4.- Perfil de concentración de la especie **A** que se absorbe y reacciona en una película líquida. Solución Exacta  $Pe = 0.1$ ,  $Da = 10$



### III.4 Transporte aumentado en películas líquidas

El transporte aumentado<sup>6,7</sup> se caracteriza por proporcionar un incremento a la transferencia de masa de un soluto, el cual se absorbe en una fase líquida en donde se llevan a cabo una o varias reacciones químicas entre el soluto que se encuentra en la fase gas y la fase líquida donde se absorbe. El soluto que generalmente es transportado por un gas acarreador, se absorbe y parte de éste, se difunde en la fase líquida para reaccionar para formar el producto deseado. La transferencia de masa por difusión en la película de líquido está dada por el gradiente de concentración que existe entre las fases gas-líquido. El incremento en la capacidad de absorción a través de la fase líquida se representa mediante el factor de aumento o de mejora, el cual se define de la siguiente manera

$$\Phi = \frac{\text{Flux de la especie A en la película líquida cuando existe reacción química} \Big|_{\varepsilon=0}}{\text{Flux de la especie A en la película líquida sin reacción química} \Big|_{\varepsilon=0}} \quad (\text{III.50})$$

Para poder calcular cada uno de los términos de la ecuación III.50, se hará uso de la siguiente expresión para el flux molar<sup>8</sup> de la especie A en la dirección x desde la fase gas a la fase líquida mediante

$$N_{Ax} = -D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial x} \Big|_{x=0} = k(C_A - C_A^*) \quad (\text{III.51})$$

donde:

$N_{Ax}$  = Flux molar de la especie A desde la fase gas hacia la fase líquida

$k$  = Coeficiente de transferencia de masa

$C_A$  = Concentración de la especie A en la fase gas  $C_A = p_A / RT$

La ecuación III.51 también se puede emplear para calcular el valor del coeficiente de transferencia de masa. Sin embargo en este estudio nos concretaremos a emplear únicamente el término de transferencia de masa difusivo expresado por la ley de Fick<sup>8</sup> para calcular el factor de aumento.

Usando las variables adimensionales II.9, la ecuación III.51 se puede escribir de la siguiente manera

$$N_{Ax} = \frac{C_A^* D_{AB}}{\delta} \left. \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} \quad (\text{III.52})$$

ahora, aplicando la ecuación III.52 para los casos de absorción de la especie **A** en la película líquida con reacción y sin reacción química, y sustituyendo dichas expresiones en la ecuación III.50, se llega a que el factor de aumento de la transferencia de masa se puede calcular mediante

$$\Phi = \frac{N_{Ax}^{cRx} \Big|_{\varepsilon=0}}{N_{Ax}^{sRx} \Big|_{\varepsilon=0}} = - \frac{C_A^* D_{AB}}{\delta} \left. \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=0}^{cRx} \Big/ - \frac{C_A^* D_{AB}}{\delta} \left. \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=0}^{sRx} \quad (\text{III.53})$$

reduciendo términos

$$\Phi = \frac{N_{Ax}^{cRx} \Big|_{\varepsilon=0}}{N_{Ax}^{sRx} \Big|_{\varepsilon=0}} = \left. \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=0}^{cRx} \Big/ \left. \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=0}^{sRx} \quad (\text{III.54})$$

donde:

$N_{Ax}^{cRx}$  = Flux molar de la especie **A** cuando en el proceso de absorción existe la influencia de una reacción química de primer orden irreversible.

$N_{Ax}^{sRx}$  = Flux molar de la especie **A** cuando el proceso de absorción es puramente físico.

Para evaluar el numerador y el denominador de la ecuación III.54 es necesario derivar una vez con respecto a  $\varepsilon$  las expresiones obtenidas para el perfil de concentración adimensional sin reacción y con reacción química, ecuaciones II.51 y III.49 respectivamente. En este momento únicamente daremos el resultado de la expresión final para el factor de aumento

$$\Phi = \frac{\sqrt{Da}[\exp(-\sqrt{Da}) - \exp(\sqrt{Da})]}{[\exp(-\sqrt{Da}) + \exp(\sqrt{Da})]} - \frac{\sum_{n=1}^{\infty} \frac{2\lambda_n^2}{(\lambda_n^2 + N)} \exp[-(\lambda_n^2 + N)\varphi\zeta]}{\sum_{n=1}^{\infty} 2 \exp(-\lambda_n^2 \varphi\zeta)}$$

(III.55)

Las figuras III.4.1 a III.4.4 muestran las gráficas obtenidas para el factor de aumento para diferentes valores de los números de Damköhler y Péclet.

Figura III.4.1 Influencia del número de Damköhler sobre el factor de aumento para Pe=10

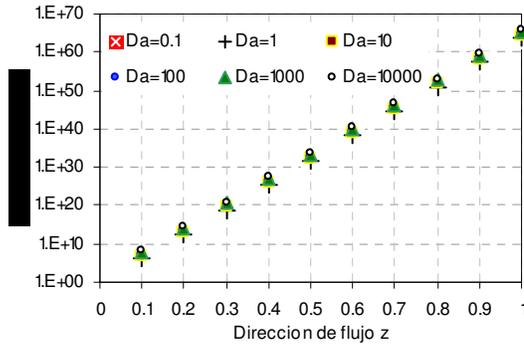
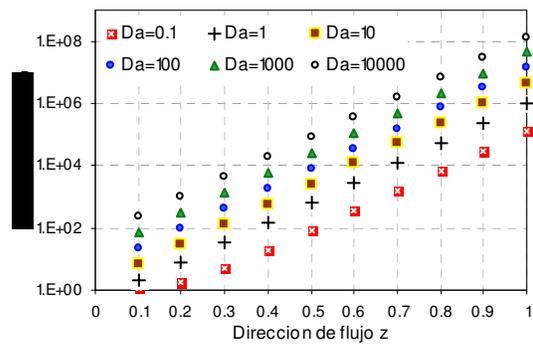


Figura III.4.2 Influencia del número de Damköhler sobre el factor de aumento para Pe=100



Se puede observar que cuando el número de Péclet cambia de 10 a 100, el valor del factor de aumento disminuye considerablemente debido a que el tiempo de contacto entre las fases se reduce en un orden de magnitud. Para valores del número de Péclet menores a 1, el flujo debido a la absorción física es cero, ya que la superficie de la fase

líquida se satura rápidamente con la especie A. Para este caso, el proceso de absorción con reacción química, controla el proceso global de transferencia de masa.

Figura III.4.3 Influencia del número de Damköhler sobre el factor de aumento para  $Pe=1000$

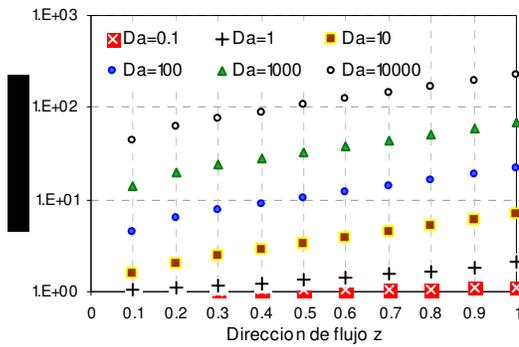


Figura III.4.4 Influencia del número de Damköhler sobre el factor de aumento para  $Pe=10000$

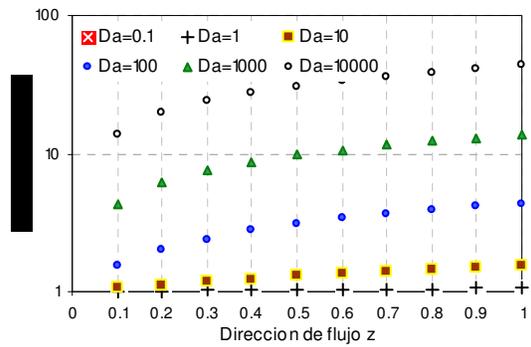
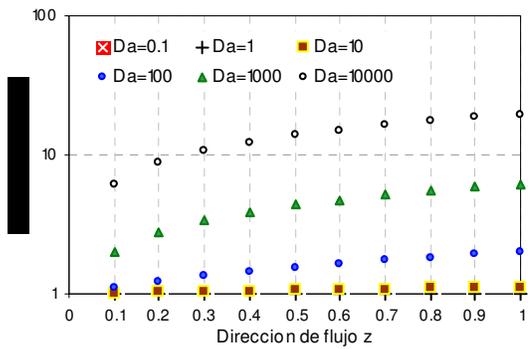


Figura III.4.5 Influencia del número de Damköhler sobre el factor de aumento para  $Pe=50000$



## Capítulo IV Solución aproximada al problema de absorción

### IV.1 Método de Diferencia finita

Como se mencionó en la introducción, otro de los objetivos del presente estudio es aplicar el método de diferencia finita para resolver las ecuaciones diferenciales parciales para los modelos de absorción puramente física y absorción con reacción química (reacción irreversible de primer orden y reacción del tipo Michaels-Menten) en el interior de la película de líquido de tal manera que se pueda encontrar la desviación que existe entre la solución encontrada por el método numérico y la solución analítica desarrollada en este trabajo de tesis. Además

Los métodos de diferencia finita<sup>11,12</sup> se conocen como técnicas discretas donde el dominio de la solución de una ecuación diferencial parcial sujeta a condiciones de frontera como las que se han manejado a lo largo de este trabajo, se subdivide en un número finito de puntos o intervalos, conocidos como nodos de malla. La información que existe entre estos puntos se encuentra mediante el uso de las series de Taylor. En estos métodos, la derivada se reemplaza por una aproximación de diferencia finita. Alternativamente, se puede ver a este procedimiento de discretización<sup>12</sup> como el reemplazo de la solución de la ecuación diferencial parcial por un polinomio interpolante y la derivada del mismo.

Se hará el desarrollo del método para sistemas de una sola variable independiente mediante series de Taylor y posteriormente se ampliará a sistemas de dos variables independientes. La aplicación del método de diferencia finita, consiste de los siguientes pasos. Primero; considerar que  $U(x)$  es una función continua que depende de la variable  $x$ , Segundo, dividir el dominio  $x$  como lo muestra la figura IV.1 en un conjunto de puntos (nodos) en el intervalo de interés, esto es para el intervalo cerrado  $[a,b]$

$$a = x_0 < x_1 < x_2 \dots \dots < x_{i-1} < x_i < x_{i+1} = b \quad (\text{IV.1})$$

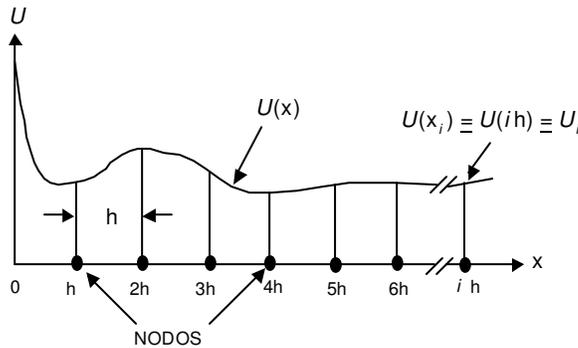


Figura IV.1 discretización de  $U(x)$  mediante el método de diferencia finita unidimensional usando un tamaño de malla constante  $h$ .

tal que

$$U(x_i) \equiv U(ih) \equiv U_i \quad \text{para } i = 0, 1, 2, 3 \dots \dots \quad (\text{IV.2})$$

Reemplazando el punto de localización  $x_i$  por  $ih$ , las coordenadas de los nodos están especificadas simplemente al multiplicar el valor entero de  $i$  por el espaciamiento de la malla  $h$  (en este caso se está considerando que el valor de  $h$  es constante y normalizado a un valor menor que la unidad). El valor entero  $i$  denota la posición del nodo a lo largo de la coordenada  $x$  relativa al dato especificado. Normalmente  $i = 0$  cuando  $x = 0$ . Segundo, discretizar las ecuaciones diferenciales aplicando el método.

Para el caso de un problema bidimensional, el primer paso es dividir el dominio  $x, z$  en un conjunto de puntos (nodos), como lo muestra la figura IV.2 para el intervalo de interés en ambas variables independientes, esto es para  $b \geq x \geq a$  y  $d \geq z \geq c$ .

$$a = x_0 < x_1 < x_2 \dots \dots < x_{i-1} < x_i < x_{i+1} = b \quad (\text{IV.3})$$

$$c = z_0 < z_1 < z_2 \dots \dots < z_{j-1} < z_j < z_{j+1} = d \quad (\text{IV.4})$$

donde los puntos de localización  $x_i$  y  $z_j$  se reemplazan por  $ih$  y  $jk$ , quedando especificados los nodos simplemente al multiplicar los valores enteros de  $i$  y  $j$  por los espaciamientos de la malla  $h$  y  $k$ , los cuales se consideran constantes en todo el dominio de  $x$  y  $z$ .

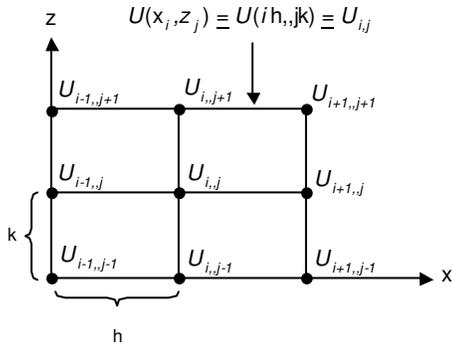


Figura IV.2 discretización de  $U(x,z)$  mediante el método de diferencia finita bidimensional usando tamaños de malla constantes  $h$  y  $k$ .

tal que

$$U(x_i, z_j) \equiv U(ih, jk) \equiv U_{i,j} \quad \text{para } i, j = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (\text{IV.5})$$

El segundo paso consiste en emplear las series de Taylor, para poder escribir las ecuaciones diferenciales y las condiciones a la frontera en forma de ecuaciones algebraicas. Las series de Taylor, juegan un papel muy importante en la formulación y clasificación de los diferentes esquemas empleados para la aplicación del método de diferencia finita.

Iniciaremos definiendo a la función  $f(x)$  tal que  $f$  y sus  $n$  primeras derivadas son continuas en el intervalo cerrado  $[a,b]$ . Además se debe considerar que  $f^{n+1}(x)$  existe para toda  $x$  en el intervalo abierto  $(a,b)$ . Finalmente se supone que existe un número  $\xi$  en el intervalo abierto  $(a,b)$  de tal manera que la función  $f$  evaluada en  $b$ , se calcula mediante la siguiente expresión

$$f(b) = f(a) + f'(a)(b-a) + f''(a)\frac{(b-a)^2}{2!} + f'''(a)\frac{(b-a)^3}{3!} + \dots + f^{(n)}(a)\frac{(b-a)^n}{n!} + f^{(n+1)}(\xi)\frac{(b-a)^{n+1}}{(n+1)!} \quad (\text{IV.6})$$

La ecuación IV.6 también es válida cuando  $b < a$ ; en tal caso  $[a, b]$  se reemplaza por  $[b, a]$ , y  $(a, b)$  se reemplaza por  $(b, a)$ .

Para obtener expresiones para la primera derivada del método de diferencia finita, las cuales se van a emplear en la solución de las ecuaciones diferenciales parciales para los procesos de absorción con y sin reacción química, se usará la ecuación IV.6 desarrollada hasta la primera derivada.

Para el intervalo  $x_i \leq \xi \leq x_i + h$  con  $a = x_i$  y  $b = x_i + h$ , se tiene

$$f(x_i + h) = f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2!} f''(\xi) \quad (\text{IV.7a})$$

de la misma manera para el intervalo  $x_i - h \leq \bar{\xi} \leq x_i$  con  $a = x_i$  y  $b = x_i - h$

$$f(x_i - h) = f(x_i) - hf'(x_i) + \frac{h^2}{2!} f''(\bar{\xi}) \quad (\text{IV.7b})$$

Despejando de la ecuación IV.7a el término para la primera derivada y reordenando términos, se obtiene la siguiente ecuación para la primera derivada

$$f'(x_i) = \left[ \frac{f(x_i + h) - f(x_i)}{h} \right] - \frac{h}{2!} f''(\xi) \quad (\text{IV.8})$$

despreciando el término de la segunda derivada  $-\frac{h}{2!} f''(\xi) = 0$  la ecuación IV.8 se reduce a la siguiente expresión

$$f'(x_i) = \left[ \frac{f(x_i + h) - f(x_i)}{h} \right] \quad (\text{IV.9})$$

como puede observarse en la ecuación final IV.9, la serie ha sido truncada eliminando el término de la segunda derivada por tal motivo de antemano se sabe que existe un error  $E_i$  asociado a esta aproximación. Dicho error puede ser caracterizado como  $E_i = -\frac{h}{2!} f''(\xi) = O(h)$  lo que significa que la aproximación es de orden  $h$ . A la ecuación IV.9 se le conoce como el método de diferencia finita hacia adelante para la primera derivada.

De la misma manera, usando la ecuación IV.7b se puede obtener otra ecuación para calcular la primera derivada

$$f'(x_i) = \left[ \frac{f(x_i) - f(x_i - h)}{h} \right] + \frac{h}{2!} f''(\bar{\xi}) \quad (\text{IV.10})$$

a la ecuación IV.10 se le conoce como el método de diferencia finita hacia atrás donde el error de truncamiento es  $E_i = +\frac{h}{2!} f''(\bar{\xi}) = O(h)$  que en valor absoluto es exactamente igual al encontrado para el método de diferencia finita hacia adelante.

Las ecuaciones IV.9 y IV.10 se pueden escribir de la siguiente manera:

$$f'_i = \left[ \frac{f_{i+1} - f_i}{h} \right] \quad (\text{IV.11})$$

$$f'_i = \left[ \frac{f_i - f_{i-1}}{h} \right] \quad (\text{IV.12})$$

donde  $f_i$  es la función evaluada en  $x_i$ ,  $f_{i-1}$  es la función evaluada en  $x_i-h$  y  $f_{i+1}$  es la función evaluada en  $x_i+h$ . De manera semejante se puede aplicar el mismo procedimiento para obtener expresiones que permitan calcular la segunda derivada para el método de diferencia finita. Ahora se usará la ecuación IV.6 desarrollada hasta la cuarta derivada

Para el intervalo  $x_i \leq \xi \leq x_i + h$  con  $a=x_i$  y  $b=x_i+h$

$$f(x_i + h) = f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2!} f''(x_i) + \frac{h^3}{3!} f'''(x_i) + \frac{h^4}{4!} f^{IV}(\xi) \quad (\text{IV.13})$$

para el intervalo  $x_i - h \leq \bar{\xi} \leq x_i$  con  $a=x_i$  y  $b=x_i-h$

$$f(x_i - h) = f(x_i) - hf'(x_i) + \frac{h^2}{2!} f''(x_i) - \frac{h^3}{3!} f'''(x_i) + \frac{h^4}{4!} f^{IV}(\bar{\xi}) \quad (\text{IV.14})$$

sumando las ecuaciones IV.13 y IV.14

$$f(x_i + h) + f(x_i - h) = 2f(x_i) + h^2 f''(x_i) + \frac{h^4}{4!} [f^{IV}(\xi) + f^{IV}(\bar{\xi})] \quad (\text{IV.15})$$

reordenando la ecuación IV.15 para despejar la segunda derivada  $f''$ , se tiene

$$f''(x_i) = \frac{f(x_i + h) - 2f(x_i) + f(x_i - h)}{h^2} + \frac{h^2}{4!} [f^{IV}(\xi) + f^{IV}(\bar{\xi})]$$

$$f''(x_i) = \left[ \frac{f(x_i + h) - 2f(x_i) + f(x_i - h)}{h^2} \right] \quad (\text{IV.16})$$

Nuevamente, en este caso la serie que se representa por la ecuación IV.16 ha sido truncada en los términos que contienen la cuarta derivada de  $f$  y por consiguiente, el error  $E_i$  asociado a esta aproximación ahora puede ser caracterizado como  $E''_i = \frac{h^2}{4!} [f^{IV}(\xi) + f^{IV}(\bar{\xi})] = O(h^2)$ , lo que significa que la aproximación encontrada es de orden  $h^2$ .

A la ecuación IV.16 se le conoce como el método de diferencia finita centrada para la segunda derivada y se puede escribir como

$$f''_i = \left[ \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} \right] \quad (\text{IV.17})$$

Hasta este momento, sólo se han deducido las ecuaciones que se van a emplear para resolver la ecuación diferencial parcial para la absorción de un gas en un líquido.

## IV.2 Aplicación del método de diferencia finita a la ecuación

### de absorción sin reacción química

Para la aplicación del método de diferencia finita al modelo de absorción sin reacción química ecuación II.14, el dominio de la variable independiente  $\varepsilon^*$  se divide en  $M$  intervalos del mismo tamaño  $h$  como se muestra en la figura IV.3 de acuerdo a la siguiente expresión

$$h = \frac{\varepsilon_M^* - \varepsilon_0^*}{M} \quad (\text{IV.18})$$

donde  $\varepsilon_0^* = 0$  y  $\varepsilon_M^* = Pe^{1/2}$  y  $M$  es el número de intervalos en los que se va dividir el

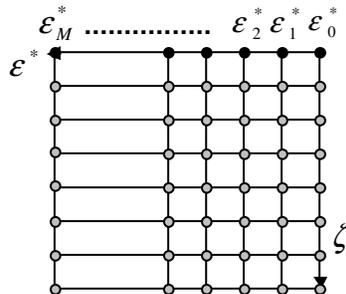


Figura IV.3 Discretización de la función  $f(\varepsilon^*, \zeta)$  mediante el método de diferencia finita usando un tamaño de malla constantes  $h$ .

dominio de la variable  $\varepsilon^*$ . Los puntos de localización (nodos de la malla) en color negro son valores conocidos de la función  $f$  y se emplearán para encontrar el valor de la función  $f$  en los nodos de color blanco cuando se aplique el método de diferencia finita centrada al término del lado derecho de la ecuación II.14 de la siguiente manera

$$\frac{df_i}{d\zeta} = \varphi \frac{(f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}))}{h^2} \quad \text{para } i = 1, 2, 3, 4, \dots, M \quad (\text{IV.19})$$

donde el valor del tamaño de la malla  $h$  se calcula de la siguiente manera

$$h = \frac{\varepsilon_M^* - \varepsilon_0^*}{M} = \frac{(\varepsilon_M Pe^{1/2} - \varepsilon_0 Pe^{1/2})}{M} = \frac{Pe^{1/2}}{M} \quad (IV.20)$$

sustituyendo el valor de ecuación IV.20 en la ecuación IV.19 y recordando que  $\varepsilon_0 = 0$  y  $\varepsilon_M = 1.0$ , la expresión final para el sistema de ecuaciones diferenciales es

$$\frac{df_i}{d\zeta} = \frac{\phi M^2}{Pe} (f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}) \quad \text{para } i = 1, 2, 3, 4, \dots, M \quad (IV.21)$$

Antes de resolver el sistema de ecuaciones IV.21, es importante encontrar cuál es la relación que existe entre el sistema de ecuaciones diferenciales representado por IV.21 y las condiciones a la frontera II.15b y II.15c. Para ello se va a desarrollar la ecuación IV.21 para los casos  $i = 1$  e  $i = M$

Para  $i = 1$

$$\frac{df_1}{d\zeta} = \frac{\phi M^2}{Pe} (f_2 - 2f_1 + f_0) \quad (IV.22a)$$

Para  $i = M$

$$\frac{df_M}{d\zeta} = \frac{\phi M^2}{Pe} (f_{M+1} - 2f_M + f_{M-1}) \quad (IV.22b)$$

la condición a la frontera II.15b nos indica que el valor de concentración adimensional en la frontera gas-líquido es igual a la unidad es decir

$$\forall \quad \varepsilon_o^* = 0 \quad f_0 = 1 \quad (IV.23b)$$

Aplicando el método de diferencia finita centrada a la condición a la frontera II.15c para encontrar el valor de  $f_{M+1}$ , se tiene que

$$\forall \quad \varepsilon_M^* = Pe^{1/2} \quad \frac{\partial f}{\partial \varepsilon^*} = \frac{(f_{M+1} - f_{M-1})}{h} = 0 \rightarrow f_{M+1} = f_{M-1} \quad (\text{IV.23c})$$

Ahora se van a sustituir los resultados obtenidos de las condiciones a la frontera IV.23b y IV.23c en las ecuaciones IV.22a y IV.22b para obtener el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que se va a integrar para encontrar el perfil de concentración de la especie A en el interior de la película de líquido.

Para  $i = 1$

$$\frac{df_1}{d\zeta} = \frac{\varphi M^2}{Pe} (1 - 2f_1 + f_2) \quad (\text{IV.24a})$$

Para  $i = 2, 3, 4, \dots, M-1$

$$\frac{df_i}{d\zeta} = \frac{\varphi M^2}{Pe} (f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}) \quad (\text{IV.24b})$$

Para  $i = M$

$$\frac{df_M}{d\zeta} = \frac{\varphi M^2}{Pe} (2f_{M-1} - 2f_M) \quad (\text{IV.24c})$$

El sistema de ecuaciones diferenciales representado por las ecuaciones IV.24 a, b y c, está perfectamente establecido y para realizar la integración de dicho sistema, únicamente se requiere emplear la ecuación II.15a como condición inicial de la siguiente manera:

$$\forall \quad \varepsilon^* [0, Pe^{1/2}] \quad \zeta_0 = 0 \quad f_i = 0 \quad \text{para } i = 1, \dots, M \quad (\text{IV.25a})$$

### IV.3 Análisis de resultados y comparación entre la solución analítica

#### y la solución numérica

Las figuras IV.3.1 a IV.3.8 muestran los gráficos de las soluciones encontradas mediante el método numérico de diferencia finita centrada, empleando tamaños de malla de  $h=0.1$  que dan como resultado un sistema de 10 ecuaciones diferenciales, hasta  $h=0.0125$  que dan un sistema de 80 ecuaciones diferenciales. En estos gráficos, se puede observar claramente que cuando el número de Péclet toma valores entre 0.1 y 10000, los resultados que predice el método numérico son aceptables ya que la diferencia entre los valores predichos por la solución analítica y los calculados por el método numérico, oscilan entre  $-1.0E-03$  y  $3.0E-06$  cuando se emplean 10 y 80 ecuaciones diferenciales respectivamente.

Fig. IV.3.1.- Solución mediante el método de diferencia finita a la ecuación de absorción sin reacción química para  $Pe_{lect}=0.1$  a una distancia de penetración de 0.5

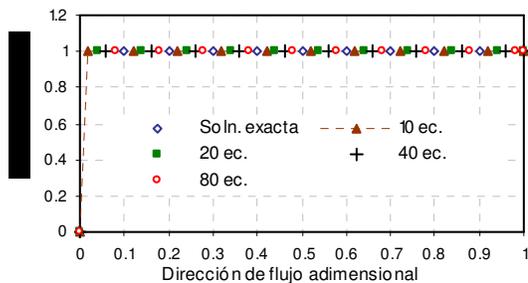
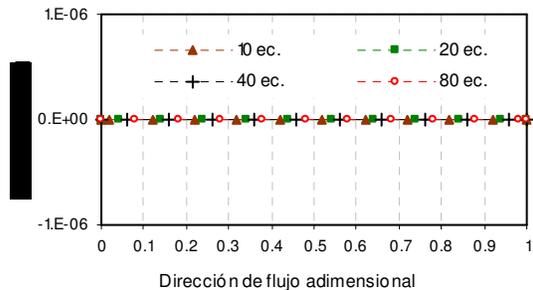


Fig. IV.3.2.- Desviación de la solución encontrada por diferencia finita a la ecuación de absorción sin reacción química para  $Pe_{lect}=0.1$



Para  $Pe = 1.0$ , los perfiles de concentración obtenidos son idénticos a los obtenidos para  $Pe = 0.1$ . Ambos casos, representan el proceso de absorción de un gas en un líquido que permanece estático y para este caso, el proceso de transferencia de masa está controlado por la difusión de la especie A y este problema de absorción se puede resolver como un problema unidimensional utilizando las mismas condiciones a la frontera en la dirección  $x$  del problema bidimensional.

Fig. IV.3.3.- Solución mediante el método de diferencia finita a la ecuación de absorción sin reacción química para  $Péclet=10$  a una distancia de penetración de 0.5

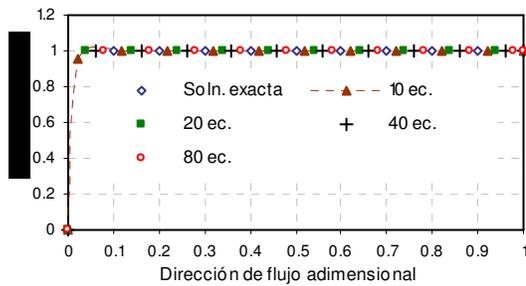
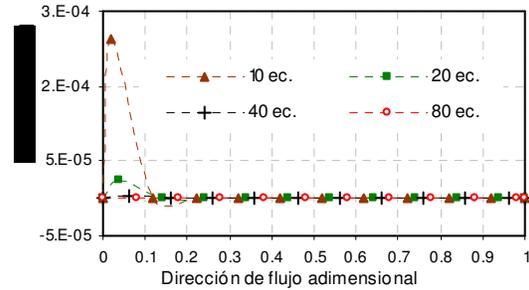


Fig. IV.3.4.- Desviación de la solución encontrada por diferencia finita a la ecuación de absorción sin reacción química para  $Péclet=10$



Es importante notar que las soluciones aproximadas empleando 10 y 20 ecuaciones diferenciales presentan oscilaciones fuertes en los valores de concentración obtenidos en la región  $z=0$ , debido al cambio brusco que existe en el momento que las fases líquido y gas se ponen en contacto, es decir cuando la concentración de la especie  $A$  justo a la entrada de la columna cambia de 0 a 1. Lo anterior se conoce como problemas de entrada y en la mayoría de los casos la solución numérica a dichos problemas requiere de métodos más sofisticados como los métodos de colocación ortogonal y elemento finito. En este trabajo únicamente nos enfocaremos en analizar las limitaciones que presenta el método de diferencia finita.

Fig. IV.3.5.- Solución mediante el método de diferencia finita a la ecuación de absorción sin reacción química para  $Péclet=100$  a una distancia de penetración de 0.5

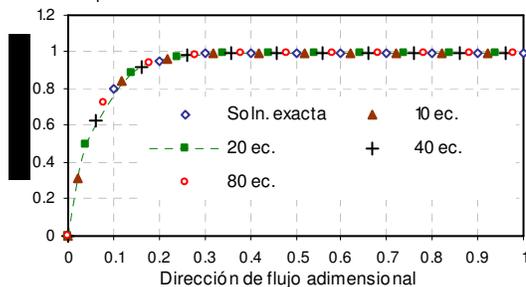
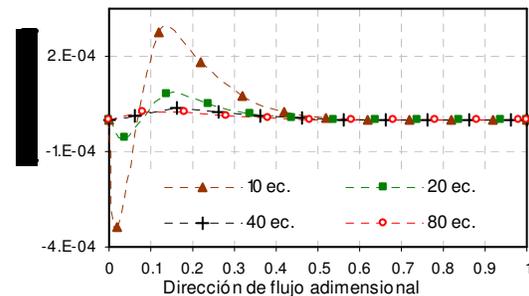


Fig. IV.3.6.- Desviación de la solución encontrada por diferencia finita a la ecuación de absorción sin reacción química para  $Péclet=100$



Para lograr que el método de diferencia finita el sistema sea estable en esta región, se empleó un sistema de 40 ecuaciones con  $h=0.025$  y como se puede observar en las figuras IV.3.4 y IV.3.6, los resultados obtenidos con este sistema muestran mayor estabilidad cuando el número de Péclet es 100. Sin embargo, cuando el número de Péclet toma el valor de 1000, nuevamente se puede observar que el sistema de 40 ecuaciones al igual que el sistema de 10 y 20 ecuaciones es inestable.

Fig. IV.3.7.- Solución mediante el método de diferencia finita a la ecuación de absorción sin reacción química para  $Pe_{cl\acute{e}ct}=1000$  a una distancia de penetración de 0.5

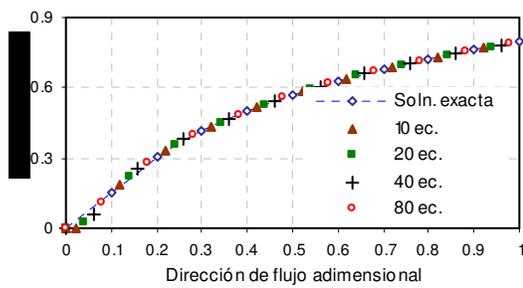
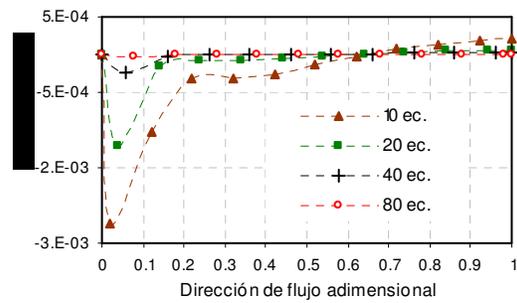


Fig. IV.3.8.- Desviación de la solución encontrada por diferencia finita a la ecuación de absorción sin reacción química para  $Pe_{cl\acute{e}ct}=1000$



En las figuras IV.3.1 a IV.3.10 se puede observar que cuando se utilizan 80 puntos de malla para generar un sistema de 80 ecuaciones diferenciales, el sistema es completamente estable para Péclet entre 0.1 y 10000 por que la diferencia obtenida entre los valores de la solución exacta y aproximada son menores a  $1E-05$ .

Fig. IV.3.9.- Solución mediante el método de diferencia finita a la ecuación de absorción sin reacción química para  $Pe_{cl\acute{e}ct}=10000$  a una distancia de penetración de 0.5

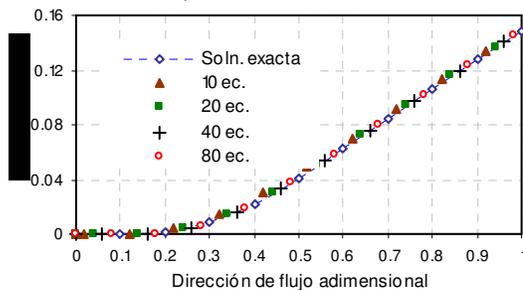
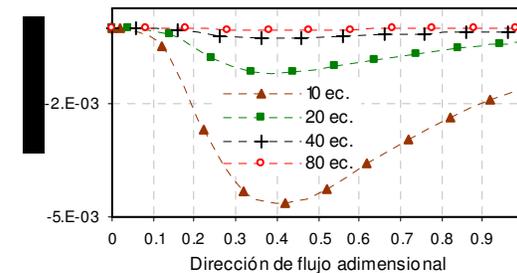


Fig. IV.3.10.- Desviación de la solución encontrada por diferencia finita a la ecuación de absorción sin reacción química para  $Pe_{cl\acute{e}ct}=10000$



A medida que aumenta el número de nodos en la implementación del método de diferencia finita, es importante mencionar que se requieren más recursos de cómputo para realizar la integración numérica de las ecuaciones diferenciales resultantes y por lo tanto es el momento adecuado para usar otro método de integración numérica que permita reducir el número de integraciones.

Para realizar la integración del sistema de 10, 20, se empleó el método de Runge-Kutta de 4° orden con un tamaño de paso constante de 2E-05. El número de integraciones realizadas fue de 50000 para valores del número de Péclet entre 10 y 50000. Sin embargo para valores del número de Péclet entre 0.1 y 10, se encontró que el método de integración numérica diverge de la solución buscada y por lo tanto para lograr una solución adecuada, el tamaño de paso para la integración se redujo de 1E-04 a 3E-06 lo que significa realizar 300000 integraciones.

Para reducir de manera significativa el número de integraciones, para los sistemas de 10, 20, 40 y 80 ecuaciones, se empleó el método de 4° orden Rosenbrock<sup>13,14</sup>, con el cual el número máximo de integraciones para todos los valores de número de Péclet fue de 2484.

Fig. 3.11.- Solución mediante el método de diferencia finita a la ecuación de absorción sin reacción química para  $Pe_{cl\acute{e}ct}=50000$  a una distancia de penetración de 0.5

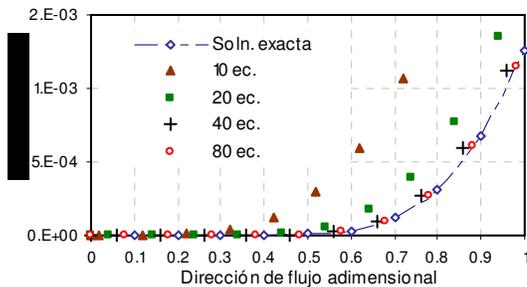
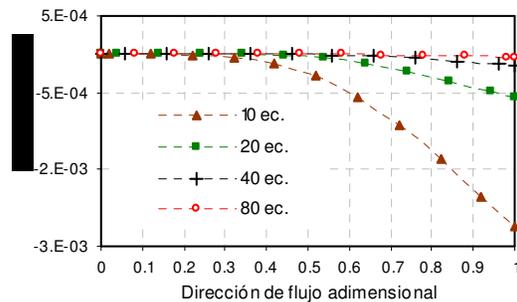


Fig. 3.12.- Desviación de la solución encontrada por diferencia finita a la ecuación de absorción sin reacción química para  $Pe_{cl\acute{e}ct}=50000$



#### IV.4 Aplicación del método de diferencia finita a la ecuación

##### de absorción con reacción química

Al igual que el caso de absorción sin reacción química, ahora se aplicará el método de diferencia finita centrada a la ecuación diferencial parcial para el modelo de absorción con reacción química, es decir se va a realizar la discretización del lado derecho de la ecuación III.11 para obtener la siguiente expresión

$$\frac{df_i}{d\zeta} = \varphi \frac{(f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}))}{h^2} - \varphi N f_i \quad \text{para } i = 1, 2, 3, 4, \dots, M$$

(IV.26)

donde  $h$ , el tamaño de malla tiene el mismo valor que para el caso de absorción sin reacción química. Sustituyendo el valor de  $h$  en la ecuación IV.26 y recordando que  $M$  es el número de intervalos en los que se va a dividir el dominio de la variable  $\varepsilon^*$ . Se tiene que

$$\frac{df_i}{d\zeta} = \frac{\varphi M^2}{Pe} (f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1})) - \varphi N f_i \quad \text{para } i = 1, 2, 3, 4, \dots, M$$

(IV.27)

La ecuación IV.27 representa el modelo de absorción con reacción química en forma de diferencia finita y, como se puede observar, es un conjunto de  $M$  ecuaciones diferenciales, una para cada uno de los nodos de la malla en la que se ha dividido el dominio de la variable independiente. Utilizando los resultados obtenidos para las condiciones a la frontera ecuaciones IV.23b y IV.23c, la ecuación IV.27 se puede escribir de la siguiente manera:

Para  $i = 1$

$$\frac{df_1}{d\zeta} = \frac{\varphi M^2}{Pe} (1 - 2f_1 + f_2) - \varphi N f_1 \quad \text{(IV.28a)}$$

Para  $i = 2, 3, 4, \dots, M-1$

$$\frac{df_i}{d\zeta} = \frac{\varphi M^2}{Pe} (f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}) - \varphi N f_i \quad (\text{IV.28b})$$

Para  $i = M$

$$\frac{df_M}{d\zeta} = \frac{\varphi M^2}{Pe} (2f_{M-1} - 2f_M) - \varphi N f_M \quad (\text{IV.28c})$$

La integración numérica de las ecuaciones IV.28 dará como resultado el perfil de concentración de la especie **A** en el interior de la película líquida. Nuevamente, la condición frontera II.15a, se utilizará como condición inicial para realizar la integración.

## IV.5 Análisis de resultados y comparación entre la solución analítica y la

### solución numérica para el caso de una reacción de primer orden

Las figuras IV.5.1 a IV.5.5, muestran la comparación entre los perfiles de concentración obtenidos por la solución analítica y la solución numérica para diferentes valores del número de Péclet 0.1, 1.0, 10, 100, 1000, 10000 y para un valor constante del número de Damköhler igual a 10.

Fig. IV.5.1.- Solución mediante el método de diferencia finita a la ecuación de absorción con reacción química de primer orden para Péclet = 0.1, 1, 10 y Damköhler = 10 a una distancia de penetración de 0.5

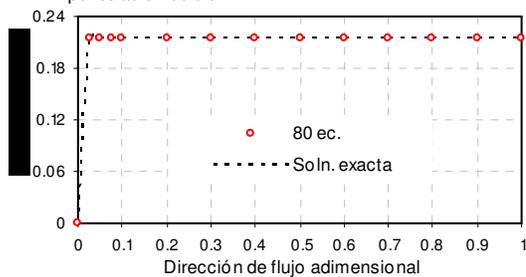
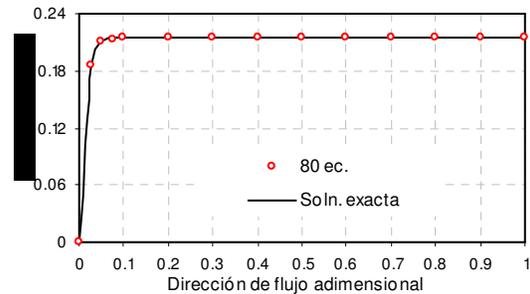


Fig. IV.5.2.- Solución mediante el método de diferencia finita a la ecuación de absorción con reacción química para Péclet = 100 y Damköhler=10 a una distancia de penetración de 0.5



Se puede observar que los resultados obtenidos por la solución numérica son bastante aceptables así como también se puede ver que para valores de Péclet menores a 1000, el proceso de transferencia de masa está controlado por la reacción química y cuando el número de Péclet toma valores mayores a 10000 el proceso de transferencia de masa está controlado por la velocidad de la fase líquida.

Fig. IV.5.3.- Solución mediante el método de diferencia finita a la ecuación de absorción con reacción química para Péclet = 1000 y Damköhler=10 a una distancia de penetración de 0.5

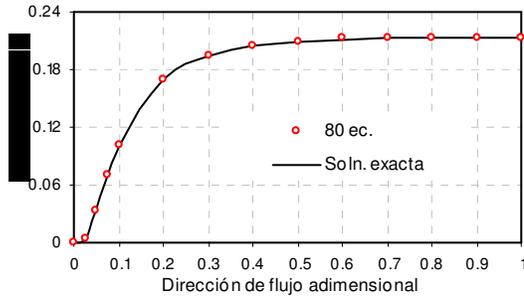
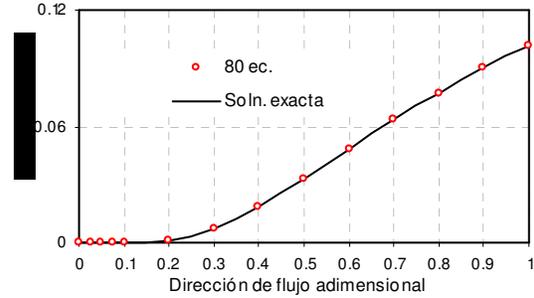
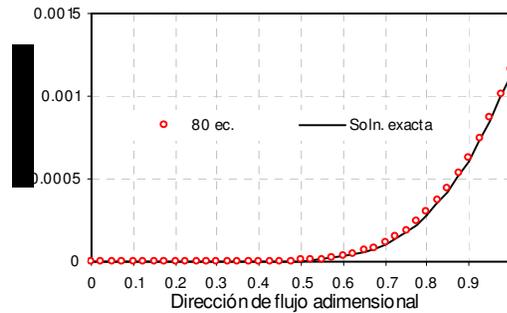


Fig. IV.5.4.- Solución mediante el método de diferencia finita a la ecuación de absorción con reacción química para Péclet = 10000 y Damköhler=10 a una distancia de penetración de 0.5



Es importante mencionar que para resolver el sistema de 80 ecuaciones diferenciales se empleó el método de integración numérica de Rosenbrock de 4<sup>o</sup> orden con ajuste en el tamaño de paso, dando excelentes resultados y sobre todo ahorro en tiempo de máquina.

Fig. IV.5.5 .- Solución mediante el método de diferencia finita a la ecuación de absorción con reacción química para Péclet = 50000 y Damköhler=10 a una distancia de penetración de 0.5



Para todos los valores de los números de Péclet y Damköhler que se manejan en el problema de absorción con reacción química de primer orden, el número máximo de integraciones realizado por el método de Rosenbrock fue de 3200 en lugar de las 300000 integraciones que se requiere el método de Runge-Kutta de 4<sup>o</sup> orden cuando el número de Péclet toma el valor de 0.1.

Es importante mencionar que el tamaño de paso inicial usado para realizar la integración por el método de Rosenbrock de 4° orden fue de 1E-05 ya que el proceso real conocido como problema de entrada, presenta un salto instantáneo en la concentración de la especie A justo a la entrada de la columna.

#### IV.6 Aplicación del método de diferencia finita a la ecuación de absorción con

##### reacción química para un modelo cinético complejo

Existen procesos de transferencia de masa con reacción química, para los cuales, la expresión de velocidad de reacción de la especie A, adquiere una forma compleja, de tal manera, que es difícil poder hallar la solución exacta de la ecuación diferencial parcial que gobierna dicho fenómeno. Por lo tanto, se vuelve indispensable la implementación de un método numérico para dicho fin.

Para el caso donde las reacciones químicas que tienen una expresión para la velocidad de reacción del tipo Michaelis-Menten de la forma

$$R_A = \frac{-k'''C_A}{(1 + K'C_A)} \quad (\text{IV.29})$$

Donde:  $k'''$  es la constante de velocidad de reacción expresada en [=] tiempo<sup>-1</sup>

$C_A$  = Concentración de la especie A [=] mol/volumen

$K'$  = Constante de adsorción de la especie A [=] volumen/mol

Sustituyendo la expresión para  $R_A$  en la ecuación III.1 se obtiene:

$$V_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} - \frac{k'''C_A}{(1 + K'C_A)} \quad (\text{IV.30})$$

Empleando la expresión encontrada para el perfil de velocidad ecuación II.8 y las variables adimensionales definidas por las ecuaciones II.9, se obtiene la siguiente expresión del balance de materia para la especie A

$$[1-\varepsilon^2] \frac{\partial f}{\partial \zeta} = \frac{\varphi}{Pe} \frac{\partial^2 f}{\partial \varepsilon^2} + \frac{1}{\varphi Pe} \frac{\partial^2 f}{\partial \zeta^2} - \frac{\varphi N f}{(1+K'' f)} \quad (\text{IV.31})$$

donde:  $K'' = K' C_A$

Haciendo el cambio de variable  $\varepsilon^{*2} = Pe^{1/2} \varepsilon$  en la ecuación IV.31 y tomando el límite cuando  $Pe \gg 1$ , la ecuación IV.31 se reduce a la siguiente expresión

$$\frac{\partial f}{\partial \zeta} = \frac{\varphi}{Pe} \frac{\partial^2 f}{\partial \varepsilon^{*2}} - \frac{\varphi N f}{(1+K'' f)} \quad (\text{IV.32})$$

Aplicando el método de diferencia finita centrada a la ecuación IV.32, se obtiene la ecuación:

$$\frac{df_i}{d\zeta} = \varphi \frac{(f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}))}{h^2} - \frac{\varphi N f_i}{(1+K'' f_i)} \quad \text{para } i = 1, 2, 3, 4, \dots, M \quad (\text{IV.33})$$

Sustituyendo el valor de  $h$  en la ecuación (IV.33) y recordando que  $M$  es el número de intervalos en los que se divide al dominio de la variable  $\varepsilon^*$  se tiene

$$\frac{df_i}{d\zeta} = \frac{\varphi M^2}{Pe} (f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1})) - \frac{\varphi N f_i}{(1+K'' f_i)} \quad \text{para } i = 1, 2, 3, 4, \dots, M \quad (\text{IV.34})$$

La ecuación IV.34, representa el modelo de absorción con reacción química, en forma de diferencia finita y, como se puede observar, es un conjunto de  $M$  ecuaciones diferenciales, una para cada uno de los nodos de la malla en los que se ha dividido el dominio de la variable independiente. Utilizando los resultados obtenidos para las

condiciones a la frontera ecuaciones IV.23b y IV.23c, la ecuación IV.34 se puede escribir de la siguiente manera:

Para  $i = 1$

$$\frac{df_1}{d\zeta} = \frac{\varphi M^2}{Pe} (1 - 2f_1 + f_2) - \frac{\varphi N f_1}{(1 + K'' f_1)} \quad (\text{IV.35a})$$

Para  $i = 2, 3, 4, \dots, M-1$

$$\frac{df_i}{d\zeta} = \frac{\varphi M^2}{Pe} (f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}) - \frac{\varphi N f_i}{(1 + K'' f_i)} \quad (\text{IV.35b})$$

Para  $i = M$

$$\frac{df_M}{d\zeta} = \frac{\varphi M^2}{Pe} (2f_{M-1} - 2f_M) - \frac{\varphi N f_M}{(1 + K'' f_M)} \quad (\text{IV.35c})$$

La integración numérica de las ecuaciones IV.35 dará como resultado el perfil de concentración de la especie A en el interior de la película líquida. Nuevamente, la condición frontera II.15a, se utilizará como condición inicial para realizar la integración.

## IV.7 Análisis de los resultados obtenidos por el método de diferencia finita

### para el caso de absorción con reacción química (modelo cinético complejo)

En las figuras IV.7.1 a IV.7.8 se muestran los perfiles de concentración de la especie  $A$ , obtenidos para los diferentes valores del número de Péclet [0.1, 1, 10, 100, 1000, 10000], Damköhler [1,10] y para diferentes valores de la constante de adsorción  $K''$  [0, 0.1, 1, 10, 100, 1000] todos a la misma distancia de penetración de la película líquida  $\varepsilon = 0.5$ .

Fig. IV.7.1.- Perfiles de concentración de  $A$  obtenidos por el método de diferencia finita (S.A.), usando una expresión cinética de la forma  $r_A = kCA/(1+K''CA)$ , para  $Pe = 0.1, 1, 10$  y  $Da = 1$  a una distancia de penetración de 0.5

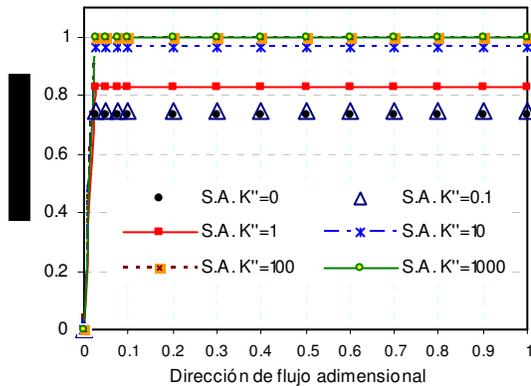
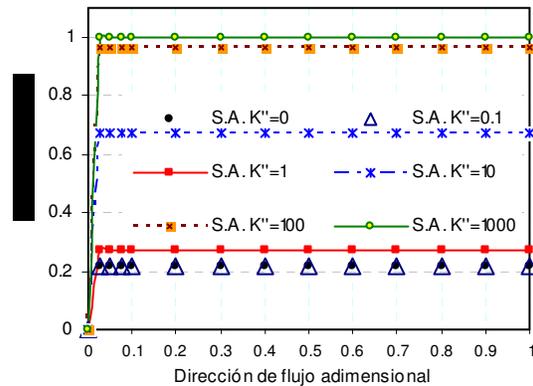


Fig. IV.7.2.- Perfiles de concentración de  $A$  obtenidos por el método de diferencia finita (S.A.), usando una expresión cinética de la forma  $r_A = kCA/(1+K''CA)$ , para  $Pe = 0.1, 1, 10$  y  $Da = 10$  a una distancia de penetración de 0.5



Se puede observar que los perfiles de concentración encontrados mediante el método de diferencia finita (Solución Aproximada S.A.) para los casos donde la constante de adsorción toma los valores de  $K''=0$  y  $K''=0.1$  siguen la misma tendencia que el perfil de concentración hallado por la solución exacta (S.E.) para el caso  $K''=0$ .

Cuando los valores de la constante de adsorción  $K''$  son  $\gg 1$  y el número de Péclet permanece sin cambio, se observa que la concentración de la especie  $A$  aumenta debido a que la velocidad de adsorción está controlando el proceso global de transferencia de masa. En este caso, la fase líquida se comporta como un lecho empacado en cual la especie  $A$  se adsorbe con una velocidad mayor a la de reacción.

Para los casos en los que el número de Péclet toma los valores de 0.1, 1 y 10, los perfiles de concentración son prácticamente iguales, lo que indica nuevamente que el problema de transferencia de masa esta controlado por la difusión en una sola dirección.

Fig. IV.7.3.- Perfiles de concentración de  $A$  obtenidos por el método de diferencia finita (S.A.), usando una expresión cinética de la forma  $r_A = kCA / (1 + K''CA)$ , para  $Pe=100$  y  $Da=1$  a una distancia de penetración de 0.5

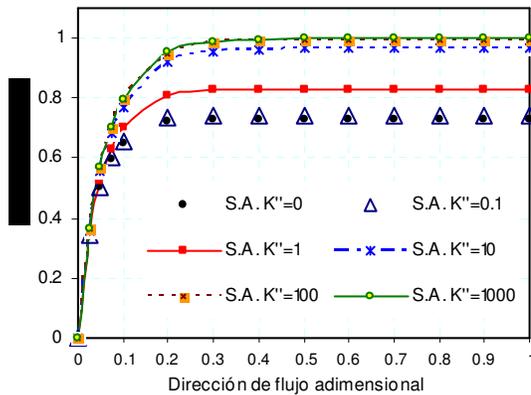
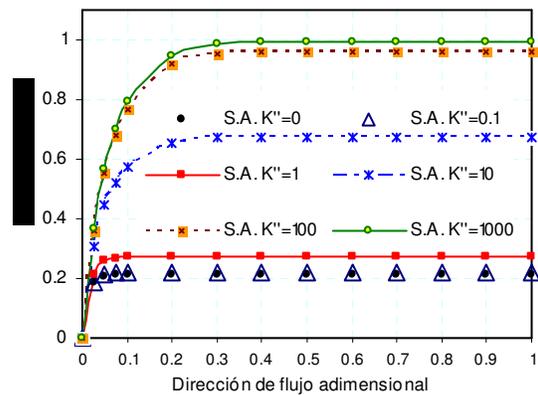


Fig. IV.7.4.- Perfiles de concentración de  $A$  obtenidos por el método de diferencia finita (S.A.), usando una expresión cinética de la forma  $r_A = kCA / (1 + K''CA)$ , para  $Pe=100$  y  $Da=10$  a una distancia de penetración de 0.5



El número máximo de integraciones realizadas por el método de Rosenbrock de 4° orden fue de 3200 cuando el número de Péclet toma el valor de 0.1 mientras que el método de Runge-Kutta requiere de aproximadamente 300000 integraciones.

Fig. IV.7.5.- Perfiles de concentración de **A** obtenidos por el método de diferencia finita (S.A.), usando una expresión cinética de la forma  $r_A = kCA / (1 + K''CA)$ , para  $Pe = 1000$  y  $Da = 1$  a una distancia de penetración de 0.5

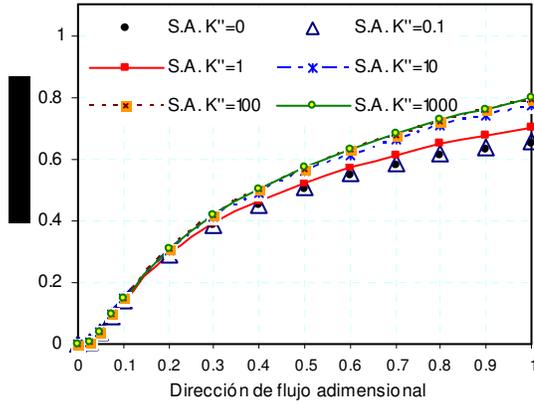
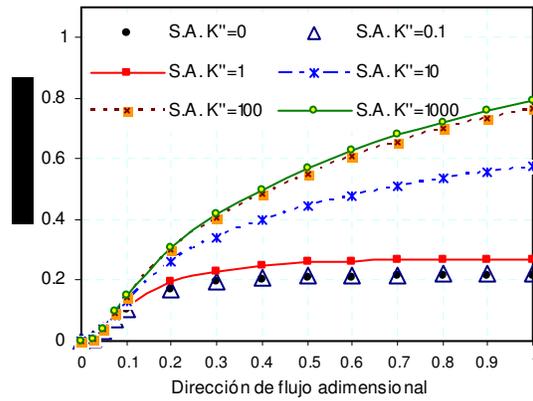


Fig. IV.7.6.- Perfiles de concentración de **A** obtenidos por el método de diferencia finita (S.A.), usando una expresión cinética de la forma  $r_A = kCA / (1 + K''CA)$ , para  $Pe = 1000$  y  $Da = 10$  a una distancia de penetración de 0.5



Cuando el número de Péclet toma el valor de 100, el número de integraciones realizadas por el método de 4° orden de Rosenbrock varió en un rango de 173 a 575, usando un tamaño de paso inicial de 0.0001, mientras que el método Runge-Kutta requiere de aproximadamente de 10000 integraciones.

Fig. IV.7.7.- Perfiles de concentración de **A** obtenidos por el método de diferencia finita (S.A.), usando una expresión cinética de la forma  $r_A = kCA / (1 + K''CA)$ , para  $Pe = 10000$  y  $Da = 1$  a una distancia de penetración de 0.5

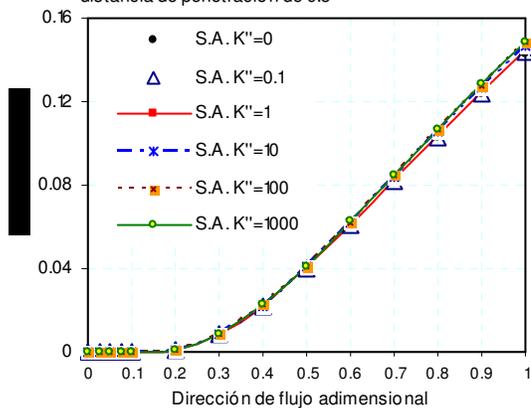
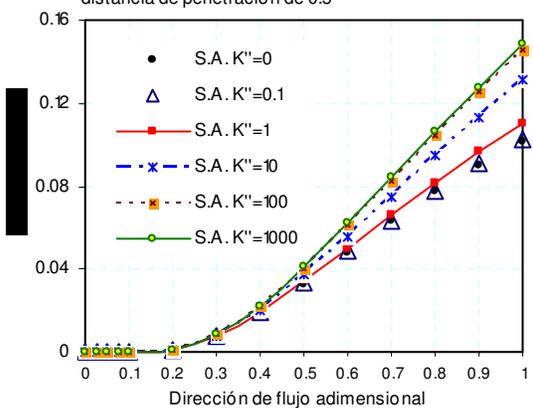


Fig. IV.7.8.- Perfiles de concentración de **A** obtenidos por el método de diferencia finita (S.A.), usando una expresión cinética de la forma  $r_A = kCA / (1 + K''CA)$ , para  $Pe = 10000$  y  $Da = 10$  a una distancia de penetración de 0.5



En las figuras IV.7.7 y IV.7.8 se puede observar que cuando el número de Péclet toma el valor de 10000 y el número de Damköhler toma el valor de 1, la forma del perfil de concentración de la especie *A* es prácticamente el mismo para todos los valores de la constante  $K''$ , lo que significa que la influencia de los procesos de adsorción y reacción química sobre el proceso global de transferencia de masa son despreciables. Sin embargo, cuando el número de Damköhler toma el valor de 10, se observa una reducción en la concentración de la especie *A* en el interior e la película indicando que la reacción química empieza a tener un efecto importante en el proceso de transferencia de masa. El mismo fenómeno se presenta cuando el número de Péclet toma el valor de 50000.

El número de integraciones realizadas por el método de Rosenbrock de 4° orden para el Péclet=50000 y Damköhler 1 y 10 varió en un rango de 2000 a 2750 usando un tamaño de paso inicial de 0.00001. Para lograr el mismo grado de aproximación, el método de Runge-Kutta requiere aproximadamente de 50000 integraciones para Péclet=10000 y alrededor de 300000 integraciones para Péclet=50000.

## Conclusiones

La solución analítica del modelo propuesto para la absorción sin y con reacción química, permitió encontrar los perfiles de concentración de la especie A en el interior de la película de líquido. Es importante mencionar que el modelo se puede aplicar a cualquier sistema Gas-Líquido y que para el caso de absorción con reacción química, se pueden considerar sistemas con cinética sencilla y compleja, ya que dichos modelos se encuentran incluidos en la expresión dada por el número de Damköhler.

La aplicación del método numérico de Diferencia Finita Centrada para la solución de los problemas de absorción con y sin reacción química, proporciona resultados aceptables. Sin embargo, es importante mencionar que este método presenta inestabilidad conforme el número de Péclet aumenta (ver figuras IV.3.2, IV.3.4, IV.3.6, IV.3.8 y IV.3.10). Para resolver dichos problemas de inestabilidad y lograr que la solución aproximada diera buenos resultados, fue necesario incrementar el número de nodos y por lo tanto el número de ecuaciones diferenciales ordinarias a 80. La solución de dicho sistema de ecuaciones se realizó mediante la aplicación del método predictivo-correctivo de Rosenbrock, el cual permitió reducir significativamente el tiempo de máquina empleado en comparación al tiempo empleado por el método de Runge-Kutta de 4° orden.

La solución analítica de los modelos propuestos para la absorción sin y con reacción química, permitió conocer la importancia de la influencia de una reacción química sobre el proceso de transferencia de masa mediante el cálculo del factor de aumento. Para aquellos casos en los que el número de Péclet  $\leq 1$ , el proceso global de transferencia de masa está gobernado por la reacción química.

## **Bibliografía**

- 1** Talens F.I.; Chem. Eng. Technol. 23 (2000) 7.
- 2** Welty J. R., Wicks Ch. E., and Wilson R. E.; Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer. John Wiley and Sons. 1976.
- 3** R. Byron Bird, Warren E. Stewart and Edwind L. Lightfoot; Transport Phenomena. John Wiley & Sons, Inc. 2002.
- 4** Churchill R. V.; Brown J. W., Fourier Series and Boundary Value Problems. McGraw-Hill sixth edition, 2001.
- 5** Boyce W. E. Diprima R. C.; Ecuaciones Diferenciales y Problemas con Valores en la Frontera. Limusa Wiley cuarta edición, 2001.
- 6** Morales M. A.; Alcances de un Método Aproximado para la Solución de Problemas de Transporte y Reacción. Tesis de Doctorado. UAM Iztapalapa. México 2004.
- 7** Danckwerts, F. R. S.; Gas-Liquid Reactions. McGraw-Hill 1970.
- 8** Treybal R.E.; Mass Transfer Operations. McGraw-Hill 1980.
- 9** Leithold Louis.; El cálculo con Geometría Analítica. Harla 1973.
- 10** Flores E. L.; Análisis Comparativo de la Solución Exacta de una Ecuación de Difusión Transitoria y Algunas Aproximaciones en Transferencia de Masa. Tesis de Licenciatura. UNAM. México 2004.
- 11** Lapidus L., F. Pinder G.; Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering. John Wiley ans Sons. 1985.

**12** E. Davis M.; Numerical Methods and Modeling for Chemical Engineers. John Wiley and Sons. 1984.

**13** Rosenbrock, H.H.; Some General Implicit Process for the Numerical Solution of Differential Equations. Comput. J., 5, 329(1963).

**14** Press W.H. Teukolsky S.A., Vetterling W. T.; Numerical Recipes in Fortran 90. The Art of Parallel Scientific Computing. Cambridge University Press. Second Edition 1999.