

**UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA NACIONAL**

**FACULTAD REGIONAL ROSARIO**

**DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA**

# **FENÓMENOS DE TRANSPORTE**

**NOTAS DE CÁTEDRA: “UNIDAD TEMÁTICA 8”**

- **ANÁLISIS ENVOLVENTE PARA DIFUSIÓN**
- **ECUACIONES DIFERENCIALES PARA LA TRANSFERENCIA DE  
MATERIA**

Revisión: Octubre 2008

*“La presente es una recopilación de diversas notas y apuntes de cátedra dispersas que fueron elaboradas o redactadas en los últimos años. Se agradece especialmente la colaboración de los alumnos cursantes en 2008: Federico, Rodrigo; Guardatti, Nicolás; Maceratesi, Lucas; Peroni, Matías; Hlousek, Jaquelina; Oriti Misterio, Lionel; Oriti Misterio, Mauricio; Tobio, Gisela para su compilación y organización, que con la coordinación del Auxiliar Juan M. Dominguez permite disponer de esta versión revisada. Se advierte que estas notas son solo una guía para el estudio, debiendo consultarse la bibliografía recomendada en cada tema para lograr un conocimiento pleno de los mismos.”*

**Cátedra de Fenómenos de Transporte**

**Ing. Jorge E. Robin**

**Ing. Marcela N. Kaminsky**

**Juan M. Dominguez**

## 8.A. ANÁLISIS ENVOLVENTE PARA DIFUSIÓN

### 8.A.1. PROCEDIMIENTO

- Aplicar el balance a una envoltura perpendicular al transporte y obtener la ecuación diferencial para obtener la densidad de flujo de materia.
- Se introduce la relación entre la densidad de flujo y el gradiente de concentración.

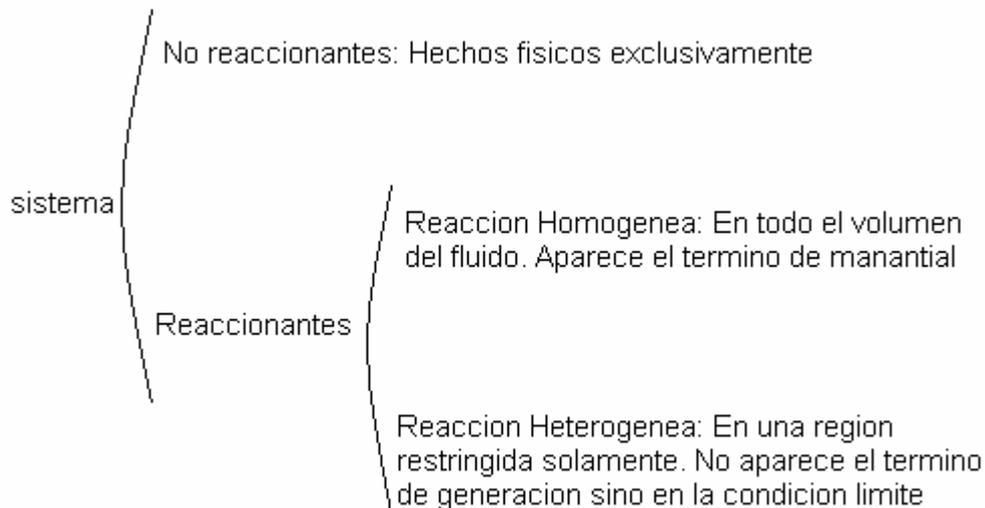
### 8.A.2. DENSIDAD DE FLUJO

Comúnmente se usa (mezclas binarias).

$$N_{A_z} = -c \cdot D_{AB} \cdot \frac{\delta x_A}{\delta z} + x_A \cdot (N_{A_z} + N_{B_z})$$

“La densidad molar respecto de ejes estacionarios es la suma de la correspondiente a la difusión y al flujo global. Para usarla hay que conocer  $N_{B_z}$ ”

### 8.A.3. SISTEMAS REACCIONANTES O NO



La cinética estudia la velocidad de formación o desaparición de las especies químicas. Los mecanismos de reacción y las velocidades son conocidas o se expresan por formaciones sencillas. Por ejemplo:

Reacción heterogénea:  $R_A = k_n C_A^n$

O también:  $N_{A_z} \Big|_{\text{sup}} = k_n C_A^n \Big|_{\text{sup}}$

- $[R_A]$ =moles/cm<sup>3</sup> seg
- $[C_A]$ =moles/cm<sup>3</sup>
- $k_n$ : Constante cinética
- $n$ : orden de reacción

**8.A.4. BALANCE EN ENVOLTURAS**

$$\left| \begin{array}{c} \text{Velocidad de} \\ \text{Entrada de Materia} \\ \text{(Comp A)} \end{array} \right| - \left| \begin{array}{c} \text{Velocidad de} \\ \text{Salida de Materia} \\ \text{(Comp A)} \end{array} \right| + \left| \begin{array}{c} \text{Velocidad de} \\ \text{Producción de Materia} \\ \text{(Comp A)} \end{array} \right| = 0$$

La “entrada” y “salida” pueden ser por difusión o flujo global; la “producción” por aparición o desaparición por reacciones químicas homogéneas.

▪ Condiciones límites

- a) La concentración en la superficie se puede especificar ( $x_A = x_{A_0}$ )
- b) Densidad de flujo de materia en la superficie especificada ( $N_A = N_{A_0}$ )
- c) Si hay difusión en un sólido, en la interfase puede verificarse:  
 $N_{A_0} = k_c \cdot (C_{A_0} - C_{A_F})$  siendo  $k_c$  el coeficiente de transferencia de materia
- d) Velocidad de reacción en la superficie especificada, por ejemplo:  $N_{A_0} = k_1 \cdot C_{A_0}$   
 Siendo  $k_1$  la constante de velocidad de reacción de primer orden y  $C_{A_0}$  la concentración del componente A en la superficie.

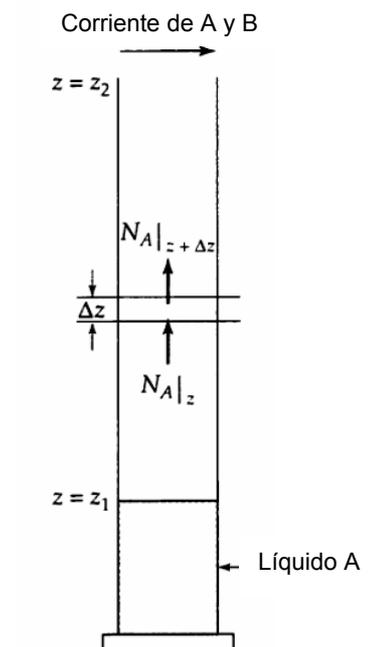
**8.A.5. DIFUSIÓN EN PELÍCULA GASEOSA ESTANCADA**

Hipótesis:

- A y B forman una mezcla gaseosa ideal
- Presión y temperatura constantes
- La concentración de A en la fase gaseosa es la correspondiente al equilibrio con el líquido de la interfase (equilibrio líquido-vapor):

$$x_{A_1} = \frac{p_A}{P}$$

- B es insoluble en líquido A.
- En  $z=z_2$ ,  $x_{A2}$  es constante. Se supone que circula lentamente una corriente de mezcla gaseosa A-B cuya concentración es  $x_{A2}$ .



Para estado estacionario A se aleja de la superficie y B permanece estacionario, luego en

$$N_{A_z} = -c \cdot D_{AB} \cdot \frac{dx_A}{dz} + x_A \cdot (N_{A_z} + N_{B_z}) \text{ será } N_{B_z} = 0.$$

Y por lo tanto,  $N_{A_z} = -c \cdot D_{AB} \cdot \frac{dx_A}{dz} + x_A \cdot N_{A_z}$

Despejando:  $N_{A_z} = -\frac{C \cdot D_{AB}}{(1-x_A)} \cdot \frac{dx_A}{dz}$

Aplicando el balance de materia, para la envoltura de área S y altura  $\Delta z$ :

$$S \cdot N_{A_z|z} - S \cdot N_{A_z|z+\Delta z} = 0$$

Dividiendo por  $S \cdot \Delta z$  ;

$$\frac{N_{A_z|z} - N_{A_z|z+\Delta z}}{\Delta z} = 0$$

aplicando límite para  $\Delta z \rightarrow 0$  ,

$$-\frac{dN_{A_z}}{dz} = 0 \quad \text{es decir que} \quad N_{A_z} = Cte$$

Luego,

$$-\frac{d}{dz} \left( -\frac{c \cdot D_{AB}}{(1-x_A)} \cdot \frac{dx_A}{dz} \right) = 0$$

Para comportamiento ideal:  $c=cte$ . a P y T ctes, y  $D_{AB}$  no depende de la concentración luego,

$$\frac{d}{dx} \left( \frac{dx_A}{[1-x_A] \cdot dz} \right) = 0$$

Integrando,

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

E integrando nuevamente,

$$-Ln(1-x_A) = C_1 \cdot z + C_2$$

- Condición Límite 1: En  $z = z_1 \rightarrow x_A = x_{A1}$
- Condición Límite 2: En  $z = z_2 \rightarrow x_A = x_{A2}$

Y como,  $-\ln(1-x_A) = -\ln x_B$ , luego:

$$-\ln x_{B1} = C_1 \cdot z_1 + C_2$$

$$-\ln x_{B2} = C_1 \cdot z_2 + C_2$$

Restando miembro a miembro;

$$\ln \frac{x_{B2}}{x_{B1}} = C_1 \cdot (z_1 - z_2)$$

$$C_1 = \frac{\ln \frac{x_{B2}}{x_{B1}}}{z_1 - z_2} = \frac{\ln \frac{1-x_{A2}}{1-x_{A1}}}{z_1 - z_2} = \frac{\ln \frac{1-x_{A1}}{1-x_{A2}}}{z_2 - z_1}$$

Reemplazando en cualquiera de las condiciones límites, por ejemplo, en CL1,

$$-\ln x_{B1} = \left( \frac{1}{z_2 - z_1} \right) \cdot \ln \frac{x_{B1}}{x_{B2}} \cdot z_1 + C_2$$

$$-\ln x_{B1} - \left( \frac{z_1}{z_2 - z_1} \right) \cdot \ln \frac{x_{B1}}{x_{B2}} = C_2$$

$$-\ln x_{B1} - \left( \frac{z_1}{z_2 - z_1} \cdot \ln x_{B1} \right) + \left( \frac{z_1}{z_2 - z_1} \cdot \ln x_{B2} \right) = C_2$$

$$C_2 = \ln x_{B1} \cdot \left( -\frac{z_1}{z_2 - z_1} - 1 \right) + \frac{z_1}{z_2 - z_1} \cdot \ln x_{B2}$$

$$C_2 = -\frac{z_2}{z_2 - z_1} \cdot \ln x_{B1} + \frac{z_1}{z_2 - z_1} \cdot \ln x_{B2}$$

$$C_2 = \frac{z_1 \cdot \ln(1-x_{A2}) - z_2 \cdot \ln(1-x_{A1})}{z_2 - z_1}$$

Sumo y resto  $\frac{z_1}{z_2 - z_1} \cdot \ln(1-x_{A1})$

$$C_2 = \frac{z_1 \cdot \ln(1-x_{A2}) - z_1 \cdot \ln(1-x_{A1}) - z_2 \cdot \ln(1-x_{A1}) + z_1 \cdot \ln(1-x_{A1})}{z_2 - z_1}$$

$$C_2 = \frac{z_1 \cdot \ln(1-x_{A2}) - z_1 \cdot \ln(1-x_{A1}) - (z_2 - z_1) \cdot \ln(1-x_{A1})}{z_2 - z_1}$$

$$C_2 = -\frac{z_1}{z_2 - z_1} \cdot \ln \left( \frac{1-x_{A1}}{1-x_{A2}} \right) - \ln(1-x_{A1})$$

Llevando a la general;

$$-\ln(1-x_{A1}) = \frac{z}{z_2-z_1} \cdot \ln \frac{1-x_{A1}}{1-x_{A2}} - \frac{z_1}{z_2-z_1} \cdot \ln \left( \frac{1-x_{A1}}{1-x_{A2}} \right) - \ln(1-x_{A1})$$

$$\ln \frac{1-x_{A1}}{1-x_A} = \frac{z-z_1}{z_2-z_1} \cdot \ln \left( \frac{1-x_{A1}}{1-x_{A2}} \right)$$

Aplicando antilogaritmo,

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

$$\frac{x_{B1}}{x_B} = \left( \frac{x_{B1}}{x_{B2}} \right)^{\frac{z-z_1}{z_2-z_1}} \quad \text{ó} \quad \frac{x_B}{x_{B1}} = \left( \frac{x_{B2}}{x_{B1}} \right)^{\frac{z-z_1}{z_2-z_1}}$$

Sabemos que:  $N_{AZ} = cte$ , pero  $\frac{dx_A}{dz}$  no lo es (exponencial).

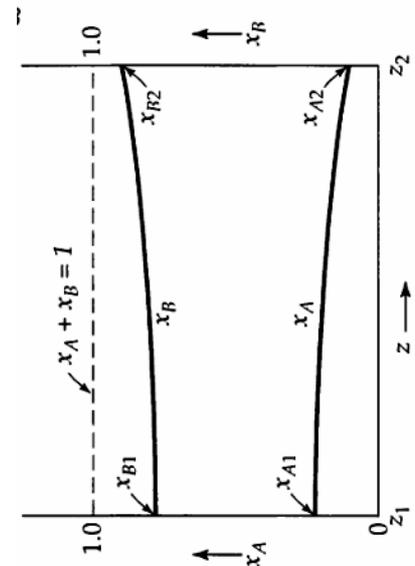
Para hallar una concentración media en toda la longitud  $z_1$  a  $z_2$ ,

$$x_{med} = \frac{\int_{z_1}^{z_2} x \, dz}{\int_{z_1}^{z_2} dz}$$

Para el componente B,

$$\frac{x_{Bmed}}{x_{B1}} = \frac{\int_{z_1}^{z_2} \frac{x_B}{x_{B1}} \, dz}{\int_{z_1}^{z_2} dz} = \frac{\int_{z_1}^{z_2} \left( \frac{x_{B2}}{x_{B1}} \right)^\varphi \, dz}{\int_{z_1}^{z_2} dz} = \frac{\int_0^1 \left( \frac{x_{B2}}{x_{B1}} \right)^\varphi \, d\varphi}{\int_0^1 d\varphi}$$

Para  $\varphi = \frac{z-z_1}{z_2-z_1}$  y  $d\varphi = \frac{dz}{z_2-z_1}$



$$\frac{x_{Bmed}}{x_{B1}} = \frac{\left(\frac{x_{B2}}{x_{B1}}\right)^\varphi}{\ln \frac{x_{B2}}{x_{B1}}} \Bigg|_0^1 = \frac{x_{B2} - x_{B1}}{\ln \frac{x_{B2}}{x_{B1}}} = x_{B_{ln}} \text{ (media logarítmica)}$$

Para hallar la densidad de flujo en la interfase,

$$N_{AZ} \Big|_{z=z_1} = - \frac{c \cdot D_{AB}}{1 - x_{A1}} \cdot \frac{dx_A}{dz} \Big|_{z=z_1} = + \frac{c \cdot D_{AB}}{x_{B1}} \cdot \frac{dx_B}{dz} \Big|_{z=z_1}$$

$$N_{AZ} \Big|_{z=z_1} = \frac{c \cdot D_{AB}}{z_2 - z_1} \cdot \text{Ln} \left( \frac{x_{B2}}{x_{B1}} \right)$$

o también;

$$N_{AZ} \Big|_{z=z_1} = \frac{c \cdot D_{AB}}{(z_2 - z_1) \cdot x_{B_{ln}}} \cdot (x_{A1} - x_{A2})$$

En función de la presión,

$$p_A \cdot \hat{V} = n_A \cdot R \cdot T ; \quad x_A = \frac{n_A}{n_T} = \frac{p_A}{P}$$

$$p_A = c_A \cdot R \cdot T ; \quad P = c \cdot R \cdot T$$

$$p_A = x_A \cdot c \cdot R \cdot T$$

$$N_{AZ} \Big|_{z=z_1} = \frac{\left(\frac{P \cdot D_{AB}}{R \cdot T}\right)}{(z_2 - z_1)} \cdot \text{Ln} \frac{p_{B2}}{p_{B1}} = \frac{\left(\frac{P \cdot D_{AB}}{R \cdot T}\right)}{(z_2 - z_1) \cdot p_{B_{ln}}} \cdot (p_{A1} - p_{A2})$$

donde,

$$p_{B_{ln}} = \frac{p_{B2} - p_{B1}}{\text{Ln} \left( \frac{p_{B2}}{p_{B1}} \right)}$$

Las ecuaciones anteriores indican que la densidad de flujo molar de difusión de un componente en una mezcla binaria es directamente proporcional a la disminución de la fracción molar (o presión parcial) del componente e inversamente proporcional a la longitud del trayecto

y la diferencia media logarítmica de los valores extremos de fracción molar (o presión parcial) del componente estancado.

Estas son de máxima aplicación en la difusión de películas gaseosas, tal como equipos industriales de absorción.

Parecería imposible que un componente (A) difundiera en otro estancado (B), dado que los gradientes de concentración son similares. Esto se debe a que el gradiente de B es mantenido por A, ya que las moléculas de B son arrastradas por las colisiones de A (que difunde), siendo el número de moléculas arrastradas igual al número de moléculas de B que difunden por la influencia del gradiente, y el valor neto es cero.

### **8.A.6. DIFUSION EQUIMOLAR EN CONTRACORRIENTE**

En este caso,  $N_{AZ} = -N_{BZ}$ , ya que ambos componentes difunden con igual velocidad, por lo tanto,

$$N_{AZ} = -c \cdot D_{AB} \cdot \frac{dx_A}{dz}$$

o también,

$$N_{AZ} = -\frac{D_{AB}}{R \cdot T} \cdot \frac{dp_A}{dz}$$

Para estado estacionario,  $N_{AZ} = cte$ , y la integración conduce a:

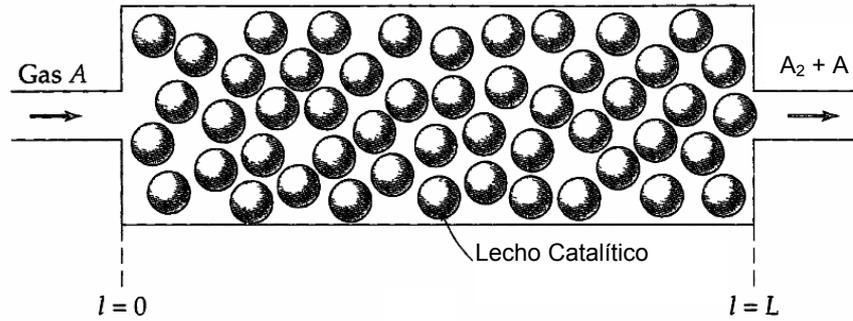
$$N_{AZ} = c \cdot D_{AB} \cdot \frac{(x_{A1} - x_{A2})}{(z_2 - z_1)}$$

y

$$N_{AZ} = \frac{D_{AB}}{R \cdot T} \cdot \frac{(p_{A1} - p_{A2})}{(z_2 - z_1)}$$

### **8.A.7. DIFUSION CON REACCION HETEROGENEA**

Un reactor catalítico por donde circula un gas A y donde se lleva a cabo la reacción dimerización,  $2A \rightarrow A_2$  que se puede considerar irreversible e instantánea, obteniendo un gas de salida compuesto por el dímero ( $A_2$ ) y el reactante no convertido (A).



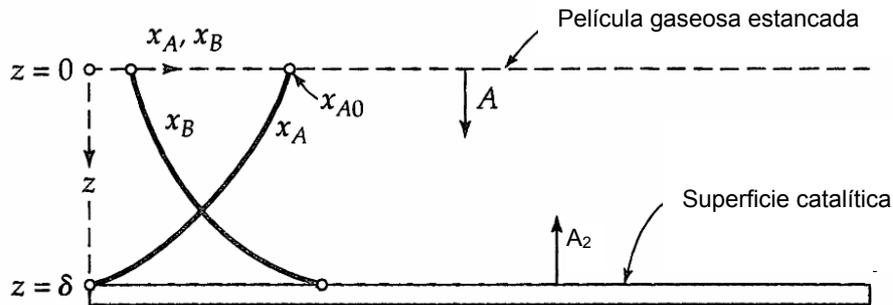
Para el análisis de este sistema debe recurrirse a un modelo muy simplificado. A tal efecto se imagina que cada partícula catalítica está rodeada de una película gaseosa estancada a través de la cual difunde el reactante A hasta alcanzar la superficie catalítica.

El producto  $A_2$  difunde en sentido contrario hasta alcanzar la corriente turbulenta de gas compuesto por A y  $A_2$ .

Se pretende hallar la velocidad local de conversión A en  $A_2$  cuando se conoce el espesor de la película ( $\delta$ ) y las composiciones globales  $x_{A0}$  y  $x_{A20}$  de las corrientes.

En la figura se representa el modelo, moviendo un mol de  $A_2$  en dirección z (negativa). Por cada 2 moles de A que se mueven en z (positivo), para la reacción isotérmica y estacionaria, siendo:

$$N_{A_{2z}} = -\frac{1}{2} \cdot N_{Az} \quad (\text{a cualquier } z)$$



Recordando,

$$N_{Az} = -c \cdot D_{AA_2} \cdot \frac{dx_A}{dz} + x_A \cdot (N_{Az} + N_{A_{2z}})$$

se puede escribir,

$$N_{Az} = -c \cdot D_{AA_2} \cdot \frac{dx_A}{dz} + x_A \cdot \left( N_{Az} - \frac{1}{2} N_{Az} \right)$$

$$N_{Az} = -0.5 \cdot x_A \cdot N_{Az} = -c \cdot D_{AA_2} \cdot \frac{dx_A}{dz}$$

$$N_{Az} = \frac{-c \cdot D_{AA_2}}{(1-0.5 \cdot x_A)} \cdot \frac{dx_A}{dz}$$

Del balance de materia, en la película de espesor  $\Delta z$ ,

$$S \cdot N_{Az} \Big|_z - S \cdot N_{Az} \Big|_{z+\Delta z} = 0$$

$$\lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{N_{Az} \Big|_z - N_{Az} \Big|_{z+\Delta z}}{\Delta z} = 0$$

$$\frac{dN_{Az}}{dz} = 0$$

Llevando en el balance de materia el valor de  $N_{Az}$  de la ecuación de la difusión, (para  $c \cdot D_{AAz} = cte$ ).

$$\frac{dN_{Az}}{dz} = -c \cdot D_{AAz} \cdot \frac{d}{dz} \left( \frac{dx_A}{(1-0.5x_A) \cdot dz} \right) = 0$$

Integrando,

$$\frac{dx_A}{(1-0.5x_A) \cdot dz} = C_1$$

$$-2 \cdot \ln(1-0.5x_A) = C_1 \cdot z + C_2$$

Siendo las condiciones límite,

- Condición Límite 1: para  $z=0$  es  $x_A = x_{A0}$
- Condición Límite 2: para  $z=d$  es  $x_A = 0$

luego,

$$-2 \cdot \ln(1-0.5x_{A0}) = C_2$$

$$\frac{2 \cdot \ln(1-0.5x_{A0})}{d} = C_1$$

y entonces,

$$-2 \cdot \ln(1-0.5x_A) = \frac{2 \cdot \ln(1-0.5x_{A0})}{d} \cdot z - 2 \cdot \ln(1-0.5x_{A0})$$

$$\ln(1-0.5x_A) = \ln(1-0.5x_{A0}) \cdot \left[1 - \frac{z}{d}\right]$$

$$(1-0.5x_A) = (1-0.5x_{A0})^{\left[1 - \frac{z}{d}\right]}$$

Diferenciando esta última,

$$\frac{dx_A}{(1-0.5x_A)} = 2 \cdot \frac{\ln(1-0.5x_{A0})}{d} dz$$

y llevándola a la ecuación,

$$N_{Az} = \frac{-c \cdot D_{AA_2}}{(1-0.5 \cdot x_A)} \cdot \frac{dx_A}{dz}$$

queda,

$$N_{Az} = \frac{2 \cdot c \cdot D_{AA_2}}{d} \cdot \ln\left(\frac{1}{1-0.5x_{A0}}\right)$$

La ecuación anterior representa la velocidad de dimerización por unidad de área de superficie catalítica. Debe observarse que aunque la reacción es instantánea en la superficie del catalizador, la conversión de A en A<sub>2</sub> se realiza a velocidad “finita” ya que la difusión en la película es la que aporta el reactante en la superficie, luego, la reacción está “controlada por la difusión”, o sea la “difusión controla el fenómeno”.

Si se conoce el área efectiva del catalizador en el volumen del reactor se puede calcular la velocidad de transformación en un equipo real. Otras limitaciones al modelo son las desigualdades en la distribución del flujo global, los efectos térmicos, la pérdida de actividad del catalizador, etcétera.

---

## 8.B. ECUACIONES DIFERENCIALES PARA LA TRANSFERENCIA DE MATERIA

---

Aplicando un balance de materia a un elemento diferencial de fluido para una mezcla binaria (A, B) de dos especies químicas, de acuerdo a la ley de conservación de la materia en un volumen fijo en el espacio, de lados Δx, Δy, Δz, y donde se puede producir el componente A con una velocidad r<sub>A</sub> (masa/vol-tiempo), se puede escribir:

$$\left| \begin{array}{c} \text{Velocidad de cambio} \\ \text{de la masa A} \\ \text{en el volumen} \end{array} \right| = \left| \begin{array}{c} \text{Velocidad} \\ \text{de entrada} \\ \text{de A} \end{array} \right| - \left| \begin{array}{c} \text{Velocidad} \\ \text{de salida} \\ \text{de A} \end{array} \right| + \left| \begin{array}{c} \text{Velocidad de} \\ \text{producción} \\ \text{de A} \end{array} \right|$$

Que permite establecer el balance,

$$\frac{\delta \rho_A}{\delta \theta} \cdot \Delta x \Delta y \Delta z = n_{Ax} \cdot \Delta y \Delta z \Big|_x - n_{Ax} \cdot \Delta y \Delta z \Big|_{x+\Delta x} + n_{Ay} \cdot \Delta x \Delta z \Big|_y - n_{Ay} \cdot \Delta x \Delta z \Big|_{y+\Delta y} + n_{Az} \cdot \Delta x \Delta y \Big|_z - n_{Az} \cdot \Delta x \Delta y \Big|_{z+\Delta z} + r_A \cdot \Delta x \Delta y \Delta z$$

Dividiendo por el volumen, haciendo tender a cero y reordenando se obtiene la ecuación de continuidad del componente A, de la mezcla binaria, donde  $n_{Ai} = \rho_A v_{Ai}$

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial \theta} + \left( \frac{\partial n_{Ax}}{\partial x} + \frac{\partial n_{Ay}}{\partial y} + \frac{\partial n_{Az}}{\partial z} \right) = r_A$$

Luego,

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial \theta} + (\nabla \cdot n_A) = r_A$$

Para el componente B y para igual tratamiento,

$$\frac{\partial \rho_B}{\partial \theta} + (\nabla \cdot n_B) = r_B$$

Sumando ambas ecuaciones se obtiene la ecuación de continuidad de la mezcla (idéntica a la de un fluido puro), ya que  $n_A + n_B = \rho v$  y  $r_A + r_B = 0$

$$\frac{\partial \rho}{\partial \theta} + (\nabla \cdot \rho v) = 0$$

Para base molar se puede obtener de igual forma,

$$\frac{\partial c_A}{\partial \theta} + (\nabla \cdot N_A) = R_A$$

$$\frac{\partial c_B}{\partial \theta} + (\nabla \cdot N_B) = R_B$$

siendo  $R_A$  y  $R_B$  las velocidades de producción/desaparición de A y B respectivamente (moles/volumen-tiempo), quedando,

$$\frac{\partial c}{\partial \theta} + (\nabla \cdot c v^*) = (R_A + R_B)$$

donde, en general  $R_A + R_B \neq 0$  (no se conservan los moles) y  $N_A + N_B = c v^*$

Teniendo en cuenta las relaciones con las concentraciones, se pueden obtener para el componente A las siguientes ecuaciones válidas para difusión ordinaria con  $\rho$ ,  $c$  y  $D_{AB}$  variables.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_A}{\partial \theta} + (\nabla \cdot \rho_A v) &= (\nabla \cdot \rho D_{AB} \nabla w_A) + r_A \\ \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + (\nabla \cdot c_A v^*) &= (\nabla \cdot c D_{AB} \nabla x_A) + R_A \end{aligned}$$

### **8.B.1. ECUACIONES SIMPLIFICADAS**

a) Si  $\rho$ ,  $c$  y  $D_{AB}$  son constantes, se obtiene:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial \theta} + \rho_A (\nabla \cdot v) + (v \cdot \nabla \rho_A) = D_{AB} \cdot \nabla^2 \rho_A + r_A$$

y como  $(\nabla \cdot v) = 0$ , al dividir por  $M_A$ ,

$$\frac{\partial c_A}{\partial \theta} + (v \cdot \nabla c_A) = D_{AB} \cdot \nabla^2 c_A + R_A$$

que es útil para soluciones líquidas, a P y T constantes.

Además, el primer miembro es,

$$\frac{Dc_A}{D\theta} = D_{AB} \cdot \nabla^2 c_A + R_A$$

Y para  $R_A=0$  queda,

$$\frac{Dc_A}{D\theta} = D_{AB} \cdot \nabla^2 c_A$$

Que es equivalente a

$$\frac{DT}{D\theta} = \alpha \cdot \nabla^2 T$$

b) Para  $c$  y  $D_{AB}$  constantes, se puede escribir,

$$\frac{\partial c_A}{\partial \theta} + c_A (\nabla \cdot v^*) + (v^* \cdot c_A) = D_{AB} \cdot \nabla^2 c_A + R_A$$

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

quedando,

$$\frac{\partial c_A}{\partial \theta} + (v^* \cdot c_A) = D_{AB} \cdot \nabla^2 c_A + R_A - \frac{c_A}{C} \cdot (R_A + R_B)$$

usada para gases de baja densidad a P y T constantes.

c) Sin reacción química y velocidad cero;

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial \theta} = D_{AB} \cdot \nabla^2 \rho_A$$

**Ecuación de la difusión o Segunda Ley de Fick**

$$\frac{\partial c_A}{\partial \theta} = D_{AB} \cdot \nabla^2 c_A$$

Que es válida en sólidos, líquidos estacionarios ( $v=0$ ) o para interdifusión equimolar en gases ( $v^*=0$ ). La 2<sup>da</sup> Ley de Fick es análoga a la conducción de calor en sólidos:

$$\frac{\partial T}{\partial \theta} = \alpha \cdot \nabla^2 T$$

### **8.B.2 ECUACIONES DE VARIACIÓN PARA VARIOS COMPONENTES**

Para fluidos no isotérmicos que constan de n especies químicas, se pueden establecer las siguientes ecuaciones;

▪ Continuidad:

$$\frac{D\rho_i}{D\theta} = -\rho_i (\nabla \cdot v) - (\nabla \cdot j_i) + r_i \quad \text{para } i=1,2,\dots,n$$

*“La suma de las n ecuaciones deviene en la ecuación de continuidad para la mezcla”*

▪ Movimiento:

$$\rho \cdot \frac{Dv}{D\theta} = -[\nabla \cdot \Pi] + \sum_{i=1}^n \rho_i \cdot g_i$$

Donde  $\Pi$  es el tensor de presión ( $\Pi = \tau + p\delta$ ), que incluye el esfuerzo y la presión. Se incluye la sumatoria porque cada componente puede estar sujeto a diferentes fuerzas externas por unidad de masa.

▪ Energía:

$$\rho \cdot \frac{D\left(U + \frac{1}{2}v^2\right)}{D\theta} = -(\nabla \cdot q) - (\nabla \cdot [\Pi \cdot v]) + \sum_{i=1}^n (n_i \cdot g_i)$$

Donde  $q$  es la densidad de flujo de energía relativa a la velocidad media de masa ( $v$ ), y la sumatoria tiene en cuenta la contribución de cada componente.

Para un punto fijo en el espacio,

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial \theta} = -(\nabla \cdot \{\rho_i v + j_i\}) + r_i \quad i=1,2,\dots,n$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial \theta} = -[\nabla \cdot \{\rho v v + \Pi\}] + \sum_{i=1}^n \rho_i g_i$$

$$\frac{\partial \rho \left( U + \frac{1}{2} v^2 \right)}{\partial \theta} = -\nabla \cdot \left( \left\{ \rho \left( U + \frac{1}{2} v^2 \right) v + q + [\Pi \cdot v] \right\} \right) + \sum_{i=1}^n (n_i \cdot g_i)$$

Donde  $\{\rho_i v + j_i\} = n_i$ , por lo que para un punto fijo en el espacio se puede escribir,

$$n_i = \rho w_i v + j_i$$

$$\phi = \rho v v + \Pi$$

$$e = \rho \left( U + \frac{1}{2} v^2 \right) v + q + [\Pi \cdot v]$$

quedando,

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial \theta} = -(\nabla \cdot n_i) + r_i$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial \theta} = -[\nabla \cdot \phi] + \sum_{i=1}^n \rho_i g_i$$

$$\frac{\partial \rho \left( U + \frac{1}{2} v^2 \right)}{\partial \theta} = -(\nabla \cdot e) + \sum_{i=1}^n (n_i \cdot g_i)$$

Si el sistema está en estado estacionario, sin reacciones químicas o fuerzas exteriores, la divergencia de  $n_i, \phi$ , e son cero.

Para sistemas multicomponente debe tenerse en cuenta que la termodinámica irreversible indica que existen contribuciones adicionales por otras fuerzas impulsoras (presión, temperatura, fuerzas).

### **8.B.3. ANÁLISIS DIMENSIONAL PARA MEZCLAS**

Para la mezcla isotérmica de dos fluidos, cuya viscosidad y difusividad son constantes, como la densidad y la concentración molar. Entonces,

$$\frac{Dc_A}{D\theta} = D_{AB} \cdot \nabla^2 c_A$$

$$\frac{Dx_A}{D\theta} = D_{AB} \cdot \nabla^2 x_A$$

Definiendo las variables adimensionales en función de las características del sistema ( $V, D, x_{A1}-x_{A0}$ ) se puede obtener;

$$v^* = \frac{v}{V} ; \quad p^* = \frac{p-p_0}{\rho v^2} ; \quad \theta^* = \frac{V\theta}{D} ; \quad x_A^* = \frac{x_A - x_{A0}}{x_{A1} - x_{A0}}$$

quedando,

$$\frac{D}{V(x_{A1} - x_{A0})} \frac{Dc_A}{D\theta} = \frac{D D_{AB}}{V(x_{A1} - x_{A0})} \nabla^2 x_A$$

o sea,

$$\frac{Dx_A^*}{D\theta^*} = \frac{D_{AB}}{VD(x_{A1} - x_{A0})} \nabla^{*2} x_A$$

$$\frac{Dx_A^*}{D\theta^*} = \frac{\mu}{VD\rho} \cdot \frac{\rho D_{AB}}{\mu} \nabla^{*2} x_A$$

y como

$$\frac{1}{Re} = \frac{\mu}{VD\rho} ; \quad \frac{1}{Sc} = \frac{\rho D_{AB}}{\mu}$$

$$\frac{Dx_A^*}{D\theta^*} = \frac{\nabla^{*2} x_A}{Re \cdot Sc}$$

Donde el número de Schmidt ( $Sc = \mu / \rho D_{AB}$ ) es equivalente en difusión que el número de Prandtl ( $Pr = Cp \mu / k$ ) en transmisión de calor.