

Mezcla de n especies

Concentración $\rho_i = \frac{\text{masa de } i}{\text{volumen de la mezcla}}$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho_i dV + \int_S \rho_i \vec{v} \cdot d\vec{A} = \int_V r_i dV - \int_S \vec{\Phi} \cdot d\vec{A}$$

flujo molecular por difusión.
Transporte Molecular.

Teorema de Gauss $\rightarrow$ integrales de volumen.

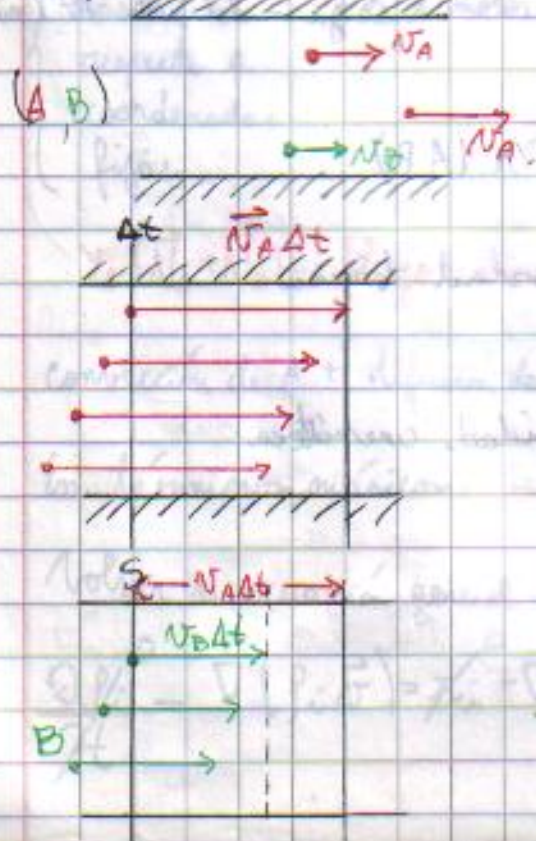
$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \vec{v}) = r_i - \nabla \cdot \vec{\Phi}$$

Ley de Fick (análoga a ley de Fourier).

Fluido Incompresible: $\nabla \cdot (\rho_i \vec{v}) = \rho_i \nabla \cdot \vec{v} + \vec{v} \cdot \nabla \rho_i$

Sin reacción química.

¿qué es $\vec{v}$ para una mezcla?



$$N_A \Delta t S = \text{volumen}$$

$$\rho_A = \frac{\text{masa de A}}{\text{volumen}}$$

$$\rho_A N_A \Delta t S = \text{masa de A que atraviesa S durante } \Delta t$$

$$\text{flujo de A m\u00e1sico} = \rho_A v_A S$$

$$\text{flujo espec\u00edfico de A} = \rho_A v_A$$

$$\text{flujo espec\u00edfico de B} = \rho_B v_B$$

$$\rho_A v_A + \rho_B v_B = \text{flujo m\u00e1sico total} = \text{masa total que atraviesa S durante } \Delta t \text{ (por } \mu \text{ de \u00e1rea)} = \rho v$$

$$\rho = \text{densidad promedio} = \frac{\text{masa total}}{V}$$

N = velocidad promedio (máxima)

El mismo argumento se desarrolla en términos molares, netos.

Concentración Molar $C_i = \frac{\text{moles de } i}{\text{vol. de mezcla}} = \frac{P_i}{P_{\text{mix}}}$

Flujo molar específico de A: $C_A N_A$
para B: $C_B N_B$



Flujo molar total = $C_A N_A + C_B N_B = C N^*$

N^* = vel. media molar

$C = \frac{\text{moles totales}}{\text{vol. total}}$

¿Cuál v utilizamos? N o N^* ?
Ninguna de las dos

M
o
l
e
s

✓ $N_i = C_i N$ Relativo a coord. fijas
✗ $J_i = C_i (N_i - N)$
✓ $J_i^* = C_i (N_i - N^*)$

✓ $m_i = P_i N_i$
✓ $j_i = P_i (N_i - N)$
✗ $j_i^* = P_i (N_i - N^*)$

M
a
s
e
s

$J_A^* = C_A (N_A - N^*) = -D_{AB} \nabla C_A$
difusividad de A c/n (A,B)

$[D] = \frac{m^2}{s}$ $\alpha = \left[\frac{m^2}{s} \right]$ difusividad térmica

$\nu = \left[\frac{m^2}{s} \right]$ viscosidad cinemática

$C = \frac{P}{RT}$

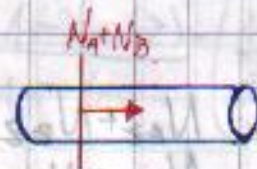
Otra forma de considerar ρ, c , de $C_A = 0/A$. 8-1A-2005

$$Y_A = \frac{\text{moles de A}}{\text{moles totales.}}$$

$$C_A(\vec{v}_A) = \vec{N}_A$$

$$\begin{aligned} \vec{J}_A^* &= -\kappa D_{AB} \nabla Y_A = C_A (\vec{v}_A - \vec{v}^*) = \vec{N}_A - C_A \vec{v}^* \\ &= \vec{N}_A - C_A Y_A \vec{v}^* \\ &= \vec{N}_A - Y_A (C \vec{v}^*) \end{aligned}$$

$$\vec{J}_A^* = \vec{N}_A - Y_A (\vec{N}_A + \vec{N}_B)$$



$$Y_A (\vec{N}_A + \vec{N}_B) - \kappa D_{AB} \nabla Y_A = \vec{N}_A$$

flujo
convectivo
total

$\vec{N}_A + \vec{N}_B =$ flujo
molar con
respecto a
coordenadas
fijas

flujo advectivo
de A (molar)

flujo molar,
total de A
en coordenadas
fijas.

$w_A =$ fracción másica

$Y_A =$ fracción molar

$$Y_A (\vec{N}_A + \vec{N}_B) = \text{flujo convectivo de A}$$

convección de A + difusión de A = flujo global de A.

$$\text{En términos másicos: } w_A (\vec{m}_A + \vec{m}_B) - \rho D_{AB} \nabla w_A = \vec{m}_A$$

Volver a ecuación general de transporte estacionario: $\frac{\partial}{\partial t} = 0$ sin generación
 $\pi = 0$

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} - \nabla \cdot (f_i \vec{v}) = \pi_i - \nabla \cdot \vec{j}_i$$

Propiedades Constantes: $P_i = P W_i$

conc. total $C = \frac{P}{RT}$

Si $P = \text{cte}$, $\nabla \cdot P_i \vec{v} = P_i \cancel{\nabla \cdot \vec{v}} + \vec{v} \cdot \nabla P_i$

$\vec{v} \cdot \nabla W_A = D_{AB} \nabla^2 W_A$ pero $\vec{v} = -D_{AB} \nabla P_i$

En términos molares, con la hipótesis de $C = \text{cte}$

$\vec{v} \cdot \nabla C_A = D_{AB} \nabla^2 C_A$ (en forma análoga)

- Caso unidimensional en dirección z :

$N_{Az} - Y_A(N_{Az} + N_{Bz}) = -C D_{AB} \frac{dY_A}{dz}$

o caso: $N_{Az} + N_{Bz} = 0$

$N_{Az} = -N_{Bz}$

$\frac{N_A}{N_B}$

} difusión equimolar

$N_{Az} = -C D_{AB} \frac{dY_{Az}}{dz}$

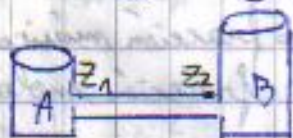
Cond. de Borde:

$Y_A = Y_{A1}$ en $z = z_1$

$Y_A = Y_{A2}$ en $z = z_2$

$\frac{N_{Az}}{C D_{AB}} (z_1 - z_2) = Y_{A2} - Y_{A1}$

$\frac{dY_A}{dz} = \frac{-N_{Az}}{C D_{AB}}$



Opera exclusivamente la difusión.

Gratificación uniforme

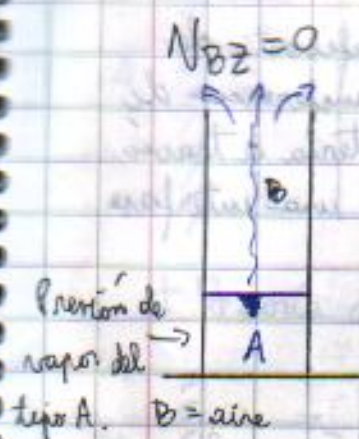
$N_{Az} = C D_{AB} \frac{Y_{A2} - Y_{A1}}{z_1 - z_2}$

Si la difusión es muy lenta, se puede resolver un caso cuasi-estacionario.

Partir con $Y_{A1} = 1$ y $Y_{A2} = 0$ durante Δt .

Calcular variación de Y_{A1} , Y_{A2} en Δt , etc.

2º caso: difusión a través de una capa en reposo.



$$N_{Bz} = 0 \quad \forall t$$

$$N_{Az} = Y_A N_{Az} - C D_{AB} \frac{dY_A}{dz}$$

$$\frac{dY_A}{dz} = \frac{-N_{Az}}{C D_{AB}} (1 - Y_A)$$

$$z = z_1 \quad Y_A = Y_{A1} \quad (\text{fracción de saturación})$$

$$z = z_2 \quad Y_A = Y_{A2}$$

Estado estacionario en que N_{Az} se supone cte

$$n = \frac{z - z_0}{z_2 - z_0}$$

$$N_{Az} = \frac{C D_{AB}}{z_2 - z_1} \ln \left(\frac{1 - Y_{A2}}{1 - Y_{A1}} \right)$$

$$\frac{1 - Y_A(z)}{1 - Y_{A0}} = \left(\frac{1 - Y_{A2}}{1 - Y_{A0}} \right)^n$$

10-11-2005

Consideramos el caso de geometría esférica (aún difusión a través de capa en reposo)

Geometría esférica.



R_1 = radio de la gota
 R_2 = radio lejos de la gota.

líq en reposo = B.

$$\frac{F_{m,A}^*}{4\pi} \left(\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2} \right) = C D_{AB} \ln \left(\frac{1 - Y_{A2}}{1 - Y_{A1}} \right)$$

límite $R_2 \rightarrow \infty$
 $Y_{A2} \rightarrow 0$

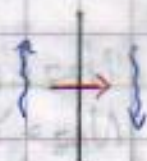
$$\frac{F_{m,A}^*}{4\pi R_1} = -C D_{AB} \ln(1 - Y_{A1})$$

↑ error?

Difusión a través de interfases de fluido



agua + A



Coefficiente de transferencia de materia a través de una interfase

$$\left[\frac{\text{calor}}{\Delta T} = h \right], \quad q = h(T_w - T_\infty)$$

Transferencia de masa:

$$\begin{aligned} \vec{N}_A - Y_A (\vec{N}_A + \vec{N}_B) &= \vec{J}_A^* = - \underbrace{K_{L,A}}_{\text{sin fórmulas por defecto empíricas}} D_{AB} \nabla Y_A \\ &= h_m (C_{A0} - C_{A\infty}) \\ &= \underline{K_{L,A}} (Y_{A0} - Y_{A\infty}) \end{aligned}$$

definición del coeficiente de transferencia de masa K_L

+ Análisis Dimensional para K_L :

- $\left. \begin{matrix} K_L \\ \rho \\ V \\ D \\ \mu \\ D_{AB} \end{matrix} \right\}$ 3 productos adimensionales:

$$Re = \frac{\rho V D}{\mu}$$

Sherrwood $Sh = \frac{K_L D}{C D_{AB}}$

$$Sh = \frac{K_L C D}{D_{AB}}$$

Schmidt $Sc = \frac{\mu}{\rho D_{AB}}$

$$Sh = f(Re, Sc)$$

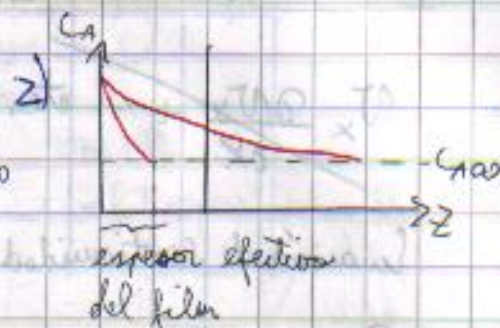
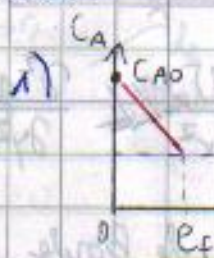


e_f = espesor del film

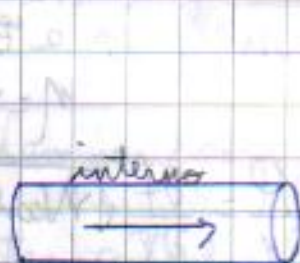
Se aplica resultado para difusión equimolecular

$$J_{A_0}^* = \frac{D_{AB}(C_{A_0} - C_{A_{\infty}})}{e_f}$$

+ Zona del Film



Flujos Externos

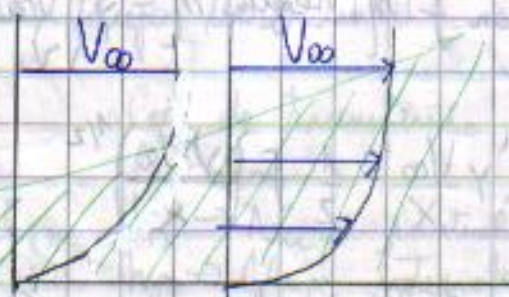
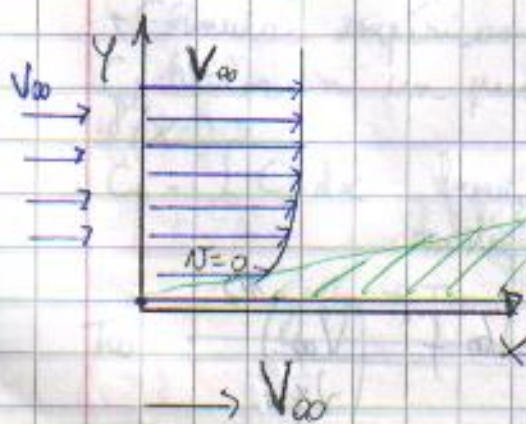


o bien $\vec{v}_{\text{fluido}} = \vec{v}_{\text{objeto}}$



Partícula en ambiente infinito

- 2 casos:
- Placa plana
 - Esfera.



zona afectada
 $N < V_{\infty}$

Capa límite o capa de frontera $\rightarrow$ Boundary Layer