

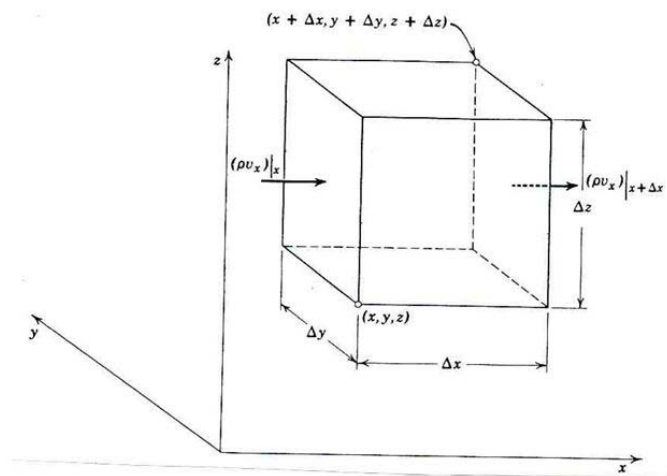
La Conservación de la Masa

En el capítulo introductorio vimos las leyes básicas de la transferencia masa de una especie por vía molecular (difusión). Esta es la ley de Fick.

También se dijo que la difusión se puede tener lugar en presencia de un movimiento global, (o flujo) de la solución, el cual genera otro modo de transporte de la especie, el convectivo.

Con lo anterior se puede establecer un balance general de la masa para una especie en particular. En sistemas de flujo existe el balance de masa total, llamado Ecuación de Continuidad.

Consideremos un volumen de control fijo en el espacio, de forma de paralelepípedo:



Supongamos que en esta región fluye una mezcla binaria de A y B. Dentro del VC se puede producir una reacción química con una velocidad r_A ($\text{kg}/(\text{m}^3 \text{ s})$).

Las distintas contribuciones al balance de materia son:

Tasa temporal de variación de la masa de A en el elemento de volumen:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z$$

Entrada y salida de A por unidad de tiempo a través de las caras en
 x y en $x+\Delta x$
 y y en $y+\Delta y$
 z y en $z+\Delta z$

$$\begin{array}{ll} n_A|_x \Delta y \Delta z & n_A|_{x+\Delta x} \Delta y \Delta z \\ n_A|_y \Delta x \Delta z & n_A|_{y+\Delta y} \Delta x \Delta z \\ n_A|_z \Delta x \Delta y & n_A|_{z+\Delta z} \Delta x \Delta y \end{array}$$

Tasa temporal de producción de A por reacción química:

$$r_A \Delta x \Delta y \Delta z$$

Escribiendo el balance completo de materia, dividiendo por el elemento de volumen, y luego haciendo tender a cero el elemento de volumen, se obtiene lo siguiente:

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

Esta es la ecuación de continuidad del componente A en una mezcla binaria. Otra igual podemos escribir para el componente B:

$$\frac{\partial \rho_B}{\partial t} + \left(\frac{\partial n_{Bx}}{\partial x} + \frac{\partial n_{By}}{\partial y} + \frac{\partial n_{Bz}}{\partial z} \right) = r_B$$

Si sumamos ambas ecuaciones, obtendremos la ecuación de continuidad para la mezcla, que ya es conocida. Para esto consideramos:

- que las densidades parciales se suman para dar la densidad total,
- que la masa de un componente que se crea por reacción química lo hace a expensas del otro componente, de modo que la suma de las velocidades de reacción es nula
- que como quedó demostrado, $\rho v = n_A + n_B$

La suma es:
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left(\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} \right) = 0$$

Si ahora usamos las relaciones entre flujos absolutos y flujos de difusión:

$$n_A = j_A + \rho_A v$$

En que j son flujos de difusión.

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \left(\frac{\partial (j_A + \rho_A u)}{\partial x} + \frac{\partial (j_A + \rho_A v)}{\partial y} + \frac{\partial (j_A + \rho_A w)}{\partial z} \right) = r_A$$

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \left(\frac{\partial (\rho_A u)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho_A v)}{\partial y} + \frac{\partial (\rho_A w)}{\partial z} \right) = - \left(\frac{\partial j_A}{\partial x} + \frac{\partial j_A}{\partial y} + \frac{\partial j_A}{\partial z} \right) + r_A$$

Ahora expresamos los flujos de difusión por la ley de Fick:

$$\bar{j}_A = -\rho D_{AB} \nabla m_A = -D_{AB} \nabla \rho_A$$

Quedando:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \left(\frac{\partial (\rho_A u)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho_A v)}{\partial y} + \frac{\partial (\rho_A w)}{\partial z} \right) = \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D_{AB} \frac{\partial m_A}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D_{AB} \frac{\partial m_A}{\partial y} \right) + \dots \right) + r_A$$

Si suponemos que la densidad total y la difusividad son constantes:

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

La divergencia de la velocidad es cero para fluidos incompresibles, con lo cual se puede simplificar aún más esta ecuación.

Hecho esto, si dividimos la ecuación anterior por el peso molecular del compuesto A, obtenemos la ecuación en términos de concentraciones molares:

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

Esta ecuación presenta una gran analogía con la ecuación del calor.

RESUMEN DE ECUACIONES FUNDAMENTALES: (2D)

Momento (Navier-Stokes)

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) &= F_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \\ \rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) &= F_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \end{aligned}$$

Energía:

$$\rho C \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} \right) = k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \mu \phi$$

Conservación de masa por especie:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + u \frac{\partial C_A}{\partial x} + v \frac{\partial C_A}{\partial y} = D_{AB} \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} \right) + R_A$$

Conservación global de masa (Continuidad)

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$$

ADIMENSIONALIZACIÓN DE LAS ECUACIONES PARA FLUJO FORZADO:

Tomemos un caso particular bidimensional en que suponemos que actúan los tres fenómenos de transferencia.

Caso de una placa plana, con un flujo paralelo a ella. El flujo es de aire, con velocidad U_0 , temperatura T_0 , y concentración de una especie química C_{A0} , todas estas uniformes.

Sea L la longitud de la placa. La placa está hecha de un material sublimable, (A), que aumenta la concentración inicial de este componente al transferirse al aire.

Usaremos los datos anteriores como magnitudes de referencia para la adimensionalización.

Se definen las magnitudes adimensionales:

$$U = u/U_0,$$

$$V = v/U_0,$$

$$X = x/L,$$

$$Y = y/L,$$

$$P = p/(\rho U_0^2)$$

$$T' = (T - T_0)/(T_p - T_0), \quad C' = (C_A - C_{A0})/(C_p - C_{A0})$$

En que C_p es la concentración de pared (concentración del componente sublimable en la capa de aire inmediatamente adyacente a la placa).

Tenemos como variables físicas las coordenadas, las velocidades en las direcciones coordenadas, la temperatura, la concentración de A, las dimensiones geométricas de la placa, y las propiedades físicas

Reemplazando las variables dimensionales en las ecuaciones por sus expresiones en términos de las variables adimensionales, (omitiendo los términos fuente), se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial \tau} + U \frac{\partial U}{\partial X} + V \frac{\partial U}{\partial Y} &= -\frac{\partial P}{\partial X} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} \right) \\ \frac{\partial T'}{\partial \tau} + U \frac{\partial T'}{\partial X} + V \frac{\partial T'}{\partial Y} &= \frac{1}{RePr} \left(\frac{\partial^2 T'}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 T'}{\partial Y^2} \right) \\ \frac{\partial C'}{\partial \tau} + U \frac{\partial C'}{\partial X} + V \frac{\partial C'}{\partial Y} &= \frac{1}{ReSc} \left(\frac{\partial^2 C'}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 C'}{\partial Y^2} \right) \end{aligned}$$

Han aparecido los grupos adimensionales siguientes:

$Re = U_0 L/\nu$, N° de Reynolds
 $Pr = \mu C/k = \nu/\alpha$ = N° de Prandtl
 $Sc = \nu/D_{AB}$ = N° de Schmidt

Estos son los parámetros de flujo, de transporte térmico y de transporte de masa respectivamente. Estos grupos adimensionales son independientes, impuestos por la geometría, por el régimen de flujo y de transferencia de calor y masa, y por las propiedades físicas del sistema.

Condición de velocidad.

Como el flujo es viscoso, las dos velocidades son nulas encima de la superficie ($y = 0$). (Condición de no deslizamiento).

La componente de velocidad normal a la superficie es cero en el caso de placa impermeable.

Condición de temperatura

Se supone dada la temperatura superficial, T_p (Condición de Dirichlet). Otra condición posible, aunque mucho menos usada, es la de flujo de calor impuesto (Condición de Neumann, o de derivada conocida).

Condición de concentración

Además, el sólido sublimable mantiene justo sobre la superficie una mezcla saturada de naftaleno y aire ($C_A = C_{AS}$ en $y = 0$).

Transporte en la interfase:

Aparecerán grupos adimensionales dependientes, como resultado de cada fenómeno de transferencia que está ocurriendo:

Desde el punto de vista práctico, interesa el flujo de la cantidad transferida en la superficie del sólido.

En la superficie de un cuerpo, podemos definir parámetros de transporte de cantidad de movimiento, calor y masa. Tomemos el caso de flujo de aire, de velocidad U_0 , temperatura T_0 , y concentración de A, C_{A0} , paralelo a una placa

plana de longitud L . La placa tiene una temperatura superficial T_p , y está hecha de un material sublimable A (ej. naftaleno).

Flujos

Los flujos de

- cantidad de movimiento, (Esfuerzo de corte)
- calor (calor transferido a la corriente fluida)
- masa (masa transferida a la corriente fluida)

En la interfase se expresan, respectivamente por:

$$\tau = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_{y=0} = \nu \rho \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_{y=0} = \frac{\nu \rho U_o}{L} \left(\frac{\partial U}{\partial Y} \right)_{y=0}$$

$$q = -k \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_{y=0} = -\frac{k(T_p - T_o)}{L} \left(\frac{\partial T'}{\partial Y} \right)_{y=0}$$

$$N_A = -D_{AB} \left(\frac{\partial C_A}{\partial y} \right)_{y=0} = -\frac{D_{AB}(C_{AS} - C_{Ao})}{L} \left(\frac{\partial C'}{\partial Y} \right)_{y=0} =$$

Los potenciales para la transferencia son: $0 - U_o$ para la cantidad de movimiento, $T_p - T_o$ para el calor, y $C_{AS} - C_{Ao}$ para la masa.

Se definen en consecuencia los grupos adimensionales de transporte por:

$$C_f = \frac{\tau L}{\nu \rho U_o} = \left(\frac{\partial U}{\partial Y} \right)_{y=0}$$

$$Nu = \frac{qL}{k(T_p - T_o)} = -\left(\frac{\partial T'}{\partial Y} \right)_{y=0} = \frac{hL}{k}$$

$$Sh = \frac{N_A L}{D_{AB} (C_{AS} - C_{Ao})} = - \left(\frac{\partial C'}{\partial Y} \right)_{y=0} = \frac{KL}{D_{AB}}$$

Los grupos son:

- ✓ El coeficiente de fricción o arrastre,
- ✓ el número de Nusselt
- ✓ el N° de Sherwood.
- ✓

Estos dos últimos definen también los coeficientes de transferencia de calor (h) y de masa (K).

Re define el régimen de flujo (velocidad, geometría y propiedades)

Pr y Sc dependen la naturaleza del (los) fluido (s), agrupando las propiedades físicas relevantes al transporte de calor y masa respectivamente.

Evaluación de estos grupos:

Difusividad naftaleno-aire, 300 K: $0,19 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$

Difusividad térmica aire, 300 K: $2,25 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$

Viscosidad cinemática aire, 300 K: $1,585 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$

De donde: $Pr=0,704$, $Sc=1,199$

Casos de difusión pura:

Medio estacionario con concentraciones superficiales específicas:

Estos problemas son análogos a los de conducción de calor (o de flujo viscoso).

La velocidad media, molar o de masa, es cero, y el flujo absoluto de una especie es igual al flujo difusivo.

$$n_A = -\rho D_{AB} \nabla m_A = -D_{AB} \nabla \rho_A$$

$$\bar{N}_A = -CD_{AB} \nabla x_A = -D_{AB} \nabla C_A$$

Para una aplicación más ajustada a la realidad, estas condiciones se dan cuando la fracción másica del componente que difunde es muy pequeña ($m_A \leq 1$, $x_A \leq 1$) y el flujo del otro componente es, por lo tanto, aproximadamente nulo. Ambas condiciones se dan en soluciones muy diluidas.

La ecuación de Conservación de la masa en medio plano estacionario con gradiente de concentración en una dirección, en forma molar, se escribe:

$$\frac{d}{dx}(CD_{AB} \frac{dx_A}{dx}) = 0$$

Con $x = 0, x_A = x_{A1}$
 $x = L, x_A = x_{A2}$

$$x_A(x) = (x_{A2} - x_{A1}) \frac{x}{L} + x_{A1}$$

De donde:

$$N_{Ax} = -CD_{AB} \frac{(x_{A2} - x_{A1})}{L}$$

Solución que es análoga a la de conducción de calor a través de una placa plana.