

**CONSIDERACIÓN DE LA TRANSFERENCIA DE MASA Y CANTIDAD DE
MOVIMIENTO EN EL MODELAMIENTO DE UN REACTOR TUBULAR**

**OSCAR FABIO SALAZAR VÉLEZ
GERMÁN GONZÁLEZ SILVA**



**UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MANIZALES
FACULTAD DE INGENIERÍA Y ARQUITECTURA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA
2004**

**CONSIDERACIÓN DE LA TRANSFERENCIA DE MASA Y CANTIDAD DE
MOVIMIENTO EN EL MODELAMIENTO DE UN REACTOR TUBULAR**

**OSCAR FABIO SALAZAR VÉLEZ
GERMÁN GONZÁLEZ SILVA**

**Trabajo Final para optar al título de
Ingeniero Químico**

**Director
RAMIRO BETANCOURT GRAJALES
Ingeniero Químico**



**UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MANIZALES
FACULTAD DE INGENIERÍA Y ARQUITECTURA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA
2004**

RESUMEN

En este trabajo se exponen los fundamentos teóricos y el modelo matemático, que describe la variación en las concentraciones para una mezcla reaccionante que fluye en el interior de un tubo, limitándose al caso de un fluido incompresible que no experimenta cambios en la temperatura. El conjunto de ecuaciones diferenciales se escriben en coordenadas cilíndricas sobre un espacio bidimensional. También se muestra el algoritmo para la solución numérica del modelo utilizando el método de diferencias finitas, que se desarrolla para el caso de una mezcla multicomponente aplicando la ecuación de Stefan-Maxwell y también para el caso de una mezcla binaria.



ABSTRACT

In this work the theoretical foundations and the mathematical model are exposed, that describes the variation in the concentrations for a reactive mixture that flows inside a tube, limited to the case of an incompressible fluid that doesn't experience changes in the temperature. The group of differential equations is written in coordinated cylindrical on a two-dimensional space. The algorithm is also shown for the numeric solution of the model using finite differences method, that is developed for the case of a multicomponent mixture applying the equation of Stefan-Maxwell and also for the case of a binary mixture.



AGRADECIMIENTOS

Los autores expresan sus agradecimientos a:

Al Profesor Jorge Eduardo Hurtado Gómez, por su apoyo y gran interés en este trabajo.

Al Profesor Ramiro Betancourt Grajales, por ser el director de este trabajo.

Al Profesor Javier Fontalvo Alzate, por sus valiosas orientaciones y estímulo, que nos proporcionó a pesar de la distancia.

Al Profesor Miguel Ángel Gómez, por su interés y colaboración en la ejecución de este trabajo.

A la Profesora Adela Londoño Carvajal, por su diligente atención y esmero por que nosotros llevásemos este trabajo a feliz termino.

Al Profesor Carlos Ariel Cardona, quien estuvo atento y dispuesto a escuchar siempre nuestras inquietudes.

Un agradecimiento muy especial a Martha Helena Pineda, quien siendo Directora de la biblioteca de La UN, facilitó y agilizó la consecución de mucha de la información necesaria para la elaboración de este trabajo, además por su desinteresada e incondicional amistad.

A Marleny Correa por sus nobles gestos y su firmeza desinteresada para facilitar el tiempo y espacio en horas laborales y así pudiéramos cumplir con los objetivos de este trabajo de grado.

Al Ingeniero y amigo Cesar Augusto Sánchez Correa, por su ayuda desinteresada en los momentos más difíciles de este trabajo.

A nuestros amigos Mónica Cruz Sánchez, Andrés Restrepo y Wilmar Osorio Viana, porque siempre estuvieron atentos a escucharnos.

A nuestras familias, por su paciencia y apoyo durante nuestras vidas y en especial durante la realización de este trabajo.

A todos los demás personas, ingenieros, profesores e investigadores que de una u otra manera colaboraron con nosotros en el estudio realizado.

CONTENIDO

INTRODUCCIÓN

1. CONCEPTOS BÁSICOS EN EL DISEÑO DE REACTORES

1.1 Conceptos Generales.....	1
1.1.1 Definición de Reacción Química.....	2
1.1.2 Tipos de Transformaciones Químicas.....	2
1.1.3 Clases de Reacciones Químicas.....	2
1.1.4 Definición de Velocidad de Reacción.....	2
1.1.5 Velocidades Relativas de Reacción.....	3
1.1.6 Ecuación de Rendimiento.....	4
1.1.7 Definición de Reactor Químico.....	5
1.2 Tipos De Reactores Químicos.....	5
1.2.1 Ecuación General de Balance.....	6
1.2.2 Conversión.....	6

2. MECANISMOS DE TRANSPORTE. TURBULENCIA Y MEZCLADO EN SISTEMAS REACCIONANTES

2.1 Difusión Molecular.....	8
2.1.1 Difusión Ordinaria o de Concentraciones.....	9
2.1.2 Difusión Originada por Gradientes de Presión.....	9
2.1.3 Difusión Forzada.....	10
2.1.4 Difusión Térmica.....	10
2.2 Diferentes Modelos de Velocidades de Difusión.....	10
2.2.1 Modelo Hirschfelder - Curtiss o de Orden Cero.....	10
2.2.2 Primera Ley de Fick.....	11
2.2.3 Aproximación del Número de Lewis.....	12
2.2.4 Modelo de Difusión Número de Lewis Igual a la Unidad.....	13
2.3 Mecanismo de Transporte por Convección.....	13
Mecanismo de Convección Natural o Libre	
Mecanismo de Convección Forzada.	
2.4 Transferencia de Masa con Reacción – Difusión.....	14
2.5 Criterio Para la Consideración de la difusión en el Diseño de un Reactor Tubular	15
2.6 Turbulencia Y Mezclado En Sistemas Reaccionantes	16
2.6.1 Micromezclado.....	17

2.6.1.1	Limites del Micromezclado.....	17
	Segregación Total	
	Máximo Mezclado o Mezclado Total	
2.7	Turbulencia.....	19
2.7.1	Teoría de Kolmogorov.....	20
	Primer Postulado de Kolmogorov	
	Segundo Postulado de Kolmogorov	
2.7.2	Modelos de Turbulencia.....	21
2.7.2.1	Modelo de turbulencia κ - ϵ	22
2.7.2.2	Sistema general de ecuaciones para el modelo κ - ϵ	23
	Viscosidad Cinemática Turbulenta.....	23
	Energía Cinética Turbulenta.....	24
	Energía Cinética de Disipación Turbulenta.....	24
	Condiciones de Frontera.....	24
2.7.2.3	Efecto de Números de Reynolds Bajos.....	25
3.	MODELAMIENTO MATEMÁTICO BIDIMENSIONAL DE REACTOR TUBULAR	
3.1	Descripción del Sistema Físico.....	29
3.2	Balance para la Cantidad de Movimiento.....	30
3.2.1	Modelo para Flujo no Desarrollado.....	30
3.2.2	Modelo para Flujo Desarrollado.....	31
3.3	Balance para la Transferencia de Masa.....	31
3.3.1	Balance Global de Masa.....	32
3.3.2	Balance Diferencial para las Especies Químicas.....	32
3.3.3	Modelo de Transferencia de Masa sin Dispersión Axial.....	33
3.4	Descripción del Flujo Difusivo.....	34
3.4.1	Ecuación de Stefan-Maxwell para la Difusión Multicomponente...	34
3.4.2	La Ley de Fick.....	35
4.	ESTRATEGIA DE SOLUCION NUMÉRICA DEL MODELO MATEMÁTICO	
4.1	Solución del Balance para la Cantidad de Movimiento.....	38
4.1.1	Solución del modelo para flujo no desarrollado.....	38
4.2	Solución del Balance para la Transferencia de Masa.....	39
4.2.1	Solución del modelo para una mezcla Multicomponente.....	39
4.2.1.1	Discretización.....	40
4.2.1.2	Algoritmo.....	40
4.2.1.3	Ejemplo.....	40
4.2.2	Solución del modelo para una mezcla binaria.....	42
4.2.2.1	Discretización.....	43
4.2.2.2	Algoritmo.....	43
4.2.2.3	Ejemplo.....	43
4.2.2.4	Estudio del orden de la cinética de reacción.....	45
4.2.2.5	Influencia de la difusividad en la conversión química.....	46

5. EFECTO DE LOS PARÁMETROS EN LA SOLUCIÓN DEL MODELO	
5.1 Reacción de isomerización de n-butano.....	50
5.2 Efecto de la temperatura y el radio.....	52
CONCLUSIONES.....	55
BIBLIOGRAFÍA.....	56
ANEXO A.....	64
ANEXO B.....	67



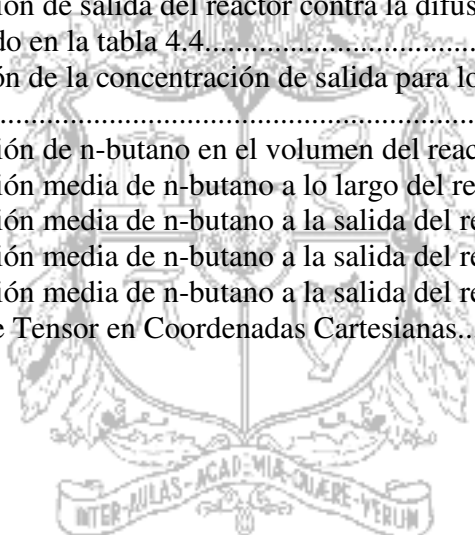
LISTA DE TABLAS

	Pág.
Tabla 1.1 Nomenclatura	7
Tabla 2.1 Expresiones de conservación derivadas de la ecuación 2.28.....	22
Tabla 2.2 Valores numéricos para las constantes del modelo κ - ϵ	24
Tabla 2.3 Nomenclatura	26
Tabla 3.1 Nomenclatura	36
Tabla 4.1	41
Tabla 4.2	44
Tabla 4.3	45
Tabla 4.4	47
Tabla 4.5	48
Tabla 5.1	50
Tabla B1 Números Adimensionales.....	69



LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Figura 2.1	Reactor Pistón Completamente Segregado..... 17
Figura 2.2	Aproximación de la Función Respuesta de un Tanque Agitado..... 18
Figura 4.1	Concentración media de las sustancias a lo largo del reactor..... 42
Figura 4.2	Concentración del reactivo en el volumen del reactor..... 44
Figura 4.3	Concentración de mezcla del reactivo a la salida del reactor contra la constante de velocidad para el ejemplo dado en la tabla 4.1..... 46
Figura 4.4	Concentración de salida del reactor contra la difusividad para el ejemplo dado en la tabla 4.4..... 47
Figura 4.5	Comparación de la concentración de salida para los tres tipos de Reactores..... 48
Figura 5.1	Concentración de n-butano en el volumen del reactor..... 51
Figura 5.2	Concentración media de n-butano a lo largo del reactor..... 51
Figura 5.3	Concentración media de n-butano a la salida del reactor, T = 330 K.. 52
Figura 5.4	Concentración media de n-butano a la salida del reactor, T = 345 K.. 53
Figura 5.5	Concentración media de n-butano a la salida del reactor, T = 360 K.. 53
Figura A1	Notación de Tensor en Coordenadas Cartesianas..... 65



INTRODUCCIÓN

Este trabajo tiene por objetivo aclarar algunos aspectos relacionados con el modelamiento y simulación de un reactor tubular para un fluido incompresible y de fase homogénea, en el que se tomen en cuenta los fenómenos que pueden influenciar notablemente su rendimiento. El estudio se encamina en la tarea de mejorar la comprensión de la teoría fundamental y la de los modelos matemáticos que la describen, facilitando así la generación de herramientas que sean útiles en el desarrollo de simuladores para este tipo de reactores y para otros de mayor complejidad.

Como parte de la labor necesaria para alcanzar este objetivo, en el presente trabajo se plantea un esquema de solución numérica para un modelo con un mediano nivel de rigurosidad teórica, logrando de esta manera dar un paso más en el sentido de mejorar las predicciones y reducir las pruebas experimentales.

No sobra aclarar, que en la actualidad, ya existen varios paquetes comerciales de simulación que incorporan modelos como los que aquí se tratan, y hasta de mayor realismo, denominados como *simuladores CFD* (Computational Fluid Dynamics), con la desventaja de que son regularmente costosos, aparte de que esconden los algoritmos que usan en la solución de las ecuaciones, y es por eso que vale este esfuerzo de desarrollar, desde instancias elementales, estrategias numéricas que permitan a su vez afianzar los conceptos y sus criterios de aplicación.

En el Capítulo 1 se presenta un enfoque global de la fundamentación de los conceptos en cinética de reacción y diseño de reactores. El Capítulo 2 se presentan los modelos y conceptos generales del Micromezclado, del macromezclado y de la turbulencia. En el capítulo 3 se resumen los pasos para llegar a la deducción del modelo matemático a partir de los balances generales, para continuar en el capítulo 4 con los esquemas de discretización y el planteamiento del algoritmo para su solución numérica. Dejando los análisis de los parámetros de diseño en el capítulo 5.

CAPITULO 1

CONCEPTOS BÁSICOS EN EL DISEÑO DE REACTORES

El diseño de un reactor implica no sólo saber que tan grande o de que tipo debe ser, es importante aclarar que en el diseño se deben tener en cuenta los siguientes aspectos:

- Las condiciones óptimas de operación: temperatura, presión, velocidad de flujo, cantidad y calidad de las materias primas, además un estudio fisicoquímico y cinético de las especies reaccionantes.
- Los requerimientos ambientales y de seguridad industrial, los dispositivos apropiados para el funcionamiento y control instrumental.
- El costo mínimo de inversión maximizando las ganancias.
- Se requiere un estudio fuerte de mercados que garantice que la producción sea adecuada para los índices de oferta y demanda del producto.

El diseño de reactores es la actividad fundamental y representativa de los ingenieros químicos.

1.1 CONCEPTOS GENERALES

1.1.1 Definición de Reacción Química

Se conoce como reacción química a aquel proceso unitario que tiene por objeto distribuir de forma distinta los átomos de ciertas moléculas (compuestos reaccionantes o reactantes) para formar otras nuevas (productos). Los factores que hay que tener en cuenta a la hora de llevar a cabo o desarrollar una reacción química son:

- Condiciones de presión, temperatura, y composiciones necesarias para que los materiales entren en estado de reacción.
- Las características termodinámicas y cinéticas de la reacción.
- Las fases (sólido, líquido, gaseoso) que se encuentran presentes en la reacción

1.1.2 Tipos de Transformaciones Químicas

Según *Fogler (1999)*, un compuesto químico pierde su identidad química (propiedades) en una reacción; existen tres formas por las cuales esto se lleva a cabo:

- Descomposición, consiste en la división de una molécula en moléculas más simples, átomos o radicales.
- Combinación, ésta tiene lugar cuando una molécula o átomo se une con otra especie para formar un compuesto nuevo.
- Isomerización, en éste caso la molécula no efectúa ninguna descomposición externa o adición a otra, es simplemente un cambio de configuración estructural interna.

1.1.3 Clases de Reacciones Químicas

Smith (1991), *Hill (1977)*, y *Levenspiel (1981)*, explican las diferentes reacciones químicas; así:

Reacciones Homogéneas: Cuando se efectúa solamente en una fase, ya sea gaseosa, sólida o líquida.

Reacciones Heterogéneas: Cuando se requiere la presencia de al menos dos fases para que tenga lugar la reacción a una velocidad deseada.

Reacciones Catalíticas: Son aquellas reacciones que requieren de una sustancia adicional (que no aparece en el balance global) para modificar la velocidad de reacción, llamado catalizador.

Reacciones Enzimáticas: Utilizan catalizadores biológicos (enzimas con alto peso molecular, con centros activos y con una elevada selectividad).

Reacciones No Catalíticas: Los materiales reactantes no necesitan ninguna sustancia adicional (catalizador) para aumentar su velocidad de reacción.

Reacciones Autocatalíticas: En esta reacción, uno de los productos formados actúa como catalizador, participando en otra etapa del proceso.

Reacciones Endotérmicas: Son aquellas que absorben calor del exterior.

Reacciones Exotérmicas: Son aquellas que liberan calor hacia el medio.

1.1.4 Definición de Velocidad de Reacción

En una reacción química cuando aparece una especie química, necesariamente desaparece otra; la expresión matemática de la velocidad de reacción puede ser expresada como la velocidad de desaparición de reactivos o como la velocidad de aparición de los productos.

La velocidad de reacción se define como el número de moles que reaccionan de una especie por unidad de volumen y por unidad de tiempo, si simboliza como $-r_A$.

La definición de velocidad de reacción cambia cuando se aplica a una reacción gas-sólido, donde $-r_A$ es el número de moles que reaccionan de A por unidad de masa de catalizador y por unidad de tiempo. La velocidad de reacción es función de las propiedades de las especies químicas mas no del tipo de flujo (pistón, continuo); si las propiedades varían a lo largo del reactor la ley de velocidad o velocidad de reacción varía también. Según *Fogler (1999)*; la ley de velocidad es una expresión algebraica intensiva y no es una ecuación diferencial, dependiente de la temperatura y la concentración.

De forma esquemática se toma la siguiente reacción:



De manera simple, la expresión matemática de la ley de velocidad de esta reacción se puede escribir como:

$$-r_A = kC_A^a C_B^b \quad 1.2$$

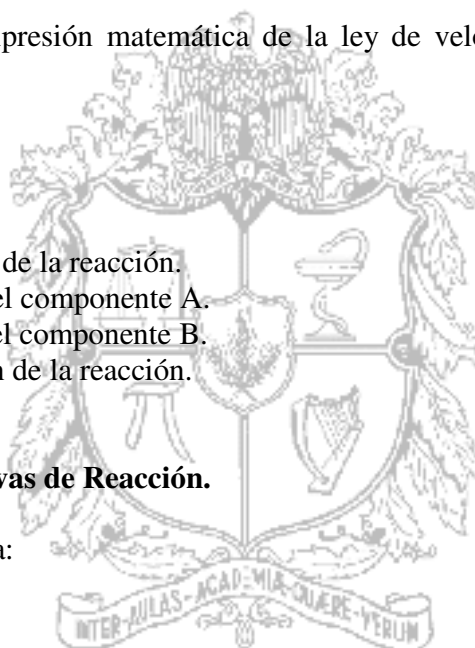
Donde,

k: es la constante cinética de la reacción.

C_A : es la concentración del componente A.

C_B : es la concentración del componente B.

a y b: representan el orden de la reacción.



1.1.5 Velocidades Relativas de Reacción.

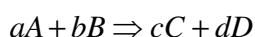
En la expresión algebraica:

$$-r_A = kC_A^a C_B^b$$

El orden de la reacción es relativo al exponente de cada una de las especies, por ejemplo en esta expresión la reacción es de orden 'a' respecto del componente A y de orden 'b' respecto del componente B.

El coeficiente cinético k para las reacciones de orden 'n' ($n = a + b + \dots$), según *Levenspiel (1981)*, tiene dimensiones de $(\text{tiempo})^{-1} * (\text{concentración})^{1-n}$.

La reacción:



También se puede escribir como:

$$A + \frac{b}{a}B \Rightarrow \frac{c}{a}C + \frac{d}{a}D \quad 1.3$$

y la expresión de las velocidades específicas de reacción es:

$$-r_A = \frac{a}{b} r_B = \frac{a}{c} r_C = \frac{a}{d} r_D \quad 1.4$$

1.1.6 Ecuación de Rendimiento

Es aquella expresión matemática que relaciona las condiciones de salida con las de entrada en un reactor químico, para diversas cinéticas y diferentes modelos de contacto (ver Denbigh et al, 1990; Fogler, 1999).

- Modelo de Contacto: Está referido a la forma como los materiales circulan a través del reactor y se contactan unos con otros en su interior, además del tiempo que necesitan para mezclarse, y las condiciones y características de la incorporación de material.
- Cinética: Está referido a la rapidez con la que ocurren las reacciones, el equilibrio en el interior del reactor, y la velocidad de la reacción química; éstos factores están condicionados por la transferencia (balance) de materia y energía.

El rendimiento que se basa en los flujos molares se puede definir como la relación de las moles de producto formado y el número de moles del reactante clave.; así:

$$Y = \frac{r_D}{-r_A} \quad 1.5$$

Para un reactor batch:

$$Y = \frac{N_D}{N_{A0} - N_A} \quad 1.6$$

N: número de moles de A en el reactor.

Para un reactor de flujo continuo:

$$Y = \frac{F_D}{F_{A0} - F_A} \quad 1.7$$

F: flujo molar de A a través del reactor. y el subíndice D representa al compuesto deseado

1.1.7 Definición de Reactor Químico

Un reactor químico es una unidad procesadora diseñada para que en su interior se lleven a cabo una o varias reacciones químicas. Dicha unidad procesadora está constituida por un recipiente, el cual cuenta con líneas de entrada y salida para sustancias químicas, y está vigilado por un algoritmo de control.

Los reactores químicos tienen como funciones principales:

- Asegurar el tipo de contacto o modo de fluir de los reactantes en el interior del recipiente, para garantizar la mezcla deseada de los materiales reactantes.
- Proporcionar el tiempo suficiente de contacto entre las sustancias y/o catalizador, para alcanzar la conversión deseada.
- Permitir condiciones de presión, temperatura y composición de modo que la reacción tenga lugar en el grado y a la velocidad deseada, atendiendo a los aspectos termodinámicos y cinéticos de la reacción.

1.2 TIPOS DE REACTORES QUÍMICOS

Existen infinidad de tipos de reactores químicos (ver *Nauman, 1987; Nauman, 2001 y Fogler, 1999*) y cada uno responde a las necesidades de una situación en particular; entre los tipos más importantes, más conocidos, y mayormente utilizados en la industria se puede mencionar los siguientes:

- Reactor discontinuo
- Reactor continuo
- Reactor semicontinuo
- Reactor en flujo pistón.
- Tanque con agitación continua.
- Reactor de lecho fluidizado
- Reactor de lecho fijo
- Reactor de lecho con escurrimiento.
- Reactor de lecho de carga móvil.
- Reactor de burbujas
- Reactor con combustible en suspensión.
- Columna de destilación reactiva.
- Reactores de recirculación.
- Reactores de membrana.
- Fermentadores.
- Reactor trickle bed.

Adicionalmente se pueden mencionar que los reactores isotérmicos son aquellos que trabajan u operan a una misma temperatura; y los reactores isobáricos, son aquellos que trabajan u operan a una misma presión.

1.2.1 Ecuación General de Balance

Para realizar el balance ya sea de materia, energía o cantidad de movimiento es importante definir primero el volumen de control a analizar.

La ecuación general de materia se escribe como:

Entra - Sale + Genera = Acumulación.

Aplicando esta ecuación para un balance molar de la especie j en un instante t queda:

$$F_{jo} - F_j - G_j = \frac{dN_j}{dt} \quad 1.8$$

Donde:

N_j : número de moles de j en el sistema en el tiempo t.

F_j : Flujo molar de la especie j.

Si las propiedades fisicoquímicas son espacialmente uniformes dentro del volumen de control, la velocidad de generación se puede considerar como el producto del volumen por la velocidad de formación de la especie j, dando origen a la expresión:

$$G_j = -r_j V \quad 1.9$$

A partir de la ecuación del balance molar de especie j se puede llegar a la siguiente expresión:

$$F_{jo} - F_j + \int_V r_j dV = \frac{dN_j}{dt} \quad 1.10$$

Ésta expresión es conocida como la ecuación básica de ingeniería de las reacciones químicas, siendo la base de la cual se parte para obtener las ecuaciones de diseño de los reactores más comunes.

1.2.2 Conversión

Se define como la fracción de reactivo que se ha convertido a producto o también como el número de moles del reactivo A que han reaccionado por mol de A alimentado al reactor y se simboliza con la letra X. Así su expresión matemática es:

Para un reactor batch:

$$X = \frac{N_{AO} - N_A}{N_{AO}} \quad 1.11$$

N: número de moles de A en el reactor.

Para un reactor de flujo continuo:

$$X = \frac{F_{AO} - F_A}{F_{AO}} \quad 1.11(b)$$

F: flujo molar de A a través del reactor.

Para ambos casos el subíndice A_0 , significa al inicio o a la entrada del reactor y el subíndice A significa al final o a la salida del reactor.

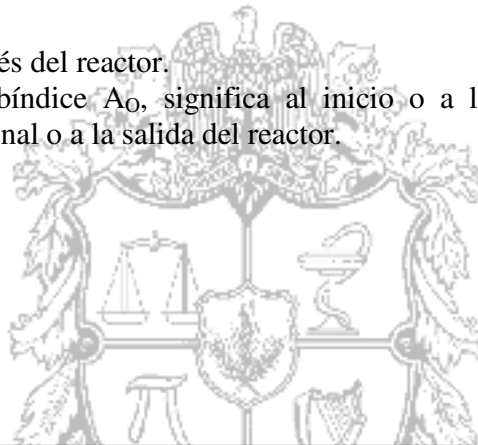


Tabla 1.1 NOMENCLATURA

a y b: representan el orden de la reacción .
 C_A : es la concentración del componente A.
 C_B : es la concentración del componente B.
F: flujo molar de A a través del reactor.
 F_j : Flujo molar de la especie j.
 G_j : Velocidad de generación de la especie j .
N: número de moles de A en el reactor.
 N_j : número de moles de j en el sistema en el tiempo t.
k: es la constante cinética de la reacción.
 r_i : Velocidad de reacción de la especie i.
V: Volumen del reactor.

CAPÍTULO 2

MECANISMOS DE TRANSPORTE, TURBULENCIA Y MEZCLADO EN SISTEMAS REACCIONANTES

Un componente en una mezcla fluida homogénea sólo se transfiere en el seno de la misma a causa del gradiente de concentraciones; en el caso de un fluido en reposo o fluyendo laminadamente en dirección perpendicular al gradiente de concentración, la transferencia se desarrolla como consecuencia del movimiento caótico de las moléculas de la mezcla, constituyendo el mecanismo de *Difusión Molecular*.

En un fluido turbulento se producen diferencias de densidad por cambios de temperatura o composición; desarrollándose transferencia de masa; éste fenómeno se denomina *Mecanismo por Convección*.

Estos mecanismos necesitan un medio material para su desarrollo, pero existe el *Mecanismo de Radiación*, por medio del cual existe transporte de energía en el vacío por ser un fenómeno electromagnético.

2.1 DIFUSIÓN MOLECULAR

La difusión molecular es un mecanismo causado por el movimiento de las partículas individuales a través de una sustancia debido a su energía térmica. Se ha desarrollado una *Teoría Cinética* para los gases, la cual describe adecuadamente los fenómenos difusionales involucrados; cosa contraria pasa con los líquidos, los cuales aún siguen siendo estudiados en una forma empírica (*Bird et al.1960*).

Para dar una idea sobre la difusión; por ejemplo, cuando agregamos unas gotas de colorante en un vaso con agua; después de cierto tiempo, el color se distribuye por todo el vaso

uniformemente, sin cambios subsecuentes; siendo este mecanismo una operación muy lenta. La solución alcanzará espontáneamente el equilibrio, ya que las sustancias se moverán de puntos con mayor concentración a unos de menor concentración y la rapidez con la que el soluto se mueve de un punto a otro y en una dirección cualquiera dependerá del gradiente de concentración en ese punto.

Existen diversos modelos para simular las velocidades de difusión en un sistema multicomponente, pero la tarea no es sencilla, pues su complejidad matemática, el costo en la capacidad del equipo de computo y el tiempo de simulación son grandes.

Para un sistema multicomponente, se deben considerar las contribuciones relacionadas con las fuerzas mecánicas impulsoras y una contribución adicional debida a la fuerza térmica impulsora:

$$j_i = j_i^x + j_i^p + j_i^g + j_i^T \quad 2.1$$

2.1.1 Difusión Ordinaria o de Concentraciones j_i^x

Según *Bird et al (1960)* depende de forma complicada de los gradientes de todas las sustancias implicadas:

$$j_i^x = \frac{c^2}{\rho RT} \sum_{j=1}^n M_i M_j D_{ij} \left[x_i \sum_{\substack{K=j \\ k \neq j}}^n \left(\frac{\partial \bar{G}_i}{\partial x_k} \right) \nabla_{x_k} \right] \quad 2.2$$

T, P, x_s
 $x_s \neq k, j$

2.1.2 Difusión Originada por Gradientes de Presión j_i^p

Al existir un gradiente de presión impuesto sobre el sistema, puede existir un movimiento neto de la especie *i* en la mezcla, éste término es despreciable en comparación con la *Difusión Ordinaria*; (ver *Bird et al, 1960; Taylor et al, 1993*) sólo en casos de centrifugación se obtienen valores considerables de *Difusión de Presión*.

$$j_i^p = \frac{c^2}{\rho RT} \sum_{j=1}^n M_i M_j D_{ij} \left[x_i M_j \left(\frac{\bar{V}}{M_j} - \frac{1}{\rho} \right) \nabla P \right] \quad 2.3$$

2.1.3 Difusión Forzada j_i^g

Este fenómeno es muy característico en sistemas iónicos, donde la fuerza externa (una fuerza eléctrica causada por la imposición de un campo eléctrico) es diferente en cada uno de los iones. (ver Taylor et al, 1993 y Novella 1984).

$$j_i^g = -\frac{c^2}{\rho RT} \sum_{j=1}^n M_i M_j D_{ij} \left[x_i M_j \left(g_i - \sum_{k=1}^n g_k \frac{\rho_k}{\rho} \right) \right] \quad 2.4$$

Si la fuerza externa es la *gravedad*, todas las g_i son iguales; por ende, los j_i^g se anulan.

2.1.4 Difusión Térmica j_i^T

Describe la tendencia de difusión de componentes químicos bajo la influencia de un gradiente de temperaturas. Este término es casi despreciable; sin embargo, en la literatura recomiendan formas para calcularla y obtener valores numéricos, es conveniente combinarlo con la convección libre de un sistema análogo.

$$j_i^T = -D_i^T \nabla \ln T \quad 2.5$$

2.2 DIFERENTES MODELOS DE VELOCIDADES DE DIFUSIÓN

A continuación se exponen brevemente algunos modelos para describir las velocidades de difusión en orden decreciente de complejidad y elaboración matemática (*Hilbert, R 2004*):

2.2.1 Modelo Hirschfelder - Curtiss o de Orden Cero

Este modelo desarrolla una aproximación del coeficiente de difusión para una especie i en una mezcla,

$$D_i = (1 - w_i) \left[\bar{x} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n \frac{w_k}{x_k D_{ij}} \right]^{-1} \quad 2.6$$

Donde:

D_i : Coeficiente de difusión para una especie i en la mezcla.

w_i : Fracción masa de la especie i .

w_k : Fracción masa de la especie k .

\bar{x} : Fracción molar promedio de la mezcla.

x_k : Fracción molar de la especie k .

D_{ij} : Coeficiente de difusión binario, es función de la presión y de la temperatura.

Esta aproximación es comprobada y equivalente de acuerdo sólo al primer término $D^{[0]}$ de la serie de expansión de la matriz de difusión D según *Hilbert, R (2004)* y por ésta razón se conoce con el nombre de *Aproximación de Orden Cero*.

El modelo de velocidad de difusión de orden cero, considera los términos de difusión simple y difusión térmica; la conservación de la masa global generalmente no se cumple, por tal motivo el autor adiciona un término, forzando al modelo a cumplir con la conservación de la masa global.

El término adicional consta de una parte predictiva y una parte correctiva

$$j_i^C = -\sum_{k=1}^n w_k D_k \nabla X_k \quad 2.7$$

La expresión general para la velocidad de difusión con aproximación de orden cero es:

$$j_i = j_i^X + j_i^T + j_i^C \quad 2.8$$

2.2.2 Primera Ley de Fick

El término de difusión está basado en gradientes de concentración, considerando densidad constante y considerando un coeficiente de difusión para cada especie.

Un problema al usar esta aproximación, es emplear y calcular los coeficientes de difusión. Una solución simple a este problema es, considerar el sistema altamente diluido. Este modelo de aproximación no garantiza que se cumpla la ley de conservación de masa, según publicación de *Hilbert R.(2004)* y se debe hacer una corrección generalmente, al valor de la velocidad.

Para el caso de soluciones binarias diluidas y con densidad constante, la difusión molecular es proporcional al gradiente de concentraciones y ocurre en el sentido en el cual decrece éste.

$$j_i = -D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial z} \quad 2.9$$

Un análisis riguroso basado en la termodinámica de los procesos irreversibles, muestra que el potencial correcto no es el gradiente de concentración, sino el gradiente de potencial químico y para mezclas multicomponentes deben incluirse en la ecuación los gradientes de las otras especies.

Si el gradiente de concentraciones se presenta en diferentes direcciones; *Bird et al (1960)* recomienda escribir la *ley de Fick* como:

$$J_A^* = -\nabla \cdot C_A \quad 2.10$$

La J_A^* representa un flux[‡] de un componente con relación a la velocidad molar promedio de todos los componentes, en un lugar fijo en el espacio.

2.2.3 Aproximación del Número de Lewis

Este modelo es muy simple y puede comparar diferentes efectos de las especies, mientras se logra una manipulación matemática sencilla de las ecuaciones de conservación.

Si todos los números de Lewis no son iguales, se debe hacer una corrección en la velocidad garantizando la Ley de conservación de la masa.

Esta aproximación es posible gracias al análisis dimensional, estudiado en mecánica de fluidos y en fenómenos de transporte; el procedimiento de π - Buckingham es el más empleado cuando no existe ninguna ecuación diferencial que pueda aplicarse en el modelo y es una aplicación del requerimiento de homogeneidad dimensional de una situación física dada.

El número de Lewis compara la difusión térmica de la mezcla y la difusividad másica de las especies. El número de Lewis es la relación entre el número de Schmidt (Sc_i) y el número de Prandtl (Pr).

$$Le_i = \frac{Sc_i}{Pr} \quad 2.11$$

$$Le_i = \frac{\lambda}{\rho C_p D_i} \quad 2.12$$

λ : Conductividad térmica.

ρ : Densidad.

C_p : Capacidad específica de calor.

De la ecuación anterior se puede obtener la expresión del coeficiente de difusión:

$$D_i = \frac{\lambda}{\rho C_p Le_i} \quad 2.13$$

[‡] Flux indica el flujo por unidad de área.

2.2.4 Modelo de Difusión Número de Lewis Igual a la Unidad

Esta aproximación asume que todos los números de Lewis a una temperatura determinada, son constantes e iguales a uno; por consiguiente, para cada especie los coeficientes de difusión y de calor son iguales.

De la ecuación 2.12, reemplazamos el valor del Número de Lewis:

$$D_i = \frac{\lambda}{\rho C_p} \quad 2.14$$

Es simple su implementación y simulación y existen modelos de turbulencia basados en éste concepto, cabe decir que es un modelo ideal.

2.3 MECANISMO DE TRANSPORTE POR CONVECCIÓN

Según *Welty et al 1994*, en los fluidos el movimiento se desarrolla debido a que existen puntos del fluido con diferente temperatura, composición y diferencias de densidad. La transferencia de masa debida a la convección consiste en el movimiento de un fluido con una superficie o entre dos fluidos y es función de las propiedades de transferencia y de las características dinámicas del fluido que está fluyendo (*ver Novella 1984 y Bird et al 1960*).

Existen dos tipos de mecanismos de convección:

Mecanismo de Convección Natural o Libre

El movimiento se debe a una diferencia de densidad a causa de una concentración o diferencia de temperatura. La expresión de rapidez de transferencia de masa convectiva se expresa como:

$$N_A = K_c \Delta C_A$$

Donde:

N_A : Rapidez de transferencia de masa molar de la especie A.

K_c : Coeficiente de transferencia convectiva de masa.

ΔC_A : Diferencia entre la concentración de superficie límite y la concentración media de la corriente de fluido de A en difusión.

El flujo es natural o libre, cuando es causado por fuerzas de empuje debido a una diferencia de densidad y el campo gravitacional terrestre.

Siempre que un fluido se caliente o se enfríe en un campo gravitatorio existe la posibilidad de que se produzca convección natural.

Cuando el fluido es puro, los gradientes de densidad se relacionan con los gradientes de temperatura por medio de un coeficiente de dilatación volumétrica β .

Mecanismo de Convección Forzada.

Este tipo de mecanismo ocurre cuando el fluido se hace pasar por una superficie sólida, usando mecanismos externos, como bombas, ventiladores, agitadores, compresores y hasta la misma gravedad. Las características de flujo son una función fuerte del efecto de flotación del fluido con mayor temperatura. El número de Nusselt en este caso, depende del número de Grashof y Prandtl.

2.4 TRANSFERENCIA DE MASA CON REACCIÓN - DIFUSIÓN

Según *Bird et al (1960)* en un proceso simultáneo de *Transferencia de Masa - Reacción*, el factor de control puede ser cualquiera de los dos fenómenos, pero generalmente no existe un dominio absoluto de ninguno de los efectos.

Para que exista una reacción química, debe ocurrir un contacto íntimo en las zonas de actividad de las especies involucradas y ese contacto es fruto del movimiento molecular (el cual suele ser caótico) y se cumple también para el *Mecanismo de Difusión*, por lo tanto, la difusión es efecto inherentemente importante cuando ocurre una reacción química; la rapidez de transporte total de masa debe expresarse en función de las dos.

La difusión puede ser lenta y el mecanismo de reacción puede estar limitado por la difusión.

En el diseño de un reactor químico, la *difusión - reacción* es un factor crítico y es representativo de los reactores de corriente de alimentación no mezclada. Los reactores tubulares presentan gradientes de concentración axial a lo largo del reactor, causados por cambios en la concentración promedio en el flujo, al considerar los efectos reactivos, difusionales y fluidodinámicos del sistema, la simulación del modelo del reactor real se hace un algoritmo complejo. Por razones lógicas, se deben hacer algunas consideraciones para lograr un poco más de flexibilidad en la simulación del modelo.

Un modelo simple en coordenadas cilíndricas para un reactor tubular en estado estable, difusividad constante, velocidad sólo en dirección axial como función del radio y difusión axial despreciable, es:

$$V_z(r) \frac{\partial c}{\partial z} = D_A \left[\frac{1}{r} \frac{\partial c}{\partial r} - \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} \right] + r_A \quad 2.15$$

2.5 CRITERIO PARA LA CONSIDERACIÓN DE LA DIFUSIÓN EN EL DISEÑO DE UN REACTOR TUBULAR

Este canon está fundamentado en parámetros adimensionales así,

$$\frac{D_A \bar{t}}{R^2} = \frac{D_A L}{u R^2} \quad 2.16$$

Donde D_A : Coeficiente de difusión de la especie A.

La descripción de un sistema comienza por la identificación de los fenómenos que tienen lugar, al igual que la selección del evento objeto de estudio y sus variables representativas. Los principios básicos, en donde se fundan los modelos teóricos, corresponden a las leyes de conservación, que a continuación se dan en forma general:

Ecuación de Continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -[\mathbf{v} \cdot \nabla \rho] - \rho(\nabla \cdot \mathbf{v}) \quad 2.17$$

Esta ecuación se deduce de un balance de materia en un elemento estacionario de volumen definido:

$$\left\langle \begin{array}{c} \text{Velocidad de acumulación} \\ \text{de materia} \end{array} \right\rangle = \left\langle \begin{array}{c} \text{Velocidad de entrada} \\ \text{de materia} \end{array} \right\rangle - \left\langle \begin{array}{c} \text{Velocidad de salida} \\ \text{de materia} \end{array} \right\rangle$$

Conservación de la masa para la especie i :

$$\rho \frac{\partial w_i}{\partial t} = -\rho[\mathbf{v} \cdot \nabla w_i] - (\nabla \cdot \mathbf{j}_i) + r_i \quad 2.18$$

Balance de Cantidad de Movimiento

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\rho[\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}] - (\nabla p) - [\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}] + \rho \mathbf{g} \quad 2.19$$

Esta ecuación se deduce de un balance de cantidad de movimiento para un elemento estacionario de volumen definido:

$$\left\langle \begin{array}{l} \text{Velocidad de acumulación} \\ \text{de cantidad de movimiento} \end{array} \right\rangle = \left\langle \begin{array}{l} \text{Velocidad de entrada de} \\ \text{cantidad de movimiento} \end{array} \right\rangle - \left\langle \begin{array}{l} \text{Velocidad de salida de} \\ \text{cantidad de movimiento} \end{array} \right\rangle + \left\langle \begin{array}{l} \text{Suma de las fuerzas que} \\ \text{actúan sobre el sistema} \end{array} \right\rangle$$

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = \text{Velocidad de aumento de cantidad de movimiento.}$$

$$-\rho[\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}] = \text{Velocidad de ganancia de cantidad de movimiento por convección, por unidad de volumen.}$$

$$-(\nabla p) = \text{Fuerza de presión que actúa en el elemento, por unidad de volumen}$$

$$-[\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}] = \text{Velocidad de ganancia de cantidad de movimiento por transporte viscoso, por unidad de volumen.}$$

$$+\rho g = \text{Fuerza gravitacional que actúa sobre el elemento, por unidad de volumen}$$

2.6 TURBULENCIA Y MEZCLADO EN SISTEMAS REACCIONANTES

Para conocer la conversión en un reactor real, en el caso particular de cinéticas de primer orden, sólo es necesaria la *función de Distribución de Tiempos de Residencia* (DTR), y no es importante saber que tan mezcladas están las moléculas circundantes para calcularla. Sin embargo para reacciones de orden mayor es necesario conocer que tan mezcladas se encuentran las moléculas reaccionantes además de la DTR.

El mezclado y su calidad van asociados por la turbulencia, entre mayor turbulencia mayor contacto entre las especies reaccionantes y mayor será la probabilidad de reacción. A escala molecular, el mezclado es un factor directo en el transcurso de una reacción química; además del éxito en la homogenización a escala molecular.

La turbulencia incrementa las tasas de transferencia de calor, masa y cantidad de movimiento, también favorece el mezclado de las especies y es un factor muy importante en el desempeño de las reacciones químicas.

La eficacia de los modelos de turbulencia radica en la optimización de las predicciones teóricas, ya que permite obtener valores de velocidad, concentración y temperatura a diferentes números de Reynolds, que al ser comparados con los valores reales muestran que la aproximación es muy acertada. El estudio y el análisis de la turbulencia son considerados como uno de los más complejos en el campo de la física y la ingeniería.

En este informe se exponen algunos postulados y modelos de la turbulencia y del mezclado, no se resuelve ninguno de ellos pero se incluyen en el trabajo como complemento, abriendo la puerta para la continuación en el diseño computacional de la dinámica de los fluidos, para algún osado estudiante de Ingeniería Química.

2.6.1 Micromezclado

Consiste en la deformación viscoso-convectiva de los elementos del fluido (*Baldyga, J. et al 1995*), seguido por la difusión molecular. Este fenómeno se desarrolla a escala molecular, donde su efecto se ve principalmente en reacciones rápidas e instantáneas, cambiando la conversión y la selectividad tanto en la mezcla reactiva en régimen laminar como en la de flujo turbulento.

En reactores químicos, el micromezclado puede cambiar las propiedades y cualidades de los productos, como en el caso particular de reacciones de polimerización; donde la distribución de los pesos moleculares puede ser controlada con el micromezclado. Las reacciones biológicas, las reacciones con flujo muy viscoso, reacción de formación de óxido nítrico, son ejemplos de reacciones que dependen del mezclado.

2.6.1.1 Límites del Micromezclado

Danckwerts (1995) define los dos límites del micromezclado así:

Segregación Total

Es un flujo donde se forman pequeños grupos de moléculas de igual edad que atraviesan el reactor sin mezclarse; este tipo de fluido es conocido con el nombre de *Macrofluido*. La edad de una partícula es el tiempo que permanece en el reactor.

En un reactor, el tiempo que tarda en efectuarse la mezcla, afecta el tipo de flujo y el grado de segregación afecta esencialmente las características de distribución de producto y por ende el diseño del reactor.

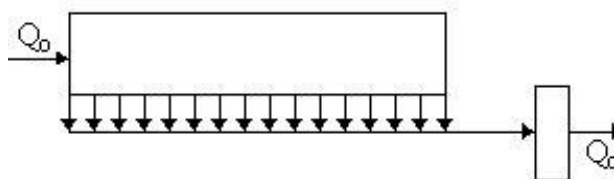


Figura 2.1 Reactor Pistón Completamente Segregado

Máximo Mezclado o Mezclado Total

En este flujo las moléculas se mezclan entre sí desde el ingreso al reactor, sin importar a que grupo de edades correspondan; se mueven libremente, intermezclándose, chocando unas con otras. Este tipo de comportamiento del fluido se conoce con el nombre de *microfluido*.

Se considera un reactor PFR, alimentado en muchos lugares a lo largo de su costado, mezclándose completamente en dirección radial pero no en dirección axial. A diferencia de los modelos de segregación, el mezclado aquí es más temprano, lográndose una condición de mezclado máximo en todos los puntos del reactor.

En la figura 2.2, λ corresponde al tiempo o *edad* que tarda la partícula del fluido en atravesar el reactor.

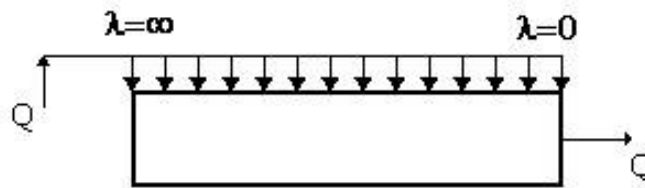


Figura 2.2 Reactor Pistón Mezclado Totalmente

La concentración a la salida para una cinética dada, es representada por la ecuación diferencial de Zwietering según *Nauman (2001)*:

$$\frac{dc}{d\lambda} + \frac{f(\lambda)}{w(\lambda)} [c_{ent} - c(\lambda)] + r_A = 0 \quad 2.20$$

Para garantizar la existencia de un valor finito; la condición de frontera más usual asociada con la ecuación diferencial de Zwietering es:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{dc}{d\lambda} = 0 \quad 2.21$$

Una condición inicial reportada por diferentes autores, para valores muy grandes de λ es:

$$\lambda = 0 \quad \text{entonces} \quad c_{sal} = c_{ent} \quad 2.22$$

Baldyga et al. (1995) consideran el caso de una cinética de reacción de orden n , descrita por r_A :

$$r_A = k_n c^n \quad 2.23$$

Si $n < 1$, el mezclado acelera la reacción.

Si $n = 1$, la reacción no es sensible a diferencias en el nivel de mezclado molecular.

Si $n > 1$, la segregación completa forma el limite superior y el mezclado total forma el limite inferior de la conversión

2.7 TURBULENCIA

Es complicado definir la turbulencia en términos sencillos y por esta razón se plantean algunas definiciones existentes en la bibliografía revisada.

Von Kármán (1937) en Wilcox (2002) definió la turbulencia como:

“...Es un movimiento irregular que generalmente da la apariencia a los fluidos gaseosos y líquidos, cuando fluyen sobre superficies sólidas e incluso cuando corrientes vecinas del mismo fluido pasan unas sobre otras.”

En la década de los 70's Hinze, en su libro *Turbulence*, definió el movimiento turbulento como:

“...es la condición irregular del flujo, en el cual las magnitudes muestran una variación aleatoria, con el tiempo y las coordenadas espaciales, así que los valores medios estadísticos pueden ser discernidos.”

Según Castilla (2001), Lesieur (1997) definen la turbulencia con características concretas del flujo:

1. *“Es impredecible en el sentido de que, dadas unas ciertas condiciones iniciales, es imposible predecir la configuración del flujo en un instante arbitrario posterior.”*
2. *Las magnitudes físicas transportadas por el fluido son mezcladas con mucha o más efectividad que en un flujo laminar, donde esta función quedaría manifestada tan sólo por coeficientes de difusión molecular.*
3. *En el flujo intervienen un gran rango de escalas espaciales.”*

Castilla (2001) plantea la existencia de dos consideraciones que se deben tomar como referencia, en el estudio de la turbulencia bidimensional:

1. La turbulencia bidimensional no es un caso concreto o simplificado de la turbulencia tridimensional. Al no considerar las tres dimensiones, desaparece el término de la vorticidad, esto implica un estudio de fenómenos que no tienen analogía con la turbulencia tridimensional.
2. En el laboratorio no es posible la turbulencia en dos dimensiones, esto sólo se considera en el contexto de simulación matemática, en el diseño o en investigaciones.

Castilla (2001) define la longitud de mezclado, como una estimación de la distancia que ha de recorrer una partícula de fluido en una dirección para que las componentes en esa dirección de su posición y su velocidad pierdan su correlación.

La turbulencia esta dominada por la energía del movimiento caótico; los grandes remolinos son responsables de la difusividad y la tensión (esfuerzo) observada en los flujos turbulentos y no necesariamente dependen de las propiedades locales del fluido.

2.6.1 Teoría de Kolmogorov

Primer Postulado de Kolmogorov

Kolmogorov en investigaciones realizadas en la década de los 40's, consideró como hipótesis fundamental que todo el movimiento a pequeña escala está únicamente y universalmente determinada por la longitud de mezclado (ℓ) y por la energía de disipación. A este rango de escalas se le denomina *Rango de Equilibrio Universal*. Quiere decir que el movimiento es independiente de la dinámica lenta de los grandes remolinos, del flujo medio, y no depende del mecanismo que genera la turbulencia.

Para escalas pequeñas, en comparación con el mecanismo generador de la turbulencia y lejos de los contornos, la turbulencia es *homogénea e isotrópa*. Lo que indica desde un punto de vista estadístico, es que la variación de la velocidad a una distancia ℓ no depende del punto de origen, ni de la orientación de ℓ .

El movimiento a pequeña escala, depende de la energía que suplen los grandes remolinos (ϵ) y la viscosidad cinemática (ν).

$$\epsilon = -\frac{dk}{dt} \quad 2.24$$

Segundo Postulado de Kolmogorov

El segundo postulado de Kolmogorov afirma que para un número de Reynolds lo suficientemente grande, existe un subrango del rango de equilibrio universal, denominado *Subrango Inercial*, donde la única variable significativa es la energía (ϵ).

El subrango inercial está limitado por el tamaño mínimo que pueden tener los remolinos, denominado *Escala de Kolmogorov*.

Por medio de un sencillo análisis dimensional se obtiene:

$$\eta = \frac{\nu^{3/4}}{\epsilon^{1/4}} \quad 2.25$$

$$\tau = \left(\frac{\nu}{\epsilon}\right)^{1/2} \quad 2.26$$

$$u = (\nu\epsilon)^{1/4} \quad 2.27$$

Donde η , τ y u son la longitud, tiempo y velocidad de *escala de Kolmogorov*.

En la literatura (*Wilcox*) se reporta la *Ley -3/5 de Kolmogorov*, la cual es la base teórica en los modelos numéricos de simulación de flujos turbulentos; los más conocidos de ellos son:

- **Simulación Numérica Directa:** resuelven directamente las ecuaciones de Navier Stokes en todas sus escalas presentes en el dominio computacional y es conocida con la sigla inglesa DNS (Direct Numerical Simulation).
- **Simulación de Grandes Remolinos:** Este modelo modifica las ecuaciones de la dinámica de forma que las variables representan el comportamiento del flujo para escalas mayores que la determinada por la discretización del dominio; este procedimiento es generalmente conocido como Large-Eddy Simulation o LES.
- **Generación Estocástica:** esta simulación busca generar flujos turbulentos “artificiales” que posean propiedades estadísticas convenientes, sin resolver las ecuaciones de la dinámica de los fluidos.

2.7.2 Modelos de Turbulencia

Las ecuaciones de Navier Stokes y de Continuidad, son aplicables a flujos turbulentos; es más, si se lograran resolver analíticamente éstas ecuaciones, se obtendrían valores instantáneos de la velocidad y la presión y en el caso de flujo turbulento, las fluctuaciones que se presentan alrededor de sus valores medios serían irrelevantes.

Pero como hasta el momento la Ciencia de las Matemáticas apenas está recorriendo el sendero tortuoso de las Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP), la turbulencia será por ahora *el misterio más grande de la Física Clásica, aún sin resolver*.

Es conveniente desarrollar alternativas para describir el caos reinante en los flujos turbulentos, el análisis estadístico – matemático ha sido la herramienta más importante para aproximar el comportamiento del flujo de fluidos. Uno de los propósitos de los modelos de turbulencia es proveer valores numéricos del esfuerzo de Reynolds en cada punto del flujo. La jerarquía de los modelos de turbulencia suele clasificarlos con relación al costo o esfuerzo computacional. La siguiente clasificación va desde el más simple hasta el más complejo:

1. Modelos de longitud de mezclado: Leyes de potencia y aproximaciones del esfuerzo de Reynolds.
2. Modelos de viscosidad de remolino.
 - 2.1 Modelos de una sola ecuación : Viscosidad de remolino especificada
 - 2.2 Modelos de una sola ecuación: κ o ℓ
 - 2.3 Modelos con dos ecuaciones: Modelo κ - ϵ y sus modificaciones.
3. Modelos de transporte del esfuerzo de Reynolds: modelo algebraico de esfuerzo
4. Modelo de Altos ordenes cerrados (Higher-Orden Closure).
5. Simulación de grandes Remolinos (Large eddy Simulation).
6. Simulación Numérica Directa (Direct Numerical Simulation).
7. Modelos de Generación estocástica.

2.7.2.1 Modelo de Turbulencia κ-ε

Uno de los propósitos de los modelos de turbulencia es proveer valores numéricos del esfuerzo de Reynolds en cada punto del flujo. Los modelos de la turbulencia pueden ser resueltos con técnicas numéricas computacionales, como el CFD (Computational Fluid Dynamics), que permite analizar los resultados finales del comportamiento del flujo, de concentraciones y distribución de la temperatura a lo largo del reactor.

La ecuación general de conservación para una cantidad ϕ expresada por Hjertager et al (2002) es:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i \phi)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right] + S \quad 2.28$$

donde ϕ depende de las coordenadas espaciales y del tiempo. Esta ecuación genera diferentes expresiones de conservación, lo que se debe hacer es remplazar ϕ y Γ_ϕ por las variables apropiadas, tal como aparece resumido en la tabla 2.1.

Tabla 2.1. Expresiones de conservación derivadas de la ecuación 2.28

PARA OBTENER	REEMPLAZAR		
Ecuación de Conservación	Variable ϕ	Difusión Turbulenta Γ_ϕ	Termino De Fuente Generalizado S
Ecuación de Continuidad	1	0	0
Velocidad en Dirección axial	v_z	μ_{eff}	$-\frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_t \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial v_r}{\partial z} \right)$
Velocidad en Dirección Radial	v_r	μ_{eff}	$-\frac{\partial P}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_t \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial v_r}{\partial r} \right) - \frac{2\mu v_r}{r^2}$
Energía Cinética Turbulenta	κ	$\frac{\mu_t}{\sigma_\kappa}$	$G - \rho \epsilon$
Disipación de Energía Cinética turbulenta	ϵ	$\frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon}$	$(C_1 G - C_2 \rho \epsilon) \left(\frac{\epsilon}{\kappa} \right)$
Disipación de Energía cinética turbulenta	ϵ	$\frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon}$	$(C_1 G - C_2 \rho \epsilon) \left(\frac{\epsilon}{\kappa} \right)$

Barkelev et al. (1986) presentan la ecuación 2.28 de la forma siguiente:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v_i \phi) = \nabla \cdot [\Gamma_\phi \nabla \phi] + S \quad 2.29$$

Las ecuaciones de conservación de momento, balance de masa, energía cinética turbulenta, energía cinética de disipación turbulenta; se obtienen al remplazar ϕ por v_i , w_i (fracción masa de la especie i), κ y ϵ respectivamente como lo indica la Tabla 2.1, donde:

$$G = \mu_t \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial v}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{v_r}{r} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial r} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial r} - \frac{v_\theta}{r} \right) + \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial z} \right) \right\} \quad 2.30$$

$$\mu_{\text{eff}} = \mu_1 + \mu_t \quad 2.31$$

$$\mu_t = C_\mu \frac{\rho \kappa^2}{\epsilon} \quad 2.32$$

$$v_t = C_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon} \quad 2.33$$

Donde:

μ_{eff} : viscosidad efectiva

μ_t : viscosidad turbulenta

v_t : viscosidad Cinemática turbulenta

Codina R., et al (1996) proveen una expresión de la longitud característica para el modelo κ - ϵ , remplazando la viscosidad cinemática turbulenta por $\sqrt{\kappa L}$ en la ecuación anterior:

$$L = C_\mu \frac{\kappa^3}{\epsilon} \quad 2.34$$

2.7.2.2 Sistema general de ecuaciones para el modelo κ - ϵ

Viscosidad Cinemática Turbulenta

$$v_t = C_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon} \quad 2.35$$

Energía Cinética Turbulenta

$$\frac{\partial \kappa}{\partial t} + v_j \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} = \tau_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(v + \frac{v_T}{\sigma_\kappa} \right) \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right] - \varepsilon \quad 2.36$$

Energía Cinética de Disipación Turbulenta

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + v_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = C_1 \frac{\varepsilon}{\kappa} \tau_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(v + \frac{v_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] - C_2 \frac{\varepsilon^2}{\kappa} \quad 2.37$$

Los valores de los parámetros empíricos son reportados por diferentes investigadores [Smith, 1997; Hjertager, 2002; Bertrand, 1996; Wilcox, 2002]; pero todos aceptan los valores reportados por Lader y Spalding (1974).

Tabla 2.2. Valores numéricos para las constantes del modelo κ - ε

C_μ	C_1	C_2	σ_κ	σ_ε
0.09	1.44	1.92	1.0	1.3

Condiciones de Frontera

Ekambara y Joshi (2003) presentan unas sencillas condiciones de contorno para el modelo κ - ε :

Condiciones en el centro

$$\frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} = 0 \quad \frac{\partial \kappa}{\partial r} = 0 \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} = 0 \quad 2.38$$

Condiciones en la pared

$$\kappa = 0 \quad \varepsilon = 2\nu \left(\frac{\partial \sqrt{\kappa}}{\partial r} \right) \quad \bar{v}_z = 0 \quad 2.39$$

Condiciones a lo largo del flujo

$$V = V_{\text{entrada}} \quad K = K_{\text{entrada}} \quad \varepsilon = \varepsilon_{\text{entrada}} \quad 2.40$$

2.7.2.3 Efecto de Números de Reynolds Bajos

Es casi inevitable considerar que los modelos de turbulencia fueron desarrollados para números muy grandes de Reynolds. El problema de los modelos anteriores radica en que no son efectivos cerca de la pared, donde se forma una capa límite de flujo; en particular ϵ presenta grandes gradientes en la frontera de la capa siguiente a la pared. Otro punto que se debe tener en cuenta cerca a la pared, es que se requiere alta resolución en la discretización (mallado) de la geometría, lo que indica que los tamaños de paso deben ser muy pequeños.

Por estas razones se ha hecho necesario desarrollar métodos que satisfagan estas necesidades. El *modelo de dos capas* actualmente ha sido estudiado; usa el *modelo $\kappa-\epsilon$* lejos de la pared, mientras la capa viscosa es descrita por el *modelo de una ecuación* donde la longitud de mezclado es dada explícitamente.

El éxito de los modelos de turbulencia $\kappa-\epsilon$ para números de Re bajos, basados en técnicas computacionales de CFD*; puede ser atribuido a :

- La precisión para predecir los perfiles radiales de velocidad media, de la energía cinética turbulenta y la viscosidad de remolino justamente cerca a la pared.
- El modelo $\kappa-\epsilon$ para predecir la difusión turbulenta, puede asumir que la difusión axial y radial son diferentes. El modelo predice satisfactoriamente la difusividad turbulenta radial y los perfiles de velocidad.

El texto recomendado para el estudio detallado de los modelos de turbulencia en este trabajo es el libro de Wilcox. (2002). El autor recopila una gama de modelos teórico-empíricos; analiza y compara cada modelo con técnicas de CFD.

* Computational Fluid Dynamics

TABLA 2.3. NOMENCLATURA

C_i : Concentración molar de la especie i
 C_p : Capacidad específica de calor
 ΔC_A : Diferencia entre la concentración de superficie límite y la concentración media de la corriente de fluido de A en difusión.
 D_{AB} : Coeficiente de difusión de A en B
F: Flujo molar de la especie i
 F_{i0} : Flujo molar de entrada de la especie i
g: Vector gravitacional
G: Energía libre de Gibbs
 j_i^x : Densidad de flujo de materia de la especie i.
 j_i^c : Difusión de concentración
 j_i^p : Difusión de presión
 j_i^s : Difusión forzada
 j_i^T : Difusión térmica
L: Longitud
 M_i : Peso molecular del elemento i
 N_A : Rapidez de transferencia de masa molar de la especie A.
p: presión
Q: Flujo volumétrico
 r_A : Velocidad de aparición de A
r: Posición radial
 r_i : Término de rapidez de producción de masa i dentro del volumen de control
R: radio del cilindro
 \mathcal{R} : Constante universal de los gases
S: Selectividad
t: Tiempo.
 ΔT : Diferencia de temperatura entre la superficie y el fluido

Continuación

U: Energía interna

v: Vector de velocidad

v_z : Componente de la velocidad en la coordenada z

U_z : Velocidad promedio

V: Volumen del reactor

X: conversión

Z: Posición axial

ϕ : Rendimiento fraccional

∇ : Gradiente. u operador

∇^2 : Laplaciano

λ : Conductividad térmica.

λ : Edad de una partícula en flujo

ρ : Densidad.

ρ : Concentración de masa para la especie i

ψ : Concentración adimensional

τ : Tensor de esfuerzo cortante

ω : Fracción másica de la especie i.

α : Difusividad térmica



CAPÍTULO 3

MODELO MATEMÁTICO BIDIMENSIONAL DEL REACTOR TUBULAR

En este capítulo se tratará en detalle el modelo matemático para representar un reactor tubular isotérmico donde una o varias reacciones homogéneas toman lugar. El desarrollo se hará para fluidos incompresibles; se iniciará con las ecuaciones generales de balance (materia y cantidad de movimiento) puestas en forma diferencial; se procederá después a simplificarlas para obtener el caso que nos compete: el reactor bidimensional con dispersión radial. Para alcanzar tal punto del análisis iniciaremos con una introducción que tiene por objeto poner en contexto los conocimientos que se tratarán.

Los reactores tubulares, para el caso de reacciones en fase líquida, son muy adecuados en casos donde se requieran sistemas eficientes para la remoción o adición de calor, lo cual es posible debido a la gran superficie disponible para el intercambio de este. Tal es el caso de las reacciones de polimerización donde se ha demostrado que un sistema tubular es más eficiente para la remoción del calor generado. También resultan adecuados para procesos donde las velocidades de reacción son altas, lo cual implica cortos tiempos de residencia.

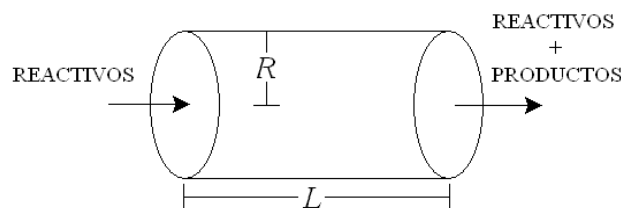
Generalmente, a nivel industrial, los reactores tubulares son ampliamente empleados para reacciones en fase gaseosa, homogéneas o heterogéneas catalíticas (empacados). Desde el punto de vista del modelamiento riguroso y la solución del modelo matemático, un sistema de flujo gaseoso resulta ser más complejo que su homólogo incompresible. La razón para esto es que las ecuaciones de balance deben acoplarse con una ecuación de estado para describir la variación de la densidad en términos de la presión y la composición de la mezcla. Por el contrario si el fluido es incompresible el balance de cantidad de movimiento se reduce a la clásica ecuación de Navier – Stokes, donde se parte de un conocimiento de la densidad y del supuesto de su homogeneidad en el sistema; adicionalmente, la condición de incompresibilidad permite desacoplar (resolver secuencialmente) el balance de cantidad de movimiento y las ecuaciones de conservación para las especies. La importancia del estudio del modelo para un fluido incompresible y su solución radica en ser el primer paso hacia la

consideración de sistemas más complejos. Además no es de descartar la posibilidad de la importancia práctica de estos conocimientos básicos en sistemas reales. A nivel académico resultan de gran interés las conclusiones que se puedan obtener del estudio de este tipo de sistemas porque establecen las bases de la construcción teórica del conocimiento sobre los reactores reales.

Uno de los primeros artículos con una descripción no ideal del flujo en tubos el de *Levenspiel y Smith (1957)*, en el cual se propone un modelo simple para la dispersión axial y se desarrolla un método experimental para la determinación del coeficiente de dispersión. *McLaughlin et al (1986)* estudiaron el efecto de la velocidad radial sobre la conversión de la reacción y demostraron que al despreciar la componente radial de la velocidad se puede introducir un error significativo en los balances de masa y calor para las reacciones de polimerización. *Liu y Barkelaw (1986)* estudiaron un reactor de chorro no isotérmico con densidad constante y emplearon el modelo *k-e* (ver capítulo 2) de turbulencia. *Hjertager et al (2002)* estudiaron un reactor bidimensional en fase líquida donde ocurre una reacción de neutralización ácido base, con un esquema similar al de *Liu y Barkelaw (1986)*, pero con un modelo más sofisticado para describir la turbulencia y la reacción química. *Jakobsen et al (2002)* estudiaron una reacción en fase gaseosa en un reactor empacado y compararon las simulaciones entre los casos unidimensional y bidimensional, mostrando que para la producción de gas de síntesis las variaciones radiales de la composición y la temperatura son despreciables.

3.1 DESCRIPCIÓN DEL SISTEMA FISICO

El reactor tubular, se compone de un cilindro recto de base circular colocado horizontalmente, en el que las dimensiones se encuentran definidas por la longitud y el radio. La mezcla de reactivos ingresa de dirección axial por una de las bases, mientras que por la otra base se obtiene una mezcla de reactivos y productos.



Con el propósito de obtener un sistema de ecuaciones con un nivel de complejidad media, se imponen las siguientes restricciones:

- El sistema se encuentra en estado estable (No hay variaciones con el tiempo)
- No existen cambios en la dirección angular (Modelo bidimensional)
- No se toman en cuenta los efectos caloríficos (Sistema isotérmico)

- El esquema es de una sola reacción
- No hay dispersión o difusión en el sentido axial
- Se considera flujo incompresible
- El régimen de flujo es laminar

Estas consideraciones permiten que se pueda desacoplar el balance de cantidad de movimiento con el de materia y realizar así una solución secuencial del modelo.

3.2 BALANCE PARA LA CANTIDAD DE MOVIMIENTO

3.2.1 Modelo Para Flujo No Desarrollado

El balance para la cantidad de movimiento para un fluido newtoniano cuando la densidad y la viscosidad permanecen constantes, se conocen como las ecuaciones de Navier-Stokes:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \rho \mathbf{g} \quad 3.1$$

Junto con la ecuación de continuidad:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad 3.2$$

Efectuando el desarrollo para cada las coordenadas radiales en el esquema bidimensional resulta:

$$\frac{\partial v_z}{\partial t} = -v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} - v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\mu}{\rho} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right] \quad 3.3$$

$$\frac{\partial v_r}{\partial t} = -v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} - v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\mu}{\rho} \left[-\frac{v_r}{r^2} \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{\partial^2 v_r}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} \right] \quad 3.4$$

$$\frac{v_r}{r} + \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad 3.5$$

Las condiciones de frontera se pueden plantear en términos de la velocidad, presión o una combinación de ambas:

Las condiciones para la velocidad:

Entrada: $v_z = f(r)$ 3.6

Salida: $\frac{\partial v_z}{\partial z} = 0$

Centro: $v_z = 0$, $v_r = 0$

Pared: $\frac{\partial v_z}{\partial r} = 0$, $v_r = 0$

Condiciones para la presión:

Entrada: $p = fe(r)$ 3.7

Salida: $p = fs(r)$

Centro: $\frac{\partial p}{\partial r} = 0$

Pared: $\frac{\partial p}{\partial r} = 0$



3.2.2 Modelo Para Flujo Desarrollado

La condición de que el fluido no experimenta cambios en la dirección z, lleva a una solución analítica para la velocidad, conocida como el perfil parabólico de velocidades:

$$v_z(r) = 2u \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right) \quad 3.8$$

En donde u es la velocidad media de flujo.

3.3 BALANCE PARA LA TRANSFERENCIA DE MASA

El planteamiento de las ecuaciones que describen la conservación de la materia, tanto para la masa global como para las sustancias, se puede realizar de dos maneras, en términos de concentraciones molares o de concentraciones másicas, pero por razones de interdependencia con la velocidad del balance de cantidad de movimiento es preferible su expresión en unidades másicas.

3.3.1 Balance Global De Masa

El balance para la densidad total sobre un punto se escribe:

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} + \nabla \cdot (v \rho_t) = 0 \quad 3.9$$

3.3.2 Balance Diferencial Para Las Especies Químicas

Es necesario realizar el planteamiento de la conservación para cada una de las s de sustancias presentes en el esquema de reacción.

El balance diferencial de masa para la especie i se expresa como:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot n_i = r_i \quad 3.10$$

Siendo v_i la velocidad de la especie i en una dirección dada, se define flujo másico para la especie con respecto de lo ejes estacionarios como:

$$n_i = \rho_i v_i \quad 3.11$$

Introduciendo la definición del flujo difusivo másico para la especie i con respecto de la velocidad media másica

$$j_i = \rho_i (v_i - v) \quad 3.12$$

En donde la velocidad media másica es el promedio ponderado con las fracciones másicas, que corresponde a la velocidad planteada en el balance para la cantidad de movimiento:

$$v = \sum_{i=1}^s w_i v_i \quad 3.13$$

pudiéndose notar que la suma de los flujos difusivos para las especies en cualquier posición es:

$$\sum_{i=1}^s j_i = 0 \quad 3.14$$

Utilizando la definición del flujo difusivo en el balance para la especie i resulta:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i v) + \nabla \cdot (j_i) = r_i \quad 3.15$$

En esta ecuación se conoce $\nabla \cdot (\rho_i \mathbf{v})$ como el término convectivo, y $\nabla \cdot (\mathbf{j}_i)$ como el término difusivo. Desarrollando el término difusivo nos queda:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \rho_i (\nabla \cdot \mathbf{v}) + \mathbf{v} \cdot (\nabla \rho_i) + \nabla \cdot (\mathbf{j}_i) = r_i \quad 3.16$$

En el caso de que el fluido es incompresible ($\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$), y despejando la derivada respecto del tiempo se llega a:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\mathbf{v} \cdot (\nabla \rho_i) - \nabla \cdot (\mathbf{j}_i) + r_i \quad 3.17$$

En correspondencia con el principio de conservación de la materia, debe cumplirse que

$$\sum_{i=1}^s r_i = 0 \quad 3.18$$

$$\sum_{i=1}^s \rho_i = \rho_t \quad 3.19$$

Al desarrollar el balance para la especie i en las coordenadas cilíndricas en el espacio bidimensional:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -v_r \frac{\partial \rho_i}{\partial r} - v_z \frac{\partial \rho_i}{\partial z} - \left(\frac{j_i^r}{r} + \frac{\partial j_i^r}{\partial r} + \frac{\partial j_i^z}{\partial z} \right) + r_i \quad 3.20$$

3.3.3 Modelo de Transferencia de Masa sin Dispersión Axial

Para un modelo donde no se tome en cuenta la dispersión axial (o el flujo másico difusivo axial se considere despreciable) y que se encuentre en estado estable, se puede despejar la derivada de la concentración másica respecto de z :

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial z} = \frac{1}{v_z} \left(-v_r \frac{\partial \rho_i}{\partial r} - \left(\frac{j_i^r}{r} + \frac{\partial j_i^r}{\partial r} \right) + r_i \right) \quad 3.21$$

Las condiciones de frontera necesarias para la solución de este modelo, se formulan expresando que en el centro del tubo existe simetría para las variables y que no hay flujo de materia a través de la pared, además de conocer el perfil de concentraciones en la entrada:

Entrada: $\rho_i = f(r)$ 3.22

Centro: $j_i^r = 0$, $\frac{\partial \rho_i}{\partial r} = 0$

Pared: $j_i^r = 0$, $\frac{\partial \rho_i}{\partial r} = 0$

3.4 DESCRIPCIÓN DEL FLUJO DIFUSIVO

La correcta descripción del término difusivo, es uno de los temas más estudiados en el campo de los fenómenos de transferencia. Entre las formulaciones más utilizadas se encuentran la ecuación de Stefan-Maxwell y la ley de Fick.

3.4.1 Ecuación de Stefan-Maxwell para la Difusión Multicomponente

Las relaciones desarrolladas por Josef Stefan y James Clerk Maxwell (*Taylor y Krishna 1993*), acoplan de forma implícita las velocidades para las especies con la fuerza guía para la difusión:

$$d_i = -\sum_{j=1}^s \frac{x_i x_j (v_i - v_j)}{D_{ij}} \quad 3.23$$

En donde D_{ij} es la difusividad de Stefan-Maxwell para el par de sustancias i y j , que posee la propiedad de simetría $D_{ij} = D_{ji}$. Mientras que d_i es la fuerza guía para el componente i en la misma dirección para J_i .

Bajo la consideración de que la difusión solo se debe a la existencia del gradiente de la fracción molar, la ecuación se reduce a:

$$\nabla_{x_i} = -\sum_{j=1}^s \frac{x_i x_j (v_i - v_j)}{D_{ij}} \quad 3.24$$

Esta consideración pone de manifiesto el hecho de que esta ecuación solo es aplicable a $s-1$ sustancias, pues debido a que las fracciones molares suman uno, se cumple que:

$$\sum_{i=1}^s \nabla_{x_i} = 0 \quad 3.25$$

Un inconveniente de esta teoría es que fue inicialmente planteada en términos de flujos y fracciones molares, por tanto es necesario realizar su transformación a unidades másicas

para fácil implementación en el balance para las especies. Partiendo del cálculo de las fracciones másicas a partir de las fracciones molares:

$$w_i = \frac{x_i M_i}{\sum_{i=1}^s x_i M_i} = \frac{x_i M_i}{M_t} \quad 3.26$$

Se obtiene la relación entre los gradientes másico y molar para el componente i:

$$\nabla w_i = \frac{M_i}{M_t} \nabla X_i - \frac{w_i}{M_t} \sum_{k=1}^s M_k \nabla X_k \quad 3.27$$

realizando la conversión de las velocidades para las especies a flujos difusivos másicos ecuación 3.12, la ecuación de Stefan-Maxwell 3.24 queda escrita como:

$$\nabla X_i = \frac{M_t^2}{\rho_t} \sum_{i=1}^s \left(\frac{w_i j_i}{M_i M_j D_{ij}} - \frac{w_j j_i}{M_j M_i D_{ij}} \right) \quad 3.28$$

3.4.2 La Ley de Fick

En el caso particular de que se tenga una mezcla constituida solo por dos sustancias, las ecuaciones de Stefan-Maxwell se reducen a la clásica ley de Fick:

$$j_i = -\rho_t D_{ij} \nabla w_i \quad 3.29$$

que al contrario de Stefan-Maxwell, tiene la ventaja de ser un planteamiento explícito para los flujos difusivos y que no depende del gradiente de la otra sustancia.

TABLA 3.1 NOMENCLATURA

C_i : Concentración molar de la especie i
 C_p : Capacidad específica de calor
 D_{AB} : Coeficiente de difusión de A en B
F: Flujo molar de la especie i
 F_{i0} : Flujo molar de entrada de la especie i
 g : Vector gravitacional
G: Energía libre de Gibbs
L: Longitud
 M_i : Peso molecular del elemento i
 N_A : Rapidez de transferencia de masa molar de la especie A.
p: presión
Q: Flujo volumétrico
 r_A : Velocidad de aparición de A
r: Posición radial
 r_i : Término de rapidez de producción de masa i dentro del volumen de control
R: radio del cilindro
S: Selectividad
t: Tiempo.
v: Vector de velocidad
 v_z : Componente de la velocidad en la coordenada z
 U_z : Velocidad promedio
V: Volumen del reactor
X: conversión
Z: Posición axial
 ∇ : Gradiente. u operador
 ∇^2 : Laplaciano
 λ : Conductividad térmica.
 λ : Edad de una partícula en flujo
 ρ : Densidad.
 ρ : Concentración de masa para la especie i
 ψ : Concentración adimensional
 τ : Tensor de esfuerzo cortante
 ω : Fracción másica de la especie i.
 α : Difusividad térmica

CAPITULO 4

ESTRATEGIA DE SOLUCIÓN NUMÉRICA DEL MODELO MATEMÁTICO

En el presente capítulo se describen brevemente los algoritmos utilizados en la solución numérica de los modelos deducidos en el capítulo anterior. En cada uno de los modelos se resumen las ecuaciones que lo componen, se explican los procedimientos para su discretización y se numeran los pasos que componen el algoritmo. Se comienza por la exposición de la estrategia en el modelo para el balance de cantidad de movimiento, seguido de la descripción de las estrategias para la transferencia de masa, en los casos de mezcla multicomponente y mezcla binaria, mostrando los resultados obtenidos para valores definidos en las constantes de las ecuaciones.

Las ecuaciones de Navier-Stokes, gracias a su mediano nivel de complejidad, son muy utilizadas en gran cantidad de modelamientos, sobre todo en situaciones de flujo sobre superficies libres y en el campo de la aerodinámica. Pero los problemas en los que el fluido se encuentra limitado por paredes, no son claramente comentados en la literatura. En general, muchos investigadores han tratado de plantear métodos genéricos que puedan resultar aplicables en varios casos. Entre estos se encuentran los métodos de proyección, descritos por *Peyret (1983)* en detalle por *Brown et al (2001)*, en el que la discretización utilizada logra que no sea necesaria una solución simultánea para la velocidad y la presión, sino que se hace secuencialmente, el inconveniente que surge es que es necesario conocer la velocidad en las fronteras del sistema, lo que lo hace poco atractivo para el caso de flujo en el interior de tubos. *Mercado et al (2001)*, resuelve el flujo en un tubo en el que existe transferencia de calor a través de la pared, asumiendo que el fluido se encuentra desarrollado y acoplado la ecuación con el balance de energía, pero en la situación en que la temperatura fuera constante a lo largo del tubo, la solución para la velocidad se reduce al perfil parabólico de velocidad.

En cuanto a los modelos para la transferencia de masa, *Oran (2001)* propone una estrategia de solución basada en la dinámica del sistema, pero no hace comentarios respecto de las condiciones de frontera, ni son claros los procedimientos para garantizar la conservación de la masa en el sistema, al igual que tampoco hace comentarios sobre las ecuaciones utilizadas para la difusión multicomponente. *Amundson et al (1998)* describe un método para resolver un sistema de reacción con difusión aplicando la ecuación de Stefan-Maxwell, el inconveniente es que se aplica en una situación donde no existe flujo, aparte de que hay claridad sobre el procedimiento para efectuar la discretización.

4.1 SOLUCIÓN DEL BALANCE PARA LA CANTIDAD DE MOVIMIENTO

4.1.1 Solución del modelo para flujo no desarrollado

Bajo el supuesto de que la caída de presión en la longitud tiene una tendencia lineal, y que su variación radial se considera despreciable, se puede reducir notablemente el nivel de complejidad en el planteamiento:

$$\frac{\partial v_z}{\partial t} = -v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} - v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} - \frac{1}{\rho} \frac{\Delta p}{L} + \frac{\mu}{\rho} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right] \quad 4.1$$

$$\frac{\partial v_r}{\partial t} = -v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} - v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} + \frac{\mu}{\rho} \left[-\frac{v_r}{r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{\partial^2 v_r}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} \right] \quad 4.2$$

La discretización de las derivadas respecto al tiempo de manera explícita, permite obtener los valores de las velocidades en su progresión a través del tiempo hasta que se llegue al estado estable.

Los perfiles de velocidad obtenidos que se obtienen no distan mucho del perfil parabólico de velocidad correspondiente al caso para flujo de flujo desarrollado. Lo que nos hace concluir que para una geometría de flujo tan sencilla no se justifica una solución rigurosa del balance de cantidad de movimiento.

4.2 SOLUCIÓN DEL BALANCE PARA LA TRANSFERENCIA DE MASA

4.2.1 Solución del modelo para una mezcla multicomponente

El modelo matemático para un esquema de reacción donde intervengan más de dos sustancias, exige la solución simultánea del balance para las especies químicas en conjunto con la relación de Stefan-Maxwell, para cada una de las s especies:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial z} = \frac{1}{v_z} \left(-v_r \frac{\partial \rho_i}{\partial r} - \left(\frac{j_i^r}{r} + \frac{\partial j_i^r}{\partial r} \right) + r_i \right) \quad 4.3$$

$$\frac{\partial w_i}{\partial z} = \frac{M_i}{Mt} \frac{\partial x_i}{\partial z} - \frac{w_i}{Mt} \sum_{k=1}^s M_k \frac{\partial x_i}{\partial z} \quad 4.4$$

$$\frac{\partial w_i}{\partial r} = \frac{M_i}{Mt} \frac{\partial x_i}{\partial r} - \frac{w_i}{Mt} \sum_{k=1}^s M_k \frac{\partial x_i}{\partial r} \quad 4.5$$

$$\frac{\partial x_i}{\partial z} = \frac{Mt^2}{\rho_t} \sum_{i=1}^s \left(\frac{w_i j_j^z}{M_i M_j D_{ij}} - \frac{w_j j_i^z}{M_j M_i D_{ij}} \right) \quad 4.6$$

$$\frac{\partial x_i}{\partial r} = \frac{Mt^2}{\rho_t} \sum_{i=1}^s \left(\frac{w_i j_j^r}{M_i M_j D_{ij}} - \frac{w_j j_i^r}{M_j M_i D_{ij}} \right) \quad 4.7$$

$$\sum_{i=1}^s \rho_i = \rho_t \quad 4.8$$

sujetas a las condiciones:

$$\text{Entrada: } \rho_i = \text{fc}(r) \quad 4.9$$

$$\text{Centro: } j_i^r = 0, \quad \frac{\partial \rho_i}{\partial r} = 0$$

$$\text{Pared: } j_i^r = 0, \quad \frac{\partial \rho_i}{\partial r} = 0$$

4.2.1.1 Discretización

El planteamiento explícito de la derivada en z en el balance de las especies 4.3 , hace que pueda calcular los valores de las concentraciones en la siguiente posición de z a partir de los valores de las variables en el punto anterior.

Para las condiciones de frontera en el centro y la pared, se utiliza una discretización de primer orden para las derivadas las derivadas. Todas las demás derivadas se discretizan utilizando diferencias finitas hacia atrás de primer orden.

El tamaño de paso para z debe ser lo suficientemente pequeño para garantizar la estabilidad en la solución.

4.2.1.2 Algoritmo

1. Teniendo el perfil de concentraciones en la entrada del reactor, se calcula j_i
2. Se calculan las concentraciones en el siguiente paso de z , aplicando el balance para las especies 4.3
3. Se obtienen los j_i correspondientes a las concentraciones calculadas para el siguiente paso, resolviendo el conjunto
4. Se regresa al paso numero dos hasta que se llegue a la longitud especificada del reactor

4.2.1.3 Ejemplo:

Se propone un esquema de reacción con dos reactivos y dos productos:



Con una cinética de reacción definida por:

$$r_i = E_i M_i \left(K_d \frac{\rho_A \rho_B}{M_A M_B} - K_r \frac{\rho_C \rho_D}{M_C M_D} \right) \quad 4.10$$

Especificando los siguientes valores para las difusividades binarias:

$$D_{AB} = 1e-7, D_{AC} = 2e-7, D_{AD} = 5e-7, D_{BC} = 2e-7, D_{BD} = 4e-7, D_{CD} = 3e-7,$$

Fijando los siguientes valores:

	A	B	C	D
Coefficiente estequiométrico E_i	-1	-1	1	1
Peso molecular M_i (kg/kgmol)	2	3	3	2
Concentración de entrada (kg/m ³)	2	3	3	2

Tabla 4.1

Parámetro	Valor
Longitud (m)	1
Radio (m)	0.1
Velocidad media (m/s)	10
Constante cinética Kd (m ³ /kgmol s)	10
Constante cinética Kd (m ³ /kgmol s)	1e-5

Asumiendo que el fluido obedece a un perfil parabólico de velocidad, el resultado de la integración arroja la distribución de concentraciones para las cuatro especies en el espacio del reactor $\rho_i = f(r,z)$. Para facilitar el análisis de los resultados, se calcula la concentración media (o de mezcla) en cada posición de z, que corresponde a la concentración que resulta de mezclar el todo fluido que pasa por esa posición de z:

$$\bar{\rho}_i = \frac{\int_0^R 2\pi r v_z \rho_i dr}{\int_0^R 2\pi r v_z dr}$$

4.11

Los resultados de concentración media se muestran en la figura:

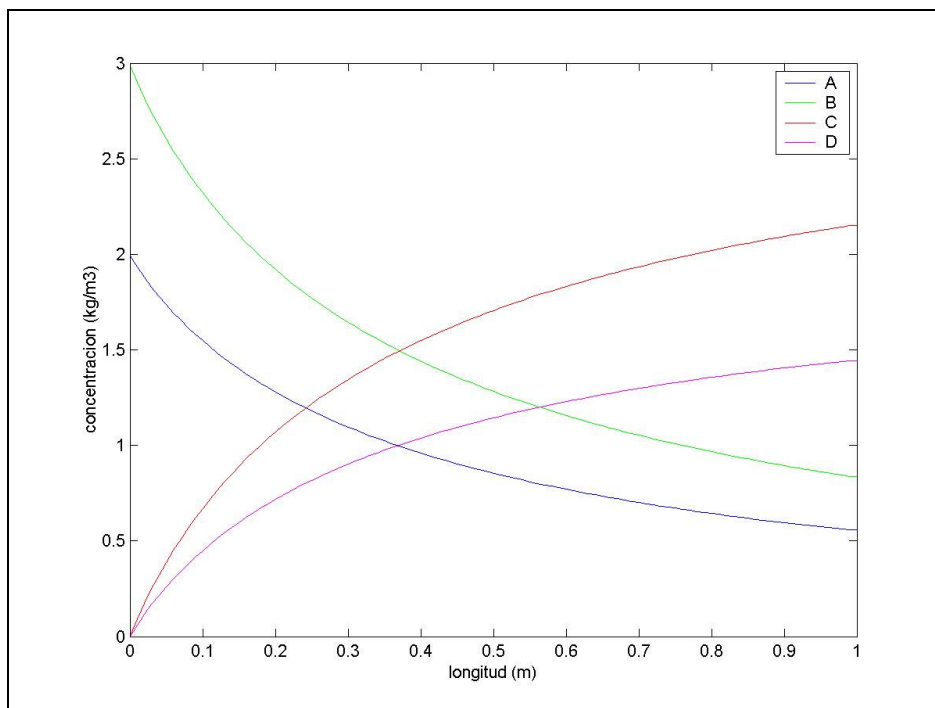


Figura 4.1 Concentración media de las sustancias a lo largo del reactor

La solución del modelo para una mezcla multicomponente resulta problemático para valores grandes de las difusividades, pues la estequiometría de la reacción deja de conservarse para las concentraciones medias de las sustancias, arrojando así valores sin sentido físico, o que no se pueden explicar a través del hecho de que unas sustancias se transforman en otras. Esto da la impresión de que fuera necesario implementar algún esquema de corrección para las concentraciones a medida que se realiza la integración.

4.2.2 Solución del modelo para una mezcla binaria

El balance para la especie i , utilizando la ley de Fick, queda expresado

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial z} = \frac{1}{v_z} \left(-v_r \frac{\partial \rho_i}{\partial r} - D_{ij} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \rho_i}{\partial r} + \frac{\partial^2 \rho_i}{\partial r^2} \right) + r_i \right) \quad 4.12$$

sujeta a las condiciones:

$$\text{Entrada: } \rho_i = f_c(r) \quad 4.13$$

$$\text{Centro: } \frac{\partial \rho_i}{\partial r} = 0$$

$$\text{Pared: } \frac{\partial \rho_i}{\partial r} = 0$$

Gracias a que el balance para la especie i no depende las concentraciones de la otra especie, solo es necesario resolver la ecuación para el reactivo.

4.2.2.1 Discretización

Al igual que en el modelo para la mezcla multicomponente, se realiza un planteamiento explícito de la derivada en z en el balance de las especies 4.12 .

Las condiciones de frontera en el centro y la pared, se utiliza una discretización de primer orden para las derivadas las derivadas. Mientras que las otras derivadas se discretizan utilizando diferencias finitas centradas de primer orden.

El tamaño de paso para z debe ser lo suficientemente pequeño para garantizar la estabilidad en la solución.

El algoritmo resultante es mucho más simple que el que resulta para el caso multicomponente.

4.2.2.2 Algoritmo

1. Se tiene el perfil de concentraciones en la entrada del reactor
2. Se calculan las concentraciones en el siguiente paso de z , aplicando el balance para las especies 4.12
3. Se regresa al paso numero dos hasta que se llegue a la longitud especificada del reactor

4.2.2.3 Ejemplo:

Para una esquema de una reacción monomolecular:



Expresando la cinética de la reacción de primer orden:

$$r_i = E_i K \rho_i \quad 4.14$$

Se dan los siguientes valores a los parámetros del modelo:

Tabla 4.2

Parámetro		Valor
Concentración inicial	(kg/m ³)	5
Longitud	(m)	2
Radio	(m)	0.1
Velocidad media	(m/s)	10
Difusividad	(m ² /s)	3e-5
Constante cinética K	(1/s)	10

La distribución de la concentración del reactivo a lo largo de longitud y el radio, se muestra en la siguiente gráfica

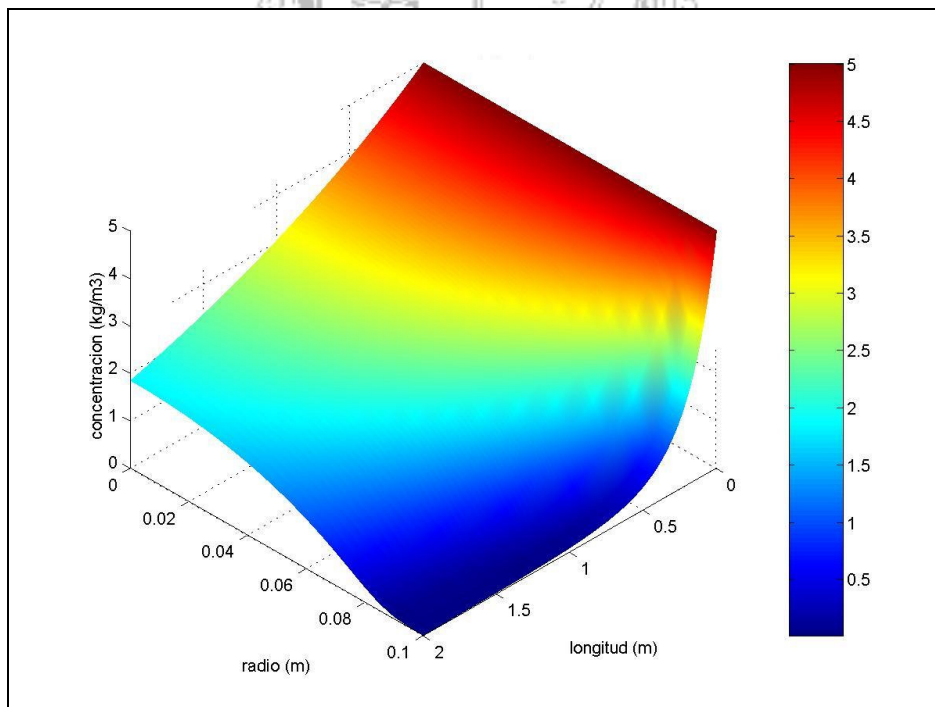


Figura 4.2 Concentración del reactivo en el volumen del reactor

Aquí se puede notar que existe una variación radial apreciable para el reactivo, disminuyendo su concentración en cercanías de la pared, lo cual se debe a que las bajas velocidades en este sector proporcionan un tiempo de residencia en el reactor mayor que el que posee el fluido que se desplaza por el centro del tubo.

4.2.2.4 Estudio del orden de la cinética de reacción

Como es sabido, la reacción $A \rightarrow B$, no implica una cinética de primer orden y resulta entonces interesante observar la influencia del orden de la reacción en la conversión alcanzada. La figura 4.3 es una cuantificación de esta idea; en ella se han superpuesto las graficas de la concentración de salida contra la constante de velocidad para las cinéticas de orden cero, uno y dos.

Tabla 4.3

Parámetro		Valor
Concentración inicial	(kg/m ³)	5
Longitud	(m)	2
Radio	(m)	0.1
Velocidad media	(m/s)	10
Difusividad	(m ² /s)	3e-5

La tabla 4.3 da la información de entrada para la solución del problema. Se pueden observar varios aspectos: para bajas constantes de velocidad la concentración de salida es más baja (por lo tanto la conversión es más alta) para la reacción de orden dos y es posible afirmar para tales casos que, el incremento del orden de reacción aumenta la conversión. Las cinéticas de orden dos y uno, dan la misma solución para una constante de velocidad de aproximadamente 20, lo cual resulta muy interesante, porque indica que la conversión de salida es independiente del orden en ese punto. Lo mismo ocurre cuando la curva es la correspondiente a la cinética de orden cero; corta las otras dos a una constante de velocidad de aproximadamente 25.

Para altas constantes de velocidad el sentido de la conversión se invierte, y la conversión más alta se obtiene para cinéticas de orden cero, siguiendo en orden decreciente la de orden uno y la de orden dos.

Finalmente, como la constante de velocidad depende principalmente de la temperatura, la figura 4.3 ilustra en forma indirecta la influencia de esta sobre la conversión y podría en principio, emplearse para establecer la influencia de la temperatura.

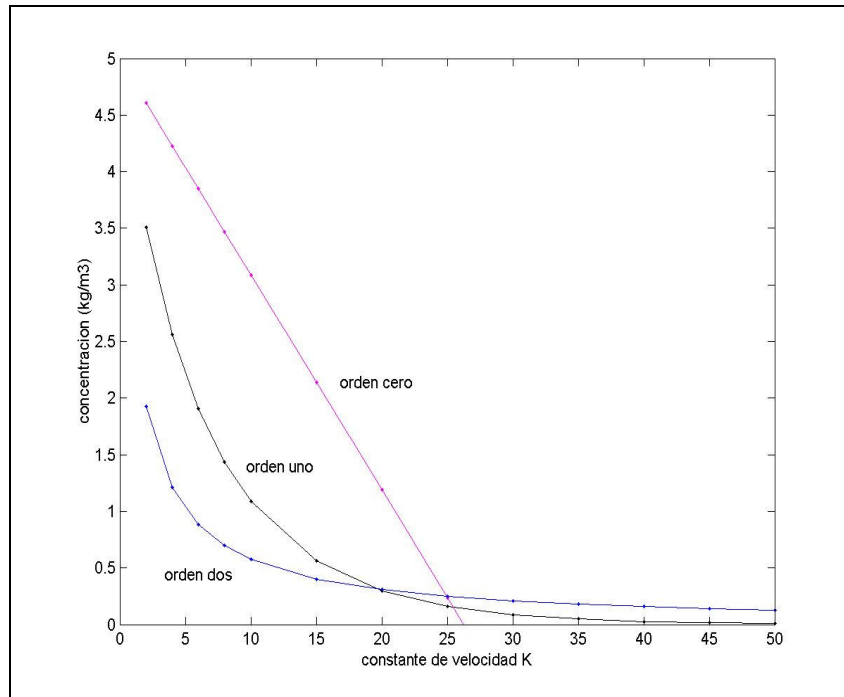


Figura 4.3. Concentración de mezcla del reactivo a la salida del reactor contra la constante de velocidad

4.2.2.5 Influencia de la difusividad en la conversión química

Las dos contribuciones fundamentales al transporte de materia son la convección y la difusión. La inclusión de esta última (la dispersión) en el modelo de un reactor es la primera consideración de no idealidad. Desde el punto de vista de la difusión, los dos extremos de los modelos de un reactor (ambos ideales) son el de Difusividad cero y el de Difusividad infinita (flujo pistón). La solución de los modelos de los reactores reales deben encontrarse en el interior de la región delimitada por estos dos extremos (Nauman, 2001).

Las soluciones de los modelos rigurosos son generalmente comparadas con el reactor de flujo pistón y como este no presenta variaciones radiales de concentración siempre encuentran grandes diferencias entre uno y el otro. Sin embargo, una comparación más adecuada debe incluir el reactor de difusividad cero.

Una gráfica de la concentración de salida de un reactivo (o de un producto) contra la Difusividad, establece todas las posibilidades de distribución de productos en un reactor de dimensiones dadas. La figura 4.4 es un ejemplo de ello para las condiciones especificadas en la tabla 4.4.

Tabla 4.4.

Parámetro		Valor
Concentración inicial	(kg/m ³)	5
Longitud	(m)	2
Radio	(m)	0.1
Velocidad media	(m/s)	10
Constante cinética	(1/s)	10

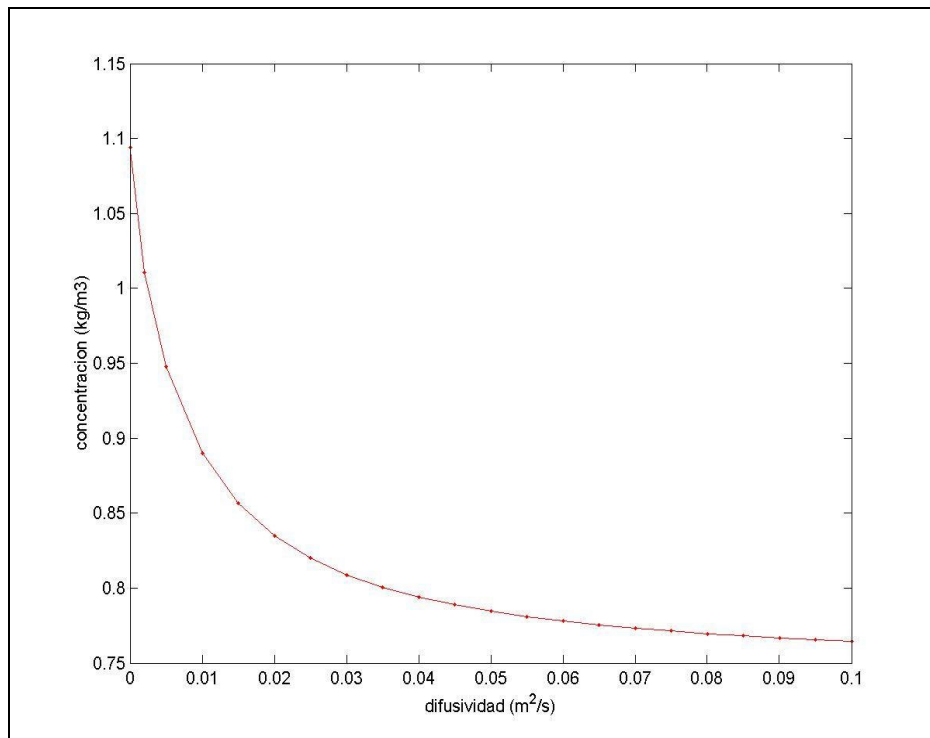


Figura 4.4. Concentración de salida del reactor contra la difusividad

En todos los casos las ordenadas corresponden a las concentraciones de mezcla a la salida del reactor. Como era de esperarse, la figura 4.4 muestra un aumento de la conversión con el aumento de la Difusividad, lo cual significa una progresión desde el reactor de Difusividad cero hacia el reactor de flujo pistón, o lo que es lo mismo, un aumento del mezclado radial.

La tabla 4.5 especifica un ejemplo, cuyo propósito es indicar la forma de comparación apropiada entre los modelos ideales extremos y el modelo no ideal.

Tabla 4.5.

Parámetro		Valor
Concentración inicial	(kg/m ³)	5
Longitud	(m)	2
Flujo volumétrico	(m ³ /s)	0.1
Difusividad	(m ² /s)	0.1
Constante cinética	(1/s)	10

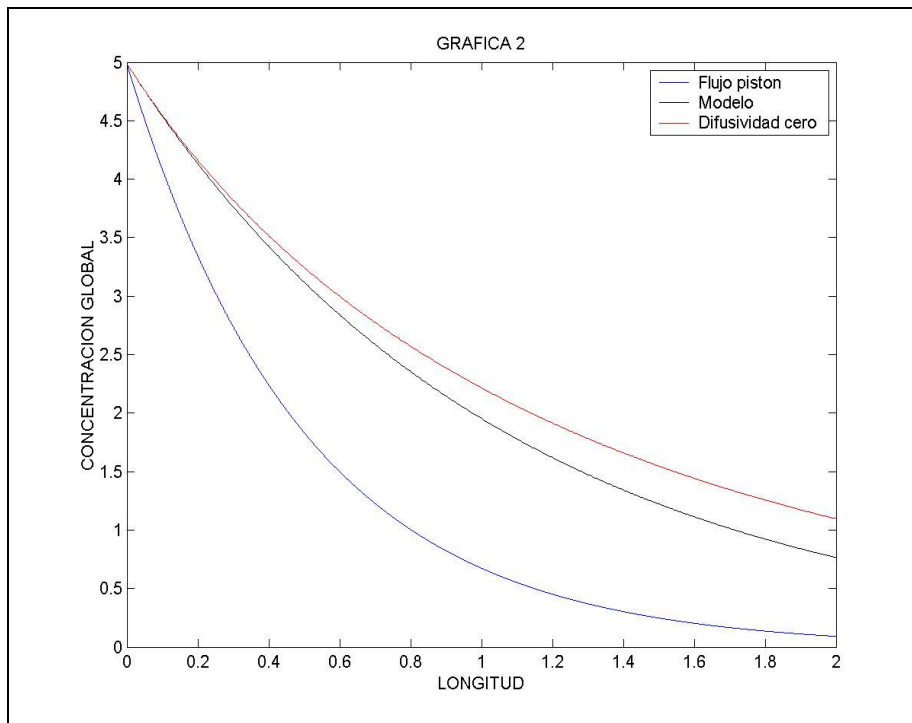


Figura 4.5. Comparación de la concentración de salida para los tres tipos de reactores

CAPITULO 5

EFECTO DE LOS PARÁMETROS EN LA SOLUCIÓN DEL MODELO

Uno de los conceptos más importantes durante el diseño de un proceso o en el dimensionamiento de un equipo de proceso es el “estudio paramétrico”; entendiéndose por esto la cuantificación de los cambios que experimenta la solución de un modelo matemático con la varianza de sus especificaciones. La utilidad de este tipo de cálculos radica en el establecimiento de las condiciones y variables óptimas a las cuales debe llevarse a cabo el proceso.

La tarea de optimizar un reactor es harto compleja, requiriendo el uso de todas las ecuaciones de conservación (materia, energía y cantidad de movimiento) en conjunción con una función de costos, si lo que se quiere es una optimización de carácter práctico (industrial). Un nivel más básico de la optimización es el de el desempeño; por ejemplo, sólo optimizar la conversión, la selectividad, la razón de reciclaje, la tasa de remoción de calor, etc. La aparición de óptimos generalmente está relacionada con las no linealidades del modelo y en la mayoría de los casos requiere el acople de las ecuaciones; por ejemplo *Gómez y Fontalvo (2004)*, estudiando el caso de un reactor tubular ideal, muestran la existencia de un radio óptimo sólo en el caso de acoplar los balances de materia y cantidad de movimiento.

Con el fin de mejorar la comprensión sobre ciertos detalles en la solución del modelo para una mezcla binaria, se ha optado por seleccionar un sistema reaccionante con aplicación en la vida real, y establecer la variación respecto de los parámetros más relevantes.

5.1 REACCIÓN DE ISOMERIZACIÓN DE N-BUTANO

EL isobutano es una sustancia utilizada en la fabricación de aditivos para gasolinas. Este puede ser producido por la isomerización en fase líquida de n-butano empleando pequeñas cantidades de un catalizador líquido *Fogler (1999)*. Esta es una reacción que además de ser exotérmica es reversible.



teniendo una cinética reacción expresada por:

$$r_A = k \left(C_A - \frac{C_B}{K_C} \right) \quad < \text{kmol} / \text{m}^3 \text{ h} > \quad 5.1$$

$$k = 31.1 \exp \left(7906 \left(\frac{T-360}{360T} \right) \right) \quad < \text{h}^{-1} > \quad 5.2$$

$$K_C = 3.03 \exp \left(-830.3 \left(\frac{T-333}{333T} \right) \right) \quad 5.3$$

Con el objetivo de examinar la distribución de concentración que el reactivo logra en el volumen del reactor, se definen valores para los parámetros diciendo que el reactivo ingresa puro.

Tabla 5.1

Parámetro		Valor
Concentración inicial	(kg/m ³)	579
Longitud	(m)	15
Radio	(m)	0.08
Velocidad media	(m/s)	0.011
Temperatura	(K)	330

Empleando el método de Wilke-Chang para el cálculo de la difusividad, y con los parámetros de la tabla 5.1, se obtiene la figura 5.1 que pone en evidencia el gran cambio que experimenta la concentración de n-butano en dirección radial, alcanzándose valores pequeños en cercanías de la pared y aproximados a su valor de equilibrio químico, esto gracias a las grandes velocidades de reacción que se manejan en este sector.

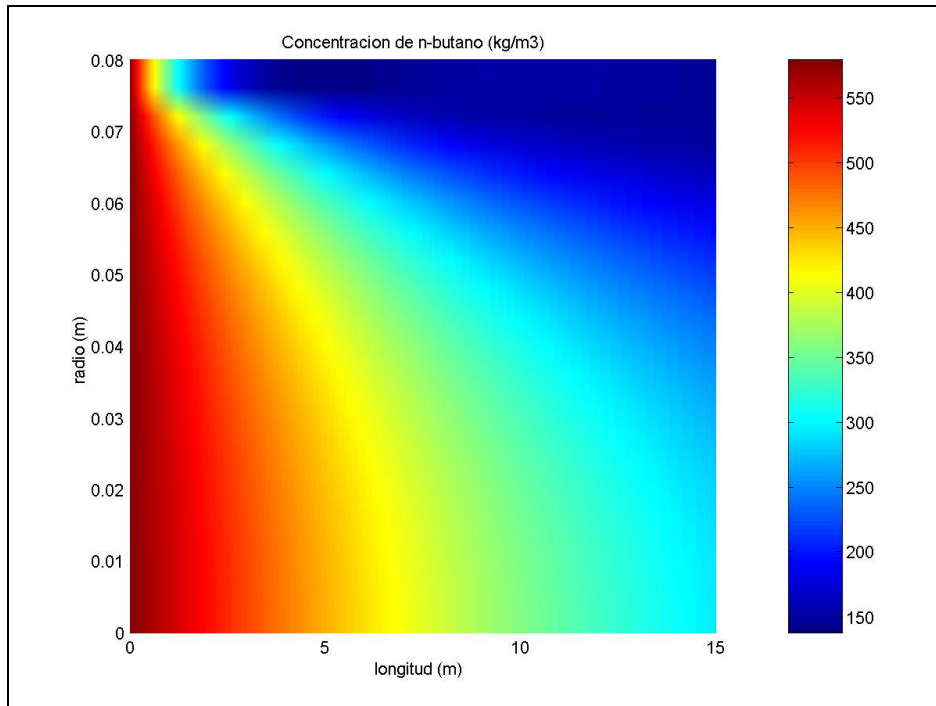


Figura 5.1 Concentración de n-butano en el volumen del reactor

La figura anterior sugiere que al comparar este resultado con el reactor de flujo pistón la diferencia puede llegar a ser apreciable, lo cual se comprueba en la figura 5.2.

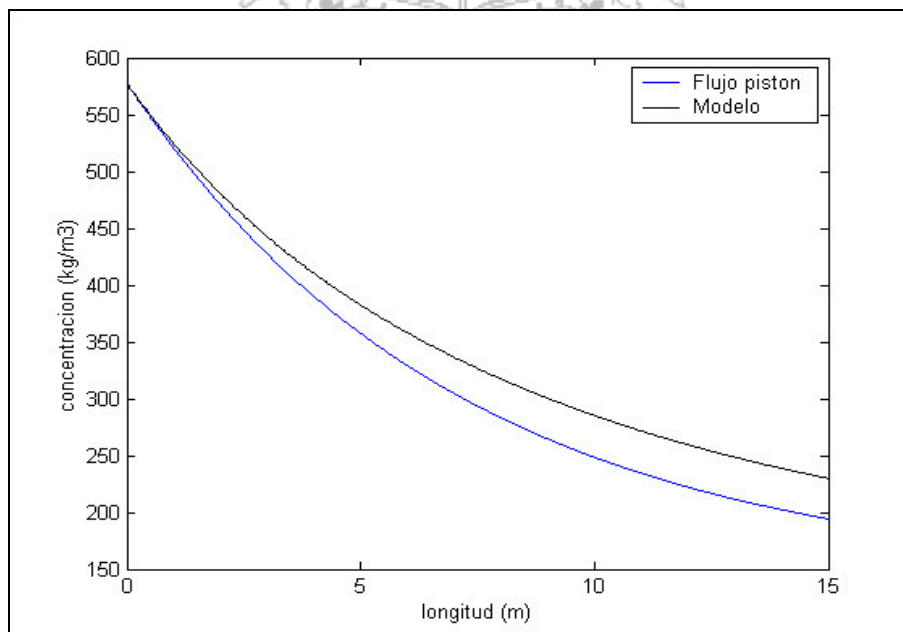


Figura 5.2 Concentración media de n-butano a lo largo del reactor

5.2 EFECTO DE LA TEMPERATURA Y EL RADIO

Teniendo en cuenta que la temperatura afecta directamente las magnitudes de la difusividad y la velocidad de reacción, y que las dimensiones del tubo definen el volumen para llevar a cabo la reacción, se constituyen estas como variables que se desean seleccionar adecuadamente para mejorar el rendimiento del reactor. A priori, debido a que las ecuaciones se encuentran desacopladas, es de suponer que no se encuentren óptimos. Esto, empero, no resulta desalentador porque el estudio sirve también para interpretar desde el punto de vista físico lo que ocurre en el reactor.

Manteniendo un flujo volumétrico de $2.2308 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$ se realizan modificaciones sobre la temperatura, longitud y diámetro del reactor. Se definieron tres valores de temperatura, y tres niveles de longitud para observar su influencia sobre la concentración media de salida para diferentes valores del radio, resultados mostrados en las figuras 5.3, 5.4 y 5.5

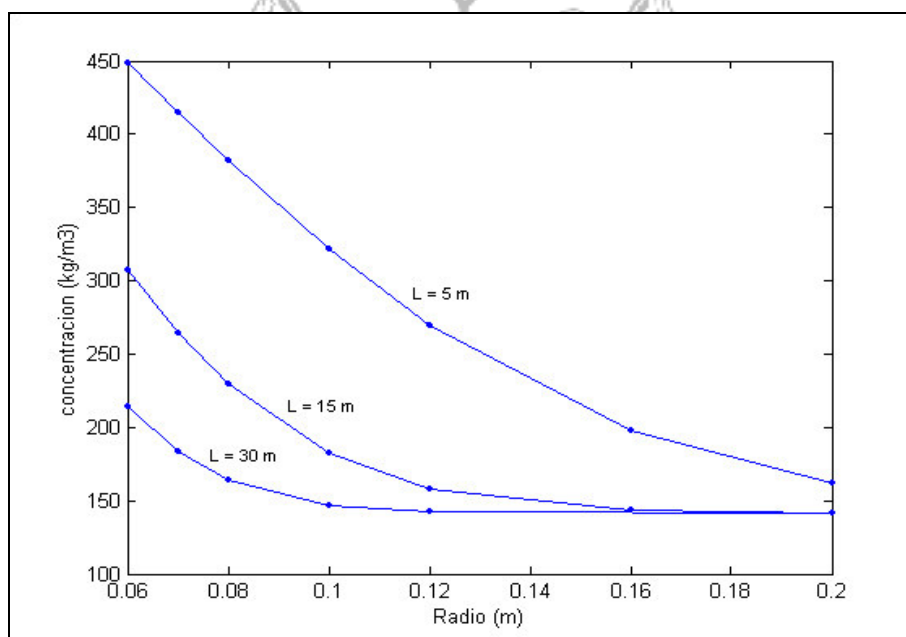


Figura 5.3 Concentración media de n-butano a la salida del reactor, $T = 330 \text{ K}$

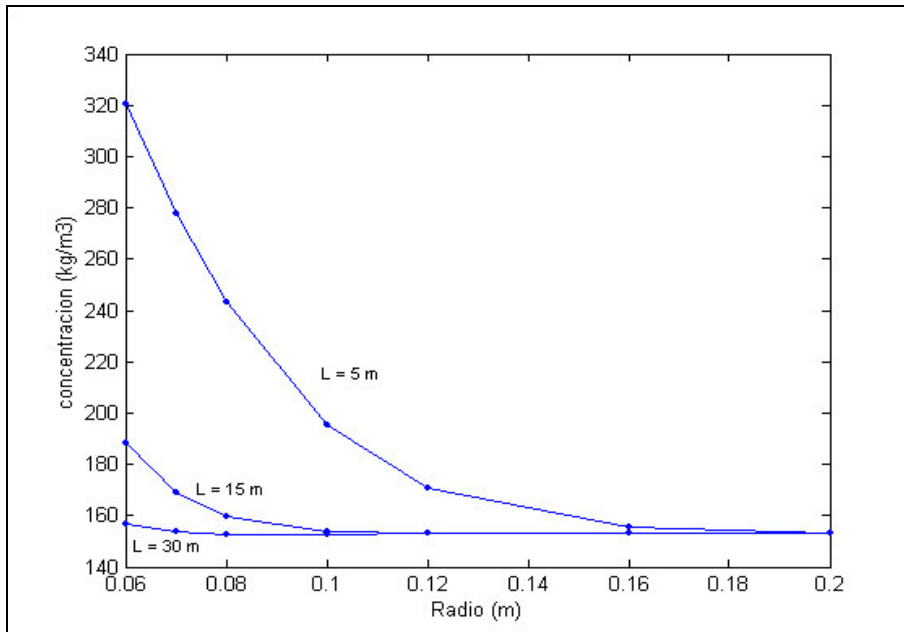


Figura 5.4 Concentración media de n-butano a la salida del reactor, $T = 345\text{ K}$

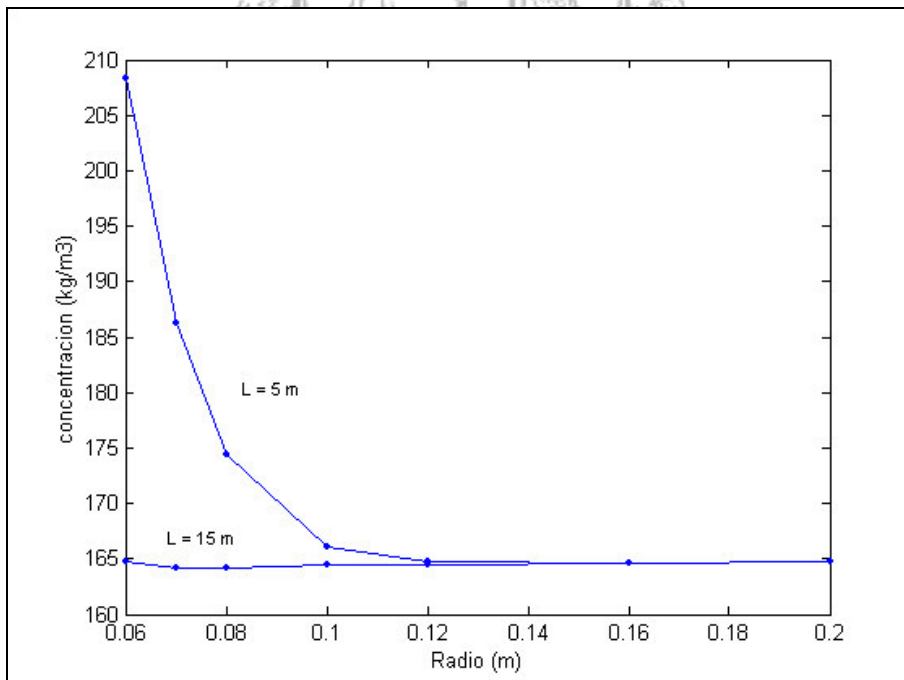


Figura 5.5 Concentración media de n-butano a la salida del reactor, $T = 360\text{ K}$

En las gráficas anteriores se concluye principalmente que la conversión del reactivo se incrementa a medida que también lo hacen la temperatura, el radio y la longitud. Pero algo interesante que se puede notar es que para una longitud definida existe una magnitud del radio a partir del cual desaparece su influencia sobre la concentración de salida ya que se alcanza el valor del equilibrio químico, lo mismo que también habrá un momento en que no se justifique aumentar la longitud del reactor para mejorar la conversión.

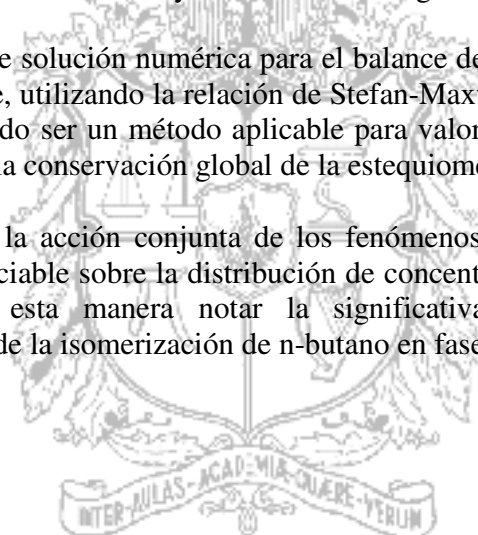


CONCLUSIONES

Al solucionar las ecuaciones de Navier-Stokes asumiendo caída de presión constante, se obtiene un perfil parabólico de velocidad idéntico al que se obtiene para un flujo desarrollado, llegándose a la conclusión de que no es justificable efectuar esta solución si está desacoplada del balance de materia y en el caso de una geometría sencilla de flujo.

Se planteó un algoritmo de solución numérica para el balance de materia en un esquema de reacción multicomponente, utilizando la relación de Stefan-Maxwell para la descripción del término difusivo, resultando ser un método aplicable para valores bajos de difusividad, ya que estable y cumple con la conservación global de la estequiometría.

Para difusividades bajas, la acción conjunta de los fenómenos de difusión y convección logra tener un efecto apreciable sobre la distribución de concentraciones en el volumen del reactor, pudiéndose de esta manera notar la significativa variación radial de la concentración en el caso de la isomerización de n-butano en fase líquida.



BIBLIOGRAFÍA

Alopaeus, Ville (2002). On approximate calculation of multicomponent mass transfer fluxes. *Computers and Chemical Engineering* 26, 461–466.

Amundson, N. R. ; Morano, E. ; Sanders, R. Techniques for the numerical solution of steady reaction-diffusion systems employing Stefan-Maxwell difusión. *East-West J. Numer. Math.* Vol 6, No1 pp. 9-25 (1998)

Abbott, M. B.; Basco, D.R.. (1989) *Computational Fluid Dynamics. A Introduction for Engineer.* Longman Group UK Limited.

Bakker. A., et al. Design Reactors Via CFD. *Chemical Engineering Progress.* Diciembre 2001 pp.30-39.

Bakker. A., et al. Realize Greater Benefits from CFD. *Chemical Engineering Progress.* Marzo 2001 pp. 45-53

Baldyga J. Turbulent Mixer Model With Application to Homogeneous, Instantaneous Chemical Reactions. *Chemical Engineering Science.* Vol. 44, No. 5, (1989); p. 1175.

Baldyga J. y Pohorecki R.. Turbulent Micromixing in Chemical Reactors. *Chemical Engineering Journal.* 58 (1995) 183-195

Baldyga, J. y Pohorecki, R. T. Turbulent mixing and Chemical Reactor. *Chemical Engineering Journal*, vol 58 pp 507 (1995).

Benneker, Arno H.; Kronberg, Alexander E. Y Westerterp K. (1997). Longitudinal Mass and Heat Dispersion in Tubular Reactors *Ind. Eng. Chem. Res.* 1997, 36, 2031-2040.

Bertrand J., Xuereb C. (1996). *Chemical Engineering Science.* vol 51, No 10 pp 1725

Bird R. Byron y Curtiss, C. F. (1999) .Multicomponent Difusión. *Ind. Eng. Chem. Res.* 38, 2515-2522

Bird, R B., Stewart, W. E., & Lightfoot, E. N.. (1960). *Fenómenos de Transporte*. New York : John Wiley 1960.

Brown, D.; Cortez, R. ; Minion, M. (2001). Accurate Projection methods for the incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of computational Physics* 168, 464-499

Brown, David L. Accuracy of Projection Methods for the Incompressible Navier-Stokes Equations This article was submitted to *Workshop on Numerical Simulation of Incompressible Flows*, Half Moon Bay, California, June 19-21, 2001 June 15, 2001 U.S. Department of Energy

Castilla, R. .(2001) Thesis Phd: *Simulación Cinemática de Flujo Turbulento. Aplicación al Estudio de la Estructura de la Turbulencia y la Difusión* Universidad Politécnica de Cataluña.

Chung, T. J. *Finite Element Analysis in Fluid Dynamics*. McGraw-Hill International Book Company.

Codina and Soto. (1996). *Computational Fluid Dinamics'96*. Editorial John Wiley & Sons Ltd.

Costa Novella. (1984). *Ingeniería Química*. Editorial Universidad de Alambra

Costin S. Bildea ; Alexandre C. Dimian , Susana C. Cruz , Piet D. Iedema (2004) Design of tubular reactors in recycle system. *Computers and Chemical Engineering* 28, 63-72.

Curtiss C. F. y Byron Bird R. (1996) Multicomponent Diffusion In Polymeric Liquids. *Proc. Natl. Acad. Sci.* Vol. 93, pp. 7440–7445,

Cussler, E. L.(1997) *Diffusions Mass Transfer in Fluid Systems*. Cambridge University Press: Cambridge, U.K.

Chih-Hsiung L. And Barkelew C. C., Numerical Analysis Of Jet-Stirred Reactors With Turbulent Flows and Homogeneous Reactions. *AIChE Journal*. Vol. 32, No. 11 (1986) p. 1813.

Chorin, Alexandre Joel. (1997) A Numerical Method for Solving Incompressible Viscous Flow Problems. *Journal of Computational Physics* 135, 118–125.

Daily James W. & Harleman Donald R.(1969). *Dinámica de Fluidos*. Editorial F Trillas, S.A

Danckwerts P. V. Continuous Flow System, Distribution of Residence Times. *Chemical Engineering Science*, vol 8 pp 93 (1995).

Danckwertss P.V. (1953). Continuous Flow Systems Distribution of Residence Times. *Chem. Eng. Sci.* **2**, 1-13.

Days 26 and 27: *Residence Time Distributions and Non-Ideal Flow Patterns*. CE 561 Lecture Notes Fall 2003

Douglas, J. M.; Bischoff, K.B. Variable Density Effects And Axial Dispersion In Chemical Reactors. *I&EC Process Design and Development*.

Ekambara K., Joshi J. B., Axial mixing in pipe flows: Turbulent and Transition Regions. *Chemical Engineering Science*. Vol. 58, (2003); pp 2715-2724.

Fogler, H.S. (1999). *Elements of Chemical Reaction Engineering*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 3rd ed.,.

Garbey, M.; Kaper, H. G.y Romanyukha, N.(2001) *A Fast Solver for Systems of Reaction-Diffusion Equations*. Thirteenth International Conference on Domain Decomposition Methods.

Garbey, M.; Kaper, H. G.y Romanyukha, N.(2001) *A Fast Solver for Systems of Reaction-Diffusion Equations*. Thirteenth International Conference on Domain Decomposition Methods

Gómez, Miguel A; Fontalvo, Javier. (2004) Análisis de la Posibilidad de Cambio de la composición de una mezcla gaseosa entre el sitio de muestreo y el de análisis. *Punto Crítico Revista de Ingeniería Química, Universidad Nacional de Colombia sede Manizales*; número uno.

Griebel, M; Dornseifer, T; Neunhoeffler.(1998) *Numerical Simulation in Fluid Dynamics. An Practical introduction*.SIAM monographs on Mathematical Modeling and Computation.

Harris; C.; Roekaerts; F.; Rosendal, J. (1996) Computational Fluid Dynamics for Chemical Reactor Engineering. *Chem. Eng. Scie* 51, 10; 1556-1594

Hilbert, R., F. Tap, H. El-Rabii, D. Thevenin. (2004). Impact of detailed chemistry and transport models on turbulent combustion simulations. *Progress in Energy and Combustion Science*, vol 30 pp 61-117

Hjertager L. K., Et Al. CFD Modelling of Fast Chemical Reactions in Turbulent liquid Flows. *Computers Chemical Engineering*. Vol. 26. (2002); p. 507

Hjertager, L. K. ; Hjertager, B. H. ; Solberg, T. CFD modeling of fast chemical reactions in turbulent liquid flows. *Computers and Chemical Engineering* vol 26, 507-515 (2002)

Hjertager, L.K.; Hjertager B.H. and Solberg, T. *CFD Modeling of Fast Chemical Reactions in Turbulent Liquid Flows*. Chemical Engineering Laboratory, Aalborg University Esbjerg, Niels Bohrs vej 8, DK-6700 Esbjerg, Denmark

J.M. Ottino, F.J. Muzzio, M. Tjahjadi, J.G. Franjione, S.C. Jana and H.A. Kusch. Chaos, symmetry, and self-similarity: exploiting order and disorder in mixing processes. *Science* August 7, 1992 v257 n5071 p754(7)

Joshi, Jyeshtharaj B.; Ranade, Vivek V. (2003) Computational Fluid Dynamics for Designing Process Equipment: Expectations, Current Status, and Path Forward. *Ind. Eng. Chem. Res.* 42, 1115-1128

Kennedy, Christopher A.; Carpenter, Mark H. (2003) Additive Runge–Kutta schemes for convection–diffusion–reaction equations. *Applied Numerical Mathematics* 44 , 139–181

Kuipers, J.; Swaaij, W. (1998) Computational Fluid Dynamics applied to chemical reaction engineering. *Advanced in Chemical Engineering* vol 24

L. Formaggia, J.-F. Gerbeau, F. Nobile, A. Quarteroni. Numerical Treatment Of Defective Boundary. Conditions For The Navier–Stokes Equations. *Siam J. Numer. Anal.* Vol. 40, No. 1, pp. 376–401.

Lars Olander (1994). Expressions And Equations For Different Time Distributions For Air In Ventilated Rooms. *Undersökningsrapport* 1994:33

Lauder, B y Spalding D. *Mathematics Model of Turbulence*. Academic Press (1972)

Levenspiel Octave. (1981). *Ingeniería de las Reacciones Químicas*. Editorial Reverté, S.A.. Segunda Edición

Levenspiel, O. ; Smith, W. Notes on the diffusion-type model for the longitudinal mixing of fluid in flow. *Chem. Eng Sci* 6, 227-233 (1957)

Liu, C. H. ; Barkelw, C. H. Numerical analysis of jet-stirred reactors with turbulent flows and homogeneous reactions. *AIChE J.* vol 32 n 11, 1813-1820 (1986)

M. A. Ol'shanskii And V. M. Staroverov. On Simulation Of Outflow Boundary Conditions In Finite Difference Calculations For Incompressible Fluid. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* 2000; 33: 499–534

McCabe Warren L., Smith J. C., & Harriott P.(1991). *Operaciones Unitarias en la Ingeniería Química*. Editorial McGraw Hill.

Mclaughlin, H. S. ; Nauman, E. B. Effect of radial velocities on laminar flow tubular reactors models. *AIChE J.*vol 32 n 3, 419-425 (1986)

Mercado, E. R.; Souza, V. C. ; Guirardello, R. ; Núñez, J. R. (2001). Modeling flow and heat transfer in tubes using a fast CFD formulation. *Computers and chemical engineering* 25, 713-722

Mortensen, Mikael; Orciuch, Wojciech,; Bouaifi, Mounir; Andersson, Bengt. *Mixing Of A Jet In A Pipe*. Chalmers University of Technology, Departement of Chemical Reaction Engineering, 412 96

Nauman, E.B.(1987). *Chemical Reactor Design*, Wiley, New York,

Nauman, E.B.(2001). *Chemical Reactor Design, optimization and Scaleup*. McGrawn Hil.

Pozrikidis, C. (1997). *Introduction to theoretical and Computational fluid Dynamics*. Oxford Universite Press.

Oran Elaine S And Boris Jay P.(2001). *Numerical Simulation of Reactive Flow*. Second Edition. Cambridge University Press.

Pohoreckl, Rysrard y Baklyga , Jerry. (1983) New Model of Micromixing in Chemical Reactors. I. General, Development and Application to a Tubular Reactor. *Ind. Eng. Chem. Fundam.* 22, 392-397.

Ranade, V. V. And Bourne, J. R. Reactive Mixing in an Agitate Tank. : *Chem. Eng. Comm.* Vol 99, (1991) pp. 33-53.

Ranade, V. V.; Joshi J. B. Computational Fluid Dynamics for Designing Process Equipment. *Ind Eng Chem. Res.* Vol 46 No. 6, (2003) p. 1115.

Ranade, Vivek V. . Computational Fluid Dynamics for Reactor Engineering. *Review in Chemical Engineering*. Vol. 11, No. 3, (1995); pp. 229-289.

Ranade, Vivek V. An Efficient Computational Flow in Stirred Vessels: A Case of Rushton Turbine. *Chemical Engineering Science*. Vol. 52, No. 24, (1997); p. 4473.

S.A. Logtenberg, A.G. Dixon. (1998) Computational fluid dynamics studies of fixed bed heat transfer. *Chemical Engineering and Processing* 37, 7-21

Shah Jimmy J. ; Fox Rodney O. (1999) Computational Fluid Dynamics Simulation of Chemical Reactors: Application of in Situ Adaptive Tabulation to Methane, Thermo-chlorination Chemistry. *Ind. Eng. Chem. Res.* 38, 4200-4212.

Slattery, John C.(1999) *Advanced Transport Phenomena*. Cambridge University Press

Smith, F.G . (1997). *Chemical Engineering Science*. vol 52, No 9 pp 1459

T. Sakurai, H. Sugiura.(2003) A projection method for generalized eigenvalue problems using numerical integration. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 159, 119–128

Taylor, R., Krishna R. (1993) *Multicomponent Mass Transfer*. John Wiley & Sons

Toor, H. L (1969). Turbulent Mixing of Two Species With And Without Chemical Reactions. *A&EC Fundamentals*. 8, 655-659

Venkitachalam Hari. *Residence Time Distributions*. School of Environmental Science Murdoch University, Murdoch WA 6150

Vollmer, Jürgen ; Tél, Tamás ; Breyman, Wolfgang. (2004). Dynamical-system models of transport: chaos characteristics, the macroscopic limit, and irreversibility. *Physica D* 187 108–127

Wangard, William III, David S. Dandy, and Brian J. Millerz A Numerically Stable Method for Integration of the Multicomponent Species Diffusion Equations. *Journal of computational Physics* 174, 460–472 (2001).

Wendt John F. (1996). *Computational fluid Dynamics An Introduction*. Springer Verlag

Wesseling Pieter (2000). *Principles of Computational fluid Dynamics*. Springer Verlag

Welty, J. R., Wicks C. E. & Wilson R. E. (1994). *Fundamentos de Transferencia de Momento, Calor y Masa*. Sexta Reimpresión. Limusa S.A.

Wilcox D.C(2002). *Turbulence Modeling for CFD*. DCW Industries

Wendt; John F. (1996) *Computational Fluid Dynamics.A Introduction*. Springer Verlag Berlin

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTARIA

A.K. Das, J. De Wilde, G.J. Heynderickx, G.B. Marin. (2004). CFD simulation of dilute phase gas–solid riser reactors: part II simultaneous adsorption of SO₂–NO_x from flue gases. *Chemical Engineering Science* 59, 187 – 200

A.K. Das, J. De Wilde, G.J. Heynderickx, G.B. Marin., J. Vierendeelsb, E. Dickb. (2004). CFD simulation of dilute phase gas–solid riser reactors: Part I—a new solution method and flow model validation. *Chemical Engineering Science* 59, 167 – 186.

Armfield, S. ; Street, R. (2004) Modified fractional-step methods for the Navier-Stokes equations. *ANZIAM J.* 45 (E) ppC364–C377,

Avrin, Joel D. Incompressible Reacting Flows. *Transactions Of The American Mathematical Society*. Volume 349, Number 10, October 1997

Baranyi, László. Computation Of Unsteady Momentum And Heat Transfer From A Fixed Circular Cylinder In Laminar Flow. *Journal of Computational and Applied Mechanics*, Vol. 4., No. 1., (2003), pp. 13–25.

Davison Michael y Max Jones B.(1997) Residence Time In Concurrent Foraging With Fixed Times To Prey Arrival. *Journal Of The Experimental Analysis Of Behavior* 67, 161–179 Number 2.

Denbigh,K.G., Turner,J.C.R (1990). *Introducción a la teoría de los reactores químicos*. Limusa. México

Hill, C.G.,(1977.) *An Introduction to Chemical Engineering Kinetics and Reactor Design*. Wiley, New York,

Jakobsen, H. A. ; Lindborg, H. ; Handeland, V. (2002) A numerical study of the interactions between viscous flow, transport and kinetics in fixed bed reactors. *Computers and Chemical Engineering* vol 26, 333-357

Johnston ,Hans. and Jian-Guo Liu. (2002) Finite Difference Schemes for Incompressible Flow Based on Local Pressure Boundary Conditions.*Journal of Computational Physics* 180, 120–154

Kern Donald Q.(1976) *Procesos De Transferencia De Calor*. McGraw Hill Book Company.

Kozeschnik, Ernst.(1999) Multicomponent Diffusion Simulation Based on Finite Elements. *Metallurgical And Materials Transactions A* Volume 30a, OCTOBER 1999—2575

Mortimer, Robert G (1973).Transition State Theory for Diffusion Coefficients in Multicomponent Liquids.*Ind. Eng. Chem. Fundam.*, Vol. 12, No. 4, 1973.

Pinelli, Davide; Magelli, Franco.(2000). Analysis of the Fluid Dynamic Behavior of the Liquid and Gas Phases in Reactors Stirred with Multiple Hydrofoil Impellers. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 39, 3202-3211

Smith J.M. (1991). *Ingeniería De La Cinética Química*.. Compañía Editorial Continental, S. A. De C. V.

Soto, Orlando y Löhner, Rainald.(2002) *A Mixed Adjoint Formulation for Incompressible Turbulent Problems*. 40th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit; AIAA 2002-0451

Trebotich, David P. y Colella Phillip. (2001) A Projection Method for Incompressible Viscous Flow on Moving Quadrilateral Grids. *Journal of Computational Physics* 166, 191–217

Turbulence Modelling. Part 2: Limitations of k-epsilon model. QNET CFD - LUZERN - 23 May 2002 (VKI notes will be on <http://:cf.me.umist.ac.uk> ... people).

White, Frank M. (1983). *Mecánica de Fluidos*. Editorial McGraw Hill

Zheng,Yihao; Garcia, Alejandro L.y Alder Berni J. Comparison of Kinetic Theory and Hydrodynamics for Poiseuille Flow. *Journal of Statistical Physics*, Vol. 109, Nos. 314,

ANEXO A

NOTACIÓN MATEMÁTICA

La mayoría de los textos y artículos científicos utilizan una nomenclatura que compacta las expresiones de conservación, conocida con el nombre de *Nomenclatura Indicial*.

La ecuación de continuidad para flujo incompresible con densidad constante, está dada en la nomenclatura tradicional como:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \text{A1}$$

En la nomenclatura de los libros de CFD (indicial) aparece como:

$$\frac{du_i}{dx_j} = 0 \quad \text{A2}$$

En coordenadas cilíndricas

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{du_i}{dx_i} = \frac{1}{r} \frac{\partial(ru_x)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0 \quad \text{A3}$$

Otra operación con el operador ∇ es:

$$\nabla P = \frac{\partial P}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial P}{\partial \theta} + \frac{\partial P}{\partial z} \quad \text{A4}$$

la nomenclatura de los libros de CFD es:

$$\nabla P = \frac{\partial P}{\partial x_i} \quad \text{A5}$$

Es notable la diferencia en las ecuaciones A3 y A4, la ecuación A4 no tiene punto.

De igual forma cuando aparezca en las ecuaciones de conservación el siguiente término:

$$u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \sum_{j=1}^3 u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \sum_{j=1}^3 u_j \nabla \cdot u_i \quad A6$$

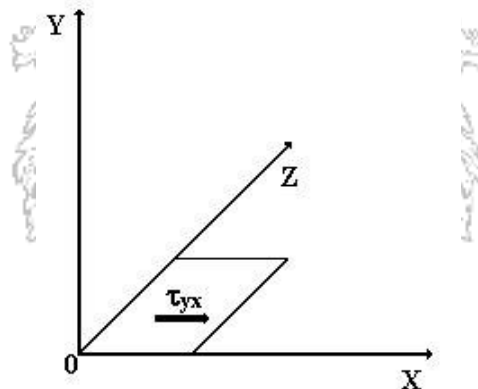
Donde 1, 2, 3; son las componentes r, θ , z respectivamente.

Una cantidad con dos subíndices (τ_{ij}) es un tensor que posee nueve componentes:

$$\tau_{ij} = \begin{bmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{21} & \tau_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & \tau_{33} \end{bmatrix} \quad A7$$

Donde τ_{ij} es conocido como el tensor de Reynolds o tensor de esfuerzo turbulento. Se considera un tensor en coordenadas cartesianas como se ve en el Figura A1

Figura A1 Notación de Tensor en Coordenadas Cartesianas



El primer subíndice (y) indica la normal a la superficie en la cual el tensor actúa, el segundo subíndice (x) indica la dirección del tensor

Todos los esfuerzos con subíndices iguales ($\tau_{11}, \tau_{22}, \tau_{33}$) son conocidos como *Esfuerzos Normales o Presiones* y los que posean diferentes subíndices se les ha asignado el nombre de *Esfuerzos de Corte* y se considera un tensor simétrico, cuando los esfuerzos con subíndices invertidos son iguales ($\tau_{23}=\tau_{32}$).

Para un tensor simétrico, solo es necesario el conocimiento del seis de sus nueve componentes; de los cuales tres son esfuerzos normales y tres son esfuerzos de corte.

Un tensor muy utilizado en la dinámica de los fluidos es el *Tensor Delta de Kronecker* δ_{ij} , representado por una matriz idéntica

$$\delta_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

A8



ANEXO B

NÚMEROS ADIMENSIONALES

El análisis dimensional es el método más empleado para correlacionar cierto número de variables en una sola ecuación, expresando un efecto.

Los números adimensionales son relaciones entre variables físicas y se les ha asignado los nombres de los primeros investigadores en el campo de la mecánica de fluidos, transferencia de masa y de calor.

Adimensionalización de las Ecuaciones Básicas

Las ecuaciones de conservación contienen las tres dimensiones básicas (L, M, T), además todas las variables p , u , r , z , y t pueden adimensionalizarse utilizando la densidad y dos constantes de referencia características del flujo que se está tratando:

- La velocidad de referencia u : puede ser la velocidad máxima o la velocidad a la entrada del reactor.
- La longitud característica R : Radio del cilindro

Como ejemplo, al tratar las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento que se presentan en el capítulo 2:

Continuidad	$\nabla \cdot u = 0$	2.4
-------------	----------------------	-----

Cantidad de movimiento	$\frac{Du}{Dt} = \nu \cdot \nabla^2 u - \frac{\nabla \cdot p}{\rho} + g$	2.5
------------------------	--	-----

Las variables adimensionales* pueden ser las siguientes:

$$u^* = \frac{u}{U} \quad p^* = \frac{p}{\rho U^2} \quad t^* = \frac{tV}{R} \quad r^* = \frac{r}{R} \quad \nabla = \frac{\nabla}{R} \quad 2.6$$

Remplazando estas variables en las ecuaciones de conservación y reorganizando resulta:

$$\text{Continuidad} \quad \nabla^* \cdot u^* = 0 \quad 2.7$$

$$\text{Cantidad de Movimiento} \quad \frac{Du^*}{Dt^*} = \frac{1}{Re} \nabla^{*2} u - \frac{\nabla \cdot p}{\rho} + \frac{1}{Fr} \quad 2.8$$

Donde Re y Fr son los números de Reynolds y Froude respectivamente

Las condiciones de frontera y las condiciones iniciales de estas ecuaciones de conservación, igualmente deben ser adimensionadas.

Según *Oran (2001)* se recomienda no utilizar en la programación ecuaciones de conservación adimensionales; por las siguientes razones:

- Es muy complicado depurar o encontrar un error en el programa, cuando todas las variables son de orden uno.
- El método es cuestionable cuando se debe realizar un proceso iterativo complejo o cuando el problema no está en un espacio homogéneo.
- Es muy relevante trabajar en unidades reales, sirve para focalizar el problema y desarrollar la intuición sobre el tema a tratar y facilita la comunicación con ingenieros y laboratoristas.

La tercera afirmación es la más importante y en este trabajo se comprobó la realidad y lo acertado de la afirmación del autor.

A continuación se listan los números adimensionales más empleados en la dinámica de los Fluidos.

* Éste símbolo se utiliza para representar Variables Adimensionales

Tabla B1 Números Adimensionales

Nombre	Símbolo	Definición	Significado Físico
Atwood	A	$\frac{\Delta\rho}{\rho_1 + \rho_2}$	$\frac{\text{Diferencia de densidades}}{\text{Suma de densidades}}$
Biot	Bi	$\frac{h \sqrt{A}}{k}$	$\frac{\text{Resistencia conductora a la transferencia de calor}}{\text{Resistencia convectiva a la transferencia de calor}}$
Brinkman	Br	$\frac{\mu u^2}{kT}$	$\frac{\text{Calor debido a la disipación térmica}}{\text{Calor debido a la conducción térmica}}$
Capilaridad	Cp	$\frac{\mu u}{\sigma}$	$\frac{\text{Fuerza viscosa}}{\text{Tensión superficial}}$
Damköhler Convectivo	Da	$\frac{r_i l^2}{u}$	$\frac{\text{Rata de reacción química}}{\text{Rata de transporte convectivo}}$
Damköhler Difusional	Da	$\frac{r_i l^2}{D}$	$\frac{\text{Rata de reacción química}}{\text{Rata de transporte Difusional}}$
Damköhler Convección	Da	$\frac{Ql}{\rho h u}$	$\frac{\text{Calor debido a la reacción}}{\text{Calor debido a la convección}}$
Damköhler Conducción	Da	$\frac{Ql}{kT}$	$\frac{\text{Calor debido a la reacción}}{\text{Calor debido a la conducción}}$
Damköhler Difusión	Da	$\frac{Ql}{\rho D u}$	$\frac{\text{Calor debido a la reacción}}{\text{Calor debido a la Difusión}}$
Coefficiente de Descarga	C _D	$\frac{\rho' - \rho}{g \rho' l u^2}$	$\frac{\text{Fuerza de descarga}}{\text{Fuerza inercial}}$
Eckert	Ec	$\frac{u^2}{c_p T}$	$\frac{\text{Energía cinética}}{\text{Entalpia}}$
Euler	Eu	$\frac{P}{\rho u^2}$	$\frac{\text{Presión}}{\text{Fuerza inercial}}$
Euler Cavitación	Ca	$\frac{P - P_v}{\rho u^2}$	$\frac{\text{Presión}}{\text{Fuerza inercial}}$
Froude	Fr	$\frac{u^2}{lg}$	$\frac{\text{Energía cinética}}{\text{Energía gravitacional}}$
Grashof	Gr	$\frac{l^3 \rho^2 \beta g \Delta T}{\mu^2}$	$\frac{\text{Fuerza boyante}}{\text{Fuerza inercial}}$
Karlovitz	K	$\frac{l}{u} \frac{du}{dy}$	Factor de dilatación : criterio para incrementar el área de flamas
Knudsen	Kn	$\frac{\delta}{l}$	$\frac{\text{Tiempo de convección}}{\text{Tiempo de colisión}}$

Lewis	Le	$\frac{k}{\rho c_p D_{ij}}$	$\frac{\text{Difusividad térmica}}{\text{Difusividad de masa}}$
Mach	Ma	$\frac{u}{u_{\text{sonido}}}$	$\frac{\text{Magnitud de efectos de compresibilidad}}{\text{Velocidad del flujo}} = \frac{\text{Velocidad del flujo}}{\text{Velocidad del sonido}}$
Newton	Nt	$\frac{F}{\rho l^2 u^2}$	$\frac{\text{Fuerza impuesta}}{\text{Fuerza inercial}}$
Nusselt	Nu	$\frac{hl}{k}$	$\frac{\text{Resistencia térmica de convección del fluido}}{\text{Resistencia térmica de conducción}}$
Pecler Calor	Pe	$\frac{ul\rho c_p}{k}$	$\frac{\text{Transporte de calor convectivo}}{\text{Transporte de calor por conducción}}$
Pecler Masa	Pe	$\frac{ul}{D_{ij}}$	$\frac{\text{Transporte convectivo de masa}}{\text{Transporte molecular de masa}}$
Poiseuille	Po	$\frac{l\Delta P}{\mu u}$	$\frac{\text{Fuerza de presión}}{\text{Fuerza viscosa}}$
Prandtl	Pr	$\frac{c_p \mu}{k}$	$\frac{\text{Difusividad de momento}}{\text{Difusividad térmica}}$
Rayleigh	Ra	$\frac{gl^3 \beta \Delta T \rho^2}{c_p \mu k}$	$\frac{\text{Fuerza boyante}}{\text{Fuerza difusional}}$
Reynolds	Re	$\frac{l u \rho}{\mu}$	$\frac{\text{Fuerza inercial}}{\text{Fuerza viscosa}}$
Richardson	Ri	$\frac{gl}{\Delta u^2}$	$\frac{\text{Efectos boyantes}}{\text{Efectos de corte vertical}}$
Rosby	Ro	$\frac{u}{2 \text{sen}(\Lambda) \omega l}$	$\frac{\text{Fuerza inercial}}{\text{Fuerza Coriolis}}$
Schmidt	Sc	$\frac{\mu}{\rho D_{ij}}$	$\frac{\text{Difusividad de momento}}{\text{Difusividad de masa}}$
Stanton	St	$\frac{h}{\rho u c_p}$	$\frac{\text{Pérdida de conducción térmica}}{\text{Capacidad Calorífica}}$
Stokes	S	$\frac{\mu}{\rho l^2 \omega}$	$\frac{\text{Proporcionde humedadviscosa}}{\text{Rata Vibraciond}}$
Strouhal	Sr	$\frac{l\omega}{u}$	$\frac{\text{Rata vibracional}}{\text{Rata de flujo convectivo}}$
Weber	W	$\frac{\rho l u^2}{\sigma}$	$\frac{\text{Fuerza inercial}}{\text{Tensiónsuperficial}}$