

## ALGORITMOS DE CÁLCULO PARA EL PROBLEMA DE DIFUSIÓN EN UNA MEZCLA GASEOSA DE TRES COMPONENTES

J. Armijo C.<sup>1</sup>

### RESUMEN

Se propone algoritmos de cálculo para el problema de difusión en una mezcla de gases de tres componentes. Los algoritmos se derivan al resolver la ecuación de Maxwell-Stefan mediante la transformada de Laplace. Se calculan los flux molares y se comparan con los obtenidos de la metodología Taylor-Krishna. Los resultados revelan que la difusión neta de las especies químicas en mezclas de más de dos componentes puede establecerse en dirección opuesta a la gradiente de concentración o puede ser cero a pesar de que la gradiente es diferente de cero.

**Palabras clave:** Difusión, ecuación, Maxwell-Stefan, algoritmos, cálculo, flux molares.

### CALCULATION ALGORITHMS FOR THE PROBLEM OF DIFFUSION IN A GAS MIXTURE OF THREE-COMPONENT

### ABSTRACT

We propose algorithms for calculating the diffusion problem in a gas mixture of three components. The algorithms are derived by solving the Maxwell-Stefan equation by Laplace transform. Molar flux are calculated and compared with those obtained from the Taylor-Krishna methodology. The results show that the net diffusion of chemical species in mixtures of more than two components can be set in the opposite direction to the gradient of concentration or may be zero even though the gradient is different from zero.

**Keywords:** Diffusion equation, Maxwell-Stefan, algorithms, computation, molar flux.

## 1. INTRODUCCIÓN

Las operaciones de separación por transferencia de masa, tales como absorción y destilación, están fundamentados en los mecanismos de difusión molecular. La difusión a nivel molecular es consecuencia del movimiento individual de las moléculas y al choque entre ellas, en virtud de su energía térmica.

En la absorción de un gas desde una mezcla binaria A+B, la especie A debe migrar desde la masa principal de la mezcla hacia la interfase gas-líquido atravesando una película del gas B estancada sobre la interfase

debido a una barrera a la solubilidad ( $N_B=0$ ). En la destilación, se establece una contra-difusión equimolar de A y B ( $N_A+N_B=0$ ). Los vapores de B se difunden desde la masa principal hacia la interfase vapor-líquido donde se condensan, y los vapores de A se evaporan en la interfase y migran hacia la masa principal de la mezcla de vapores<sup>[1]</sup>.

Los procesos de difusión en mezclas binarias se describen por la primera ley de Fick. Esta considera la difusión neta como el resultado del transporte por arrastre de la mezcla, denominada efecto convectivo, y el transporte debido a una gradiente de concentración denominada difusión ordinaria.

<sup>1</sup> Javier Armijo Carranza, Departamento Académico de Operaciones Unitarias; jarmijocarranza@gmail.com

ria<sup>[2]</sup> el cual es proporcional al coeficiente de difusión molecular binario ( $D_{AB}$ ).

Para mezcla de gases multicomponentes ideales, la ecuación desarrollada por Maxwell y Stefan<sup>[3]</sup> es una buena aproximación para describir los procesos de difusión molecular:

$$\vec{\nabla}y_i = \sum_{j=1}^N \frac{1}{cD_{ij}} (y_i \vec{N}_j - y_j \vec{N}_i) \quad (1)$$

Existe una importante diferencia entre difusión binaria y difusión multicomponente<sup>[4]</sup>. En difusión binaria el movimiento de la especie A es siempre proporcional al negativo de la gradiente de concentración de la especie A. En la difusión de mezclas multicomponentes, puede presentarse las siguientes situaciones: (i) *difusión inversa*, en el cual una especie se mueve contra su gradiente de concentración; (ii) *difusión osmótica*, en el cual una especie se difunde a pesar que su gradiente es cero; (iii) *barrera a la difusión*, cuando una especie no se difunde a pesar de que su gradiente es diferente de cero.

H. L. Toor<sup>[4]</sup> presenta soluciones analíticas de la ecuación de Stefan-Maxwell para mezclas de tres componentes en los casos de difusión inversa, difusión osmótica y de barrera a la difusión; así mismo propone el uso de gradientes generalizados para calcular el flux molar. Toor presenta soluciones en los casos donde se restringe el flux molar: para  $N_i = 0$  y para  $\sum N_i = 0$ .

R. Taylor y R. Krishna<sup>[5]</sup> proporcionan la solución exacta de la ecuación de Maxwell-Stefan para mezclas multicomponentes de gases ideales. La solución de las ecuaciones diferenciales se realiza mediante el álgebra matricial, y proponen algoritmos para los respectivos cálculo de los flux molares mediante procesos iterativos.

La metodología de Taylor-Krishna es bastante general y depende, como cualquier método iterativo, del valor inicial de la variable que se busca calcular para asegurar convergencia. Esta situación hace que se

realice un gran esfuerzo computacional en tener estimados iniciales muy cercanos a los valores verdaderos para el flux molar, de tal suerte que se pueda reducir a tres iteraciones el proceso global de cálculos. Aunque la solución de Taylor-Krishna se aplica a cualquier número de componentes, ellos presentan ejemplo de cálculo al caso de mezclas de tres componentes (para  $N_i = 0$  y  $\sum N_i = 0$ ), posiblemente, porque es difícil encontrar información experimental para más de tres componentes que pueda servir para confrontar los valores calculados.

En este trabajo formulamos una solución alternativa de la ecuación de Maxwell-Stefan derivada a partir de la transformada de Laplace para mezcla de tres gases. El método demanda un gran esfuerzo algebraico para reducir las ecuaciones analíticas de los perfiles de concentración, pero disminuye el esfuerzo computacional, manteniendo en tres el mínimo número de iteraciones en el proceso de cálculo de los flux molares para los casos de  $N_i = 0$  y  $\sum N_i = 0$ . Así mismo, se presenta la solución general sin restricción de los flux molares.

## 2. FUNDAMENTOS TEÓRICOS

Sea una mezcla de tres gases A, B y C, que se difunden en dirección z, a presión y temperatura constante. No hay reacción química entre las especies en el espesor de película donde ocurre la difusión. En estado estacionario, la ecuación de continuidad establece que el flux molar de cualquiera de ellas es independiente de z:

$$\frac{dN_i}{dz} = 0 \quad [i = A, B, C] \quad (2)$$

Por otro lado, la ecuación (1) se desarrolla para cada especie considerando que el coeficiente binario  $D_{ij} = D_{ji}$ :

$$c \frac{dy_A}{dz} = \frac{1}{D_{AB}} (y_A N_B - y_B N_A) + \frac{1}{D_{AC}} (y_A N_C - y_C N_A) \quad (3)$$

$$c \frac{dy_B}{dz} = \frac{1}{D_{AB}} (y_B N_A - y_A N_B) + \frac{1}{D_{BC}} (y_B N_C - y_C N_B) \quad (4)$$

$$c \frac{dy_C}{dz} = \frac{1}{D_{AC}}(y_C N_A - y_A N_C) + \frac{1}{D_{BC}}(y_C N_B - y_B N_C) \quad (5)$$

Las ecuaciones 3 a 5 se resuelven con la restricción:

$$y_A + y_B + y_C = 1 \quad (6)$$

que se cumple en cualquier posición z.

Despejando y C de la ecuación 6, y reemplazando en las ecuaciones 3 y 4, se obtiene después de arreglar:

$$c \frac{dy_A}{dz} = M y_A + N y_B - D \quad (7)$$

$$c \frac{dy_B}{dz} = P y_B + Q y_A - E \quad (8)$$

$$M = \frac{N_B}{D_{AB}} + \frac{N_A + N_C}{D_{AC}} \quad (9)$$

Donde:

$$N = \left( \frac{1}{D_{AC}} - \frac{1}{D_{AB}} \right) N_A \quad (10)$$

$$P = \frac{N_A}{D_{AB}} + \frac{N_B + N_C}{D_{BC}} \quad (11)$$

$$Q = \left( \frac{1}{D_{BC}} - \frac{1}{D_{AB}} \right) N_B \quad (12)$$

$$D = \frac{N_A}{D_{AC}} \quad E = \frac{N_B}{D_{BC}} \quad (13)$$

Condición de frontera:

$$z = 0 \quad y_A = y_{A0}, \quad y_B = y_{B0} \quad (14)$$

### Caso 1: Solución general sin restricción en el flux molar

La solución de las ecuaciones 7, 8 y 14 se obtiene mediante la Transformada de Laplace<sup>[6]</sup>, al aplicar el teorema de inversión de Heavy-Side<sup>[7]</sup> se obtienen los perfiles de concentraciones:

$$y_A = k_{11} + \sum_{i=1}^2 \frac{f_1(a_i)}{g_1(a_i)} e^{a_i z} \quad (15)$$

$$y_B = k_{21} + \sum_{i=1}^2 \frac{f_2(a_i)}{g_2(a_i)} e^{a_i z} \quad (16)$$

$$k_{11} = \frac{PD - NE}{PM - NQ} \quad k_{21} = \frac{EM - DQ}{PM - NQ} \quad (17)$$

$$f_1(a_i) = c^2 y_{A0} a_i^2 + c(N y_{B0} - P y_{A0} - D) a_i + PD - NE \quad (18)$$

$$g_1(a_i) = 3c^2 a_i^2 - 2c(P + M) a_i + PM - NQ \quad (19)$$

$$f_2(a_i) = Q f_1(a_i) \quad (20)$$

$$g_2(a_i) = (c a_i - P) [4c^2 a_i^2 - c(2P + 3M) a_i + PM - NQ] - c N Q a_i \quad (21)$$

$i = 1, 2$

$$a_i = \frac{(P + M) \pm \sqrt{(P - M)^2 + 4NQ}}{2c} \quad (22)$$

Las ecuaciones 15 al 22 constituyen soluciones generales al problema de difusión de tres componentes sin ninguna restricción en los flux molares. Para determinar la composición yA en función de la posición se debe especificar los flux molares  $N_A$ ,  $N_B$  y  $N_C$ . Por otro lado, si se conoce la composición en el extremo de la película,  $z = \delta$ , entonces el problema es determinar los flux molares y solo tenemos las dos ecuaciones 7 y 8, con tres incógnitas  $N_A$ ,  $N_B$  y  $N_C$ . En este caso, se debe fijar alguna restricción en uno de los flux molares.

Si imponemos restricciones al flux molar de una de las especies obtenemos las soluciones dadas por Toor<sup>[4]</sup>, cuyas ecuaciones se presentan en el anexo.

En adelante definimos las relaciones de flux:

$$\phi = \frac{N_B}{N_A} \quad \varphi = \frac{N_C}{N_A} \quad (23)$$

### Caso 2: Barrera a la solubilidad o gas estancado ( $N_C = 0$ )

Similar al caso de una mezcla binaria, el componente C no puede pasar hacia una segunda fase porque es impermeable a C o por la baja solubilidad de C en dicha fase. Las ecuaciones 15 al 22 también se aplican a este caso, donde:

$$\phi = \frac{N_c}{N_A} = 0$$

**Caso 3: Difusión neta cero,  $N_A + N_B + N_C = 0$**

En el caso de difusión neta cero se tiene

$$\phi = -(1 + \phi)$$

Se aplica la transformada de Laplace a las ecuaciones diferenciales, y para obtener el perfil de concentraciones se emplea el método de las fracciones parciales<sup>[6]</sup>.

$$y_A = y_{A0} + k_{31}(e^{a_3z} - 1) - k_{32}z \quad (24)$$

$$y_B = y_{B0} + k_{33}(e^{a_3z} - 1) - k_{34}z \quad (25)$$

$$k_{31} = \frac{My_{A0} + Ny_{B0}}{(P + M)} - \frac{NE + MD}{(P + M)^2} \quad (26)$$

$$k_{32} = \frac{DP - NE}{c(P + M)} \quad (27)$$

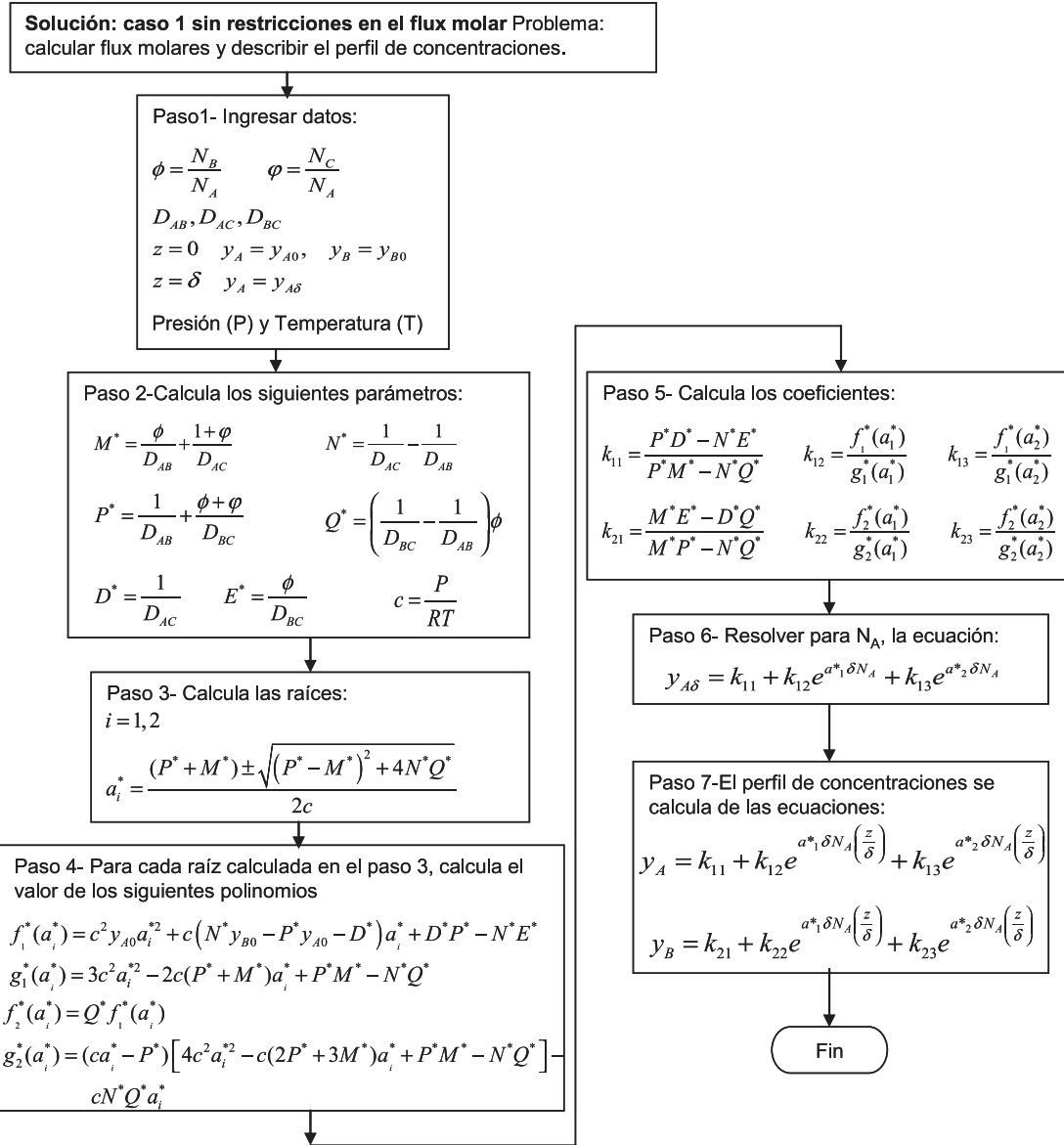
$$k_{33} = \frac{Qk_1}{M} \quad (28)$$

$$k_{34} = \frac{E}{c} - \frac{Q(NE + MD)}{cM(P + M)} \quad (29)$$

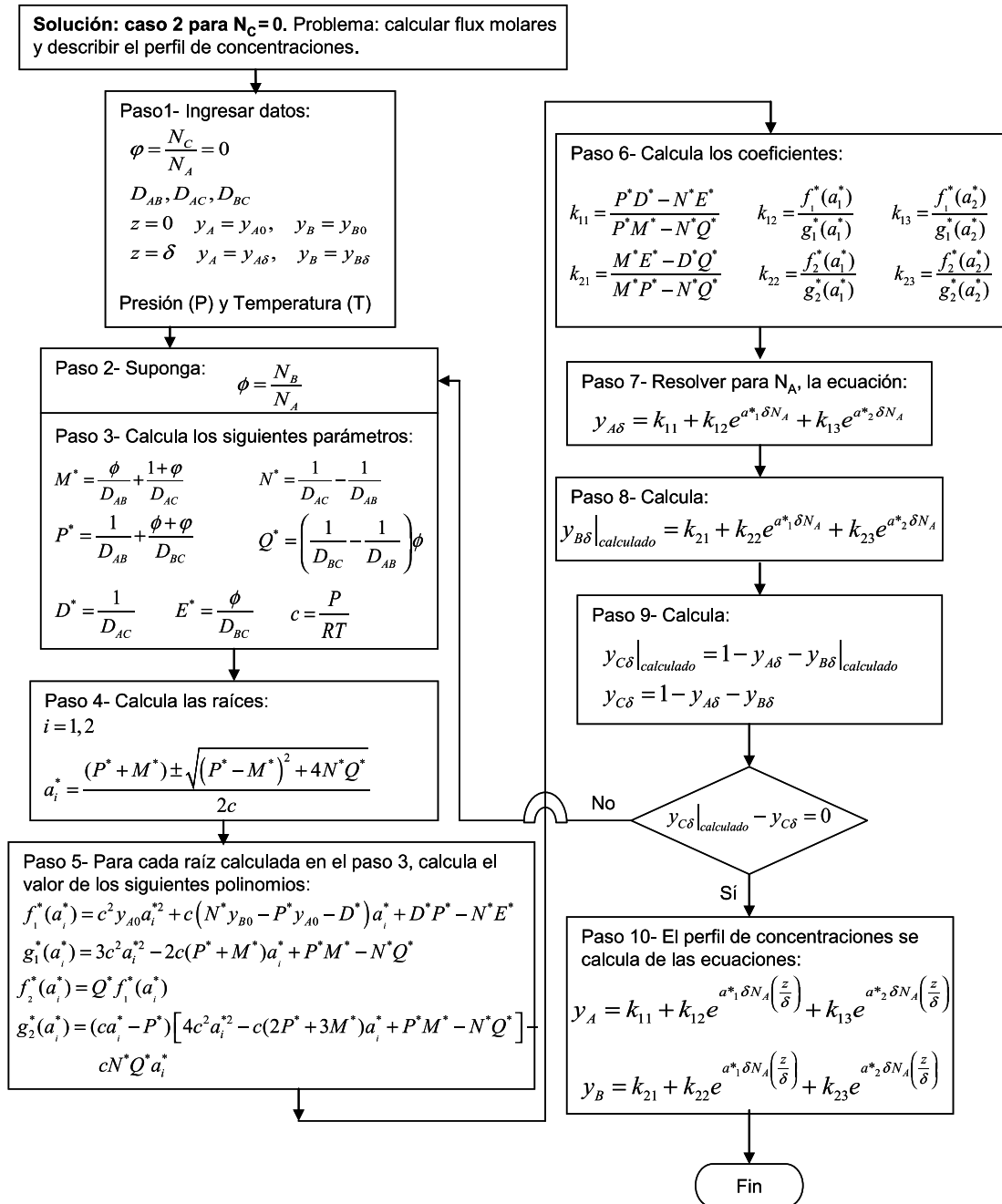
$$a_3 = \frac{P + M}{c} \quad (30)$$

Las ecuaciones para los casos 1, 2 y 3 permiten elaborar los procedimientos de cálculo que se muestran en las Figuras 1, 2 y 3 respectivamente. La Figura 4 determina la región de búsqueda donde puede hallarse una solución para  $f$ , en los casos 2 y 3.

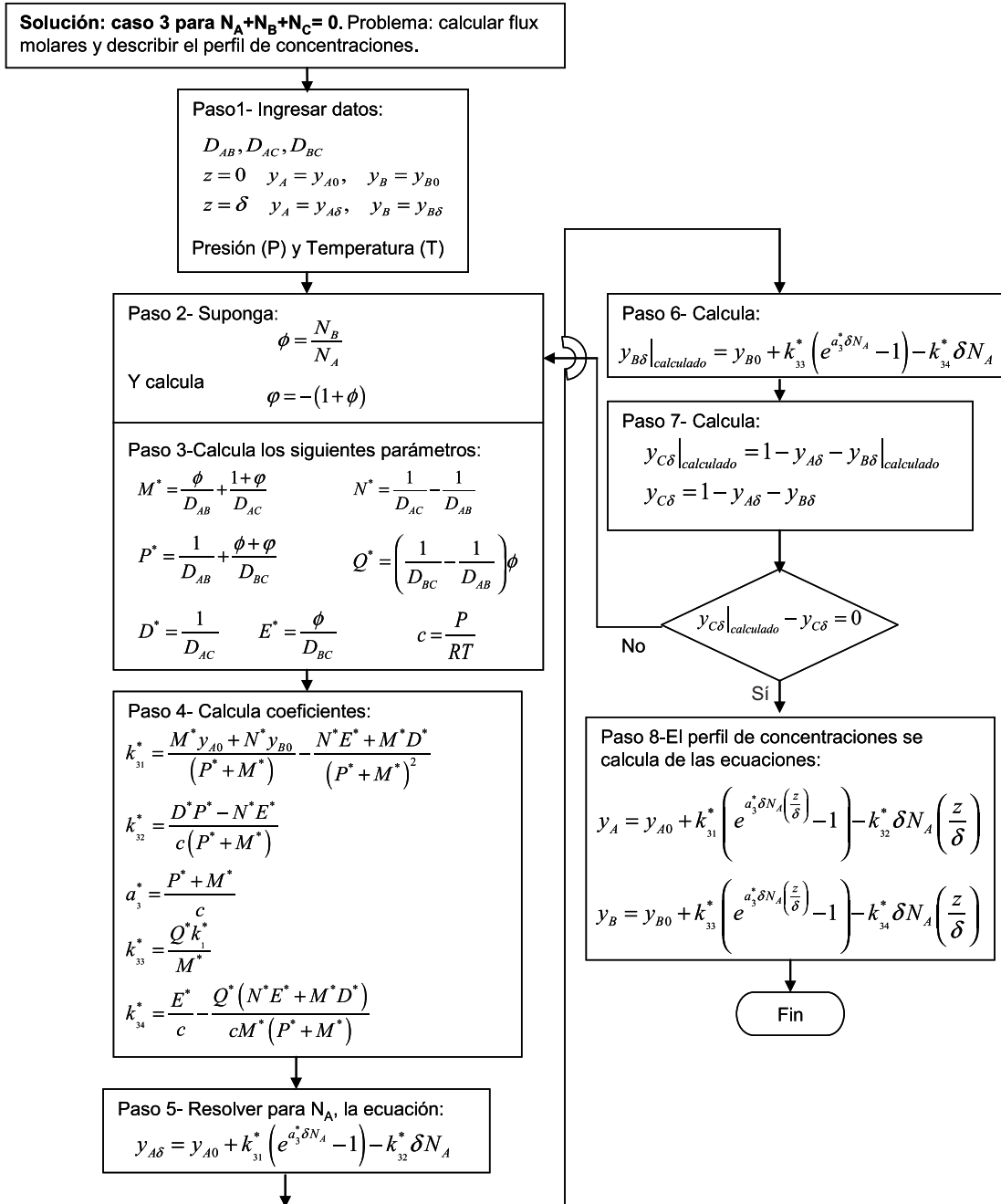
Los algoritmos son fácilmente implementados en una hoja de cálculo y se utilizan para resolver algunos problemas de la literatura, como los presentados por Taylor-Krishna al mostrar su método general para mezclas multicomponentes aplicados a tres componentes.



**Figura 1.** Algoritmo para resolver el caso 1 sin restricciones en los flux molares. Se calculan los flux molares y el perfil de concentraciones.



**Figura 2.** Algoritmo para resolver el caso 2  $N_C=0$ . Se calculan los flux molares y el perfil de concentraciones.



**Figura 3.** Algoritmo para resolver el caso 3  $N_A + N_B + N_C = 0$ . Se calculan los flux molares y el perfil de concentraciones.

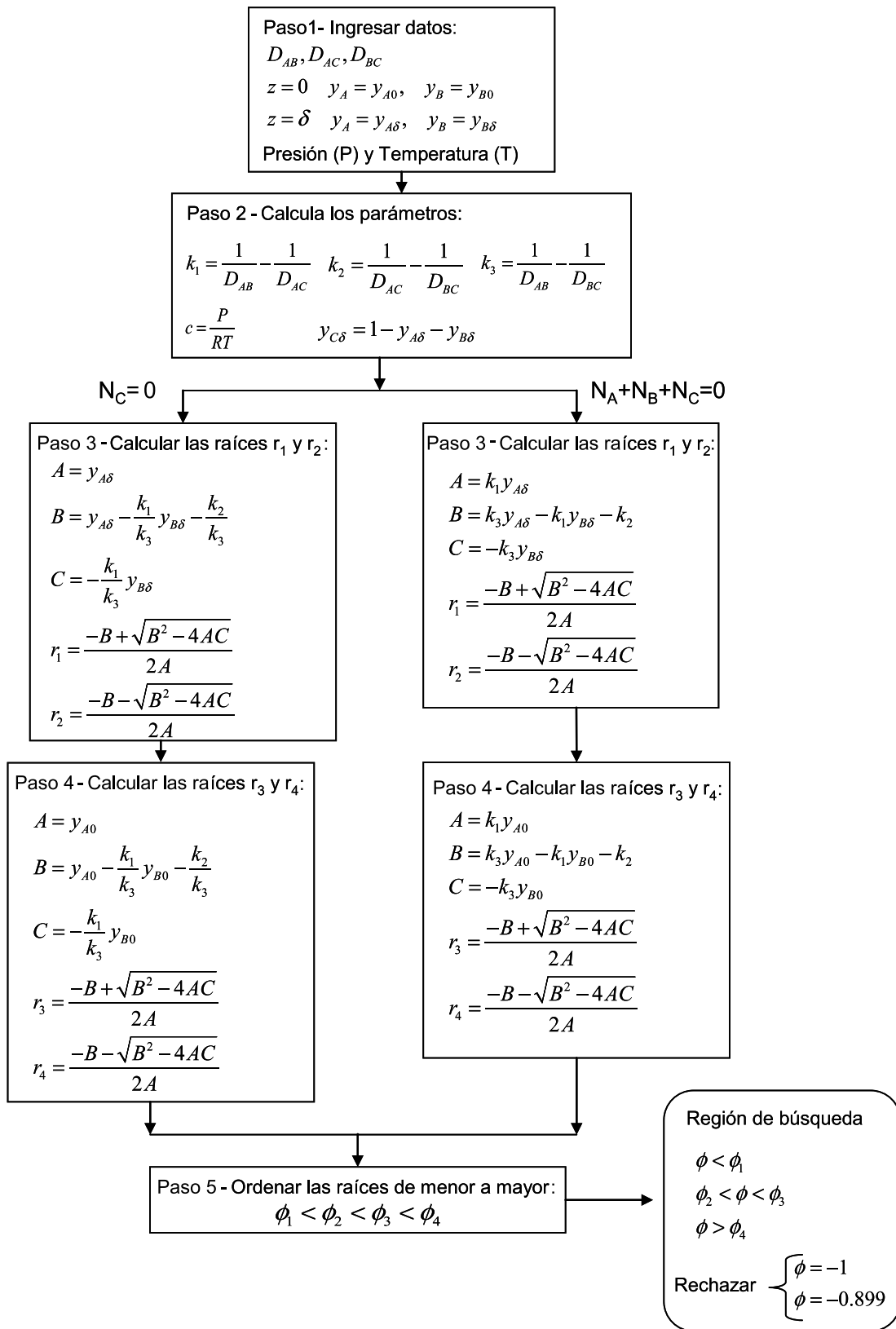


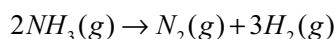
Figura 4. Algoritmo para determinar la región de búsqueda donde puede hallarse una solución para el valor de f en los casos 2 y 3.



### 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

#### Problema 1: Descomposición catalítica de amoníaco

Amoníaco (A) en fase gaseosa se difunde desde la masa principal hacia la superficie de un catalizador donde se descompone de acuerdo a la reacción química:



El nitrógeno (B) e hidrógeno (C) formados sobre la superficie del catalizador se difunden en sentido contrario al amoníaco y se mezclan en la masa principal del gas. Se considera que la reacción química es instantánea, y el amoníaco desaparece apenas llega a la superficie del catalizador ( $y_A = 0$ ). El proceso está controlado por el fenómeno de difusión y la relación de los flux molares se determina por la estequiometría de la reacción:

$$\frac{N_A}{2} = N_B = \frac{N_C}{3}$$

La presión es de 1 atmósfera y la temperatura promedio en el espesor de película ( $\delta$ ) es 200 °C. Los coeficientes de difusión binario se estiman a partir de la ecuación modificada de Wilke-Lee<sup>[8]</sup>:

$$D_{AB} = 0.520 \text{ cm}^2 / \text{s}$$

$$D_{AC} = 1.595 \text{ cm}^2 / \text{s}$$

$$D_{BC} = 1.527 \text{ cm}^2 / \text{s}$$

Las composiciones de la masa principal de la mezcla de gases, expresada en fracciones molares son:

$$z = 0, \quad y_{A0} = 0.3333 \quad y_{B0} = 0.1667 \quad y_{C0} = 0.500$$

De acuerdo a estas condiciones, el espesor de película ( $\delta$ ) se mide desde la masa principal del gas hacia la superficie del catalizador. La relación de flux molares son:

$$\phi = -\frac{1}{2} \quad \varphi = -\frac{3}{2}$$

Para este ejemplo se sigue el algoritmo de la Figura 1. Para calcular el flux molar la ecuación del paso 6 se arregla de la forma:

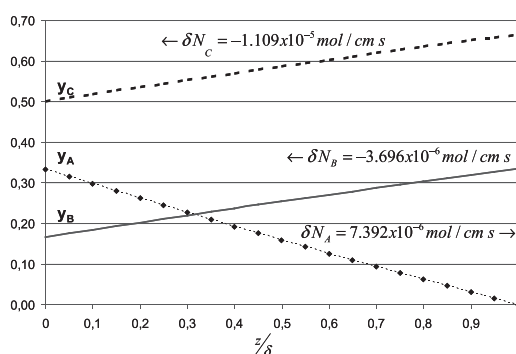
Se calcula  $\delta N_A$  haciendo  $y_{A\delta} = 0$ .

Utilizando la técnica de Newton se obtiene la solución en tres iteraciones. Como no se especifica el espesor de película,  $\delta$ , los flux molares se calculan como el producto  $\delta N_i$ .

La Figura N.º 5 muestra los perfiles de concentración que se obtienen del algoritmo de la Figura 1. En esta se observa que los flux netos de  $NH_3$ (A),  $N_2$ (B) e  $H_2$ (C) se dirigen en dirección que decrece la concentración como si fuese solamente difusión ordinaria.

#### Problema 2: Deshidrogenación del etanol en fase vapor<sup>[9]</sup>

Como en el caso anterior, el etanol (A) se difunde hacia la superficie de un catalizador donde se decompone de acuerdo a la siguiente reacción:



**Figura 5.** Perfiles de concentración para la difusión de una mezcla ternaria:  $NH_3$ (A),  $N_2$ (B),  $H_2$ (C) sin restricciones en el flux molar:  $N_B/N_A = -0.5$ ,  $N_C/N_A = -1.5$

El acetaldehído (B) y el hidrógeno (C) se difunden en sentido contrario al etanol (A). La relación de los flux molares es:

$$N_A = N_B = N_C$$

La concentración de etanol sobre la superficie del catalizador es diferente de cero por cuanto la cinética de la reacción es finita:

$$N_A = \frac{y_A}{k_c}$$

Las condiciones son:

Composición en la masa principal del gas

$$z = 0, y_{A0} = 0.6 \quad y_{B0} = 0.2 \quad y_{C0} = 0.2$$

Relación de flux molares

$$\phi = -1 \quad \phi = -1$$

La presión es de 1 atmósfera y la temperatura de 548 K.

La constante cinética,  $k_c = 0.001 \text{ mol/cm}^2 \text{ s}$ .

El espesor de película,  $\delta = 0.1 \text{ cm}$ .

Los coeficientes de difusión binarios son:

$$D_{AB} = 0.720 \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$D_{AC} = 2.30 \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$D_{BC} = 2.30 \text{ cm}^2/\text{s}$$

Se emplea el algoritmo de la figura 1, pero la ecuación del paso 6 se expresa como sigue:

$$\frac{(\delta N_A)}{\delta k_c} - k_{11} - k_{12} e^{a^*1} - k_{13} e^{a^*2 \delta N_A} = 0$$

Taylor-Krishna obtienen los siguientes resultados:

$$y_{A\delta} = 0.08960$$

$$N_A = 0.8960 \text{ mol/m}^2 \text{ s}$$

Los resultados se muestran en la Figura 6, con las ecuaciones desarrolladas aquí. En tres pasos iterativos, obtenemos:

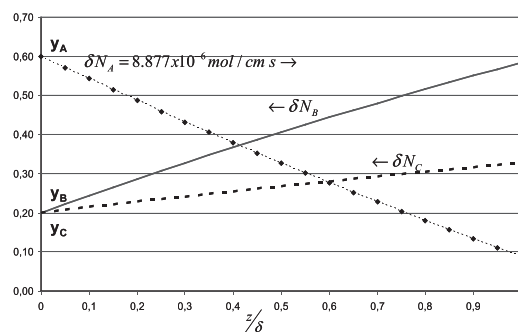
$$y_{A\delta} = 0.08877$$

$$N_A = 0.8877 \text{ mol/m}^2 \text{ s}$$

Los resultados se muestran en la Figura 6, con las ecuaciones desarrolladas aquí. En tres pasos iterativos, obtenemos:

$$y_{A\delta} = 0.08877$$

$$N_A = 0.8877 \text{ mol/m}^2 \text{ s}$$



**Figura 6:** Perfiles de concentración para la difusión de una mezcla ternaria: Etanol (A), acetaldehído (B), H<sub>2</sub>(C); con flux molares:  $N_B = N_A$ ,  $N_C = N_A$ .

### Problema 3: Evaporación de una mezcla líquida acetona-metanol en presencia de aire<sup>[10]</sup>

Una mezcla de líquidos acetona (A) - metanol (B) en presencia de aire se evapora en el tubo de Stefan. En la interfase gas-líquido prevalece un estado de equilibrio, y en el extremo superior del tubo, la corriente de aire lo mantiene libre de acetona y metanol. Las condiciones son:

Presión = 745.56 mm Hg, temperatura = 55.4 °C.

Las composiciones en las fronteras de la película son:

$$z = 0, y_{A0} = 0.319 \quad y_{B0} = 0.528$$

$$z = \delta \quad y_{A\delta} = 0 \quad y_{B\delta} = 0 \quad y_{C\delta} = 1$$

En este caso el aire (C) forma una capa estancada sobre la superficie del líquido, por lo tanto  $N_C = 0$ , es decir:

Los coeficientes de difusión binaria son:

$$D_{AB} = 0.0848 \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$D_{AC} = 0.1372 \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$D_{BC} = 0.1991 \text{ cm}^2/\text{s}$$

El espesor de película,  $\delta = 23.8 \text{ cm}$ .

Primero empleamos el algoritmo de la figura 4 para determinar la región de búsqueda de  $\phi$ . Se halla:

$$-0.6214 < \phi < 1.7718$$

Se explora diferentes valores de  $f$ , en el rango anterior, siguiendo el algoritmo de la Figura 2. Hallamos que la solución es:

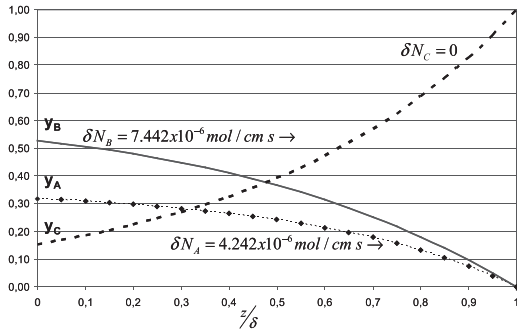
$$\phi = 1.7543$$

$$N_A = 1.782 \times 10^{-7} \text{ mol/cm}^2 \text{ s}$$

$$y_{A\delta} = 0.9996$$

**Problema 4: Contradifusión equimolar en la mezcla etanol-alcohol ter-butílico-agua<sup>[11]</sup>**

Considere ahora el problema de la mezcla etanol (A)- alcohol ter-butílico (B)- agua (C) con la condición  $N_A+N_B+N_C=0$ . Las condiciones son:



**Figura 7.** Perfiles de concentración para la difusión de mezcla: acetona (A), metanol (B), aire (C); con flux molar  $N_C = 0$ .

Presión = 760 mm Hg, temperatura = 133.07 °C.

Las composiciones en las fronteras de la película son:

$$z = 0, \quad y_{A0} = 0.65 \quad y_{B0} = 0.13$$

$$z = \delta \quad y_{A\delta} = 0.50 \quad y_{B\delta} = 0.14$$

En este caso el flux total neto es cero:

$$\phi = -(1 + \phi)$$

Los coeficientes de difusión binario son:

$$D_{AB} = 0.08 \text{ cm}^2 / \text{s}$$

$$D_{AC} = 0.21 \text{ cm}^2 / \text{s}$$

$$D_{BC} = 0.17 \text{ cm}^2 / \text{s}$$

El espesor de película es  $\delta = 0.1 \text{ cm}$ .

El algoritmo de la figura 4 determina las siguientes regiones de búsqueda para hallar una solución de  $\phi$ :

$$\phi < -1.085$$

$$-1.042 < \phi < 0.164$$

$$\phi > 0.2206$$

La exploración de diferentes valores de  $\phi$  con el algoritmo de la figura 3 conduce inicialmente a  $\phi = 0.05$ . A partir de este valor llegamos a la solución

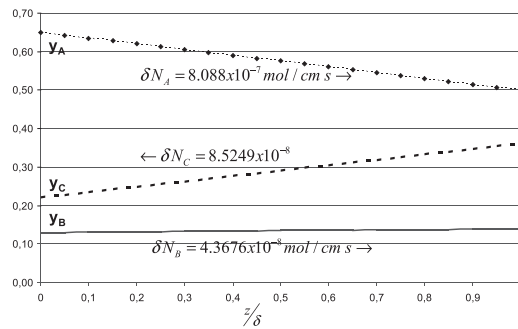
$$\phi = 0.054$$

$$N_A = 8.088 \times 10^{-2} \text{ mol/m}^2 \text{ s}$$

$$N_B = 4.3676 \times 10^{-3} \text{ mol/m}^2 \text{ s}$$

El método de Taylor-Krishna da como resultado los flux molares de A y B,  $8.086 \times 10^{-2}$  y  $4.344 \times 10^{-3} \text{ mol/m}^2 \text{ s}$ , respectivamente.

La Figura 8 muestra los perfiles de concentración.



**Figura 8.** Perfiles de concentración para la difusión de mezcla: etanol (A)- alcohol ter-butílico (B)- agua (C); con flux molar  $N_A+N_B+N_C = 0$ .

**Problema 5: Mezcla de evaporación constante<sup>[12]</sup>**

Consideramos el caso de una mezcla líquida tolueno (A) y etanol (B) que se evapora en una atmósfera inerte de nitrógeno (C). En el gas, el tolueno y etanol se difunden a través de una película de nitrógeno ( $N_C=0$ ) estancada. En la interfase líquido-gas ( $z=0$ )

prevalece el equilibrio termodinámico. Las composiciones de equilibrio en el gas, a 760 mm Hg y 15.56 °C, en función de la composición de la mezcla líquida son:

**Tabla 1.** Equilibrio líquido-vapor, sistema tolueno (A) + etanol (B) + nitrógeno (C)

| $x_A$ | $y_A$  | $y_B$  |
|-------|--------|--------|
| 0,096 | 0,075  | 0,4355 |
| 0,155 | 0,1034 | 0,4189 |
| 0,233 | 0,1264 | 0,3959 |
| 0,274 | 0,133  | 0,3867 |
| 0,375 | 0,1421 | 0,371  |

En el otro extremo de la película ( $z=\delta$ ) una corriente ligera de nitrógeno mantiene los niveles de concentración de tolueno y etanol despreciables, así que para fines prácticos la fracción molar de nitrógeno es 1.

Se denomina mezcla de evaporación constante aquella cuya composición molar del líquido está dado por la relación de los flux molares:

$$x_A = \frac{N_A}{N_A + N_B} = \frac{1}{1 + \phi} \quad (31)$$

Para efectuar los cálculos utilizamos los siguientes valores para los coeficientes de difusión molecular binarios:

$$D_{AB} = 0.03625 \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$D_{AC} = 0.07066 \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$D_{BC} = 0.1109 \text{ cm}^2/\text{s}$$

El algoritmo de cálculo a seguir es el que corresponde a la figura 2, solo que en este caso las composiciones en  $z = 0$  se desconocen.

El procedimiento a seguir es:

- Suponer  $x_A$ .
- Estimar las composiciones  $y_{A0}$  y  $y_{B0}$  de la Tabla 1.
- Seguir el algoritmo de la Figura 4 para determinar la región de búsqueda donde puede hallarse una solución para  $\phi$ .

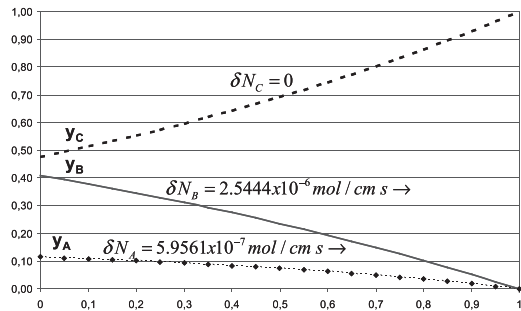
- Seguir el algoritmo de la Figura 2 para determinar el valor correcto de  $\phi$ .
- Calcula  $x_A$  de la ecuación 31. Compara este valor calculado con el valor supuesto y si estos se ajustan bajo cierta tolerancia habremos hallado la solución al problema.

Los resultados se muestran a continuación para dos valores supuestos de  $x_A$ :

| $x_A$ supuesto | $y_{A0}$ Tabla 1 | $y_{B0}$ Tabla 1 | $\phi$ calculado | $x_A$ calculado |
|----------------|------------------|------------------|------------------|-----------------|
| 0,233          | 0,1264           | 0,3959           | 3,765            | 0,2099          |
| 0,19           | 0,115            | 0,409            | 4,272            | 0,1897          |

Se observa que la solución es  $x_A = 0.19$ .

La Figura 9 muestra los perfiles de concentración y los valores de los flux molares.



**Figura 9.** Perfiles de concentración para mezcla de evaporación constante: tolueno (A), etanol (B),  $N_2$ (C), con  $N_C = 0$ .

#### 4. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Los resultados muestran que la velocidad de difusión, en una mezcla multicomponente, depende de la gradiente de concentración de todas las especies presentes, y la dirección de difusión no siempre ocurre en la misma dirección en que disminuye la concentración.

La metodología presentada en este trabajo constituye una alternativa de cálculo en el caso de mezclas ternarias y que requiere menos esfuerzo computacional. Se recomienda implementar el algoritmo de Taylor y Krishna porque es mucho más general y aplica a cualquier número de componentes en la mezcla.

**5. NOMENCLATURA**

A, B, C especies químicas

- $D_{ij}$  coeficiente de difusión binario i, j; [L<sup>2</sup>/ tiempo]
- $N_i$  flux molar de la especie química; [mol/L<sup>2</sup> tiempo]
- $y_i$  fracción de la especie i en la mezcla
- $z$  coordenada espacial
- $\delta$  espesor de película; [L]

- [4] Toor H.L., Diffusion in three component gas mixtures, *A.I.Ch.E: Journal*, 3 (2): 198-207, 1957.
- [5] Taylor R., R. Krishna, Multicomponent Mass Transfer, Jhon Wiley & Sons, p. 162, 1993.
- [6] Kreyszig E., Advanced Engineering Mathematics, 6.ª ed., Jhon Wiley & Sons Inc., p. 242, 1980.
- [7] Spiegel M., Transformada de Laplace, Serie de compendios Schaum, Mc Graw Hill, Mexico, p. 46-61, 1970.
- [8] Treybal R.E, *Op. cit.*, p
- [9] Taylor R., R. Krishna, *Op. cit.*, p. 191.
- [10] Taylor R., R. Krishna, *Op. cit.*, p. 21.
- [11] Taylor R., R. Krishna, *Op. cit.*, p. 170.
- [12] Bird R.B., Stewart W., Lightfoot E., *Op. cit.*

**6. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

- [1] Treybal R.E., *Mass Transfer Operations*, 3.ª ed. Mc Graw Hill Book Co., p. 21-35, 1980.
- [2] Bird R.B., Stewart W., Lightfoot E., 2.ª ed., Jhon Wiley & Sons, p. 514, 2002.
- [3] *Ibid.*, p. 538.

**ANEXO**

**Soluciones de Toor<sup>[4]</sup> para la difusión de tres gases ideales**

**Tabla 3.** Caso 2.  $N_C = 0$  barrera a la solubilidad.

|   |  |
|---|--|
| $N_A \left( \frac{1}{D_{AC}} + \frac{\phi}{D_{BC}} \right) = \left( \frac{c}{\delta} \right) \ln \left[ \frac{y_{C\delta}}{y_{C0}} \right] \quad (23)$  | $k_1 = \frac{1}{D_{AB}} - \frac{1}{D_{AC}}$            |
| $N_A (1 + \phi) = \frac{cD_{AB}}{\delta} \ln \left[ \frac{\phi(1 + \phi)y_{A\delta} - (1 + \phi)(k_1/k_3)y_{B\delta} - \phi(k_2/k_3)}{\phi(1 + \phi)y_{A0} - (1 + \phi)(k_1/k_3)y_{B0} - \phi(k_2/k_3)} \right] \quad (24)$ | $k_2 = \frac{1}{D_{AC}} - \frac{1}{D_{BC}} \quad (25)$ |
|   | $k_3 = \frac{1}{D_{AB}} - \frac{1}{D_{BC}}$            |

**Tabla 4.** Caso 3.  $N_C = 0$  barrera a la solubilidad y  $N_B = 0$  barrera a la difusión.

|   |   |
|---|---|
| $N_A = \left( \frac{cD_{AC}}{\delta} \right) \ln [r_C] \quad (26)$              |   |
| $\frac{y_{B\delta}}{y_{B0}} = (r_C)^{\frac{D_{AC}}{D_{AB}}} \quad (27)$         | $r_C = \frac{y_{C\delta}}{y_{C0}} \quad (29)$ |
| $y_{A\delta} = 1 - y_{C0}r_C - y_{B0} (r_C)^{\frac{D_{AC}}{D_{AB}}} \quad (28)$ |   |

**Tabla 5.** Caso 4.  $NA + NB + NC = 0$  Difusión neta igual a cero.

|   |  |
|---|--|
| $N_A \left( \frac{k_3}{D_{AC}} + \frac{k_1 \phi}{D_{BC}} \right) = \frac{c}{\delta} [k_3 (y_{A0} - y_{A\delta}) + k_1 (y_{B0} - y_{B\delta})] \quad (30)$   | $k_1 = \frac{1}{D_{AB}} - \frac{1}{D_{AC}}$ $k_2 = \frac{1}{D_{AC}} - \frac{1}{D_{BC}} \quad (25)$ $k_3 = \frac{1}{D_{AB}} - \frac{1}{D_{BC}}$ |
| $N_A (k_3 + k_1 \phi) = \frac{c}{\delta} \ln \left[ \frac{k_1 y_{A\delta} \phi^2 + (k_3 y_{A\delta} - k_1 y_{B\delta} - k_2) \phi - k_3 y_{B\delta}}{k_1 y_{A0} \phi^2 + (k_3 y_{A0} - k_1 y_{B0} - k_2) \phi - k_3 y_{B0}} \right] \quad (31)$ |  |

**Tabla 6.** Caso 5.  $NA + NB + NC = 0$  y  $NC = 0$  barrera a la difusión.

|  |   |
|--|---|
| $N_A = \left( \frac{c}{\delta k_2} \right) \ln[r_C] \quad (32)$                                    | $r_C = \frac{y_{C\delta}}{y_{C0}} \quad (29)$ |
| $D_{AB} [k_3 (y_{A0} - y_{A\delta}) + k_1 (y_{B0} - y_{B\delta})] = \ln[r_C] \quad (33)$           |   |
| $y_{A\delta} = y_{A0} + \frac{k_1}{k_2} y_{C0} (r_C - 1) - \frac{\ln[r_C]}{k_2 D_{AB}} \quad (34)$ |   |