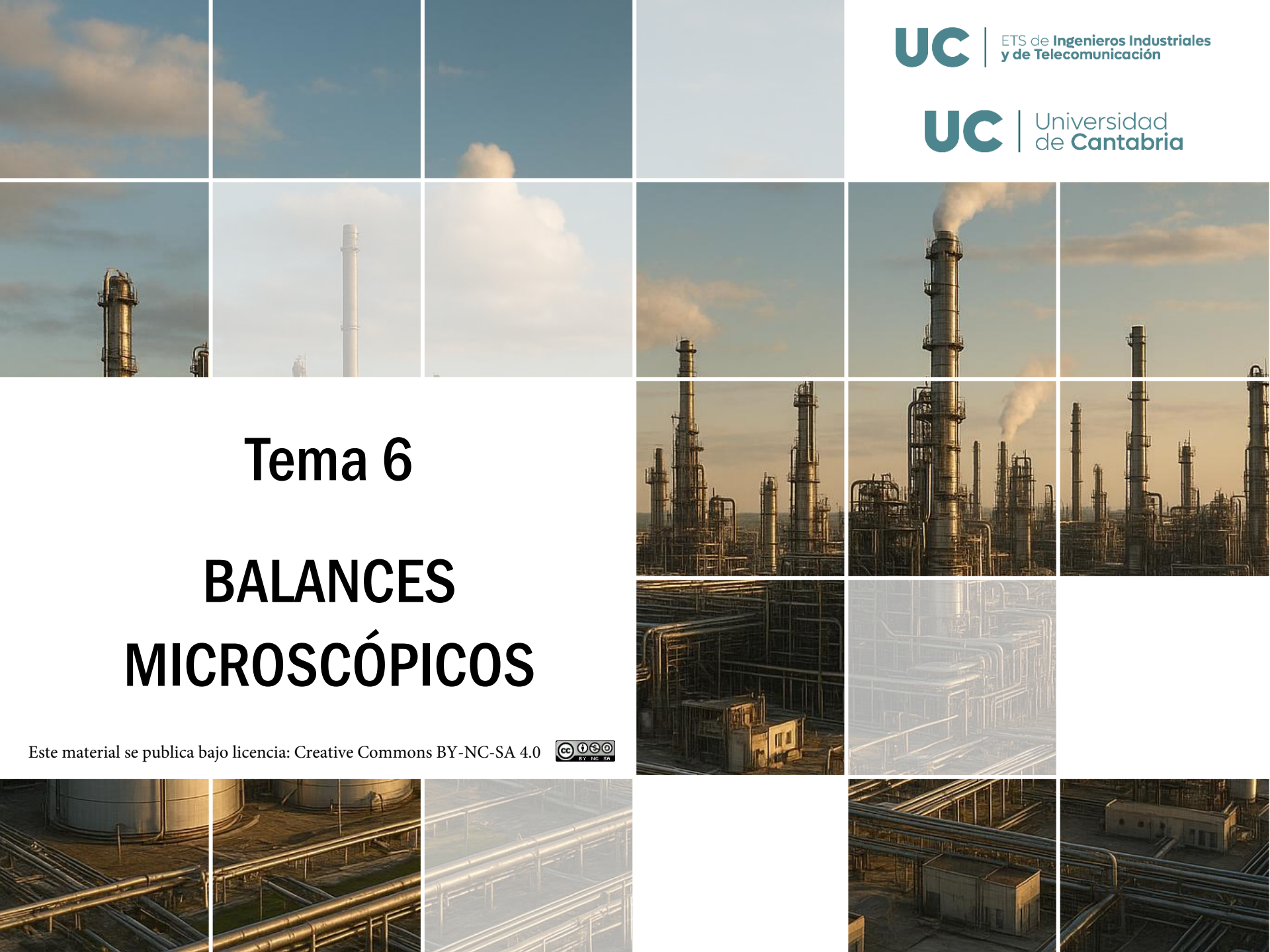
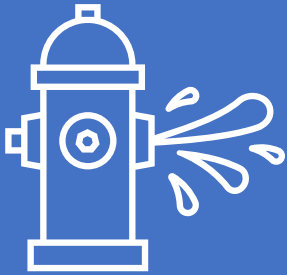


Tema 6

BALANCES MICROSCÓPICOS

Este material se publica bajo licencia: Creative Commons BY-NC-SA 4.0



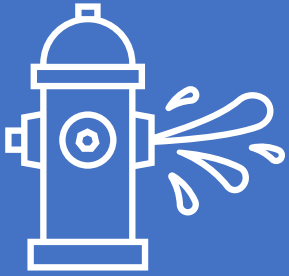


6.1 Balances
microscópicos
de
conservación
de la materia

Tema 6

BALANCES

MICROSCÓPICOS



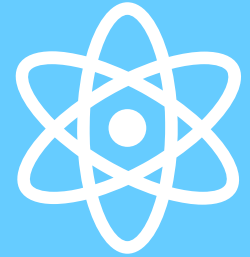
6.1 Balances
microscópicos
de
conservación
de la materia



6.2. Balances
microscópicos
de cantidad de
movimiento



6.3. Balances
microscópicos
de energía



6.4. Balances
microscópicos
de materia

1

Conocer las implicaciones de la ecuación de continuidad

Identificar el resultado en forma de perfiles de velocidad, temperatura y concentración / composición de los balances microscópicos de cantidad de movimiento, energía y materia respectivamente

Resultados de aprendizaje

- **Formular balances microscópicos para la conservación de la materia, de cantidad de movimiento, de energía y de materia**

1

Conocer las implicaciones de la ecuación de continuidad

Identificar el resultado en forma de perfiles de velocidad, temperatura y concentración / composición de los balances microscópicos de cantidad de movimiento, energía y materia respectivamente

2

Aplicar una metodología para la resolución de balances microscópicos de cantidad de movimiento

3

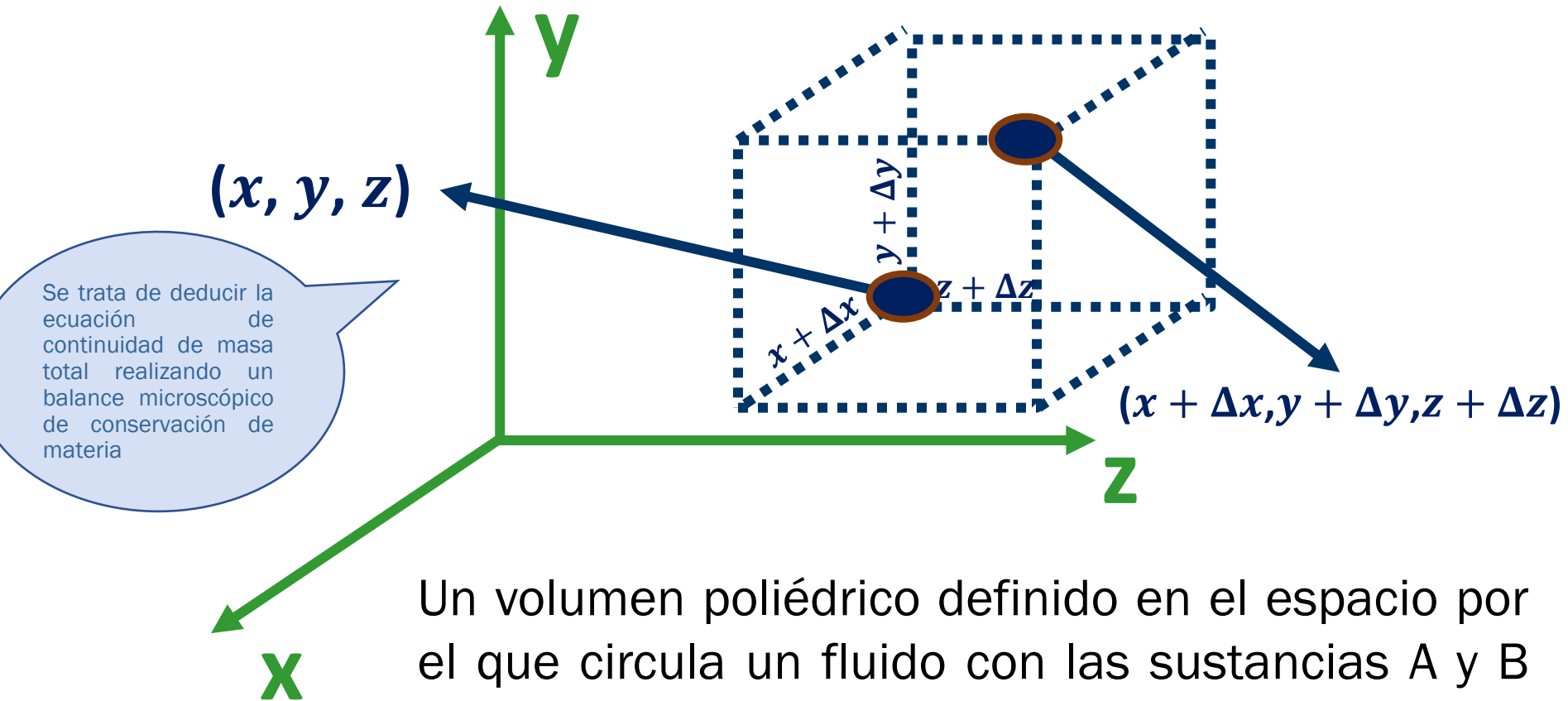
Aplicar una metodología para la resolución de balances microscópicos de energía

4

Aplicar una metodología para la resolución de balances microscópicos de materia

6.1 Balances microscópicos de conservación de la materia

Aplicación del BMic de conservación de materia



Un volumen poliédrico definido en el espacio por el que circula un fluido con las sustancias A y B en una dirección cualquiera (entra por los lados contiguos al vértice (x, y, z) y sale por los lados del vértice opuesto $(x + \Delta x, y + \Delta y, z + \Delta z)$)

Aplicación del BMic de conservación de materia

Ecuación de continuidad

Balance de materia en forma diferencial

(flujo másico, masa por unidad de tiempo p.ej.: kg/s)

ACUMULACIÓN

$$A = E - S$$
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z =$$

Tenemos un elemento de volumen $\Delta x \Delta y \Delta z$ luego al multiplicar por $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ quedaría $\frac{\partial m}{\partial t}$ es decir, flujo másico

$$\begin{aligned} & (|(\rho u_x)|_x - |(\rho u_x)|_{x+\Delta x}) \Delta y \Delta z + \\ & (|(\rho u_y)|_y - |(\rho u_y)|_{y+\Delta y}) \Delta x \Delta z + \\ & (|(\rho u_z)|_z - |(\rho u_z)|_{z+\Delta z}) \Delta x \Delta y \end{aligned}$$

El producto de la densidad de flujo másico G por un área A es el flujo másico que entra/sale a través de esa área $\rho u \cdot A$

ENTRADA - SALIDA

La densidad de flujo másico G se puede calcular como el producto de la densidad por la velocidad $G = \rho u$. De esta forma el producto de la densidad por la velocidad ρu es equivalente a $\frac{m}{V} u = \frac{mu}{V}$ es decir G y $\frac{mu}{V}$ tienen dimensiones equivalentes (cantidad de movimiento por unidad de volumen)

Estas son las áreas del poliedro anterior

Aplicación del BMic de conservación de materia

Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \left[\frac{\partial(\rho u_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho u_z)}{\partial z} \right]$$

Al dividir por el volumen del elemento diferencial y tomar el límite $\Delta x, \Delta y, \Delta z \rightarrow 0$, se obtiene la forma diferencial local

Podemos relacionar la variación local de la densidad con el tiempo con la divergencia de la densidad de flujo másico convectivo según:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0$$

La densidad es un escalar, lo que no implica que no pueda variar con la posición x, y, z

$\nabla \cdot$ indica la operación de divergencia

ρu es un vector ya que u es un vector

La divergencia del vector densidad de flujo másico ρu es un escalar

Aplicación del BMic de conservación de materia

Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0$$

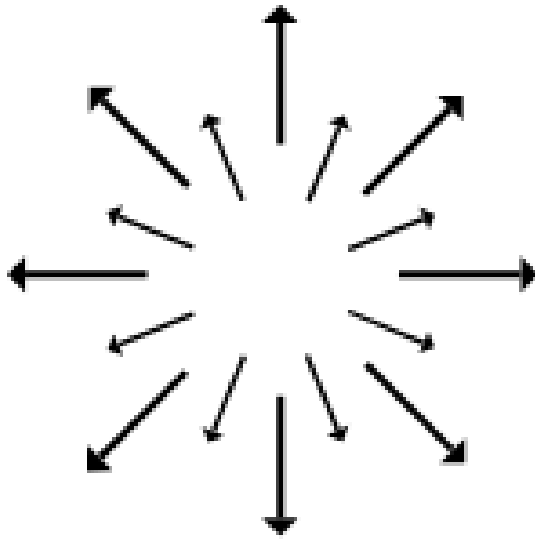
Esta ya sería la ecuación de continuidad o ecuación de conservación de masa total, válida para flujo compresible e incompresible, newtonianos y no newtonianos y flujo estacionario o no estacionario

La divergencia de la densidad de flujo másico $\nabla \cdot (\rho u)$ es una propiedad local del campo vectorial y nos indica si el fluido está divergiendo o convergiendo:

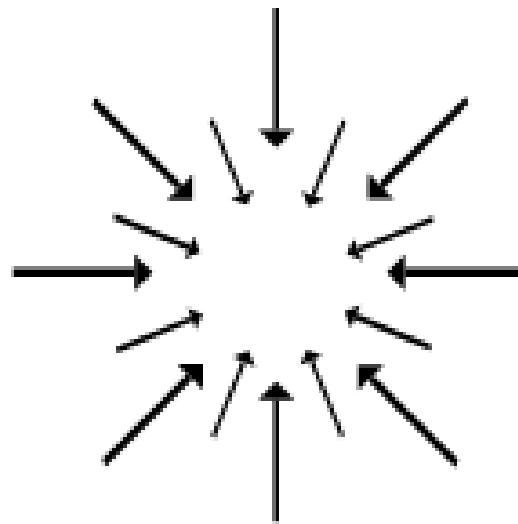
- Si $\nabla \cdot (\rho u) > 0$, el campo ρu se expande localmente, por lo que disminuye la densidad ρ ($\partial \rho / \partial t < 0$)
- Si $\nabla \cdot (\rho u) < 0$, el campo ρu converge/ se comprime localmente, por lo que aumenta la densidad ρ ($\partial \rho / \partial t > 0$)

Aplicación del BMic de conservación de materia

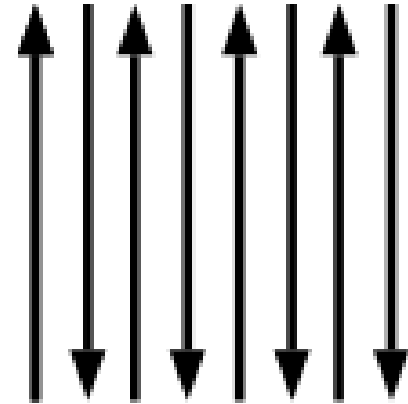
Definición de la ecuación de continuidad



$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{V}_x) &> 0 \\ \frac{\partial}{\partial y}(\mathbf{V}_y) &> 0 \\ \nabla \cdot (\mathbf{V}) &> 0\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{V}_x) &< 0 \\ \frac{\partial}{\partial y}(\mathbf{V}_y) &< 0 \\ \nabla \cdot (\mathbf{V}) &< 0\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{V}_x) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial y}(\mathbf{V}_y) &= 0 \\ \nabla \cdot (\mathbf{V}) &= 0\end{aligned}$$

Aplicación del BMic de conservación de materia

Ecuación de continuidad

Si ahora reordenamos $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho u)$$

Para un flujo con densidad local estacionaria ($\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$) luego:

$$\nabla \cdot (\rho u) = 0$$

Y ahora operando usando la identidad vec. del producto escalar:

$$\rho(\nabla \cdot u) + u \cdot (\nabla \rho) = 0$$

Aplicación del BMic de conservación de materia

Ecuación de continuidad

Y ahora operando usando la identidad vec. del producto escalar:

$$\rho(\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mathbf{u} \cdot (\nabla \rho) = 0$$

Combinando con la hipótesis de campo de densidad uniforme, ρ espacialmente constante, $(\nabla \rho) = 0$

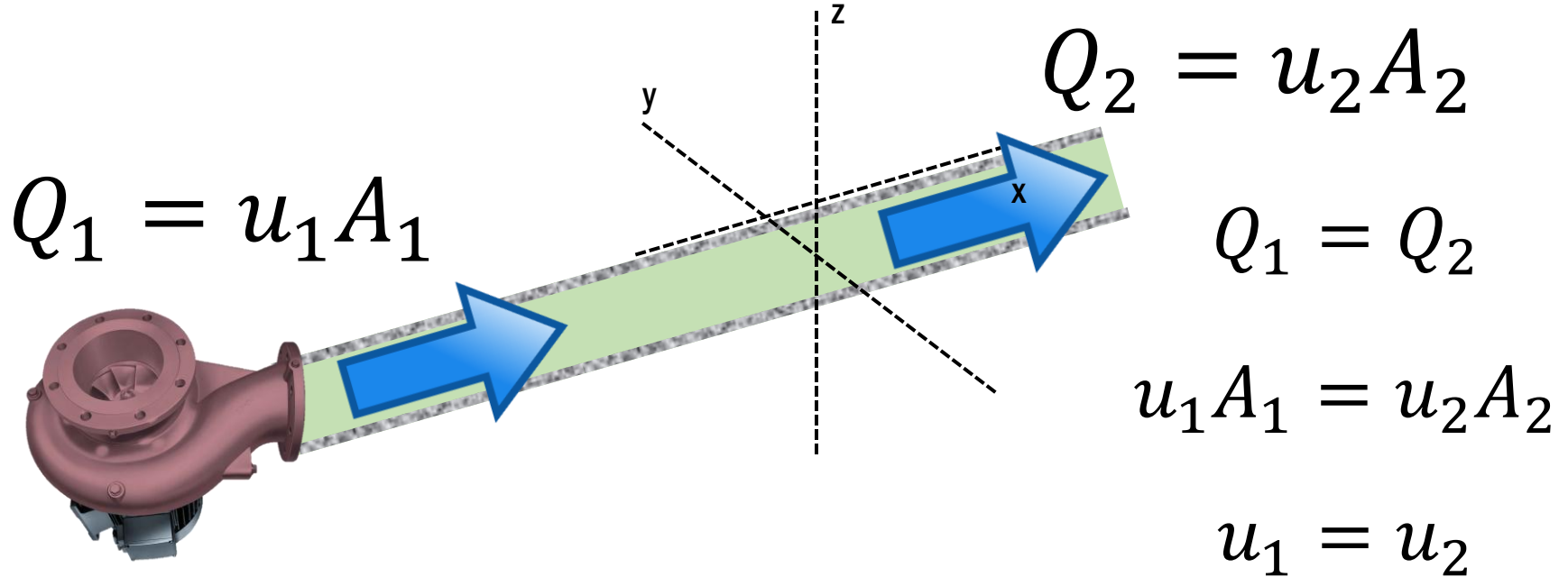
$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

Ecuación de continuidad simplificada para un fluido de densidad constante

Esta es la forma simplificada de la ecuación de continuidad para un fluido $\rho = cte$. Indica que no existe expansión ni compresión local del elemento material de fluido, y por tanto, su volumen se conserva durante el movimiento.

Aplicación del BMic de conservación de materia

Aplicación macroscópica de la ecuación de continuidad



En una conducción de sección constante $A_1 = A_2$, si $\rho = cte$, al no crearse ni destruirse materia, las velocidades lineales en los extremos deben ser necesariamente iguales $u_1 = u_2$. Este resultado es una consecuencia macroscópica de aplicar $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ sobre una región geométrica con área constante: el balance integral de masa $Q_1 = Q_2$ por ser $\rho = cte$ implica que las velocidades medias aguas arriba y aguas abajo deben ser iguales: $\overline{u}_1 = \overline{u}_2$

Aplicación del BMic de conservación de materia

La ecuación de continuidad: otros sistemas de coordenadas

$$[\partial\rho/\partial t + (\nabla \cdot \rho\mathbf{v}) = 0]$$

Coordenadas cartesianas (x, y, z):

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z) = 0 \quad (\text{B.4-1})$$

Coordenadas cilíndricas (r, θ , z):

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}(\rho v_\theta) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z) = 0 \quad (\text{B.4-2})$$

Coordenadas esféricas (r, θ , ϕ):

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r^2 v_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta}(\rho v_\theta \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}(\rho v_\phi) = 0 \quad (\text{B.4-3})$$

^a Cuando se supone que el fluido tiene densidad de materia constante ρ , la ecuación se simplifica a $(\nabla \cdot \mathbf{v}) = 0$.

Aplicación del BMic de conservación de materia

Consideraciones a la ecuación de continuidad

La ecuación de continuidad es un balance de conservación de masa total. No contiene leyes constitutivas de transporte molecular. Las leyes de Newton, Fourier y Fick se introducen después para cerrar, respectivamente, el transporte molecular de cantidad de movimiento, energía por conducción y materia por difusión. En particular, la ley de Newton de la viscosidad se usa como cierre directo para problemas laminares. En régimen turbulento, el mezclado turbulento/macroscópico introduce transporte adicional de cantidad de movimiento y no se puede resolver el problema aplicando directamente $\tau = \mu \frac{\partial u}{\partial y}$ como en laminar.

Aplicación del BMic de conservación de materia

Consideraciones a la ecuación de continuidad

Es esencial no confundir la forma general de la ecuación de continuidad —expresada mediante la divergencia del vector densidad de flujo másico— con su expresión particular en un sistema concreto de coordenadas. El operador divergencia tiene definiciones distintas en coordenadas rectangulares, cilíndricas y esféricas, lo que conduce a desarrollos diferentes de la misma ecuación física, aunque el contenido del balance no cambia.

6.2 Balances microscópicos de cantidad de movimiento

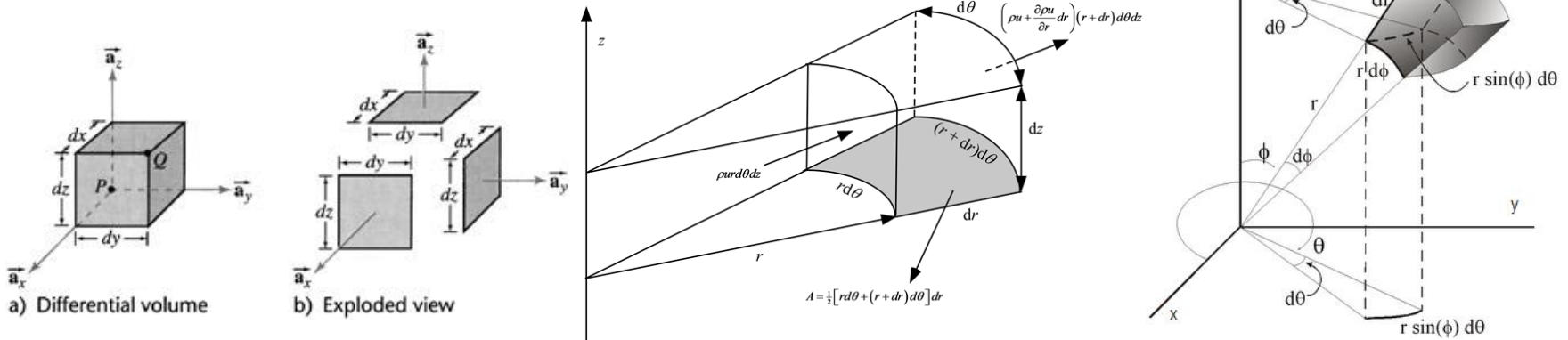


Aplicación del BMic de cantidad de movimiento

$$\mathbf{E} - \mathbf{S} + \mathbf{F} = \mathbf{0}$$

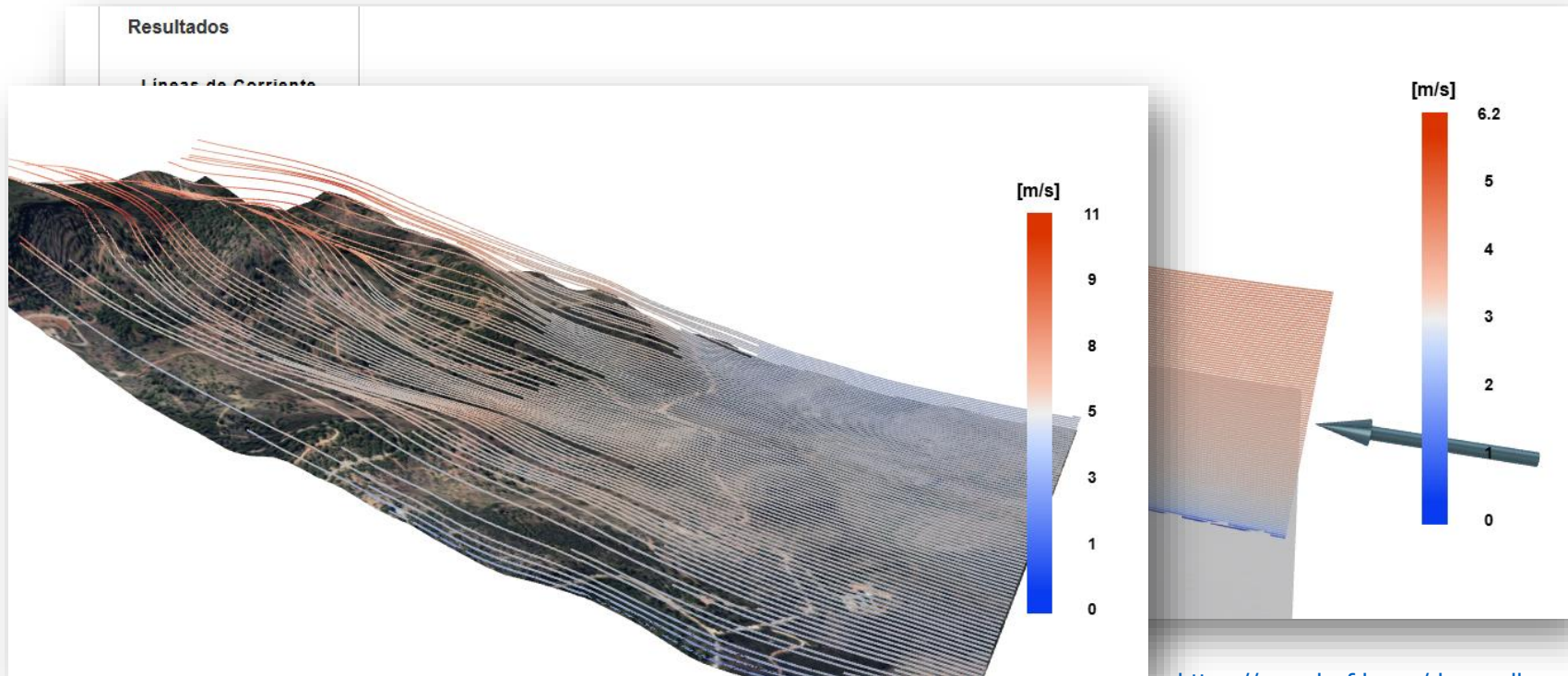
Balance de cantidad de movimiento en estado estacionario en forma diferencial

El balance microscópico de cantidad de movimiento establece que la divergencia del flujo de cantidad de movimiento debe igualar la suma de las fuerzas de superficie y de cuerpo que actúan sobre el fluido. Estas fuerzas pueden ser: (i) de superficie (presión y esfuerzos viscosos) y (ii) de cuerpo (como la gravedad). El resultado es una ecuación vectorial que representa un balance de fuerzas por unidad de volumen.



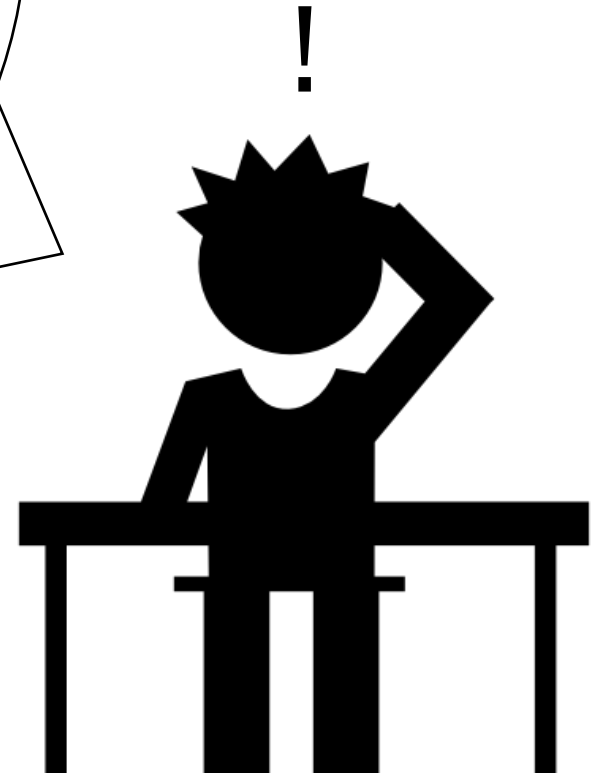
Aplicación del BMic de cantidad de movimiento

El objetivo fundamental de aplicar el balance microscópico de cantidad de movimiento es determinar el campo de velocidades, es decir, **obtener el vector velocidad en cada punto** del dominio geométrico considerado.



Recuerdo que la cantidad de movimiento es el producto de la masa m por la velocidad u , luego la tasa de variación con el tiempo de la cantidad de movimiento $\frac{d(mu)}{dt}$ debe tener las dimensiones de la fuerza F

$$\sum F = \frac{d(mu)}{dt} = m \frac{du}{dt} = ma$$



Aplicación del BMic de cantidad de movimiento

Ecuaciones diferenciales de distribución de densidad de flujo de cantidad de movimiento en coordenadas cartesianas (x, y, z) para un fluido incompresible (balance general + $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$; aún en función del tensor τ)

$\frac{Du}{Dt}$ es la derivada material
→ derivada con el t más las derivadas parciales con la posición x, y, z

ρ es cte. por ser incompresible

Gradiente de presión

Divergencia del tensor de tensiones viscosas

Todos los términos tienen unidades de fuerza por unidad de volumen [N/m^3]

$$\rho \left[\frac{Du}{Dt} \right] = -\nabla p - [\nabla \cdot \tau] + \rho g$$

Fuerza gravitacional por und. de volumen

Aceleración
Aceleración por convección

Fuerzas Externas (presión)

Fuerzas viscosas

Fuerzas Externas (gravedad)

$$\rho \left(\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} - \left[\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right] + \rho g_x$$

Una ecuación por cada componente → 3 ecuaciones

$$\rho \left(\frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_y}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} - \left[\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \right] + \rho g_y$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} - \left[\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right] + \rho g_z$$

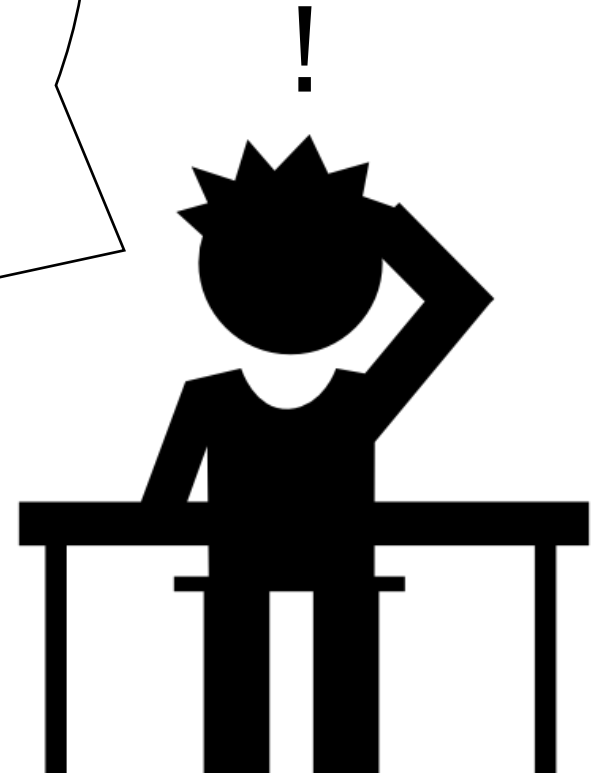
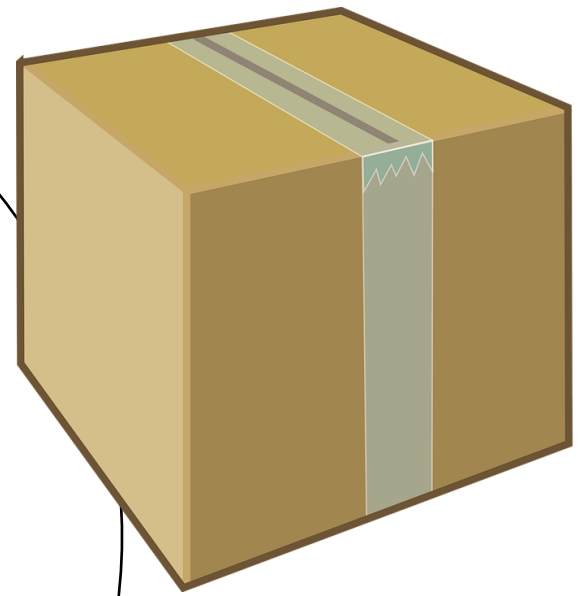
Tasa de cambio de la cantidad de movimiento por und. de volumen

Fuerza debida al gradiente de presión por und. de volumen

Fuerzas viscosas por und. de volumen

Fuerza debida a la acción de la gravedad por und. de volumen

¡Entendido! Lo que sucede es que al aplicar una fuerza sobre un volumen de fluido será capaz de mover a este, es decir, tendrá cierta velocidad, es decir, al aplicar fuerzas sobre un volumen/superficies generará perfiles de velocidad. El balance de fuerzas determina si está en reposo, o si tiene velocidad constante ($\rightarrow$ fuerza neta cero) o si acelera ($\rightarrow$ fuerza neta distinta de cero)



Aplicación del BMic de cantidad de movimiento

Ecuaciones diferenciales de distribución de densidad de flujo de cantidad de movimiento en coordenadas cilíndricas (r, θ, z) para un fluido incompresible

(balance general + $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$; aún en función de τ)

$$\begin{aligned} & \rho \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} - \frac{u_\theta^2}{r} \right) \\ &= -\frac{\partial p}{\partial r} - \left[\frac{1}{r} \frac{\partial(r\tau_{rr})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\theta r}}{\partial \theta} + \frac{\partial \tau_{zr}}{\partial z} - \frac{\tau_{\theta\theta}}{r} \right] + \rho g_r \end{aligned}$$

¡Son 3 ecuaciones diferentes, una por cada componente de la velocidad!

$$\begin{aligned} & \rho \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_\theta}{\partial z} - \frac{u_r u_\theta}{r} \right) = \\ & -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} - \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 \tau_{r\theta})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\theta\theta}}{\partial \theta} + \frac{\partial \tau_{z\theta}}{\partial z} + \frac{\tau_{\theta r} - \tau_{r\theta}}{r} \right] + \rho g_\theta \end{aligned}$$
$$\begin{aligned} & \rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = \\ & -\frac{\partial p}{\partial z} - \left[\frac{1}{r} \frac{\partial(r\tau_{rz})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\theta z}}{\partial \theta} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right] + \rho g_z \end{aligned}$$

Aplicación del BMic de cantidad de movimiento

Ecuaciones diferenciales de distribución de densidad de flujo de cantidad de movimiento en coordenadas cilíndricas (r, θ, z) para un fluido incompresible

$$\rho \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} - \frac{u_\theta^2}{r} \right) = -\frac{\partial p}{\partial r} - \left[\frac{1}{r} \frac{\partial(r\tau_{rr})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial\tau_{\theta r}}{\partial \theta} + \frac{\partial\tau_{zr}}{\partial z} - \frac{\tau_{\theta\theta}}{r} \right] + \rho g_r$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_\theta}{\partial z} + \frac{u_r u_\theta}{r} \right) = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} - \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2\tau_{r\theta})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial\tau_{\theta\theta}}{\partial \theta} + \frac{\partial\tau_{z\theta}}{\partial z} + \frac{\tau_{\theta r} - \tau_{r\theta}}{r} \right] + \rho g_\theta$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} - \left[\frac{1}{r} \frac{\partial(r\tau_{rz})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial\tau_{\theta z}}{\partial \theta} + \frac{\partial\tau_{zz}}{\partial z} \right] + \rho g_z$$

Esta diapositiva duplica la anterior – pendiente de añadir la versión en coordenadas esféricas (BSL Tabla B.6)

Aplicación del BMic de cantidad de movimiento

Ecuaciones diferenciales de distribución de densidad de flujo de cantidad de movimiento en coordenadas cilíndricas (r, θ, ϕ) para un fluido incompresible

Coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) :

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial v_r}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + \frac{v_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial v_r}{\partial \phi} - \frac{v_\theta^2 + v_\phi^2}{r} \right) &= - \frac{\partial p}{\partial r} \\ &- \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \tau_{rr}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\tau_{\theta r} \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \tau_{\phi r} - \frac{\tau_{\theta\theta} + \tau_{\phi\phi}}{r} \right] + \rho g_r \\ \rho \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\theta}{\partial \phi} + \frac{v_r v_\theta - v_\phi^2 \cot \theta}{r} \right) &= - \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} \\ &- \left[\frac{1}{r^3} \frac{\partial}{\partial r} (r^3 \tau_{r\theta}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\tau_{\theta\theta} \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \tau_{\phi\theta} + \frac{(\tau_{\theta r} - \tau_{r\theta}) - \tau_{\phi\phi} \cot \theta}{r} \right] + \rho g_\theta \\ \rho \left(\frac{\partial v_\phi}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_\phi}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_\phi}{\partial \theta} + \frac{v_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} + \frac{v_\phi v_r + v_\theta v_\phi \cot \theta}{r} \right) &= - \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial p}{\partial \phi} \\ &- \left[\frac{1}{r^3} \frac{\partial}{\partial r} (r^3 \tau_{r\phi}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\tau_{\theta\phi} \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \tau_{\phi\phi} + \frac{(\tau_{\phi r} - \tau_{r\phi}) + \tau_{\phi\theta} \cot \theta}{r} \right] + \rho g_\phi \end{aligned}$$

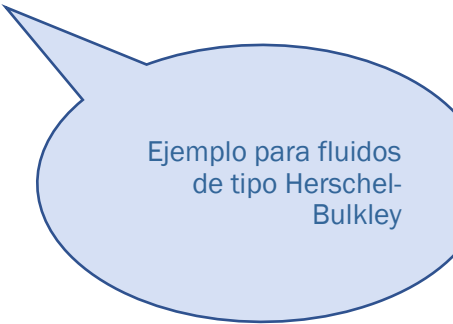
Estas ecuaciones se han escrito sin hacer la suposición de que τ es simétrico. Esto significa, por ejemplo, que cuando la suposición común de que el tensor de esfuerzo es simétrico, entonces $\tau_{r\theta} - \tau_{\theta r} = 0$.

Aplicación del BMic de cantidad de movimiento

En los tres sistemas de coordenadas anteriores aparece explícitamente el tensor de esfuerzos τ_{yx} . Para poder expresar el balance microscópico únicamente en términos de la velocidad u , es necesario introducir una ley de transporte molecular que relacione esfuerzo cortante τ_{yx} y tasa de deformación $\frac{du_x}{dy}$:

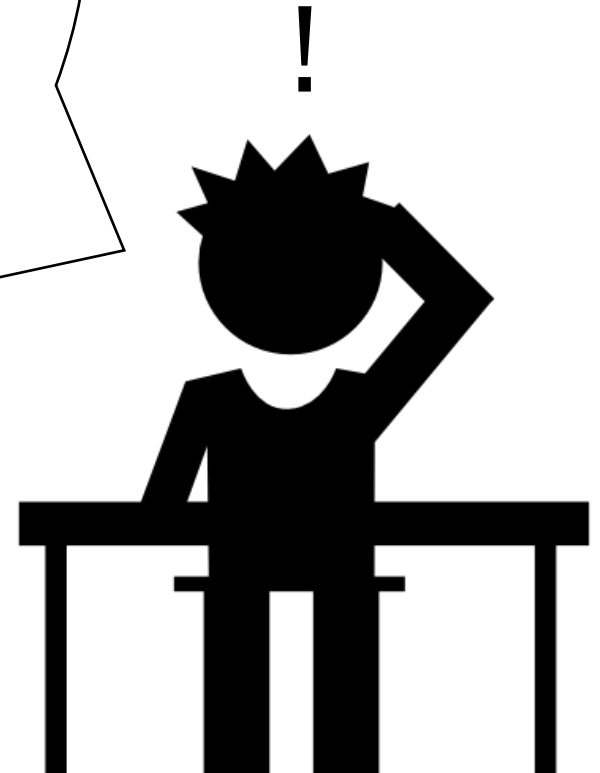
$$\tau_{yx} = |\tau_{yx}| = \tau_0 + K \left| \frac{du_x}{dy} \right|^{n-1} \frac{du_x}{dy}$$

Por tanto, en función de la combinación de los valores de τ_0 (tensión de fluencia), el K (índice de consistencia) y de n (exponente) se tendrán diferentes perfiles de velocidad para la misma geometría. Como es obvio, cuando $\tau_0 = 0$ y $n = 1$ se tendrá la expresión para fluidos newtonianos.



Ejemplo para fluidos
de tipo Herschel-
Bulkley

Por eso introducimos la ley de Newton de la viscosidad antes de resolver balances microscópicos de cantidad de movimiento en régimen laminar: relaciona el esfuerzo cortante molecular con el gradiente de velocidad. Esta relación permite cerrar el balance y obtener perfiles de velocidad en los casos laminares tratados en este tema



Aplicación del BMic de cantidad de movimiento

Ecuaciones diferenciales de distribución de densidad de flujo de cantidad de movimiento en coordenadas cartesianas (x, y, z) para un **fluido newtoniano** con densidad y viscosidad constante (Navier-Stokes)

Son 3 ecuaciones, una por componente de velocidad, tras sustituir la ley de Newton de la viscosidad para un fluido newtoniano (se usarán como cierre directo en régimen laminar)

$$\rho \left(\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left[\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right] + \rho g_x$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_y}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left[\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right] + \rho g_y$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right] + \rho g_z$$

Tasa de cambio de la cantidad de movimiento por und. de volumen

Fuerza debida al gradiente de presión por und. de volumen

Fuerzas viscosas por und. de volumen

Fuerza debida a la acción de la gravedad por und. de volumen

Aceleración

Aceleración por convección

Fuerzas externas

Fuerzas viscosas

Fuerzas externas

Aplicación del BMic de cantidad de movimiento

Ecuaciones diferenciales de distribución de densidad de flujo de cantidad de movimiento en coordenadas cilíndricas (r, θ, z) (Navier-Stokes) para un fluido newtoniano con densidad y viscosidad constante (Navier-Stokes)

$$\begin{aligned} & \rho \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} - \frac{u_\theta^2}{r} \right) \\ &= -\frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial (ru_r)}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_r}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} \right] + \rho g_r \\ & \rho \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_\theta}{\partial z} + \frac{u_r u_\theta}{r} \right) \\ &= -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \mu \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial (ru_\theta)}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial z^2} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right] + \rho g_\theta \\ & \rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = \\ & \quad -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial z^2} \right] + \rho g_z \end{aligned}$$

Aplicación del BMic de cantidad de movimiento

Ecuaciones diferenciales de distribución de densidad de flujo de cantidad de movimiento en coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) para un fluido newtoniano con densidad y viscosidad constante

Coordenadas esféricas (r, θ, ϕ):

$$\rho \left(\frac{\partial v_r}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + \frac{v_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial v_r}{\partial \phi} - \frac{v_\theta^2 + v_\phi^2}{r} \right) = - \frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r^2 v_r) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 v_r}{\partial \phi^2} \right] + \rho g_r \quad (\text{B.6-7})^a$$

$$\rho \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\theta}{\partial \phi} + \frac{v_r v_\theta + v_\phi^2 \cot \theta}{r} \right) = - \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \mu \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial v_\theta}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (v_\theta \sin \theta) \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial \phi^2} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} - \frac{2 \cot \theta}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} \right] + \rho g_\theta \quad (\text{B.6-8})$$

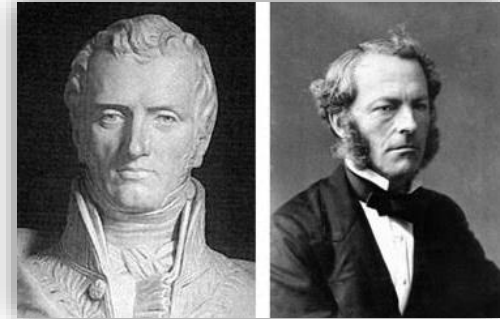
$$\rho \left(\frac{\partial v_\phi}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_\phi}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_\phi}{\partial \theta} + \frac{v_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} + \frac{v_\phi v_r + v_\theta v_\phi \cot \theta}{r} \right) = - \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial p}{\partial \phi} + \mu \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial v_\phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (v_\phi \sin \theta) \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 v_\phi}{\partial \phi^2} + \frac{2}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial v_r}{\partial \phi} + \frac{2 \cot \theta}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial v_\theta}{\partial \phi} \right] + \rho g_\phi \quad (\text{B.6-9})$$

^a La cantidad entre corchetes en la ecuación B.6-7 no es lo que habría que esperar de la ecuación (M) para $[\nabla \cdot \nabla \mathbf{v}]$ en la tabla A.7-3, debido a que a la ecuación (M) se ha sumado la expresión para $(2/r)(\nabla \cdot \mathbf{v})$, que es cero para fluidos con ρ constante. Así se obtiene una ecuación mucho más sencilla.

Las ecuaciones de Navier-Stokes

Para un fluido newtoniano incompresible

$$\rho \left(\underbrace{\frac{\partial u}{\partial t}}_{\text{Aceleración}} + \underbrace{u \nabla \cdot u}_{\text{Aceleración por convección}} \right) = - \underbrace{\nabla \mathcal{P}}_{\text{Fuerzas externas}} + \underbrace{\mu \nabla^2 u}_{\text{Fuerzas viscosas}}$$



Se tiene que entender como la aplicación de la segunda ley de Newton ($F = ma$) a un elemento diferencial de volumen para un fluido incompresible. Genera un sistema de ecuaciones no lineal (por la aceleración convectiva), vectorial (por la velocidad), parcial (por la distribución con el tiempo y la posición) y diferencial que relaciona los cambios en la velocidad de un fluido con las fuerzas que actúan sobre él. Se tienen 3 variables para la velocidad (u_x , u_y , u_z) y 1 para la presión p (4 variables) y 3 ecuaciones (para cada componente cartesiana, cilíndrica o esférica). Se requiere una ecuación adicional que es la ecuación de continuidad

$$\nabla \cdot u = 0$$

Ecuación de continuidad

Las ecuaciones de Navier-Stokes

Para flujo incompresible y viscoso, se ha demostrado que en 2D existen soluciones suaves, globales y únicas. En 3D no se ha demostrado la existencia global de soluciones suaves ni su unicidad. Ciertas simetrías pueden reducir el problema 3D a uno equivalente 2D, donde sí se conoce la existencia y unicidad global. **La posible aparición de singularidades en 3D es precisamente el problema sin resolver.**

Matemáticamente, una *singularidad* significa que una magnitud (velocidad, etc.) se hace infinita en tiempo finito. Físicamente, la viscosidad real (y otros mecanismos) evitarían que apareciesen infinitos reales, pero el modelo matemático sería incompleto.

Implica que sea un problema matemático, no físico.

Las ecuaciones de Navier-Stokes

Unsolved problems

Birch and Swinnerton-Dyer Conjecture

Supported by much experimental evidence, this conjecture relates the number of points on an elliptic curve mod p to the rank of the group of points. Elliptic curves, defined by

Hodge Conjecture

The answer to this conjecture determines how much of the topology of the solution set of a system of algebraic equations can be defined in terms of further algebraic equations. The Hodge conjecture is known in certain special cases, e.g., when the solution set has dimension less than four. But in dimension four it is unknown.

Navier-Stokes Equation

This is the equation which governs the flow of fluids such as water and air. However, there is no proof for the most basic questions one can ask: do solutions exist, and are they unique? Why ask for a proof? Because a proof gives not only certitude, but also understanding.



Las ecuaciones de Navier-Stokes

Ciencia / Materia

INTELIGENCIA ARTIFICIAL >

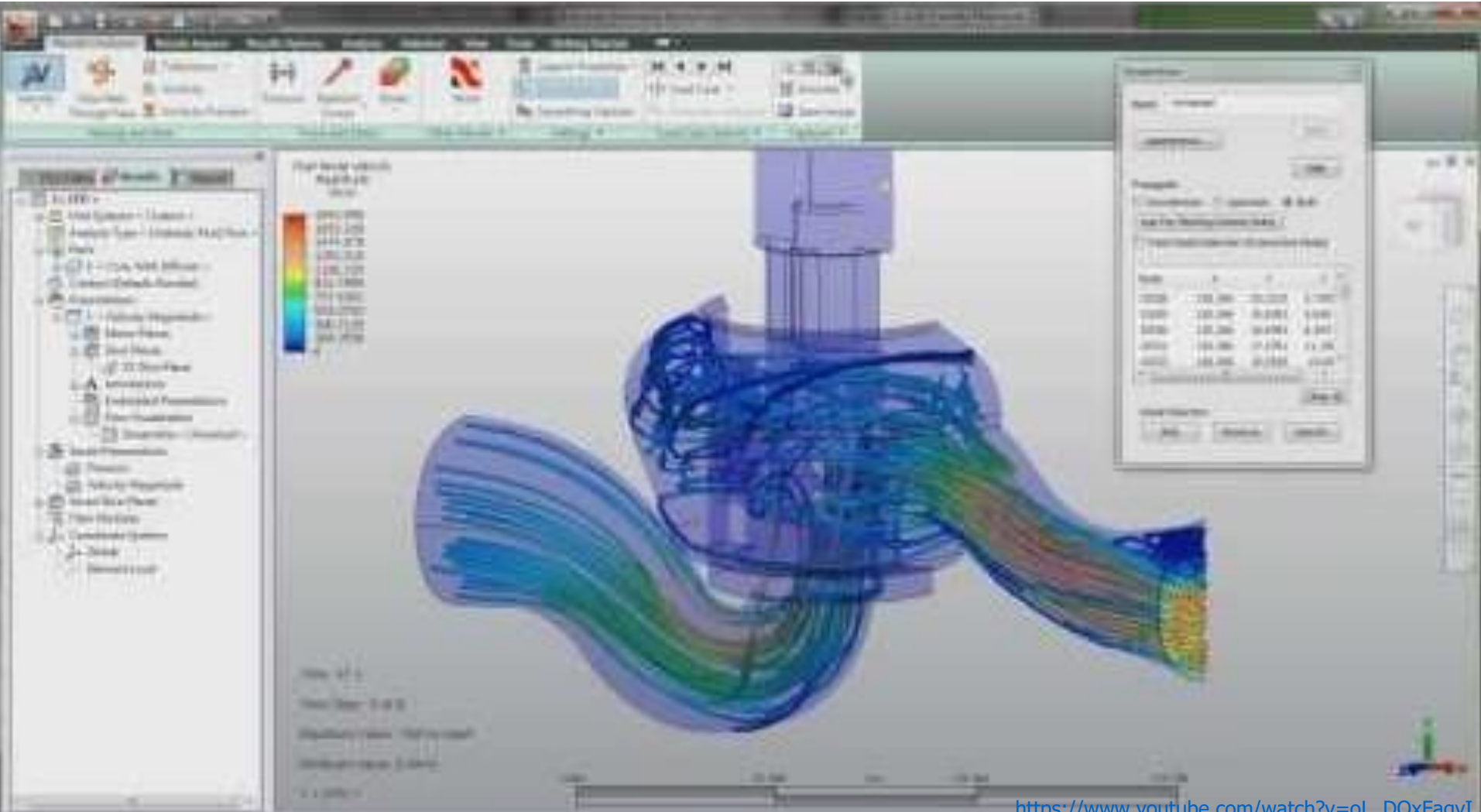
El matemático español Javier Gómez Serrano y Google Deepmind se alían para resolver el problema del millón de dólares de Navier-Stokes

Un equipo de investigadores e ingenieros trabaja en secreto desde hace tres años en uno de los enigmas más endiablados de la humanidad, cuya solución se considera inminente gracias a la inteligencia artificial



Las ecuaciones de Navier-Stokes

Soluciones para Navier-Stokes (aproximaciones numéricas)



Aplicación del BMic de cantidad de movimiento

Pasos para la aplicación de los BMic de cantidad de movimiento

1

Elegir el sistema de coordenadas y escribir las ecuaciones de cantidad de movimiento correspondientes a la geometría

2

Introducir la ley constitutiva: ley de Newton de la viscosidad como cierre directo para fluidos newtonianos en régimen laminar

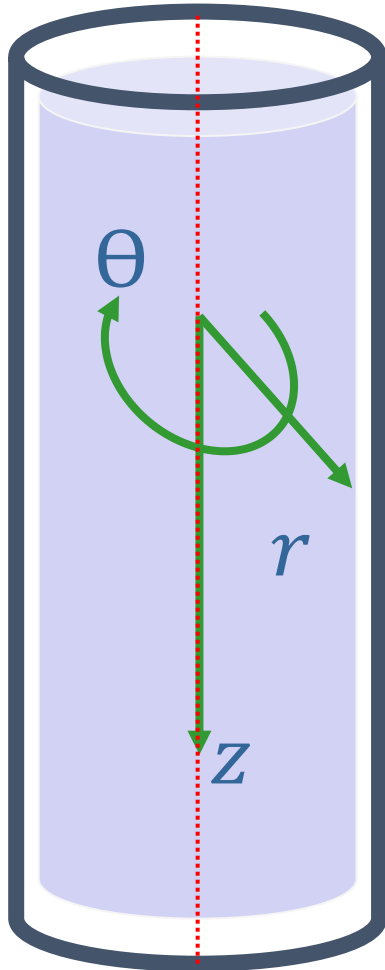
3

Simplificar las ecuaciones usando las hipótesis físicas: régimen est., geometría, continuidad, comp. nulas, simetrías y condiciones del flujo

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano



PERFIL DE VELOCIDAD u

Para un fluido newtoniano que circula por el interior de un tubo de sección circular (longitud L y radio R) en condiciones de presión y temperatura constante en el estado estacionario. Asumir régimen laminar y flujo axial puro. Asumir que el fluido puede moverse como consecuencia de la acción de fuerzas de gravedad y/o presión. El tubo se asume como superficie estática.

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano



Elegir el sistema de coordenadas y escribir las ecuaciones de cantidad de movimiento correspondientes a la geometría

$$\rho \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} - \frac{u_\theta^2}{r} \right) = -\frac{\partial p}{\partial r} - \left[\frac{1}{r} \frac{\partial(r\tau_{rr})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial\tau_{\theta r}}{\partial \theta} + \frac{\partial\tau_{zr}}{\partial z} - \frac{\tau_{\theta\theta}}{r} \right] + \rho g_r$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_\theta}{\partial z} - \frac{u_r u_\theta}{r} \right) = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} - \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2\tau_{r\theta})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial\tau_{\theta\theta}}{\partial \theta} + \frac{\partial\tau_{z\theta}}{\partial z} + \frac{\tau_{\theta r} - \tau_{r\theta}}{r} \right] + \rho g_\theta$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} - \left[\frac{1}{r} \frac{\partial(r\tau_{rz})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial\tau_{\theta z}}{\partial \theta} + \frac{\partial\tau_{zz}}{\partial z} \right] + \rho g_z$$

Se tienen 3 ecuaciones, una por componente de velocidad. Bajo las hipótesis del caso, solo la componente axial z aportará el perfil $u_z(r)$

GEOMETRÍA CILÍNDRICA

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano

2

Introducir la ley constitutiva: ley de Newton de la viscosidad como cierre directo para fluidos newtonianos en régimen laminar

$$\rho \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} - \frac{u_\theta^2}{r} \right) = -\frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial (r u_r)}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_r}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} \right] + \rho g_r$$

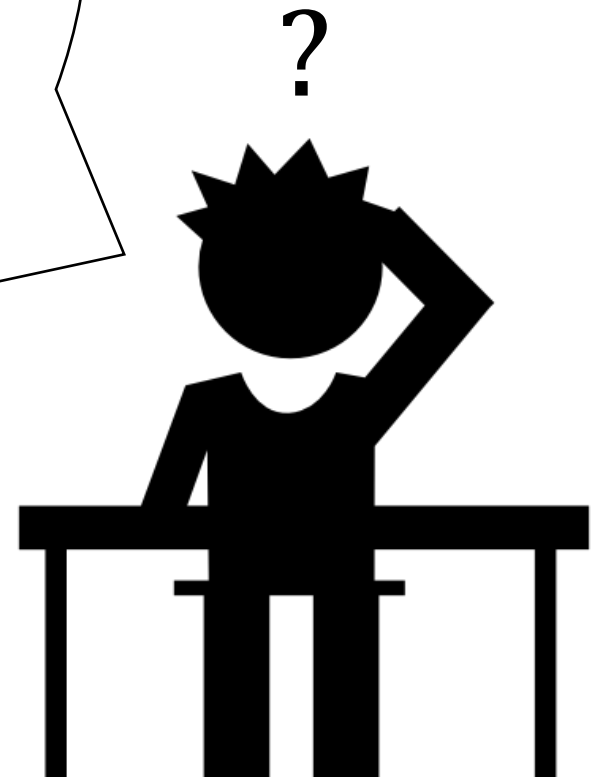
$$\rho \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_\theta}{\partial z} + \frac{u_r u_\theta}{r} \right) = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \mu \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial (r u_\theta)}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial z^2} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right] + \rho g_\theta$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right] + \rho g_z$$

Al asumir fluido newtoniano y régimen laminar, se sustituye el esfuerzo viscoso molecular mediante la ley de Newton de la viscosidad.

GEOMETRÍA CILÍNDRICA

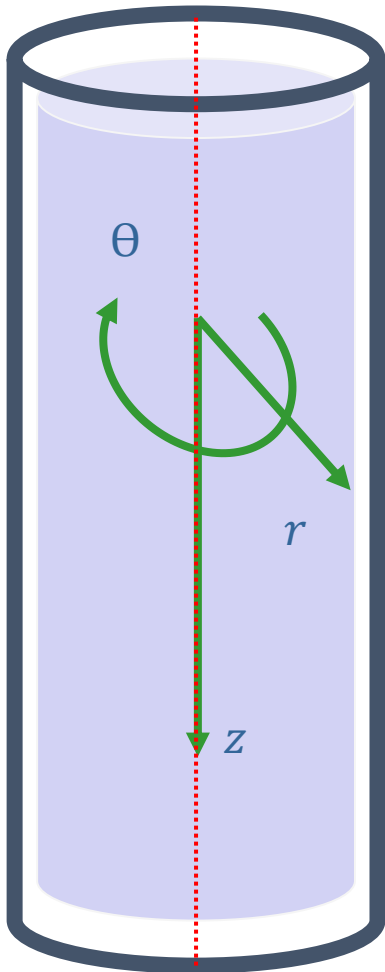
No creo que pueda resolver un
conjunto de 3 ecuaciones
diferenciales con el tiempo y con la
posición... ¿Qué puedo hacer?



Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano

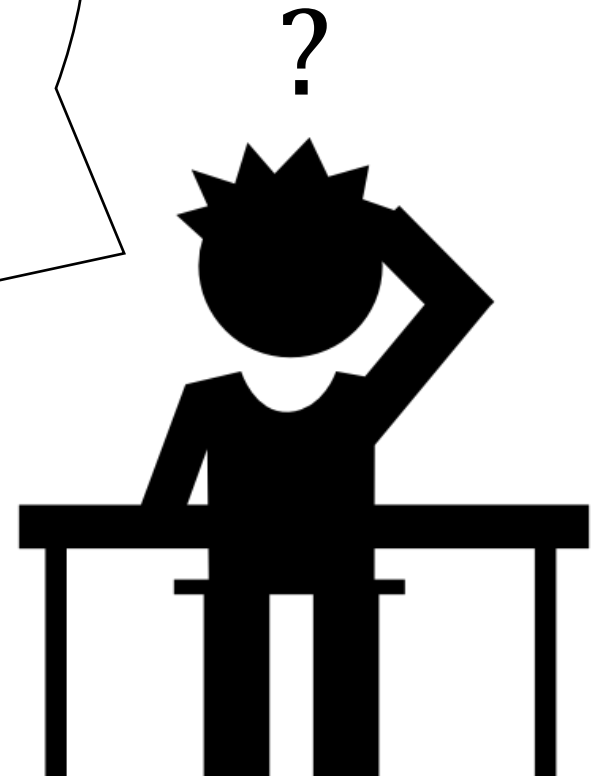
3

Simplificar las diferenciales de distribución de densidad de flujo de cantidad de movimiento (*emplear la ECUACIÓN DE CONTINUIDAD*)



Resulta fundamental poder entender que las componentes de la velocidad u_z , u_r , u_θ (velocidad en cada una de las 3 dimensiones) son independientes de que las componentes u_z , u_r , u_θ pueden variar con las tres componentes z , r y θ . Por tanto, para poder simplificar las ecuaciones diferenciales de distribución de densidad de flujo de cantidad de movimiento, es crítico poder distinguir las componentes de la velocidad con respecto a cómo varían cada una de esas 3 componentes con cada una de las 3 dimensiones.

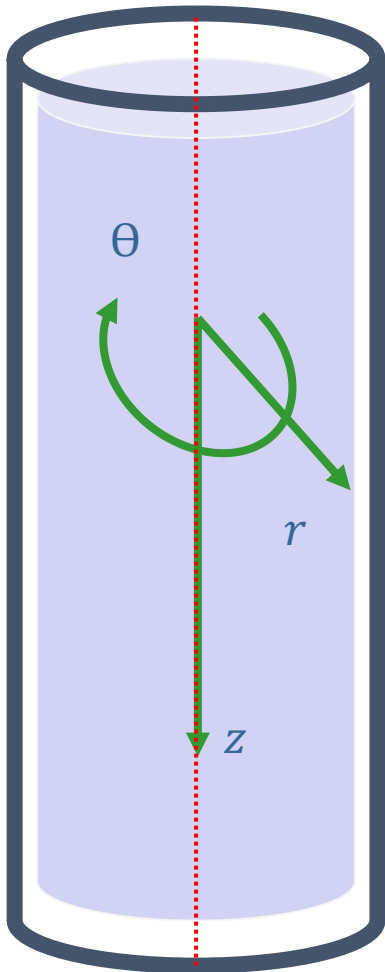
¿Pero como puedo saber entonces
como puedo hacer esas
simplificaciones?



Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano

3

Simplificar las diferenciales de distribución de densidad de flujo de cantidad de movimiento (*emplear la ECUACIÓN DE CONTINUIDAD*)



$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \rightarrow \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0$$

$$\mathbf{u}_r = 0$$

$$u_\theta = 0$$

$$u_z \neq 0$$

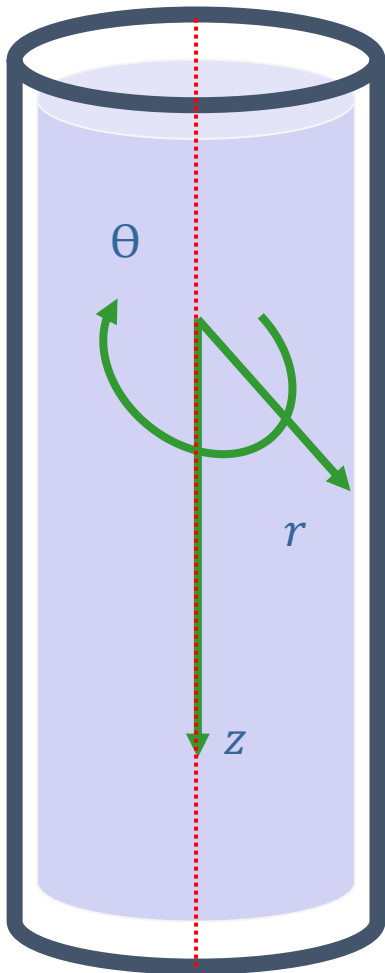
$$g_z = g$$

$\mathbf{u}_r$ representa la componente de velocidad en la dimensión del radio r , es decir, se desplaza en la dirección radial. Al existir flujo axial puro necesariamente se debe cumplir que $\mathbf{u}_r = 0$

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano

3

Simplificar las diferenciales de distribución de densidad de flujo de cantidad de movimiento (*emplear la ECUACIÓN DE CONTINUIDAD*)



$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \rightarrow \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0$$

$$u_r = 0$$

$$\mathbf{u}_\theta = \mathbf{0}$$

$$u_z \neq 0$$

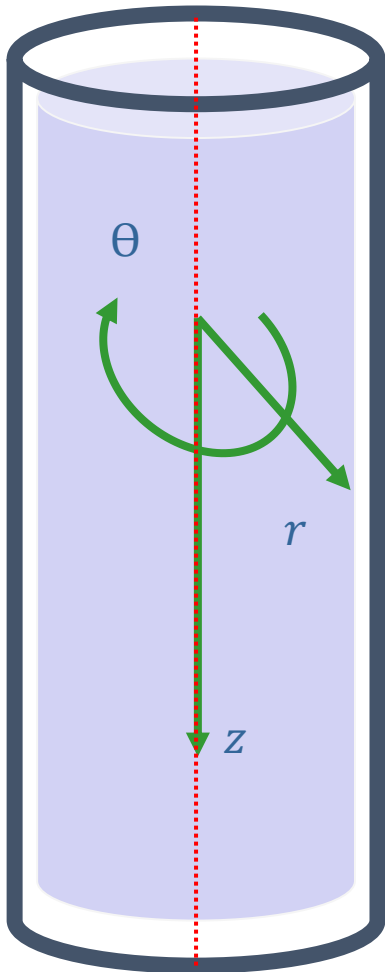
$$g_z = g$$

$\mathbf{u}_\theta$ representa la componente de la velocidad en la dimensión del ángulo θ es decir con el ángulo. Al existir flujo axial puro necesariamente se debe cumplir que $\mathbf{u}_\theta = \mathbf{0}$

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano

3

Simplificar las diferenciales de distribución de densidad de flujo de cantidad de movimiento (*emplear la ECUACIÓN DE CONTINUIDAD*)



$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \rightarrow \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0$$

$$u_r = 0$$

$$u_\theta = 0$$

$$\mathbf{u}_z \neq \mathbf{0}$$

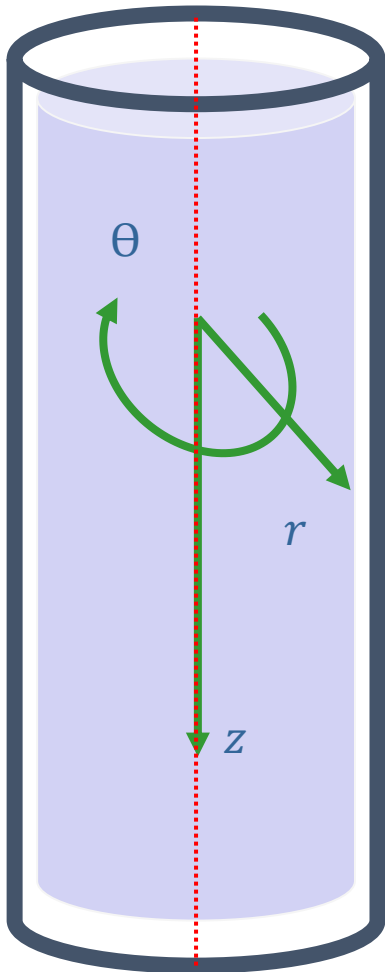
$$g_z = g$$

$\mathbf{u}_z$ representa la componente de la velocidad en la dimensión z , es decir con la posición en el tubo a lo largo de su longitud. Al ser flujo axial puro, entonces $\mathbf{u}_z \neq \mathbf{0}$ (el fluido se desplaza en la dimensión z)

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano

3

Simplificar las diferenciales de distribución de densidad de flujo de cantidad de movimiento (*emplear la ECUACIÓN DE CONTINUIDAD*)



$$\nabla \cdot u = 0 \rightarrow \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0$$

$$u_r = 0$$

$$u_\theta = 0$$

$$u_z \neq 0$$

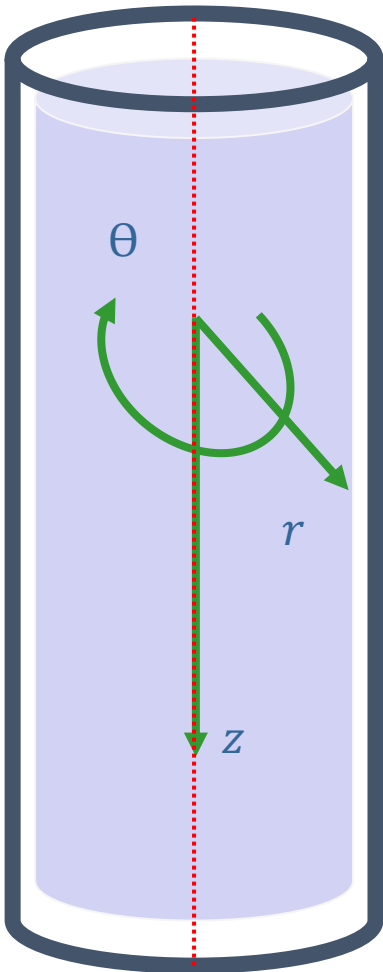
$$g_z = g$$

g_z representa la acción de la gravedad sobre el volumen de fluido newtoniano considerado. En este caso, como el eje z coincide con la dirección y sentido de la gravedad, las otras componentes son nulas $g_\theta = g_r = 0$ y se cumple que entonces $g_z = g$

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano

3

Simplificar las diferenciales de distribución de densidad de flujo de cantidad de movimiento (*emplear la ECUACIÓN DE CONTINUIDAD*)



$$\frac{\partial p}{\partial r}, \frac{\partial p}{\partial \theta}, \frac{\partial p}{\partial z}$$

La variación de la presión con las dimensiones r , θ , y z , es decir, $\frac{\partial p}{\partial r}, \frac{\partial p}{\partial \theta}, \frac{\partial p}{\partial z}$ depende de cada caso particular. En este caso, lo evidente es que la presión vendría ejercida de forma externa por una bomba/compresor y por tanto la diferencia de presión es a lo largo del eje z . Sería necesario conocer las condiciones que hicieran que haya diferencia de presión con el radio r .

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano



Simplificar las diferenciales de distribución de densidad de flujo de cantidad de movimiento (*emplear la ECUACIÓN DE CONTINUIDAD*)

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \rightarrow \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0$$

$$u_r = 0 \quad u_\theta = 0 \quad u_z \neq 0$$

Analizamos la primera de las componentes: r

$$g_z \neq 0$$

Nos queda que $0=0$, y por tanto no aporta nada

$$\begin{aligned} & \rho \left(\cancel{\frac{\partial u_r}{\partial t}} + u_r \cancel{\frac{\partial u_r}{\partial r}} + \frac{u_\theta}{r} \cancel{\frac{\partial u_r}{\partial \theta}} + u_z \cancel{\frac{\partial u_r}{\partial z}} - \cancel{\frac{u_r^2}{r}} \right) \\ &= -\cancel{\frac{\partial p}{\partial r}} + \mu \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial (r u_r)}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \cancel{\frac{\partial^2 u_r}{\partial \theta^2}} + \cancel{\frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2}} - \frac{2}{r^2} \cancel{\frac{\partial u_\theta}{\partial \theta}} \right] + \cancel{\rho g_r} \end{aligned}$$

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano



Simplificar las diferenciales de distribución de densidad de flujo de cantidad de movimiento (*emplear la ECUACIÓN DE CONTINUIDAD*)

$$\nabla \cdot u = 0 \rightarrow \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0$$

$$u_r = 0 \quad u_\theta = 0 \quad u_z \neq 0$$

$$g_z \neq 0$$

Analizamos la segunda de las componentes: θ

Nos queda que $0=0$, y por tanto no aporta nada

$$\rho \left(\cancel{\frac{\partial u_\theta}{\partial t}} + u_r \cancel{\frac{\partial u_\theta}{\partial r}} + \frac{u_\theta}{r} \cancel{\frac{\partial u_\theta}{\partial \theta}} + u_z \cancel{\frac{\partial u_\theta}{\partial z}} + \frac{u_r}{r} \cancel{u_\theta} \right)$$

$$= -\frac{1}{r} \cancel{\frac{\partial p}{\partial \theta}} + \mu \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \cancel{\frac{\partial (ru_\theta)}{\partial r}} \right) + \frac{1}{r^2} \cancel{\frac{\partial^2 u_\theta}{\partial \theta^2}} + \cancel{\frac{\partial^2 u_\theta}{\partial z^2}} + \frac{2}{r^2} \cancel{\frac{\partial u_r}{\partial \theta}} \right] + \cancel{\mu g_\theta}$$

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano



Simplificar las diferenciales de distribución de densidad de flujo de cantidad de movimiento (*emplear la ECUACIÓN DE CONTINUIDAD*)

$$\nabla \cdot u = 0 \rightarrow \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0$$

$$u_r = 0 \quad u_\theta = 0 \quad u_z \neq 0$$

$$g_z \neq 0$$

Analizamos la tercera de las componentes: z

Nos quedan 3 términos que obviamente no son nulos

$$\rho \left(\cancel{\frac{\partial u_z}{\partial t}} + u_r \cancel{\frac{\partial u_z}{\partial r}} + \frac{u_\theta}{r} \cancel{\frac{\partial u_z}{\partial \theta}} + u_z \cancel{\frac{\partial u_z}{\partial z}} \right) = - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial z^2} \right] + \rho g_z$$

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano



Simplificar las ecuaciones usando las hipótesis físicas: régimen est., geometría, continuidad, comp. nulas, simetrías y condiciones del flujo

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \rightarrow \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0 \quad u_r = 0 \quad u_\theta = 0 \quad u_z \neq 0$$

Por tanto, la componente axial del balance microscópico de cantidad de movimiento queda, antes de integrar, como:

$$0 = -\frac{\partial P}{\partial z} + \mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) \right) + \rho g_z$$



Ahora toca integrar esta expresión

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

Definiendo la presión modificada como:

$$\mathcal{P} = P - \rho g z$$

¡Es agrupar los términos de presión y gravedad !

Se obtendría la siguiente expresión (asumiendo $g_z = g$):

$$0 = -\frac{P_L - P_0}{L - 0} + \mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) \right) + \rho g \frac{L}{L} - \rho g \frac{0}{L}$$

$$0 = -\frac{P_L}{L} + \rho g \frac{L}{L} + \frac{P_0}{L} - \rho g \frac{0}{L} + \mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) \right)$$

$$0 = -\frac{(P_L - \rho g L)}{L} + \frac{(P_0 - \rho g 0)}{L} + \mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) \right)$$

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

$$0 = -\frac{(P_L - \rho g L)}{L} + \frac{(P_0 - \rho g 0)}{L} + \mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) \right)$$

$$0 = -\frac{(\mathcal{P}_L)}{L} + \frac{(\mathcal{P}_0)}{L} + \mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) \right)$$

$$0 = \frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)}{L} + \mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) \right)$$

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

$$0 = \frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)}{L} + \mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) \right)$$

Operando esta expresión:

$$-\frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)}{\mu L} r \partial r = \partial \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right)$$

Integrando esta expresión de forma indefinida:

$$-\frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)}{\mu L} \frac{r^2}{2} = r \frac{\partial u_z}{\partial r} + C_1$$

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

Para resolver el valor de la constante de integración C_1 es necesario establecer la condición límite correspondiente:

CONDICIÓN LÍMITE 1

Condición de simetría

$$r = 0 \rightarrow \frac{\partial u_z}{\partial r} = 0$$

$$-\frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)}{\mu L} \frac{0^2}{2} = 0 \cdot 0 + C_1$$

$$-\frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)}{\mu L} \frac{r}{2} = \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{C_1}{r}$$

$$C_1 = 0$$

La única forma de que el gradiente de velocidad no sea infinito en el centro es que C_1 sea cero

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

De esta forma la expresión subsiguiente con $C_1=0$, es:

$$-\frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)}{\mu L} \frac{r^2}{2} = r \frac{\partial u_z}{\partial r}$$
$$-\frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)}{\mu L} \frac{r}{2} \partial r = \partial u_z$$

Integrando esta expresión de forma indefinida aparece una nueva constante de integración C_2 :

$$-\frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)}{\mu L} \frac{r^2}{4} + C_2 = u_z$$

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

Para resolver el valor de la constante de integración C_2 es necesario establecer la condición límite correspondiente:

CONDICIÓN LÍMITE 2

Velocidad nula en la pared
(no slip boundary condition)

$$r = R \rightarrow u_z = 0$$

$$-\frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)}{\mu L} \frac{R^2}{4} + C_2 = 0$$

$$C_2 = \frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)}{\mu L} \frac{R^2}{4}$$

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

Operando la expresión:

$$u_z = \frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)}{\mu L} \frac{R^2}{4} - \frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)}{\mu L} \frac{r^2}{4}$$

$$u_z = \frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)}{4\mu L} (R^2 - r^2)$$

$$u_z = \frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)}{L} \frac{R^2}{4\mu} \left(1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right)$$

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

Operando la expresión:

$$u_z = \frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)}{L} \frac{R^2}{4\mu} \left(1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right)$$

El máximo se producirá necesariamente en $r = 0$, ya que en ese punto es donde la derivada de la velocidad es nula:

$$u_{z,max} = \frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)}{L} \frac{R^2}{4\mu}$$

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

Utilizando la ley de Newton de la viscosidad para régimen laminar:

$$\tau_{rz} = -\mu \frac{\partial u_z}{\partial r} = \frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)}{L} \frac{r}{2}$$

El valor absoluto del esfuerzo cortante viscoso es máximo en la pared $r = R$, donde el gradiente radial de velocidad es máximo. En el eje $r = 0$, por simetría, el esfuerzo cortante es nulo.

$$\tau_{rz,max} = \frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)}{L} \frac{R}{2}$$

Caso de estudio: tubería cilíndrica con fluido newtoniano

Consideraciones adicionales

En el centro, es decir, $r \sim 0$, la velocidad u_z casi no cambia con el radio por lo que su derivada con r es muy pequeña. Sin embargo, en el extremo cerca de la pared, es decir, en $r \sim R$ es donde se produce la mayor variación de u_z con r (mayor valor de la derivada)

Distribución lineal de la densidad de flujo de cantidad de movimiento $\tau_{rz}(r)$

El sentido de la velocidad u_z en la dirección z depende necesariamente del valor positivo o negativo del gradiente de presión modificada. Cambiar ese signo hace que el fluido se mueve en dirección ascendente o descendente.

El esfuerzo cortante τ_{rz} es nulo en $r = 0$, es decir no hay transferencia de cantidad de movimiento, mientras que el valor máximo se da necesariamente en la pared del tubo, y lo hace de forma lineal. Por tanto una variación lineal del esfuerzo cortante lleva a un perfil parabólico de velocidad u_z .

6.3 Balances microscópicos de energía

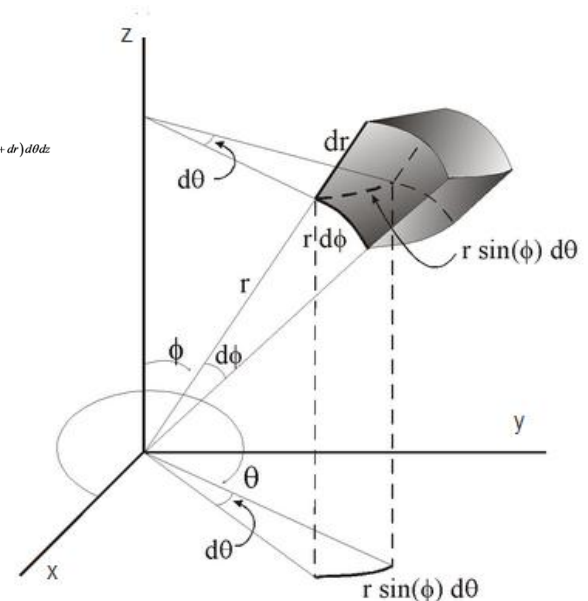
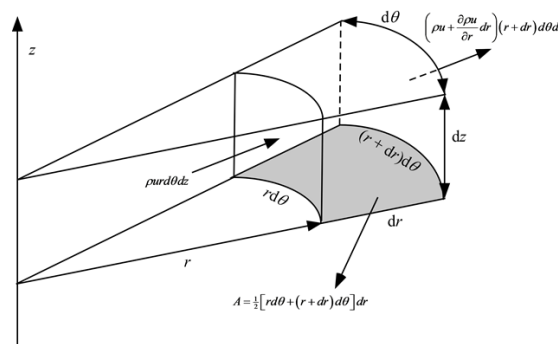
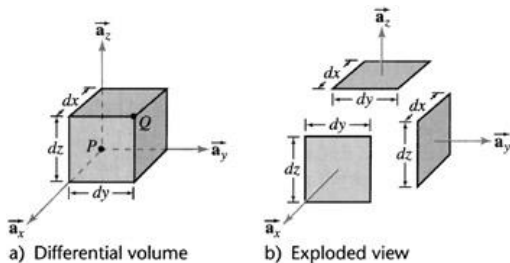


Aplicación del BMic de energía

$$E - S + Q = 0$$

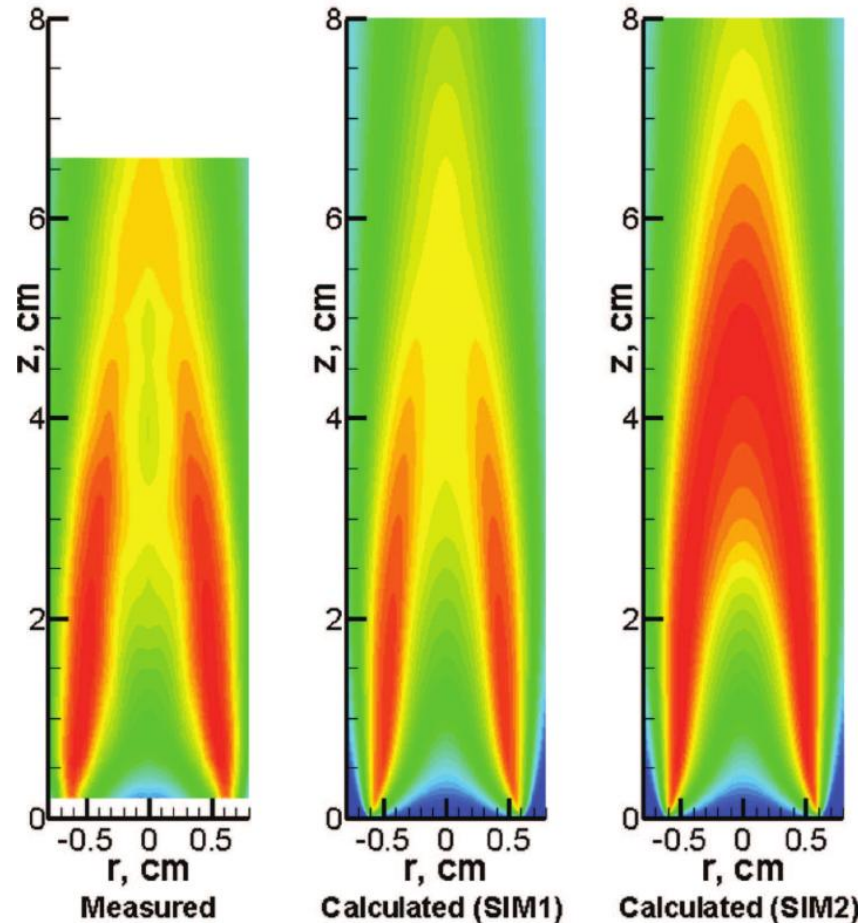
Balance de energía en estado estacionario en forma diferencial

El transporte de la energía se debe tanto a la conducción como al movimiento convectivo. Los procesos eléctricos (efecto Joule), químicos (reacciones químicas) y mecánicos (disipación viscosa) pueden generar calor Q y, por tanto, modificar la distribución de temperatura T del sistema.



Aplicación del BMic de energía

El objetivo de la aplicación del Balance Microscópico de energía debe ser un perfil de temperatura, es decir, conocer en cada punto de la geometría considerada cual es el valor de la temperatura



Aplicación del BMic de energía

Ecuaciones diferenciales de distribución de densidad de flujo de energía en coordenadas cartesianas (x, y, z)

$$\begin{aligned} \rho C_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_x \frac{\partial T}{\partial x} + u_y \frac{\partial T}{\partial y} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = & - \left[\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right] \\ & - T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_p \left[\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right] - \left\{ \tau_{xx} \frac{\partial u_x}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial u_y}{\partial y} + \tau_{zz} \frac{\partial u_z}{\partial z} \right\} \\ & - \left\{ \tau_{xy} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) + \tau_{xz} \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) + \tau_{yz} \left(\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right) \right\} \end{aligned}$$

¡Se trata de una única ecuación!

Aplicación del BMic de energía

Ecuaciones diferenciales de distribución de densidad de flujo de energía en coordenadas cilíndricas (r, θ, z)

$$\begin{aligned} \rho C_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = & - \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r q_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (r q_\theta) + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right] \\ - T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_p \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right] - & \left\{ \tau_{rr} \frac{\partial u_r}{\partial r} + \tau_{\theta\theta} \frac{1}{r} \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + u_r \right) + \tau_{zz} \frac{\partial u_z}{\partial z} \right\} \\ - \left\{ \tau_{r\theta} \left[r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial u_\theta}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right] + \tau_{rz} \left(\frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial z} \right) + \tau_{\theta z} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right) \right\} \end{aligned}$$

¡Se trata de una única ecuación!

Aplicación del BMic de energía

Ecuaciones diferenciales de distribución de densidad de flujo de energía en coordenadas esféricas (r, θ, ϕ)

Coordenadas esféricas:

$$\begin{aligned} \rho \hat{C}_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + \frac{v_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial T}{\partial \phi} \right) = & - \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 q_r) \right. \\ & + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (q_\theta \sin \theta) + \left. \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial q_\phi}{\partial \phi} \right] - T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_p \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 v_r) \right. \\ & + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (v_\theta \sin \theta) + \left. \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} \right) - \left\{ \tau_{rr} \frac{\partial v_r}{\partial r} + \tau_{\theta\theta} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_r}{r} \right) \right. \\ & + \left. \tau_{\phi\phi} \left(\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} + \frac{v_r}{r} + \frac{v_\theta \cot \theta}{r} \right) \right\} - \left\{ \tau_{r\theta} \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} - \frac{v_\theta}{r} \right) \right. \\ & + \left. \tau_{r\phi} \left(\frac{\partial v_\phi}{\partial r} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_r}{\partial \phi} - \frac{v_\phi}{r} \right) + \tau_{\theta\phi} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_\phi}{\partial \theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\theta}{\partial \phi} - \frac{\cot \theta}{r} v_\phi \right) \right\} \end{aligned}$$

Aplicación del BMic de energía

Ecuaciones diferenciales de distribución de densidad de flujo de energía para fluido newtonianos con densidad y conductividad calorífica constante en coordenadas cartesianas

$$\begin{aligned} \rho C_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_x \frac{\partial T}{\partial x} + u_y \frac{\partial T}{\partial y} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) &= k \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] \\ &+ 2\mu \left\{ \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} \right)^2 \right\} \\ &+ \mu \left\{ \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right)^2 \right\} = \\ &= k \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + \mu \Phi_V \end{aligned}$$

¡Se trata de una única ecuación!

El término $\mu \Phi_V$ se conoce como disipación viscosa y se puede despreciar si las velocidades u_x , u_y y u_z son suficientemente bajas

Aplicación del BMic de energía

Ecuaciones diferenciales de distribución de densidad de flujo de energía para fluido newtonianos con densidad y conductividad calorífica constante en coordenadas cilíndricas (r, θ, z)

$$\begin{aligned} \rho C_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) &= k \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] \\ &+ 2\mu \left\{ \left(\frac{\partial u_r}{\partial r} \right)^2 + \left[\frac{1}{r} \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + u_r \right) \right]^2 + \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} \right)^2 \right\} \\ &+ \mu \left\{ \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial z} \right)^2 + \left[\frac{1}{r} \left(\frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right) + r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{u_\theta}{r} \right) \right]^2 \right\} = \\ &= k \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + \mu \Phi_v \end{aligned}$$

¡Se trata de una única ecuación!

El término $\mu \Phi_v$ se conoce como disipación viscosa y se puede despreciar si las velocidades u_r , u_θ y u_z son suficientemente bajas

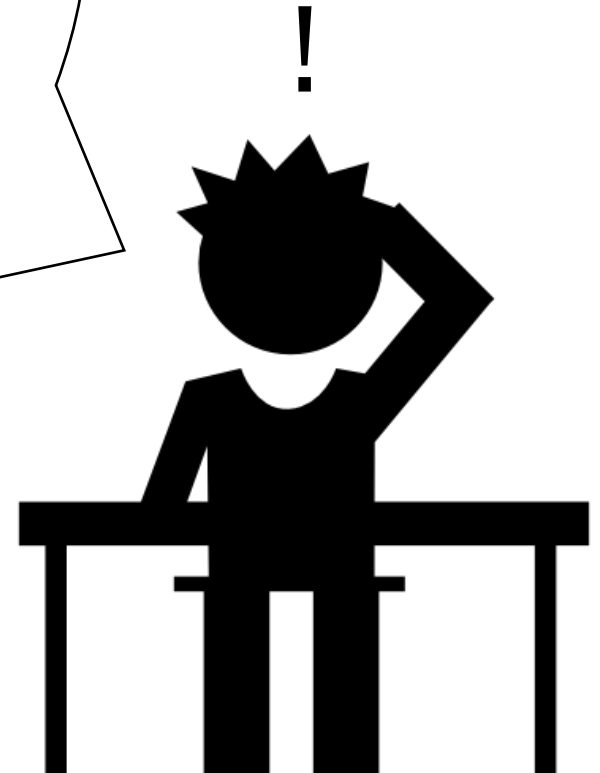
Aplicación del BMic de energía

Ecuaciones diferenciales de distribución de densidad de flujo de energía para fluido newtonianos con densidad y conductividad calorífica constante en coordenadas esféricas (r, θ, ϕ)

Coordenadas esféricas:

$$\begin{aligned} \rho \hat{C}_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + \frac{v_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial T}{\partial \phi} \right) &= k \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right. \\ &+ \left. \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 T}{\partial \phi^2} \right] + 2\mu \left\{ \left(\frac{\partial v_r}{\partial r} \right)^2 \right. \\ &+ \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_r}{r} \right)^2 + \left(\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} + \frac{v_r}{r} + \frac{v_\theta \cot \theta}{r} \right)^2 \Big\} \\ &+ \mu \left\{ \left[r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_\theta}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right]^2 + \left[\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_r}{\partial \phi} + r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_\phi}{r} \right) \right]^2 \right. \\ &+ \left. \left[\frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{v_\phi}{\sin \theta} \right) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\theta}{\partial \phi} \right]^2 \right\} \end{aligned}$$

¡Entendido! Por eso vemos primero la Ley de Fourier de la conducción antes que los balances: la relación entre densidades de flujo de calor y temperatura es fundamental para resolver el balance microscópico de energía, que es un balance que nos permite conocer los perfiles de temperatura en una determinada geometría



Aplicación del BMic de energía

Pasos para la aplicación de los BMic de energía

1

Plantear el balance de energía para un elemento diferencial de volumen
(elegir la ecuación según geometría)

2

Introducir la expresión de densidad de flujo de energía *(sustituir la expresión de la densidad de flujo de energía)*

3

Simplificar las diferenciales de distribución de densidad de flujo de energía

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

Aplicación del BMic de energía

Ejemplos de condiciones límites

CONDICIÓN LÍMITE 1

La temperatura en una superficie es conocida

$$x = L \rightarrow T_{x=L} = T_1$$

CONDICIÓN LÍMITE 2

La densidad de flujo de energía es conocida

$$q_{r=R} = q_0$$

CONDICIÓN LÍMITE 3

El coeficiente de transferencia de calor es conocido (interfases sólido-líquido)

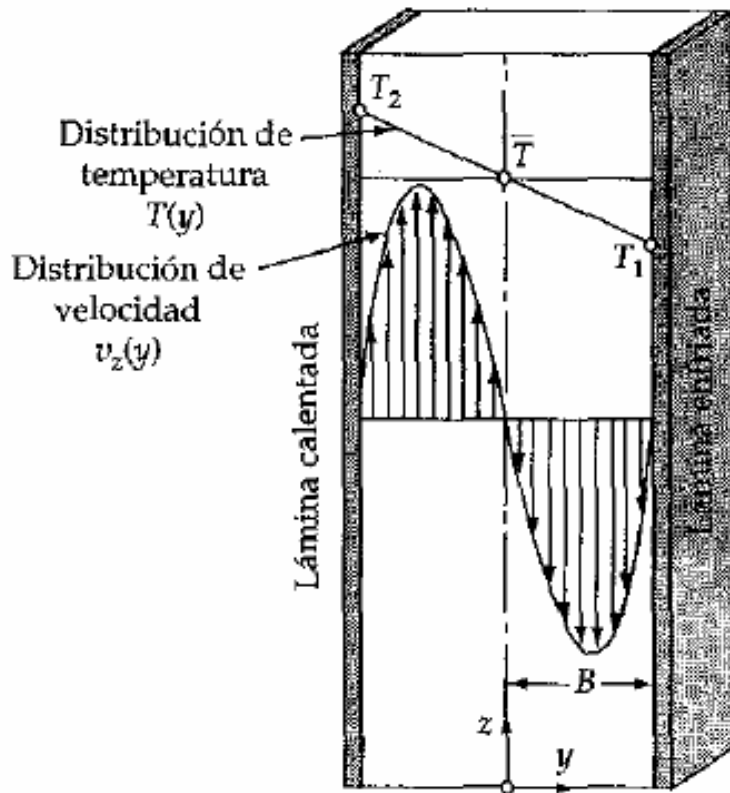
$$q_{r=R} = h(T - T_{fluido})$$

CONDICIÓN LÍMITE 4

Continuidad de temperatura/densidad de flujo de calor (interfases sólido-sólido)

$$x = a \rightarrow T_{Acero,a} = T_{Polimero,a}$$

Caso de estudio: convección libre



Se tiene un fluido entre una pared caliente a una temperatura T_2 a una distancia $y = -B$ y una pared fría a temperatura T_1 a una distancia $y = B$. La densidad del fluido es ρ y la viscosidad es μ . Tanto por la parte superior como por la parte inferior el fluido no puede escapar (tapado por ambos extremos). Si las paredes son lo suficientemente altas, se puede negar los efectos en dichos extremos. El fluido en contacto con la superficie caliente asciende y en la fría desciende.

La velocidad de flujo másico ascendente debe igualar a la velocidad de flujo másico descendente.

Caso de estudio: convección libre



Plantear el balance de energía para un elemento diferencial de volumen
(*elegir la ecuación según geometría*)

$$\begin{aligned} \rho C_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_x \frac{\partial T}{\partial x} + u_y \frac{\partial T}{\partial y} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = & - \left[\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right] \\ & - T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_p \left[\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right] - \left\{ \tau_{xx} \frac{\partial u_x}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial u_y}{\partial y} + \tau_{zz} \frac{\partial u_z}{\partial z} \right\} \\ & - \left\{ \tau_{xy} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) + \tau_{xz} \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) + \tau_{yz} \left(\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right) \right\} \end{aligned}$$

GEOMETRÍA CARTESIANA

Caso de estudio: convección libre

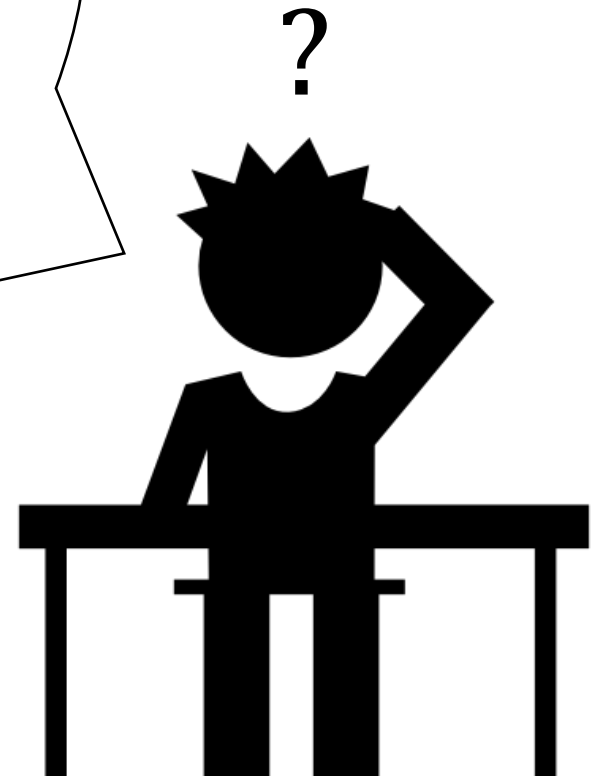
2

Introducir la expresión de densidad de flujo de energía (*sustituir la expresión de la densidad de flujo de energía*)

$$\begin{aligned} \rho C_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_x \frac{\partial T}{\partial x} + u_y \frac{\partial T}{\partial y} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) &= k \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] \\ &+ 2\mu \left\{ \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} \right)^2 \right\} \\ &+ \mu \left\{ \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right)^2 \right\} = \\ &= k \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + \mu \Phi_V \end{aligned}$$

GEOMETRÍA CARTESIANA

No creo que pueda resolver esta
ecuación diferencial con el tiempo y
con la posición... ¿Qué puedo hacer?



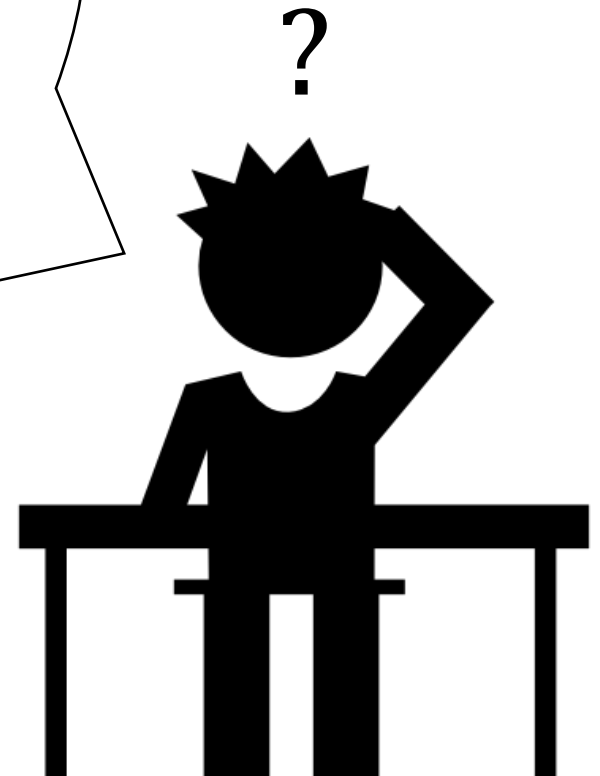
Caso de estudio: convección libre



Simplificar las diferenciales de distribución de densidad de flujo de energía

Resulta fundamental poder entender que la temperatura T puede variar con las tres componentes x , y y z . Por tanto, para poder simplificar las ecuaciones diferenciales de distribución de densidad de flujo de energía, es crítico poder distinguir cómo varía la T con cada una de las 3 dimensiones.

¿Pero como puedo
saber entonces
como puedo hacer
esas
simplificaciones?



Caso de estudio: convección libre



Simplificar las diferenciales de distribución de densidad de flujo de energía

$$\frac{\partial T}{\partial y} \neq 0$$

La temperatura T varía con la dimensión y , pero no con las otras dos dimensiones x, z

$$\frac{\partial T}{\partial t} = 0$$

La temperatura T es constante con el tiempo

$$\Phi_V = 0$$

Las velocidades son suficientemente pequeñas (se desprecian los efectos de la disipación viscosa)

$$\rho C_v \left(\cancel{\frac{\partial T}{\partial t}} + \cancel{\frac{\partial T}{\partial x}} + \cancel{\frac{\partial T}{\partial y}} + \cancel{\frac{\partial T}{\partial z}} \right) = k \left[\cancel{\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \cancel{\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}} \right] + \cancel{\mu \nabla^2 v}$$

Caso de estudio: convección libre



Simplificar las diferenciales de distribución de densidad de flujo de energía

$$\frac{\partial T}{\partial y} \neq 0$$

La temperatura T varía con la dimensión y , pero no con las otras dos dimensiones x, z

$$\frac{\partial T}{\partial t} = 0$$

La temperatura T es constante con el tiempo

$$\Phi_V = 0$$

Las velocidades son suficientemente pequeñas (se desprecian los efectos de la disipación viscosa)

$$0 = k \left[\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right] \checkmark$$

Caso de estudio: convección libre

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(*definir condiciones iniciales y condiciones límite*)

Integrando la expresión de forma explícita se generan dos constantes de integración:

$$k \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0 \quad k \frac{\partial T}{\partial y} = C_1 \quad kT = yC_1 + C_2$$

Sustituyendo las dos condiciones límites:

CONDICIÓN LÍMITE 1
Temperatura pared caliente

$$y = -B \rightarrow T = T_2$$

CONDICIÓN LÍMITE 2
Temperatura pared fría

$$y = B \rightarrow T = T_1$$

$$kT_2 = -BC_1 + C_2$$

$$kT_1 = BC_1 + C_2$$

Caso de estudio: convección libre

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(*definir condiciones iniciales y condiciones límite*)

Operando la expresión:

$$kT_2 = -BC_1 + C_2$$

$$kT_1 = BC_1 + C_2$$

Despejando C_2 al combinar las anteriores

$$\frac{k(T_2 + T_1)}{2} = k\bar{T} = C_2$$

Sustituyendo para obtener C_1

$$kT_1 = BC_1 + k\bar{T}$$

Despejando para obtener C_1

$$\frac{k(T_1 - \bar{T})}{B} = C_1$$

Caso de estudio: convección libre

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(*definir condiciones iniciales y condiciones límite*)

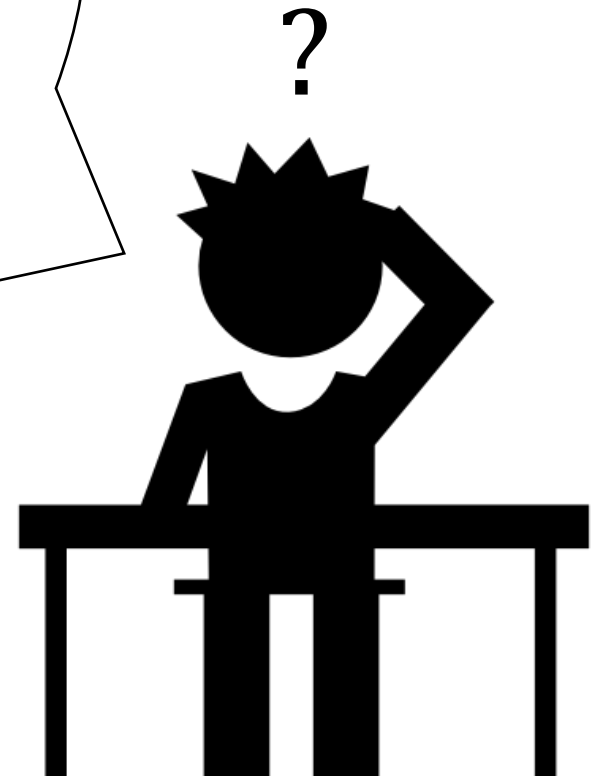
Se obtiene finalmente el perfil de temperatura con la dimensión y

$$kT = yC_1 + C_2 \qquad kT = y \frac{k(T_1 - \bar{T})}{B} + k\bar{T}$$
$$T = y \frac{(T_1 - \bar{T})}{B} + \bar{T} = \bar{T} - \frac{y}{B} \frac{\Delta T}{2}$$

Donde ΔT es la diferencia de temperatura entre T_2 y T_1 . Se puede observar que en un fluido de propiedades constantes, el perfil de temperatura T no depende de las propiedades físicas del fluido.

Una vez conocido el perfil de temperaturas es posible evaluar el perfil de velocidades.

¿Pero... no
estábamos
resolviendo un
perfil de
temperaturas? ¿No
he terminado aquí?



Caso de estudio: convección libre

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

Una vez conocido el perfil de temperaturas T es posible evaluar el perfil de velocidades u . Para una geometría cartesiana:

$$\rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right] + \rho g_z$$

$$\frac{\partial u_z}{\partial y} \neq 0$$

La velocidad u_z varía con la dimensión y (la distancia entre las placas), pero no con las otras dos dimensiones x, z

$$\frac{\partial u_z}{\partial t} = 0$$

La velocidad u_z es constante con el tiempo (estado estacionario)

La presencia de gradientes térmicos modifica el balance hidrostático, lo que origina **convección libre** y la ρ varía con la T

Se tiene finalmente que:

$$\rho \left(\cancel{\frac{\partial u_z}{\partial t}} + u_x \cancel{\frac{\partial u_z}{\partial x}} + u_y \cancel{\frac{\partial u_z}{\partial y}} + u_z \cancel{\frac{\partial u_z}{\partial z}} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\cancel{\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2}} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \cancel{\frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2}} \right] + \rho g_z$$

Aquí $\frac{\partial p}{\partial z}$ representa el **gradiente de presión generado por el peso del fluido** y no el gradiente de presión impuesto externamente: sería la presión ejercida por la columna de aire que hay por encima. No hay ninguna bomba o compresor

Las otras 2 ecuaciones no son relevantes

Caso de estudio: convección libre

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

Una vez conocido el perfil de temperaturas T es posible evaluar el perfil de velocidades u . Para una geometría cartesiana:

$$\rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right] + \rho g_z$$

$$\frac{\partial u_z}{\partial y} \neq 0$$

La velocidad u_z varía con la dimensión y (la distancia entre las placas), pero no con las otras dos dimensiones x , z

$$\frac{\partial u_z}{\partial t} = 0$$

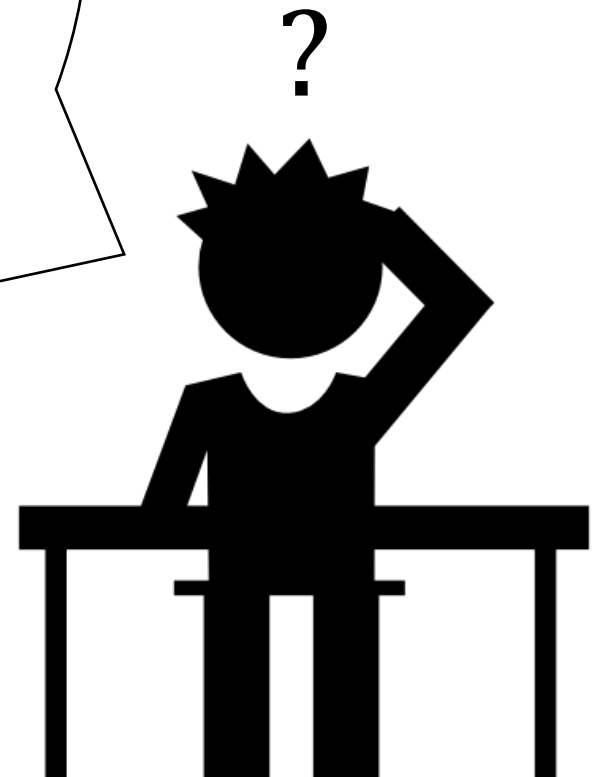
La velocidad u_z es constante con el tiempo

Se tiene finalmente que:

$$0 = -\frac{\partial P}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} \right) + \rho g_z$$

Se necesita relacionar ρ con T para introducir el efecto de flotación. Se aplica la aproximación de Boussinesq: ρ se toma aproximadamente constante salvo en el término gravitatorio, donde se linealiza con la T

Preveo un problema...
Hemos dicho que la
densidad depende de la
temperatura? ¿Pero no
habíamos dicho en la parte
de balances microscópicos
de cantidad de movimiento
que $-\frac{\partial P}{\partial z} + \rho g_z$ era una
constante?



Caso de estudio: convección libre

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

Dado que la densidad ρ varía con la temperatura T , (introducimos la flotación mediante la aprox. De Boussinesq) y asumiendo que la μ no se ve afectada por la T en el intervalo considerado, es necesario realizar una expansión en series de Taylor para la ρ con la T entorno a $\bar{T}$. Los 2 primeros términos de dicha expansión llevan a :

$$\rho = \rho(\bar{T}) + \left. \frac{d\rho}{dT} \right|_{T=\bar{T}} (T - \bar{T}) + \dots = \bar{\rho} - \bar{\rho}\bar{\beta}(T - \bar{T})$$

Donde $\bar{\rho}$ es la densidad a la temperatura promedio $\bar{T}$ y $\bar{\beta}$ es el coeficiente de expansión volumétrico ($= -\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dT}$) evaluado a la temperatura promedio $\bar{T}$ (unidades de K^{-1}), luego al sustituir la expresión desarrollada de la ρ :

$$0 = -\frac{\partial P}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} \right) + \bar{\rho} g_z - \bar{\rho}\bar{\beta}(T - \bar{T}) g_z$$

En convección forzada $\frac{\partial P}{\partial z}$ tenía un valor fijado constante, pero ahora en convección libre para cada posición y tenemos una T diferente, por lo que en cada valor de y , la P para cada z depende de la T en esa posición y

Caso de estudio: convección libre

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

$$0 = -\frac{\partial P}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} \right) + \bar{\rho} g_z - \bar{\rho} \bar{\beta} (T - \bar{T}) g_z$$

Al sustituir el perfil de temperatura T que se había obtenido anteriormente:

$$0 = -\frac{\partial P}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} \right) + \bar{\rho} g_z - \bar{\rho} \bar{\beta} \left(\bar{T} - \frac{y \Delta T}{B} - \bar{T} \right) g_z$$

Operando:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial z} - \bar{\rho} g_z \right) - \bar{\rho} \bar{\beta} \left(\frac{y \Delta T}{B} \right) g_z = \mu \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} \right)$$

Caso de estudio: convección libre

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

Si ahora tenemos en cuenta que:

$$\frac{\partial P}{\partial z} - \bar{\rho} g_z = 0$$

En convección forzada $\frac{\partial P}{\partial z} - \rho g_z$ se suele tomar como una constante (que puede ser cero o no) ya que depende de la caída de presión impuesta normalmente a través de una bomba ΔP y al ser la temperatura T constante no hay cambios en el valor de la densidad ρ

Como la densidad ρ cambia con la temperatura T en cada posición y , el equilibrio hidrostático simple ya no se cumple, es decir, no se cumple $\frac{\partial P}{\partial z} - \rho g_z = 0$ (la presión equilibra el peso del fluido), pero sí se cumple esta condición cuando $\rho = \bar{\rho}$ a la temperatura promedio $\bar{T}$: las diferencias locales de ρ con $\bar{\rho}$ originan las fuerzas de flotación por las que se mueve el fluido: hacia arriba en el lado caliente ($\frac{\partial P}{\partial z} < 0$) y hacia abajo en el lado frío ($\frac{\partial P}{\partial z} > 0$)

Es porque el aumento de presión P en el eje z se debe únicamente a la densidad media del fluido $\bar{\rho}$ que se sitúa a una altura determinada z . Es importante recalcar que la temperatura T_2 se mantiene constante en $y = -B$ y que la temperatura T_1 se mantiene constante en $y = B$ independientemente del valor de z . Sustituyendo se obtiene que:

$$-\bar{\rho}\bar{\beta} \left(\frac{y}{B} \frac{\Delta T}{2} \right) g_z = \mu \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} \right)$$

Aquí la velocidad u_z ya sólo depende de la posición y

Caso de estudio: convección libre

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(*definir condiciones iniciales y condiciones límite*)

Integrando la expresión de forma explícita se generan dos constantes de integración, con lo que sustituyendo las condiciones límites:

CONDICIÓN LÍMITE 1

No deslizamiento en la pared caliente

$$y = -B \rightarrow u_z = 0$$

CONDICIÓN LÍMITE 2

No deslizamiento en la pared fría

$$y = B \rightarrow u_z = 0$$

Por lo que finalmente quedaría:

$$u_z = \frac{\bar{\rho} g_z \bar{\beta} \Delta T B^2}{12\mu} \left[\left(\frac{y}{B} \right)^3 - \left(\frac{y}{B} \right) \right]$$

Se observa que el perfil de velocidad u_z es proporcional a la dif. de temperaturas ΔT , a la densidad $\bar{\rho}$ e inversamente prop. a la viscosidad μ .

Caso de estudio: convección libre

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(*definir condiciones iniciales y condiciones límite*)

Definiendo una posición/distancia adimensional η así como una velocidad adimensional u_z^* de la siguiente forma, aparece el número adimensional de Grashof Gr :

$$\eta = \frac{y}{B} \qquad u_z^* = \frac{Bu_z \bar{\rho}}{\mu} \qquad Gr = \frac{\bar{\rho}^2 g_z \bar{\beta} \Delta T B^3}{\mu^2}$$

Por lo que finalmente quedaría:

$$u_z^* = \frac{Gr}{12} \left[(\eta)^3 - (\eta) \right]$$

El número adimensional de Grashof Gr es el número adimensional convencional que se emplea en el estudio de los sistemas con convección libre.

6.4 Balances microscópicos de materia

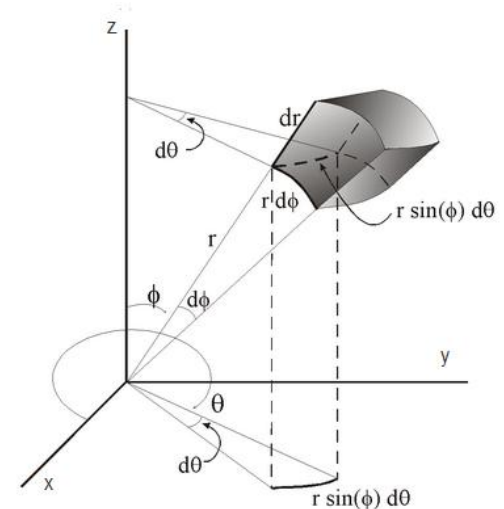
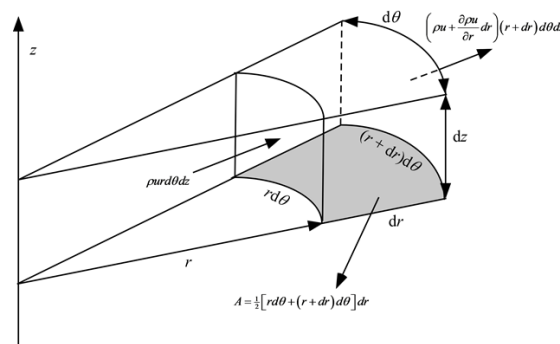
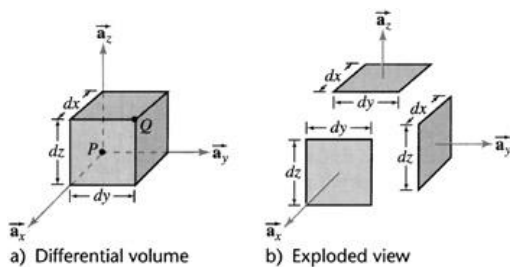


Aplicación del BMic de materia

$$E - S + Rx = 0$$

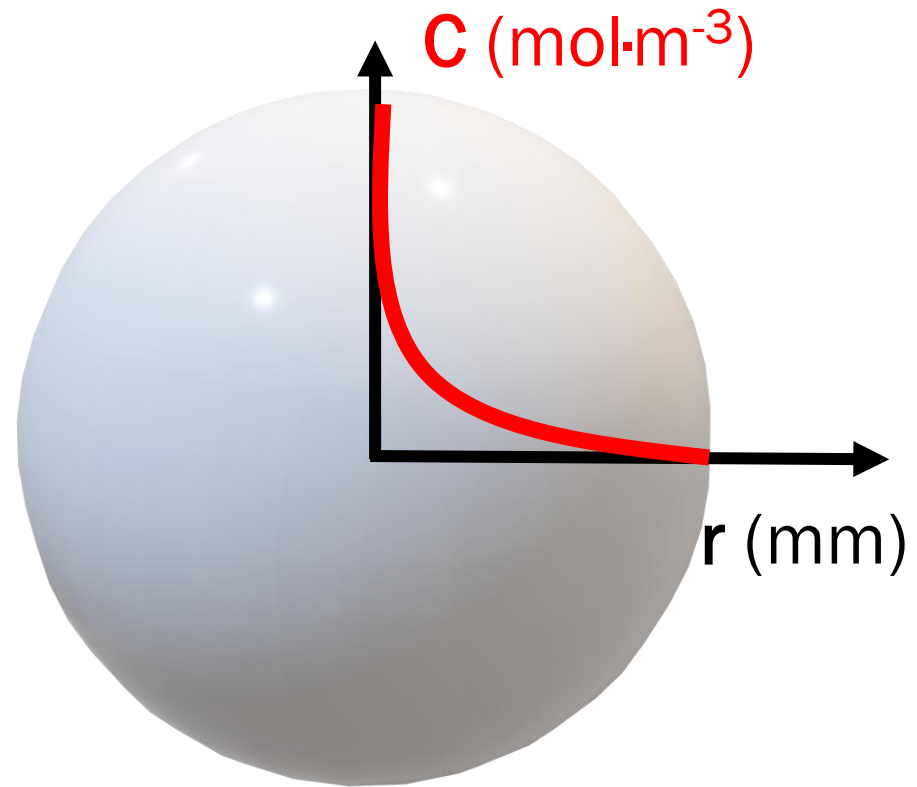
Balance de materia en estado estacionario en forma diferencial

En el estado estacionario, el transporte de materia se debe tanto al flujo difusivo como al advectivo. Las reacciones químicas son responsables de la generación o desaparición de componentes en un sistema multicomponente. En sistemas de un solo componente se hará referencia a la ecuación de continuidad para ese componente.



Aplicación del BMic de materia

El objetivo de la aplicación del Balance Microscópico de materia debe ser un perfil de composiciones / concentraciones, es decir, conocer en cada punto de la geometría considerada cual es el valor de la composición / concentración



Aplicación del BMic de materia

Ecuaciones diferenciales de distribución de densidad de flujo de materia para la especie α en coordenadas cartesianas, cilíndricas y esféricas

§B.10 LA ECUACIÓN DE CONTINUIDAD PARA LA ESPECIE α EN TÉRMINOS^a DE j_α

En determinadas referencias se refieren tradicionalmente como ecuaciones de continuidad para especies químicas

$$[\rho D\omega_\alpha / Dt = -(\nabla \cdot j_\alpha) + r_\alpha]$$

Coordenadas cartesianas (x, y, z):

$$\rho \left(\frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + v_x \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial x} + v_y \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial y} + v_z \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial z} \right) = - \left[\frac{\partial j_{\alpha x}}{\partial x} + \frac{\partial j_{\alpha y}}{\partial y} + \frac{\partial j_{\alpha z}}{\partial z} \right] + r_\alpha \quad (\text{B.10-1})$$

Coordenadas cilíndricas (r, θ, z):

$$\rho \left(\frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + v_r \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial z} \right) = - \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r j_{\alpha r}) + \frac{1}{r} \frac{\partial j_{\alpha \theta}}{\partial \theta} + \frac{\partial j_{\alpha z}}{\partial z} \right] + r_\alpha \quad (\text{B.10-2})$$

Coordenadas esféricas (r, θ, ϕ):

$$\rho \left(\frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + v_r \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial \theta} + \frac{v_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial \phi} \right) = - \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 j_{\alpha r}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (j_{\alpha \theta} \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial j_{\alpha \phi}}{\partial \phi} \right] + r_\alpha \quad (\text{B.10-3})$$

^a Para obtener las ecuaciones correspondientes en términos de J_α^* deben hacerse las siguientes sustituciones:

Sustituir	ρ	ω_α	j_α	$\mathbf{v}$	r_α
por	c	x_α	J_α^*	$\mathbf{v}^*$	$R_\alpha = x_\alpha \sum_{\beta=1}^N R_\beta$

Aplicación del BMic de materia

Ecuaciones diferenciales de distribución de densidad de flujo de materia una especie A en coordenadas cartesianas, cilíndricas y esféricas

Coordenadas rectangulares:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \left(\frac{\partial N_{Ax}}{\partial x} + \frac{\partial N_{Ay}}{\partial y} + \frac{\partial N_{Az}}{\partial z} \right) = R_A$$

No ha desaparecido la velocidad lineal, sino que ahora está integrada en N_A

Coordenadas cilíndricas:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r N_{Ar}) + \frac{1}{r} \frac{\partial N_{A\theta}}{\partial \theta} + \frac{\partial N_{Az}}{\partial z} \right) = R_A$$

Aquí el término R_A representa la reacción química

Coordenadas esféricas:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 N_{Ar}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (N_{A\theta} \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial N_{A\phi}}{\partial \phi} \right) = R_A$$

Aplicación del BMic de materia

Pasos para la aplicación de los BMic de materia

1

Plantear el balance de materia para un elemento diferencial de volumen
(elegir la ecuación según geometría)

2

Introducir la ley constitutiva de transporte de materia: ley de Fick para difusión molecular, incluyendo el término convectivo si procede

3

Simplificar las diferenciales de distribución de densidad de flujo de materia

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

Aplicación del BMic de materia

Ecuaciones diferenciales de distribución de densidad de flujo de materia con densidad y difusividad constante en coordenadas cartesianas, cilíndricas y esféricas

§B.11 LA ECUACIÓN DE CONTINUIDAD PARA LA ESPECIE A EN TÉRMINOS DE ω_A PARA $\rho \mathcal{D}_{AB}$ CONSTANTE^a

$$[\rho D_{\omega A} / Dt = \rho \mathcal{D}_{AB} \nabla^2 \omega_A + r_A]$$

Coordenadas cartesianas (x, y, z):

$$\rho \left(\frac{\partial \omega_A}{\partial t} + v_x \frac{\partial \omega_A}{\partial x} + v_y \frac{\partial \omega_A}{\partial y} + v_z \frac{\partial \omega_A}{\partial z} \right) = \rho \mathcal{D}_{AB} \left[\frac{\partial^2 \omega_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \omega_A}{\partial z^2} \right] + r_A \quad (\text{B.11-1})$$

Coordenadas cilíndricas (r, θ, z):

$$\rho \left(\frac{\partial \omega_A}{\partial t} + v_r \frac{\partial \omega_A}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial \omega_A}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial \omega_A}{\partial z} \right) = \rho \mathcal{D}_{AB} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \omega_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \omega_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \omega_A}{\partial z^2} \right] + r_A \quad (\text{B.11-2})$$

Coordenadas esféricas (r, θ, ϕ):

$$\rho \left(\frac{\partial \omega_A}{\partial t} + v_r \frac{\partial \omega_A}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial \omega_A}{\partial \theta} + \frac{v_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial \omega_A}{\partial \phi} \right) = \rho \mathcal{D}_{AB} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \omega_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \omega_A}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \omega_A}{\partial \phi^2} \right] + r_A$$

Aplicación del BMic de materia

Formas equivalentes de la Ley de Fick para difusión binaria en función del empleo de densidad de flujo másico o molar

Densidad de flujo	Gradiente	Forma de la ley de Fick
j_A	$\nabla \omega_A$	$j_A = -\rho \mathcal{D}_{AB} \nabla \omega_A$ (A)
J_A^*	∇x_A	$J_A^* = -c \mathcal{D}_{AB} \nabla x_A$ (B)
n_A	$\nabla \omega_A$	$n_A = \omega_A(n_A + n_B) - \rho \mathcal{D}_{AB} \nabla \omega_A = \rho_A \mathbf{v} - \rho \mathcal{D}_{AB} \nabla \omega_A$ (C)
N_A	∇x_A	$N_A = x_A(N_A + N_B) - c \mathcal{D}_{AB} \nabla x_A = c_A \mathbf{v}^* - c \mathcal{D}_{AB} \nabla x_A$ (D)
$\rho(\mathbf{v}_A - \mathbf{v}_B)$	$\nabla \omega_A$	$\rho(\mathbf{v}_A - \mathbf{v}_B) = -\frac{\rho \mathcal{D}_{AB}}{\omega_A \omega_B} \nabla \omega_A$ (E)
$c(\mathbf{v}_A - \mathbf{v}_B)$	∇x_A	$c(\mathbf{v}_A - \mathbf{v}_B) = -\frac{c \mathcal{D}_{AB}}{x_A x_B} \nabla x_A$ (F)

Se observa que la densidad de flujo másico j_A (kg/(m²·s)) aparece junto a la densidad ρ (kg/(m³)) y a la fracción másica ω_A (-), mientras que la densidad de flujo molar J_A^* (kmol/(m²·s)) aparece junto a la concentración c (kmol/(m³)) y la fracción molar x_A (-).

Aplicación del BMic de materia

Ejemplos de condiciones límites

CONDICIÓN LÍMITE 1

La fracción molar en una superficie es conocida

$$x = L \rightarrow x_A = x_{A,0}$$

CONDICIÓN LÍMITE 2

La densidad de flujo de materia es conocida

$$N_A = N_{A,0}$$

CONDICIÓN LÍMITE 3

El coeficiente de transferencia de materia es conocido (interfases)

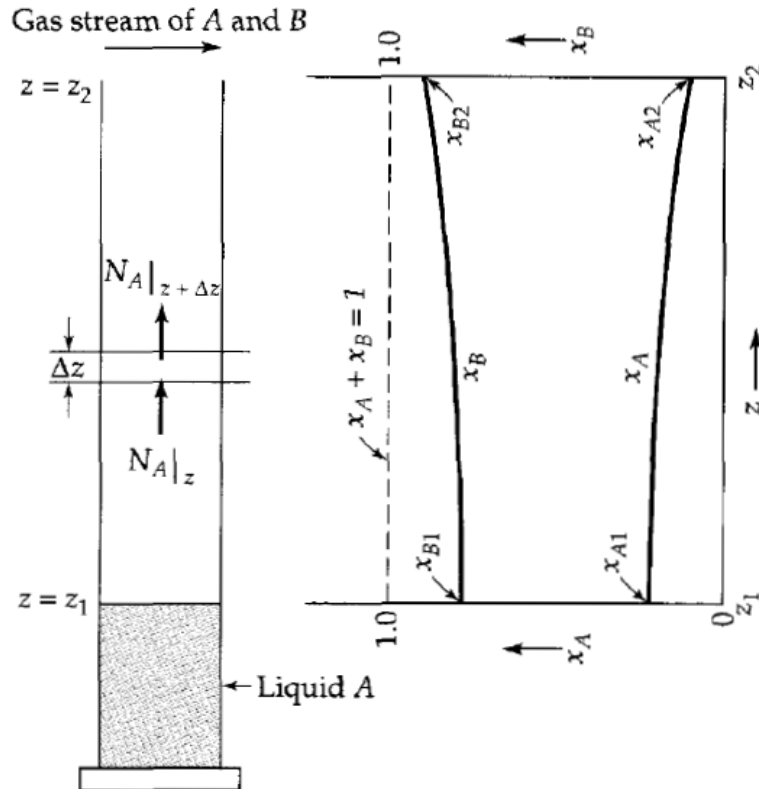
$$N_{A,0} = k_c (C_{A,0} - C_{A,bulk})$$

CONDICIÓN LÍMITE 4

La velocidad de la reacción en la superficie es conocida (reacción de primer orden)

$$N_{A,0} = k(C_{A,0})$$

Caso de estudio: difusión en una columna de gas estancada



Se tiene un líquido A que se evapora en un gas B. Se tiene un dispositivo que mantiene el líquido A a una altura $z = z_1$. La mezcla gaseosa de A y B se puede asumir como ideal. La solubilidad de B en el líquido A es despreciable. La fracción molar en la fase gas $x_{A,1}$ en la superficie del líquido es la concentración en equilibrio con el líquido (la presión parcial de A dividida por la presión total). Una corriente de gas mezcla de A y B fluye por la parte superior a una velocidad tal que mantiene la concentración de A en $z = z_2$ como $x_{A,2}$.

Caso de estudio: difusión en una columna de gas estancada

1

Plantear el balance de materia para un elemento diferencial de volumen
(*elegir la ecuación según geometría*)

$$\rho \left(\frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t} + v_r \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial z} \right) = - \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r j_{\alpha r}) + \frac{1}{r} \frac{\partial j_{\alpha \theta}}{\partial \theta} + \frac{\partial j_{\alpha z}}{\partial z} \right] + r_\alpha \quad (\text{B.10-2})$$

2

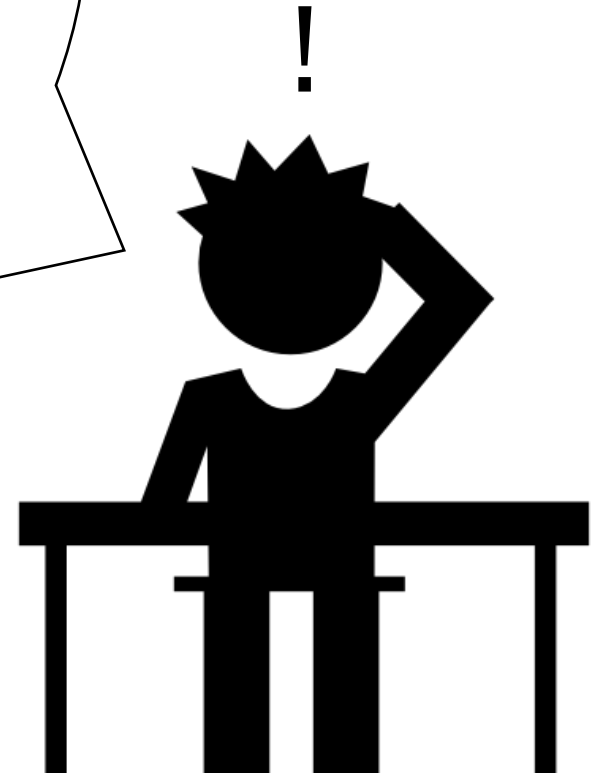
Introducir la expresión de densidad de flujo de materia (*sustituir la expresión de la densidad de flujo de materia*)

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r N_{Ar}) + \frac{1}{r} \frac{\partial N_{A\theta}}{\partial \theta} + \frac{\partial N_{Az}}{\partial z} \right) = R_A$$

GEOMETRÍA CILÍNDRICA

El empleo de la geometría cartesiana nos llevaría a una situación similar en este caso particular

¡Entendido! Por eso vemos primero la Ley de Fick de la difusión antes que los balances: la relación entre densidades de flujo de materia y concentración es fundamental para resolver el balance microscópico de materia, que es un balance que nos permite conocer los perfiles de concentración en una determinada geometría



Caso de estudio: difusión en una columna de gas estancada



Simplificar las diferenciales de distribución de densidad de flujo de materia

$N_{A,r} = 0; N_{A,\theta} = 0;$
 $N_{A,z} \neq 0$ Únicamente existe densidad de flujo de materia en la dimensión z

$N_{B,z} = 0$ B se comporta como componente estancado en la fase gas: no hay flujo neto molar de B en la columna gaseosa sobre el líquido A

$\frac{\partial x_A}{\partial t} = 0$ La fracción molar en la fase gas para la sustancia A es constante con el tiempo

$R_A = 0$ No hay reacción química

Simplificando, las expresiones anteriores se obtiene:

$$\frac{\partial N_{A,z}}{\partial z} = 0$$

Caso de estudio: difusión en una columna de gas estancada



Simplificar las diferenciales de distribución de densidad de flujo de materia

La resolución de esta expresión sería directa si se dispusiera del valor de la densidad de flujo de materia. En tanto que las condiciones que se conocen son en los extremos del tubo, necesitamos la definición de la densidad de flujo de materia combinada, es decir, la que tiene en cuenta la contribución advectiva y la difusión:

$$N_{A,z} = x_A (N_{A,z} + N_{B,z}) - cD_{AB} \frac{\partial x_A}{\partial z}$$

Simplificando tenemos la expresión de la densidad de flujo de materia dado que $N_{B,z} = 0$ por poder difundirse en A, ahora sí en función de la fracción molar en la fase gas:

$$N_{A,z} = \frac{-cD_{AB}}{1 - x_A} \frac{\partial x_A}{\partial z}$$

Caso de estudio: difusión en una columna de gas estancada

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

Puesto que hemos supuesto presión y temperatura constante, entonces necesariamente, si tenemos gases ideales, entonces c también es constante, luego:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{-cD_{AB}}{1 - x_A} \frac{\partial x_A}{\partial z} \right) = 0$$

Como puede observarse, finalmente el perfil de concentraciones no depende de la difusividad D_{AB} :

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{1 - x_A} \frac{\partial x_A}{\partial z} \right) = 0$$

Caso de estudio: difusión en una columna de gas estancada

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

Integrando la expresión de forma explícita se generan dos constantes de integración:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{1 - x_A} \frac{\partial x_A}{\partial z} \right) = 0 \quad \frac{1}{1 - x_A} \frac{\partial x_A}{\partial z} = C_1 \quad -\ln(1 - x_A) = C_1 z + C_2$$

Sustituyendo las dos condiciones límites:

CONDICIÓN LÍMITE 1

Fracción molar en la fase gas en la
superficie del líquido

$$Z = Z_1 \rightarrow x_A = x_{A,1}$$

CONDICIÓN LÍMITE 2

Fracción molar en la fase gas en la
corriente de gas

$$Z = Z_2 \rightarrow x_A = x_{A,2}$$

Caso de estudio: difusión en una columna de gas estancada

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

Sustituyendo y operando:

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

$$-Ln(1 - x_{A,1}) = C_1 z_1 + C_2$$

$$-Ln(1 - x_{A,2}) = C_1 z_2 + C_2$$

Despejando los valores de las dos constantes de integración:

$$-Ln(1 - x_{A,1}) - (-Ln(1 - x_{A,2})) = C_1 z_1 - C_1 z_2$$

$$Ln \frac{(1 - x_{A,2})}{(1 - x_{A,1})} = C_1 (z_1 - z_2)$$

$$\frac{Ln \frac{(1 - x_{A,2})}{(1 - x_{A,1})}}{(z_1 - z_2)} = C_1$$

Caso de estudio: difusión en una columna de gas estancada

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

$$-Ln(1 - x_{A,1}) = \frac{Ln \frac{(1 - x_{A,2})}{(1 - x_{A,1})}}{(z_1 - z_2)} z_1 + C_2$$

$$-Ln(1 - x_{A,1}) - \frac{Ln \frac{(1 - x_{A,2})}{(1 - x_{A,1})}}{(z_1 - z_2)} z_1 = C_2$$

Caso de estudio: difusión en una columna de gas estancada

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

Sustituyendo y operando:

$$\frac{\ln \frac{(1 - x_{A,2})}{(1 - x_{A,1})}}{(z_1 - z_2)} = C_1 \qquad -\ln(1 - x_{A,1}) - \frac{\ln \frac{(1 - x_{A,2})}{(1 - x_{A,1})}}{(z_1 - z_2)} z_1 = C_2$$
$$-\ln(1 - x_A) = \frac{\ln \frac{(1 - x_{A,2})}{(1 - x_{A,1})}}{(z_1 - z_2)} z - \ln(1 - x_{A,1}) - \frac{\ln \frac{(1 - x_{A,2})}{(1 - x_{A,1})}}{(z_1 - z_2)} z_1$$
$$-\ln(1 - x_A) + \ln(1 - x_{A,1}) = \frac{\ln \frac{(1 - x_{A,2})}{(1 - x_{A,1})}}{(z_1 - z_2)} (z - z_1)$$

Caso de estudio: difusión en una columna de gas estancada

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

Operando:

$$\ln \frac{(1 - x_{A,1})}{(1 - x_A)} = \frac{\ln \frac{(1 - x_{A,2})}{(1 - x_{A,1})}}{(z_1 - z_2)} (z - z_1)$$

$$\ln \frac{(1 - x_A)}{(1 - x_{A,1})} = \ln \frac{(1 - x_{A,2})}{(1 - x_{A,1})} \frac{(z - z_1)}{(z_2 - z_1)}$$

$$\ln \frac{(1 - x_A)}{(1 - x_{A,1})} = \ln \left(\frac{(1 - x_{A,2})}{(1 - x_{A,1})} \right)^{\frac{(z - z_1)}{(z_2 - z_1)}}$$

$$\frac{(1 - x_A)}{(1 - x_{A,1})} = \left(\frac{(1 - x_{A,2})}{(1 - x_{A,1})} \right)^{\frac{(z - z_1)}{(z_2 - z_1)}}$$

Caso de estudio: difusión en una columna de gas estancada

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

Es importante destacar que el perfil de la fracción molar en la fase gas de B se obtiene como $1 - x_A$, a partir del cual se puede calcular el valor promedio en la altura del tubo

$$\frac{(x_B)}{(x_{B,1})} = \left(\frac{(x_{B,2})}{(x_{B,1})} \right)^{\frac{(z - z_1)}{(z_2 - z_1)}} \quad x_{B,avg} = \frac{(x_{B,2} - x_{B,1})}{Ln \left(\frac{x_{B,2}}{x_{B,1}} \right)} = x_{B,Ln}$$

El valor de la densidad de flujo de materia en la superficie del líquido A $N_{A,z=z_1}$ será la tasa de evaporación de A, de tal forma que se obtiene:

$$N_{A,z=z_1} = \frac{cD_{AB}}{(z_2 - z_1)x_{B,Ln}} (x_{A,1} - x_{A,2})$$

Caso de estudio: difusión en una columna de gas estancada

4

Integración de ecuaciones diferenciales
(definir condiciones iniciales y condiciones límite)

El valor de la densidad de flujo de materia en la superficie del líquido A $N_{A,z=z_1}$ será la tasa de evaporación de A, de tal forma que se obtiene:

$$N_{A,z=z_1} = \frac{cD_{AB}}{(z_2 - z_1)x_{B,Ln}} (x_{A,1} - x_{A,2})$$

En esta expresión obviamente la difusividad D_{AB} sí que aparece efectivamente, junto con la concentración total, la altura de la columna estancada, la diferencia de fracciones molares en los extremos de la columna y el valor logarítmico promedio de la fracción molar de B. Si se hubiera eliminado el término advectivo de la combinada, la expresión que se hubiera obtenido sería:

$$N_{A,z=z_1} = \frac{cD_{AB}}{(z_2 - z_1)} (x_{A,1} - x_{A,2})$$

Esta expresión sería la obtenida si se ignorase el término convectivo del flujo molar absoluto. Es válida para contradifusión equimolar o como aproximación sin flujo molar total, pero no representa correctamente el tubo de Stefan con $N_B = 0$ para la difusión.