eman ta zabal zazu

Universidad del País Vasco
Euskal Herriko Unibertsitatea

Ingeniaritza kimikoaren oinarriak

Egilea
Jose Luis Ayastuy Arizti

EUSKARA ERREKTOREORDETZAREN SARE ARGITALPENA

Liburu honek UPV/EHUko Euskara Errektoreordetzaren dirulaguntza jaso du

Egilea: Jose Luis Ayastuy Arizti
EHUko Zientzia eta Teknologia Fakultateko irakaslea
Ingeniaritza Kimikoa Saila
Telefonoa: 946012619
Helbide elektronikoa: joseluis.ayastuy@ehu.es

ISBN: **978-84-691-7220-9**

Leioa, 2008ko urria

AURKIBIDEA

1 GAIA
INGENIARITZA KIMIKOAREN KONTZEPTUA ETA PRINTZIPIOA 3

2 GAIA
DIMENTSIOAK, UNITATEAK ETA DIMENTSIO-ANALISIA 12

3 GAIA
KALKULU-TEKNIKAK 27

4 GAIA
MASAREN IRAUPENAREN LEGEA: MASA-BALANTZEAK 37

5 GAIA
ENERGIAREN IRAUPENAREN LEGEA: ENERGIA-BALANTZEAK 53

6 GAIA
MUGIMENDU KANTITATEAREN TRANSFERENTZIA. JARIAGAIEN JARIOA 67

7 GAIA
KANPO-JARIOA. JARIAGAIEN JARIOAN OINARRITUTAKO BEREIZTE-ERAGIKETAK 105

8 GAIA
BERO-TRANSMISIORAKO MEKANISMOAK 119

9 GAIA
BERO-TRANSMISIORAKO EKIPOAK: BERO-TRUKAGAILUAK 155

10 GAIA
MASA-TRANSFERENTZIARAKO MEKANISMOAK 171

11 GAIA
FASEEN ARTEKO MASA-TRANSFERENTZIA. BEREIZTE-ERAGIKETAK 187

12 GAIA
LIKIDO-LURRUN OREKA ETA DESTILAZIOA 199

13 GAIA
GAS-LIKIDO OREKA ETA ABSORTZIO / DESORTZIO ERAGIKETA 233

14 GAIA
LIKIDO-LIKIDO OREKA ETA ERAUZKETA 253

15 GAIA
ZINETIKA ETA OREKA KIMIKOA 279

16 GAIA
ERREAKTORE KIMIKOAK DISEINATZEKO OINARRIAK 295

17 GAIA
ERREAKTORE EZ-JARRAITU IDEALA 305

18 GAIA
ERREAKTORE JARRAITU IDEALAK 327

BIBLIOGRAFIA 355

1. GAIA

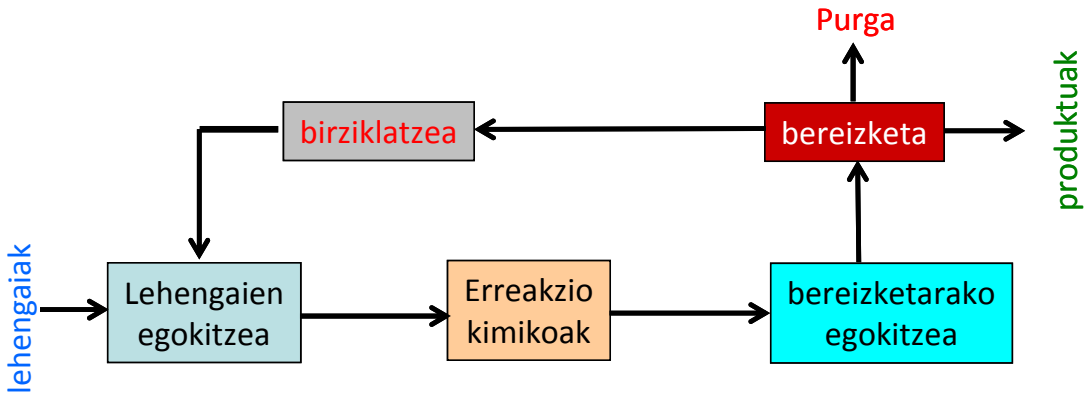
INGENIARITZA KIMIKOAREN KONTZEPTUA ETA PRINTZIPIOAK

Ingeniaritza Kimikoa materiaren egoera fisikoa edo konposizio kimikoa edo eduki energetikoa aldatzen duten prozesu industrialez arduratzen da, AIChEren esanetan (*American Institute of Chemical Engineers*). Ingeniari kimikoa, beraz, prozesu horien sorreraz, diseinuaz, saiakuntzez, eskala-aldaketaz, gauzatzeaz eta kontrolaz arduratzen da.

Ingeniaritzaren arlo guztien artean, ingeniaritza kimikoa izan zen lehena, oinarrizko zientziaren, diseinuaren eta fabrikazioaren arteko erlazio sakona ulertu zuena.

1.1 INDUSTRIA-PROZESU KIMIKOA

Industrian, konposatu kimikoak (lehengaiak) beste konposatu kimiko batzuetara (produktuak) eraldatzen dituzten eragiketa fisiko eta kimikoen sekuentzia ordenatuari industria-prozesu kimikoa deritzo. Adibidez, azido nitrikoaren fabrikazioa, petrolio gordinaren zatikatzea edo ikatzaren gasifikazioa industria-prozesu kimikoak dira. 1.1 irudian instalazio kimiko baten eskema orokorra agertzen da.



1.1 irudia. Instalazio kimiko baten eskema orokorra.

1.1 irudian ikusten den bezala, lehengaiak produktu bihurtzeko, tarteko hainbat eragiketa egiten dira. Lehenik eta behin, erreaktoreko baldintzetara egokitu behar dira lehengaiak, besteak beste, presio, tenperatura, konposizio eta fase egokiak izateko. Horretarako, "lehengaien egokitzea" izeneko eragiketa sortak egin behar dira (konpresoreekin presioa eman, berogailuekin berotu eta abar). Behin lehengaiak egoera egokian egonik, erreaktorea (edo erreaktore sorta) elikatzen da, han prozesu osoko eraldaketa nagusia egiteko: produktuak sortzeko, alegia. Zoritxarrez, erreaktoreetan ez da lehengai guztia bihurtzen; horren ondorioz, bihurtu gabeko lehengaiak, produktuak eta azpiproduktuek osatutako nahastea irteten da erreaktoretik.

Produktua purutasun handikoa nahi bada, nahaste hori bereizi egin behar da. Modu berean, bihurtu ez den lehengaia berreskuratu eta berriro prozesura sartzeak, hau da, birziklatzeak onura ekonomikoa dakarkio prozesuari. Hori dela eta, nahastea bereizi aurretik, bereizteko eragiketak egingo diren baldintzetara egokitu behar da. Bereizteko eragiketetan, alde batetik, produktuak lortuko dira (azken burukoak, merkatuan saltzeko); beste aldetik, bihurtu gabeko lehengaia, birziklatu egingo dena.

Sarri, lehengaiak ezpurutasunak izaten ditu, biak bereiztea zaila delako. Ezpurutasuna konposatu geldoa edo inertea bada, erreaktorean ez da bihurtzen eta nahastearekin irtengo da. Produktuak bereizteko orduan, ezpurutasunak lehengaiarekin batera daude, baita birziklatze-korrontean ere. Prozesua ezpurutasun geldoz elikatzen ari da, eta ezpurutasunak ez dira inondik kanporatzen: horrela lan egingo balu, prozesuko hodi eta ekipoetan ezpurutasunak metatuko lirateke, eta eragiketa oker gauzatuko litzateke. Hori saihesteko,

purga izeneko garbitze-korronte bat kanporatzen da, bertatik ezpurutasun geldoak kanporatzeko.

1.2 INDUSTRIA KIMIKOAREN EBOLUZIOA

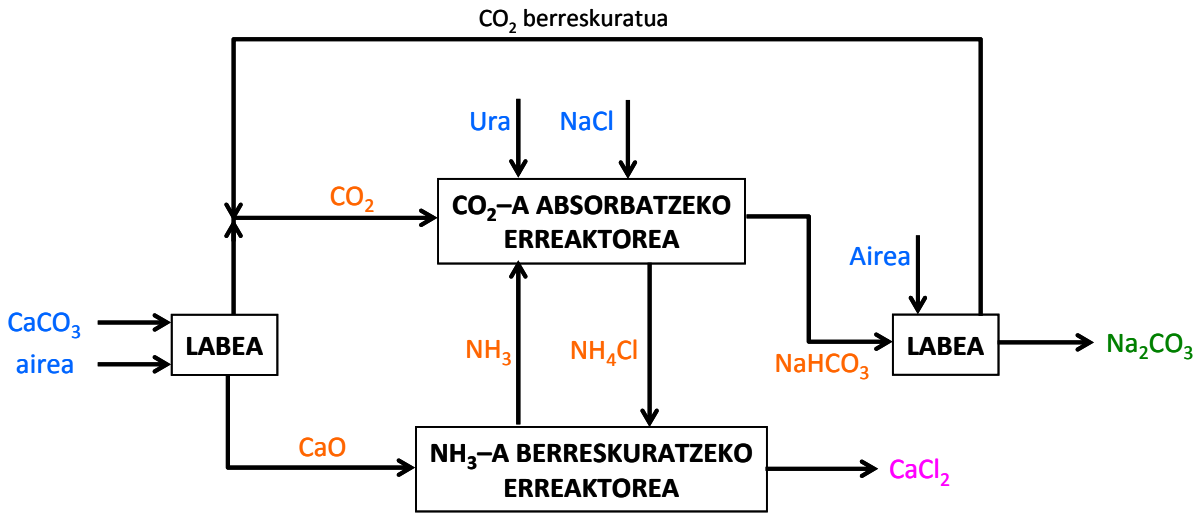
Industria kimikoaren hasiera zehatza jakitea zaila den arren, jakina da Kristo aurreko 7000. urtean beira egiten zela. Egiptoarrek iragazketa erabiltzen zuten K.a. 200. urtean. Feniziarrek xaboia ekoizten zuten K.a. 500. urtean. Ikusten denez, industria kimikoaren hasiera aspaldikoa da, nahiz eta ezaguera zientifikoak ez ziren aplikatzen hasi XVII. mendera arte. Ezaguera zientifikoaz garatu zen lehen prozesua Leblanc prozesua izan zen, sodio karbonatoaren ekoizpena, alegia, 1783. urtean patentatua.

Leblanc prozesuak gatza, azido sulfurikoa, ikatza eta kareharria erabiltzen ditu lehengai gisa, eta bi urratsetan gauzatzen da:

$$2\ NaCl + H_2SO_4 \rightarrow Na_2SO_4 + 2\ HCl$$

$$Na_2SO_4 + CaCO_3 + 2\ C \rightarrow Na_2CO_3 + CaS + 2\ CO_2$$

Prozesu horretan lehengai garestiak erabiltzen direnez (azido sulfurikoa) eta, batez ere, HCl kutsatzailea sortzen denez, 1860. urtean asmatutako Solvay prozesuak alboratu egin du.



1.2 irudia. Na_2CO_3-a ekoizteko Solvay prozesuaren bloke-diagrama.

Solvay prozesuak lehengai merkeak erabiltzen ditu (NaCl eta kareharria), eta prozesu orokorra hau da:

$$2\ NaCl + CaCO_3 \rightarrow Na_2CO_3 + CaCl_2$$

Lehen urratsean, CO_2 gasa ($CaCO_3$ airean kiskaltzean CaO-rekin batera sortzen dena) gatz-ura eta NH_3-a ur-disoluzio urtsuan burbuilatzen da, eta sodio bikarbonatoa prezipitatzen da:

$$NaCl + CO_2 + NH_3 + H_2O \rightarrow NaHCO_3 + NH_4Cl$$

Iragaziaz, NH_4Cl-aren ur-disoluziotik $NaHCO_3$-a bereizten da. Ur-disoluzioa, kareharria kiskaliz lortzen den CaO-arekin erreakzionarazten da, NH_3 sortzeko:

$$2\ NH_4Cl + CaO \rightarrow 2\ NH_3 + CaCl_2 + H_2O$$

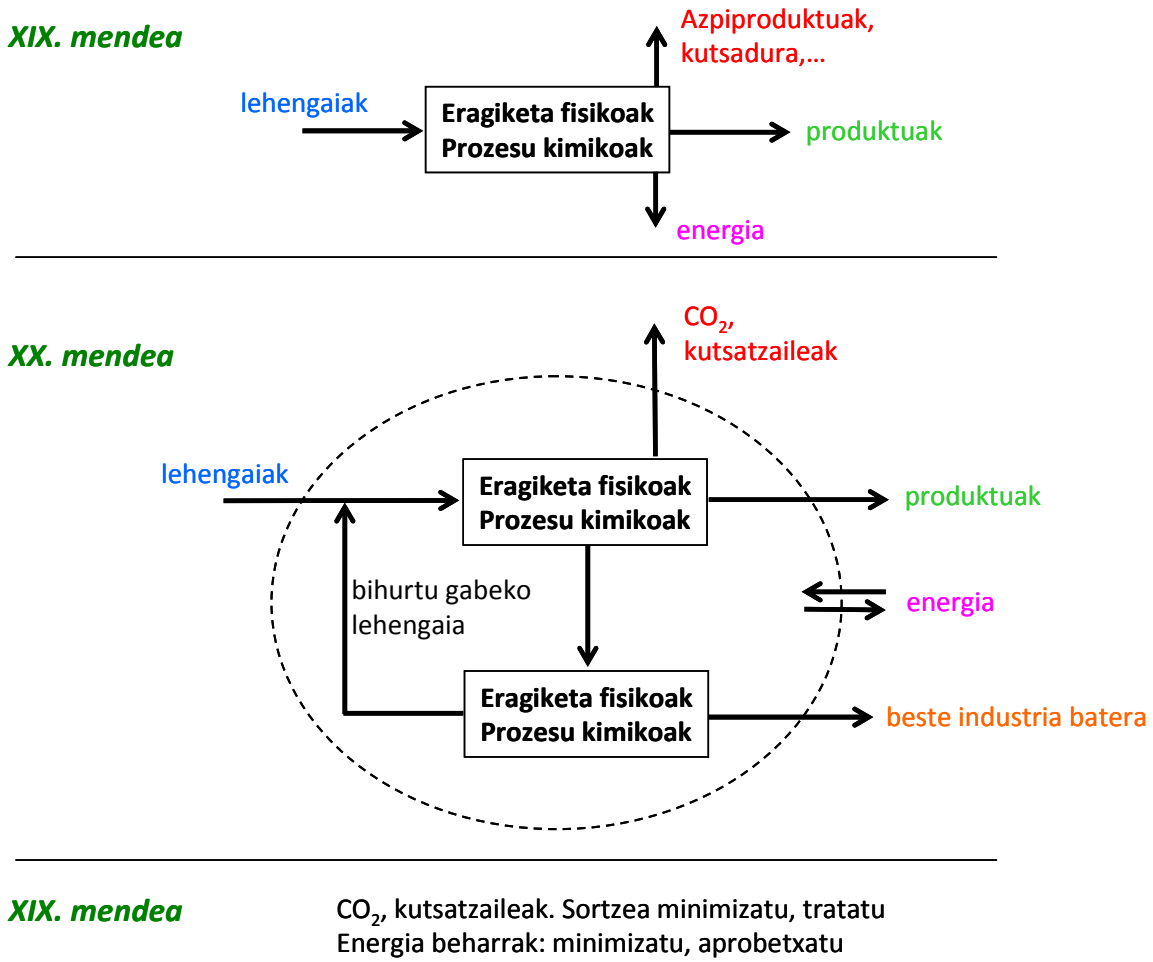
Prozesu horretan sortutako amoniakoa birziklatu egiten da gatz-uretan burbuilatuz. Sodio bikarbonatoa tenperatura baxuan airean lehortu eta kiskali ondoren, sodio bikarbonatoa lortzen da:

$$2\ NaHCO_3 \rightarrow Na_2CO_3 + H_2O + CO_2$$

Karbono dioxidoa berreskuratu eta birziklatu egiten da. 1.2 irudian agertzen da prozesuaren fluxu-diagrama. Prozesu horretan kaltzio kloruroa lortzen da sasiproduktu gisa.

Azken bi mendeetako industria kimikoaren eboluzioak bi ardura nagusi izan ditu, garaien arabera (1.3 irudian): prozesuen eraginkortasuna eta jasangarritasuna, alegia.

XIX. mendearen hasierako industriek ez zuten izan inolako ardurarik azken produktuen ekoizte-prozesuan sor zitezkeen kutsatzaileekin, eta energiaren erabilera mugagabea zuten. Energiaren erabilera ez-eraginkorreko eta kutsadura-maila handiko industriak ziren (Leblanc prozesua, lekuko).



1.3 irudia. Azken bi mendeetako eboluzioa industria kimikoan.

XX. mendeko industria kimikoan, bihurtu gabeko lehengaiak birziklatzeak eta energiaren erabileraren optimizazioak prozesuen eraginkortasun eta errentagarritasun hobea ekarri du. Prozesuan sor daitezkeen azpiproduktuei etekin ekonomikoa ateratzen zaie, beste industria batzuen lehengai gisa salduz. Energiaren erabilera minimizatzeko prozesu eraginkorragoak asmatu dira, eta prozesuko korronteen arteko bero-trukea gauzatzen da. Mende horretako ekonomia petrolioan oinarritu da, lehengai eta erregai gisa erabiltzen baita (gasolinak, lekuko). Industriek erabiltzen duten energia gehiena erregai horien errekuntzaz sortua denez, CO_2-a igortzen da. Gas horren igorpenaren eta Lurraren berokuntza-prozesuaren arteko lotura zuzena ez da XX. mendeko azken aldera arte ikusi.

XX. mendearen amaieran, jasangarritasunaren kontzeptua errotu da gizartean eta prozesu kimikoen berritze eta egokitzean. Garai horretan diseinatu diren prozesu kimikoak,

aurrekoak ez bezala, kutsatzaileen igorpen minimoa dute helburu, eta ahalik eta eskaera energetiko txikienaz dihardute (kutsatzaileak sortzea ekiditea, sortutakoan tratatzea baino onuragarriagoa delako printzipioan oinarrituta). Jasangarritasunean oinarriturik, etekin atomiko handieneko prozesuak diseinatu dira (etekin atomikoa, EA, produktuan dauden lehengaien atomo kantitate gisa definitzen da):

$$EA(\%) = 100 \cdot \frac{\text{helburu-produktuen pisu molekularra}}{\text{produktu guztien pisu molekularra}} \tag{1.1}$$

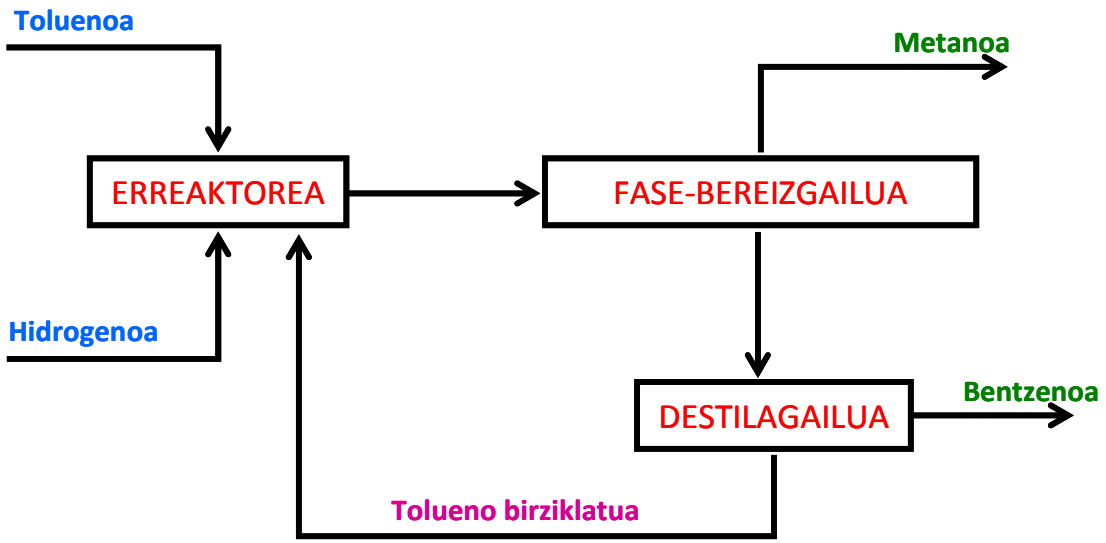
Gaur egun, petrolioan —agortzen ari da— oinarritutako ekonomia hidrogenoan —agortezina eta jasangarria— oinarritutako ekonomia bihurtzeko trantsizio-garaian gaude; betiko prozesu kimikoen ordez, jasangarritasunean oinarritzen diren prozesu berriagoak sortzen ari dira.

1.3 PROZESU KIMIKOEN ADIERAZPEN GRAFIKOA: FLUXU-DIAGRAMAK

Prozesu kimikoak azaltzeko era sinple eta eraginkorrena fluxu-diagramen bidezkoa da. Diagramen sinpletasunaren arabera, bi motako fluxu-diagramak erabiltzen dira: bloke-diagramak eta prozesu-diagramak. Lehenengoetan, nahitaezko informazioa besterik ez da ematen, prozesuaren funtzionamendua ulertzeko nahikoa dena. Bigarrenak, ordea, prozesuaren xehetasun guztiak emateko erabiltzen dira. Diagramako lerroek, prozesuko materia-fluxua edota energia-fluxua adierazten dute.

1.3.1 Bloke-diagramen bidezko prozesu kimikoen adierazpena

1.4 irudian toluenoaren hidrodealkilazio bidezko bentzeno-ekoizpenaren bloke-diagrama azaltzen da. Ikusten denez, ekipo bakoitza bloke edo lauki batean sartzen da, eta prozesuaren adierazpen laburtua besterik ez du ematen.



1.4 irudia. Toluenoaren hidrodealkilazioaren bidez bentzenoa ekoizteko prozesuaren prozesu-diagrama.

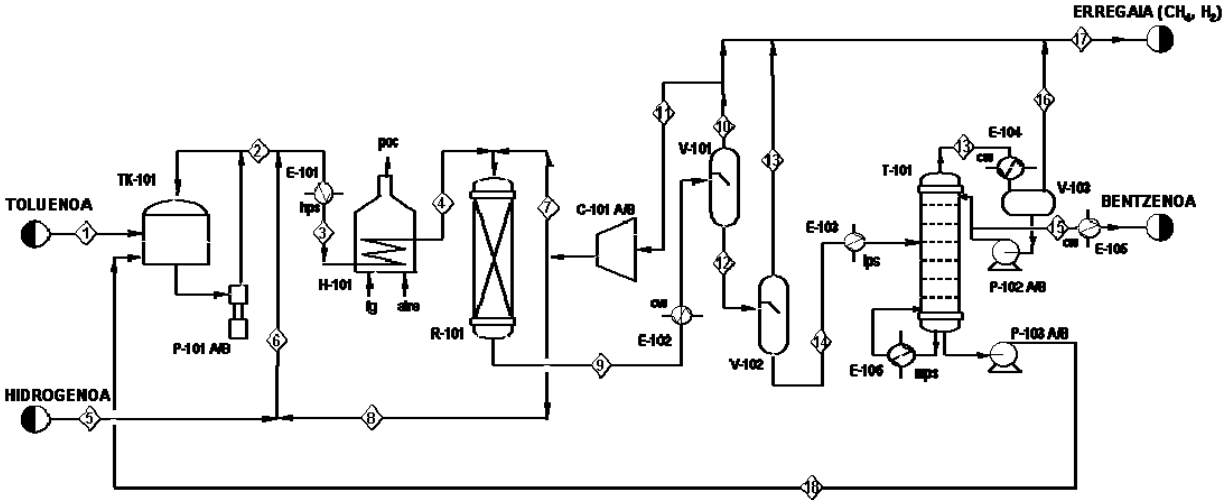
1.4 irudiko bloke-diagramaren arabera, toluenoaren eta hidrogenoaren arteko erreakzioan metanoa eta bentzenoa sortzen dira. Produktuak eta bihurtu gabeko lehengaiak bereizteko, lehenik eta behin, lurruna, (metanoa) eta likidoa (bentzenoa eta toluenoa) bereizten dira. Azken bi horiek destilazioz bereizi ondoren, bihurtu gabeko toluenoa erreaktorera birziklatzen da.

Bloke-diagramak marrazteko arau eta gomendioak:

- Eragiketa edo prozesua lauki batean sartzen da, eta barruan eragiketaren edo ekipoaren izena jarri behar da.
- Instalazioan duten kokapen fisikoa ez da nahitaez jarri behar.
- Korronteen noranzkoa gezien bitartez adierazten da.
- Geziak horizontalak zein bertikalak dira, inoiz ez makurtuak.
- Gezien gurutzaketa saihestu behar da (horizontalak du lehentasuna).
- Bereizketa-eragiketetan gutxienez 2 irteera-gezi jarri behar dira.
- Diagramaren noranzko orokorra ezkerretik eskuinera eta goitik beherakoa da, ahal den neurrian (lehengaiak ezkerretik sartzen dira, eta produktuak eskuinetik irteten dira).

1.3.2 Prozesu-diagramen bidezko prozesu kimikoen adierazpena

Diagrama hauetan prozesuaren informazio zehatza ematen da. Ekipoak marrazteko, benetako formaren berri ematen duten irudi estandarrak erabiltzen dira. 1.5 irudian azaltzen da bentzenoaren ekoizpena azaltzen duen prozesu-diagrama.



1.5 irudia. Toluenoaren hidrodealkilazioaren bidez bentzenoa ekoizteko prozesuaren prozesu-diagrama.

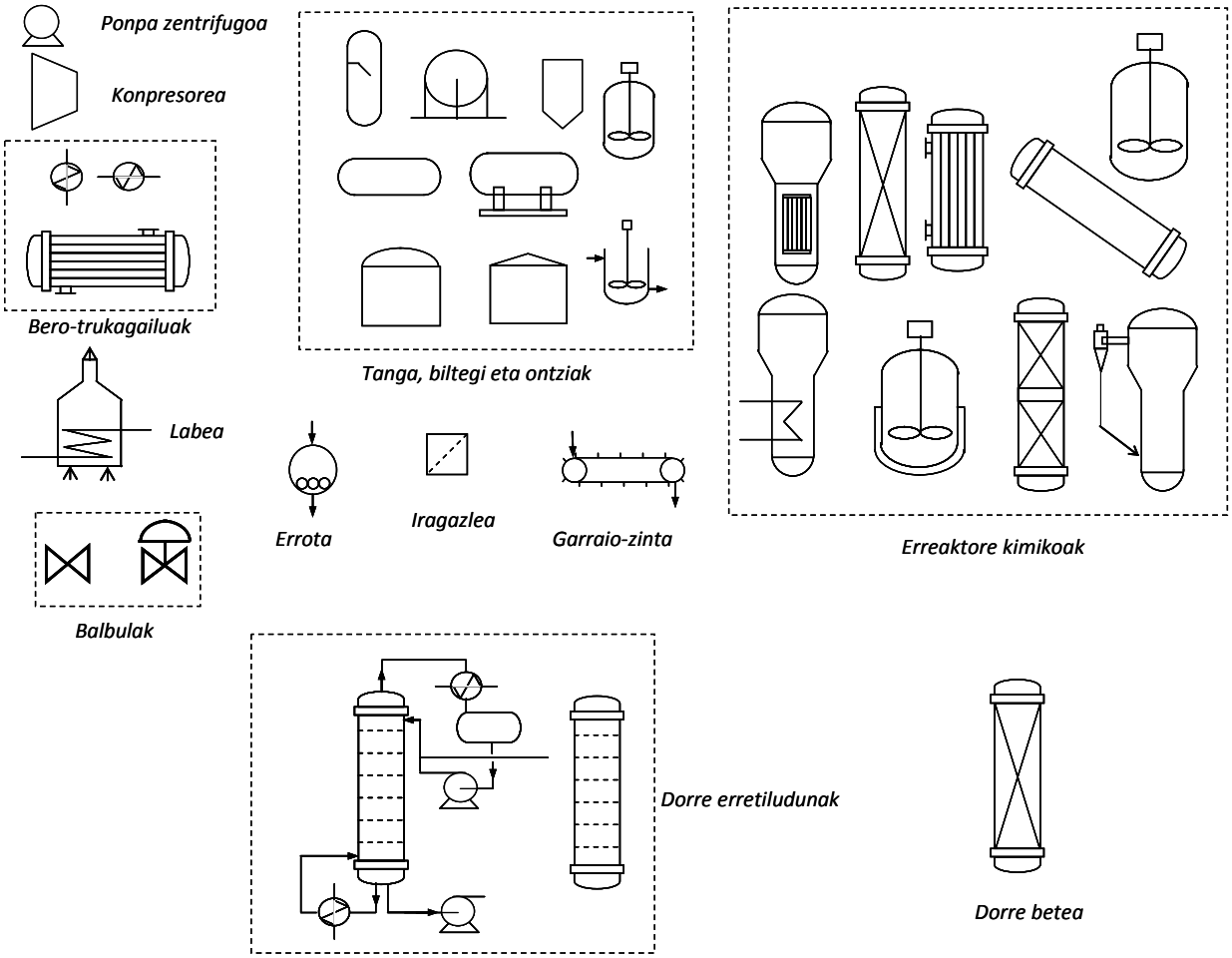
1.5 irudiko prozesu-diagraman, aztertutako prozesuaren xehetasun ugari azaltzen da, bloke-diagraman azaltzen ez direnak. Adibidez, ikusten da fase-bereizketa bi etapatan egiten dela likidoaren eta gasaren bereizketa (hidrogenoa eta metanoa) erabatekoa izan dadin (V-101 eta V-102 ekipoak). Era berean, ikusten da labea behar dela toluenoa berotzeko (H-101 ekipoa) eta destilazioa dorre erretiludunean egiten dela.

Prozesu-diagramak marrazteko irudi estandarrak 1.6 irudian azaltzen dira. Ekipo horien arteko materia-fluxua gezien bitartez adierazten da, bloke-diagraman azaldu den bezala.

1.4 OINARRIZKO ERAGIKETAK ETA PROZESUAK

XX. mendea arte ez zen ikusi industria-prozesu kimikoen arteko erlaziorik. H_2SO_4-aren industria, urearen industria, NaOH-aren industria, gatzaren industria… bakoitza bere aldetik aztertzen zen, beren artean ezer komunik edukiko ez balute bezala. Ingeniaritza kimikoaren

garapenak eta oinarrizko zientziaren garapenak industria kimiko gehienen eragiketa komunak argitu dituzte. Hala, etanolaren ekoizpenean, petrolio-findegietan, disolbatzaileen ekoizpenean, oxigenoaren ekoizpenean… destilazioa egiten da, eta aipatutako prozesuek lehengai eta produktu guztiz desberdinak erabiltzen dituzte. Ingeniaritza kimikoaren garapenak destilazio-eragiketaren azterketa sistematikoa ekarri du. Berdin gertatu da beste hainbat eragiketarekin: absortzioa, erauzketa, lixibiazioa, iragazketa eta abar.



1.6 irudia. Prozesu-diagraman erabiltzeko irudi estandarrak.

Lehengaiak eta produktuak edozein izanda ere, sistematikoki azter daitezkeen eragiketak ***oinarrizko eragiketak*** dira. ***Prozesu kimikoa***, berriz, oinarrizko hainbat eragiketaren batuketa eta erresultantea da. Adibidez, Solvay prozesua erreakzio kimikoek, absortzioak, iragazketak, kiskaltzeak…, hots, oinarrizko eragiketek osatzen dute. Prozesu kimikoek (beti horrela ez den arren) erreakzio kimikoak izango dituzte. Eragiketa bakoitza ekipo batean gauzatzen denez, prozesua gauzatzeko, hainbat ekipo behar dira, modu egokian lotuta.

1.5 ERAGIKETEN ETA PROZESUEN LAN EGITEKO MODUA

Eragiketek zein prozesuek muturreko bi modutan dihardutenez, honela sailkatzen dira:

(1) Eragiketa edo prozesu jarraitua:

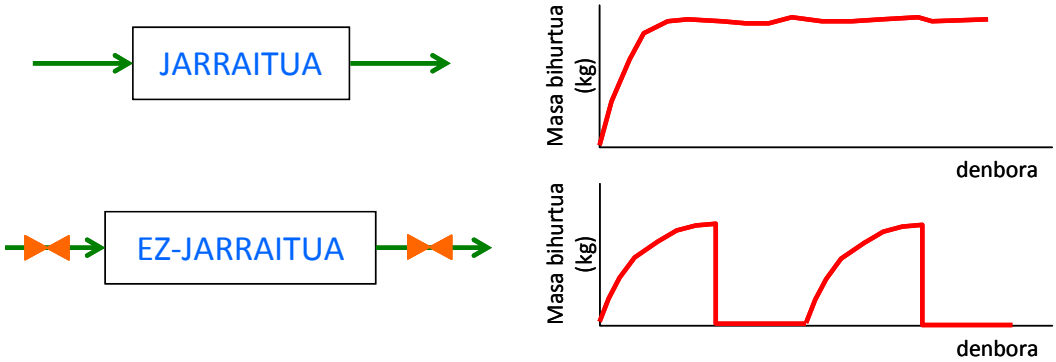
Ekipoa edo prozesua etengabe elikatzen da, eta bihurtutako korrontea etengabe irteten da ekipo edo prozesutik. Denbora guztian ekipoak lanean dihardu. Ekipoaren tamaina elikatzen den emariaren araberakoa eta eragiketaren abiaduraren araberakoa da. Azken hori jakitea

ezinbestekoa da ekipoen diseinua egiteko orduan. Aurrerago datozen gaietan, eragiketen abiadura jakiteko oinarriak azalduko dira, gehienak lege zinetikoetan oinarrituak:

$$\text{Prozesuaren abiadura} = \frac{\text{Indar eragilea}}{\text{Erresistentzia}} \tag{1.2}$$

Lege zinetikoaren arabera, prozesuko aldagai hedagarrien (masa kantitatearen araberakoak diren masaren, energiaren eta mugimendu kantitatearen) abiadura orekarekiko duen diferentziaren (indar eragilearen) araberakoa da, eta erresistentziarekiko (sistemak berak duen eragozpenarekiko) alderantziz proportzionala da.

Era jarraituan diharduten ekipoak eta prozesuak ekoizpen-maila handiak lortzeko erabiltzen dira; energetikoki, eragiketa ez-jarraituak baino eraginkorragoak eta garbiagoak dira, eta bihurtutako produktua uniformea da. 1.7 irudian azaltzen dira ekipo horien sinboloen ezaugarriak eta denboran zeharreko funtzionamendua.



1.7 irudia. Eragiketa jarraitu eta ez-jarraituen sinboloen ezaugarriak eta ekoizpenaren denboran zeharreko eboluzioa.

(2) Eragiketa edo prozesu ez-jarraitua:

Zikloka diharduen ekipoa edo prozesua da. Denbora-tarte batean ekoitzi egiten (eragiketa gauzatzen) du (ekoizpen-denbora), eta, beste denbora-tarte batzuetan, ez du ezer ekoizten (ekipoa bete, hustu, garbitu eta abar egiteko denbora; guztien batura denbora hila da). Ziklo osoaren iraupena denbora hila eta ekoizpen-denboraren baturaz lortzen da, eta denbora da aldagai nagusia. Horrelako eragiketak edo prozesuak ekoizpen-maila txikiko baina balio erantsi handiko produktuak ekoizteko erabiltzen dira. Era jarraituan diharduten ekipoak baino sinple eta merkeagoak dira, eta malgutasun handia eskaintzen dute, ziklo bakoitzean lehengaia aldatzean produktu desberdina lor baitaiteke. 1.7 irudian azaltzen da ekipo horien sinboloen ezaugarriak eta denboran zeharreko funtzionamendua. Ikusten denez, denbora-tarte batzuetan ekoitzi egiten da, eta beste denbora-tarte batzuetan, berriz, ez da ezer ekoizten.

Azaldu diren lan egiteko moduak muturrekoak dira. Hainbat ekipok lan egiteko tarteko modua dute, hau da, korronte batzuek era jarraituan eta beste batzuek ez-jarraituan dihardute. Adibidez, olioaren hidrogenazioz margarina ekoiztean, hidrogenoa era jarraituan elikatzen da erreaktorean, baina olioa kargaka elikatzen da; eta margarina ere era ez-jarraituan lortzen da.

1.6 ERAGIKETEN ETA PROZESUEN EGOERA

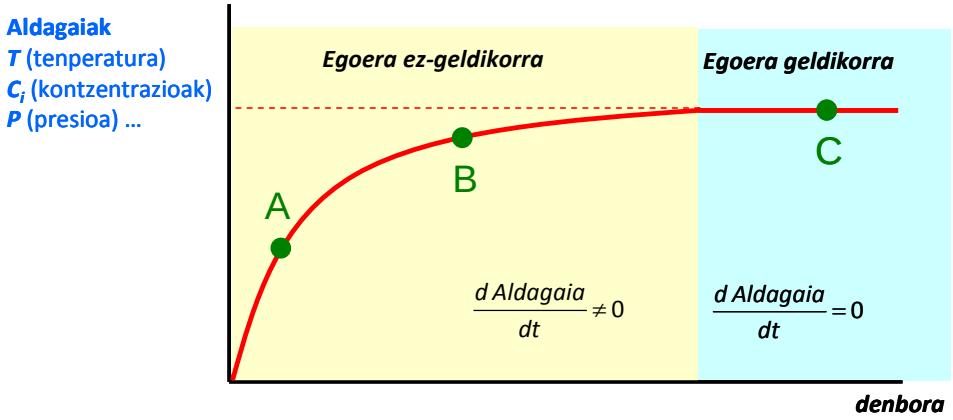
Eragiketak gauzatzeko, ekipoek denboran zehar berdintsu edo modu desberdinean lan egin dezakete. Hori adierazteko, bi egoera bereizten dira:

(1) Egoera geldikorra

Aldagaiak ez dira aldatzen denborarekin. Horren ondorioz, denbora ez da aldagaia, eta, eragiketa aztertzeko orduan, ez dio axola azterketa noiz egiten den, beti berdin lan egiten baitu. Era jarraituan diharduten ekipoek horrela egiten dute lan, abian jartzeko lehen unean eta amaierako azken unean izan ezik. Adibidez, zentral nuklear bateko nukleoaren erreakzioa hasten denean, egun batzuk behar ditu egoera geldikorra lortzeko, tenperatura egokia lortzeko. Behin egun horiek igarota, urteak eman ditzake egoera geldikorrean.

(2) Egoera ez-geldikorra

Aldagaiak aldatu egiten dira denboran zehar. Horren ondorioz, denbora da aldagai nagusia, diseinuan kontuan hartu behar den aldagai nagusia. Era ez-jarraituan diharduten ekipoek horrela egiten dute lan.



1.7 irudia. Egoera geldikorra eta ez-geldikorra.

1.7 irudiaren arabera, A egoera ez-geldikorra da, A baino lehenagoko eta geroxeagoko denboretan aldagaien balioak desberdinak direlako. Kontuan izan aldagaia denboran zehar zer abiaduratan aldatzen den adierazten duela marraztutako kurbaren maldak. Halaber, B ere egoera ez-geldikorrean dago, baina denborarekin motelago aldatzen dira aldagaiak. Behin C egoera lortu ondoren, aldagaiek konstante diraute denboran, egoera geldikorra lortu den seinale.

2. GAIA

DIMENTSIOAK, UNITATEAK ETA DIMENTSIO-ANALISIA

2.1 MAGNITUDEAK ETA UNITATEAK

Sistema fisikoen propietate batzuk neurtu egin daitezke, eta ondorioz, kuantifikatu egin daitezke. Horrelakoak dira, adibidez, luzera, abiadura, azalera, dentsitatea, masa, kontzentrazioa, energia eta abar. ***Magnitudeak*** edo ***dimentsioak*** propietate neurgarriak dira. ***Unitateak***, berriz, magnitudeak kuantifikatzeko elementu estandarizatuak dira, magnitudeak neurtzeko patroiak, alegia. Aurreko magnitudeak unitate batean baino gehiagotan adieraz daitezke: hala, adibidez, luzera, metrotan edo argi-urtetan; masa, kilogramotan edo tonatan; energia jouletan zein kaloriatan neur daiteke. Magnitudea aldaezina da; unitateak, berriz, historian zehar eta eskualdez eskualde aldatuz joan dira, ohituren arabera beharretara moldatuz: Erresuma Batuan, adibidez, masa magnitudearen unitatea libra da, baina herrialde gehienetan kilogramoa erabiltzen da.

Naturako sistema guztiak aztertuz gero, oso magnitude eta unitate kopurua handia ateratzen da, eta nekeza da haiekin lan egitea. Arazo hori saihesteko, kontzeptu fisikoak adierazten dituzten ***oinarrizko magnitude*** edo dimentsio batzuk aukeratu dira konbentzioz (haien unitateak barne). Haiekin, beste edozein magnitude eraiki daiteke. Oinarrizko magnitudeetatik eratortzen diren magnitudeak ***magnitude eratorriak*** dira.

Historikoki, mekanika newtondarrean luzera (L), denbora (t) eta masa (M) erabili izan dira oinarrizko magnitude moduan. Hala, dentsitatea edo indarra magnitude eratorriak dira, eta L, M eta t-ren funtzio potentzial gisa azaltzen dira: $M \cdot L^{-3}$ eta $M \cdot L \cdot t^{-2}$, hurrenez hurren. Aldagai baten magnitudea adierazteko, aldagaia kortxete artean sartzen da. Adibidez, $[v] = L \cdot t^{-1}$ adierazpenak abiaduraren magnitude edo dimentsioa adierazten du. Beraz, edozein [Z] magnitude dimentsio-formula honen bidez azaldu daiteke:

$$[Z] = M^a \cdot L^b \cdot t^c \tag{2.1}$$

Unitate-sistema bat baino gehiago dago, eta bakoitzak erabilera jakin bat du. Hala, ***unitate-sistema absolutuak*** eta ***unitate-sistema teknikoak*** daude. Lehenek oinarrizko magnitudetzat luzera (L), denbora (t) eta masa (M) dituzte; bigarrenek, berriz, luzera (L), denbora (t) eta indarra (F) erabiltzen dituzte, eta ingeniaritzan erabiltzen dira, batik bat. Bi sistemak Newton-en legearen bitartez erlazionatzen dira ($[F] = M \cdot L \cdot t^{-2}$).

Aurrerantzean, masa erabiliko da oinarrizko dimentsio gisa; beraz, unitate-sistema absolutuak erabiliko dira. 2.1 Taulan unitate-sistema absolutuen unitate-sistema batzuk azaltzen dira. Estandarizatzeko eta homogeneizatzeko helburuarekin, herrialde gehienek Nazioarteko Unitate Sistema (SI) erabiltzeko erabakia hartu dute.

2.1 Taula. Magnitudeak eta unitate-sistema absolutuak.

	Unitate-sistema					
	CGS		**IS**		**FPS**	
Oinarrizko magnitudea	*ikurra*	*izena*	*ikurra*	*izena*	*ikurra*	*izena*
Luzera (L)	cm	zentimetro	m	metro	ft	Oin
Masa (M)	g	gramo	kg	kilogramo	lb	libra
Denbora (t)	s	segundo	s	segundo	s	segundo
Tenperatura (T)	ºC	Celsius	K	Kelvin	ºF	Fahrenheit

2.1 Taulan, orain arte aipatutako oinarrizko magnitudeez aparte, tenperatura (T) eta haren unitateak agertzen dira. Tenperatura bero-transmisioa azaltzeko ezinbestekoa delako aukeratzen da oinarrizko magnitude gisa. Fisika eta kimikaren alor guztiak betetzeko,

kandela (cd), ampere (A) eta mol (mol) gehitzen dira SI sisteman argi-intentsitatearen, korronte elektrikoaren intentsitatearen eta materia kantitatearen unitate gisa. Hala, SI unitate-sisteman indarraren unitatea $kg \cdot m/s^2$ da, eta energiarena, berriz, $kg \cdot m^2/s^2$ da.

2.2 UNITATEEN BIHURKETA

Unitate-sistemen arteko bihurketa egiteko, ***baliokideen metodoa*** erabiltzen da. Hala, 1 lb-ren baliokidea 0,4536 kg da (1 lb <> 0,4536 kg). Unitate batetik beste unitate baterako baliokidetza oinarrizko magnitudeei dagozkien baliokidetzatik eratortzen da. Bibliografia aberatsa dago magnitude eratorrien unitateen arteko baliokidetzak aurkitzeko. Adibide hauen bitartez azalduko da metodoaren erabilera.

1.1 adibidea

Gas idealen konstante unibertsalak (R) 0,082 atm·l/mol·K balio du. Arrhenius-en ekuazioan, ordea, J/mol·K unitateetan erabiltzen denez, kalkulatu ezazu R-ren balioa unitate horietan.
Ebazpena

$$0,082\,\frac{\cancel{atm}\cdot\cancel{l}}{K\cdot mol}\cdot\frac{101,3\cdot10^3\,\frac{\cancel{N}}{\cancel{m^2}}}{1\,\cancel{atm}}\cdot\frac{1\,\cancel{m^3}}{10^3\,\cancel{l}}\cdot\frac{1\,J}{1\,\cancel{N}\cdot\cancel{m}} = 8,3\,J/mol\cdot K$$

Unitate-sistemen arteko bihurketa egitean, ohiko tauletan agertzen ez diren unitate eratorri konplexuak lor daitezke. Horrelako kasuetan, hau gomendatzen da:

(1) Bihurketak unitatez unitate egitea, dagokion baliokidetzaz ordezkatuz.

(2) Aldaketa egin ahala, egindako aldaketa markatzea.

(3) Ahal den neurrian, SI-ko unitateez baliatzea.

(4) Azken unitateak frogatzea (dimentsio bera daukan ikustea, alegia).

2.2.1. Tenperatura-eskalak

Tenperatura-eskalen arteko baliokidetzak garrantzi aparta du ingeniaritza kimikoan. SI unitateen sisteman Kelvin (K) erabiltzen da oinarrizko unitate gisa, nahiz eta sarri Celsius graduak (ºC) erabiltzen diren. FPS sisteman Fahrenheit (ºF) eta haren eskala absolutua den Rankine (ºR) erabiltzen dira. Lau unitate horien arteko baliokidetza 2.1 irudian agertzen da, eta hau da:

$$(K) = (ºC) + 273,15 \qquad (2.2)$$

$$(ºF) = 1,8\cdot(ºC) + 32 \qquad (2.3)$$

$$(ºC) = [(ºF) – 32]/1,8 \qquad (2.4)$$

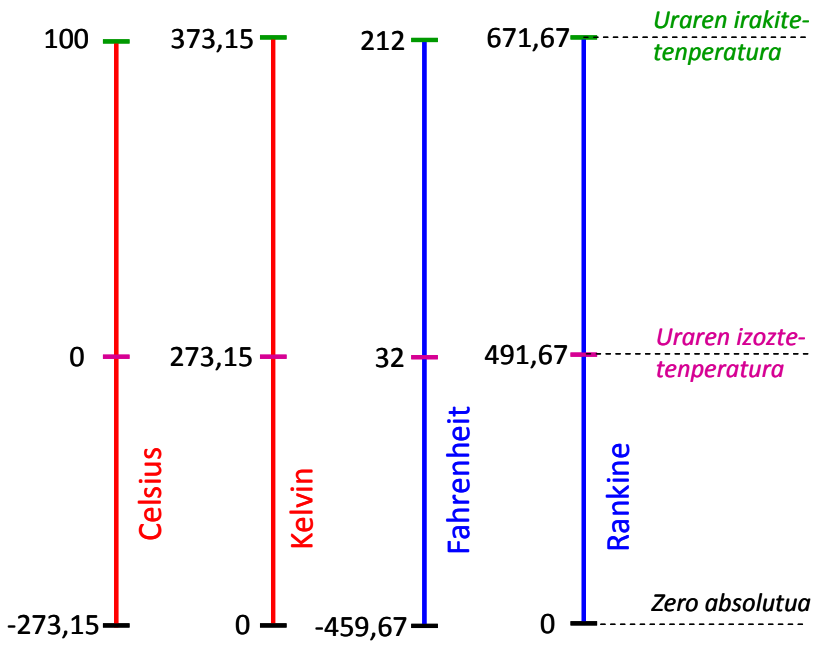
$$(ºR) = (ºF) + 459,67 \qquad (2.5)$$

Tenperatura magnitudea duen aldagai bat unitatez aldatzean, bi egoera aurkitu daitezke:

(a) Tenperaturaren balio absolutuak agertzea. Kasu horietan, goian azaldu diren tenperatura-eskalen arteko baliokidetzak erabiltzen dira. Adibidea: gizakiaren gorputzeko tenperatura normala 37 ºC izanik, (37 ºC)·1,8 + 32 = 98,6 ºF da.

(b) Tenperatura-diferentziak edo -gehikuntzak azaltzea. Ingeniaritza kimikoan erabiltzen diren hainbat adierazpenetan (gehienetan) tenperatura-unitateak azaltzen direnean,

gehikuntza eran agertzen dira. Beraz, tenperatura-eskalen arteko gehikuntzak eginik, 1 ºC = 1 K = 1,8 ºF = 1,8 ºR dela ondorioztatzen da. Horren arabera, Celsius gradu bateko diferentzia 1,8 Fahrenheit graduko diferentziaren baliokidea da. Adibidez, zilarraren eroankortasun termikoak 410 W/m·K balio badu, $410\frac{W}{m\cdot \cancel{K}}\cdot\frac{1\,\cancel{K}}{1{,}8\,^{o}R}=227{,}8\frac{W}{m\,^{o}R}$ balio du.



2.1 irudia. Tenperatura-eskalak.

2.3 EKUAZIO DIMENTSIODUNAK ETA DIMENTSIOGABEAK

Ingeniaritzan erabiltzen diren ekuazioak lege fisikoetan oinarrituak edo korrelazio enpirikoak izan daitezke. Lehenengo kasuan, ekuazioaren terminoak dimentsionalki homogeneoak dira, hau da, termino guztiak dimentsio berekoak dira, eta ekuazioan ager daitezkeen konstanteak dimentsiogabeak dira. Korrelazio enpirikoetako terminoak, ordea, dimentsionalki heterogeneoak izan daitezke, hau da, terminoak dimentsio desberdinekoak izan daitezke. Hala ere, ekuazioek dimentsionalki homogeneoak izan behar dute, hots, berdintzaren bi aldeek dimentsio berekoak izan behar dute. Horregatik, korrelazio enpirikoen bi aldeetako dimentsioak berdinak izateko, proportzionaltasun-konstantea dimentsioduna da.

Dimentsionalki homogeneoak diren ekuazioko termino guztiak termino batez zatitzean, dimentsio gabeko taldeetan eraldatzen da ekuazioa. Adibidez, jariagaien mekanikan Bernouilli-ren ekuazioak dio jariagai baten energia mekanikoa kontserbatu egiten dela, hau da, haren energia zinetikoaren $\left(\frac{v^2}{2g\alpha}\right)$, energia potentzialaren (Z) eta presioaren energiaren $\left(\frac{P}{\rho g}\right)$ batura konstantea dela (terminoak jariagai m-tan adierazita daude).

$$\frac{v^2}{2g\alpha}+Z+\frac{P}{\rho g}=K$$

Ekuazioa Z terminoaz zatitzean, $\frac{v^2}{2g\alpha Z}+1+\frac{P}{\rho g Z}=\frac{K}{Z}$ bihurtzen da, eta, ikusten denez, termino guztiak dimentsiogabeak dira.

Beste kasu askotan, ordea, esperimentalki behatutako hainbat parametroren korrelazio enpirikoak erabiltzen dira. Ekuazio horietako terminoak dimentsio desberdinekoak izan daitezke, eta, ondorioz, agertzen diren konstanteak dimentsiodunak izan ohi dira. Ekuazio horietan, magnitude batentzat zenbait unitate erabiltzen dira sarritan, eta nahitaezkoa da unitate egokiak aukeratzea ekuazioaren erabilera zuzen baterako.

Adibidez, hodi horizontal baten hormaren gainazaletik atmosferara alde egiten duen beroa, azalera unitateko, honela azaldu daiteke:

$$\frac{Q}{A}=0,5\cdot\frac{\Delta T^{1,25}}{D^{0,25}}$$

non Q = bero-jarioa (Btu/h); A = azalera (ft^2); ΔT = gainazaleko eta atmosferako tenperaturen arteko diferentzia (ºF) eta D = hodiaren kanpo-diametroa (in) baitira. Ekuazioaren bi terminoak alderatzean, dimentsio desberdina dutela ohartuko gara. Horregatik, eta ekuazioak dimentsionalki homogeneoak izan daitezen, konstantea dimentsioduna da $\left(0,5\frac{Btu\cdot in^{0,25}}{h\cdot ft^2\cdot(ºF)^{1,25}}\right)$. Ekuazio horretan beste unitate batzuk erabili nahi badira, konstantearen balioa aldatu egin beharko da.

Maiz, ekuazio enpirikoetan aldagaien balioak unitate jakin batzuetan erabili behar dira. Gerta daiteke, ordea, ezagutzen diren aldagaiek beste unitate batzuk izatea. Aldatu beharreko balioak asko ez badira, bana-banako aldaketa egin daiteke; datu sorta zabala denean, ordea, lan nekeza izan daiteke. Hori saihesteko, unitate berriak erabiltzen dituen beste adierazpen batera molda daiteke ekuazioa. Moldaketa hori egiteko, ***baliokideen metodoa*** erabiltzen da. Ondoko 2 adibidean azaltzen da prozedura.

2.2 adibidea

Demagun $h=0,50\cdot\left(\frac{\Delta T}{D}\right)^{0,25}$ ekuazio enpirikoan h (Btu/hft^{2}ºF), ΔT (ºF) eta D (in) unitateekin erabili behar direla. Eralda ezazu adierazpena h (kJ/hm^{2}K), ΔT (K) eta D (m) unitateekin erabiltzeko.

Ebazpena

Aldagai bakoitzaren baliokideak kalkulatuko dira:

$$h\left(\frac{Btu}{h\,ft^2\,ºF}\right)=h^*\left(\frac{\cancel{kJ}}{hm^2\,\cancel{K}}\right)\cdot\left(\frac{1Btu}{1,055\cancel{kJ}}\right)\cdot\left(\frac{1\cancel{m}}{3,281ft}\right)^2\cdot\left(\frac{1\cancel{K}}{1,8ºF}\right)=0,0489\cdot h^*$$

$$\Delta T(ºF)=\Delta T^*(\cancel{K})\cdot\left(\frac{1,8ºF}{1\cancel{K}}\right)=1,8\cdot\Delta T^*$$

$$D(in)=D^*(m)\cdot\left(\frac{39,37in}{1\cancel{m}}\right)=39,37\cdot D^*$$

h eta $0,0489\cdot h^*$ baliokideak dira; modu berean ΔT eta $1,8\cdot\Delta T^*$, eta D eta $39,37\cdot D^*$ ere baliokideak dira.

Jatorrizko ekuazioan baliokideak ordezkatzen badira:

$$0,0489 \cdot h^* = 0,50 \cdot \left(\frac{1,8 \cdot \Delta T^*}{39,37 \cdot D^*} \right)^{0,25}$$

Zenbaki guztiak konstante batean biltzen badira:

$$h^* = 4,728 \cdot \left(\frac{\Delta T^*}{D^*} \right)^{0,25}$$

Ikusten denez, adierazpen berrian aldagaiak unitate berrietan erabili behar dira, eta konstantearen balioa ere aldatu egin da. * duten aldagaiak unitate berriekin erabili behar dira.

Laburtuz, ekuazioak dimentsionalki homogeneoa izan behar duela dioen propietatea erabiliz, (a) ekuazioen unitateak froga daitezke, (b) unitate desberdinen arteko bihurketa egin daiteke, (c) aldagai dimentsiogabeen multzoak defini daitezke.

2.4 DIMENTSIO-ANALISIA

Fenomeno fisiko-kimiko baten gain eragina duten aldagaiak zeintzuk diren jakin arren, kasu askotan, zaila da jakitea haien arteko erlazio zehatza zein den: batzuetan, aldagai kopurua handia izanik, saiakuntza kopuru handia behar delako, eta beste batzuetan, ekuazioen integrazioa zaila delako. Horrelakoetan, aldagaien arteko erlazio enpirikoaren ikerketa errazteko, dimentsio-analisia tresna egokia da. Era berean, dimentsio-analisiak saiakuntzen planifikazioa eta emaitzen interpretazioa egiten laguntzen du.

Adibidez, sistema batek 5 aldagaitan eragiten badu, eta haien arteko erlazio zehatza lortzeko, aldagai bakoitza 3 mailatan aldatu nahi bada (beste aldagaiak konstante izanik), 3^5 = 243 saiakuntza egin beharko lirateke, eta, jakina, lan nekeza eta luzea izan daiteke hori. Dimentsio-analisia erabiltzen bada, eta adibidez, aldagai guztiak aldagai dimentsiogabeen 2 taldera murrizten badira, 3^2 = 9 saiakuntzarekin nahikoa izango litzateke aldagaien arteko erlazio zehatza lortzeko.

Dimentsio-analisiaren bidez, hasierako aldagai asko aldagai dimentsiogabeen talde murriztuago bihurtzen dira. Dimentsio gabeko talde horiei ***dimentsio gabeko modulu*** edo zenbaki deritze. Ingeniaritza kimikoan azaltzen diren zenbaki batzuek esangura fisiko handia dutenez, izen propioa dute. Ingeniaritza kimikoan erabiltzen diren zenbaki dimentsiogabe adierazgarrienak 3.2 Taulan agertzen dira.

Dimentsio-analisia printzipio hauetan oinarritzen da:

(a) Magnitude fisikoak erlazionatzen dituzten ekuazioek dimentsionalki homogeneoak izan behar dute.

(b) Magnitude fisiko guztiak oinarrizko magnitudeen funtzio potentzial gisa adieraz daitezke (dentsitatea, adibidez, $[\rho] = M \cdot L^{-3}$).

(c) Dimentsionalki homogeneoa den ekuazio bat aldagai dimentsiogabeen talde sorta batera murriztu daiteke. Talde horietan, fenomenoan eragina duten aldagai guztiak agertuko dira. Printzipio horri Buckingham-en π teorema deritzo.

Dimentsio-analisia egiteko, bi metodo erabiltzen dira: Buckingham-en metodoa (orokorra) eta Rayleigh-en metodoa (laburtua). Ondoren, bi metodoen aplikazioa azalduko da.

2.4.1 Buckingham-en π metodoa

Urrats hauei jarraitzen zaie:

1. Ikertzen ari den sisteman, eragina izan dezaketen aldagaiak behatzen dira (Q_1, Q_2, …,Q_n). Urrats horretan garrantzitsua da aldagai guztiak kontuan hartzea, haien eragina bazter ez uzteko. Ustez sistemaren gain eragina duen aldagairen bat aukeratu bada, eta benetan ez badu eragiten, metodo honen emaitzan agerian geratzen da.
2. Aurreko urratsean aukeratu diren aldagai guztien dimentsioak aztertzen dira. Horretarako, oinarrizko magnitudeen sistema bat aukeratuko da, eta haren oinarrizko dimentsioak erabiliko dira dimentsio eratorriak adierazteko. Oinarrizko dimentsioak aukeratzeko orduan, ohikoena Unitate Absolutuen Sistema aukeratzea da, masa (M), luzera (L), denbora (t) eta tenperatura (T) hartuta sistema horretako oinarrizko magnitudetzat.
3. Dimentsio bereko aldagai bat baino gehiago badago, bat bakarra hartzen da kontuan; dimentsio bereko beste aldagaiek *forma-faktore* izena hartzen dute. Buckingham-en metodoaren garapenean, baztertu egiten dira, eta prozeduraren bukaeran bakarrik hartuko dira kontuan.
4. Lehen urratsean aukeratutako aldagai bakoitzaren dimentsioa oinarrizko magnitudeen funtzioan adierazitakoan, *berretzaileen matrizea* eraikitzen da. Matrizeak aldagai kopurua bezainbeste zutabe eta oinarrizko dimentsio kopurua bezainbeste lerro dauzka. Gelaxka bakoitzean dagokion berretzailea adierazten da.
5. Eraiki den matrizearen *heina* (j) kalkulatzen da, hau da, lor daitekeen ordena handieneko determinantearen ordena.
6. Independenteak diren i aldagai dimentsiogabeen taldeak osatzen dira:

   i: Eratortzen diren aldagai dimentsiogabeen talde kopurua
   n: Matrizean kontuan hartutako aldagai kopurua
   j: Matrizearen heina

$$i = n - j \tag{2.6}$$

   Aldagai dimentsiogabeen taldeak osatzen dira:

$$\left.\begin{aligned} \pi_1 &= Q_1^{a_1} \cdot Q_2^{b_1} \cdot \cdots \cdot Q_j^{p_1} \cdot Q_{j+1} \\ \pi_2 &= Q_1^{a_2} \cdot Q_2^{b_2} \cdot \cdots \cdot Q_j^{p_2} \cdot Q_{j+2} \\ &\vdots \\ \pi_i &= Q_1^{a_i} \cdot Q_2^{b_i} \cdot \cdots \cdot Q_j^{p_i} \cdot Q_{j+i} \end{aligned}\right\} \tag{2.7}$$

7. Berretzaileen serie bakoitzak [(a_1,b_1,…,p_1); (a_2,b_2,…,p_2); …; (a_i,b_i,…,p_i)] balio egokiak izan behar ditu sortzen diren π_1, π_2, …, π_i aldagai taldeak dimentsiogabeak izateko. Horretarako, aldagai talde bakoitzean dimentsioen homogeneotasun-baldintza betetzeko ekuazioak ezartzen dira, eta sistema ebaztean berretzaile egokiak kalkulatzen dira.
8. Forma-faktoreak kontuan hartzen dira, eta Buckingham-en teorema formulatzen da:

$$f\left(\pi_1, \pi_2, \cdots, \pi_i\right) = 0 \tag{2.8}$$

2.3 adibidea

Ohantze partikulatu bateko partikula solidoen eta ohantzea zeharkatzen duen jariagaiaren arteko masa-transferentzia ikertu behar da, masa-transferentziarako koefizientearen (k_C) eta sistemako beste aldagaien arteko harremana zehazteko.

Masa (M), luzera (L) eta denbora (t) oinarrizko magnitudeak aukeratu dira, sistema honetan, isotermoa izanik, tenperaturaren eragina arbuiagarria baita. Azterketa sakona egin ondoren, sistema honetan zerikusia izan dezaketen aldagaien zerrenda osatu da; bakoitzaren dimentsioa ondoren adierazten da.

Ebazpena

Berretzaileen matrizea eraikitzen da:

Aldagaia	L	M	t
Koefizientea, k_C	1	0	-1
Ohantzeko partikulen diametroa, D_p	1	0	0
Jariagaiaren dentsitatea, ρ	-3	1	0
Jariagaiaren likatasuna, μ	-1	1	-1
Solutuaren barreiatze-koefizientea, D_{AB}	2	0	-1
Jariagaiaren emari masikoa azalera unitateko, G	-2	1	-1

Kasu honetan dimentsio bereko aldagairik ez dagoenez, ez dago forma-faktorerik. Matrizearen heina j = 3 izanik eta aldagai kopurua n = 6 izanik, lor daitezkeen dimentsio gabeko zenbaki kopurua i = 3 da. k_C, G eta μ aldagaiak aukeratzen badira, aldagai dimentsiogabeen hiru talde hauek lortuko dira:

$$\pi_1 = D_P^{a_1} \cdot \rho^{b_1} \cdot D_{AB}^{c_1} \cdot k_c$$
$$\pi_2 = D_P^{a_2} \cdot \rho^{b_2} \cdot D_{AB}^{c_2} \cdot G$$
$$\pi_3 = D_P^{a_3} \cdot \rho^{b_3} \cdot D_{AB}^{c_3} \cdot \mu$$

Bakoitzari homogeneotasun-baldintza ezartzen bazaio:

π_1: L: $0 = a_1 - 3b_1 + 2c_1 + 1$; M: $0 = b_1$; t: $0 = -c_1 - 1$ | Ebatziz: $\pi_1 = \dfrac{D_P \cdot k_C}{D_{AB}}$ (Sherwood-en zenbakia)

π_2: L: $0 = a_2 - 3b_2 + 2c_2 - 2$; M: $0 = b_2 + 1$; t: $0 = -c_2 - 1$ | Ebatziz: $\pi_2 = \dfrac{D_P \cdot G}{\rho \cdot D_{AB}}$

π_3: L: $0 = a_3 - 3b_3 + 2c_3 - 1$; M: $0 = b_3 + 1$; t: $0 = -c_3 - 1$ | Ebatziz: $\pi_3 = \dfrac{\mu}{\rho \cdot D_{AB}}$ (Schmidt-en zenbakia)

π_2/π_3 egitean, $\dfrac{G \cdot D_P}{\mu}$ lortzen da, Reynolds[1]-en zenbakia izenarekin ezagutzen dena. Beraz, sistema era honetako adierazpen batek azaltzen du: $f(Sc, \mathrm{Re}, Sh) = 0$. Hasieran sei aldagaiz osatutako sistema hiru aldagaiko sistema batera murriztu da. Laborategian egin beharko

[1] Reynolds zenbakiaren adierazpen ezagunagoa da $\dfrac{D \cdot v \cdot \rho}{\mu}$ formakoa (ikusi 2.2 taula eta 6. gaia), hodi hutseko jarioan. Ohantze partikulatuetan partikulen diametroa (D_P) erabiltzen da hodiaren diametroaren (D) ordez. G, azalera unitateko emari masikoa da ($G = v \cdot \rho$) (7.1 atala).

diren saiakuntzetan, hiru aldagai horien arteko erlazio zehatza nolakoa den ikusiko da. Adibidez, ikerlari batzuek adierazpen hau proposatu dute geometria eta baldintza zehatz batzuetarako:

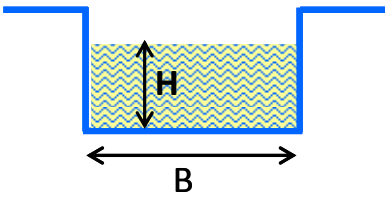
$$Sh = 1{,}17 \cdot Re^{0{,}585} \cdot Sc^{1/3}$$

2.4.2 Rayleigh-en metodoa

Urrats hauei jarraitzen zaie:

1. Aztertzen ari den fenomenoan, eragina izan dezaketen aldagaiak identifikatu eta zerrenda batean ezartzen dira.
2. Garrantzi handieneko aldagaia (edo ikertzen ari den aldagaia) beste aldagaien funtzio potentzial gisa adierazten da.
3. Aukeratu den magnitudeen sistemako oinarrizko magnitudeez ordezkatzen dira aldagaiak, eta oinarrizko magnitude bakoitzari homogeneotasun-baldintza ezartzen zaio.
4. Kalkulatutako berretzaileen balioak funtzio potentzialean (bigarren urratsean proposatutako ekuazioan) ordezkatzen dira, eta berretzaile bereko terminoak taldekatzen dira.

2.4 adibidea



Irudian, kanal baten sekzioa agertzen da. Bertatik ρ dentsitatedun jariagai bat igarotzean, emari bolumetrikoa (Q) aldagai hauen funtzioa izango dela uste da: (H) kanalean jariagaiak hartzen duen altuera, (B) kanalaren zabalera, (ρ) jariagaiaren dentsitatea, (g) grabitazioaren azelerazioa. Lor dezagun emaria beste aldagaiekin erlazionatzen dituen adierazpena dimentsio-analisiaren bidez.

$Q = \rho^a \cdot H^b \cdot B^c \cdot g^d$ erako funtzio potentziala definituko da.

$[Q] = L^3 \cdot t^{-1}$ $\quad$ $[L] = L$

$[\rho] = M \cdot L^{-3}$ $\quad$ $[g] = L \cdot t^{-2}$

$[H] = L$

Oinarrizko magnitude bakoitzari homogeneotasun-baldintza ezartzen bazaio:

L: 3 = -3a + b + c + d

M: 0 = a

t: -1 = -2d

Sistema ebazteko, aldagai bat aukeratu behar da parametro gisa. c aukeratzen bada:

a = 0 ; b = 5/2 – c ; c = c ; d = ½

Ekuazio potentzialean berretzaileen balioa ordezkatu eta dimentsio gabeko taldeetan batu ondoren:

$$Q\sqrt{\frac{g}{H^5}} = \left(\frac{L}{H}\right)^c$$

Lortutako adierazpenean, dentsitaterik ez da agertzen. Horren arabera, hasierako aldagaien artean dentsitatea kontuan hartu badugu ere, bukaerako adierazpenean ez da agertzen, hau

da, ustez eragina duen aldagaitzat hartu bada ere, dimentsio-analisia egin ondoren ikusi da aldagaiak ez duela inolako eraginik.

2.2 Taula. Ingeniaritza kimikoan ohikoak diren dimentsio gabeko zenbakiak.

Zenbakia	*Izena*	*Esangura*
$\mathrm{Re} = \frac{DV\rho}{\mu} = \frac{DG}{\mu}$	Reynolds	Inertzia-indarra/Marruskadura-indarra
$Eu = \frac{\Delta P}{\rho V^2}$	Euler	Presio-indarra/Inertzia-indarra
$Fr = \frac{V^2}{Dg}$	Froude	Inertzia-indarra/Grabitate-indarra
$Gr = \frac{L^3 g \beta \Delta T \rho^2}{\mu^2}$	Grashof	Konbekzio termikoaren indarra
$Gr_{AB} = \frac{L^3 g \zeta \Delta\rho_A \rho^2}{\mu^2}$	Grashof masikoa	Konbekzio masikoaren indarra
$Nu = \frac{hD}{k}$	Nusselt	Konbekziozko bero-transmisioa/Eroapenezko bero-transmisioa
$\mathrm{Pr} = \frac{C_P \mu}{k}$	Prandtl	Beroaren metaketa/Eroapena
$Sc = \frac{\mu}{\rho D_{AB}}$	Schmidt	Mugimendu kantitatearen barreiatzea/Masaren barreiatzea
$Sh = \frac{k}{V}$	Sherwood	Konbekziozko masa-transferentzia/Barreiadurazko masa-transferentzia

2.5 ANTZEKOTASUNA

Erreaktore katalitikoak diseinatzeko orduan, laborategi-eskalako ekipoak erabiltzen dira ikerketak egiteko. Modu berean, prozesu kimiko osoa diseinatzeko orduan, benetako instalazioa eraiki aurretik, eskala txikiagoko instalazio pilotuan frogatzen da eraginkortasuna. Tamaina txikiagoko ekipoetan lortzen diren ondorioak eskala handiagoko ekipora estrapolatu ahal izateko, antzekotasunaren teoria erabiltzen da. Tamaina txikiko ekipoari ***eredu*** deritzo, eta benetako eskalako ekipoari ***prototipo***.

Zenbait antzekotasun-maila daude, eta maila txikienetik handienera, hauek dira:

(1) Antzekotasun geometrikoa: ereduaren eta prototipoaren magnitude geometrikoek erlazio berdinak badauzkate.

(2) Antzekotasun dinamikoa: geometrikoki antzekoak izateaz gain, bi sistemetan dauden indar-profilak berdinak badira.

(3) Antzekotasun termikoa: aurreko bi baldintzak betetzeaz gain, bi sistemetan tenperatura-profilak berdinak badira.

(4) Kontzentrazioen antzekotasuna: aurreko hirurak betetzeaz gain, bi sistemetan kontzentrazio-profilak berdinak badira.

(5) Antzekotasun kimikoa: aurreko lauak betetzeaz gain, erreakzio kimikoen fenomenoa berdina bada, hau da, bi erlazio hauek berdinak badira:

$$\frac{\text{Erreakzio-abiadura}}{\text{Muinaren jario-abiadura}}$$

$$\frac{\text{Erreakzio-abiadura}}{\text{Barreiadura-abiadura}}$$

2.5.1 Etapa mugatzailearen kontzeptua

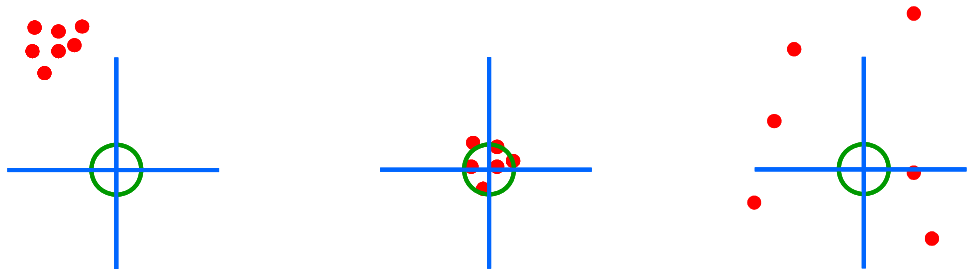
Sisteman gertatzen ari den prozesu osoaren abiadura paraleloan eta seriean gertatzen diren etapen edo urratsen abiaduraren araberakoa da. Gehienetan, etapa edo urrats horietako guztiak, bat izan ezik, azkar gertatzen dira. Horrelakoetan, prozesu osoaren abiadura motelen gertatzen den urratsaren abiaduraren berdina dela har daiteke. Urrats motelenari ***etapa mugatzailea*** deritzo.

Adibidez, gas egoeran dagoen uraren eta CO-aren arteko erreakzio katalizatuan, prozesua bi urratsetan gertatzen da: lehenik eta behin, erreaktiboak katalizatzaile solidoaren poroetara barreiatu behar dira, eta katalizatzailearen gainazalean daudenean, erreakzio kimikoa gertatzen da. Lehen urratsa azkarra den heinean, erreakzio kimikoa motela da, eta, horregatik, prozesu osoaren abiadura erreakzio kimikoaren abiadura da. Adibide honetan bi urratsen abiaduren arteko aldea nabarmena denez, bereiztea erraza da, baina beste zenbait prozesutan urrats guztien abiadurak hartu behar dira kontuan.

Eskala txikiko ekipoan egiten den prozesua eskala handiagoko ekipoan egin nahi bada, bietan etapa mugatzaileak bera izan behar du, ondorioak desberdinak izan ez daitezen.

2.6 ZIFRA ESANGURATSUAK

Praktikan, balio esperimental baten balio zehatza jakitea ezinezkoa izaten da, erabilitako metodoak eta tresnak mugatu egiten baitute zehaztasuna. Neurketa baten zehaztasunik eza adierazteko, zifra esanguratsuak erabiltzen dira. Zifra esanguratsua fidagarritasun osoz ezagutzen den zifra kopurua da, hau da, zenbaki zuzenak.



DOITASUN HANDIA ZEHAZTASUN TXIKIA	DOITASUN HANDIA ZEHAZTASUN HANDIA	DOITASUN TXIKIA ZEHAZTASUN TXIKIA

2.2 Irudia: Zehaztasunaren eta doitasunaren arteko aldea.

Askotan nahasten diren bi kontzeptu desberdindu behar dira: ***zehaztasuna*** (alborapenaren berri ematen du) eta ***doitasuna*** (ziurgabetasunaren berri ematen du). Kalkulatu edo neurtutako balio batek benetako balioarekin duen hurbiltasuna adierazten du zehaztasunak; doitasunak, berriz, kalkulatu edo neurtutako balio batek era berean kalkulatu edo neurtutako balioarekin duen hurbiltasuna adierazten du. 2.2 Irudian azaltzen da grafikoki bi kontzeptuen azalpena.

Zenbakiekin eragiketa matematikoak egitean, zifra esanguratsu desberdineko zenbakiak erabiltzen dira. Emaitzaren zifra esanguratsua erabilitako zenbakien artean zifra esanguratsu baxuenaren berdina izango da. Zenbaki ez-zehatzak (esperimentalak) erabiltzean, kontuan izan behar da arau hau:

- ezkerrean dauden zeroak ez dira zifra esanguratsuak
- eskuinean dauden zeroak zifra esanguratsuak dira

2.5 adibidea

Kalkula dezagun, 1 atm-ko presioan eta 100 ºC-an, 1 ml uretan dagoen molekula kantitatea.
Datuak: Dentsitatea: 0,958 kg/l (balio esperimentala, ez-zehatza)
Pisu atomikoak; (O): 16,00 g/mol ; (H): 1,007 g/mol (ez-zehatzak)
Avogadroren zenbakia, $N_A = 6{,}0221367 \cdot 10^{23}$ mol^{-1} (ez-zehatza)

$0{,}958 = 9{,}58 \cdot 10^{-1}$ kg/l $\rightarrow$ 3 zifra esanguratsu
16,00 g/mol $\rightarrow$ 4 zifra esanguratsu
1,007 g/mol $\rightarrow$ 4 zifra esanguratsu
$6{,}0221367 \cdot 10^{23}$ mol^{-1} $\rightarrow$ 8 zifra esanguratsu

Nola egiten dira eragiketak zifra esanguratsuekin?

- Batuketa/kenketa baten zifra esanguratsuak zifra esanguratsu gutxien dituen batugaiarenak dira.

  Pisu molekularra = 16,00 (4 ze) + 1,007 (4 ze) + 1,007 (4 ze) = 18,01 (4 ze)

- Biderketa/zatiketa baten zifra esanguratsuak zifra esanguratsu gutxien dituen biderkagaiarenak dira.

$$\left(\underbrace{0{,}958\ \cancel{g}}_{3\,ZE}\right)\cdot\left(\underbrace{\frac{1\ \cancel{mol}}{16{,}00+2\cdot 1{,}007\ \cancel{g}}}_{4\,ZE}\right)\cdot\left(\underbrace{\frac{6{,}0221367\cdot 10^{23}}{1\ \cancel{mol}}}_{8\,ZE}\right) = 3{,}20333534\cdot 10^{22} \rightarrow 3{,}20\cdot 10^{22}\ \text{molekula}$$

(3 ze)

Biribilketak: emaitzaren zenbaki bat edo gehiago baztertu egiten dira, zehaztasunik ezaren maila bermatzeko.

- Azken zifra esanguratsuaren ondorengo zifra ez-esanguratsua 5 baino handiagoa (txikiagoa) bada, azken zifra esanguratsua gora (behera) biribiltzen da.
- Adibidez: 3 zifra esanguratsu baditu eta emaitza 2,571 bada, 2,57ra biribiltzen da. Era berean, emaitza 2,577 bada, 2,58ra biribiltzen da.
- Azken zifra esanguratsuaren ondorengo zifra ez-esanguratsua 5 bada, azken zifra esanguratsua zenbaki bikoitira biribiltzen da.

  Adibidez: 3 zifra esanguratsu baditu eta emaitza 2,575 bada, 2,58ra biribiltzen da. Era berean, emaitza 2,565 bada, 2,56ra biribiltzen da.

3. GAIA

KALKULU-TEKNIKAK

Ingeniaritza kimikoan, hainbat kasutan ebazpen zaileko ekuazio-sistemak eta integralak agertzen dira. Era berean, hainbat grafiko berezi erabiltzen dira ekuazioen erabilera nekeza saihesteko.

3.1 ADIERAZPEN GRAFIKOAK

Ingeniaritza kimikoan sarri erabiltzen dira adierazpen grafikoak, eta haietako batzuk ez dira ohiko koordenatu cartesiar linealean emanak. Besteak beste, koordenatu logaritmikoak, erdilogaritmikoak eta diagrama triangeluarrak erabiltzen dira. Azken horiek 14. gaian azalduko dira.

3.1.1 Koordenatu logaritmikoak

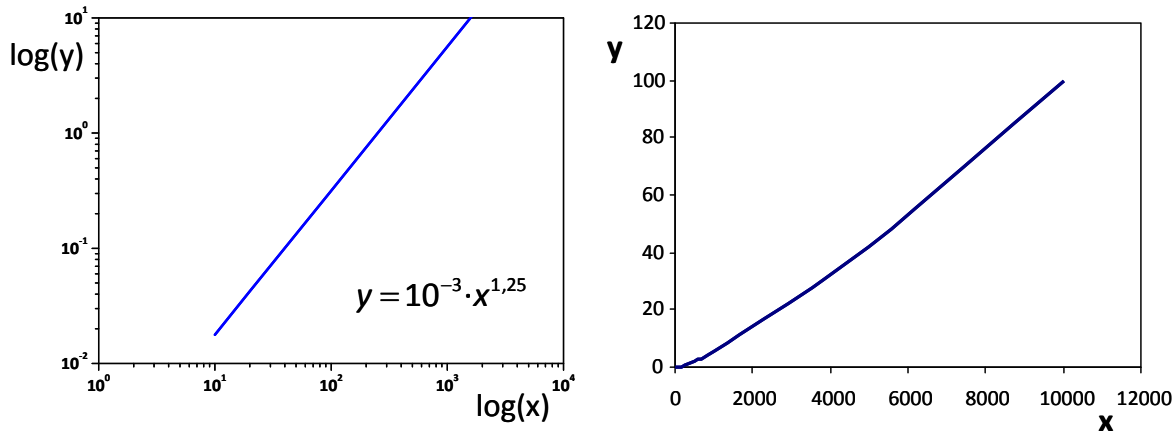
Irudikatu beharreko ekuazioak itxura hau badu:

$$y = a \cdot x^b \tag{3.1}$$

koordenatu cartesiar linealetan adierazten bada, $b \neq 0$ edo $b \neq 1$ bada, lerro ez-zuzena da. Lerro zuzenekin jardutea ez-zuzenekin lan egitea baino erosoagoa denez, ekuazioaren logaritmo hamartarrak hartzen badira,

$$\log(y) = \log(a) + b \cdot \log(x) \tag{3.2}$$

funtzioa, koordenatu logaritmikotan, *b* maldako lerro zuzen bihurtzen da. Abzisen ardatzean, log(x) irudikatzen da, eta, ordenatuen ardatzean, log(y) irudikatzen da. 3.1 Irudian, $y = 10^{-3} \cdot x^{1,25}$ ekuazioa adierazi da koordenatu logaritmikotan. Ohartzen bagara, ordenatu zein abzisen zatiketan, 10^0 eta 10^1 arteko distantzia, 10^3 eta 10^4 artekoa edo 10^{-2} eta 10^{-1} artekoa berdinak dira. Gainera, $1 \cdot 10^0$ eta $2 \cdot 10^0$ arteko luzera $4 \cdot 10^0$ eta $5 \cdot 10^0$ artekoa baino handiagoa da; proportzioa zenbakiaren logaritmo hamartarrak ematen du.



3.1 Irudia. $y = 10^{-3} \cdot x^{1,25}$ ekuazio potentzialaren adierazpen grafikoa, koordenatu logaritmikotan (ezkerrean) eta koordenatu cartesiarrean (eskuinean) adierazia.

3.2 EKUAZIOAK EBAZTEKO TEKNIKAK

Hainbat kasutan, ebazpen zaileko ekuazioak agertzen dira; beste batzuetan aldagai ezezaguna askatzea ezinezkoa da. Horrelako kasuak ebazteko, bi metodo azalduko dira, adibide baten bitartez.

Demagun $y = f(x) = e^{(0,2\cdot x)} - \left(\frac{12}{x}\right) + 2\cdot x^2 = 0$ ekuazioaren erroa (x_{erroa}) aurkitu nahi dela [0,5, 5] tartean.

3.2.1 Regula-Falsi metodoa

$x = x_{erroa}$ denean funtzioak zero balio badu, erroa baino balio txikiago eta handiagoarentzat kalkulatzean, funtzioa zeinuz aldatuko da. Funtzioa zeinuz aldatuko den muturreko bi balio hartuko dira, $x_{ezker\text{-}m}$ eta $x_{eskuin\text{-}m}$. Hala, x_{erroa} [$x_{ezker\text{-}m}$, $x_{eskuin\text{-}m}$] tartean dago.
Tarte horren barruan dagoen tarteko balio berria kalkulatuko da:

$$x_{tartea} = x_{ezker-m} - \frac{x_{eskuin-m} - x_{ezker-m}}{f\left(x_{eskuin-m}\right) - f\left(x_{ezker-m}\right)} \cdot f\left(x_{ezker-m}\right) \tag{3.3}$$

Puntu horretan, $f(x_{tartea})$ funtzioaren balio berria kalkulatzen da, eta zeinuaren arabera, tartea aldatu egingo da:

[$x_{ezker\text{-}m}$, x_{tartea}], baldin eta $f(x_{tartea}) > 0$ bada

[x_{tartea}, $x_{eskuin\text{-}m}$], baldin eta $f(x_{tartea}) < 0$ bada.

Hala, tartea estutu egin da x_{erroa}-ren inguruan. Urrats horiek behin eta berriz errepikatzen dira nahi den zehaztasuna lortu arte. Ondoren azaltzen da adibidearen erroa aurkitzeko egin diren urratsen eboluzioa.

urratsa	$x_{tartekoak}$	$f(x_{tartea})$	iruzkinak
1	0,5	-22,395	Hasierako $x_{ezker\text{-}m}$
2	5	50,318	Hasierako $x_{eskuin\text{-}m}$
3	1,886	2,209	Tarte berria [0,5, 1,886]
4	1,762	0,816	Tarte berria [0,5, 1,762]
5	1,717	0,319	Tarte berria [0,5, 1,717]
6	1,700	0,127	Tarte berria [0,5, 1,700]
7	1,693	0,051	Tarte berria [0,5, 1,693]
8	1,691	0,021	Tarte berria [0,5, 1,691]
9	1,690	0,008	Tarte berria [0,5, 1,690]

Beraz, zehaztasun-maila onargarriarekin, ekuazioaren erroa 1,690 da.

3.2.2 Newton-Raphson-en metodoa

Metodo hau deribagarriak diren funtzioekin erabil daiteke soilik. Kalkulua hasteko, lehen balio bat hartu behar da ($x_{hasiera}$; adibidean, 0,5), eta funtzioak eta funtzioaren deribatuak puntu horretan hartzen dituzten balioekin, x_{erroa}-tik hurbilago dagoen $x_{bukaera}$ kalkulatzen da; $x_{bukaera}$ hurrengo urratseko $x_{hasiera}$ gisa erabiliko da. Prozedurari jarraitzen zaio $x_{hasiera} = x_{bukaera}$ izan arte.
Metodo hau deribagarriak diren funtzioekin erabil daiteke soilik. Kalkulua hasteko, lehen balio bat hartu behar da ($x_{hasiera}$; adibidean, 0,5), eta funtzioak eta funtzioaren deribatuak puntu horretan hartzen dituzten balioekin, x_{erroa}-tik hurbilago dagoen $x_{bukaera}$ kalkulatzen da; $x_{bukaera}$ hurrengo urratseko $x_{hasiera}$ gisa erabiliko da. Prozedurari jarraitzen zaio $x_{hasiera} = x_{bukaera}$ izan arte.

$$\left(x_{k+1_urratsa}\right) = \left(x_{k_urratsa}\right) - \frac{f(x_{k_urratsa})}{\left[\frac{df\left(x_{k_urratsa}\right)}{dx}\right]} \tag{3.4}$$

Taulan agertzen da prozesuaren eboluzioa.

urratsa	$x_{hasiera}$	$f(x_{hasiera})$	$f'(x_{hasiera})$	$x_{bukaera}$
1	0,5	-22,395	50,221	0,946
2	0,946	-9,688	17,437	1,502
3	1,502	-2,132	11,599	1,685
4	1,685	-0,038	11,246	1,689
5	1,689	0,000	11,243	1,689

Zehaztasun-maila onargarriarekin, ekuazioaren erroa 1,689 da.

3.2.3 Saiakuntza- eta errore-metodoa

Metodo honetan, balio bat hartzen da, funtzioak puntu horretan duen balioa kalkulatzen da eta zero (0) den frogatzen da; hala bada, emaitza zuzena da, eta ez bada, beste balio bat hartu behar da, *f(x)* = 0 izan arte. Metodo honen desabantaila nagusia hurrengo urratserako hasierako baliorik ez ematea da. Taula honetan agertzen da adibidearen ebazpenaren eboluzioa.

urratsa	x	f(x)	iruzkinak
1	0,5	-22,395	Hasierako balioa
2	1	-8,779	Norabide egokia, errorea txikituaz doalako.
3	2,0	3,492	$x_{erroa} \in [1, 2]$
4	1,5	-2,150	$x_{erroa} \in [1,5, 2]$
5	1,75	0,687	$x_{erroa} \in [1,5, 1,75]$
6	1,80	1,247	Norabide okerra
7	1,60	-1,003	$x_{erroa} \in [1,6, 1,75]$
8	1,70	0,126	$x_{erroa} \in [1,6, 1,7]$
9	1,65	-0,437	$x_{erroa} \in [1,65\ 1,7]$
10	1,675	-0,155	$x_{erroa} \in [1,675\ 1,7]$
11	1,690	0,014	Emaitza onargarria

Zehaztasun-maila onargarriarekin, ekuazioaren erroa 1,690 da.

3.2.4 Saiakuntza- eta errore-metodoa Excel programaz baliatuz[1]

Office software-paketeko Excel kalkulu-orria erabil daiteke horrelako ekuazioak ebazteko. $y = f(x) = e^{(0,2\cdot x)} - \left(\frac{12}{x}\right) + 2\cdot x^2 = 0$ adibidearekin jarraituz, $f(x_{erroa})$ = 0 egiten duen x_{erroa} lortu behar da.

Demagun A zutabeko bigarren lerroan erroaren inguruko x-en balio bat idazten dela (A2). Horren aldameneko B zutabearen bigarren lerroan (B2), funtzioak A2 puntuan duen balioa idatziko da:

exp(0,2*A2)-(12/A2)+2*potencia(A2;2).

Orain, B2 = 0 baldintza betetzeko, A2 gelaxkan hasierako balio bat esleituko da. Adibidez, A2 = 2 hartuko da.

Une honetan, B2 gelaxkaren balioa azaltzen da pantailan (9,389).

TRESNAK > Xede-bilaketa sakatu ondoren, elkarrizketa-koadroa zabalduko da, eta hemen azaldutako balioez bete behar da:

[1] Gaztelaniazko softwarea erabili da adibide honetan.

Galdera	Bete beharrekoa
Gelaxka honetan:	B2
Lortu beharreko balioa:	0
Gelaxka hau aldatu:	A2

Sakatu ***Ados***, eta programak A2-ko balioak probatzen ditu B2 zero egin arte. Bukatzean, sakatu ***Ados***, eta A2 eta B2 gelaxketan funtzioaren erroa eta *f(x)* balioa agertzen dira, hurrenez hurren (adibide honetan 1,6888 eta 0,00033). Beraz, ekuazioaren erroa 1,689 dela har daiteke.

Programa hau erabili ahal izateko, errotik hurbil dagoen baliotik hasi behar da.

3.2.5 Ekuazio-sistemen ebazpena

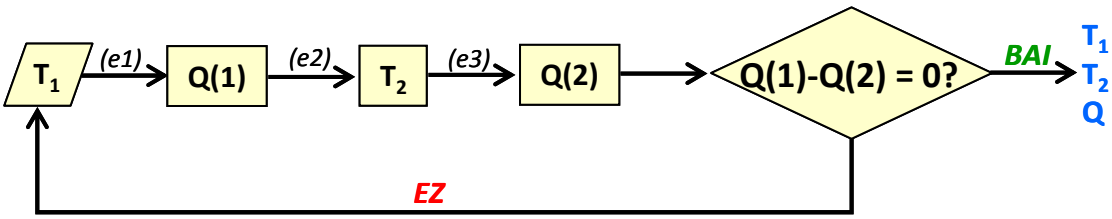
Sarri, zuzeneko ordezkapena ezinezkoa edo oso zaila duten ekuazio-sistemak ebatzi behar dira. Horrelako sistemak ebazteko, Saiakuntza-froga iterazio-metodoa erabiltzen da. Metodo honek ez du ematen hurrengo urratserako erabiliko den balioaren berri. Har dezagun, adibidez, bero-trukagailuen diseinua egitean agertzen den egoera:

$$Q = 10\cdot(90 - T_1) \qquad \text{(e1)}$$

$$Q = 12\cdot(T_2 - 20) \qquad \text{(e2)}$$

$$Q = 8{,}8\cdot\frac{(T_1 - T_2)}{\ln\left(\frac{T_1}{T_2}\right)} \qquad \text{(e3)}$$

Iterazio-kalkulua egiteko prozeduraren fluxu-diagrama beheko irudian agertzen da. T_1 esleitzen da, eta (e1) ekuazioan ordezkatzean Q(1) lortzen da. Hori (e2) ekuazioan ordezkatuz, T_2 kalkulatuko litzateke. T_1 eta T_2 balioekin Q(2) kalkulatzen da, eta ezinbesteko baldintza betetzen duen frogatzen da, hau da, bi bideetatik kalkulatutako Q (Q1 eta Q2) berdinak diren arakatzen da. Hala bada, kalkulatutako balioak egokiak dira; hala ez bada, beste T_1 esleitu, eta prozedura berriro egin behar litzateke.



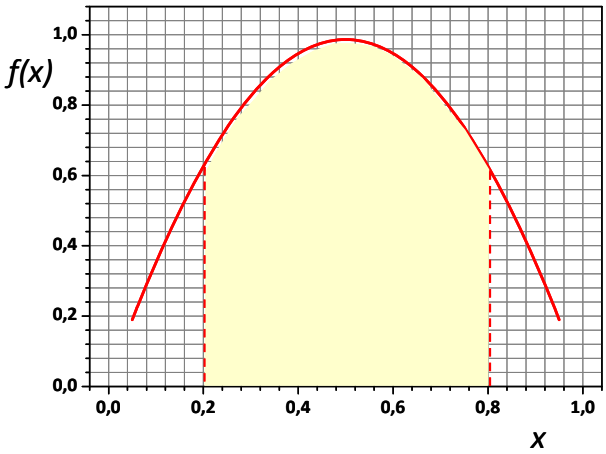
Adibidea ebazteko prozeduraren eboluzioa taula honetan agertzen da.

T_1	Q*(1)*	T_2	Q*(2)*	Q*(1)* – Q*(2)*	iruzkinak
60	300	45	458,8	-158,84	Abiapuntua
50	400	53,3	454,5	-54,51	Errotik hurbilago
45	450	57,5	448,8	1,24	Errotik hurbilago; zeinuz aldatu duelako hurrengo urratsean $T_1 > 45$ hartuko da
45,2	448	57,3	449,0	-1,03	hurrengo urratsean $45 < T_1 < 45{,}2$ hartuko da
45,1	449	57,4	448,9	0,11	hurrengo urratsean $45{,}1 < T_1 < 45{,}2$ hartuko da
45,11	448,9	57,4	448,9	-0,01	Emaitza onargarria

Ondorioz, sistema honen emaitza (T_1,T_2,Q) = (45,11, 57,4, 448,9) da.

3.3 INTEGRALAK EBAZTEKO TEKNIKAK

Integralen ebazpen analitikoa astuna denean, numerikoki zein grafikoki ebatz daitezke. Integral definituen definizioaren arabera, $I = \int_{x_1}^{x_n} f(x) \cdot dx$ integralaren balioa x_1 eta x_n tarteko *f(x)* vs. *x* kurbaren azpiko azalera da. 3.2 irudian $f(x) = 4 \cdot x \cdot (1 - x)$ funtzioa integratzen da, x_1 = 0,2 eta x_n = 0,8 muturren artean; horren emaitza ilundutako azalera da. Ondoren, integralaren hurbilketazko ebazpenerako teknikak azalduko dira.



3.2 irudia. Integralaren esangura.

3.3.1 Laukizuzenen metodoa

Kurbaren azpialdea laukizuzenen batuketaz ordezkatzen da; hala, integralaren balioa laukizuzenen azaleren batuketaz lortzen da. x_1-x_n integrazio-tartea (n-1) azpitartetan banatzen da; guztiek (x_1-x_n)/(n-1) neurtzen dute (laukizuzen bakoitzaren oinarria, alegia). Laukizuzen bakoitzaren altuera $\left(\frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2}\right)$ izango da. Zenbat eta txikiagoa izan laukizuzenaren oinarria, orduan eta zehatzagoa da integralaren kalkulua.

Integrala, beraz, ondoko adierazpena bihurtzen da:

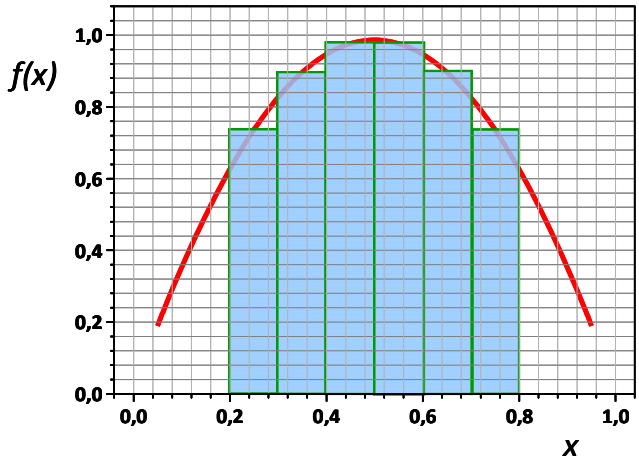
$$I = \int_{x_1}^{x_n} f(x) \cdot dx \approx \sum_{i=1}^{n-1} \left(\frac{x_1 - x_n}{n-1}\right) \cdot \left(\frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2}\right) \qquad (3.5)$$

Adibidez, 3.3 irudian agertzen da integrazio-metodo honen azalpen grafikoa. Ondoren, adibideko integrala ebazteko egin den prozedura azaltzen da.

x	*f(x)*	Δx = oinarria	$\left(\frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2}\right)$ = altuera	azalera
0,2	0,64	-	-	-
0,3	0,84	0,1	0,74	0,074
0,4	0,96	0,1	0,9	0,09
0,5	1	0,1	0,98	0,098
0,6	0,96	0,1	0,98	0,098
0,7	0,84	0,1	0,9	0,09
0,8	0,64	0,1	0,74	0,074

Ebazteko, laukizuzenen oinarria 0,1ekoa hartu da.

Laukizuzen guztien azalerak baturik, I ≈ 0,524 lortzen da (ebazpen analitikoarekin 0,527 lortzen da).

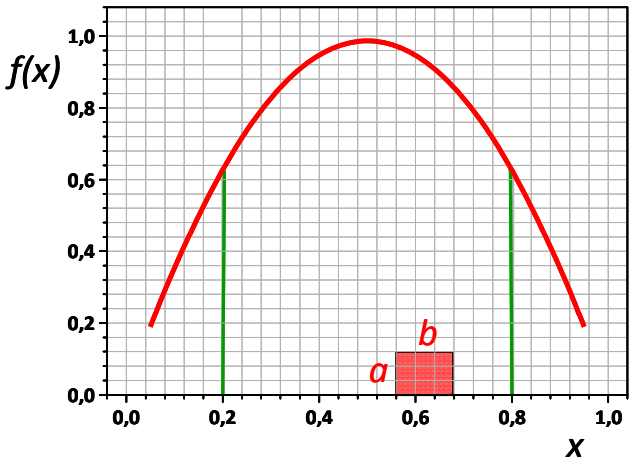


3.3 irudia. $I = \int_{0,2}^{0,8} 4 \cdot x \cdot (1-x) \cdot dx$ integralaren ebazpena laukizuzenen metodoaz, hauen oinarria 0,1 hartuta.

3.3.2 Metodo grafikoa

Behin *f(x)* vs. *x* funtzioa, x_1 eta x_n tartean, orri laukidunean irudikatuta, *oinarri-azalera* aukeratzen da (*a·b*); hala, kurbaren azpialdean zenbat oinarri-azalera dauden (*N*) zenbatzen da. Integrala, beraz, adierazpen hau bihurtzen da:

$$I = \int_{x_1}^{x_n} f(x) \cdot dx \approx (a \cdot b) \cdot N \qquad (3.6)$$



3.4 irudia. $I = \int_{0,2}^{0,8} 4 \cdot x \cdot (1-x) \cdot dx$ integralaren ebazpen grafikoa egiteko oinarri-azalera.

Prozedura honetan, zenbat eta oinarri-azalera txikiagoa aukeratu, orduan eta zehatzagoa da kalkulua, baina prozedura astuna bihurtzen da. 3.4 irudian agertzen da adibidearen ebazpena, oinarri-azalera = $a \cdot b$ = 0,12·0,12 = 0,0144 unitate izanik. $N \approx 36{,}5$ unitate zenbatzen badira, integralaren balio hurbildua $I \approx 0{,}0144 \cdot 36{,}5 = 0{,}5256$ lortzen da.

3.4 BATEZ BESTEKO BALIOAK

Ingeniaritza kimikoan egiten diren kalkulu askotan, aldagaien batez besteko balioak erabiltzen dira. Adibidez, φ propietate fisiko baten zenbait balio neurtu badira T_1 eta T_2 tenperatura-tartean, aldagai horren batez besteko balioa hau da:

$$\phi_{batezb} = \frac{\int_{T_1}^{T_2} \phi \cdot dT}{T_2 - T_1} \tag{3.7}$$

$\varphi = f(T)$ funtzioaren adierazpen analitikoa ezagutzen ez denean, eta datuak taulatan jasota daudenean, integrazioa arestian aipatutako metodoren batekin ebazten da.

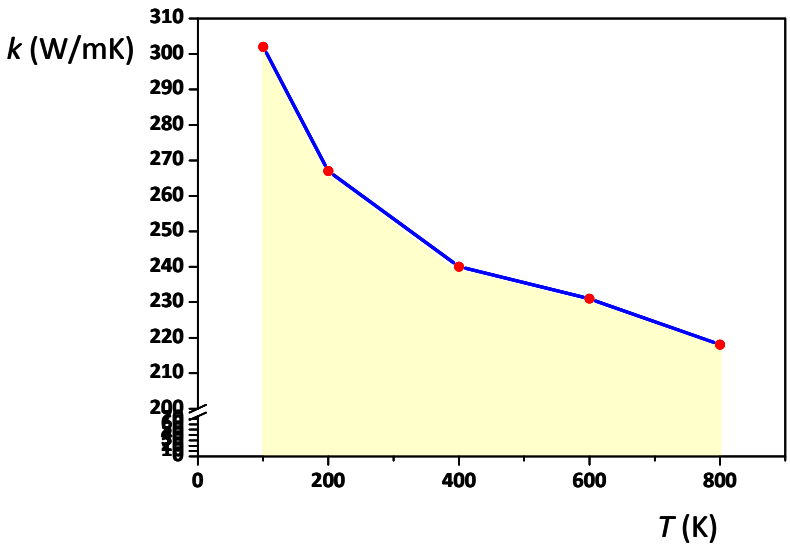
3.1 adibidea

Aluminio metalaren eroankortasun termikoa (k) neurtu da 100-800 K tartean. Kalkula dezagun eroankortasunaren batez besteko balioa, tenperatura-tarte horretan.
Datuak:

k (W/mK)	302	267	240	231	218
T (K)	100	200	400	600	800

Ebazpena

Lehenik eta behin, k vs. T irudikatuko da, ondoren ebazpen grafikoa egiteko.



Kurbaren azpiko azalera = $\int_{100}^{800} k \cdot dT \approx 171.150$ W/m

Beraz, 100-800 K tarterako k_{batezb} = 171.150 W/m/(700 K) = 244,5 W/mK.

3.4.1 Batezbesteko logaritmikoa

Zenbait kasutan, bi balioren batezbesteko logaritmikoa erabiltzen da (bero-transmisioan eta masa-transferentzian, adibidez). x_1 eta x_2 balioen batezbesteko logaritmikoa honela definitzen da:

$$x_{BL} = \frac{x_1 - x_2}{\ln\left(\frac{x_1}{x_2}\right)} \tag{3.8}$$

3.4.2 Batezbesteko geometrikoa

Beste hainbat kasutan, bi balioren edo gehiagoren batezbesteko geometrikoa erabiltzen da (bero-transmisioan, esfera hutsen kasua, adibidez). x_1, x_2, $\cdots$, x_N balioen batezbesteko geometrikoa honela definitzen da:

$$x_{BG} = \left(\prod_{i=1}^{N} x_i\right)^{1/N} \tag{3.9}$$

Ohar gaitezen berdinak diren bi zenbakiren edozein batezbestekoa (aritmetikoa, logaritikoa zein geometrikoa) zenbaki bera dela, nahiz eta 3.8 ekuazioaren arabera indeterminazioa lortu.

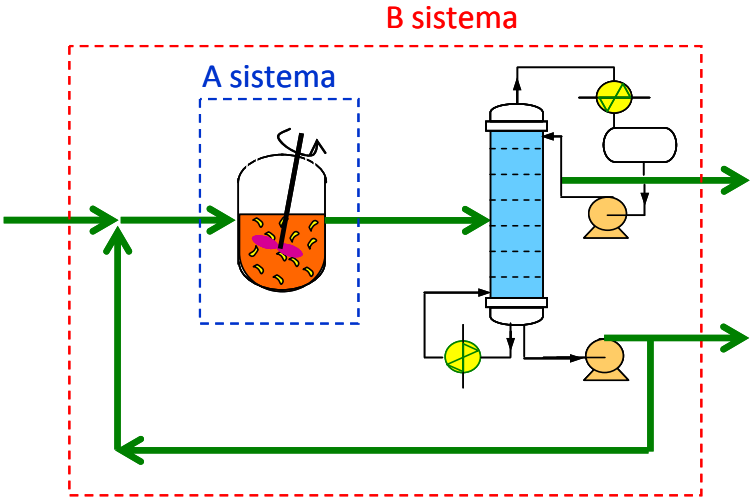
4. GAIA

MASAREN IRAUPENAREN LEGEA: MASA-BALANTZEAK

4.1 MASAREN IRAUPENAREN LEGEA

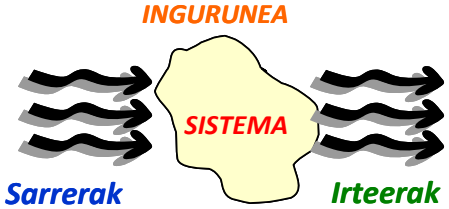
Natura-zientzietan eta ingeniaritza kimikoan, masaren iraupenaren legea oinarrizko legea da. Lege horren arabera, sistema kimiko batean "masa ez da sortzen ez desagertzen, eraldatu baino ez da egiten", Lavoisier-ek zioen moduan. Erreakzio nuklearrik gertatzen ez den sistema batean, masaren inbentarioa egin daiteke, eta analisi horri masa-balantzea deritzo. Sistema baten masa-balantzea egitean, sistema zein den zehaztu behar da, eta haren ingurunetik bereizi.

Sistema honela definitzen da: analisirako bereziki aukeratu den prozesu oso baten zatia (edo prozesu osoa). Haren muga sistema eta ingurunea bereizten dituen irudizko gainazal batek (edo ekipoaren hormak) osatzen du. Sistemak ***itxiak*** (ez dago masa-trukerik ingurunearekiko) edo ***irekiak*** (ingurunearekiko masa-trukea dago: sistematik irten edo sistemara sar daiteke) izan daitezke. 4.1 irudiko adibidean, erreakzio kimikoa gertatzen den prozesu bat dago, birziklazio-korronte batekin. Irudian, 2 sistema desberdin agertzen dira: A sistema, erreaktorea besterik ez duena, eta B sistema, erreaktoreak eta destilagailuak osatua. Bi sistemak irekiak dira (bakoitzak bere ingurunearekin masa trukatzen du, sarrera eta irteerako hodiak baitaude). A sistemaren mugak ekipoaren hormek ezartzen dituzte, eta B sistemaren mugak irudizkoak dira. B sistemaren kasuan, birziklazio-korrontea sistema barruan dago, ez ditu sistemako mugak gainditzen.



4.1 Irudia: Elikadurak eta birziklazioak bat egin ondoren, erreaktore kimikoa elikatzen dute. Irteerako nahastea destilatu ondoren, bihurtu gabeko lehengaia birziklatu egiten da.

Beraz, edozein sistema defini daiteke, eta aztertzen ari garen kasu bakoitzean, komenigarriena aukeratzen da. Oro har, 4.2 irudiko eskemak azaltzen du sistemaren eta Ingurunearen arteko erlazioa.



4.2 irudia: Berdin dio sistema barruko xehetasunak zeintzuk diren. Masa-balantzeen helburua sistemak eta inguruneak trukatzen duten masa kantitatea aztertzea da, eta sistema barruan zenbat masa eraldatu den aztertzea.

Sistema baten masaren iraupenaren legea honela adieraz daiteke (masa edo mol kopurua denbora-unitateko adierazita):

$$\begin{pmatrix}\text{Sistemara}\\ \text{SARTZEN den}\\ \text{masakantitatea}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\text{Sistematik}\\ \text{IRTETEN den}\\ \text{masakantitatea}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\text{Sisteman}\\ \text{ERALDATZEN den}\\ \text{masakantitatea}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\text{Sisteman}\\ \text{METATZEN den}\\ \text{masakantitatea}\end{pmatrix}$$

Sinplifikatuz, **S = I + E + M** idatz daiteke, batugai bakoitzaren lehen hizkiak erabiliz.

Sartu eta Irten batugaiek sistemak eta inguruneak trukatzen duten masa adierazten dute; Eraldatu batugaiak, berriz, erreakzio kimikoengatik sortu edo desagertzen den masa kantitatea (erreakzio-abiaduraren araberakoa), eta Metatu terminoak, azkenik, sisteman metatzen den masa kantitatea zenbatzen du.

Masa-balantzeak masa zein mol unitatetan egin daitezke (kg/h, mol/s, T/egun), eta gaiei dagokienez, sistema osoari (H_2O + NaCl), konposatu kimiko bati (NaCl), espezie atomiko bati (Na^+), elementu atomiko bati (H, O) eta abarri egin dakieke balantzea.

Egoera geldikorrean, Metatu batugaia zero da (sisteman ez dago masa-irabazi edo -galerarik). Erreakzio kimikorik ez dagoen sistemetan (destilazioa, adibidez), Eraldatu batugaia zero da. Sistema itxia bada, Sartu eta Irten batugaiak zero dira.

Masa-balantzea egiteko masa aukeratu bada, eta gai gisa sistema osoa aukeratu bada, erreakzio kimikoak egon arren, Eraldatu batugaia zero izango da (erreakzio kimiko baten masa osoa konstante mantentzen baita). Molak aukeratu badira, ordea, eta gai gisa sistema osoa aukeratu bada, erreakzio kimikoren bat badago, Eraldatu terminoa zero izan daiteke, edo ez, erreakzioko mol-aldaketaren arabera:

$$\Delta n = \sum\begin{pmatrix}\text{produktuen}\\ \text{koef. estekiometrikoak}\end{pmatrix} - \sum\begin{pmatrix}\text{erreaktiboen}\\ \text{koef. estekiometrikoak}\end{pmatrix} \qquad (4.1)$$

aA + bB + ··· ⇆ rR + sR + ··· erreakzio kimiko orokorrarentzako $\Delta n = (r + s + \cdots) - (a + b + \cdots)$ da. Adibidez, $A + B \rightarrow 2C$ erreakzioa gertatzen bada, erreakzioko mol-aldaketa $\Delta n = 2 - 2 = 0$ denez, Eraldatu terminoa zero izango da; erreakzioa $A + B \rightarrow 2C + D$ bada, Eraldatu terminoa positiboa izango da ($\Delta n = 3 - 2 = 1$ baita); erreaktore-irteeran, sartu diren baino mol gehiago dago, guztira.

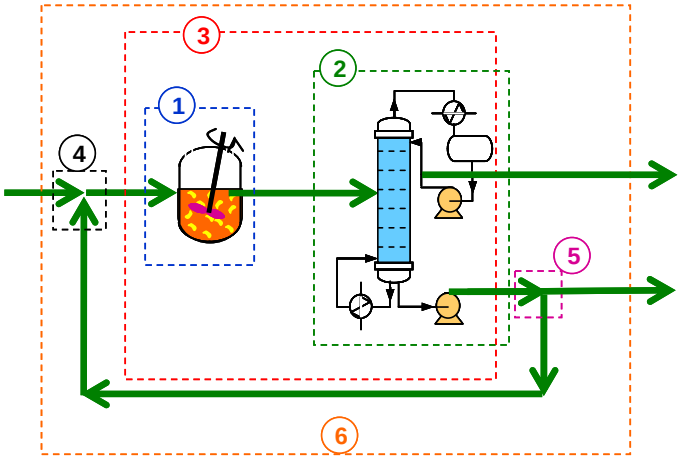
Hainbat kasutan (konposatu kimiko asko dauden erreakzio kimikoez osatutako sistemetan, edo lehengaiak zeintzuk diren jakin gabe analisi elementala ezagutzen denean), ***elementuei eginiko masa-balantzeak*** oso erabilgarriak dira. Adibidez, ikatzaren errekuntzan, C elementuaren mol kantitateak konstante irauten du, CO, CO_2 edo errauts gisa egon arren.

Ekipo gehienetan, masa hodien bidez elikatzen da, eta, eragiketa egin ondoren, hodietatik irteten da. Adibidez, bat-bateko destilagailu batera hodi baten bidez sartzen da elikadura, eta ekipotik bi hodiren bidez irteten dira sortutako bi faseak. Hodi batetik igarotzen den jariagaiaren emari masikoa hodian duen batezbesteko abiadurarekin erlaziona daiteke.

Sartu edo Irten terminoak $v \cdot S \cdot \rho$ eran jar daitezke, v jariagaiak hodian duen batezbesteko abiadura, S hodiaren sekzioa ($\frac{\pi}{4}D^2$ hodi zirkularra bada) eta ρ jariagaiaren dentsitatea izanik.

4.2 MASA-BALANTZEAK

Masa-balantzea masaren inbentarioa da, eta edozein sistemari egin dakioke (labea, hodizatia, destilagailua, findegia, Lurra planeta…). 4.3 irudian, lerro ez-jarraituez inguratutako 6 sistema posible adierazten dira.



4.3 irudia: Prozesuaren masa-balantzea ebazteko aukera daitezkeen sistemak.

Ez dago irizpide bakar bat ekipo anitzeko prozesu baten masa-balantzea egiteko (ikusi 4.3 Irudia). Iradokizun gisa, hauek eman daitezke:

(1) Sistema identifikatu, eta ezagunak diren datuak (emariak, kontzentrazioak eta abar) zerrendatu.

(2) Prozesuaren fluxu-diagrama marraztu (bloke- zein prozesu-diagrama); korronte guztiak izendatu edo zenbakitu. Lehen urratsean identifikatu diren datu ezagunak diagraman idatzi. Era berean, ekiporen batean erreakzio kimikoren bat gertatzen bada, erreakzio doitua idatzi dagokion ekipoaren inguruan.

(3) Taula bat eraiki. Taula prozesuko korronte guztien emariez bete behar da. Korronteak adina zutabe eta konposatuak adina lerro izan behar ditu taulak.

(4) Kalkulurako oinarri bat aukeratu. Korronte guztien emariak kalkulurako oinarri horrekiko kalkulatu behar dira. Kalkulurako oinarri hauek hautatu ohi dira: prozesuko korronteren bateko emari masikoa (edo molarra); denbora-tarte bat (prozesu ez-jarraituetan); konposatu inerteren baten emaria.

(5) Erreakzio kimikoak daudenean, estekiometria molen araberakoa denez, molak zenbatzea komeni da.

Masa-balantzeetan, terminologia berezia erabiltzen da hainbat gauza adierazteko. Besteak beste, hauek dira termino horietako batzuk:

-***Oinarri lehorra*** (Orsat analisia): nahaste baten konposizioa, ura baztertuta utziz (errekuntza-gasen konposizioa adierazteko erabiltzen da).

-***Oinarri bustia***: nahaste baten konposizioa, ura kontuan hartuz.

-***Soberakina***: estekiometrikoki behar dena baino gehiago sartzen den erreaktiboa (errekuntzetan ohikoa izaten da).

-***Elikadura freskoa edo berria***: prozesura sartzen den elikadura.

-***Purga-korrontea***: prozesutik kanpora ateratzen den korronte bat, normalean konposatu inerteak edo zikinkeriak kanporatzeko.

-***Birziklazio-korrontea***: prozesuan atzera bidaltzen den korrontea, aurretik igarotako ekiporen batera itzul dadin edo eragiketa bat berriro jasan dezan. Erreakzio kimikoak daudenean, bihurtu gabe dirauen erreaktiboa birziklatu egiten da.

-***Saihets-korrontea***: ekipo edo eragiketaren bat alboratuta uzten duen korrontea. Konposizioen kontrola egiteko erabiltzen da.

-***Bihurtze-maila***: erreakzio kimikoen aurrerapena adierazteko zenbakia; 0-1 arteko balioa du (0: ez da erreakziorik gertatu; 1: erreaktibo guztia desagertu da).

4.2.1 Bihurtze-mailaren erabilera, erreakzio kimikoa gertatzen den sisteman

Erreakzio kimikoak gertatzen diren sistemetan, ***osagai mugatzailea*** erabiltzen da erreakzioaren bihurtze-maila emateko. Estekiometria kontuan harturik lehenengo desagertuko litzatekeen osagaia (erreaktiboa) da osagai mugatzailea; osagai mugatzaileak guztiz erreakzionatu duenean, erreakzioa amaitu egiten da, erreakzionatu gabeko beste erreaktiboak egon daitezkeen arren. Erreakzio baten osagai mugatzailea A erreaktiboa bada, eta hasieran erreaktorera $N_{A,0}$ mol sartu badira, eta denbora baten ondoren oraindik erreakzionatu gabe N_A molek jarraitzen badute, Aren bihurtze-maila (X_A) honela definitzen da:

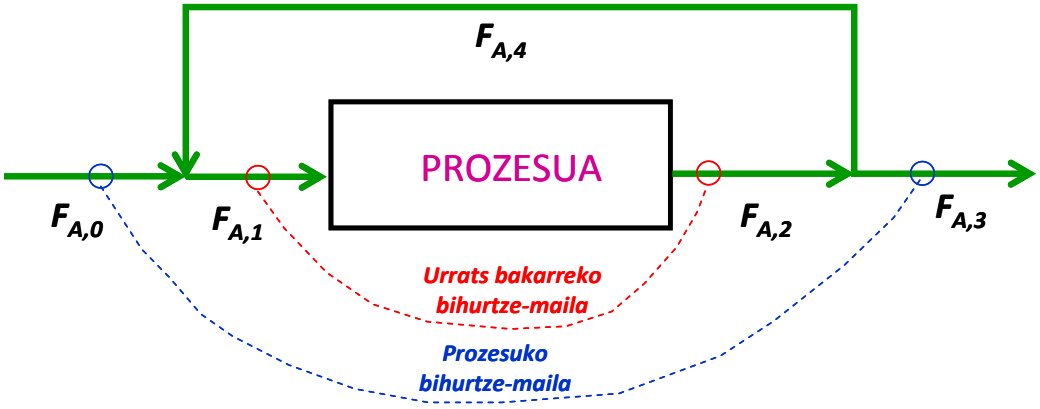
$$X_A = \frac{\text{Erreakzionatutako molak}}{\text{Hasierako molak}} = \frac{N_{A,0} - N_A}{N_{A,0}} \tag{4.2}$$

Beste era batera esanda, ($N_{A,0} \cdot X_A$) terminoak A osagaitik zenbat molek erreakzionatu duten adierazten du. Estekiometria kontuan harturik, beste erreaktibo guztien eta sortutako produktu guztien molak kalkula daitezke.

Erreaktorea etengabe elikatzen bada A osagaiaz eta produktu-korrontea erreaktoretik etengabe irteten bada, jario molarrekin lan egiten da. $F_{A,0}$ eta F_A izango dira Aren sarrerako eta irteerako emari molarrak (mol/t). Orduan, bihurtze-maila honelakoa da:

$$X_A = \frac{\text{Erreakzionatutako molak}}{\text{Hasierako molak}} = \frac{F_{A,0} - F_A}{F_{A,0}} \tag{4.3}$$

Era berean, birziklazioak egiten diren prozesuetan, bi bihurtze-maila erabiltzen dira, 4.4 irudian azaltzen den bezala.



4.4 irudia. Urrats bakarreko bihurtze-maila eta prozesuko bihurtze-maila.

Urrats bakarreko bihurtze-maila:

$$X_A = \frac{F_{A,1} - F_{A,2}}{F_{A,1}} \tag{4.4}$$

Prozesuko bihurtze-maila:

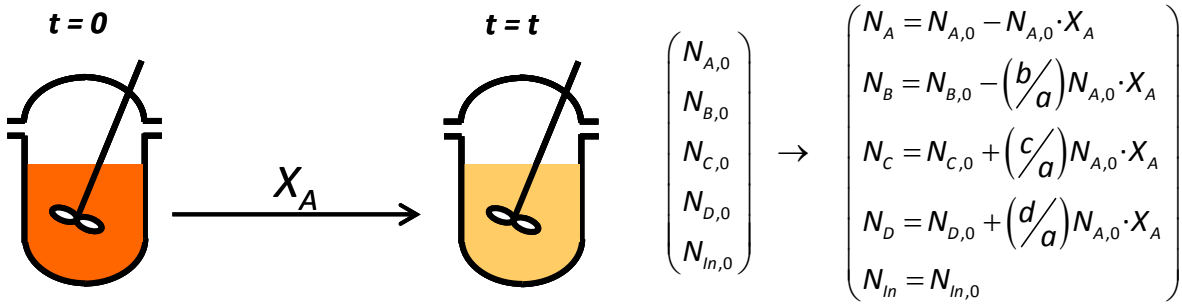
$$X_A = \frac{F_{A,0} - F_{A,3}}{F_{A,0}} \tag{4.5}$$

Demagun erreaktore ez-jarraitu batean aA + bB → cC + dD erreakzioa gertatzen dela. Erreaktorea A, B, C, D eta osagai inerte edp geldo baten $N_{A,0}$, $N_{B,0}$, $N_{C,0}$, $N_{D,0}$ eta $N_{In,0}$ molez bete da hasiera batean, eta osagai mugatzailea A dela hartuko da. Denbora bat igaro ondoren, X_A bihurtze-maila lortu denean, erreaktoreko molen banaketa ***taula estekiometrikoa*** izeneko 4.1 taulako azken lerroan agertzen da:

4.1 Taula. Taula estekiometrikoa: erreaktore barruko molak osagai mugatzailearen bihurtze-mailaren funtzioan.

molak →	A	B	C	D	In	Guztira
t = 0	$N_{A,0}$	$N_{B,0}$	$N_{C,0}$	$N_{D,0}$	$N_{In,0}$	$\sum_i N_{i,0} = N_0$
t = t D (-) edo So (+)	$-N_{A,0}\cdot X_A$	$-(b/a)\cdot N_{A,0}\cdot X_A$	$+(c/a)\cdot N_{A,0}\cdot X_A$	$+(d/a)\cdot N_{A,0}\cdot X_A$	0	$\left(\frac{\Delta n}{a}\right)\cdot N_{A,0}\cdot X_A$
t = t	$N_{A,0}$ $- N_{A,0}\cdot X_A$	$N_{B,0}$ $- (b/a)\cdot N_{A,0}\cdot X_A$	$N_{C,0}$ $+ (c/a)\cdot N_{A,0}\cdot X_A$	$N_{D,0}$ $+ (d/a)\cdot N_{A,0}\cdot X_A$	$N_{In,0}$	$N_0 + \left(\frac{\Delta n}{a}\right)\cdot N_{A,0}\cdot X_A$

D: erreakzio kimikoagatik desagertutakoak (erreakzionatutakoak)
So: erreakzio kimikoagatik sortutakoak
Δn: produktuen eta erreaktiboen koefiziente estekiometrikoen diferentzia =
= (*c*+*d*+···) - (*a*+*b*+···)



4.5 irudia: Erreaktorean gertatzen den molen aldaketa, bihurtze-mailaren funtzioan.

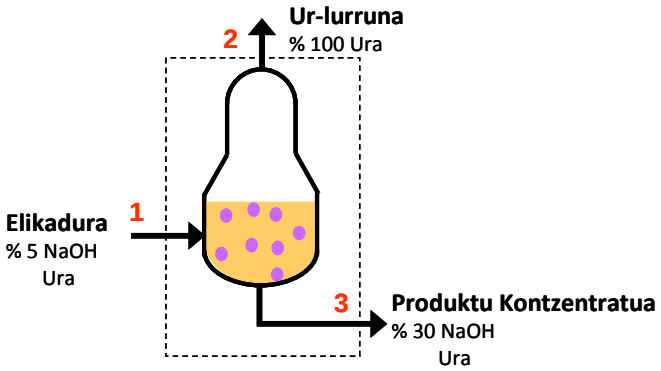
Jarraian, masa-balantzeen adibide batzuk azalduko dira.

4.2.2 Masa-balantzea erreakzio kimikorik gabeko sisteman

Egoera geldikorrean dagoen erreakzio kimikorik gabeko sisteman, Eraldatu eta Metatu terminorik ez da agertzen, eta Sartu eta Irten terminoak besterik ez da agertuko. Sarrera eta irteera bi hoditatik baino gehiagotatik egin daiteke, 1 adibidean bezala.

4.1 adibidea

Lurrungailu batean, NaOH-aren disoluzio urtsu bat pisutan % 5 izatetik % 30 izan arte kontzentratzen da, ura lurrunduz. Kalkula dezagun zenbat ur lurrundu behar den produktu-kg bakoitzeko.



Ebazpena

$$S = I + E + M$$

Erreakzio kimikorik ez dagoenez, E = 0. Era berean, ekipoak egoera geldikorrean lan egiten badu, M = 0 da. Beraz, masa-balantzea S = I adierazpenera laburtzen da (Sarrera: 1 korrontea; Irteera: 2 eta 3 korronteak). Inbentarioa kg/h-tan egingo da aukeratutako NaOH, ura eta sistema osoa gaiei dagokienez.

Kalkulurako oinarria (K.O.): F_1 = 100 kg/h (sistema osoa uraren + NaOH-aren batura izanik)

Beraz, hiru masa-balantze egin daitezkeen arren (NaOH, ura eta sistema osoa), bi besterik ez dira erabilgarriak (hirugarrena, beste bien konbinazio lineala baita):

Gaia	***Sartu***		***Irten***
Ura:	[100·0,95]	=	$[F_2 \cdot 1] + [F_3 \cdot 0{,}70]$
NaOH:	[100·0,05]	=	$[F_2 \cdot 0] + [F_3 \cdot 0{,}30]$
Sistema osoa:	[100]	=	$[F_2] + [F_3]$

Hiru ekuazioko sistema izan arren, haietako bat beste bien konbinazio lineala denez (adibidez, uraren eta NaOH-aren ekuazioak batzean sistema osoarena lortzen da), erabilgarriak bi besterik ez dira. Hau da, ekuazio erabilgarriak konposatuak adina dira.

Uraren eta NaOH-aren masa-balantzeak aukeratzen badira, bi ekuazio eta bi ezezaguneko sistema ebatzi behar da:

F_2 = 93,33 kg/h eta F_3 = 16,67 kg/h. Laburtuz:

kg/h	1	2	3
NaOH	5	0	5
Ura	95	83,33	11,67
Sistema	100	83,33	16,67

Aukeratu den kalkulurako oinarriarekin, taulako emariak kalkulatu dira. Taulako datuen arabera, 16,67 kg/h produktu lortzeko 83,33 kg/h ur lurrundu behar bada, 1 kg/h produktu lortzeko, 16,67 aldiz gutxiago lurrundu beharko da, hau da, 5 kg/h ur lurrundu beharko da. Taulako zenbaki guztiak 16,67 zenbakiaz zatitu beharko dira.

4.2.3 Masa-balantzea erreakzio kimikoak gertatzen diren sisteman

Egoera geldikorrean erreakzio kimikoak gertatzen direnean, Eraldatu terminoa erabili behar da masa-balantzea konposatuei egiten bazaie; bestalde, masa-balantzea elementuei egiten bazaie, Eraldatu terminoa desagertu egiten da, eta, hala, Sartu eta Irten terminoak geratzen dira.

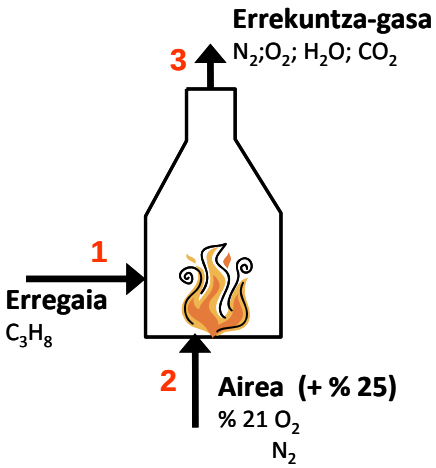
4.2 adibidea

Labe batean propanoa erretzen da, estekiometrikoki behar dena baino % 25 aire gehiago erabiliz. Kalkula dezagun errekuntza-gasen konposizioa.

Ebazpena

Demagun propanoa CO_2-a emanez guztiz erretzen dela (ohikoa oxigenoa soberan badago):

$$C_3H_8 + 5O_2 \rightarrow 3CO_2 + 4H_2O$$



Errekuntza erreakzio kimikoa denez, masa-balantzea moletan egingo da. Egoera geldikorrean lan egiten duenez, M = 0. Beraz, masa-balantzeko batugaiak S = I + E izango dira (S: 1 eta 2 korronteak; I: 3 korrontea). Inbentarioa mol/h-etan egingo da. Gai hauek aukeratu dira: C_3H_8, O_2, N_2, CO_2 eta H_2O.

Kalkulurako oinarria: F_1 = 100 mol/h

Beraz, hiru masa-balantze idatz daitezkeen arren, bi besterik ez dira erabilgarriak (hirugarrena beste bien konbinazio lineala baita):

Gaia	***Sartu***		***Irten***		***Eraldatu***
C_3H_8:	[100·1]	=	0	+	E_{C3H8};
O_2: { Estekiometrikoa: 100·5 = 500; Sartutakoa = 500·1,25 = 625 (2 korrontean)					
	625	=	$[F_{O2,3}]$	+	$[E_{C3H8}\cdot 5]$
N_2:	[2976·0,79]	=	$[F_{N2,3}]$;		
CO_2:	0	=	$[F_{CO2,3}]$	-	$[E_{C3H8}\cdot 3]$
H_2O:	0	=	$[F_{H2O,3}]$	-	$[E_{C3H8}\cdot 4]$

E_{C3H8} = desagertzen diren propano molak/h = 100 mol/h

Airearen konposiziotik: 625 = $[F_2\cdot 0,21]$; F_2 = 2.976 mol/h
O_2-ren balantzetik: $F_{O2,3}$ = 125 mol/h
N_2-ren balantzetik: $F_{N2,3}$ = 2.351 mol/h

CO_2-ren balantzetik: $F_{CO2,3}$ = 300 mol/h
Uraren balantzetik: $F_{H2O,3}$ = 400 mol/h

Laburtuz:

mol/h	1	2	3
C_3H_8	100	0	0
O_2	0	625	125
N_2	0	2.351	2.351
CO_2	0	0	300
H_2O	0	0	400
Sistema osoa	100	2.976	3.176

Ikusten denez, sistema osoa zenbatzean, ez dira berdinak sartzen diren eta irteten diren mol kopuruak ($\Delta n \neq 0$ baita). Ondorioz, ehunekoak kalkulatzen badira, konposizio hau lortzen da:

Oinarri bustian (%): $O_2/N_2/CO_2/H_2O$ = 3,94/74,00/9,45/12,61

Oinarri lehorrean (%):$O_2/N_2/CO_2$ = 4,50/84,69/10,81

Emaitza bera lortzen da C, H, O eta N elementuen masa-balantzeak egiten badira. D = 0 denez, Sartu = Irten geratzen da:

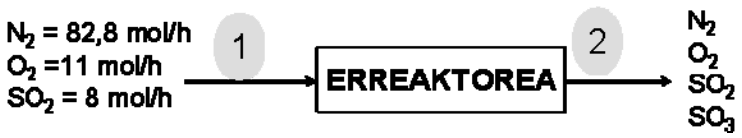
Gaia	***Sartu***		***Irten***
C:	100·3	=	$[F_{CO2,3}]\cdot 1$
H:	100·8	=	$[F_{H2O,3}]\cdot 2$
O:	625·2	=	$[F_{O2,3}]\cdot 2 + [F_{H2O,3}]\cdot 1 + [F_{CO2,3}]\cdot 2$
N:	2351·2	=	$[F_{N2,3}]\cdot 2$

Banan-banan ekuazioak ebatziaz ondokoa lortzen da: $F_{CO2,1}$ = 300 mol/h; $F_{H2O,3}$ = 400 mol/h; $F_{O2,3}$ = 125 mol/h; $F_{N2,3}$ = 2.351 mol/h.

4.3 adibidea

Erreaktore jarraitu baten gas-fasean, erreakzio hau egiten da: $SO_2 + 1/2O_2 \rightarrow SO_3$

SO_2-aren 0,8 bihurtze-maila lortzen da. Hau da erreaktoreko elikaduraren konposizioa (kmol/h): $N_2/O_2/SO_2$ = 82,8/11/8. Kalkula dezagun erreaktoretik irteten den nahastearen konposizioa.



Ebazpena

Kalkulurako oinarria: 1 korrontean 100 kmol/h.

Gaia	***Sartu***		***Irten***		***Eraldatu***	*Ekuazioa*
SO_2	$F_{SO2,2}$	=	$F_{SO2,1}$	-	$F_{SO2,1}\cdot X_{SO2}$	*1*
N_2	$F_{N2,2}$	=	$F_{N2,1}$	-	0	*2*
O_2	$F_{O2,2}$	=	$F_{O2,1}$	-	$0,5\cdot F_{SO2,1}\cdot X_{SO2}$	*3*
SO_3	$F_{SO3,2}$	=	0	+	$F_{SO3,1} + F_{SO2,1}\cdot X_{SO2}$	*4*

1 ekuaziotik $F_{SO2,2}$ = 8 – 8·0,8 = 1,6 kmol/h; *2* ekuaziotik $F_{N2,2}$= 82,8 kmol/h; *3* ekuaziotik $F_{O2,2}$ = 11 - 0,5·8·0,8 = 7,8 kmol/h; *4* ekuaziotik $F_{SO3,2}$ = 0 + 8·0,8 = 6,4 kmol/h.

Beraz, erreaktoretik irteten den nahastearen konposizioa (mol % eran adierazita) ondokoa da:

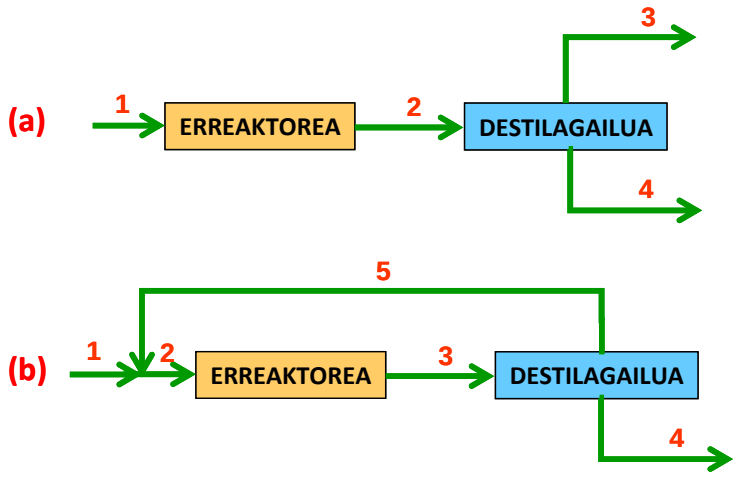
$N_2/O_2/SO_2/SO_3$ = 83,9/7,9/1,6/6,6

4.2.4 Masa-balantzea birziklazioak dauden sisteman

Erreakzio kimikoetan bihurtze-maila % 100 ez denean (gehienetan) erreaktore-irteeran bihurtu gabeko erreaktiboa geratzen da. Horrelako kasuetan, erreakzionatu ez duen erreaktiboa nahastetik bereiz badaiteke, bereizi egiten da, eta berriro erreaktorera eramaten da; ***Birziklazioa*** deritzon korrontea osatzen da, beraz. Besteak beste, prozesuaren etekin osoa handitzeko erabiltzen da.

4.4 adibidea

A → 2B dimerizazio-erreakzioa egiten da, eta Aren bihurtze-maila % 75 da. Erreaktoretik irteten den nahastea destilazioz bereizten da, eta, hala, B produktu purua lortzen da. Kalkula dezagun: (a) prozesuaren etekina (mol B)/(mol A) eran adierazita; (b) destilagailutik irteten den Aren korrontea erreaktorera birziklatzen bada, prozesuaren etekina (mol B)/(mol A) eran adierazita; (c) (b) egiturako prozesuaren bihurtze-maila.



Ebazpena

Egoera geldikorrean lan egiten duenez, M = 0 da.

(a) Kalkulurako oinarria Elikadura berrian hartuko da: F_1 = 100 mol/h (guztia A osagaia). Masa-balantzea erreaktorean egiten bada, 2 korronteko emariak jakin daitezke, eta, masa-balantzeak destilagailuan eginez gero, 3 eta 4 korronteetakoak. Laburtuz:

mol/h	1	2	3	4
A	100	25	0	25
B	0	150	150	0
Sistema osoa	100	175	150	25

Beraz, prozesuaren etekina 150/100 = 1,5 mol B/mol A da.

(b) Kalkulurako oinarria erreaktorerako elikaduran hartuko da: F_2 = 100 mol/h (guztia A osagaia). Masa-balantzea erreaktorean egiten bada, 3 korronteko emariak ezagut

daitezke, eta, destilagailuan eginez gero, 4 eta 5 korronteetakoak. Elikadura berria eta birziklazioa elkartzen diren puntuan eginez gero, elikadura freskoaren emaria kalkula daiteke:

Laburtuz:

mol/h	1	2	3	4	5
A	75	100	25	0	25
B	0	0	150	150	0
Sistema osoa	75	100	175	150	25

Beraz, prozesuaren etekina 150/75 = 2 mol B/mol A da, hau da, birziklatzen den A erreaktiboari esker, prozesuaren etekin osoa handitu egiten da.

(c) Prozesuko bihurtze-maila = 100·(75-0)/75 = % 100 da.

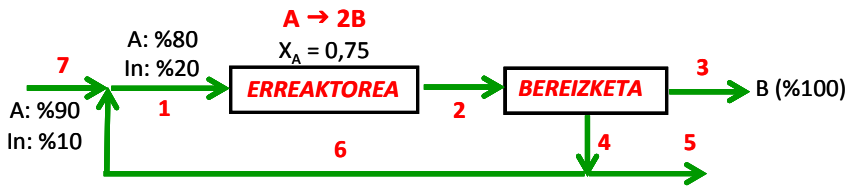
Hainbat kasutan, erreakzioan inerteak diren ezpurutasunak edukitzen ditu elikadura berriak, ezin izaten delako lehengai purua lortu. Lehengaia birziklatzen denean (3 adibidea), horrekin batera inertea birziklatzen da, ezin izaten baitira bereizi. Lehengaiarekin nahasita elikaduran sartu diren inerteak prozesutik kanporatu behar dira, prozesuan metatu ez daitezen. Hori lortzeko, birziklazio-korrontea banatu egiten da, hots, zati bat ***Purga*** gisa kanporatzen da. Purga-korronte horretatik, prozesura sartu den inerte-emari berak irten behar du.

4.5 adibidea

Erreaktore batean A → 2B dimerizazio-erreakzioa egiten da, eta Aren bihurtze-maila % 75ekoa da. Aren eta inerte (In) baten nahastea (moletan, A/inerte = 9) eta birziklazioz datorrena sartzen dira erreaktorera, eta erreaktore-sarreran, inerte/A molen erlazio onargarri maximoa 0,25 da (inerte gehiago balego, erreakzioa egiteko katalizatzailea desaktibatu egingo litzateke). Erreaktorearen irteerako nahastea bereizi egiten da: batetik, B produktu purua lortzen da; eta, bestetik, Aren eta inertearen nahastea birziklatu egiten da, eta zati bat purga moduan kanporatzen da. Kalkula dezagun:

(a) Birziklatu behar den emaria, elikadura berriaren unitateko (mol birziklazio/mol elikadura berri).

(b) Purga-korrontearen emaria, birziklatzen den emariaren unitateko (mol purga/mol birziklazio).



Ebazpena

Kalkulurako oinarria: F_1 = 100 mol/h (bertako konposizioa eta emari guztiak ezagunak dira).

Gaia	***Sartu***		***Irten***		***Eraldatu***	*ekuazioa*
Erreaktorean						
A	100·0,8	=	$F_{A,2}$	+	D_A	*1*
In	100·0,2	=	$F_{In,2}$			*2*
B	0	=	$F_{B,2}$	-	D_A·2	*3*

Bereizgailuan						
A	$F_{A,2}$	=	$(F_{A,4} + 0)$	+	0	*4*
In	$F_{In,2}$	=	$(F_{In,4} + 0)$	+0	*5*	
B	$F_{B,2}$	=	$(F_{B,3} + 0)$	+	0	*6*
Korronte-bereizketan						
Sist. osoa	F_4	=	$(F_5 + F_6)$	+	0	*7*
Korronte-elkarketan						
A	$(F_6 \cdot 0{,}5 + F_7 \cdot 0{,}9)$	=	80			*8*
Sist. osoa	$F_6 + F_7$	=	100			*9*
Prozesu osoan						
In	$0{,}1 \cdot F_7$	=	$F_{In,5}$			*10*

Ohar gaitezen 4, 5 eta 6 korronteek konposizio berdina daukatela.

Bihurtze-mailaren definizioa kontutan hartuta: D_A = 80·0,75 = 60 mol/h; (D_A: erreakzio kimikoa dela eta desagertzen diren Aren molak). Ondorioz, *1* ekuaziotik $F_{A,2}$ = 20 mol/h.

2 ekuaziotik, $F_{In,2}$ = 20 mol/h; *3* ekuaziotik, $F_{B,2}$ = 120 mol/h, eta beraz, F_2 = 160 mol/h.

4, 5 eta 6 ekuazioetatik, $F_{A,4}$ = 20 mol/h, $F_{In,4}$ = 20 mol/h, $F_{B,4}$ = 120 mol/h, eta F_3 = 120 mol/h.

4 korrontean (eta ondorioz, 5 eta 6 korronteetan) inertea sistema osoaren moleen %50 delako, $F_{In,5} = 0{,}5 \cdot F_5$.

8 eta *9* ekuazioak batera ebatziz, F_6 eta F_7 emariak kalkulatzen dira. Amaitzeko, *7* eta *10* ekuazioak ebazten dira.

Laburtuz:

mol/h	1	2	3	4	5	6	7
A	80	20	0	20	7,5	12,5	67,5
B	0	120	120	0	0	0	0
Inertea	20	20	0	20	7,5	12,5	7,5
Sistema osoa	100	160	120	40	15	25	75

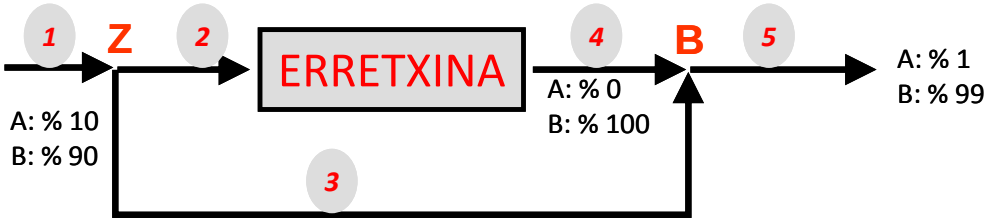
(a) F_6/F_7 = 0,333
(b) F_5/F_6 = 0,6

4.2.5 Masa-balantzea saihets-korronteak dauden sisteman

Zenbait prozesutan, ***saihets-korronteak*** erabiltzen dira, ekipo baten irteerako konposizioa edo tenperatura kontrolatzeko, adibidez. Ekipo bat elikatzeko korrontea banatu egiten da: zati batekin ekipoa elikatzen da dagokion eragiketa egiteko (erreakzioa, metaketa, destilazioa…), eta beste zati batek saihestu egiten du ekipoa eta, ondoren, ekipotik irteten den korrontearekin bat egiten du.

4.6 adibidea

Planta kimiko batean, A kutsatzailea azpiproduktu gisa sortzen da, B produktuarekin batera (mol B/mol A = 9 da). Merkatuan saldu ahal izateko, B osagaiak eduki dezakeen Aren edukiak % 1 eta % 10 artekoa (moletan) izan behar du. Konposizio hori lortzeko, erretxinaz betetako zutabe batetik igaroarazten zaio A eta Bren nahasteari; erretxinak A guztia metatzen du, B metatu gabe, A osagaiarentzat hautakorra baita. Saltzeko konposizioa lortu ahal izateko, elikaduraren zati batek saihestu egiten du erretxina. Kalkula dezagun elikadura mol bakoitzeko saihestu behar den emaria.



Ebazpena

Kalkulurako oinarri gisa F_2 = 100 mol/h hartuko da.

Gaia	***Sartu***		***Irten***		***Eraldatu***		***Metatu***	*ekuazioa*
Korronte-bereizketan (Z)								
Sist. osoa	F_1	=	$(100 + F_3)$	+	0	+	0	*1*
Erretxinan								
A	10	=	$F_{A,4}$	+	0	+	M_A	*2*
B	90	=	$F_{B,4}$	+	0	+	M_B	*3*
Korronte-elkarketan (B)								
Sist. osoa	$(90 + F_3)$	=	F_5					*4*
A	$(0 + F_3 \cdot 0{,}1)$	=	$F_5 \cdot 0{,}01$					*5*

M_B = 0 denez, *3* ekuaziotik $F_{B,4}$ = 90 mol/h ; F_4 = 90 mol/h.
Erretxinak A guztia metatzen duelako, $F_{A,4}$ = 0, eta *2* ekuaziotik M_A = 10 mol/h.
4 eta *5* ekuazioak ebatziz, F_3 = 10 mol/h eta F_5 = 100 mol/h.
Bukatzeko, *1* ekuaziotik F_1 = 110 mol/h.

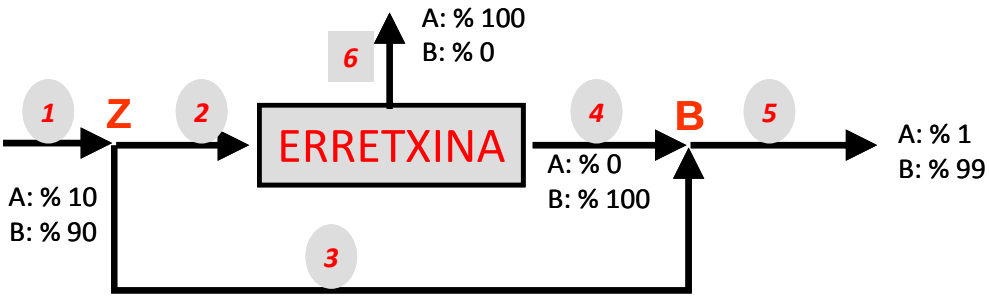
Laburtuz:

mol/h	1	2	3	4	5
A	11	10	1	0	1
B	99	90	9	90	99
Sistema osoa	110	100	10	90	100

Elikadura mol bakoitzeko saihestu behar den emaria = 10/110.

4.6 adibidearen beste modu bateko ebazpena:

Adibide honetan, A erretxinan metatzen da, eta masa-balantzean Metatu terminoa agertzen da. Masa-balantzetik Metatu terminoa kentzeko, korronte irudikari bat erabil daiteke; izan ere, korronte horretatik, A guztiak alde egiten du. Hala, M terminorik ez dago, eta Irteera bat gehitzen da Arentzat. Irudiko eskemak agertzen du prozesuaren bloke-diagrama. 6 korronte irudikaritik A osagai guztiak alde egiten du, eta erretxinan metaketarik ez balego bezala azter daiteke.

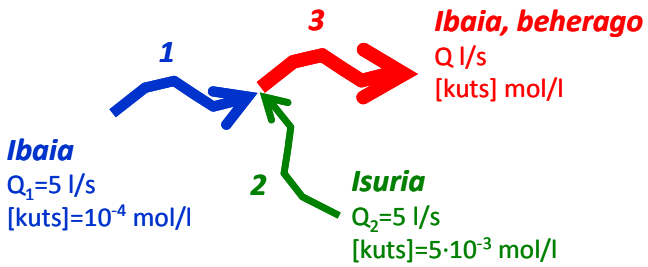


4.2.6 Masa-balantzea kontzentrazioak erabilita

Orain arte azaldu diren adibideetan, masatan edo moletan adierazitako konposizioak erabili dira. Disoluzioekin lan egiten denean, konposizioa molen edo masaren % gisa adierazi ordez, disoluzio-bolumeneko solutuaren mol edo masa gisa adierazten da: mol/l, g/l eta abar. Konposizioak horrela ematen direnean, disoluzioa eta solutuak beste modu batean zenbatzen dira: disoluzioa bolumen/denbora eran zenbatzen den moduan, solutua masa/denbora edo mol/denbora eran zenbatzen da, kontzentrazioa masa/bolumen edo mol/bolumen eran dagoen.

4.7 adibidea

Ibai batek 50 l/s-ko emaria du, eta ibaiko uretan disolbatutako kutsatzaileak 10^{-4} g/l kontzentrazioa du. Ibaiko puntu batean, inguruko instalazio kimiko batek ura isurtzen du 1 l/s emariaz, eta kutsatzailearen kontzentrazioa $5\cdot10^{-3}$ g/l da. Kalkula dezagun isurketa-puntutik behera, nahastea homogeneizatu ondoren, ibaiak duen emaria eta kutsatzailearen kontzentrazioa.



Ebazpena

Masa-balantzea bi gairi egingo zaie: disolbatzailea den urari (l/s-tan) eta kutsatzaileari (g/s-tan).

Kalkulurako oinarria Δt = 1s denbora-tartea hartzen bada:

Gaia	***Sartu***		***Irten***	*Ekuazioa*
Ura	$Q_1 + Q_2$	=	Q_3	*1*
Kutsatzailea	$Q_1\cdot C_{Kuts,1} + Q_2\cdot C_{Kuts,2}$	=	$Q_3\cdot C_{Kuts,3}$	*2*

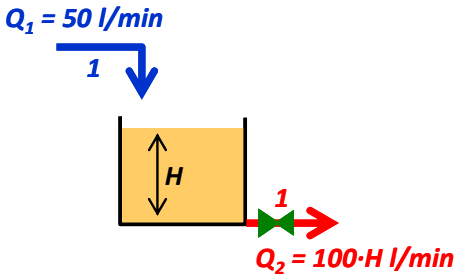
2 ekuazioa ebatziz: $5\cdot1\cdot10^{-4} + 1\cdot5\cdot10^{-3} = 6\cdot C_{Kuts,3}$; $C_{Kuts,3} = 9{,}17\cdot10^{-4}$ g/l
1 ekuaziotik: Q_3 = 6 l

4.2.7 Masa-balantzea egoera ez-geldikorrean

Orain arteko adibide guztiak egoera geldikorrekoak izan dira. Prozesu askok egoera geldikorrean lan egiten dute, hasierako eta bukaerako uneak salbuetsita. Halere, zenbait sistema egoera ez-geldikorrekoak dira berez, eta Metatu terminoa kontuan hartu behar da.

4.8 adibidea

Irudiko tanga zilindrikoaren oinarriak 1 m^2-ko azalera du. Hasieran, 1000 l urez beteta dago, eta tangan H = 1 m da. Une batean, tangaren azpialdeko 2 irteera zabaltzen da; bertan dagoen balbula batek 100·H l/min-ko emaria irteten uzten du. Kalkula dezagun 1 h igaro ondoren tangako urak zer maila (H) izango duen, eta sistema honek inoiz egora geldikorrik lortuko duen.



Ebazpena

Ez denez uraren dentsitatea aldatzen, masa-balantzea bolumenean egingo da, l/min-tan.

S = I + M

Gaia	***Sartu***		***Irten***		***Metatu***	*Ekuazioa*
Ura	Q_1	=	Q_2	+	$\frac{dV}{dt}$	*1*

Balioak ordezkatuz, $50 = 100 \cdot H + 10^{-3} \cdot \frac{dH}{dt}$

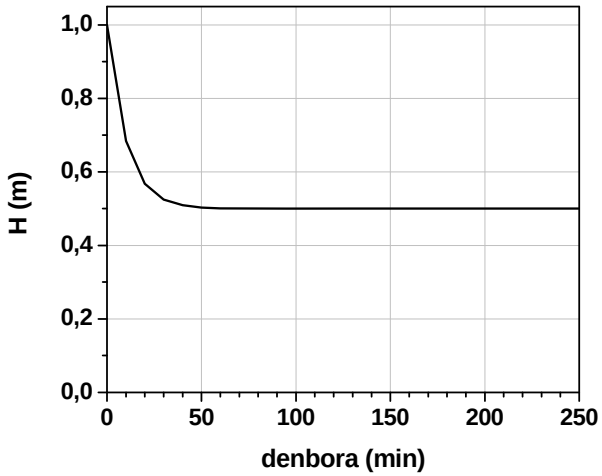
hasierako baldintzak: t = 0 , H = 1 m izanik.

Integratu ondoren, adierazpen hau lortzen da:

$$H = 0,5 \cdot \left(1 + e^{\left(-\frac{t}{10}\right)} \right)$$

1 h igaro ostean, H = 0,501 m.

H vs. t irudikatzen bada, denbora oso luzeetan H = 0,5 m izatera hurbiltzen da; beste hitz batzuetan esanda, egoera geldikorrean, H = 0,5 m izango da, eta, irudian ikusten den bezala, 100 minuturen ondoren egoera geldikorra lortu duela esan daiteke.



5. GAIA

ENERGIAREN IRAUPENAREN LEGEA: ENERGIA-BALANTZEAK

Natura-zientzietan eta ingeniaritza kimikoan, masaren iraupenaren legearekin batera, oinarrizkoa da energiaren iraupenaren legea. Eragiketa kimikoak egiteko ekipoak diseinatzean, eta, ondorioz, ekipo horien tamaina eta behar energetikoak kalkulatzeko, ezinbestekoa da energiaren analisia egitea. Termodinamikako lehen printzipioaren arabera, "sistema batean, energiak iraun egiten du". Masa ez bezala, energia modu askotara agertzen da (energia potentziala, zinetikoa eta abar).

Sistemak, ikuspegi energetikotik, ***irekiak*** ala ***itxiak*** izan daitezke. Lehenak, ingurunearekin masa trukatzen duten sistemak dira, eta, azkenak, ingurunetik isolatuta dauden sistemak dira (ikusi 4.2 irudia). Ingeniaritza kimikoan garrantzi handienekoak sistema irekiak direnez, aurrerantzean horrelako sistemen iraupenaren legea azalduko da. Lehendabizi, defini dezagun energia kontzeptua.

Energia propietate hedagarria da (masa kantitatearen araberakoa), eta masak lana egiteko duen ahalmena da. Ahalmen hori zenbait energia motatan azaltzen da, hemen sailkatzen diren moduan:

(1) ***energia mekanikoa***

Horrelakoak dira energia zinetikoa $\left(\frac{1}{2}mv^2\right)$ eta energia potentziala (mgZ), masaren abiadura (v) eta posizioaren (Z) araberakoak, hurrenez hurren.

(2) ***energia elektromagnetikoa***

Eremu elektriko eta magnetikoarekin lotutako energiak, ingeniaritza kimikoan gutxi azaltzen direnak.

(3) ***barne-energia***

Molekula eta atomoen bibrazio-, errotazio- eta translazio-energiaz osatua (U). Energia horren berri sistemaren tenperaturak ematen du.

5.1 ENERGIAREN IRAUPENAREN LEGEA

Energiaren iraupenaren legea edo Termodinamikaren lehen printzipioak hau dio (terminoen unitatea energia/denbora izanik):

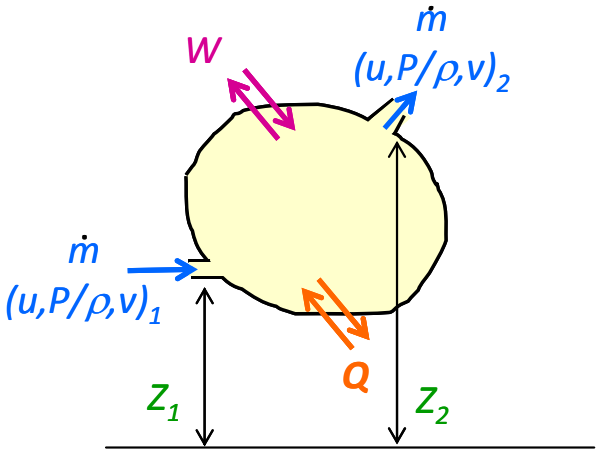
$$\begin{pmatrix}\text{Sistemara}\\ \text{SARTZEN den}\\ \text{energia}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\text{Sisteman}\\ \text{SORTZEN den}\\ \text{energia}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\text{Sistemari}\\ \text{EMATEN zaion}\\ \text{beroa}\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}\text{Sistemak}\\ \text{EGITEN duen}\\ \text{lana}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\text{Sistematik}\\ \text{IRTETEN den}\\ \text{energia}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\text{Sisteman}\\ \text{METATZEN den}\\ \text{energia}\end{pmatrix}$$

5.1 irudiko sistema irekian, bi lan mota bereizten dira: (a) masak sistemara sartzeko eta bertatik irteteko egin duen lana, sarrera eta irteerako presio moduan emana (P/ρ), eta (b) beste lan guztien batukaria, ingurunearekiko egin duena, (W). Sistema gehienetan, ponpa edo irabiagailuak erabiltzen dira sistema osatzen duen masari lana emateko, eta beroa bero-trukagailuen bidez trukatzen du ingurunearekin. Definizioz, $Q > 0$ da beroa sistemara sartzen denean, eta $W > 0$ sistemak inguruneari lana ematen dionean.

Sistema honetan energia-sorrerarik ez badago, energiaren iraupenaren legeak itxura hau hartzen du (energia/denbora eran):

$$\dot{m}\cdot\left(u+\frac{P}{\rho}+\frac{v_e^2}{2}+gZ\right)_1+\dot{m}\cdot(q)-\dot{m}\cdot(w)=\dot{m}\cdot\left(u+\frac{P}{\rho}+\frac{v_e^2}{2}+gZ\right)_2+\frac{d\left[\dot{m}\cdot\left(u+\frac{P}{\rho}+\frac{v_e^2}{2}+gZ\right)\right]}{dt} \quad (5.1)$$

Non $\dot{m}$ emari masikoa baita; u, masa unitateko barne-energia; P/ρ, masa unitateko presioari dagokion lana; $v_e^2/2$, masa unitateko energia zinetikoa; gZ, masa unitateko energia potentziala; q, masa unitateko ingurunearekin trukatzen duen beroa; eta w, masa unitateko ingurunearekiko egiten duen lana. v_e energiarentzako batezbesteko abiadura eraginkorra da, masarentzat definitzen denaren (v) desberdina (ikusi 6. gaia).



5.1 irudia. Energiaren iraupenaren legea sistema irekian.

$U=\dot{m}\cdot u$, $Q=\dot{m}\cdot q$ eta $W=\dot{m}\cdot w$ denbora unitateko barne-energia, beroa eta lana badira, hurrenez-hurren, egoera iraunkorrean adierazpen hau lortzen da (energia/denbora):

$$\left(U+\dot{m}\cdot\frac{P}{\rho}+\dot{m}\cdot\frac{v_e^2}{2}+\dot{m}\cdot gZ\right)_1+Q-W=\left(U+\dot{m}\cdot\frac{P}{\rho}+\dot{m}\cdot\frac{v_e^2}{2}+\dot{m}\cdot gZ\right)_2 \quad (5.2)$$

Definizioz, hau da masa unitateko ***entalpia*** (h):

$$h=u+\frac{P}{\rho} \quad (5.3)$$

Termino hori 5.1 ekuazioan ordezkatzen bada, egoera geldikorrean hau lortzen da (energia/denbora):

Energia/denbora $$\dot{m}\cdot\left(h+\frac{v_e^2}{2}+gZ\right)_1+\dot{m}\cdot(q)-\dot{m}\cdot(w)=\dot{m}\cdot\left(h+\frac{v_e^2}{2}+gZ\right)_2 \quad (5.4)$$

Eta $H=\dot{m}\cdot h$ denbora unitateko entalpia bada:

Energia/denbora $$\left(H+\dot{m}\cdot\frac{v_e^2}{2}+\dot{m}\cdot gZ\right)_1+Q-W=\left(H+\dot{m}\cdot\frac{v_e^2}{2}+\dot{m}\cdot gZ\right)_2 \quad (5.5)$$

5.4 ekuazioko termino guztiak emari masikoaz zatitzen badira eta ekuazioa berrantolatzen bada, adierazpen hau lortzen da (energia/masa eran):

$$\left(h+\frac{v_e^2}{2}+gZ\right)_1 - \left(h+\frac{v_e^2}{2}+gZ\right)_2 + q - w = 0 \qquad (5.6)$$

Sisteman beroa sortuko balitz (erreakzio kimiko exotermikoa dagoelako, adibidez), $(-\Delta H_r)\cdot(-r')$ terminoa gehitu beharko genuke; ΔH_r mol unitateko erreakzio-beroa da, eta $(-r')$ denbora unitateko erreakzionatu duten erreaktibo-molen kopurua da.

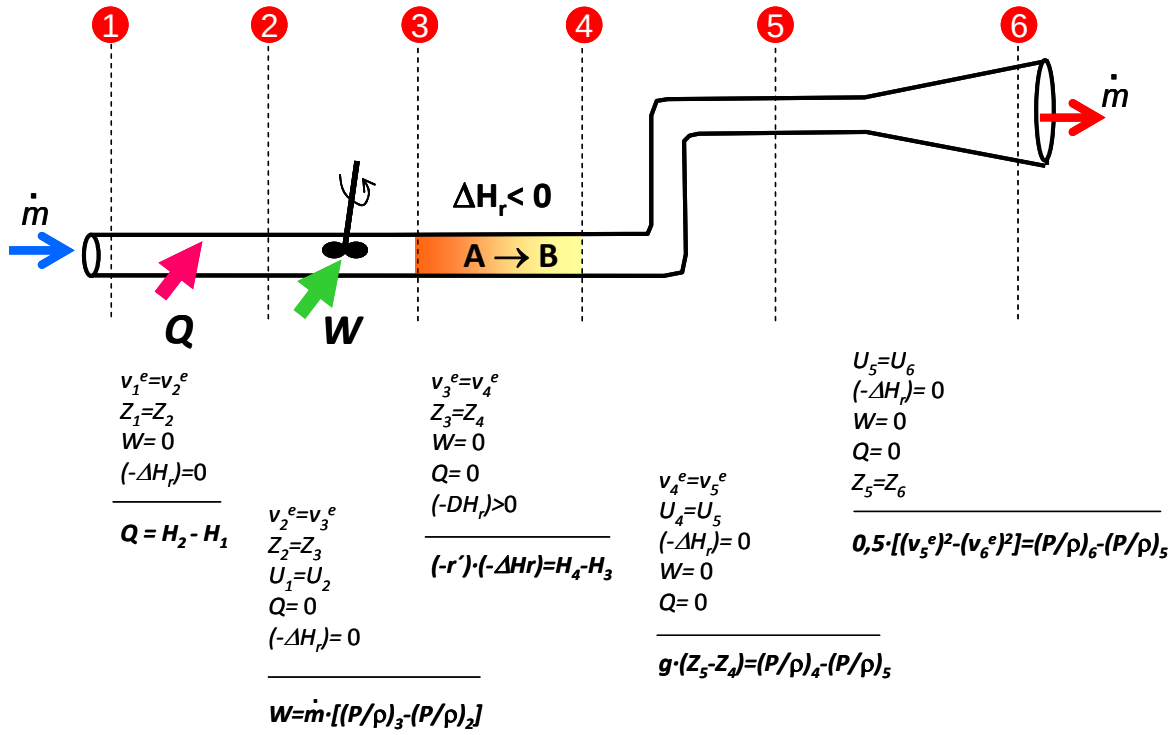
Energia/masa
$$\left(h+\frac{v_e^2}{2}+gZ\right)_1 - \left(h+\frac{v_e^2}{2}+gZ\right)_2 + \frac{(-\Delta H_r)\cdot(r')}{\dot{m}} + q - w = 0 \qquad (5.7)$$

Eta energia/denbora eran:

$$\left(H+\dot{m}\frac{v_e^2}{2}+\dot{m}gZ\right)_1 - \left(H+\dot{m}\frac{v_e^2}{2}+\dot{m}gZ\right)_2 + (-\Delta H_r)\cdot(r') + Q - W = 0 \qquad (5.8)$$

Nola interpretatzen dira ekuazio horiek? Sistema ireki batek ingurunearekin beroa trukatzen badu, lana trukatzen badu edo/eta beroa sortzen bada (erreakzio kimikoagatik, adibidez), sistemaren sarrerako eta irteerako energiak desberdinak dira. 5.2 irudian agertzen da sistema bateko zenbait punturen arteko energiaren iraupenaren legea.

1 eta 2 puntuen artean ez dago energia zinetiko eta potentzialaren aldaketarik. Bero-trukagailuaren bidez ingurunearekin trukatu duen beroa entalpia aldatzeko erabiltzen du jariagaiak. 2 eta 3 puntuen artean ponparen bitartez emandako lanak presio-aldaketa eragin du jariagaiarengan. 3 eta 4 puntuen artean erreakzioa gertatu denez, jariagaiaren entalpia aldatu egiten da. 4 eta 5 puntuen artean energia potentziala handitzeak presio-energia txikitzea dakar. Bukatzeko, 5 eta 6 puntuen artean abiadura txikitzeak (hodi zabalagora pasatzen baita) presio-energiaren igoera dakar.



5.2 irudia. Energiaren iraupenaren legea sistema irekian, energia/denbora eran emanda.

5.1.1 Balantze entalpikoak

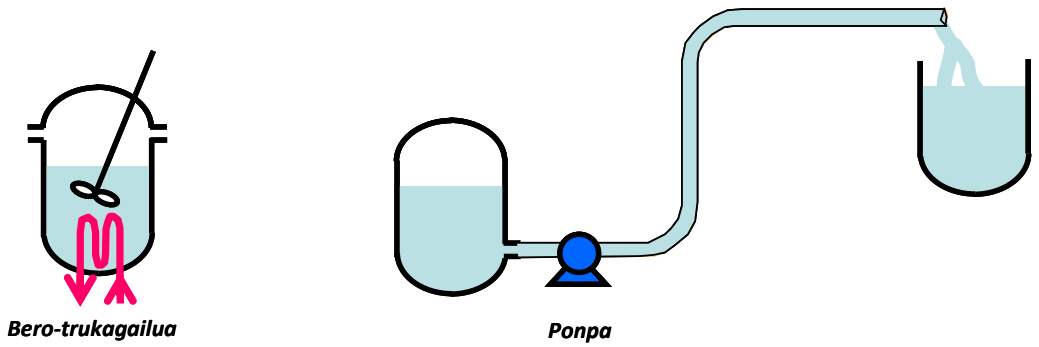
Erreakzio kimikorik gertatzen ez den kasu askotan, sistemaren sarreraren eta irteeraren artean energia potentzialaren eta energia zinetikoaren aldaketa arbuiagarria da, eta ingurunearekin ez da lanik trukatzen. Horrelako kasuetan, ***termino entalpikoak*** baino ez dira erabiltzen:

Energia/masa $$(h)_2 - (h)_1 = q \qquad (5.9)$$

Tenperatura-aldaketa duten sistemak, fase-aldaketa duten sistemak edo/eta bero-trukaketa duten sistemak dira mota horretakoak.

5.1.2 Termino mekanikoen balantzeak

Beste hainbat kasutan, termino entalpikoak arbuiagarriak dira energia zinetiko edo energia potentzialarekin alderatuta. Hala, isotermikoak (edo ia isotermikoak) diren eta fase-aldaketarik eta bero-trukaketarik ez duten sistemetan, energiaren ***termino mekanikoa***ren balantzeak egiten dira (hodi baten barneko jariagai baten jario isotermikoa, adibidez). Horrelako sistemen energia-balantzeak 6. gaian azaltzen dira, jariagaien jarioa azaltzean.



5.3 irudia. Energiaren termino entalpikoak (ezkerrean) eta termino mekanikoak (eskuinean).

Bi energia-balantzeen arteko aldea ikusteko, adibide pare bat aztertuko dugu (ikusi 5.3 irudia). Irabiatutako ontzi handi batean, ura bero-trukagailuz berotzen da. Sistema honetan, irabiatzaileak marruskaduraz berotzen duena guztiz arbuiagarria da, bero-trukagailuz berotzen denarekin alderatuta. Beraz, termino mekanikoak (irabiaketa) guztiz arbuiagarriak dira, eta balantze entalpikoa egingo da. Bestalde, beste adibidean, jariagaia lekuz aldatzen da hodi batekin, tanga batetik garaiago dagoen beste tanga batera ponpatuz. Hemen, marruskadurak sortzen duen beroa guztiz arbuiagarria da jariagaiak jasaten duen presioaren edo energia zinetikoaren diferentziarekin alderatuta. Horren ondorioz, termino entalpikoak arbuiagarriak dira, eta termino mekanikoen balantzea egingo da. Beste kasu batzuetan, ordea, energia osoaren balantzea egin behar da, termino guztiek antzeko ordena baitute.

Ondorengo ataletan, entalpia-balantzeak baino ez dira azalduko, termino mekanikoen balantzeak 6. gaian azaltzen baitira.

5.2 ENTALPIA-BALANTZE MAKROSKOPIKOAK

Prozesuen entalpia-balantzeak ebazteko, aurretik masa-balantzeak ebatzita egon behar du. Energia mekanikoaren terminoak arbuiagarriak badira, energia/masa eran,

$$(h)_2 - (h)_1 = q \qquad (5.10)$$

edo energia/denbora eran,

$$H_2 - H_1 = Q \tag{5.11}$$

Adierazpen hori erabil daiteke *H* entalpia izanik eta *Q* beroa izanik. ***Bero sentikorra*** bada (hau da, tenperatura aldatzen bada):

Erreakzio kimikorik ez badago:

$$Q = (H_2 - H_1) = \dot{m} \cdot \overline{C_P} \cdot (T_2 - T_1) \tag{5.12}$$

Erreakzio kimikoak gertatzen badira:

$$Q = (H_2 - H_1) + \sum_{erreakzioak} (-\Delta H_r \cdot r') \tag{5.13}$$

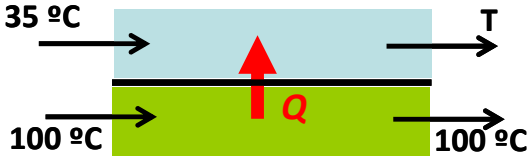
Ingurunearekin trukatzen duen energia ***Bero sorra*** bada, ez da igartzen tenperatura-diferentziarik. Hori fase-aldaketetan gertatzen da. Horrelako kasuetan, erlazio hau erabili behar da:

$$Q = \dot{m} \cdot \lambda \tag{5.14}$$

Non λ fase-aldaketaren bero sorra baita (fasez aldatutako osagaiaren mol (edo kg) bakoitzeko askatzen (edo xurgatzen) den energia). Balio horiek taulatan jasota daude, bibliografian, ohiko sustantzientzat.

5.1 adibidea

Bero-trukagailu batean 35 ºC-an sartzen den olioa berotu egiten da. Horretarako, 100 ºC-an asetako ur-lurruna erabiliko da. Berotu behar den olioaren emari masikoa 10^4 kg/h da, eta kondentsatzen ari den lurrunaren emaria, 550 kg/h. Kalkula dezagun zer tenperaturatan irteten den olioa bero-trukagailutik.
Datuak: olioaren batezbesteko bero espezifikoa = 2,5 kJ/kgºC. Lurrunaren bero sorra = 2.260 kJ/kg.



Ebazpena

Ur-lurruna aseta dagoenez, kondentsatzen denean, beroa askatzen du, bere tenperatura aldatzen ez den arren (likido eran irtengo da, tenperatura berean, 100 ºC-an).
Lurrunak ematen duen beroa 5.11 ekuazioak ematen du.
($\Delta E_{zinetikoa}$, $\Delta E_{potentziala}$, $\Delta E_{presioa} \approx 0$ dira ur-lurrunarentzako)
Q = (550)·(2260) = <u>$1{,}24 \cdot 10^6$ kJ/h (ematen duen beroa)</u>

Lurrunak ematen duen beroa olioak bereganatzen du, berotzeko. Kasu horretan, olioak tenperatura-diferentzia nabaritzen duenez:

$$Q = \dot{m} \cdot C_P \cdot \Delta T$$

($\Delta E_{zinetikoa}$, $\Delta E_{potentziala}$, $\Delta E_{presioa} \approx 0$ dira olioarentzako)

$Q = \Delta H = (10.000)\cdot(2,5)\cdot(T - 35) = 2,5\cdot 10^4\cdot(T - 35)$ kJ/h (eman behar zaion beroa)

Bi adierazpenak berdinduz: $T = 85$ ºC.

5.2.1 Entalpien kalkulua

Entalpia absolutuak ezin daitezke kalkulatu, eta, beti, erreferentzia-egoera batekiko (tenperatura eta fasea finkatuz) aldaketak kalkulatzen dira. Hori dela eta, egoera bateko entalpia kalkulatzean, kontuan hartu behar dira erreferentzia-egoerarekiko duen tenperatura-diferentzia edo egon daitezkeen fase-aldaketak.

Har ditzagun ψ1 eta ψ2 egoerak, 1 eta 2 faseak direla (5.4 irudian). Fase-aldaketarik ez badago (ezkerreko irudia, ψ1) eta presio konstantean lan egiten bada:

$$h_{T2} = h_{T1} + \int_{T1}^{T2} C_P \cdot dT \qquad (5.15)$$

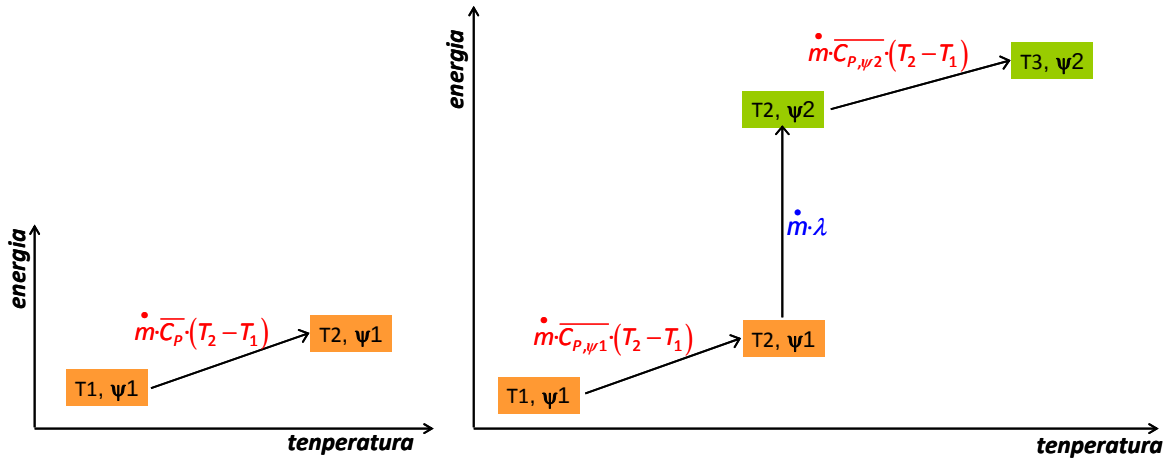
[T_1, T_2] tarte osoan bero espezifikoaren batez besteko balioa hartzen bada ($\overline{C_P}$):

$$H_{T2} = H_{T1} + \dot{m}\cdot\overline{C_P}\cdot(T_2 - T_1) \qquad (5.16)$$

1 egoera erreferentzia egoera da. Ohartu gaitezen 5.15 adierazpenak masa unitateko entalpiak erabiltzen dituela, eta 5.16 ekuazioak, berriz, energia unitatea duela.

Sisteman fase-aldaketa badago (eskuineko irudian, ψ1-etik ψ2-rako fase-aldaketa), entalpia-aldaketa osoak hiru termino izango lituzke: lehena, ψ1 fasearen bero sentikorra, T1 → T2 aldaketarako; ondoren, fase-aldaketarako T_2 tenperaturan ψ1 → ψ2 fase-aldaketa gertatzen denez, bero sorra; eta, bukatzeko, ψ2 fasearen bero sentikorra, T2 → T3 aldaketarako.

$$\Delta h = \int_{T1}^{T2} C_{P,\psi 1}\cdot dT + \lambda_{\psi 1\to\psi 2} + \int_{T2}^{T3} C_{P,\psi 2}\cdot dT \qquad (5.17)$$



5.4 irudia. Fase-aldaketarik gabeko eta fase-aldaketa duen sistema baten beroa.

5.4 irudiari erreparatzen badiogu, fase-aldaketari dagokion beroa oso handia izan oi da, eta bero sentikorra baino askoz ere nabarmenagoa izan daiteke.

Adibidez, 1 kg ur 90 ºC-tik 100 ºC-ra berotzeko (bero sentikorra) 42,1 kJ eman behar zaio; 100 ºC-an asetako 1 kg ur irakiteko 2.257 kJ behar dira.

Arestian erabili diren ekuazioetan, bi tenperaturen arteko bero espezifikoaren batezbesteko balioak erabili dira, propietate hori tenperaturaren araberakoa baita. Tenperatura-diferentzia oso zabala ez bada, batezbestekoa erabiltzea hurbilketa egokia da, baina tenperatura-aldea zabala bada, erroreak handiegiak izan daitezke. Orduan, adierazpen hau erabili beharko litzateke:

$$h_{T2} = h_{T1} + \int_{T1}^{T2} C_P(T) \cdot dT \tag{5.18}$$

Konposatu kimiko gehienen bero espezifikoak (C_P) tenperaturarekin bigarren ordenako polinomioa betetzen duela har daiteke:

$$C_P = a + bT + cT^2 \tag{5.19}$$

Hainbat konposaturen *a*, *b* eta *c* konstanteak bibliografian aurkitzen dira.

Oso presio garaietarako izan ezik, *N* konposatuz osatutako gas nahastearen bero espezifikoa honela kalkulatzen da, x_i i osagaiaren masa edo frakzio molarra izanik (bero espezifikoa masa edo mol unitateko denerako, hurrenez hurren):

$$\sum_{i=1}^{N} x_i \cdot C_{P,i} \tag{5.20}$$

5.2 adibidea

Kalkula dezagun (a) 1 kg ur, likido egoeran, 30 ºC-tik 60 ºC-ra berotzeko eman behar den beroa, (b) 1 kg ur 30 ºC-tik 150 ºC-ra berotzeko eman behar den beroa, 1 atm-ko presioan.
Datuak: C_P (J/molK) = $a + b \cdot T + c \cdot T^2$ T(K)

$\lambda_{\text{Likido}\rightarrow\text{lurrun}}$ = 40,656 kJ/mol

	a	*b*	*c*
Ura,likido-egoera	68,6342	$2{,}2902 \cdot 10^{-2}$	$-6{,}1406 \cdot 10^{-6}$
Ura, lurrun-egoera	33,4312	$-3{,}9892 \cdot 10^{-3}$	$1{,}5220 \cdot 10^{-5}$

Ebazpena

Entalpia-balantzearen arabera, kasu guztietan, $Q = \Delta H$ da.

(a) Likido-egoeran besterik ez dagoenez,

$$Q = \Delta h = \int_{303}^{333} \left(68{,}6342 + 2{,}2902 \cdot 10^{-2} \cdot T - 6{,}1406 \cdot 10^{-6} \cdot T^2\right) dT = 5296{,}97 \; {}^{J}\!/_{mol}$$

$\Delta H = Q$ = (55,56 mol)·(5296,97 J/mol) = 294,28 kJ

(b) Orain, fase-aldaketa kontuan hartu beharra dago:

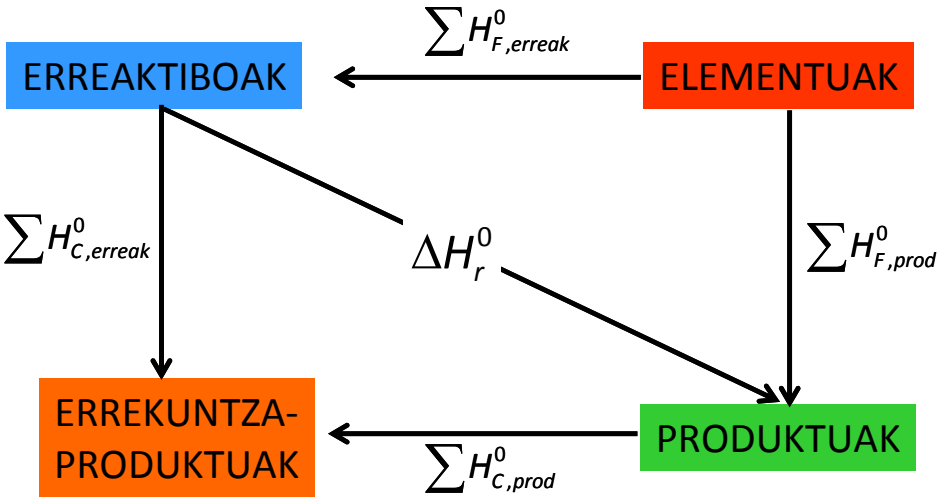
$$\Delta h = \int_{303}^{373} \left(68{,}6342 + 2{,}2902 \cdot 10^{-2} \cdot T - 6{,}1406 \cdot 10^{-6} \cdot T^2\right) dT + 40{,}656 \cdot 10^3 +$$

$$+ \int_{373}^{423} \left(33{,}4312 - 3{,}9892 \cdot 10^{-3} \cdot T + 1{,}5220 \cdot 10^{-5} \cdot T^2\right) dT = 47{,}665 \; {}^{kJ}\!/_{mol}$$

$\Delta H = Q$ = (55,56 mol)·(47,665 kJ/mol) = 2648,27 kJ

5.2.2 Erreakzio-beroaren kalkulua

Erreakzio kimiko guztietan entalpia-aldaketa gertatzen da. Erreakzioak endotermikoak edo exotermikoak izan daitezke: erreakzio endotermikoetan, beroa xurgatzen da ($Q = \Delta H_r > 0$), eta erreakzio exotermikoetan, beroa askatzen da ($Q = \Delta H_r < 0$). Entalpia horiek erreakzioan parte hartzen duten banakako osagaien formazio-bero estandarrekin (ΔH_F^0) edo errekuntza-bero estandarrekin (ΔH_C^0) kalkula daitezke (5.5 irudia). Egoera estandarra 25 ºC eta 1 atm da.



5.5 irudia. Erreakzio-beroa kalkulatzeko bideak: formazio-beroak eta errekuntza-beroak (Hess-en legea).

$$\Delta H_r^0 = \sum n_{i,prod} \cdot H^0_{F,prod} - \sum n_{i,erreak} \cdot H^0_{F,erreak} \tag{5.21}$$

$$\Delta H_r^0 = \sum n_{i,erreak} \cdot H^0_{C,erreak} - \sum n_{i,prod} \cdot H^0_{C,prod} \tag{5.22}$$

Beste tenperatura baten erreakzio-beroa neurtzeko, adierazpen hau erabiliko da:

$$\Delta H^0_{R,T} = \Delta H^0_{R,298} + \int_{298}^{T} \nabla C_P \cdot dT \tag{5.23}$$

$$\nabla C_P = \sum n_{i,prod} \cdot C_{P_{prod}} - \sum n_{i,erreak} \cdot C_{P_{erreak}} \tag{5.24}$$

n_i *i* osagaiaren koefiziente estekiometrikoa izanik.

Definizioz, elementu kimikoen formazio-bero estandarra zero (0) dela hartzen da. Hala, edozein konposatu kimikoren formazio-bero estandarra kalkula daiteke.

5.3 adibidea

Erreaktore jarraitu batean, $SO_2 + ½\ O_2 \rightarrow SO_3$ erreakzioa gauzatzen da gas-fasean, eta SO_2-aren bihurtze-maila 0,8 da. Erreaktorea $N_2/O_2/SO_2$ = 82,8/11/8 kmol/h nahasteaz elikatzen da 673 K-ean. Kalkula dezagun zer tenperaturatan dagoen erreaktore-irteerako korrontea, erreakzioa adiabatikoki gauzatzen bada.

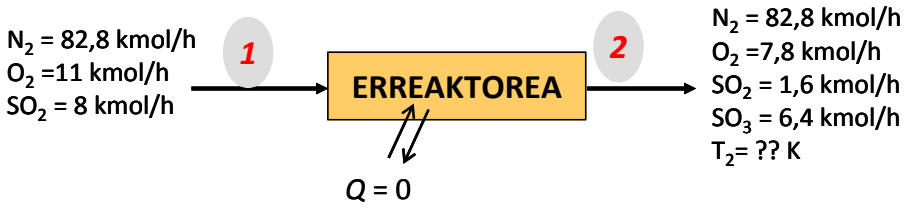
Datuak:

Batezbesteko bero espezifikoak, C_P(J/molK) $SO_2/SO_3/O_2/N_2$ = 45,6/63,6/31,0/29,7

ΔH_F^0(298K)(kJ/mol) SO_2/SO_3 = -296,8/-394,9

Ebazpena

Lehenik eta behin, masa-balantzea ebatziko da, korronte bakoitzaren emaria eta konposizioa kalkulatzeko (4. gaiko 3 adibidean ebatzia).



Energiaren iraupenaren legearen arabera, termino mekanikoak arbuiagarriak dira termino entalpikoekin alderatuta, beraz:

Sartzen den beroa + Sortzen den beroa = Irteten den beroa

Sartu	***Sortu***	***Irten***	*(kJ/mol)*
$82{,}8\cdot 29{,}7\cdot(673-T_{erref})$ (N_2) +			
$11\cdot 31{,}0\cdot(673-T_{erref})$ (O_2) +			
$8\cdot 45{,}6\cdot(673-T_{erref})$ (SO_2)			
	$+\ So$ =		
		$82{,}8\cdot 29{,}7\cdot(T_2-T_{erref})$ (N_2) +	
		$7{,}8\cdot 31{,}0\cdot(T_2-T_{erref})$ (O_2) +	
		$1{,}6\cdot 45{,}6\cdot(T_2-T_{erref})$ (SO_2) +	
		$6{,}4\cdot 63{,}6\cdot(T_2-T_{erref})$ (SO_3)	

Sartu, N_2, O_2 eta SO_2-arekin (1) korrontean: $S = 3{,}16\cdot 10^3\cdot(673-T_{erref})$ kJ/h
Irten, N_2, O_2, SO_2 eta SO_3-arekin (2) korrontean: $I = 3{,}18\cdot 10^3\cdot(T_2-T_{erref})$ kJ/h

Sortu (kJ/h):

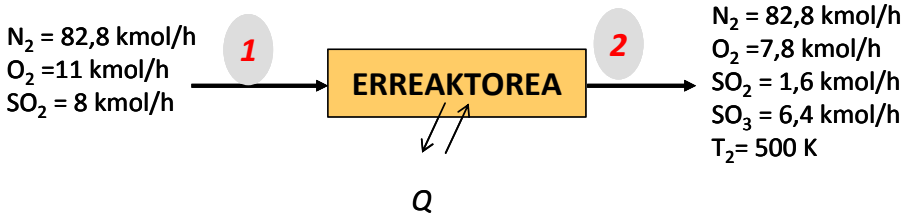
$SO_2 + ½\ O_2 \rightarrow SO_3$ erreakzio exotermikoa gertatzen denez, $\Delta H_{r,298} = -98{,}1$ kJ/mol SO_2.
Erreakzioan 6,4 kmol SO_2/h desagertzen direnez: $So = 98{,}1\cdot 6{,}4 = 6{,}29\cdot 10^5$ kJ/h
Erreferentzia-egoera gisa gas faseko 298 K aukeratzen bada: $T_2 = 868$ K

5.4 adibidea

Erreaktore jarraitu batean, $SO_2 + ½\ O_2 \rightarrow SO_3$ erreakzioa gauzatzen da gas fasean, eta SO_2-aren bihurtze-maila 0,8 da. Erreaktorea $N_2/O_2/SO_2$ = 82,8/11/8 kmol/h nahasteaz elikatzen da 673 K-ean. Kalkula dezagun zenbat bero trukatu behar duen erreaktoreak ingurunearekin, irteerako korrontea 500 K-ean egon dadin.
Datuak: (5.3 adibidekoak)

Ebazpena

5.3 adibidea ebatzita izanik,



Energia-balantzetik:

$$S + So = I + Q \text{ (Trukatu)}$$

Erreferentzia-tenperatura gisa 298 K aukeratu da.

Sartu	***Sortu***	***Irten***	*(kJ/mol)*
82,8·29,7·(673-298) (N_2) + 11·31,0·(673-298) (O_2) + 8·45,6·(673-298) (SO_2)	+ *So* =	82,8·29,7·(500-298) (N_2) + 7,8·31,0·(500-298) (O_2) + 1,6·45,6·(500-298) (SO_2) + 6,4·63,6·(500-298) (SO_3)	

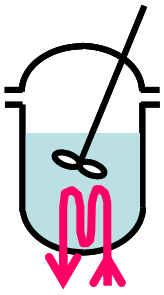
Sartu, N_2, O_2 eta SO_2-arekin (1) korrontean: $S = 1{,}187\cdot10^6$ kJ/h
Irten, N_2, O_2, SO_2 eta SO_3-arekin (2) korrontean: $I = 6{,}426\cdot10^5$ kJ/h

Sortu (kJ/h):
$\Delta H_{r,298} = -98{,}1$ kJ/mol SO_2 ;
6,4 mol SO_2/h desagertzen direnez erreaktorean: $So = 98{,}1\cdot6{,}4 = 6{,}29\cdot10^5$ kJ/h

$Q = 1{,}173\cdot10^6$ kJ/h-ko beroa kendu behar da (hoztu egin behar da).

5.5 adibidea

Tanga batean 10^4 kg ur dago 20 ºC-an. Berogailu batekin, $5\cdot10^2$ kJ/s abiaduraz berotzen bada, kalkula ezazu ordubete ondoren tangako urak izango duen tenperatura.
Datuak: uraren $C_P = 68{,}6342 + 2{,}2902\cdot10^2\cdot T - 6{,}1406\cdot10^{-6}\cdot T^2$ J/mol ºC



Bero-trukagailua

Ebazpena

Energia-balantzea eginez, eta termino entalpikoak nagusiak izanik:
$S = 0$; $I = 0$; $So = 0$; Q = Metatu

Tangako ur-masa = 10^4 kg = $555{,}56\cdot10^3$ mol

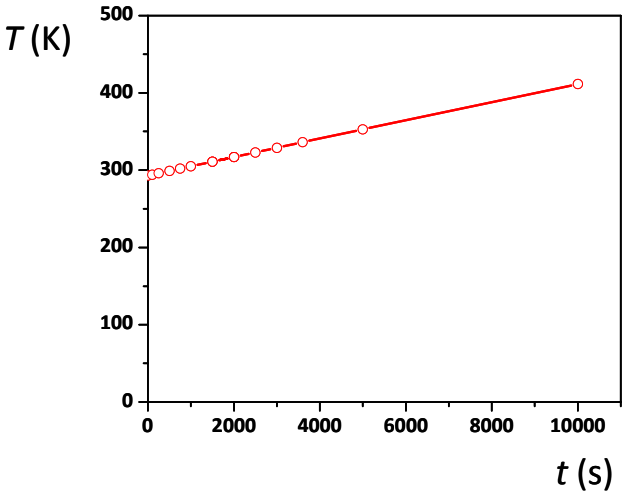
$$Q = m\cdot C_P\cdot\frac{dT}{dt} = 10^4\ J/s \qquad \therefore \qquad \int_{293}^{T} C_P\cdot dT = \frac{Q}{m}\cdot\int_0^t dt = \frac{10^4 W}{\left(555{,}56\cdot10^3 mol\right)}\cdot t$$

$$\int_{293}^{T}\left(68{,}6342 + 2{,}2902\cdot10^{-2}\cdot T - 6{,}1406\cdot10^{-6}\cdot T^2\right)\cdot dT = 0{,}9\cdot t(s)$$

Integratzean, balio hauek lortzen dira denboraren arabera:

$t(\text{s}) = -2{,}338\cdot10^{4} + 7{,}626\cdot10^{1}\cdot T + 1{,}272\cdot10^{-2}\cdot T^{2} - 2{,}274\cdot10^{-6}\cdot T^{3}$

t (s)	T (K)
0	293,0
100	294,2
250	296,0
500	299,0
750	302,0
1000	305,0
1500	311,0
2000	317,0
1500	311,0
2000	317,0
2500	323,0
3000	328,9
3600	336,1
5000	352,7
10000	411,5



Beraz, 1 orduren buruan, 336,1 K izatera heldu da.

6. GAIA

MUGIMENDU KANTITATEAREN TRANSFERENTZIA. JARIAGAIEN JARIOA

Industria kimikoan, materia egoera solido, likido zein gas-egoeran egon daiteke. Hala ere, solidoekin lan egitea garestiagoa, zikinagoa eta nekezagoa izaten denez, ohikoa izaten da gas eta likido eran lan egitea. Likido- zein gas-egoeran dagoen materia leku batetik beste batera eramateko (erreaktoretik destilagailura, tangatik erreaktorera eta abar), hodiak erabiltzen dira.

Egoera solidoan dagoen gorputzari indar tangentziala egiten zaionean (indar ebakitzaileak), oso indar handia behar da materia deformatu edo apurtzeko, solidoak barne-kohesio handia daukalako. Likido eta gasetan, ordea, indar tangentzial txiki batekin materiaren deformazioa sortzen da. Egoera horietan, barne-kohesio txikiagoa dauka materiak.

Jariatzeko joera duen eta ingurunearen forma hartzen duen substantzia ***jariagaia*** da, eta likido- zein gas-egoeran egon daiteke. Jariagai baten mugimendua edo fluxua ***jarioa*** da. Jariagaien jarioa aztertzen duen zientziaren alorra ***jariagaien mekanika*** da, eta jarioan zeharreko abiadurak eta indarrak aztertzen ditu.

Industrian, sistemak egoera geldikor zein ez-geldikorrekoak izan daitezke, baina hodien barnetik doan jariagai baten jarioak egoera geldikorra hartzeko oso denbora laburra behar izaten duenez, egoera geldikorrean dihardutela onar daiteke. Horregatik, egoera geldikorreko jarioa aztertuko da.

6.1 JARIO MOTAK: SAILKAPENA

Jario motak hainbat irizpideren arabera sailkatu daitezke. Ondoren, hiru irizpideren araberako sailkapena egingo da:

<u>*Ingurunearen arabera*</u>

1. Barne-jarioa: jarioa ingurune baten barrukoa denean (hodi baten barrukoa, adibidez).
2. Kanpo-jarioa: jariagaiak gorputz solidoa inguratzen duenean. Horrelakoa da hegazkin baten inguruko airearen jarioa, edo ingeniaritza kimikoan hainbeste erabiltzen diren ohantze finko eta fluidoa.

<u>*Konprimigarritasunaren arabera*</u>

1. Jario konprimiezina: jariagaiaren bolumen-elementu baten dentsitatea presioaren araberakoa ez denean.
2. Jario konprimigarria: jariagaiaren bolumen-elementuaren dentsitatea presioarekin aldatzen denean.

Konprimigarritasuna neurtzeko, ***elastikotasun-zenbakia*** (*E*) definitzen da:

$$\Delta P = E \cdot \left(\frac{\Delta \rho}{\rho_0} \right)_T \tag{6.1}$$

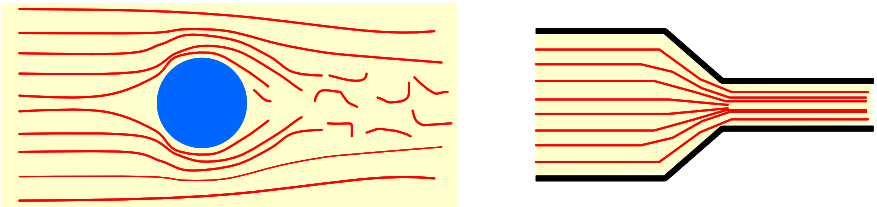
Likidoentzako $E \approx 10^4$ atm ordenakoa da; gasentzakoa, berriz, 1 atm ordenakoa da. Horregatik, giro-presioan likidoen jarioa konprimiezintzat hartzen da. Gasen jarioa ere konprimiezintzat har daiteke Mach zenbakia (Ma = v/c; v jarioaren abiadura, eta c jariagaiaren muinean dagoen soinuaren abiadura izanik) << 1 bada, baina Ma handitzen den heinean, jarioa konprimigarri bihurtzen da. Industria kimikoan, Ma << 1 erabiltzen dira gehienbat (v < 150 m/s), eta, horregatik, aurrerantzean jario konprimiezinak azalduko dira.

Marruskaduraren arabera

1. Jario ideala: marruskadurarik ez duen jarioa. Benetan ez da gertatzen, baina ikerketa teorikoan erabiltzen da.
2. Jario likatsua (edo benetakoa): jarioak marruskaduraz energia galtzen duenean. Benetako jarioak horrelakoak dira.

6.2 JARIOAREN IRUDIKAPENA: KORRONTE-LERROAK ETA IBILBIDE-LERROAK

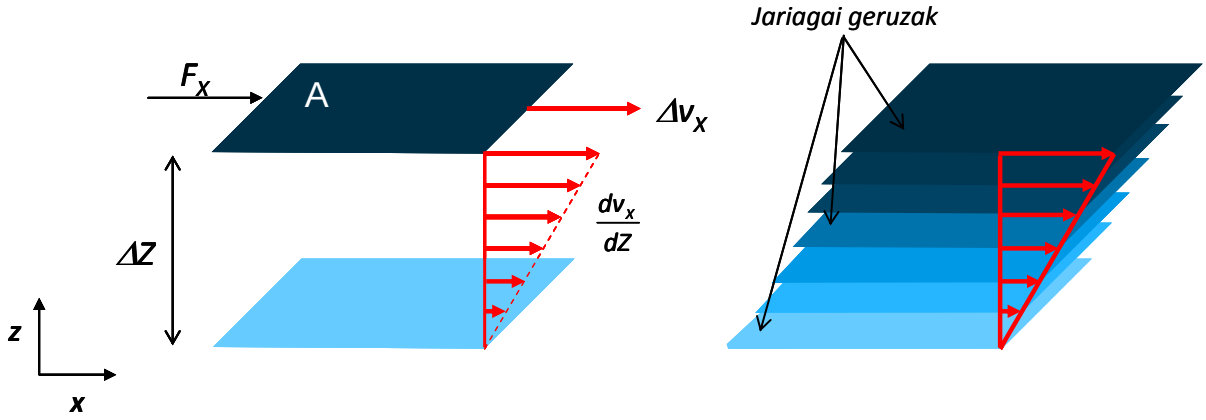
Jariagai baten jarioaren ibilbidea adierazteko, korronte-lerroak eta ibilbide-lerroak erabiltzen dira. Lehenak une batean jarioaren abiaduraren ukitzaileak diren lerroen gune geometrikoa dira. Ondorioz, korronte-lerroek ezin dute elkar gurutzatu. Ibilbide-lerroak masa gabeko jariagai-partikulak jarraitzen duen ibilbidea adierazten du, eta elkar gurutza dezakete. Egoera geldikorrean, bi lerro motak bat datoz. 6.1 irudian adierazten dira jarioaren irudikapenaren adibideak.



6.1 irudia. Esfera bat inguratzen duen jarioaren eta hodi barruko estugune baten barneko jarioaren korronte-lerroak.

6.3 MUGIMENDU KANTITATEAREN GARRAIO MOLEKULARRA: LIKATASUNA

Demagun bata bestetik ΔZ distantziara banatuak dauden A azalerako bi jariagai-xafla paralelo ditugula (likido zein gasa) (ikusi 6.2 irudia). Beheko jariagai-xafla geldirik badago, goiko xafla Δv_x abiadura erlatiboarekin X norabidean eskuinera mugitzeko, F_X indarra egin behar zaio xaflari, X norabidean baita ere. Jariagai-xafla, plano baten dauden molekulek osatzen duten xafla da.



6.2 irudia. Newton-en likatasun-legearen eratorpena.

Goiko jariagai-xaflari egin behar zaion indarra xaflen azaleraren (A), xaflen arteko distantziaren (ΔZ) eta X norabideko abiaduraren (Δv_x) araberakoa da. Indar hori bi jariagai-xaflen arteko marruskadura gainditzeko adinakoa da (beraz, jariagaiak egiten duen indarrak zeinu negatiboa dauka):

$$F_X = \mu \cdot A \cdot \frac{\Delta v_X}{\Delta Z} \quad (6.2)$$ [1]

$$\frac{F_X}{A} = \tau_X = \mu \frac{\Delta v_X}{\Delta Z} \quad (6.3)$$

Bi jariagai-xaflak elkarrengandik oso hurbil badaude:

$$\frac{F_X}{A} = \tau_X = \mu \cdot \frac{dv_X}{dZ} \quad (6.4)$$

Adierazpen horri Newton-en likatasun-legea deritzo. τ_X tentsio-ebakitzaile izenaz ezagutzen da, eta jariagai-xaflari azalera unitateko jarioaren norabidean egin behar zaion indarra adierazten du. Ekuazio horretan, μ proportzionaltasun-konstantea azaltzen da.

μ biskositatea edo ***likatasuna*** da. Likatasuna jariagaien propietate fisikoa da, eta jarioari jariagaiak berak egiten dion barne-erresistentzia da. Likatasuna jariagaiaren barne-kohesioaren adierazlea da. Horregatik, jariakortasuna 1/μ-ren araberakoa dela esan daiteke.

Likatasunak [μ] = $M \cdot L^{-1} \cdot t^{-1}$ dimentsioa du. Unitate erabiliena ***poise*** da (P), g/cm·s. Hala ere, unitate handiegia denez, jariagai gehienentzat cP erabiltzen da (1 cP = 10^{-2} P).

Likido-egoeran, molekulak elkarrekiko gertuago daudenez gasean baino, elkarreragin eta kohesio-indar handiagoa dute, eta, ondorioz, likatasun handiagoa.

Likatasuna tenperaturaren araberako propietatea da. Oro har, tenperatura handitzean, txikitu egiten da likidoen likatasuna; handitu, berriz, gasen likatasuna. Bien kasuan, gasen eta likidoen teoria molekularrak ematen du likatasuna kalkulatzeko bidea, baina adierazpen enpiriko hauek ondo doitzen dituzte datu esperimentalak.

Likidoen likatasuna:

$$\mu = A \cdot e^{\frac{B}{T}} \quad (6.5)$$

A eta B osagai bakoitzaren konstanteak izanik.

Gasen likatasuna:

$$\mu = \frac{A \cdot T^{3/2}}{T + B} \quad (6.6)$$

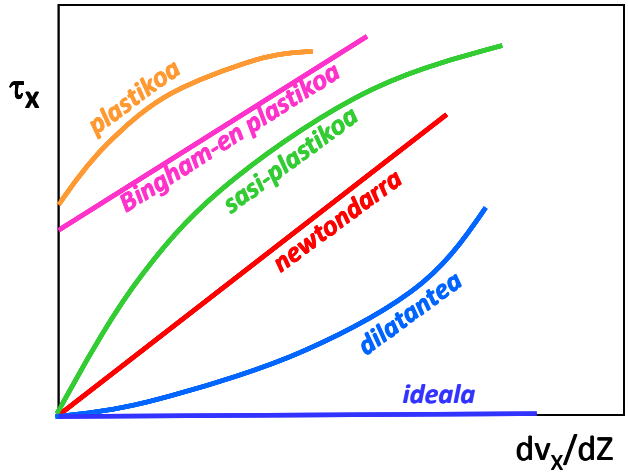
A eta B osagai bakoitzaren konstanteak izanik.

Gainazal solidoen inguruan jariagai-xaflak eta aldameneko jariagai-xaflak abiadura desberdinean mugitzen direnez[2], jariagaien jarioan tentsio-ebakitzaileak agertzen dira. Gainazal solidoarekin kontaktuan dagoen jariagaiak, haren abiadura dauka. Gainazal solidotik oso aldenduta dagoen jarioaren kasuan, ordea, jo daiteke abiadura berdinarekin mugitzen direla ; beraz, ez dute horrelako gradienterik jasaten (xaflen arteko abiadura erlatiboa zero da). Horregatik, hodien barruko jarioan edo kanpo-jarioan, horma solidoen eragina nabarmena izanik, jariagaiak bere buruari egiten dion barne-erresistentzia gainditu behar du. 6.2 irudiari erreparatuz, goiko xaflatik beheko xaflara gradientea dagoenez, bi

[1] Liburu gehienetan jariagaiak jasaten duen marruskadura erabiltzen delako, $F_X = -\mu \cdot A \cdot \frac{\Delta v_X}{\Delta Z}$ idazten da.

[2] Muga-geruza hidrodinamikoa azaltzean sakonago ikusiko da (6.6 atala).

muturreko xaflen arteko jariagai-xafletan abiadura-gradientea (dv_x/dZ) edo profila garatzen da.



6.3 irudia. Tentsio-ebakitzailea abiadura-gradientearen funtzioan: jariagai motak.

Newton-en legea betetzen duen jariagaia ***jariagai newtondarra*** da (ikusi 6.3 irudia). Horren arabera, jariagaiak jarioari egiten dion erresistentzia konstantea da abiadura-tarte osoan, hau da, ez da abiadura-gradientearen araberakoa. Horrelakoak dira gas eta likido gehientsuenak, eta gai honetan horrelako jariagaiak aztertuko dira.

Jariagai sasiplastikoak abiadura-gradientea handiagotzen den heinean jariorako erresistentzia baxuagoa du (lerroaren malda apaldu egiten da, hots, likatasuna txikitu egin da). Horrelakoak dira hainbat koloideren esekidurak eta polimeroen disoluzioak. ***Jariagai dilatagarriak*** abiadura handitu ahala erresistentzia handiagoa jartzen dio jarioari. Horrelakoak dira arto-irinaren esekidura eta harearen ur-esekidura. Bestalde, hortz-orea edo maionesa bezalako emultsioek tentsio-ebakitzaile minimo bat behar dute jarioa hasteko, eta behin jarioa hasita, likatasun konstantea daukate. Horrelako jariagaiak ***Bingham-en plastikoak*** dira. ***Jariagai plastikoek*** ere tentsio-ebakitzaile minimoa behar dute jarioa hasteko, eta, behin jarioa hasita, abiadura handitzean, likatasuna txikitu egiten dute.

Ohartu gaitezen jariagai idealean likatasuna zero izango litzatekeela, eta jarioari ez liokeela inolako eragozpenik jarriko.

Modu berean, denboraren arabera likatasuna aldatu egin daiteke. Denborarekin likatasun txikiagoa daukaten jariagaiak tixotropiko deitzen dira (hortz-orea, adibidez), eta denborarekin likatasuna handitzen duten jariagaiei erreopektiko deritze (igeltsu-orea, adibidez).

6.1 adibidea

Bi xafla solido paraleloren artean 10 cP-ko likatasuneko jariagai newtondarra dago. Goiko xafla 1 m/s-ko abiaduraz mugitzen da beheko xaflarekiko, eskuinerantz. Bi xaflak 10 cm-ko distantziara badaude, kalkula dezagun garatzen den abiadura-gradientea.

Ebazpena

Jariagai newtondarra bada, bi xaflen artean dagoen tentsio ebakitzailea (azalera unitateko marruskadura-indarra) hau da (SI unitatetan):

$$\tau_X = -\mu \cdot \frac{dv_X}{dZ} = -\mu \cdot \frac{\Delta v_X}{\Delta Z} = -10 \cdot 10^{-3} \cdot \frac{1}{0{,}1} = -0{,}1 \; N/m^2$$

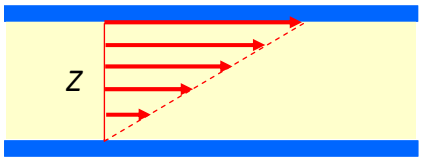
Ekuazioan zeinu negatiboa erabili da, marruskadura adierazteko. Ekuazioa integratzen bada:

$$dv_X = -\frac{\tau_X}{\mu}\cdot dZ = \frac{0,1}{10^{-2}}\cdot dZ \quad ; \quad \int_0^{v_X} dv_X = 10\cdot\int_0^{Z} dZ$$

Integrala ebaztean, jariagaiaren abiadura kalkulatuko da Z batzuetan:

Z (m)	0	0,01	0,02	0,04	0,06	0,08	0,1
v_x (m/s)	0	10^{-1}	$2\cdot10^{-1}$	$4\cdot10^{-1}$	$6\cdot10^{-1}$	$8\cdot10^{-1}$	1

Eskuineko irudian abiadura-profila marraztu da.



6.4 JARIAGAIEN PROPIETATEAK

Hona hemen ingeniaritza kimikoan garrantzia duten jariagaien propietate fisikoak (SI unitatetan adierazita).

6.4.1 Dentsitatea (ρ)

Substantziaren bolumen unitateko masa kantitatea da. $[\rho] = M\cdot L^{-3}$ da, eta SI sistemako unitatea kg/m^3 da. $1/\rho$-ri bolumen espezifiko deritzo.

6.4.2 Grabitate espezifikoa (ω)

Jariagai baten grabitate espezifikoa jariagaiaren dentsitatearen eta tenperatura finkatuan urak duen dentsitatearen arteko erlazioa da; ω dimentsiogabea da, beraz.

6.4.3 Pisu espezifikoa (γ)

Bolumen unitateko pisua da: $\gamma = \rho\cdot g$; non g grabitatearen azelerazioa baita. Oinarrizko magnitudetzat M, L eta t hartzen badira $[\gamma] = M\cdot L^{-4}\cdot t^{2}$ da.

6.4.4 Likatasuna (μ)

Jariagaiak jariatzeko bere buruari egiten dion erresistentzia, molekulen arteko kohesio-indarrak eta elkarrekintzek sortua. $[\mu] = M\cdot L^{-1}\cdot t^{-1}$; dimentsioduna.

6.4.5 Likatasun zinematikoa (ν)

Likatasunaren eta dentsitatearen arteko erlazioa, $\nu = \mu/\rho$. Bere dimentsioa $[\nu] = L^{2}\cdot t^{-1}$ da.

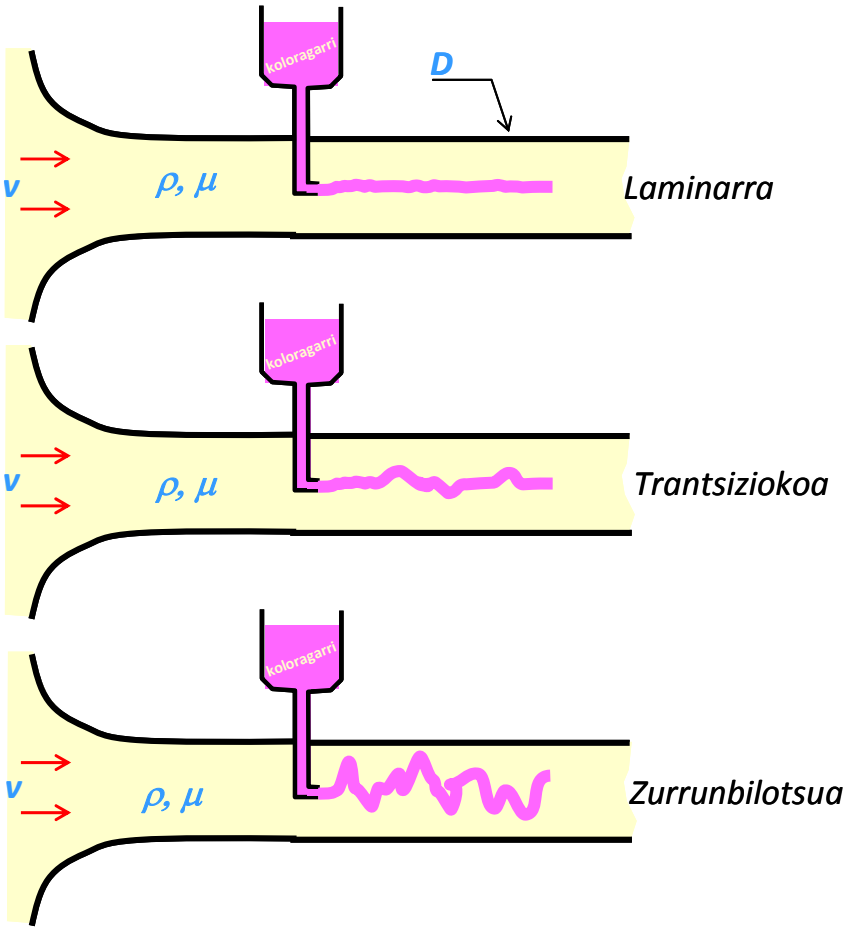
6.1 taulan agertzen dira ohiko substantzia batzuen propietateak 15 ºC-an eta 1 atm-an neurtuak.

6.1 taula. 15 ºC-an eta 1 atm-an neurtutako propietate fisikoak.

	ρ (kg/m^3)	γ (N/m^3)	ω	μ (kg/sm)	ν (m^2/s)
Ura	1.000	9.814	1	114	$1,14\cdot10^{-6}$
Hg	13.546	132.943	13,5	1,552	$1,145\cdot10^{-4}$
Airea	1,23	12,07	$1,2\cdot10^{-3}$	1,78	$1,46\cdot10^{-5}$
Parafina-olioa	800	7851	0,8	1,90	$2,375\cdot10^{-3}$

6.5 LIKATASUNAREN ERAGINA JARIAGAIEN JARIOAN: REYNOLDS-EN SAIAKUNTZA

Jariagaiaren jarioan likatasunak duen garrantzia aztertzeko, 6.4 irudian azaltzen den saiakuntza egin zuen Osborne Reynolds-ek 1883 urtean. *D* barne-diametroko beirazko hodi baten barnetik jariagai bat igarotzen da; hodiko puntu batean, tinta koloratzailea gehitzen zaio, eta hodian barrena tintak duen ibilbidearen jarraipena egiten da.



6.4 irudia. Reynolds-en saiakuntzan lortutako jario motak.

Jario mota zehazteko, dimentsio gabeko Re (Reynolds) zenbakia erabiltzen da:

$$\mathrm{Re} = \frac{D \cdot v \cdot \rho}{\mu} \tag{6.7}$$

Jarioaren indar zinetikoaren eta likatasunaren ondoriozko marruskadura-indarren arteko erlazioa adierazten du Reynolds zenbakiak.

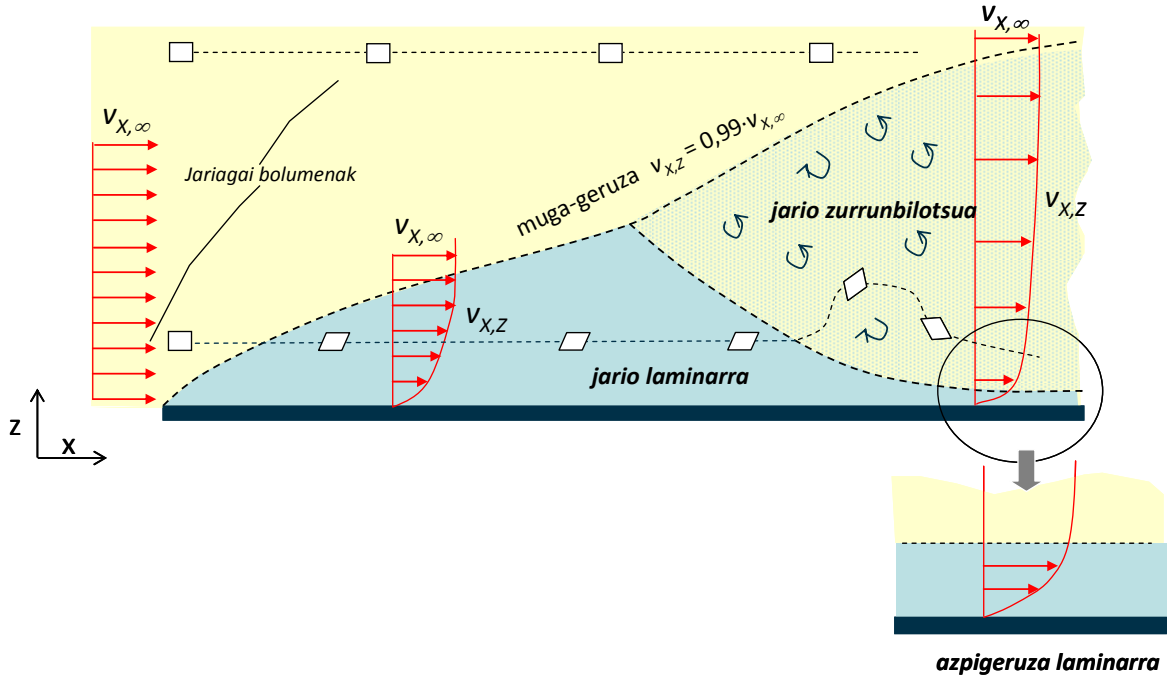
Re zenbakiaren balio baxuko jarioan (likatasun handia) tintak bere bideari jarraitzen dio, jariagaiarekin nahastu gabe. Jario mota horren eredua elkar nahastu gabe zirkulatzen duten jariagai-xafla zentrokidez osatutako jario ordenatua da. Jario mota horri jario laminar edo xaflakor deritzo, eta gutxi gorabehera Re < 2.100 ingururaino betetzen da.

Re zenbakia handitzen den heinean, tintaren eta jariagaiaren arteko nahastea hasten da, baina oraindik ez da hein handian gertatzen. Re balio altuetara heltzean (Re > 10^4 gutxi gorabehera, hodiaren arabera), berriz, tintaren eta jariagaiaren arteko nahastea osoa da, eta zurrunbiloak agertzen dira, hau da, jarioa guztiz kaotiko bihurtzen da. Jario mota horretan,

jarioaren xafla zentrokideen arteko nahastea agertzen da, eta zurrunbiloak osatzen dira. Horregatik, jario mota horri ***zurrunbilotsu*** deritzo.

6.6 MUGA-GERUZA HIDRODINAMIKOA

Gainazal solido baten inguruko jariagai baten jarioan, jarioarekiko perpendikularra den norabidean abiadura-gradientea sortzen da, jariagaiaren likatasuna dela eta. Gainazal solidoa ukitzen duen jariagaia geldirik dagoen bitartean, bere gainaldean zirkulatzen duen jariagai-xaflari erresistentzia egiten dio, eta haren abiadura gutxitzen du. Eragin hori hedatu egiten da xaflaz xafla, eta gainazal solidotik aldentzen den neurrian eragina txikiagoa da. Gainazal solidotik oso aldenduta dagoen jariagaiaren abiaduran eragina oso txikia izango da, jariagaiaren abiadura $v_{X,\infty}$ izanik, jario libreko abiadura, alegia. Beraz, abiadura-profila solidoaren inguruko eremu batean besterik ez da garatuko, ***Muga-geruza hidrodinamikoa*** deitzen den eremuan, alegia. Eremu horretatik kanpo, jariagaiaren abiadura konstantea da jarioarekiko perpendikularra den norabidean ($dv_{X,\infty}/dZ = 0$), eta jario ideal gisa igarotzen da (likatasunaren eragina arbuiagarria baita) (ikusi 6.5 irudia). Muga-geruza hidrodinamikoaren lodiera, jariagaiaren abiadura jario libreko abiaduraren %99 denekoa da. Muga-geruzatik kanpo doan jariagaiak tentsio-ebakitzailerik pairatzen ez duenez deformatu gabe doan bitartean, muga-geruzatik doan jariagaia deformatu egiten da, gainazal solidotik aldenduago dagoen aldea gainazal solidotik gertuago dagoen aldea baino azkarrago mugitzen baita.



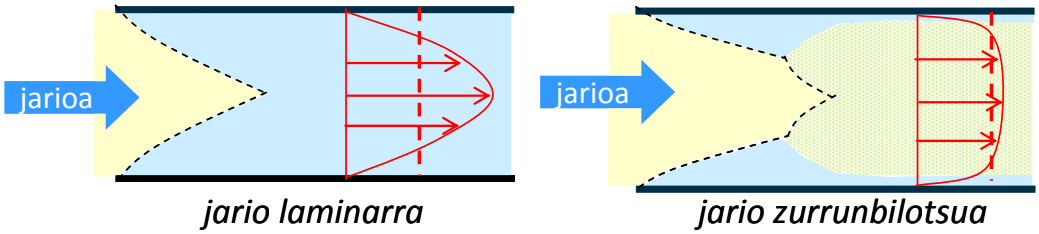
6.5 irudia. Gainazal lauaren inguruko muga-geruza hidrodinamikoaren garapena.

Muga-geruzaren lodiera gainazal solidoa ukitzen duen eremuaren luzeraren arabera handitzen da. Lehenengo eremuan jario laminarra garatzen da, abiadura-gradiente nabarmenarekin ($dv_{X,\infty}/dZ \neq 0$). Solidoaren gainazalean aurrera joan ahala, muga-geruzaren lodiera handitu egiten da, eta puntu batean, muga-geruza bitan banatzen da. Batean, jario zurrunbilotsua dago (abiadura-gradiente oso txikia), eta gainazal solidoa ukitzen duen jariagaiaren eremu estuan, azpigeruza laminarra garatzen da —abiadura-gradiente handia dago—. Azpigeruza laminarrak solidoa dagoen bitartean irauten du, eta abiadura-gradiente

handiena hor gertatzen da. Ingurune zurrunbilotsuan jariagaien arteko nahastea gertatzen da.

6.6.1 Abiadura-profila hodi zilindrikoetan

Hodi zilindrikoak luzera osoan ingurune solidoa duenez, muga-geruza garatuko da zilindroaren inguruan. Muga-geruzaren lodierak hodiaren erradio osoa hartzen duenean (egoera horri jario garatua deritzo), bi egoera gerta daitezke: (a) jario zurrunbilotsua izatea, (b) jario laminarra izatea. Lehenengo kasuan, abiadura-profila ia laua da erradio osoan, hormen inguruan izan ezik. Jario laminarrean, berriz, erradio osoan gradientea garatzen denez, abiadura-profil parabolikoa garatzen da (ikusi 6.6 irudia).



6.6 irudia. Abiadura-profilak hodi zilindrikoen barruan: jario laminarra eta jario zurrunbilotsua. Lerro ez-jarraituak batez besteko abiadura adierazten du. (Ilundutako eremuak jario laminarra adierazten du).

<u>Jario laminarrean:</u>

$$\frac{v(r)}{v_{r=0}} = 1 - \left(\frac{r}{R}\right)^2 \tag{6.8}$$

Abiadura-profila garatzen da R erradioko hodian. Hodiaren ardatzean (r = 0) abiadura maximoa dago, $v_{r=0} = 2 \cdot v$ (v jariagaiaren batez besteko abiadura izanik).

<u>Jario zurrunbilotsuan:</u>

$$\frac{v(r)}{v_{r=0}} = \left(1 - \frac{r}{R}\right)^{\frac{1}{n}} \qquad n = f(\mathrm{Re}) \tag{6.9}$$

Re > $2 \cdot 10^4$ denean, $n \approx 6$, eta Re > 10^6 denean, $n \approx 9$; eta $v/v_{r=0} \approx 0{,}85$ da.

6.6 irudiaren eta adierazpen horien arabera, jario zurrunbilotsuan abiadura ia uniformea da erradio osoan, azpigeruza laminarrean izan ezik. Jario laminarrean, ordea, erradio osoan nabari da abiadura-gradientea.

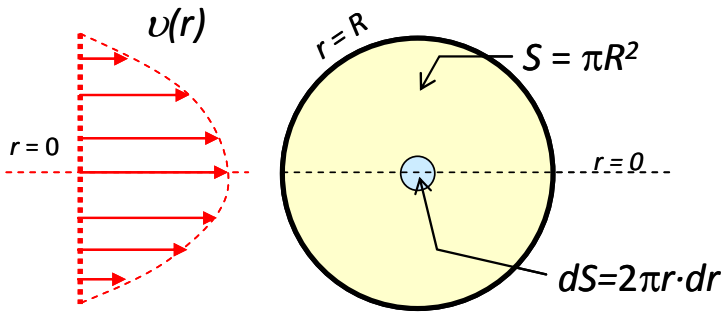
6.6.2 Jariagaiaren batez besteko abiadura hodi zilindrikoetan

Hodi baten barruko jarioaren abiadura ez da uniformea erradio guztian, ardatzean maximoa baita eta hodiaren hormetan zero balioa baitu. Hori dela eta, jariagaiaren batezbesteko abiadura (v) kalkulatzeko, erradio desberdinetako abiadura puntualak (υ) erabiliko dira (azken horiek Pitot-en neurgailuaz neur daitezke, 6.13 atalean ikusiko den bezala).

Definizioz, S azalerako gainazala zeharkatzen duen emari masikoa ($\dot{m}$) gainazalean duen batezbesteko abiaduraren (v), jariagaiaren dentsitatearen (ρ) eta azaleraren arteko biderkadura da; emari bolumetrikoa (Q), berriz, abiaduraren eta azaleraren arteko biderkadura:

$$\dot{m} = \rho \cdot S \cdot v \quad ; \quad Q = S \cdot v \tag{6.10}$$

6.11 ekuazioan agertzen da nola kalkulatzen den batez besteko abiadura.



6.7 irudia. Hodi zirkularretik doan jariagaiaren batez besteko abiaduraren kalkulua.

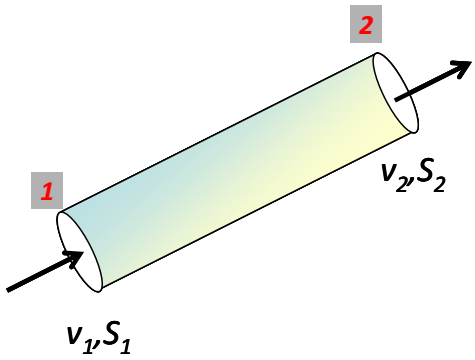
$$v = \frac{Q}{S} = \frac{\int_0^R \upsilon(r) \cdot 2\pi r \cdot dr}{\int_0^R 2\pi r \cdot dr} = \frac{\int_0^R \upsilon(r) \cdot 2\pi r \cdot dr}{S} \tag{6.11}$$

6.7 HODI BARRUKO JARIOA

Hodi barruko jariagaien jarioan masaren iraupenaren legea, energiaren iraupenaren legea eta mugimendu kantitatearen iraupenaren legea betetzen dira. Energia osoaren iraupenaren legea betetzeaz gain, sistema gehienetan termino entalpikoak arbuiagarriak direnez termino mekanikoekin alderatuta, energia mekanikoaren iraupenaren legea erabiltzen da. Ondoren azalduko dira jariagaien jarioko oinarrizko ekuazioak:

6.7.1 Masaren iraupenaren legea

Hodi baten barnetik doan eta erreakzio kimikorik jasaten ez duen jariagai batentzat hau betetzen da egoera geldikorrean:



$$\dot{m}_1 = \dot{m}_2 \tag{6.12}$$

$$\rho_1 \cdot v_1 \cdot S_1 = \rho_2 \cdot v_2 \cdot S_2 \tag{6.13}$$

Jariagaiaren dentsitatea aldatzen ez bada (sistema isotermo eta konprimiezina bada):

$$v_1 \cdot S_1 = v_2 \cdot S_2 \tag{6.14}$$

$$Q_1 = Q_2 \tag{6.15}$$

6.7.2 Mugimendu kantitatearen iraupenaren legea

Newton-en bigarren legearen arabera, jariagai baten gain eragiten duten indarren baturak azelerazioa (edo mugimendu kantitatearen aldaketa) eragiten du.

$$\sum_{Guztiak} F = \frac{d}{dt}(m \cdot v) \tag{6.16}$$

Mugimendu kantitatearen iraupen legearen aplikazioa irakasgai honen helburuetatik kanpo gelditzen delako ez da gehiago sakonduko. Hala ere 7.3 atalean erabilpenaren adibide bat ematen da.

6.7.3 Energia mekanikoaren iraupenaren legea, jario konprimiezinetan: Bernouilli-ren ekuazioa

5. gaian ikusi den bezala, energia osoaren iraupenaren legea beteko da (5.1 ekuazioa). Hemen, jario konprimiezinaren legea azalduko da (likidoen kasua, batik bat). Erreakzio kimikorik gertatzen ez bada eta ingurunearekin bero-trukerik ez badu, hau betetzen da egoera geldikorrean (energia/masa eran):

$$\left(h + \frac{v_e^2}{2} + gZ\right)_1 - \left(h + \frac{v_e^2}{2} + gZ\right)_2 - w = 0 \tag{6.17}$$

$h = u + \dfrac{P}{\rho}$ denez,

$$\left(u + \frac{P}{\rho} + \frac{v_e^2}{2} + gZ\right)_1 - \left(u + \frac{P}{\rho} + \frac{v_e^2}{2} + gZ\right)_2 - w = 0 \tag{6.18}$$

Sisteman tenperatura-aldaketarik ez badago ($\Delta u = 0$):

$$\left(\frac{P}{\rho} + \frac{v_e^2}{2} + gZ\right)_1 - \left(\frac{P}{\rho} + \frac{v_e^2}{2} + gZ\right)_2 - w = 0 \tag{6.19}$$

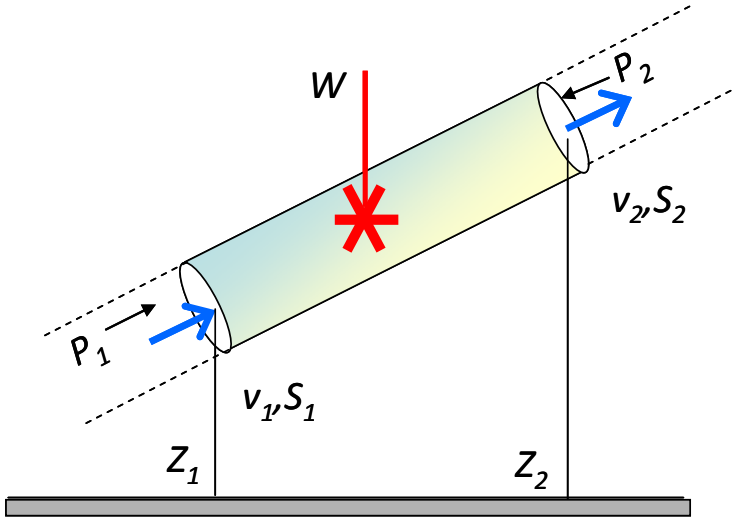
(P/ρ) terminoak presio-energia zenbatzen du. 6.8 irudian ikusten denez, $(P/\rho)_1$ terminoa atzetik datorren jariagaiak 1 gainazalean egiten duen presioa da; $(P/\rho)_2$ terminoak, berriz, 2 gainazalaren aurretik dagoen jariagaiak gainazala jarioaren aurkako noranzkoan zeharkatzeko egiten duen presioa adierazten du.

Iraupenaren legeko adierazpenean energia zinetikoaren terminoan v_e energiaren batezbesteko abiadura eraginkorra agertzen da, eta ez dator bat masaren batez besteko abiadurarekin (v).

$$v_e^2 = \frac{v^2}{\alpha} \tag{6.20}$$

Eta α zuzenketa-faktorea da, jario motaren (Re) araberakoa:

- Jario laminarrean, $\alpha = 0{,}5$
- Jario guztiz zurrunbilotsuan, $\alpha \approx 1$



6.8 irudia. Energia mekanikoaren iraupenaren legea.

Energia mekanikoaren iraupenaren ekuazioko terminoak grabitatearen azelerazioaz (g) zatitzean luzera-dimentsioa hartzen dute (jariagaiaren dentsitateko zutabe-luzera; SI sisteman, metroak dira). Sistemak ingurunearekin lanik trukatuko ez balu (w = 0):

$$\left(\frac{P}{\rho g}+\frac{v^2}{2g\alpha}+Z\right)_1=\left(\frac{P}{\rho g}+\frac{v^2}{2g\alpha}+Z\right)_2 \qquad (6.21)$$

Adierazpen hori jariagai idealen Bernouilli-ren ekuazioa da, eta energia mekanikoaren iraupenaren legea azaltzen du, hau da, presio-energia, energia zinetikoa eta energia potentzialaren batura konstantea dela hodiko puntu guztietan. Hau da, energia mekanikoen arteko trukea gertatzen da; izan ere, bat handitzen bada, beste bien batura txikitu egiten da.

Bi gainazalen artean, ponparen batekin lana (W) ematen bazaio:

$$\left(\frac{P}{\rho g}+\frac{v^2}{2g\alpha}+Z\right)_1+W=\left(\frac{P}{\rho g}+\frac{v^2}{2g\alpha}+Z\right)_2 \qquad (6.22)$$

Orain arte, jariagaiak marruskaduraz galdu duen energia ez da kontuan hartu (hau da, μ = 0 izan da); baina beste terminoekiko garrantzitsua izan daiteke, jariagaia likatsua bada bereziki, muga-geruza azaldu denean ikusi den bezala. Jariagaiak bi gainazalen arteko ibilbidean marruskaduraz galdu duen energia adierazten du h_f terminoak, jariagaiaren luzera-unitatetan.

$$\left(\frac{P}{\rho g}+\frac{v^2}{2g\alpha}+Z\right)_1+W=\left(\frac{P}{\rho g}+\frac{v^2}{2g\alpha}+Z\right)_2+h_f \qquad (6.23)$$

Adierazpen hori Bernouilli-ren ekuazioa da, jario konprimiezinentzat erabilgarria. Ibilbidean turbina baten bidez jariagaiak lan bat egingo balu, energia hori (-W) gisa zenbatuko litzateke.

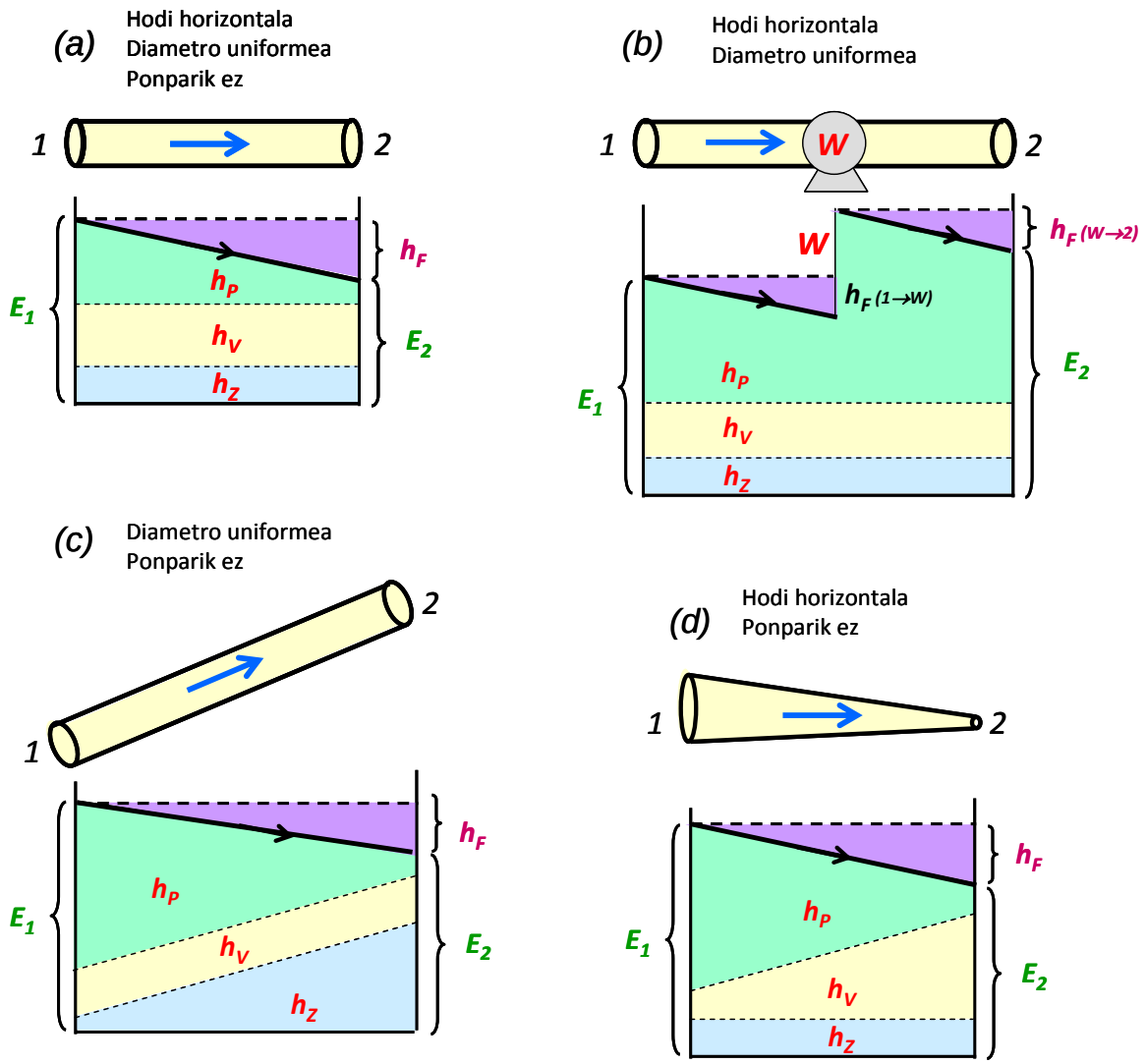
Hainbat kasuren energia mekanikoaren banaketa agertzen da 6.8 irudian. Termino mekanikoak izendatzeko, h_P (presio-energia edo presio-karga), h_V (energia zinetikoa edo karga zinetikoa) eta h_Z (energia potentziala edo altuera-karga) erabiliko dira, eta E (jariagaiaren energia mekanikoa) hiru terminoen batura izango da; h_f karga-galera gisa ere ezagutzen da.

Marruskaduraz galtzen duen energia, 6.9(a) irudian ikusten den bezala, presio-energia da (hodia horizontala eta diametro uniformeduna delako). Hodian aurrera doan heinean, presio

txikiagoa izango du jariagaiak. Horregatik, bi punturen artean marruskaduraz galtzen den energia neurtzeko, bi puntuetan presioa neurtzen da eta diferentzia kalkulatzen da.

Ponpa baten eragina ikusteko, 6.9(b) irudia aztertuko da. Hodia horizontala eta diametro uniformekoa bada, hodiko puntu guztietan karga zinetikoa eta altuera-karga mantendu egiten dira; ondorioz, ponpa bat ezartzean jariagaiak presio eran irabazten du energia. Hau da, ponpak jariagaiari presioa emateko erabiltzen dira, eta, ondoren, presio hori beste energia mekaniko batera eraldatu daiteke. Adibidez, tanga bateko jariagaia gorago dagoen beste tanga batera lekualdatzeko ponpa erabiltzean, jariagaiari presioa ematen zaio, eta hori altuera (energia potentzial) bihurtzen da.

6.9(c) edo 6.9(d) irudietan, marruskaduraz energia mekanikoa galtzeaz gain, 2 puntuan oso presio-karga baxua dago (batak altuera irabazi duelako eta besteak abiadura irabazi duelako), eta hoditik doan likidoaren lurrun-presioa berdintzen badu, likidoa irakiten hasiko da. Egoera hori saihestu beharrekoa da, jarioa eten egin baitaiteke.



6.9 irudia. Energia mekanikoaren iraupenaren legea. (a) marruskaduraz galtzen duen energia, (b) ponparen eragina, (c) altuera-diferentziaren eragina, (d) diametroa aldatzearen eragina.

Ponparen potentzia teorikoa (Pot_T) kalkulatzeko, Bernouilli-ren ekuazioan jariagaiari ematen zaion energia mekanikoa (*W*) lortu ondoren, ekuazio hau erabiliko da:

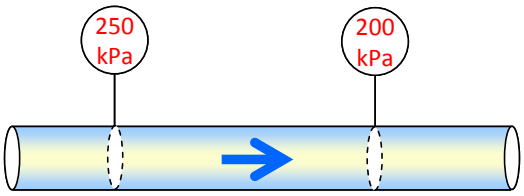
$$Pot_T(J/s) = Q \cdot W \cdot g \cdot \rho \qquad (6.24)$$

Ponpen lanerako etekina (η) % 100 baino txikiagoa denez (ikusi 6.14 atala), potentzia (Pot_B) teorikoa baino potentzia handiagoko ponpa erabili beharko da sisteman (etekina frakzio eran emanda):

$$Pot_B = \frac{Pot_T}{\eta} \qquad (6.25)$$

6.1 adibidea

Hodi horizontal baten barnetik ρ = 850 kg/m^3 dentsitateko eta μ = 1,5 cP likatasuneko jariagaia doa. 1 m-z banatutako manometroekin, A eta B gainazaletan 250 eta 200 kPa-eko presioa neurtu da, hurrenez hurren. Kalkula dezagun jariagaiak A eta B puntuen artean marruskaduraz galtzen duen energia.



Ebazpena

Hodia horizontala denez eta diametro uniformea duenez, energia potentziala eta energia zinetikoa ez dira aldatzen. Ponparik ez dagoenez, W = 0 da. Ondorioz, marruskaduraz galtzen duen energia presio-galeraren berdina da:

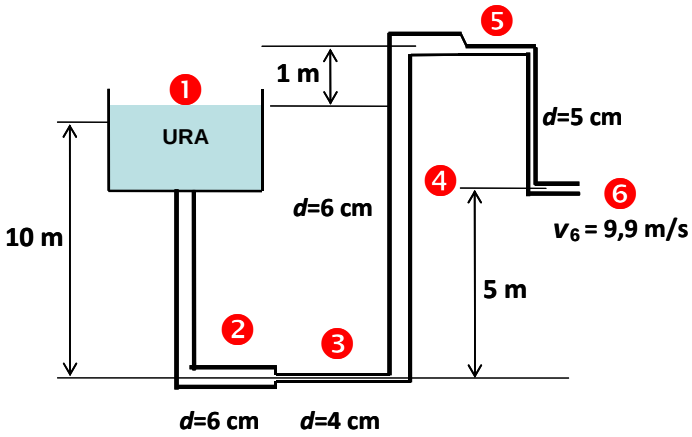
$$\left(\frac{P_1}{\rho g}\right) - \left(\frac{P_2}{\rho g}\right) = h_f$$

$$\left(\frac{250 \cdot 10^3}{850 \cdot 9,8}(m)\right) - \left(\frac{200 \cdot 10^3}{850 \cdot 9,8}(m)\right) = 6\,m(\,jariagai\,)$$

Marruskaduraz galtzen den energia 850 kg/m^3-ko dentsitatea duen jariagaiaren 6 m da, edo 50 kPa.

6.2 adibidea

Irudiko tangako jariagaia hodi batetik husten da. Kalkula ditzagun tangaren huste-emaria eta irudian agertzen diren puntuetan energia mekanikoaren terminoek dituzten balioak, jariagai-metrotan adierazita, baldin eta ❻ puntuan jariagaiak 9,9 m/s-ko batez besteko abiadura badu.



Jariagaia ideala dela onar daiteke (marruskaduraz ez du energiarik galtzen, eta α = 1).
Datua: jariagaiaren dentsitatea = 1.000 kg/m^3

Ebazpena

	❶	❷	❸	❹	❺	❻
D, m	↑	0,06	0,04	0,06	0,05	0,05
S, m^2 ($\cdot 10^{-3}$)	↑↑	2,827	1,257	2,827	1,964	1,964
P, Pa ($\cdot 10^3$)	101,3	175,8	80,75	126,8	42,53	101,3
v, m/s	~0	6,875	15,47	6,875	9,9	9,9
$h_P = P/\rho g$, m	10,34	17,94	8,24	12,94	4,34	10,34
$h_Z = Z$, m	10	0	0	5	11	5
$h_V = v^2/2g\alpha$, m	~0	2,4	12,1	2,4	5	5
E_{osoa}, m	20,34	20,34	20,34	20,34	20,34	20,34

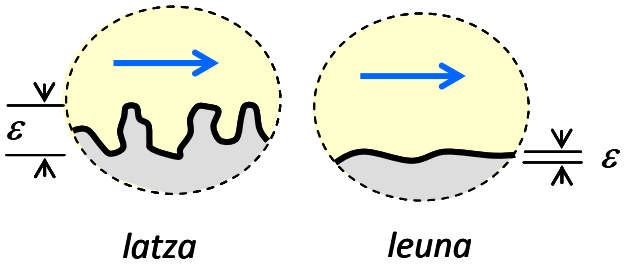
❻ puntuan batez besteko abiadura ezaguna denez, $Q = v_6 \cdot S_6$ = 0,01944 m^3/s.
❶ eta ❻ puntuak atmosferara zabalik daudenez, presio atmosferikoan daude (101,3$\cdot 10^3$ Pa). Bestalde, ❶ tangaren gainazalaren diametroa hodietako diametroen aldean oso handia denez, hango abiadura baztergarria da. Puntu guztietako energia mekaniko osoa 20,34 jariagai-metro da, presio, abiadura edo altuera erako banaketa desberdina izan arren.

6.8 MARRUSKADURAREN ONDORIOZ GERTATZEN DEN ENERGIA-GALERA

Hodi barruko jariagaien jarioan marruskaduraz galtzen den energiaren terminoa (h_f) agertzen da Bernouilli-ren ekuazioan. Hodi barruko jarioak marruskaduraz galtzen duen energia aldagai hauen funtzioa da:

$$h_f = \frac{\Delta P}{\rho g} = f(v, D, \mu, \rho, L, g, \varepsilon) \tag{6.26}$$

ε hodiaren zimurdura da, gainazalaren leuntasunaren adierazlea; alegia, [ε] = L da. 6.10 irudian ikus daiteke hodi latzaren eta hodi leunaren arteko diferentzia.



6.10 irudia. Hodiaren zimurdura.

Dimentsio-analisiaren bidez, hodi zuzenarentzat adierazpen hau lortzen da:

$$h_f = \frac{\Delta P}{\rho g} = f \cdot \frac{L}{D} \cdot \frac{v^2}{2g} \tag{6.27}$$

f Darcy-ren ***marruskadura-zenbakia*** da, dimentsiogabea. Oro har, f marruskadura-zenbakia Re zenbakiaren eta zimurdura erlatiboaren (ε/D) araberakoa da:

$$f = f\left(\frac{\varepsilon}{D}, \mathrm{Re}\right) \tag{6.28}$$

Jario laminarrean (Re < 2.100), zimurdura erlatiboaren eragina baztergarria da, eta Re zenbakiaren alderantziz proportzionala da. Jario guztiz zurrunbilotsuan, ordea, Re zenbakiaren eragina arbuiagarria da, eta ε/D zenbakiaren eragina besterik ez du. Tarteko jarioan, bi aldagaien eragina nabari da. Jarioa guztiz zurrunbilotsu bihurtzen den Re zenbakia aldakorra da ε/D-ren arabera, eta Moody-ren grafikoan (6.10 irudia) marra ez-jarraitu batez bereizita azaltzen da. 6.2 taulan, zenbait materialen zimurduraren balioak adierazten dira.

Jario laminarra (Re < 2.100):	$f = 64/\mathrm{Re}$
Tarteko jarioa:	$f = f(\varepsilon/D,\mathrm{Re})$
Jario guztiz zurrunbilotsua:	$f = f(\varepsilon/D)$

Colebrook-en ekuazioaren bidez (6.29 ekuazioa), esperimentalki lortutako marruskadura-zenbakiaren balioak doitzen dira hainbat Re eta ε/D baliotarako, tarteko jariorako eta jario zurrunbilotsurako. Hau da 2100 < Re < 10^8 tarterako Colebrook-en ekuazio baliagarria:

$$\left(\frac{1}{\sqrt{f}}\right) = -2\cdot\log_{10}\left(\frac{\varepsilon/D}{3{,}7} + \frac{2{,}51}{\mathrm{Re}\sqrt{f}}\right) \tag{6.29}$$

Moody-ren grafikoan (6.10 irudia), f-ren kalkulu grafikoa egin daiteke (ohartu gaitezen koordenatu logaritmikoak dauzkala).

Halaber, hainbat kasutarako interesgarria da Karman-en grafikoa erabiltzea (6.11 irudia); abszisan Karman-en zenbakia $\left(\mathrm{Re}\sqrt{f}\right)$ adierazten da. Karman-en zenbakiaren propietate garrantzitsuena abiadurarekiko mendekotasunik eza da.

$$\mathrm{Re}\sqrt{f} = \frac{D\rho}{\mu}\sqrt{2g\cdot h_f\cdot\left(\frac{D}{L}\right)} \tag{6.30}$$

Jariagaiaren batez besteko abiadura ezezaguna den baina marruskaduraz galtzen duen energia ezaguna denerako mugatzen da Karman-en zenbakiaren eta grafikoaren erabilera, eta abiadura kalkulatzeko erabiltzen da.

6.2 Taula. Hodien eraikuntza-material batzuen zimurdurak.

Materiala	ε (mm)
Altzairu erematxeduna	0,9-9,0
Zementua	0,3-3,0
Burdinurtua	0,26
Burdina galvanizatua	0,15
Altzairu komertziala	0,045
Beira	~0

6.8.1 Hodi ez-zirkularrak

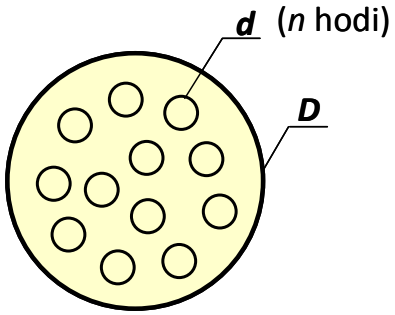
Hodiaren sekzioa zirkularra ez bada, ***diametro baliokidea*** erabiltzen da ε/D, Re, h_f eta $\left(\mathrm{Re}\sqrt{f}\right)$ aldagaiak kalkulatzeko. Diametro baliokidea erradio hidraulikoaren araberakoa da:

$$D_{BAL} = 4\cdot r_H \tag{6.31}$$

Erradio hidraulikoa ondokoa izanik:

$$r_H = \frac{\text{bustitako sekzioa}}{\text{bustitako perimetroa}} \tag{6.32}$$

Adibidez, hodi/ingurune moduko bero-trukagailuetan *D* diametroko ingurunearen barruan *n* hoditxoz osatutako hodi sorta badago, bakoitzaren kanpo-diametroa *d* izanik, ingurunetik doan jariagaiaren diametro baliokidea honela kalkulatzen da:



$$\begin{cases} r_H = \dfrac{\frac{\pi}{4}D^2 - n\frac{\pi}{4}d^2}{\pi D + n\pi d} = \dfrac{\frac{1}{4}\left(D^2 - n{\cdot}d^2\right)}{D + n{\cdot}d} \\ D_{BAL} = 4r_H = \dfrac{\left(D^2 - n{\cdot}d^2\right)}{\left(D + n{\cdot}d\right)} \end{cases}$$

6.8.2 Marruskaduraren ondorioz jario laminarrean gertatzen den energia-galera

Jario laminarrean f = 64/Re denez, hodi zuzenaren h_f-ren adierazpen orokorrean ordezkatzen bada:

$$\Delta P = \frac{32\mu{\cdot}v{\cdot}L}{D^2} \tag{6.33}$$

Ekuazio hori Hagen-Poiseuille-ren adierazpena da, eta, hodi barruko jario laminarrean, esan nahi du jariagaiak galtzen duen presioa batezbesteko abiadurarekiko proportzionala dela.

6.8.3 Marruskaduraren ondorioz jario guztiz zurrunbilotsuan gertatzen den energia-galera

Jarioa guztiz zurrunbilotsua denean f = f(ε/D) denez eta Re zenbakiarekiko mendekotasunik ez duenez, hodi zuzena zeharkatzean, jariagaiak energia hau galtzen du marruskaduraz:

$$h_f = \frac{\Delta P}{\rho g} = f{\cdot}\frac{L}{D}{\cdot}\frac{v^2}{2g} \tag{6.34}$$

Adierazpen horren arabera, jario guztiz zurrunbilotsua denean, jariagaiak galtzen duen presioa batezbesteko abiaduraren karratuarekiko proportzionala da.

6.9 BERNOUILLI-REN EKUAZIOAREN APLIKAZIOA HODITERIEN DISEINUAN

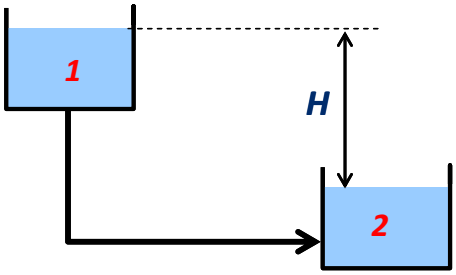
Hoditeria-sistemen diseinuan, hainbat egoera agertzen dira. Ondoren azalduko dira adibideen bidez.

6.9.1 Energia-galeraren kalkulua

Marruskaduraz galtzen den energia kalkulatzeko, emaria eta hodiaren ezaugarriak jakin behar dira.

6.3 adibidea

Tanga batek bere edukia beste tanga batera husten du 100 m-ko luzera baliokidea eta 0,05 m-ko barne-diametroko altzairuzko hodi baten bidez. Hodian 10 l/s-ko emaria neurtu bada, kalkula dezagun bi tangen mailen arteko diferentzia. Jariagaia ura da (ρ = 1.000 kg/m^3 eta μ = 1 cP) eta altzairuaren zimurdura $\varepsilon = 4{,}5{\cdot}10^{-5}$ m da.



Ebazpena

Bernouilli-ren ekuazioa 1 eta 2 tangen gainazalen artean aplikatuko da. Bi gainazalak atmosferara zabalik egonik, bietan presio bera dago. Tangen azalera handia izanik, bietan energia zinetikoa baztergarria da. Erreferentzia gisa Z_2 = 0 hartuko da energia potentziala zenbatzeko orduan. Ponparik ez dagoenez, W = 0. Orduan, Bernouilli-ren ekuazioa hau da:

$$H = h_f$$

Ekuazio hori honela interpreta daiteke: jariagaiak 1 gainazalean duen energia erabilgarria (H) lekuz aldatzeko erabili da (marruskadura gainditzeko, alegia).

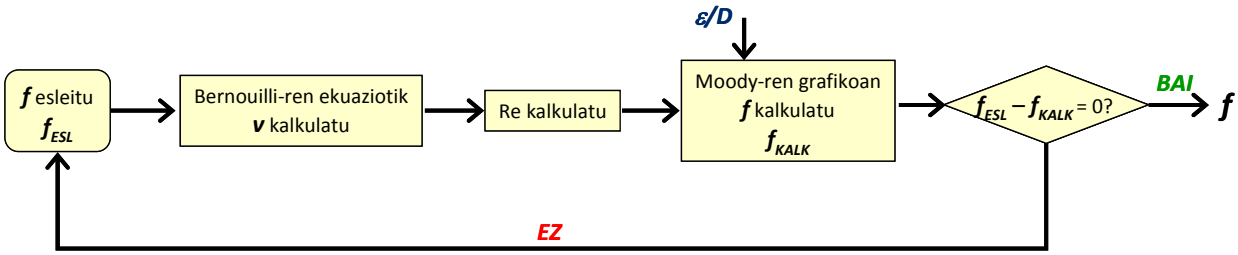
Hodiaren barne-diametroa 0,1 m bada, $S = 1{,}964 \cdot 10^{-3}$ m^2 da.
$v = Q/S = 5{,}1$ m/s
$\mathrm{Re} = 0{,}05 \cdot 5{,}1 \cdot 10^3 / 10^{-3} = 2{,}55 \cdot 10^5$
$\varepsilon/D = 0{,}0009$
Bi balio horiekin Moody-ren grafikoan begiratuz, $f \approx 0{,}0205$ lortzen da.

$h_f = \dfrac{\Delta P}{\rho g} = f \cdot \dfrac{L}{D} \cdot \dfrac{v^2}{2g} = 0{,}025 \cdot \left(\dfrac{100}{0{,}05}\right) \cdot \dfrac{5{,}1^2}{2 \cdot 9{,}8} = 54{,}4\ m$ denez, bi tangen mailen arteko diferentzia 54,4 m da.

6.9.2 Hoditik doan emariaren kalkulua

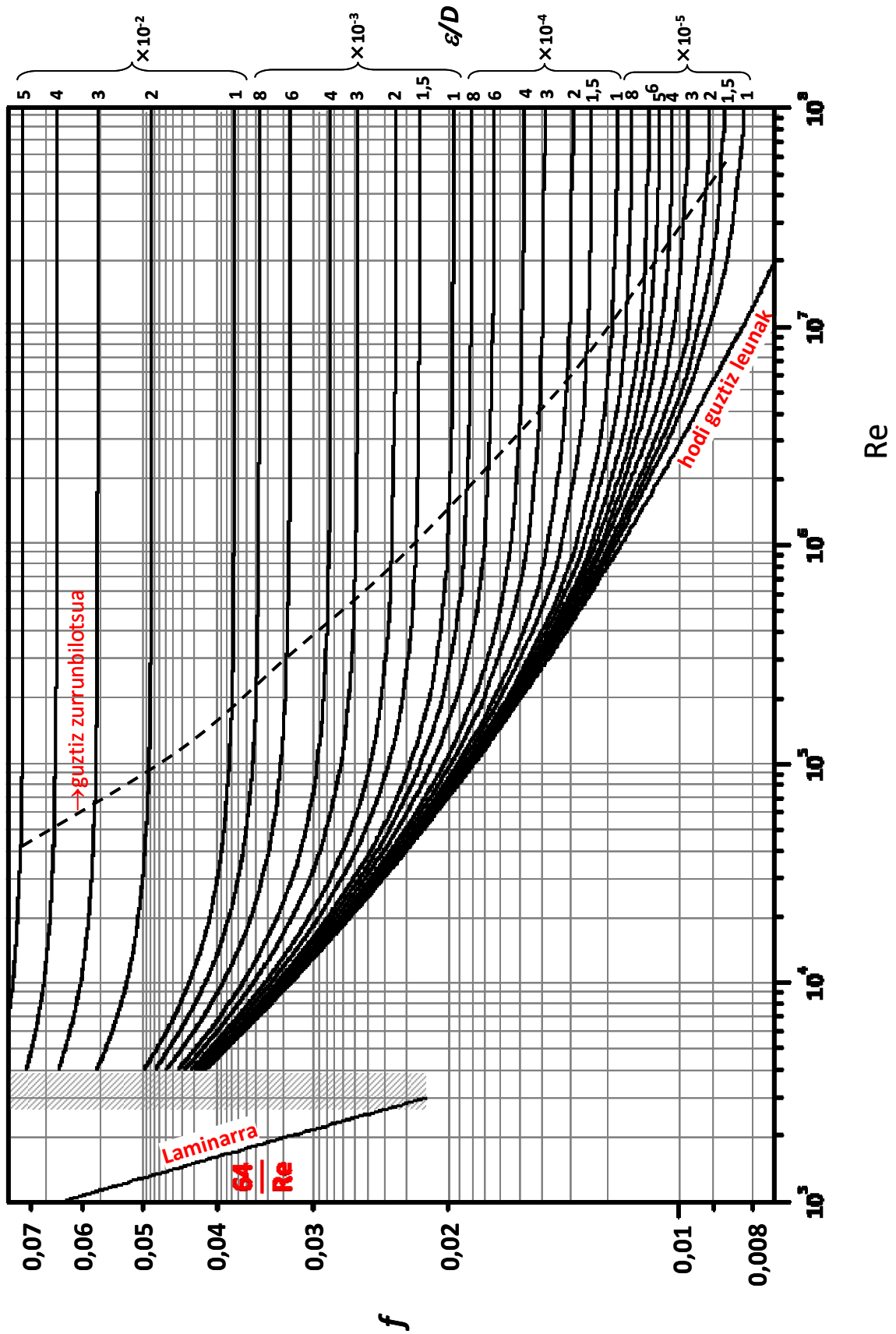
Hodiaren diametroa jakina izanik, bi egoera agertzen dira: (a) marruskaduraz zenbat energia galtzen den jakina izatea, (b) marruskaduraz zenbat energia galtzen den ez jakitea.

Lehenengo kasuan, Karman-en zenbakia Colebrook-en ekuazioan edo Karman-en grafikoan erabil daiteke $\left(\dfrac{1}{\sqrt{f}}\right)$ kalkulatu ahal izateko.

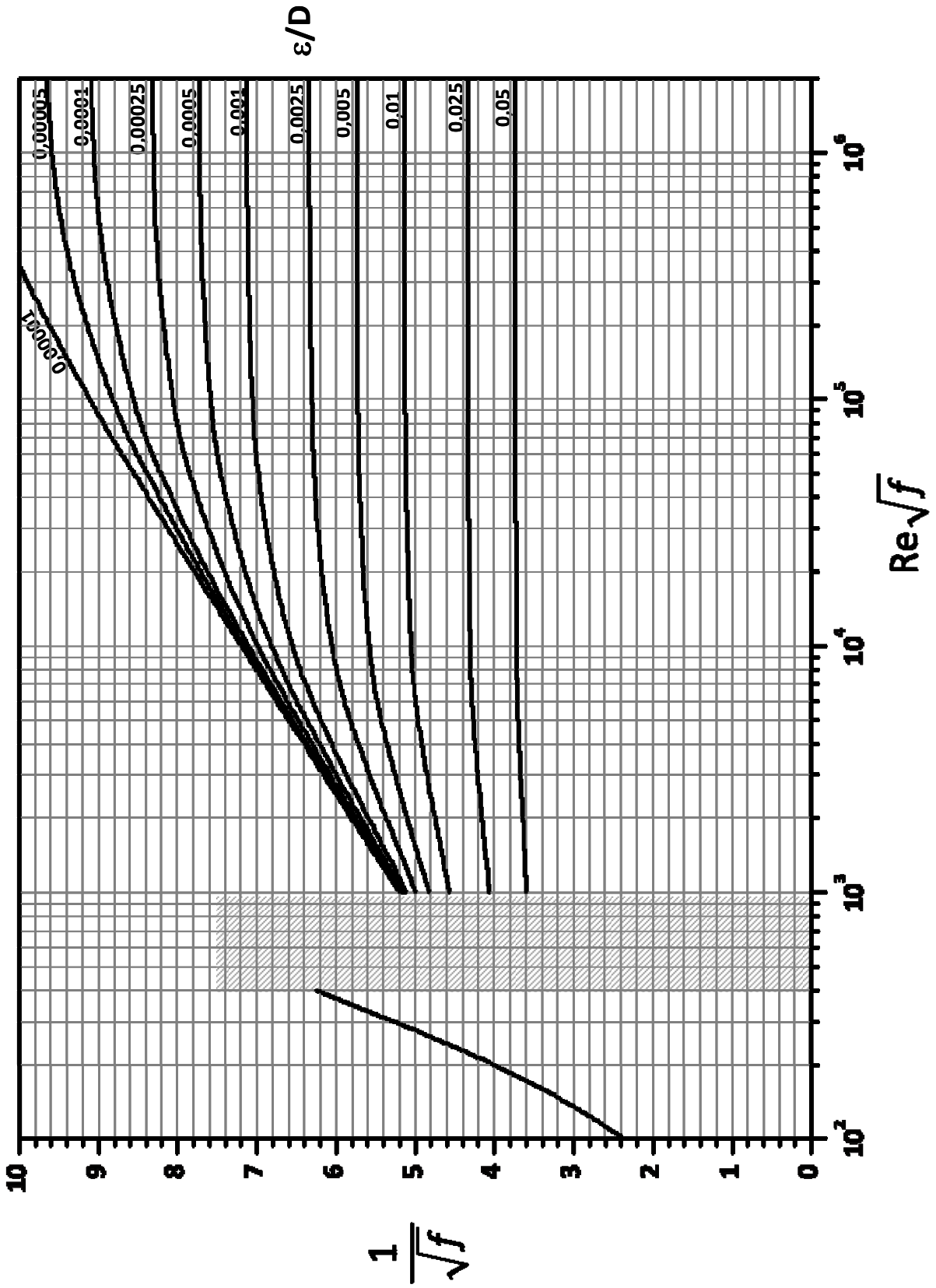


h_f jakina ez bada (edo Bernouilli-ren ekuazioarekin ezin badaiteke jakin), iterazio-kalkulua egin behar da, 6.11 irudian azaltzen den prozeduraz:

6.11 irudia. f kalkulatzeko iterazio-prozedura.



6.12 irudia. Moody-ren grafikoa.



6.13 irudia. Karman-en grafikoa.

6.4 adibidea

100 m-ko luzerako eta 0,075 m-ko barne-diametroko altzairuzko hodi baten barnean urak zirkulatzean 6,6 m galtzen ditu marruskaduragatik. Kalkula ezazu hoditik doan uraren emaria.

Ebazpena

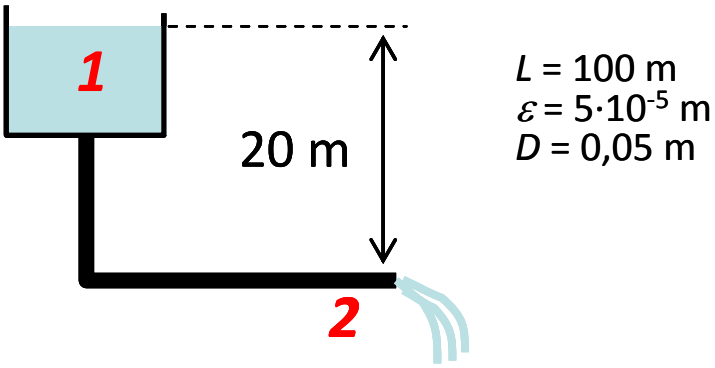
Karman-en zenbakia kalkulatuko da, marruskaduraz galtzen den energia jakina baita: $\left(\mathrm{Re}\sqrt{f}\right)$ = 2,34·10^4. Altzairuzko hodiarentzat ε/D = 6·10^{-4}.

Karman-en grafikoa erabiliz edo Colebrook-en ekuazioa erabiliz, $\left(\mathrm{Re}\sqrt{f}\right)$ ≈ 7,07.

Beraz, f = 0,02 izanik, v = 2,2 m/s lortzen da. Ondorioz, Q = 9,7 l/s-ko emaria du.

6.5 adibidea

Irudian agertzen den sistematik ρ = 750 kg/m^3 eta μ = 2·10^{-3} kg/ms propietateak dituen jariagaia doa. Kalkula dezagun zein den jariagaiaren huste-emaria.



Ebazpena

Sistema horretan, hau da Bernouilli-ren ekuazioa:

$$20 = \frac{v^2}{2g\alpha} + f\frac{L}{D}\frac{v^2}{2g} = \frac{v^2}{2g}\left(\frac{1}{\alpha} + f\frac{L}{D}\right)$$

Honela interpreta daiteke: 1 tangan duen energia erabilgarria (potentziala) 2 puntuan energia zinetikoa irabazteko eta lekuz aldatzeko erabili da.

Eragiketak eginez, eta α = 1 dela onartuta (bukaeran frogatu beharrekoa):

$$v = \sqrt{\frac{392}{1 + 2000 \cdot f}}$$

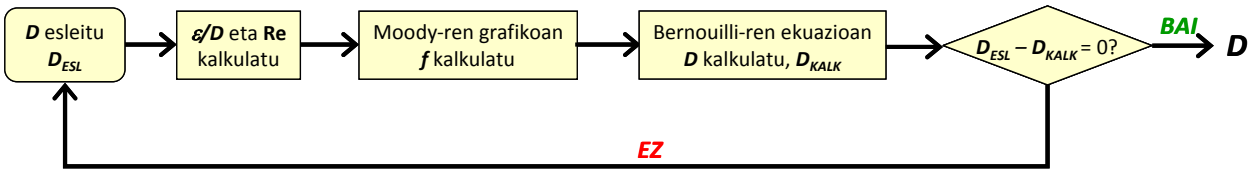
Taula honetan agertzen da ebazpenerako prozesuaren eboluzioa.

$f_{ESLEITUA}$	v (m/s) Bernouilli-ren ekuaziotik	Re	f_{KALK} Moody-ren grafikoan	% errorea
0,015	3,56	66675	0,0225	50
0,0225	2,92	54735	0,023	2,22
0,023	2,89	54149	0,023	~0

Sisteman hodi barruko batez besteko abiadura 2,89 m/s denez, Q = 5,7 l/s emaria dago. Re > 10^4 izanik, α = 1 hartzea onargarria da.

6.9.3 Gutxieneko diametroaren kalkulua

Q emaria garraiatzeko hodi-sistema diseinatu behar denean, hodiaren gutxieneko diametroa kalkulatu behar da, marruskaduraz galtzen den energia onargarria izan dadin. 6.14 irudian agertzen den iterazio-kalkuluaz ebazten da.



6.14 irudia. Diametroaren iterazio-kalkulurako prozedura.

6.6 adibidea

100 m-ko luzerako hodi batetik 20 l/s ur garraiatu behar da. Hodia altzairuzkoa da (ε = 4,5·10^{-5} m), eta marruskaduraz galtzen duen energia onargarria 7 m ur da. Kalkula dezagun hodiaren gutxieneko diametroa.

Ebazpena

$\varepsilon/D = 4{,}5\cdot10^{-5}/D$;
$v = Q\cdot4/(\pi D^2) = 0{,}0255/D^2$;
$\mathrm{Re} = 2{,}55\cdot10^{4}/D$

Bernouilli-ren ekuazioan ordezkatuz, ondoko adierazpena lortuko da:

$$h_f = 7 = f\cdot\frac{100}{D}\cdot\frac{\left(\frac{0{,}0255}{D^2}\right)^2}{2\cdot9{,}8}$$

Bertan *D* isolatuz:

$$D = 0{,}2163\cdot f^{1/5}$$

Taula honetan agertzen da iterazioaren eboluzioa.

D_{ESL} (m)	ε/D ($\cdot10^{-4}$)	v (m/s)	Re ($\cdot10^{6}$)	f Moody	D_{KALK} (m)	% errorea
0,05	9	10,2	10,0	0,019	0,098	95,811
0,098	4,59	2,66	2,655	0,0155	0,094	-4,083
0,094	4,79	2,89	2,886	0,0155	0,094	-0,001

9,4 cm-ko diametroko hodia erabili beharko litzateke.

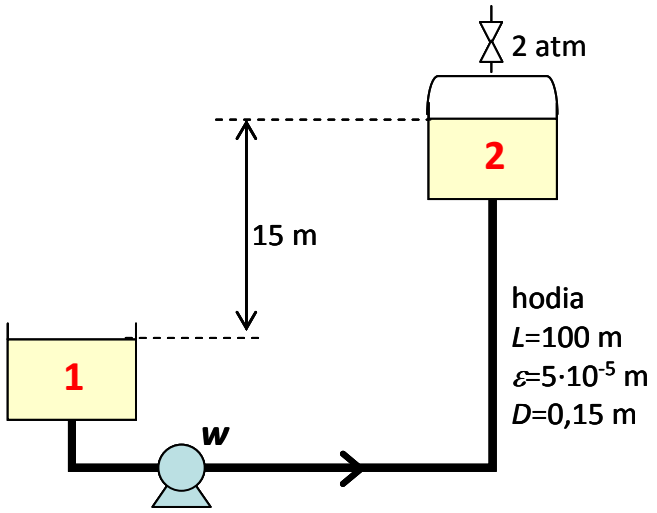
6.9.4 Ponparen potentziaren kalkulua

Jariagaiari energia emateko ponpak erabiltzen dira, jariagaiari presio-energia ematen baitzaio. Bernouilli-ren ekuazioan agertzen den *W* terminoak jariagaiak jasotzen duen energia adierazten du. Ponparen etekina % 100 baino baxuagoa denez, sisteman erabili beharreko ponparen potentziak Bernouilli-ren ekuazioan lortutakoa baino handiagoa izan beharko du.

$$Pot_B = \frac{Pot_T}{\eta} \qquad (6.35)$$

6.7 adibidea

Tanga bateko edukia (ura, ρ = 1.000 kg/m^3, μ = 1cP) bera baino 15 m gorago dagoen beste tanga batean husten da 100 m-ko luzera baliokidea eta 0,15 m-ko barne-diametroa dituen altzairuzko hodi baten bidez. 2 tangan 2 atmosferako presio absolutua dago. Hodian 50 l/s-ko emaria lortu nahi bada, kalkula dezagun ponpak zer potentzia izan behar duen, bere etekina % 75 bada.



Ebazpena

Hau da Bernouilli-ren ekuazioa 1 eta 2 tangen gainazalen artean ($\frac{P_2 - P_1}{\rho \cdot g} = 10{,}34\ m$ delako):

$$W = 25{,}34 + h_f$$

Ekuazioa honela interpreta daiteke: jariagaiak energia behar du 15 m igotzeko, presioa irabazteko (1 atm) eta lekuz aldatzeko.

Marruskaduraz galtzen duen energiaren kalkulua:
$\varepsilon/D = 3{,}33 \cdot 10^{-4}$;
v = 2,83 m/s;
Re = $4{,}25 \cdot 10^5$;

Moody-ren grafikoan $f \approx 0{,}016$ lortzen da.
h_f = 4,4 m
Ondorioz, W = 29,74 m

Ponpak behar duen potentzia teorikoa (6.24 ekuazioa):
Pot_T (J/s)=0,05(m^3/s)·29,74(m)·10^3(kg/m^3)·9,8(m/s^2) = 14,57·10^3 J/s

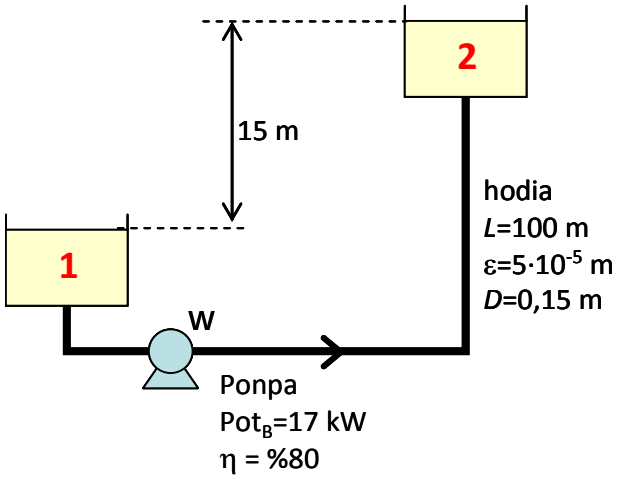
Sisteman jarriko den ponparen gutxieneko potentzia (6.35 ekuazioa):
Pot_B (J/s)= 14,57·10^3/0,75 =19,43·10^3 J/s potentziako ponpa erabili beharko litzateke.

6.9.5 Potentzia jakineko ponparen funtzionamendua

Potentzia eta etekin jakin bateko ponpak eragin desberdina du sistema bakoitzean, beste termino mekanikoen arabera. Horregatik, interesgarria da sistema ezagun batean ponpa jakin bat kokatuta dagoenean ponpak jariagaiaren gain zer eragin duen jakitea. Horrelako kalkuluak iteraziozkoak dira, lanaren terminoan eta marruskaduraz galtzen den energiaren terminoan v eta f ez baitira ezagutzen.

6.8 adibidea

Tanga bateko edukia (ura, ρ = 1.000 kg/m^3, μ = 1cP) bera baino 15 m gorago dagoen beste tanga batera lekuz aldatzeko, % 80ko etekinarekin diharduen 17 kW-eko potentziako ponpa erabili da. Kalkula dezagun lekuz aldatzen den uraren emaria.



Ebazpena

Bernouilli-ren ekuazioaren arabera, $W = 15 + h_f$.
Jariagaiak jaso behar duen energia mekanikoa ponparen benetako potentziaren eta etekinaren araberakoa da:

$$W = \frac{Pot_T}{Q \cdot \rho \cdot g} = \frac{Pot_B \cdot \eta}{Q \cdot \rho \cdot g}$$

Bernouilli-ren ekuazioan ordezkatzen bada, adierazpen hau lortzen da:

$$\frac{Pot_B \cdot \eta}{\rho \cdot g \cdot \frac{\pi}{4} \cdot D^2} = 15 + f \cdot \frac{L}{D} \cdot \frac{v^2}{2g}$$

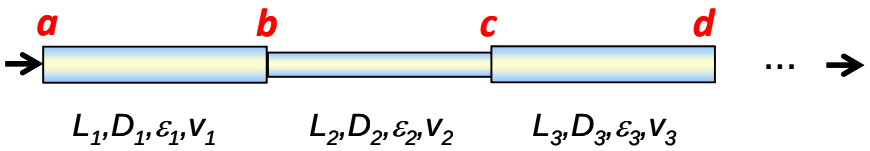
$$\frac{78,54}{v} = 15 + 34,01 \cdot f \cdot v^2$$

Ikusten den bezala, iterazio-kalkulua egiteko, 6.12 irudiko prozedura erabil daiteke. Taula honetan agertzen da iterazio-kalkuluaren eboluzioa.

f_{ESL}	v (m/s) Bernouilli	Re	f_{KALK}	% errorea
0,02	3,42	5,13·10^5	0,0152	24
0,0152	3,61	5,41·10^5	0,0155	-1,97
0,0155	3,60	5,39·10^5	0,0155	~0

Hau da, ponpa honek 63,6 l/s emaria ponpatzen du sistema horretan, 3,60 m/s abiaduraz.

6.9.6 Seriean jarritako hodien barnean marruskaduraren ondorioz galtzen den energia



6.15 irudia. Seriean jarritako hoditeria-sistema.

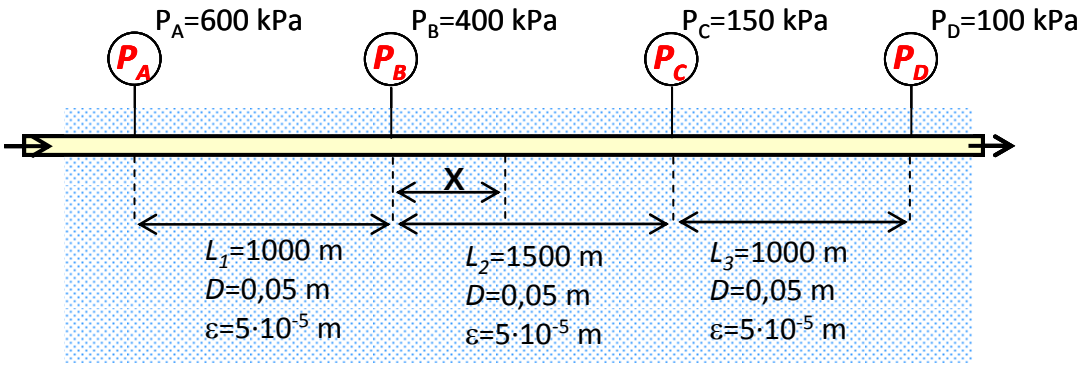
Egoera geldikorrean Q konstantea denez, $Q = v_i \cdot S_i$. N hodi sortaz osatutako sisteman:

$$h_{f,OSOA} = h_{f,1} + h_{f,2} + h_{f,3} + L = \sum_{i=1}^{N} h_{f,i} \qquad (6.36)$$

Hodien diametroak desberdinak badira, jariagaiaren batezbesteko abiadura desberdina da bakoitzean. Hodi bakoitzak bere marruskadura-zenbakia izango du. Sistema osoan zehar jariagaiak marruskaduraz galtzen duen energia hodi zati bakoitzean galtzen duenaren batura da.

6.7 adibidea

Lurpean horizontalki doan altzairuzko hodi batek ura darama, eta ihes-korronterik daukan ikusteko, jarioaren presioa neurtzen da lau puntutan (A, B, C eta D). AB eta CD tarteetan ihes-korronterik ez dagoela ikusten da. Kalkula ditzagun (a) AB eta CD tarteetako emariak, (b) ihes-korronterik egotekotan, korronte horren emaria, (c) ihesa non dagoen eta hango presioa zein den.



Ebazpena

Bernouilli-ren ekuazioa lehen eta hirugarren tarteetan aplikatzen bada (jariagai m-tan):

AB tartea: 20,4 = $h_{f,AB}$

CD tartea: 5,1 = $h_{f,AB}$

Karman-en zenbakiak kalkulatuko dira, Colebrook-en ekuaziotik $\left(\frac{1}{\sqrt{f}}\right)$ kalkulatzeko :

<u>AB tartea:</u>

$(\varepsilon/D)_{AB}$ = 0,001

$\left(\mathrm{Re}\sqrt{f}\right)_{AB}$ = $7{,}07 \cdot 10^3$

$\left(\frac{1}{\sqrt{f}}\right)$ = 6,408

f_{AB} = 0,02435

v_{AB} = 0,906 m/s eta Q_{AB} = 1,78 l/s

<u>CD tartea:</u>

$(\varepsilon/D)_{CD}$ = 0,001

$\left(\mathrm{Re}\sqrt{f}\right)_{CD}$ = $3{,}53 \cdot 10^3$

$\left(\frac{1}{\sqrt{f}}\right)$ = 6,016

f_{CD} = 0,02763
v_{AB} = 0,425 m/s eta Q_{AB} = 0,84 l/s

CD tarteko emaria AB tartekoa baino txikiagoa denez, BC tartean ihes-korrontea dago, 0,94 l/s-ko emarikoa.

BC tartea bitan banatuko da: lehenengo tartea X luzerakoa da, eta hortik emari osoa igarotzen da (1,78 l/s). Azken tartean, (1.500 – X) m luzerakoan, emaria 0,84 l/s da.
Bi azpitarteetan Bernouilli-ren ekuazioa ebatziz:

BX azpitartea: $40,8-\left(\frac{P_X}{\rho g}\right)=h_{f,BX}$

XC azpitartea: $\left(\frac{P_X}{\rho g}\right)-15,3=h_{f,XC}$

Bi ekuazioak batzen badira:

$$25,5 = hf_{BX} + hf_{XC}$$

$$h_{f,BX}=0,02435\left(\frac{X}{0,05}\right)\frac{0,906^2}{2\cdot 9,8}=0,02095\cdot X$$

$$h_{f,XC}=0,02763\left(\frac{1500-X}{0,05}\right)\frac{0,425^2}{2\cdot 9,8}=0,0050925\cdot(1500-X)$$

Ihes-korrontea B puntutik X= 1.168 m-ra dago.

6.9.7 Paraleloan kokatutako hodien barnean marruskaduraren ondorioz galtzen den energia

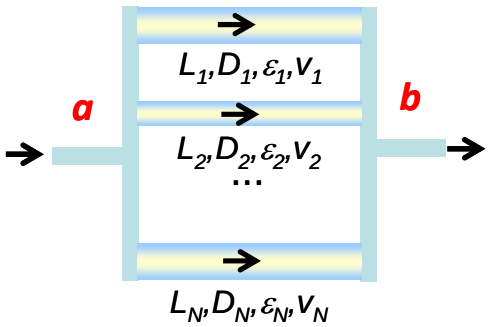
Hoditeria-sareen diseinuan ohikoa da paraleloan kokatutako hodiak izatea.

Paraleloan dauden hodien sisteman, marruskaduraz galtzen den energia osoa hodi bakoitzean galtzen denaren berdina da. Jariagaiaren emari osoa banatu egiten da adar guztietan karga-galera berdina izateko.

$$Q = Q_1 + Q_2 + \cdots + Q_N \tag{6.37}$$

N hodi sortaz osatutako sisteman:

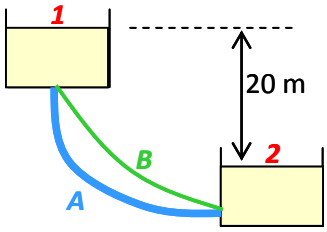
$$h_{f,OSOA}=h_{f,1}=h_{f,2}=L=h_{f,i}=L=h_{f,N} \tag{6.38}$$



6.16 irudia. Paraleloan kokatutako hoditeria-sarea.

6.8 adibidea

1 eta 2 tangen artean ura jariatzen da A eta B hodietatik (ρ = 1.000 kg/m^3, μ = 1 cP). Kalkula dezagun bi tangen artean lekuz aldatzen den uraren emaria.



A hodia:
L=30 m
D=0,075 m
ε =5·10^{-5} m

B hodia:
L=20 m
D=0,05 m
ε =2,5·10^{-5} m

Ebazpena

1 eta 2 tangen arteko jario osoa bi hodietako jarioen batura da. $Q = Q_A + Q_B$.
Bernouilli-ren ekuazioaren arabera (jariagai m-tan):

A hodia: 20 = $h_{f,A}$
B hodia; 20 = $h_{f,B}$

<u>A hodia</u>
ε/D = 6,67·10^{-4};
$\left(\mathrm{Re}\sqrt{f}\right)$ = 7,42·10^4; Colebrook-en ekuazioan ordezkatuz:

$$\left(\frac{1}{\sqrt{f}}\right) = 7{,}34.$$

v_A = 7,27 m/s;
Q_A = 32,1 l/s-ko emaria du.

<u>B hodia</u>
ε/D=5·10^{-4};
$\left(\mathrm{Re}\sqrt{f}\right)$ = 4,95·10^4; Colebrook-en ekuazioan ordezkatuz:

$$\left(\frac{1}{\sqrt{f}}\right) = 7{,}46.$$

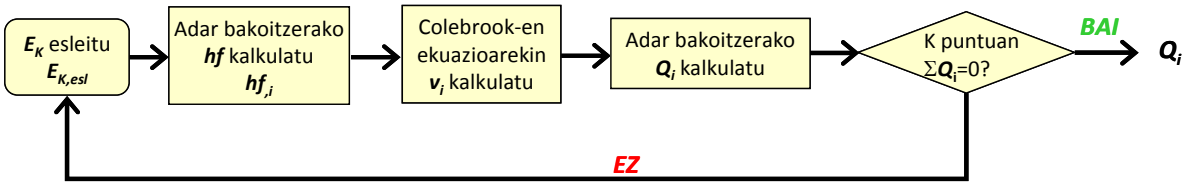
v_B = 7,39 m/s;
Q_B = 14,5 l/s-ko emaria du.

1 eta 2 tangen artean lekuz aldatzen den uraren emari osoa Q = 46,6 l/s da.

6.9.8 Hodi-sareen kalkulua

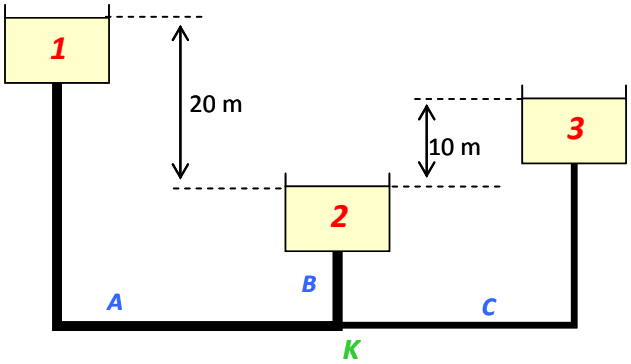
Hodi-sareen ebazpenean, komeni da adarkatze-puntuetako energia mekaniko osoa erabiltzea. Adarkatze-puntu bakoitzean (K), emarien baturak zero izan behar du. Iterazio-prozedura bati jarraitu behar zaio, 6.17 irudian azaltzen den moduan. K adarkatze-puntu bakoitzean baldintza hau bete behar da:

$$\Sigma Q_i = 0 \qquad (6.39)$$



6.17 irudia. Hodi-sareak kalkulatzeko iterazio-prozedura.

6.9 adibidea



A hodia	B hodia	C hodia
L=100 m	L=25 m	L=75 m
$\varepsilon=5\cdot10^{-5}$ m	$\varepsilon=5\cdot10^{-5}$ m	$\varepsilon=5\cdot10^{-5}$ m
D=0,05 m	D=0,075 m	D=0,1 m

Hiru tangaz osatutako sistemaren barnean ura doa. Kalkula dezagun tanga bakoitzaren huste- edo betetze-emaria.

Ebazpena

Egoera geldikorrean K puntura sartzen diren emarien batura eta handik irteten direnena berdinak dira. Hiru tangetako gainazalak aukeratuko dira Bernouilli-ren ekuazioan erabiltzeko; bestalde, hiru hodiek bat egiten duten K puntua ere aukeratuko da. Kalkula ditzagun 1, 2, 3 tangen gainazaletako eta K puntuko energia mekaniko erabilgarriak ($h_P + h_V + h_Z$).

Energia potentzialerako 2 tangaren maila $Z_2 = 0$ dela hartuko da. Presio atmosferikoa ur m-tan 10,34 m bada:

E_1 = 10,34 + 20 = 30,34 m
E_2 = 10,34 m
E_3 = 10,34 + 10 = 20,34 m

Hiru tangetako energiak aztertuta, argi dago 1 tanga hustu egingo dela eta 2 tanga bete egingo dela (kontuan izan jariagaia energia mekaniko altueneko gunetik baxueneko gunera doala). 3 tangan zer gertatzen den jakiteko, K puntuko energia mekanikoarekin konparatu beharko da.

K puntuko energia mekanikoa 10,34-30,34 m tartean egongo da, egoera geldikorrean. Taula honetan agertzen da ebazpenaren eboluzioa (K puntura sartzen den emaria > 0 eta K-tik irteten den emaria < 0 direla jotzen da).

Sistema horretan, Bernouilli-ren ekuazioaren adierazpenak hauek dira:

$$h_{f,A} = E_1 - E_K$$

$$h_{f,B} = E_K - E_2$$

$$h_{f,C} = E_3 - E_K \text{ edo } E_K - E_3$$

E_K (m)	$h_{f,A}$ (m)	$h_{f,B}$ (m)	$h_{f,C}$ (m)	Q_A (l/s)	Q_B (l/s)	Q_C (l/s)	ΣQ_i (l/s)
22	8,34	11,66	1,66	-3,76	+26,76	+11,76	+34,75
12	18,34	1,66	8,34	-5,68	+9,78	-27,32	-23,22
15	15,34	4,66	5,34	-5,18	+16,71	-21,68	-10,15
20	10,34	9,66	0,34	-4,21	+24,30	-5,03	+15,06
17	13,34	6,66	3,34	-4,81	+20,08	-16,98	-1,71

17,2	13,14	6,86	3,14	-4,77	+20,39	-16,44	-0,82
17,3	13,04	6,96	3,04	-4,76	+20,54	-16,16	-0,37
17,4	12,94	7,06	2,94	-4,74	+20,70	-15,88	+0,08

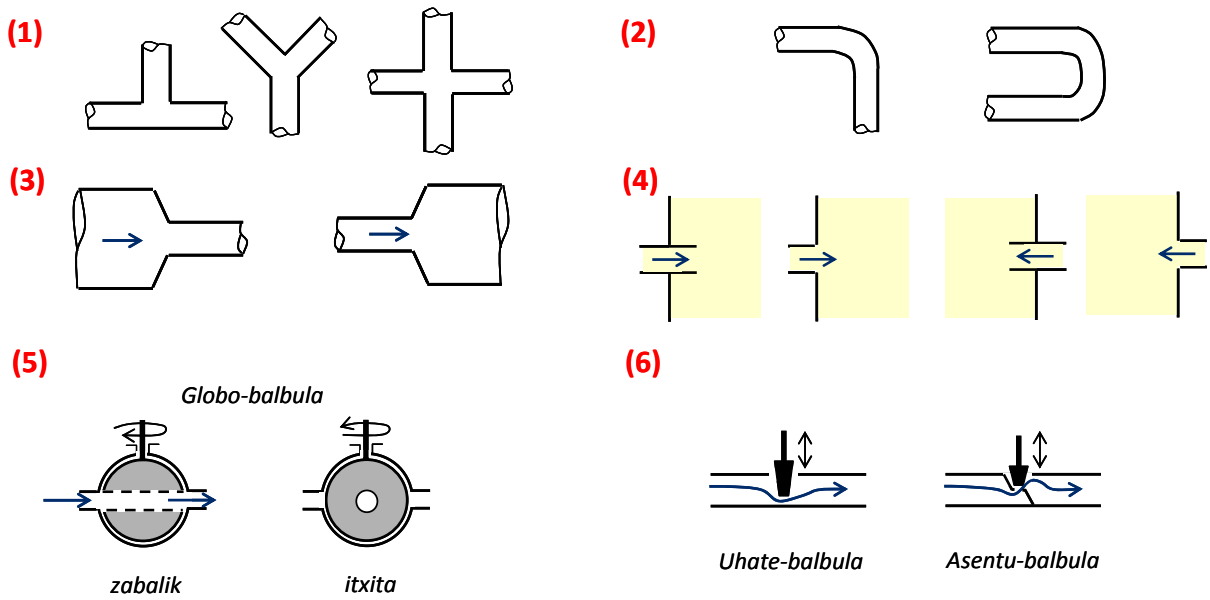
Sistema horretako emariak hauek dira: 1 tanga hustu egiten da 4,74 l/s-ko emariaz; 2 tanga bete egiten da 20,70 l/s emariaz eta 3 tanga hustu egiten da 15,88 l/s emariaz.

6.10 GALERA KOKATUAK

Orain arte azaldutakoak hodi zuzenerako balio du. Hala ere, hodi-sistema gehienetan, hodi zuzenaz gain, beste hainbat osagarri erabiltzen dira jarioa bideratu eta kontrolatzeko. Elementu horiek jariagaiari energia-galera eragiten diote, eta osagarria dagoen gune zehatzean gertatzen denez, ***galera kokatu*** deritze.

Hauek dira, besteak beste, osagarri aipagarrienak (6.18 irudian agertzen dira):

(1) Hodi-zatiketak eta -adarkatzeak, emariak batzeko eta banatzeko.
(2) Jarioaren norabidea aldatzekoak (ukondoak, bihurguneak…).
(3) Zabalgunek eta estuguneak.
(4) Tangen eta hodien arteko loturak.
(5) Jarioa eteteko balbulak.
(6) Jarioa erregulatzeko balbulak.



6.18 irudia. Hoditeria-sistemetako hainbat osagarri. (1) Zatiketak eta adarkatzeak, (2) ukondoak eta bihurguneak, (3) zabalguneak eta estuguneak, (4) tangen eta hodien arteko loturak, (5) globo-balbula, (6) erregulazio-balbulak.

Osagarri horiek jariagaiari eragiten dioten karga-galera ***galera-koefizienteen*** bidez ematen da:

$$h_f = K \cdot \frac{v^2}{2g} \tag{6.40}$$

K osagarriaren galera-koefizientea da. Osagarri bakoitzak bere galera-koefizientea du, eta Re-ren eta geometriaren mendekoa da.

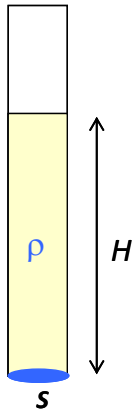
Hoditeria-sisteman hodi zuzenaz gain hainbat osagarri badago, orotara jarioak marruskaduraz galtzen duen energia eta seriean kokatutako hodi zatien eta osagarrien sistemak eragiten dion galera berdinak dira:

$$h_{f,OROT} = h_{f,hodi-zuzena} + \sum_{i=1}^{N} h_{f,osagarria,i} \tag{6.40}$$

6.11 JARIAGAIAREN JARIOAREN PRESIO MOTAK

Zutikako hodi bat jariagai batez *H* altueraraino beteta badago, hodiaren azpialdeko azalerako presioa jariagaiaren dentsitatearen (ρ) eta altueraren (*H*) araberakoa da:

$$P = \rho \cdot g \cdot H \tag{6.41}$$



Adibidez, hodia 760 mm merkurioz betetzen bada, azpialdean 1 atm-ko presioa neurtuko da. Presio hori lortzeko, hodiak 10,34 m urez beteta egon beharko luke (uraren dentsitatea merkurioarena baino 13,6 aldiz txikiagoa baita).

Zero absolutuarekiko (hutsarekiko) neurtutako presioa ***presio absolutua*** da. Presio atmosferikoarekiko neurtutako presioari ***presio manometriko*** deritzo. Itsas mailako presio absolutua 1 atm da, baina presio manometrikoa 0 atm da. Jariagaien jarioan bi punturen arteko presio-diferentziarekin lan egin ohi da maiz. Orduan, bi presioak erreferentzia-puntu berarekiko neurtu behar dira.

Jariagai baten jarioan hiru presio mota neur daitezke:

(1) *Presio estatikoa*: jarioarekiko paraleloa den gainazalean neurtzen den presioa. Termino hau Bernouilli-ren ekuazioan erabiltzen dena da ($P/\rho \cdot g$, jariagai m-tan emana).

(2) *Talka-presioa*: jarioarekiko perpendikularrra den gainazalean neurtzen den presioa. Termino hau Bernouilli-ren ekuazioko ($P/\rho \cdot g$)+($v^2/2g\alpha$) terminoa da, jariagai m-tan emana.

(3) *Presio zinetikoa*: talka-presioaren eta presio estatikoaren arteko diferentzia da; Bernouilli-ren ekuazioko ($v^2/2g\alpha$) terminoa da, jariagai m-tan adierazia.

6.17 irudian azaltzen da manometro diferentzialen bidez hiru presioak neurtzeko modua.

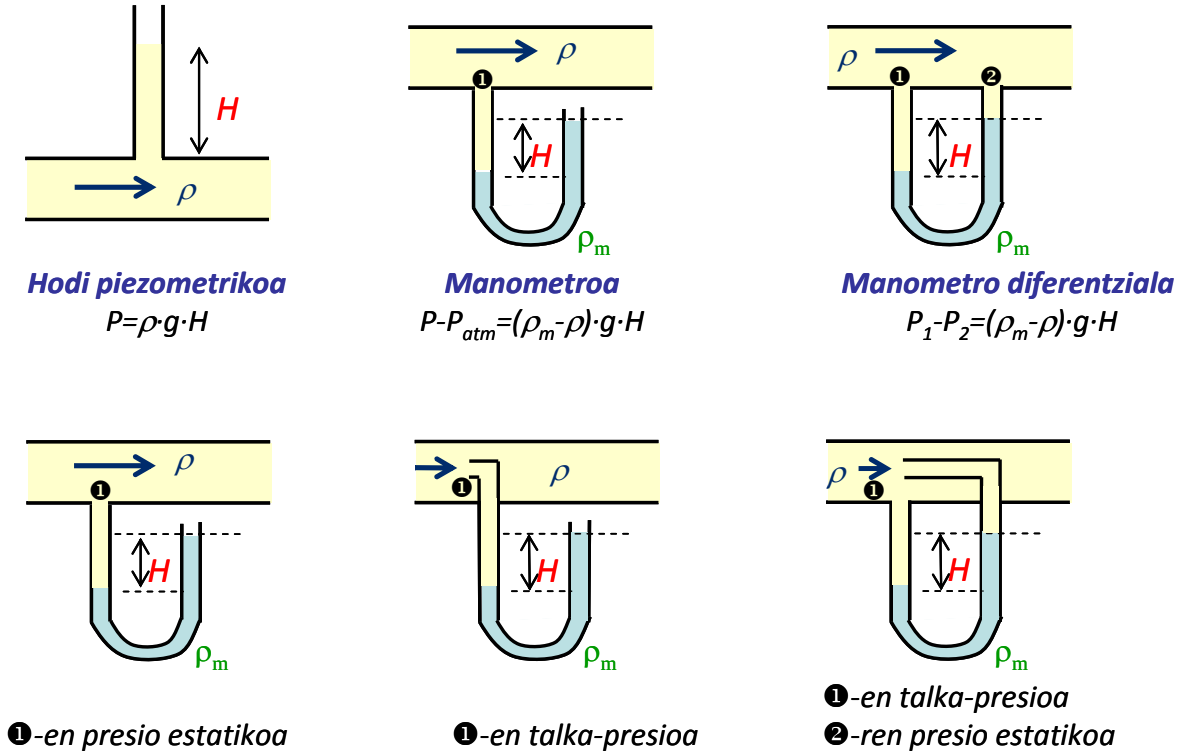
6.12 PRESIO-NEURGAILUAK

Jariagaiaren presioa jakitean, jarioari buruzko informazio asko jakiten da. Adibidez, ihes-korronterik dagoen azter daiteke, hoditik doan emaria kalkula daiteke eta ponparen funtzionamendua egokia den azter daiteke.

Presioa neurtzeko gailuak ***manometroak*** dira. ρ_m dentsitateko likido manometrikoz betetako U-itxurako hodiak dira; adar bat presioa neurtu nahi den hodiko puntura lotzen da, eta beste muturra atmosferara zabalik uzten edo hodiko beste puntu batera lotzen da. Lehenengo kasuan, hodiko puntuko presio manometrikoa neurtzen da, eta, azken kasuan, bi puntuen arteko presio-diferentzia. Azken horiei manometro diferentzialak deritze. Hoditik doan

jariagaiarekin nahasezina eta hura baino astunagoa izan behar du likido manometrikoak. Zenbat eta berdinagoak izan ρ_m eta ρ, orduan eta zehatzagoa da presio-diferentzia berdin baterako *H*-ren irakurketa.

Hodi piezometrikoak ez du likido manometrikorik erabiltzen; hodi irekian gora hodi nagusitik doan jariagaia bera erabiltzen da.



6.19 irudia. Presio-neurgailuak eta presio mota desberdinak neurtzeko prozedura.

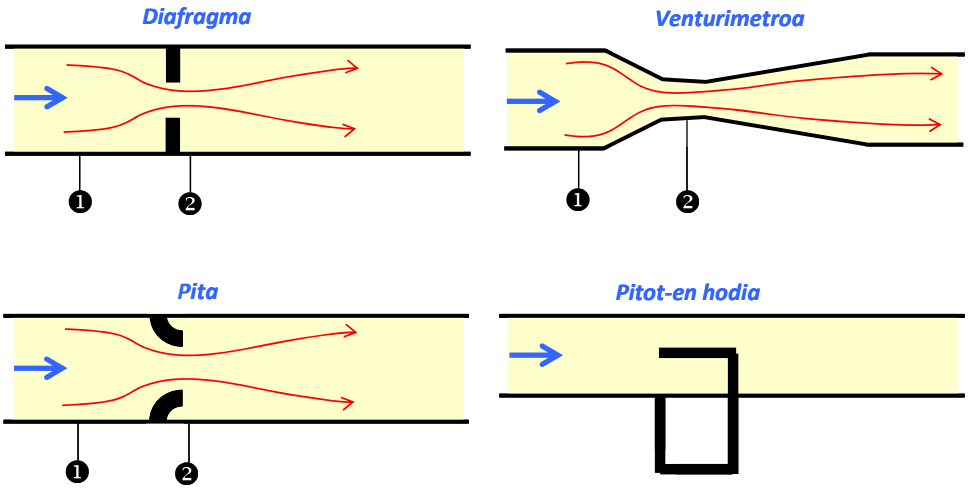
6.13 EMARIAREN NEURKETA

Ezinbestekoa da jarioaren emari masikoa edo bolumetrikoa jakitea, prozesua kontrolpean edukitzeko. Jarioaren emaria neurtzeko gailuei ***emari-neurgailu*** deritze. Ekipo horiek emaria zuzenean edo zeharka neurtzen dute.

Emaria zuzenean neurtzen duten neurgailuen adibide bat *emari-neurgailu birakorrak* dira. Ingurune baten barruan biraka dabilen gailua zeharkatzen du jariagaiak. Jariagaiaren emaria biragailuak ematen dituen biren araberakoa da. Ekipo hauek kalibratu egin behar dira, bira kopurua eta emaria erlazionatu ahal izateko.

Beste emari-neurgailu batzuk, ordea, emaria zeharka neurtzen dute: jariagaiari presio-diferentzia sorrarazten zaio, eta presio-diferentzia neurtzen dute, ondoren emariarekin erlazionatu ahal izateko. Horrelako neurgailuak dira, besteak beste, *venturimetroa*, *pita*, *diafragma* eta *Pitot-en hodia* (ikusi 6.20 irudia).

Lehenengo hiruretan, jarioa igarotzeko azalera estutu egiten da (estutze-maila $\beta = \frac{D_2}{D_1}$ da), eta manometro diferentzialarekin 1 eta 2 puntuetako presio-diferentzia neurtzen da. 1 puntuan jariagaiak hodi osoa betetzen du, eta 2 puntuan lepo estutik pasatzen da. 2 puntua estugunetik ahalik eta hurbilen egon behar da neurketa egokia izan dadin.



6.20 irudia. Presio-diferentzian oinarritutako emari-neurgailuak.

Bernouilli-ren ekuazioaren arabera, marruskaduraz galtzen den energia baztertzen bada, diametroa estutzean, jariagaiak energia zinetikoa irabazten du presio-energia murriztearen truke. Hala, gune estutik doan emaria ekuazio honekin zenbatetsi daiteke:

$$Q = C_D \cdot A_2 \cdot \sqrt{\frac{\Delta P_{1\text{-}2} \cdot 2 \cdot \alpha}{\rho \cdot \left(1 - \beta^4\right)}} \qquad (6.42)$$

C_D neurgailuaren zuzenketa-faktorea da. Egindako hurbilketak zuzentzen ditu dimentsio gabeko faktore horrek, eta Re_2, β eta gailuaren araberakoa da. Hiru gailuetatik venturimetroak lortzen ditu emaitza onenak; izan ere, lepo estuko azalera (2 gunekoa, alegia) jakina da, eta pitan eta diafragman, berriz, hurbilketa da. Diafragmetan Re > 10^5 denean, C_D = 0,605era hurbiltzen da; pitetan C_D = 0,98 ingurukoa da, eta venturimetroetan C_D = 0,99 ingurukoa da.

Pitot-en hodiarekin talka-presioa eta presio estatikoa neurtzen dira, eta bien diferentziak presio zinetikoa ematen du. Talka-presioa neurtzen duen manometroaren adarra mugikorra da, eta hodiko zenbait erradiotan abiadurak neurtzen ditu ($\upsilon(r)$ abiadura-profilarekin, batez besteko abiadura (v) eta emaria lor daiteke).

$$\upsilon(r) = \sqrt{\frac{\Delta P \cdot 2 \cdot \alpha}{\rho}} \qquad (6.43)$$

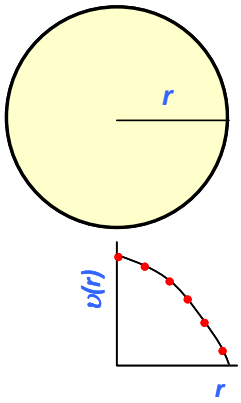
6.10 adibidea

10 cm-ko barne-diametroa duen hoditik ρ = 850 kg/m^3 dentsitateko eta μ = 1,2 cP likatasuneko jariagaia doa. Pitot-en hodia erabiliz, zenbait erradiotan abiadura puntual hauek neurtu dira:

r (cm)	0	1	2	3	4	4,75
$\upsilon(r)$ (m/s)	2	1,7	1,4	1	0,5	0,1

Kalkula ezazu hoditik doan jariagaiaren batez besteko abiadura eta emari bolumetrikoa.

Ebazpena



$$dQ = \upsilon(r)\cdot dS = \upsilon(r)\cdot 2\pi r\cdot dr$$

$$Q = \int_{r=0}^{r=5cm} \upsilon(r)\cdot 2\pi r\cdot dr$$

$$v = \frac{\int_{r=0}^{r=5cm} \upsilon(r)\cdot 2\pi r\cdot dr}{S}$$

Emaria kalkulatzeko, irudian azaltzen den integrala ebatzi behar da. Lauki zuzenen hurbilketazko metodoa erabiliz, ebazpenaren eboluzioa taula honetan agertzen da:

r (cm)	$\upsilon(r)$ (m/s)	$\upsilon(r)\cdot 2\pi r$ (m^2/s)	Δr (m)	$\left(\overline{\upsilon(r)\cdot 2\pi r}\right)$ (m^2/s)	$\Delta r\cdot\left(\overline{\upsilon(r)\cdot 2\pi r}\right)$ m^3/s
0	2	0	-	-	-
1	1,7	0,107	0,01	0,053	$5{,}341\cdot 10^{-4}$
2	1,4	0,176	0,01	0,141	$1{,}414\cdot 10^{-3}$
3	1	0,188	0,01	0,182	$1{,}822\cdot 10^{-3}$
4	0,5	0,126	0,01	0,157	$1{,}571\cdot 10^{-3}$
4,75	0,1	0,030	0,0075	0,078	$5{,}832\cdot 10^{-3}$
5	0	0	0,0025	0,015	$3{,}731\cdot 10^{-5}$

$Q \approx 5{,}961\cdot 10^{-3}$ m^3/s-ko emaria kalkulatzen da, eta batez besteko abiadura, v = 0,76 m/s.

6.14 JARIAGAIA PONPATZEKO GAILUAK

Jariagaiak lekuz aldatzeko erabiltzen den hodi-sisteman (hodi zuzena eta osagarri anitzen batura) energia galtzen da marruskaduraz. Hori dela eta, geroz eta energia erabilgarri gutxiago geratzen zaio jariagaiari. Modu berean, xurgaketa-puntua baino energia mekaniko altuagoko gunera aldatu nahi bada (presio handiagoko gunera, gorago dagoen gunera edo energia zinetiko handiagoko gunera), kanpoaldetik energia mekanikoa eman behar zaio.

Jariagai likidoari energia mekanikoa emateko ***ponpak*** erabiltzen dira. Jariagaia gasa denean, haizagailu eta konpresoreak erabiltzen dira. Atal honetan, jariagai likidoak ponpatzeko gailuak azalduko dira bakarrik.

Likidoak ponpatzeko ekipoak bi talde nagusitan banatu daitezke:

(a) ***Desplazamendu positibokoak***.

Jariagaia ingurune baten barruan dagoen eremuan itxita dago, eta pieza higikor baten mugimenduak eremu horretatik hodira desplazatzen du. Jariagaiari zuzenean presio-energia ematen dio. Ponpa horiek irteera-puntuan presio altuak emateko gai diren arren, emari baxuak ponpatzeko erabiltzen dira.
Pieza higikorraren funtzionamenduaren arabera bi motatakoak izan daitezke:

(a.1) *Atzera-aurrerako higidurako ponpak*.

Zilindro baten barnean higitzen den pistoi baten bidez jariagaia bultzatzen duen ponpa da. Presio altuak emateko gai da, baina solidoak esekita dauzkaten likidoak ezin ditu ponpatu. Horrelakoak dira pistoi-ponpa eta mintz-ponpa (6.18 irudia), eta atzeraezeko balbulak erabili behar dira.

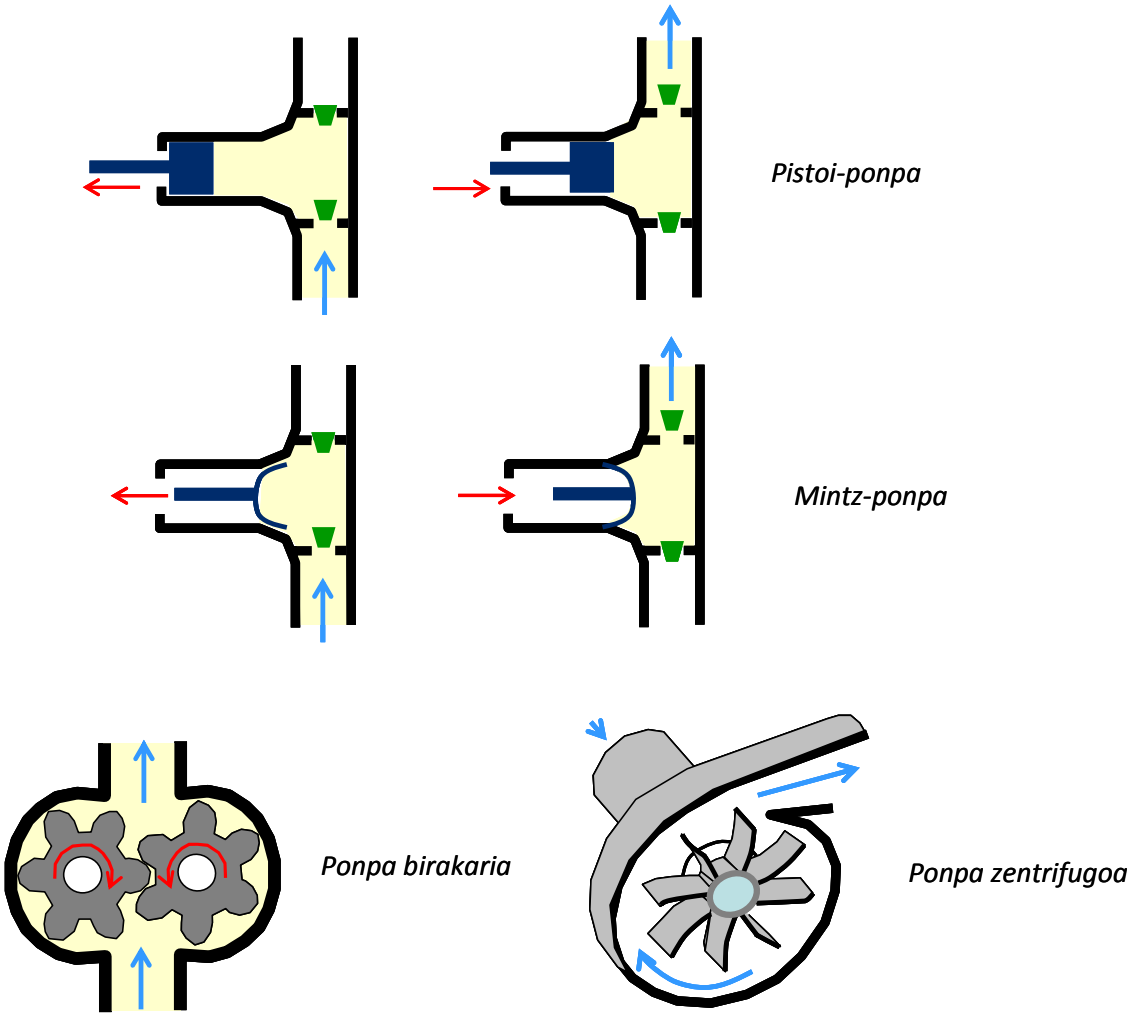
(a.2) *Ponpa birakorrak*.

Ingurune baten barnean, beren inguruan ia tarterik utzi gabe, elkarrekin engranatzen diren torloju birakariek hortzen artean garraiatzen dute likidoa (6.18 irudia).

(b) ***Ponpa zentrifugoak***.

Industria kimikoan erabilera zabalena duten ponpak dira. Emari bolumetriko handiak mugitzeko erabiltzen dira, baina ezin dute lan egin oso presio altuetan. Jariagai likatsuekin nekez lan egiten dute, baina solidoen esekidurak ponpatzeko aproposak dira.

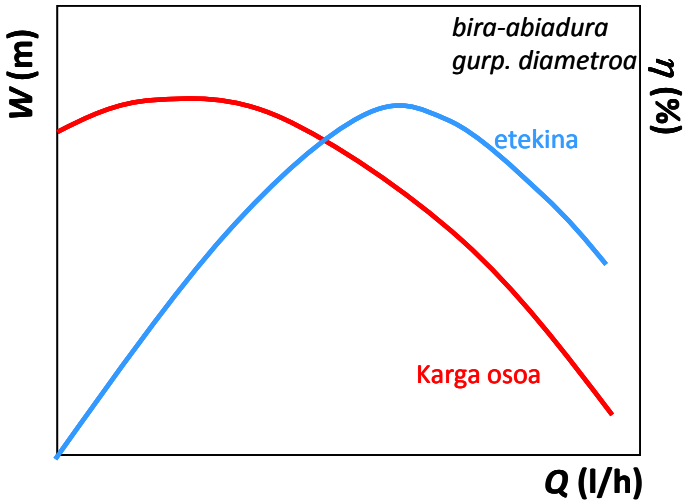
Motor elektrikoak ingurune barruan dagoen gurpila abiadura handiz birarazten du (4.000 bira/min, gutxi gorabehera), eta jariagaia gurpilaren ardatzetik elikatzen da. Barruan, gurpilak energia zinetikoa ematen dio jariagaiari (abiadura angeluarra); irteeran, hodirako konexioa egitean, jariagaiaren energia zinetikoa presio-energia bihurtzen da. Gurpila pala kurbatuz osatuta dago (6.21 irudia). Ponpa zentrifugoen lana eta etekina gurpilen tamainarekin eta bira-abiadurarekin aldatzen da.



6.21 irudia. Ponpa motak.

Ponpa zentrifugoak jariagaiari eman diezaiokeen presioa (karga, W) gutxitu egiten da ponpatzen duen emariarekin (Q). Halaber, ponpaketaren etekina emariaren araberakoa da, eta maximo batetik igarotzen da. Ponpa zentrifugoaren *kurba ezaugarriak* jariagaiari ematen dion karga (W) vs ponpatze-emaria (Q) eta etekina (η) vs Q adierazpenak dira,

ponpa bakoitzerako eta gurpilen diametro eta bira-abiadura finko baterako emanak. 6.22 irudian, ponpa zentrifugo baten kurba ezaugarrien adibidea agertzen da.



6.22 irudia. Ponpa zentrifugoaren kurba ezaugarri tipikoak.

Ponpak eman dezakeen energia mekaniko osoa ez zaio, ordea, jariagaiari heltzen, energia mekanikoaren zenbait galera baitaude. Galera garrantzitsuenak jariagaiaren eta ingurunearen arteko marruskadura eta gurpilaren eta ingurunearen arteko marruskadura dira. Galera horiek guztiak kontuan hartuta, ponpak jariagaiari eman diezaiokeen energia osoa (W_B) eta jariagaiari benetan heltzen zaion energia (W_T), ponparen etekin osoak (η) lotzen ditu, 6.25 ekuazioaren antzera:

$$\eta(\%) = 100 \cdot \frac{W_T}{W_B} \tag{6.44}$$

6.20 irudiko kurba ezaugarria aztertzen bada, ohartzen gara ponpatu nahi den emaria handiagoa den heinean, jariagaiari ematen dion karga (W) txikiagoa dela emari txikietan ezik. Halaber, jariagaiari energia maximoa eman diezaion, emari jakin bat ponpatu behar du, baina etekina maximoa izatetik urrun gelditzen da.

6.14.1 Ponpa zentrifugoen funtzionamendurako baldintzak: NPSH

Ponpara sartzen den jariagaiak abiadura angeluar izugarria hartzen du gurpil birakariak bultzatuta, eta, ondorioz, presio estatikoa gutxitzen du. Ponparen sarrerako hodiko presioarekin alderatuz presioa asko txikitu bada edo laneko tenperatura oso altua bada, ponpatzen ari den likidoa lurrundu egin daiteke (presio estatikoa likidoaren lurrun-presioa baino txikiagoa denean) eta, hala, bolumena handitu. Sortzen diren lurrun-burbuilak gurpilaren irteera-eremura pasatzean, presio handiagoko gunera pasatzen dira (abiadura angeluarra presio-energia bihurtzen baita) eta kondentsatu egiten dira. Fenomeno horri ***kabitazio*** deritzo. Ponparen egitura mekanikoan kalte handiak sortzen ditu, eta ponpen bizitza laburtzen du; beraz, saihestu beharreko fenomenoa da.

Ponparen sarrerako presioa ponpatzen ari den likidoaren lurrun-presioa baino altuagoa bada (lanerako tenperaturan neurtua, noski), kabitazioa saihets daiteke. Kabitazioa saihesteko gainpresio horri ponparen ***Xurgaketarako Karga Garbia*** edo ***NPSH*** (ingelesezko ***N****et* ***P****ositive* ***S****uction* ***H****ead*-en akronimoa) deritzo, eta ponparen sarrera-eremuko talka-presioan eta lanerako tenperaturan likidoak duen lurrun-presioaren arteko diferentzia gisa definitzen da (jariagai m-tan adieraziak):

$$NPSH = \frac{P_S}{\rho g} + \frac{v_S^2}{2g\alpha} - \frac{P^0}{\rho g} \tag{6.45}$$

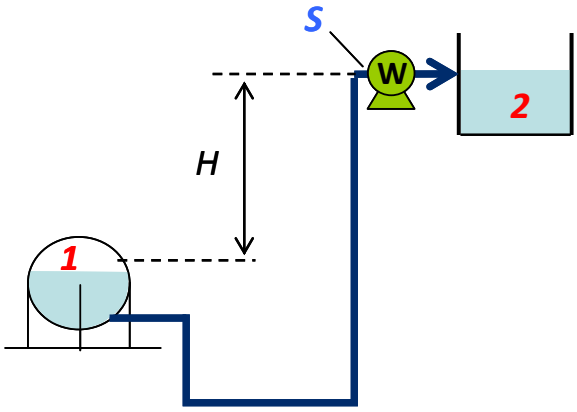
s azpiindizeak ponparen sarrera-puntua adierazten du, eta P^0 likidoaren lurrun-presioa da laneko tenperaturan.

NPSH > 0 bada, kabitazioa saihesten da, eta zerotik gertuago dagoen heinean, kabitazioa gertatzeko arriskua handitu egiten da. *NPSH* = 0 den unean, kabitazioa hasten da.

6.23 irudiko adibidearen *NPSH*ren adierazpena sistemako aldagaien funtzioan adierazten bada:

$$NPSH = \frac{P_1 - P^0}{\rho g} + \frac{v_1^2}{2g\alpha} - H - h_f \tag{6.46}$$

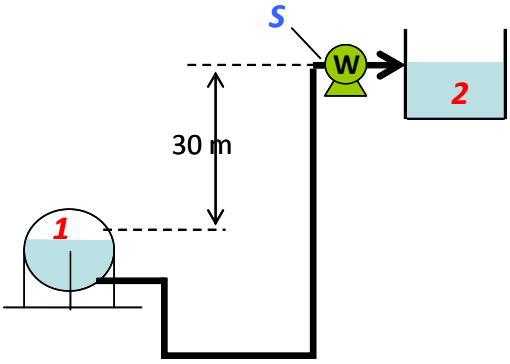
Kabitazioa saihesteko egokia izango litzateke xurgaketa-eremuko presioa (P_1) eta abiadura (v_1) handitzea, laneko tenperatura txikitzea (lurrun-presioa txikitzeko), xurgaketa-eremua baino beherago jartzea ponpa, eta bidean hodi leunagoak erabiltzea marruskaduraz energia gutxiago galtzeko.



6.23 irudia. Ponpa zentrifugoaren kokapena.

6.*11 adibidea*

28,3 m^3/h ur lekualdatzen da 2 atm-ko presio manometrikoan dagoen 1 tangatik atmosferara zabalik dagoen 2 tangara, 100 m-ko luzera baliokideko eta 7,5 cm-ko barne-diametroko hodi baten bidez (hodiaren zimurdura $\varepsilon = 5 \cdot 10^{-5}$ m da). Kalkula ditzagun (a) erabili beharreko ponpa zentrifugoaren potentzia (etekina % 75 bada), (b) ponparen kokapen horretan kabitaziorik gertatzen den, eta (c) hala bada, ponpa gehienez zer altueratan jar daitekeen.



Datuak: laneko tenperaturan, uraren lurrun-presioa P^0 = 25 mmHg da. ρ = 1.000 kg/m^3 eta μ = 1 cP har daitezke.

Ebazpena

(a) 1 eta 2 tangen gainazalen arteko Bernouilli-ren ekuazioak hau dio:

$$20,68 + W = 30 + h_f$$

Jariagaiak lekuz aldatzean marruskaduraz galtzen den energia kalkulatuko da:
v = 1,78 m/s; Re = 1,33·10^5; ε/D = 6,7·10^{-4}. Moody-ren grafikoan $f \approx$ 0,0205 lortzen da.
Beraz, h_f = 4,4 m.

W = 13,72 m; Pot_T = 1,08·10^3 J/s; Pot_B = 1,44 kJ/s

(b) Sistema honetako *NPSH* balioa kalkulatuko da:
P^0 = 25 mmHg = 0,34 ur-m
v_1 baztergarria da, 1 puntu gisa tangaren gainazala aukeratu delako.

$$NPSH = 20,68 - 0,34 - 30 - 4,4 = -14,06\,m < 0$$

Ponpan kabitazioa gertatuko da.

(c) Kabitazioa hasi dadin *NPSH* = bada: $0 = NPSH = 20,68 - 0,34 - H^* = 20,34\,m$

1 tangaren maila baino 20,34 m gorago jar daiteke gehienez ponparen sarrera. h_f = 0 hartu da, kabitazioa hastean eten egiten baita jarioa.

7. GAIA

KANPO-JARIOA. JARIAGAIEN JARIOAN OINARRITUTAKO BEREIZTE-ERAGIKETAK

6. gaian hodien barruko jariagaien garraioa aztertu da, energiaren iraupenaren ikuspuntutik. Hala ere, ingeniaritza kimikoan, hainbat ekipotan jariagaia solidoa inguratuz jariatzen da. Jario mota horri ***kanpo-jario*** deritzo, eta gai honetan fenomenoa eta fenomenoan oinarritutako bereizte-eragiketak azalduko dira. Adibidez, absortzioa gauzatzeko dorre beteek, ohantze finkoko erreaktoreek edo ohantze fluidizatuko erreaktoreek kanpo-jarioa daukate, jariagaia solidoa inguratuz jariatzen delako.

Kanpo-jarioan oinarritutako bereizte-eragiketak aplikazio zabala daukate industria kimikoan, iragazketa, jalkipena eta bereizketa hidraulikoa lekuko. Eragiketa horietan, grabitatearen indarraz eta flotazio-indarrez gainera, jariagaiaren eta solidoaren arteko marruskadura- eta inertzia-indarrek eragiten dute, eta ekipoen diseinua egiteko orduan berebiziko garrantzia daukate.

7.1 GAINAZAL SOLIDOAREN ETA JARIAGAIAREN ARTEKO MARRUSKADURA

Jariagai bat gainazal solido baten inguruan mugitzen bada, jariagaiari energia-galera eragiten dion marruskadura-indarra dago. 6. gaian azaldu da jariagaiaren likatasuna dela marruskadura sortzen duen faktorea. Esperimentalki behatzen denez, solidoaren eta jariagaiaren artean marruskadura-indar hau sortzen da:

$$F = -f_D \cdot A \cdot \frac{\rho v^2}{2} \tag{7.1}$$

ρ jariagaiaren dentsitatea, v jariagaiaren eta solidoaren arteko abiadura erlatiboa —muga-geruzatik at—, *A* solidoaren eta jariagaiaren arteko topatze-azalera (aurrez aurrekoa) eta f_D marruskadura-zenbakia izanik. Ekuazioaren zeinu negatiboak adierazten du marruskadura-indarra eta jarioaren norabidea aurkakoak direla. A topatze-azalera solidoaren geometriaren araberakoa da. Jarioaren norabidean zorrotzak diren solidoek A txikia daukate (forma aerodinamikoa daukatela esaten da), eta kamutsak diren solidoek, berriz, A handia dutenez, marruskadura handiagoa sortzen diote jarioari.

Kanpo-jarioan Reynolds zenbakia partikula solidoaren diametro baliokidearekiko (d_P) definitzen da:

$$\mathrm{Re}_P = \frac{d_P \cdot v \cdot \rho}{\mu} \tag{7.2}$$

f_D marruskadura-zenbakia dimentsiogabea da, eta solidoaren formaren araberakoa da:

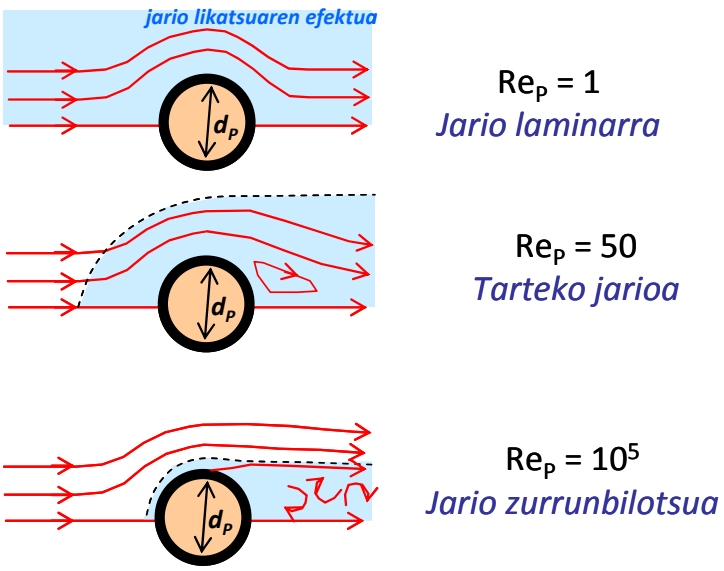
$$f_D = f(\mathrm{Re}_P, \text{solidoaren geometria})$$

7.1 irudian, zilindroaren inguruko jarioan muga-geruza fluidodinamikoak duen eboluzioa agertzen da (zilindroaren goialdean gertatzen dena adierazten da soilik, ardatzetik ikusia, behekoa simetrikoa baita).

Re_P baxua denean, jarioa guztiz laminarra da, eta jario likatsuaren efektua eremu ilundu guztian agertzen da. Re_P handitu ahala, jario likatsuaren eremua txikitu egiten da. Zilindroaren atzealdean zurrunbiloak sortzen hasten dira. Re_P gehiago handitzean, jariagaiak daraman inertziagatik muga-geruzak ez dauka gainazal solidora itsatsita mantentzeko gaitasunik, eta bereizten hasten da. Jario likatsuaren eremua izugarri murrizten da, eta eremu horretan lorratzak sortzen dira.

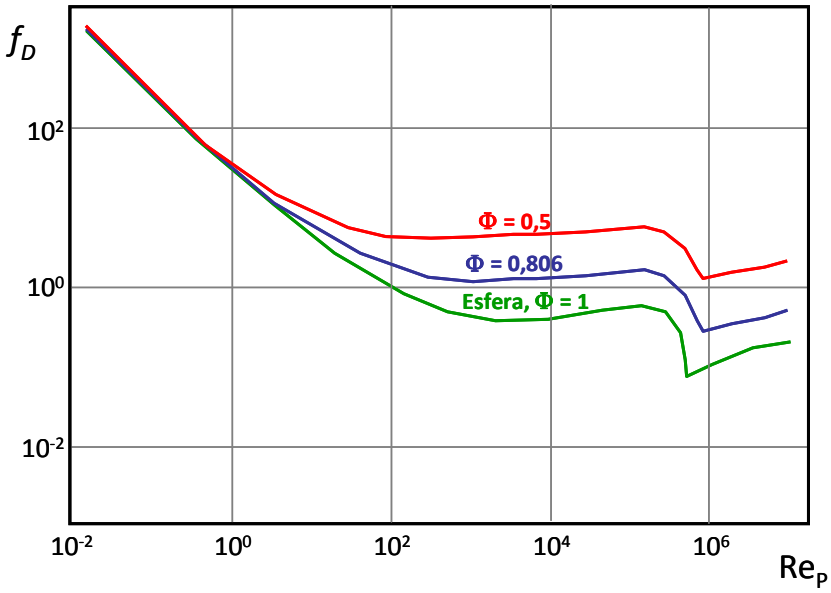
7.2 irudian, esferentzako f_D marruskadura-zenbakiaren eta Re_P-ren arteko erlazioa azaltzen da. Irudian ikusten denez, jario laminarra denean ($Re_P < 1$), Re_P handitu ahala marruskadura-zenbakia izugarri txikitzen da. Tarte horretan, Stokes-en erlazioa betetzen da:

$$f_D = \frac{24}{Re_P} \tag{7.3}$$



7.1 irudia. Zilindroa zeharkatzen duen jarioak Re_P-ren arabera duen eboluzioa (ilundutako azaleran jario likatsuaren efektua nabaritzen da).

Re_P handitzean, marruskadura-zenbakiaren txikitzea moteldu egiten da, eta 10^3-10^5 tartean ia balio konstantea hartzen du. $Re_P \approx 5 \cdot 10^5$ inguruan, bat-batean txikitu egiten da muga-geruza zurrunbilotsua bihurtzen denean, baina Re_P handitzean berriro handitu egiten da.

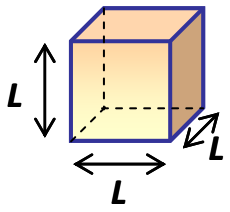


7.2 irudia. Partikulen marruskadura-zenbakiaren eboluzioa Re_P-ren eta esferikotasunaren arabera.

Ohantzeetako edo dorre beteetako partikulak ez dira esfera perfektuak, ordea. Partikulen geometria karakterizatzeko, ***esferikotasuna*** (Φ) erabiltzen da. Hala, marruskadura-zenbakia

vs Re_P grafikoak esferikotasunaren arabera eman daitezke. Definizioz, partikularen bolumen bereko esferak izango lukeen azaleraren eta partikularen benetako azaleraren arteko erlazioa —irudizko esferaren diametro baliokidea d_{BAL}— erabiliko da Re_P-ren kalkuluan.

Agerian dagoen bezala, esferaren esferikotasuna 1 da.

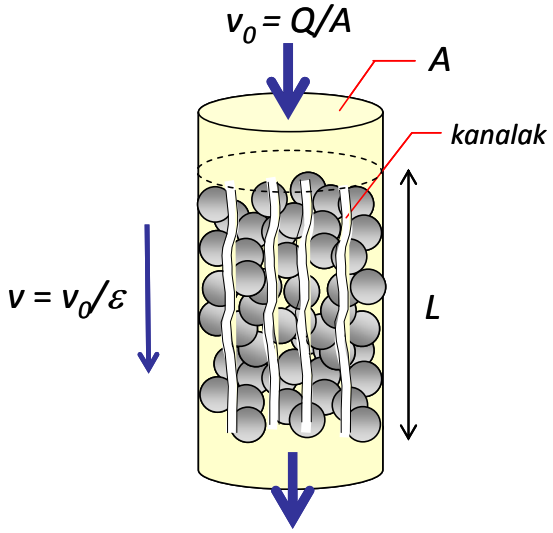


$$\left.\begin{aligned} &Bolumena = V = L^3 \\ &V_{Esfera} = L^3 = \frac{\pi}{6}\left(d_{BAL}\right)^3 \\ &d_{BAL} = L\cdot\sqrt[3]{6/\pi} = 1{,}241\cdot L \end{aligned}\right\} \qquad \Phi = \frac{4\pi\left(\frac{d_{BAL}}{2}\right)^2}{6\cdot L^2} = \sqrt[3]{\frac{\pi}{6}} = 0{,}806$$

L aldeko kuboaren esferikotasuna eta diametro baliokidea Φ = 0,806 eta d_{BAL} = 1,241·L dira, hurrenez hurren.

7.2 OHANTZE POROTSUEN BARNEKO JARIOA: GAINAZAL SOLIDOAREN ETA JARIAGAIAREN ARTEKO MARRUSKADURA

Sarri erabiltzen dira partikula solidoz betetako ohantzeak edo dorre beteak ingeniaritza kimikoko hainbat eragiketatan, erreakzio katalitikoak, absortzioak, lixibiazioak, iragazketak eta abar egiteko. Sistema horietan partikula solidoek osatzen duten ohantze poroduna zeharkatzen du jariagaiak, eta, marruskaduraz, energia galtzen du.



7.3 irudia. Ohantze porodun finkoaren barneko jariagaiaren jarioa aztertzeko Kozeny-ren hurbilketa. *Q* (jariagaiaren emari bolumetrikoa), *A* (hodiaren sekzioa), *L* (ohantzearen altuera), ε (ohantzearen porositatea), v_0 (ohantzerik gabe jariagaiak izango lukeen abiadura), *v* (ohantzean zehar jariagaiaren abiadura).

Ohantze porodunen ezaugarri nagusia hustasuna edo ***porositatea*** eta ***solidoen frakzioa*** dira (ε eta 1- ε, hurrenez hurren):

$$\varepsilon = \frac{\text{bolumen hutsa}}{\text{ohantzearen bolumena}}$$

$$1-\varepsilon=\frac{\text{solidoen bolumena}}{\text{ohantzearen bolumena}}$$

Ohantze poroduna zeharkatzean jariagaiak marruskaduragatik jasaten duen energia-galeraren azterketa teorikoa egiteko, Kozeny-ren hurbilketa erabiliko da. Hurbilketa horren arabera, ohantze porodunaren barneko jariagaiaren jarioa kanal bihurgunetsu paraleloetan gertatzen da, eta barne-jarioan aplikatutako ekuazioak jariagaiaren karga-galera kalkulatzeko erabil daitezke.

$Re_P < 1$ denean (jario laminarra), Kozeny-ren ekuazioa erabil daiteke:

$$\frac{\Delta P}{L}=\mu\left[\frac{150\cdot(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3\cdot d_P^2}\right]\cdot\frac{Q}{A} \tag{7.4}$$

$Re_P > 10^3$ denean (jario zurrunbilotsua), Carman-en ekuazioa erabil daiteke:

$$\frac{\Delta P}{L}=\left[\frac{1,75\cdot(1-\varepsilon)\cdot\rho}{\varepsilon^3\cdot d_P}\right]\cdot\left(\frac{Q}{A}\right)^2 \tag{7.5}$$

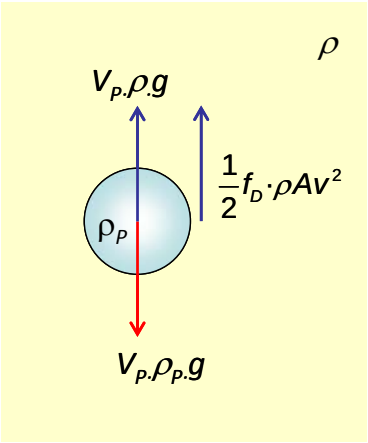
Ergun-en ekuazioa tarte guztietarako erabiltzen da:

$$\frac{\Delta P}{L}=\mu\left[\frac{150\cdot(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3\cdot d_P^2}\right]\cdot\frac{Q}{A}+\left[\frac{1,75\cdot(1-\varepsilon)\cdot\rho}{\varepsilon^3\cdot d_P}\right]\cdot\left(\frac{Q}{A}\right)^2 \tag{7.6}$$

Agerian geratzen denez, jario laminarrean, ΔP abiadurarekiko proportzionala da, eta jario zurrunbilotsuan, berriz, v^2-rekiko proportzionala da, barne-jarioan gertatzen den bezala (ikusi 6.33 eta 6.34 ekuazioak).

7.3 PARTIKULEN MUGA-ABIADURA JARIAGAIETAN

Demagun m masako, ρ_p dentsitateko, V_P bolumeneko eta d diametroko partikula esferikoa ρ dentsitateko jariagai batean grabitatearen eraginaz erortzen dela (7.4 irudia). Partikulari indar hauek eragiten diote: partikularen pisua, Arkimedesen bultzada-indarra eta mugimenduari jariagaiak jartzen dion marruskadura. Partikula esferikoa bada, partikularen masa $V_P\cdot\rho_P$ da.



7.4 irudia. Partikularen mugimendua jariagaiaren muinean.

Newton-en bigarren legearen arabera, partikularen gain eragiten duten indarren erresultanteak mugimendu kantitatearen aldaketa eragiten du $\left(\sum F=\frac{d}{dt}(m\cdot v)\right)$. Hasiera

batean, indarren erresultantea nulua ez denez, gero eta abiadura handiagoa hartzen du, baina, horren ondorioz, marruskadura-indarra ere handiagoa da (abiaduraren karratuarekiko aldatzen baita). Indarren erresultantea zero den unetik aurrera, abiadura konstantea izango du. Abiadura horri ***muga-abiadura*** deritzo, eta bereizketa-ekipo gehienetan egoera ez-geldikorreko tartea oso laburra izaten denez, abiadura horrekin erortzen direla onar daiteke. Abiadura hori da, adibidez, hegazkinetik jauzi egin eta denbora gutxira paraxutistek hartzen dutena.

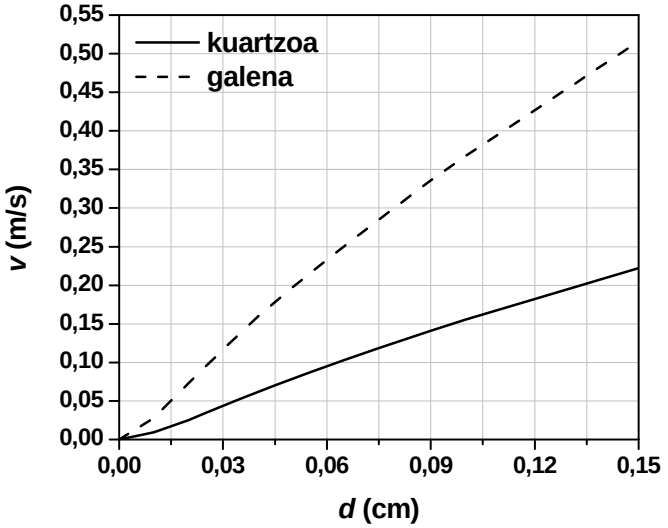
Egoera geldikorrean, beraz, $0=(\rho_P-\rho)\cdot V_P\cdot g-\frac{1}{2}f_D\cdot\rho\cdot A\cdot v^2$ da. Eta, hortik, partikularen muga-abiadura (v_∞) lor daiteke:

$$v_\infty=\sqrt{\frac{2g(\rho_P-\rho)V_P}{f_D\rho A}} \tag{7.7}$$

Partikula esferikoen kasuan, marruskaduran agertzen den azalera (partikularen topatze azalera) $A = (\pi/4)\cdot d^2$ da, eta partikularen bolumena $V_P = (1/6)\cdot\pi d^3$ denez, $V_P/A = (2/3)\cdot d$ da. Ekuazioan ordezkatzen bada, adierazpen hau lortzen da muga-abiadura kalkulatzeko:

$$v_\infty=\sqrt{\frac{4g(\rho_P-\rho)d}{3f_D\rho}} \tag{7.8}$$

Jariagai batean libreki erortzen ari den partikula baten muga-abiadura partikularen dentsitatearen eta partikularen diametroaren araberakoa da: zenbat eta handiagoak izan biak, orduan eta azkarrago erortzen da. 7.5 irudian, galenaren eta kuartzoaren muga-abiaduraren kurbak adierazten dira partikulen tamainaren arabera.



7.5 irudia. Galenaren eta kuartzoaren muga-abiadura partikula-diametroaren funtzioan.

Orain arte aipatutako ekuazioek libreki erortzen den partikularen muga-abiadura kalkulatzeko balio dute, hau da, ***jalkiera libre*** edo idealerako; hala ere, kasu gehienetan, partikula multzo handia egoten denez, batera erortzen ari diren partikulen artean elkarreragina dago, erortzea edo jalkitzea oztopatzen baitute. Partikula astunak arinak baino azkarrago jalkitzen direnez, partikula arinak desplazatu egiten dira partikula astunen

beheranzko mugimenduan. Jalkitze mota hori ***jalkiera oztopatua*** da. Beraz, arestian lortutako ekuazioak aplikagarriak izan daitezen, zuzenketa egin behar da, benetako jalkiera-abiadura horrela kalkulatutakoa baino txikiagoa izaten baita.
Jariagaiz eta solidoz osatutako nahastearen likatasun eta dentsitate eraginkorrak (biak porositatearen araberakoak) erabiltzen badira, jalkiera oztopatuan eta jalkiera librean kalkulatutako muga-abiadurak erlaziona daitezke:

$$v = v_{\infty} \cdot \varepsilon^2 \cdot 10^{-1,82(1-\varepsilon)} \tag{7.9}$$

7.4 OHANTZE FLUIDIZATUEN BARNEKO JARIOA

Ohantze porodunak finkoak edo fluidizatuak izan daitezke. Lehenengoetan, partikula solidoak finko daude; ohantze fluidizatuan, berriz, jariagaiak solidoak arrastatzen ditu. Horrelako ekipoetan jariagaia behealdetik elikatzen da, ohantzeko partikulak gorantz arrastatu ditzan. Horrelako ekipoak erreakzio katalitikoak egiteko erabiltzen dira; izan ere, jariagaiaren eta katalizatzaile-partikulen arteko ukipen egokia gertatzen denez, tenperatura hobeto kontrola daiteke.

7.6 irudian, jariagaiaren abiadura oso handia ez bada, ezin izango ditu partikula solidoak arrastatu, eta ohantzea finko mantenduko da, presio-galera proportzionalki handituko da (jario laminarra delako) eta porositatea eta ohantzearen luzera konstante mantenduko dira. Partikulen muga-abiadura berdintzen den abiaduraz elikatzean (v_F*, ***fluidizaziorako abiadura minimoa***), partikulak arrastatzen hasiko da jariagaia, eta ohantze fluidizatua izeneko portaera hasiko da. Abiadura handitzen bada, ΔP ia ez da handituko, baina porositatea eta altuera proportzionalki handituko dira. Elikadura-abiadura oso handia bada, partikulak ohantzetik kanpora arrastatzeko arriskua dagoenez, saihestu beharreko egoera da. Fluidizaziorako abiadura minimoa (v_F*) eta maximoa (v_F**) kalkulatzeko Ergun-en ekuazioko adierazpena erabiliko da.

v_F*:

$$g\left(\rho_P - \rho\right) = \frac{1,75 \cdot \rho \cdot \left(v_F^*\right)^2}{d_P \cdot \varepsilon^3} + \frac{150 \cdot \mu \cdot \left(1-\varepsilon\right) \cdot v_F^*}{d_P^2 \cdot \varepsilon^3} \tag{7.10}$$

v_F**: $\mathrm{Re}_P < 1$

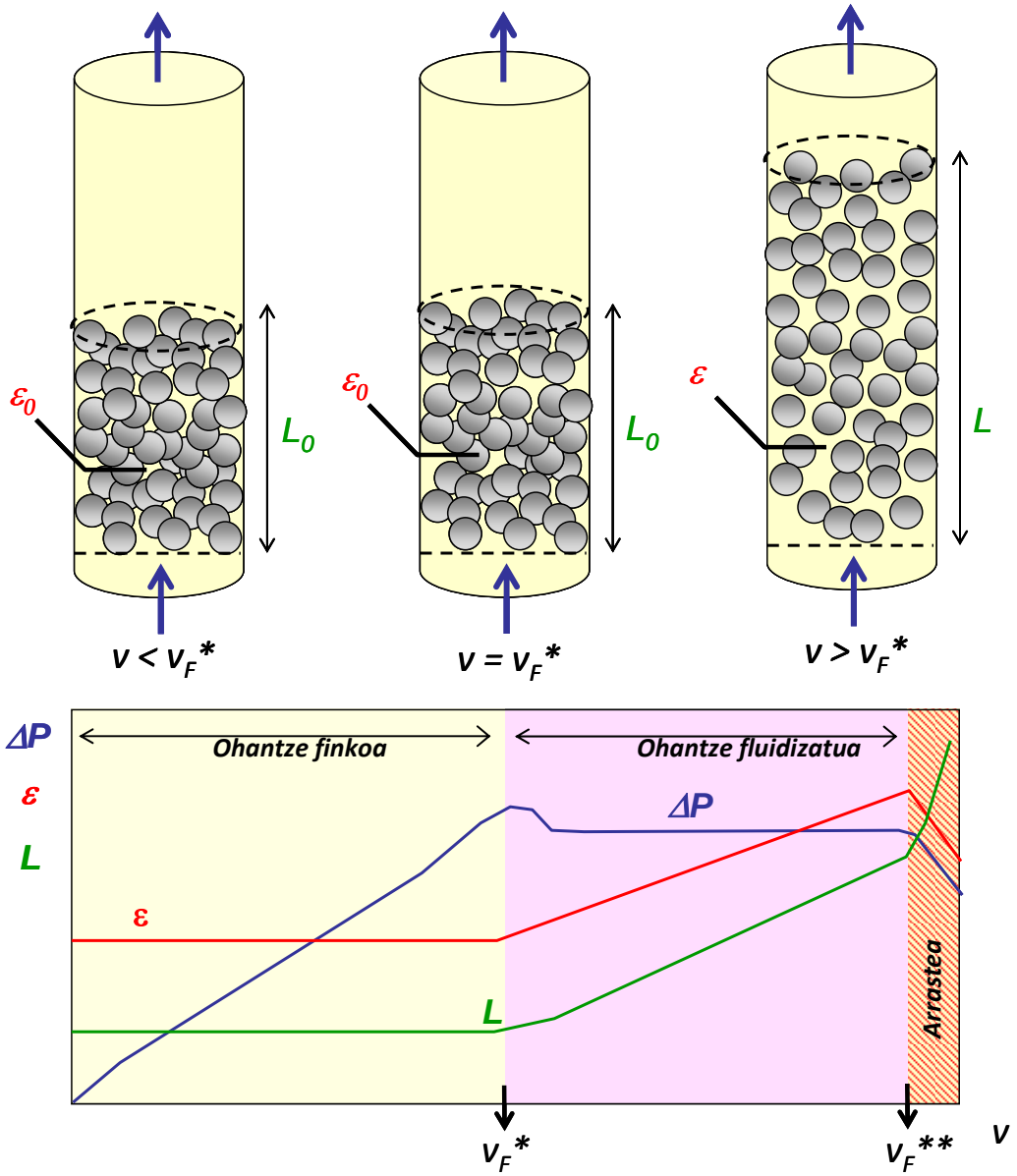
$$v_F^{**} = \frac{g \cdot \left(\rho_P - \rho\right) \cdot d_P^2}{18 \cdot \mu} \tag{7.11a}$$

$1 < \mathrm{Re}_P < 500$

$$v_F^{**} = \sqrt{\frac{4 \cdot g \cdot \left(\rho_P - \rho\right) \cdot d_P}{3 \cdot \rho \cdot f_D}} \quad \therefore \quad f_D = \frac{18}{\mathrm{Re}_P^{3/5}} \tag{7.11b}$$

$\mathrm{Re}_P > 500$

$$v_F^{**} = \sqrt{\frac{3 \cdot g \cdot \left(\rho_P - \rho\right) \cdot d_P}{\rho}} \tag{7.11b}$$



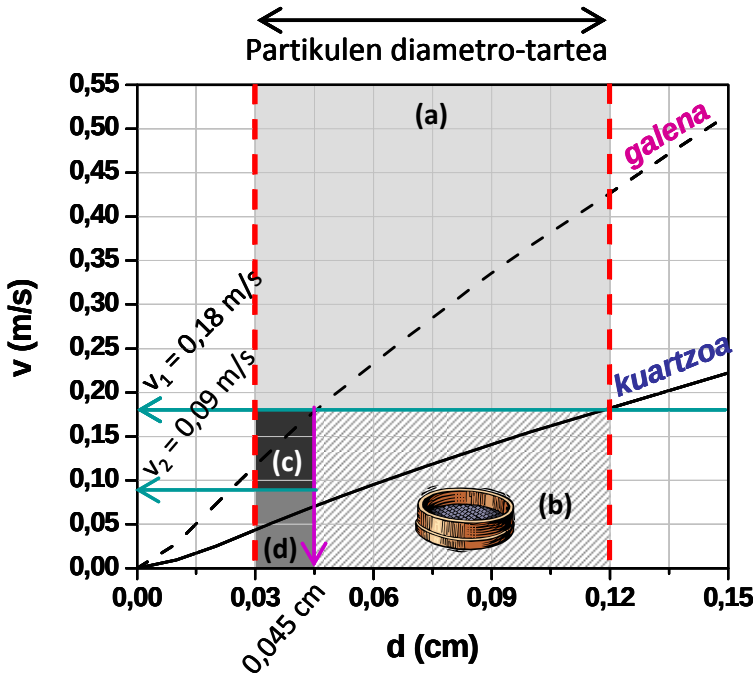
7.6 irudia. Ohantze fluidizatuaren porositatea, ohantzearen altuera eta jariagaiak jasaten duen presio-galera jariagaiaren abiaduraren funtzioan.

7.5 JARIAGAIEN JARIOAN OINARRITUTAKO BEREIZTE-ERAGIKETAK

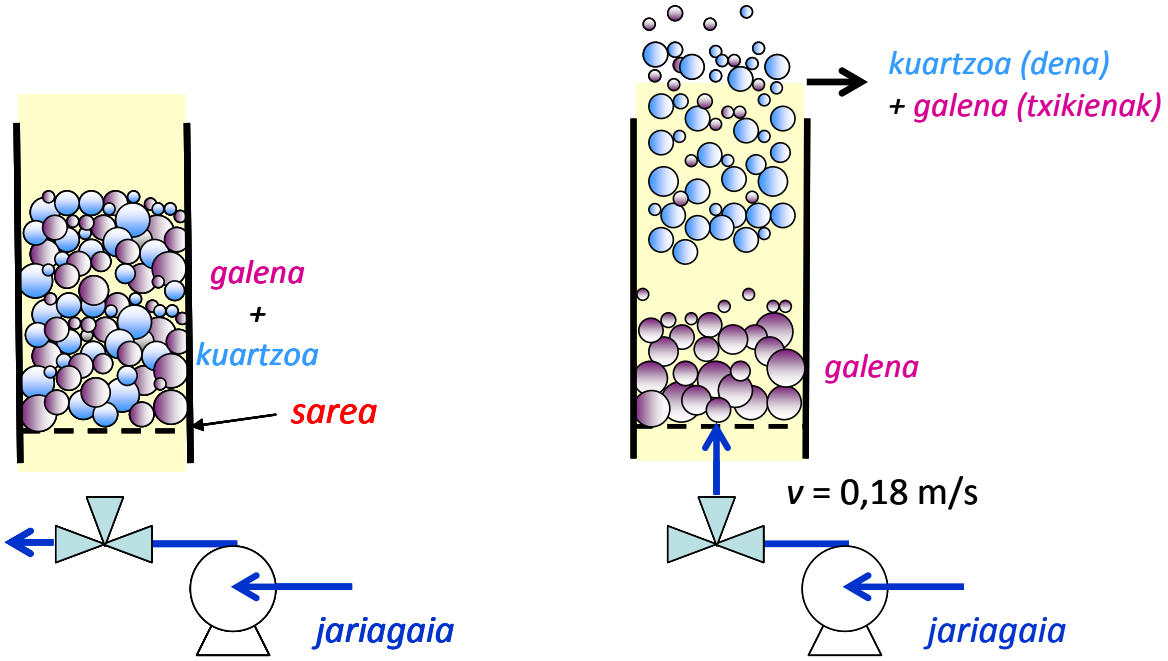
Jariagaiak eta solidoek osatutako nahaste heterogeneoak bereizteko, hainbat eragiketa erabiltzen da industria kimikoan, zein baino zein garrantzi handiagokoa. Besteak beste, bereizketa hidraulikoa, jalkipena eta iragazketa aipa daitezke.

7.5.1 Bereizketa hidraulikoa

Dentsitate desberdineko partikula solidoak bereizteko erabiltzen da; adibidez, meategietan. Jariagai bat ekipoaren behealdetik elikatzen da abiadura jakin batekin, bi solidoak bata bestetik bereizteko, muga-abiadura desberdina baitute.



7.7 irudia. Galenaren eta kuartzoaren muga-abiadurak, eta bereizte hidraulikoan lortutako bereizte-maila.



7.8 irudia. Galenaren eta kuartzoaren nahastea bereizketa hidraulikoz banatzeko sistema.

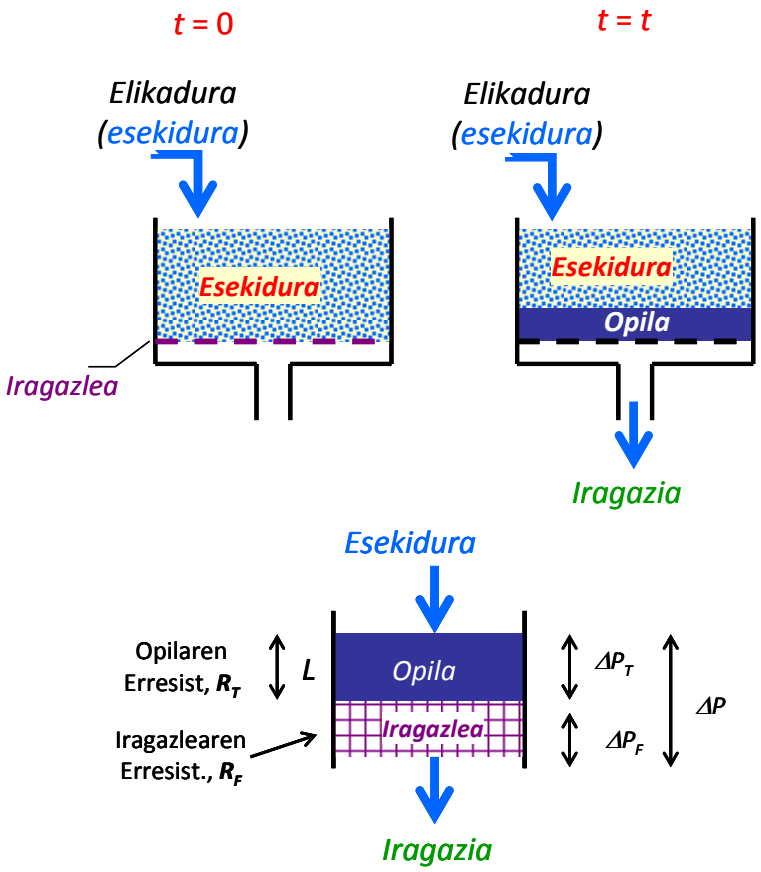
Demagun dentsitate desberdineko partikula sorta bat bereizi egin behar dela (galena eta kuartzoa). Materialen dentsitateak ρ_{GALENA} (7.500 kg/m^3) > $\rho_{KUARTZOA}$ (2.650 kg/m^3) dira, eta bi materialen partikulak $d_* \leq d \leq d^*$ muturreko diametroen tartekoak dira (0,0003 ≤ d ≤ 0,0012 m). 7.7 irudian, bi materialen muga-abiadurak irudikatu dira.

Nahastea 7.8 irudian agertzen den ekipoan sartu eta jariagaia (ura, adibidez) zirkularazten da behetik gora, v_1 = 0,18 m/s-ko abiaduraz. 7.7 irudian ikusten denez, 0,00045 < d < 0,0012 m tarteko galena partikula guztien muga-abiadura 0,18 m/s baino handiagoa denez, partikula horiek (galena soilik) ohantzearen azpian geldituko dira ((a) eremua); beste partikula guztiak

[0,0003-0,00045 m tarteko galena-partikulak eta 0,0003-0,0012 m tarteko kuartzo-partikulak] ekipoan gora arrastatzen ditu urak, eta aldamenetik kanporatzen dira. Zatiki hori 0,00045 m-ko diametroko bahe batekin bereizten bada, alde batetik, 0,00045-0,0012 m tarteko kuartzoa lortzen da ((b) eremua), eta, bestetik, 0,0003-0,00045 m tartean kuartzoaren eta galenaren nahastea lortzen da. Prozedura berari jarraitzen bazaio abiadura (v_2 = 0,09 m/s) erabiliz, bi konposatuak erabat bereiztea lor daiteke ((c) eta (d) eremuak).

7.5.2 Iragazketa

Iragazketaz, likidoan esekita dauden solidoak inguru iragazle batetik pasaraztean bereizten dira. Ohantzeko partikulen artean eta inguru iragazlearekin dauden indarren ondorioz, partikulak euskarri fisikoan atxikita geratuko dira, eta ohantzearen irteeran jariagai garbia lortuko da. Jariagaiak ohantzea zeharkatzeko energia mekanikoa behar du, ohantzeak sortzen duen marruskadura gainditu ahal izateko. Sarreraren eta inguru iragazlearen irteeraren arteko presio-diferentzia edo indar zentrifugoa izan daitezke horren eragile. Hemen, presio-diferentzian oinarritutako iragazketa-eragiketak azalduko dira.



7.9 irudia. Iragazketa. Iragazleak eta opilak jartzen duten erresistentzia eta marruskadurak eragindako energia-galerak.

Azken horien artean, hutsezko iragazketa eta presiopeko iragazketa daude. Lehenek iragazlearen irteeran huts-ponpa batekin hutsa egiten dute, eta azkenek, berriz, esekidura presio handian elikatzen dute ponpen bidez.

Esekidura elikatzen hastean, jariagaiak iragazlearen erresistentzia (R_F) bakarrik gainditu behar du, eta ΔP_F presio-erorketa sortzen dio. Baina partikula solidoak iragazlean atxikitzen diren une berean, opila sortzen doa, eta horrek erresistentzia gehigarria sortzen du (R_T). Iragazketa egin ahala, opila eta opilak eskaintzen duen erresistentzia hazi egiten dira, nahiz

eta R_F konstantea den. Horregatik, iragazketa-denborak aurrera egitean, opilak eta iragazleak sortzen duten presio-erorketa ($\Delta P = \Delta P_F + \Delta P_T$) handituz doa.

Iragazketa elkarren kontrako bi modutan egin daiteke:

-***presio konstantepean***: esekiduraren sarrerako presioaren eta iragazlearen irteerako presioaren arteko diferentzia konstante mantentzen da eragiketan. Horregatik, indar eragilea konstante mantendu baina presio-erorketa handitu egiten denez, denboran aurrera egin ahala, iragaziaren emaria gutxituz doa.

-***emari konstantepean***: eragiketa jarraituak egitean iragaziaren emari konstantea lortu nahi izaten da. Hori horrela izan dadin, eragiketan indar eragilea handitu behar da.

Hau da presio konstantean diharduen iragazle baten diseinu-ekuazioa:

$$\left(\frac{dV}{dt}\right) = \frac{w \cdot \mu \cdot \alpha}{\Delta P \cdot \left(V_f + V_e\right)} \cdot \frac{1}{A^2} \tag{7.12}$$

A iragazlearen azalera, V_f iragazi-bolumena, V_e iragaziaren bolumen baliokidea (iragazleak adinako erresistentzia egiten duen opilaren lodiera lortzeko iragazi-bolumena), α opilaren erresistentzia espezifikoa eta w opilean gelditzen den solido-masa iragazitako bolumen unitateko izanik.

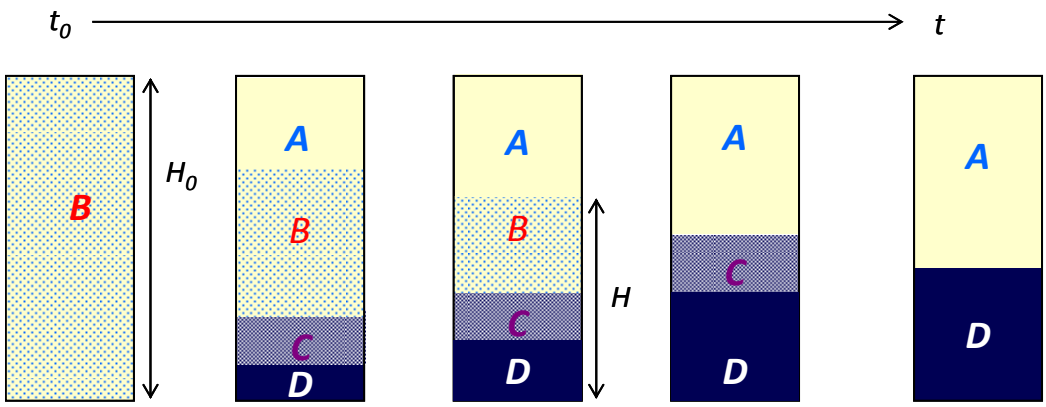
Opila konprimigarria bada, erresistentzia aldakorra izango du. Oro har, adierazpen honen araberakoa da:

$$\alpha = \alpha_0 \cdot \Delta P^n \tag{7.13}$$

Partikula zurrunarentzako $n = 0$ izanik.

7.5.3 Jalkiera eta loditzea

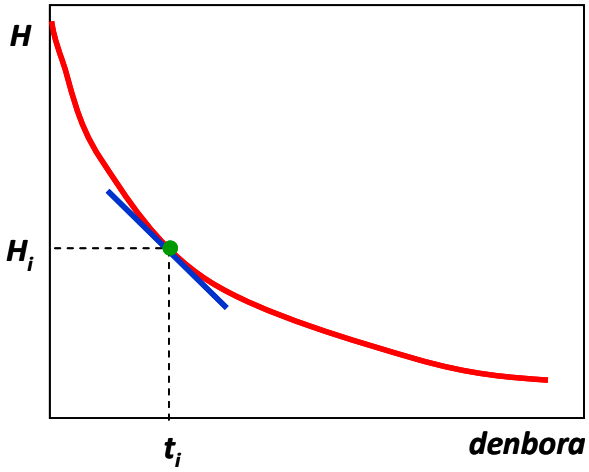
Esekidura bat bereizteko erabiltzen den eragiketa da. Geldikor dagoen esekidura bateko partikula solidoak jariagaian erortzen dira (jalkitzea), eta goialdean likido garbiko eremua eta behealdean solido kontzentratuko eremua sortzen dira. Esekidura baten jalkiera-prozesua azaltzen da 7.10 irudian. Hasieran, partikula guztiek jalkiera librea daukate: (B) eremua. Haren gainean likido garbiaren eremua (A) agertzen da. Denborak aurrera egin ahala, H modu konstantean txikitzen da, eta (D) eremu berri bat sortzen da, jalkitako partikulez osatua. Era berean, (B) eta (D) eremuen artean trantsizio-eremu bat (C) sortzen da. Aurrerago, (B) eta (C) eremuak desagertuz doaz, eta (D) eremuaren konpresioa hasten deneko uneari denbora kritiko deritzo.



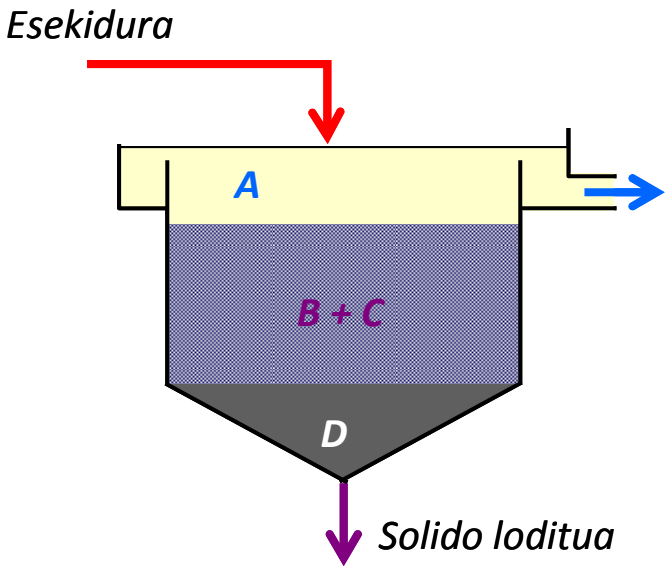
7.10 irudia. Esekidura baten jalkiera denboran zehar.

Sarri, solidoen artean elkarrekintzak gertatzen dira, eta partikulak oso txikiak badira, jalkiera oztopatu egiten da. Horrelako kasuetan, jalkiera laguntzeko partikulen malutapena eragiten da, eta partikulen koloide handiagoak lortzen dira (adibidez, $FeCl_3$ malutatzailea gehitzen zaio esekidurari).

Ekipo horien diseinua egiteko orduan, ezinbestekoa da 7.10 irudiko zinetika jakitea, elika daitezkeen emariak eta ekipoaren dimentsioak kalkulatzeko. 7.12 irudian agertzen den ekipoaren diseinua egiteko, probetan egindako saiakuntzarekin jalkipenaren zinetika lortu behar da (7.11 irudia).



7.11 irudia. Jalkipen-zinetikaren lorpena. t_i denboran H_i denean. Une horretako jalkipen-abiadura kurbaren ukitzailearen malda da.



7.12 irudia. Jalkiera-lodigailua.

8. GAIA

BERO-TRANSMISIORAKO MEKANISMOAK

Sistema bateko bi guneren artean tenperatura-diferentzia badago, energiaren (beroaren) jarioa gertatzen da tenperatura altuko gunetik tenperatura baxuko gunera. Termodinamikako kontzeptuen arabera, energia hori ***beroa*** da. Beroa jarioa da, etengabe eta uneoro gertatzen den jarioa. Horregatik, bero-jarioa adierazteko, Energia/t dimentsioa erabiltzen da.

Termodinamikak orekan dauden sistemak aztertzen ditu, eta sistema bat egoera batetik beste egoera batera igarotzeko behar den energiaren berri ematen du. Hala ere, ez du ezer esaten aldaketa horren abiadurari buruz edo ez du ematen mekanismoren berri.

Bero-transmisioa izeneko fisikaren alorrak aztertzen du zer abiaduraz gertatzen den bero-jarioa. Sistema bateko bi guneren arteko bero-transmisioa hiru mekanismoren (modu) bidez gerta daiteke: ***eroapena***, ***konbekzioa*** eta ***erradiazio termikoa***.

Ingeniaritzan izan dezakeen aplikazioen ikuspegia kontuan harturik, garrantzitsua da tenperatura-diferentzia finkatu batekin lortzen den energia-jarioaren kuantifikazioa. Hainbat ekiporen funtzionamendua bero-transmisioarekin lotuta dago (erreaktore kimikoak eta destilagailuak berotu edo hoztu egin behar dira, lurrungailuei beroa eman behar zaie, hodiak eta ekipoak isolatu egiten dira berorik gal ez dezaten). Ekipo horiei beroa kendu edo emateko gailuen tamaina edo isolatzailearen propietateak eta lodiera kalkulatzeko, ezinbestekoa da bero-transmisioaren abiadura jakitea.

8.1 ENERGIAREN IRAUPENAREN LEGEA

5. gaian ikusi den bezala, energia kontserbatu egiten da (Termodinamikaren Lehen Printzipioa). Lege horren arabera, sistema baten denbora-unitateko:

$$\begin{pmatrix}\text{Sistemara}\\ \text{SARTZEN}\\ \text{den energia}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\text{Sisteman}\\ \text{SORTZEN}\\ \text{den energia}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\text{Sistematik}\\ \text{IRTETEN}\\ \text{den energia}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\text{Ingurunearekin}\\ \text{TRUKATZEN}\\ \text{duen energia}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\text{Sisteman}\\ \text{METATZEN}\\ \text{den energia}\end{pmatrix}$$

$$S + So = I + T + M$$

Sartu eta Irten terminoetan, sistemara sartzen eta sistematik irteten den masarekin doan energia zenbatzen da. Sistemak ingurunearekin masarik trukatzen ez badu, bi termino horiek zero dira. Sortu terminoak sisteman sortzen den energia edo sistemak xahutzen duen energia (erreakzio kimiko edo nuklearrengatik, erresistentzia elektrikoagatik…) zenbatzen du. Trukatu terminoak sistemak ingurunearekin trukatzen duen energia zenbatzen du (bero-trukagailuekin), eta Metatze terminoak sisteman metatzen den energia zenbatzen du (egoera geldikorra bada, zero izango da).

8.2 BERO-TRANSMISIOAREN ABIADURA-LEGEA

Hainbat prozesu fisikotan bezala, bero-transmisioa gertatzen den abiadurak lege zinetikoari jarraitzen dio. Lege horren arabera, sisteman gertatzen den bero-jarioaren abiadura bero-jarioa sortu duen indar eragilearekiko proportzionala da eta sistemak berak bero-jarioari egiten dion eragozpen edo erresistentziarekiko alderantziz proportzionala:

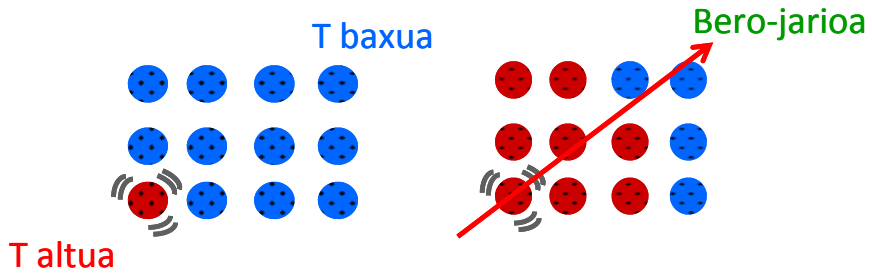
$$Q\left(\frac{\text{energia}}{\text{denbora}}\right)=\frac{\Delta T}{R}=\frac{\text{indar eragilea}}{\text{erresistentzia}} \qquad (8.1)$$

Sistemako puntu edo eremu guztiak tenperatura berdinean badaude, oreka termikoa dago, eta ez da inolako bero-jariorik gertatzen. Aldiz, tenperatura-diferentzia badago (ΔT), bero-jarioa sortzen da: horregatik, tenperatura-diferentziari ***indar eragile*** deritzo, bero-jarioa eragiten duen faktorea delako. Lege zinetikoaren arabera, zenbat eta handiagoa izan tenperatura-diferentzia, orduan eta abiadura handiagoz gertatzen da bero-jarioa. Bestalde, ***erresistentzia*** sistemak berak bere barnetik zirkulatzeko bero-jarioari egiten dion eragozpena da, eta mekanismoaren araberakoa da. Beraz, indar eragile berdin batekin bero-jarioaren abiadura desberdinak daude bero-transmisioaren mekanismoaren arabera.

8.3 EROAPEN BIDEZKO BERO-TRANSMISIOA (BARREIAPEN TERMIKOA) DIMENTSIO BAKARREAN ETA EGOERA GELDIKORREAN

Eroapen bidezko bero-transmisioa, batez ere, gorputz solidoen barnean eta geldirik dauden likidoen muinean gertatzen da. Beroa, molekulen arteko nahastea gertatu gabe, molekulen artean gertatzen den mugimendu kantitatearen transferentziaren bidez gertatzen da. Eroapen hitzak atomo eta molekulen arteko energia-trukea adierazten du.

Sistema baten barruan tenperatura-gradientea badago, bero-energiaren (beroa) jarioa gertatzen da materiaren mugimendu makroskopikorik gertatu gabe. Eduki energetiko handieneko (tenperatura altueneko) molekulek beren energiaren zati bat aldameneko eduki energetiko txikiagoko (tenperatura baxuagoko) molekulei ematean gertatzen da bero-jario hori; prozesu hori jariagaietan zein solidoetan gertatzen da.



8.1 irudia. Tenperatura altuan dauden atomo eta molekulen bibrazio-energia aldamenean hotzago dauden atomo eta molekulei igarotzen da, eta, horren ondorioz, bero-jarioa gertatzen da.

Jariagaien kasuan (gas- zein likido-egoera), molekulak libreki mugitzen dira —talka molekularrak maiztasun handiz gertatzen dira, gasen zein likidoen teoria atomikoak azaltzen duen bezala—. Hala, likidoaren mugimendu makroskopikorik gertatu gabe, tenperatura altuagoan dauden molekulen mugikortasuna handiagoa denez, talka gehiago jasaten dituzte, eta energia gehiago ematen diete aldameneko molekulei.

Solidoetan, sare-egituran finko dauden atomo zein molekulen artean ere gertatzen da. Bibrazio-energia aldameneko molekulei transmititzen zaie. Solido guztietan gertatzen den mekanismo horretaz aparte, sare-egituran akatsak badaude, elektroiak libreki mugitzen dira gorputz solidoaren barnean, eta energia-transmisioa hedapen handiagoan gertatzen da. Solido metalikoetan elektroiak libreki mugitzen direnez, solido ez-metalikoak baino hobeto eroaten dute beroa beren barnean.

Esandakoaren arabera argi ikusten da eroapen bidez gertatzen den bero-transmisioan euskarri materiala behar dela, eta gas-, likido- zein solido-egoeran egon daiteke. Hutsean, ordea, mekanismo honen bidez ezin daiteke berorik transmititu.

Sistema gaseoso edo likidoetan ere mekanismo hori gertatzen den arren, horrekin batera konbekzio bidezko mekanismoa gertatzen da, batez ere materiaren nahastea gertatzen bada (sistema gehienetan). Likido eta gasetan, azken mekanismo horren bidez transmititzen den beroa eroapenez transmititzen dena baino askoz ere handiagoa da. Horregatik, hemendik aurrerako azalpenak solidoentzat besterik ez dira izango.

Aurrerantzean azalduko den bero-transmisioa norabide bakarrekoa da, hau da, koordenatu bakarrarekin adieraz daitekeena.

8.4 EROAPEN BIDEZKO BERO-TRANSMISIOA EDO BARREIAPEN TERMIKOA: FOURIER-EN LEGEA

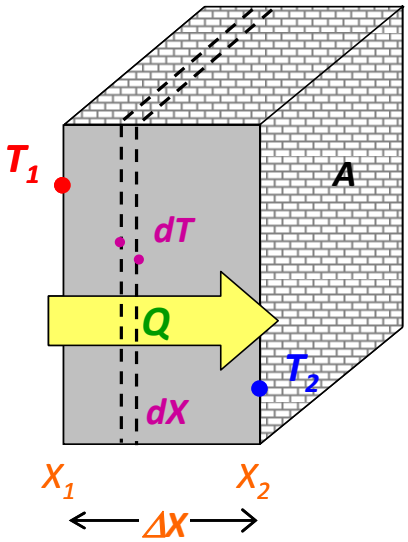
Demagun horma solido baten bi aurpegietako tenperaturak T_1 eta T_2 direla ($T_1 > T_2$ izanik), eta bi aurpegiak ΔX ($X_2 - X_1$) distantziara bereizita daudela (8.2 irudia). Hala, denbora unitateko gertatzen den bero-jarioa (Q) tenperatura-diferentziarekiko proportzionala ($\Delta T = T_1 - T_2$) da, bero-jarioaren norabidearekiko perpendikularra den azalerarekiko (A) proportzionala da eta bi aurpegien arteko distantziarekiko alderantziz proportzionala:

$$Q \propto A \cdot \frac{\Delta T}{\Delta X} \tag{8.2}$$

Ekuazioa erabilgarria izateko, k (eroapen-koefizientea) proportzionaltasun-konstantea erabiltzen da. Ekuazio horri Fourier-en legea deritzo.

$$Q = k \cdot A \cdot \frac{\Delta T}{\Delta X} \tag{8.3}$$ [1]

Ekuazio horretan, k materialaren eroapen-koefizientea (eroankortasun termikoa) da. Material bakoitzaren propietate fisikoa da, tenperaturaren araberakoa.



8.2. irudia. Horma lau baten barneko eroapen bidezko bero-transmisioa.

[1] Indar eragile gisa $T_1 - T_2$ (> 0) erabili denez, Fourier-en ekuazioak zeinu positiboa dauka. Zehazki jokatzeko, indar eragile gisa $T_2 - T_1$ erabili beharko litzateke, eta balioa negatiboa duenez, bero-jarioak zeinu positiboa izan dezan, Fourier-en ekuazioan zeinu negatiboak agertu beharko luke $\left(Q = -k \cdot A \cdot \frac{dT}{dX} \right)$.

Fourier-en legea modu diferentzialean idatzita, hau da, $\Delta X \rightarrow 0$ denean:

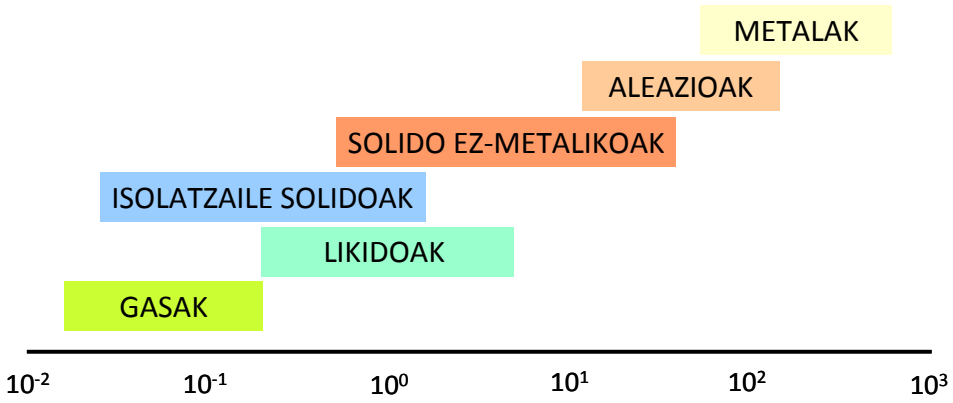
$$Q = k \cdot A \cdot \frac{dT}{dX} \quad \therefore \quad Q \cdot \frac{dX}{A} = k \cdot dT \tag{8.4}$$

Goiko ekuazioa irudiko geometriarentzat integratu ondoren lortzen da adierazpen hori. Hala ere, sistema edo geometriaren arabera, modu diferentzialean idatzitako adierazpenak erabilera hobea izan dezake, kasu partikular bakoitzerako integratu egin baitaiteke.

Eroapen-koefizientea (eroankortasun termikoa, *k*), aipatu den bezala, materialaren propietate fisikoa da. Fourier-en legean paratuz, materialak bere barnetik bero-jarioa gerta dadin daukan erraztasunaren berri ematen du eroankortasun termikoak: zenbat eta *k* handiagoa izan, orduan eta handiagoa da bero-jarioa. Hala, eroankortasun termiko altuko materialak eroale onak direla aipatzen da, eta eroankortasun termiko txikikoak, berriz, isolatzaile gisa ezagutzen dira.

Propietate fisiko horren dimentsioa [*k*] = energia/denbora·luzera·tenperatura-diferentzia da. Nazioarteko unitateen sistemako unitatea W/mK da, baina iturri bibliografiko askotan kcal/hmºC edo BTU/hftºF moduko unitateak aurkitu daitezke.

Mekanismoa azaldu denean aipatu den bezala, sistema solidoen eroankortasun-koefizienteak altuenak dira, eta likido zein gasenak txikiagoak dira. Hala, egoera fisikoaren arabera eroankortasun termikoaren joera nagusia solido > likido > gas da. Solidoetan, gainera, solido metalikoak eta ez-metalikoak bereiz daitezke. Lehenek elektroi askeak dauzkate egitura-sarean, libreki mugitu daitezkeenak. Horren ondorioz, eroapen bidezko bero-transmisioari lagundu egiten diote (solido metalikoen *k* > solido ez-metalikoen *k*). 8.3 irudian, materiaren zenbait egoeraren eroankortasun-tarteak azaltzen dira, eta 8.1 taulan, 300 K-ean neurtutako hainbat materialen eroapen-koefizienteak.



8.3 irudia: Inguruneko tenperaturan eta presioan, hainbat materialen eroankortasun termikoaren balio-tartea (W/mK unitatetan emanda).

Eroankortasun termikoa tenperaturaren araberakoa da. Hala, material batzuetan, tenperatura handitzean handitu egiten da; beste batzuetan, ordea, txikitu egiten da. Lehen portaera kuartzoak, altzairuak, glizerinak eta gas gehienek daukate. Bigarren portaera, ordea, wolframak, kobreak eta amoniakoak daukate.

Tenperatura-tartea oso zabala ez bada, tenperaturarekiko mendetasun lineala erabil daiteke:

$$k = a + b \cdot T \tag{8.5}$$

a eta *b* material bakoitzaren konstanteak izanik.

$b = 0$ eroankortasun termikoa konstantea da tenperatura-tartean
$b > 0$ eroankortasun termikoa handitu egiten da tenperatura handitzean
$b < 0$ eroankortasun termikoa txikitu egiten da tenperatura handitzean

8.1 Taula. Hainbat materialen eroankortasun termikoaren balioa (300 K).

Materiala	*k* (300 K)
Kobrea	399
Aluminioa	237
Altzairua	43
Beira	0,81
Ura	0,6
Etilenglikola	0,26
Hidrogenoa	0,18
Airea	0,026

8.5 TENPERATURA-PROFILAREN GARAPENA HORMAREN BARNEAN

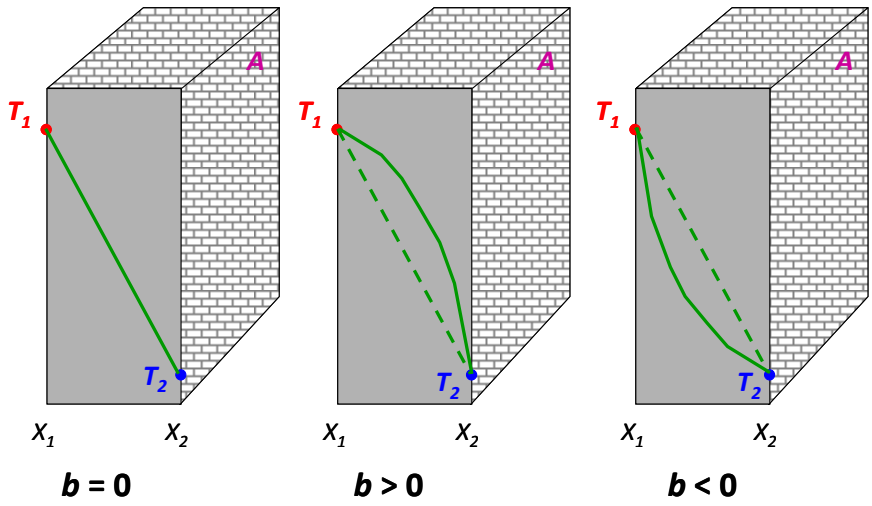
8.2 irudiko horma lauaren kasuan, Fourier-en lege diferentziala hartzen bada (8.4 ekuazioa) eta hormaren bi gainazalen artean integratzen bada, egoera geldikorra dela onartuz:

$$\frac{Q}{A}\cdot\int_{X_1}^{X_2} dX = \int_{T_1}^{T_2} k\cdot dT \tag{8.6}$$

Integral horretan, horma laua denez, bero-jarioaren noranzkoan jarioarekiko perpendikularra den azalera (*A*) ez da posizioaren (*X*) mendekoa, eta integraletik kanpora atera dateke. Baina *k* tenperaturaren mendekoa bada, integrala ebazteko, *k* = f(*T*) adierazpena (lineala edo beste bat) sartu eta integrala ebatzi behar da. Hala, T_1 eta T_2 tenperatura-tartean, bero-jarioaren abiadura

$$Q = k\cdot A\cdot\frac{(T_1 - T_2)}{\Delta X} \tag{8.7}$$

da, eta ekuazioan agertzen den *k* bi balioen batezbesteko tenperaturan daukan balioa da.



8.4 irudia. Horma lau baten barneko tenperatura-profila, *b* parametroaren arabera, egoera geldikorrean.

Horman zeharreko tenperatura-profila Fourier-en legeak ematen du, ekuazioa $\frac{dT}{dX}=\left(\frac{Q}{A}\right)\cdot\frac{1}{k}$ moduan idatzi ondoren. Kontuan izan egoera geldikorrean bero-jarioaren abiadura (*q*) konstantea dela, eta horma laua izateagatik *A* konstantea dela. Ondorioz, tenperatura-profila *k*-ren araberakoa da. 8.4 irudian agertzen dira horma lau baten kasuan lortzen diren tenperatura-profilak.

8.1 adibidea

0,20 m-ko lodierako horma lau baten aurpegiak 175 ºC eta 25 ºC-an mantentzen dira, hurrenez hurren. Kalkula ditzagun kasu bakoitzerako (i) horma zeharkatzen duen bero-jarioa azalera unitateko eta (ii) horman zeharreko tenperatura-profila. Aztertu ditzagun kasu hauek:

(a) *k* = 50 W/mK eroankortasun-koefiziente konstantea duen materiala.
(b) *k* = 50 + 0,125·*T*(ºC) W/mK eroankortasuna duen materiala.
(c) *k* = 50 - 0,125·*T*(ºC) W/mK eroankortasuna duen materiala.

Ebazpena

Sistema honetan indar eragilea konstantea da kasu guztietan, ΔT = 175 – 25 = 150 ºC
Bero-jarioa azalera unitateko kalkulatuko da, *Q/A*.

(a) k = 50 W/mK
(i) Fourier-en legean ezagunak diren datuak ordezkatuz:

$$\frac{Q}{A}=\frac{150\,\cancel{ºC}}{\frac{0{,}2\,m}{50\,W/m\cancel{K}}}=3{,}75\cdot10^{4}\,W/m^{2}$$, batez besteko *k* = 50 W/mK izanik.

(ii) Fourier-en ekuazioa moldatuz: $-\frac{dT}{dX}=\frac{\left(\frac{Q}{A}\right)}{k}=\frac{3{,}75\cdot10^{4}\,\cancel{W}/m^{\cancel{2}}}{50\,\cancel{W}/\cancel{m}K}=750\,K/m$

Hau da, horma guztian zehar malda konstantea du tenperatura-gradienteak (-750 K/m, alegia). Integratzen bada:

$$\int_{175ºC}^{T} dT=\int_{X(m)}^{0} 750\,ºC/m\cdot dX \quad \therefore \quad T(ºC) = 175 - 750\cdot X(m)$$

Taulan agertzen dira hormako zenbait posiziotarako lortzen diren tenperaturak:

(b) k = 50 + 0,125·*T*(ºC) W/mK
(i) Bi muturren arteko batez besteko tenperatura kalkulatuko da, ondoren *k*-ren balioa lortzeko: $\overline{T}$ = 100 ºC eta $\overline{k}=62{,}5\,W/mK$.
Aurreko kasuan egin den bezala, Fourier-en legean ezagunak diren datuak ordezkatuz:

$$\frac{Q}{A}=\frac{150\,\cancel{ºC}}{\frac{0{,}2\,m}{62{,}5\,W/m\cancel{K}}}=46875\,W/m^{2}$$

(ii) $-\dfrac{dT}{dX}=\dfrac{\left(\dfrac{Q}{A}\right)}{k}=\dfrac{46875\,\cancel{W}/\cancel{m^2}}{50+0{,}125\cdot T\,\cancel{W}/\cancel{m}K}$. Ikusten den bezala, tenperaturaren araberakoa da: zenbat eta tenperatura altuagoa izan, orduan eta txikiagoa da gradiente termikoa horman zehar, hau da, orduan eta eroale hobea da materiala. Irudikatu ahal izateko, integratu egin behar da:

$$\int_{175ºC}^{T}(50+0{,}125\cdot T)dT=\int_{X(m)}^{0}46875\cdot dX \quad \therefore \quad 50\cdot(175-T)+0{,}0625\cdot\left(175^2-T^2\right)=46875\cdot X$$

(c) k = 50 - 0,125·T(ºC) W/mK

(i) Bi muturren arteko batez besteko tenperatura kalkulatuko da, ondoren *k*-ren balioa lortzeko: $\overline{T}$ =100 ºC eta $\overline{k}=37{,}5\,W/mK$.

Aurreko kasuan egin den bezala, Fourier-en legean ezagunak diren datuak ordezkatuz:

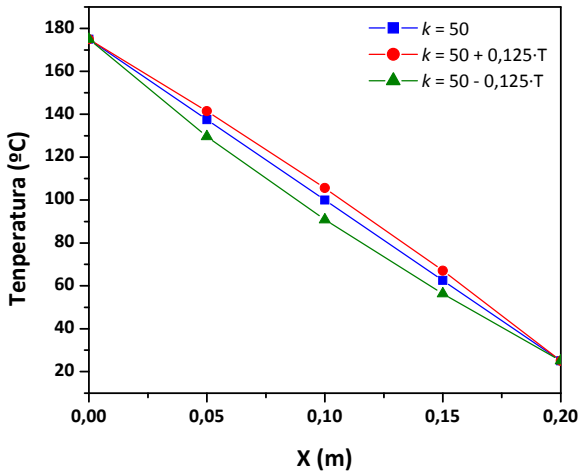
$$\frac{Q}{A}=\frac{150\,\cancel{ºC}}{\dfrac{0{,}2m}{37{,}5\,W/m\cancel{K}}}=28125\,W/m^2$$

(ii) $-\dfrac{dT}{dX}=\dfrac{\left(\dfrac{Q}{A}\right)}{k}=\dfrac{28125\,\cancel{W}/\cancel{m^2}}{50-0{,}125\cdot T\,\cancel{W}/\cancel{m}K}$. Irudikatu ahal izateko, integratu egin behar da:

$$\int_{175ºC}^{T}(50-0{,}125\cdot T)dT=\int_{X(m)}^{0}28125\cdot dX \quad \therefore \quad 50\cdot(175-T)-0{,}0625\cdot\left(175^2-T^2\right)=28125\cdot X$$

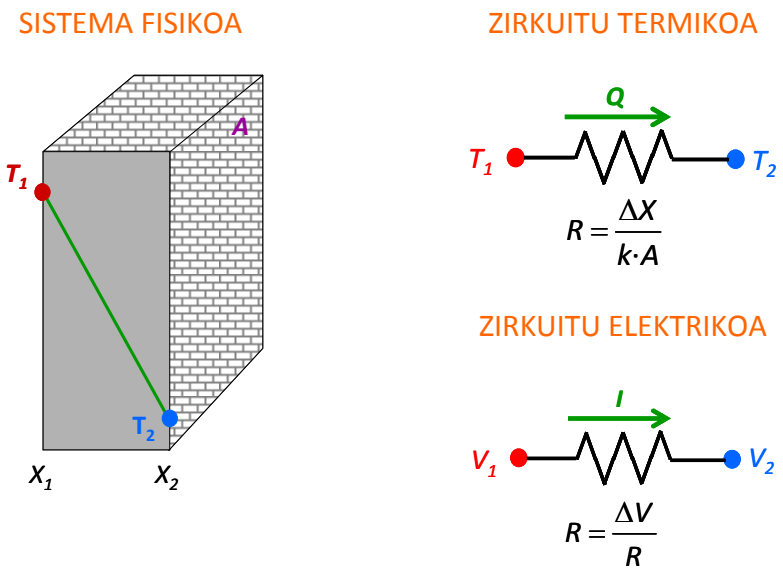
(a), (b) eta (c) kasuetan, hormako zenbait posiziotarako lortzen diren tenperaturen balioak taula honetan agertzen dira, eta irudian irudikatu dira:

X(m)	0	0,05	0,1	0,15	0,2
T(ºC) (a)	175	137,5	100	62,5	25
T(ºC) (b)	175	141,4	105,6	67,0	25
T(ºC) (c)	175	129,6	90,8	56,3	25



8.6 ZIRKUITU ELEKTRIKOEKIKO ANTZEKOTASUNA EDO ANALOGIA

Bero-transmisioak jarraitzen duen lege zinetikoaren arabera, sistema fisikoaren eredua zirkuitu elektrikoen analogoa dela esan daiteke. Bi sistemetan, indar eragile bana dago (bero-transmisioan tenperatura-diferentzia eta zirkuitu elektrikoetan potentzial-diferentzia) eta erresistentzia edo eragozpen bana dago (eroapen bidezko bero-transmisioan $\frac{\Delta X}{k \cdot A}$ eta zirkuitu elektrikoetan *R*).



8.5 irudia. Horma lau baten barneko eroapen bidezko bero-transmisioan sistema fisikoak duen eskema, zirkuitu termikoaren bidezko adierazpena eta zirkuitu elektrikoarekin duen analogia.

8.7 FOURIER-EN LEGEAREN APLIKAZIOA GEOMETRIA BAKUNENTZAT

8.7.1 Horma laua

Horrelako geometria labeek, gelek, hozkailuek eta beste hainbat sistemek izaten dute. Horma laua denez, bero-jarioaren norabideko edozein puntutan, bero-jarioarekiko perpendikularra den azalera berdina da, hau da, Fourier-en ekuazioan *A* azalera ez da

posizioaren mendekoa. Ondorioz, integraletik kanpora atera daiteke, eta adierazpen hau lortzen da:

$$Q\cdot\int_{X_1}^{X_2}\frac{dX}{A}=\int_{T_1}^{T_2}k\cdot dT \quad \therefore \quad Q=k\cdot A\cdot\frac{\Delta T}{\Delta X} \quad \therefore \quad Q=\frac{\Delta T}{\left(\frac{\Delta X}{k\cdot A}\right)} \tag{8.8}$$

Eroapen bidezko bero-transmisioari hormak jartzen dion erresistentzia

$$R=\left(\frac{\Delta X}{k\cdot A}\right) \tag{8.9}$$

da. Geometria horretako sistemetan, ohikoa da azalera unitateko bero-jarioa ematea (Q/A).

8.2 adibidea

Kongresu-jauregi bateko horma osoa beirazkoa da (k = 0,8 W/mK, eta lodiera, 4 cm) eta 25×7 m^2-ko azalera dauka. Barruko gainazala 24 ºC-ra eta kanpoaldeko gainazala 19 ºC-ra badaude, kalkula dezagun zenbat bero galtzen den kanporantz metro karratuko.

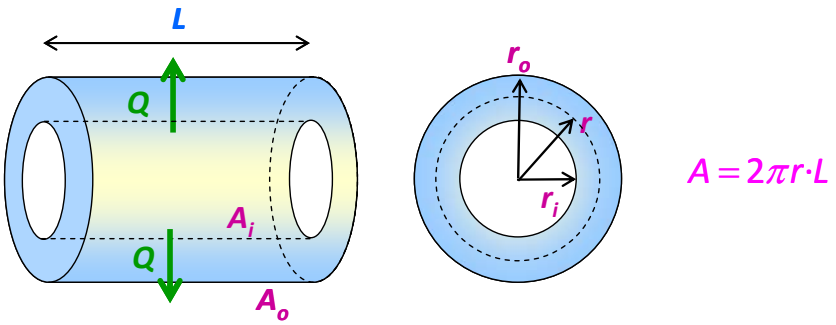
Ebazpena

Egoera geldikorra lortu duela onartzen bada, bero-jario hau kanporatzen da:

$$\frac{Q}{A}=\frac{\Delta T}{\left(\frac{\Delta X}{k}\right)}=\frac{(24-19)\,\cancel{ºC}}{\left(\frac{0{,}04\,m}{0{,}8\,W/m\cancel{K}}\right)}=100\,W/m^2$$

8.7.2 Zilindro hutsak

Geometria hori sarri agertzen da ingeniaritza kimikoan, hodiak erabiltzen direnean, batik bat. Demagun r_i eta r_o barne- eta kanpo-erradioak dituen zilindroa dugula, L luzerakoa. Hodiaren barne-gainazala T_1 tenperaturan badago eta hodiaren kanpo-gainazala T_2 tenperaturan badago, bero-jarioa erradioaren norabidean gertatzen da (noranzkoa, ordea, kanpoko eta barruko gainazalen tenperaturaren araberakoa da). Jarioarekiko perpendikularra den azalera, beraz, erradioaren mendekoa da. 8.6 irudian $T_1 > T_2$ kasua agertzen da; hodiaren muturretatik transmititzen den beroa baztertu dugu.



8.6 irudia. Eroapen bidezko bero-transmisioa zilindro hutsaren barnean.

Fourier-en ekuazioan erradioa erabiltzen bada noranzkoa adierazteko, eta azalera erradioaren mende idazten bada:

$$Q\cdot\int_{r_i}^{r_o}\frac{dr}{2\pi rL}=\int_{T_1}^{T_2}k\cdot dT \quad \therefore \quad Q=k\cdot A_{BL}\cdot\frac{\Delta T}{\Delta R} \quad \therefore \quad Q=\frac{\Delta T}{\left(\frac{\Delta r}{k\cdot A_{BL}}\right)} \tag{8.10}$$

A_{BL} = zilindroaren kanpo- eta barne-azaleren arteko batezbesteko logaritmikoa izanik. Diametroen batezbesteko logaritmikoaren mende idatz daiteke, honela:

$$A_{BL}=\frac{A_0-A_i}{\ln\left(\frac{A_0}{A_i}\right)}=2\cdot\pi\cdot L\cdot\frac{D_0-D_i}{\ln\left(\frac{D_0}{D_i}\right)}=2\cdot\pi\cdot L\cdot D_{BL} \tag{8.11}$$

Bi azalerak edo diametroak antzekoak direnean (A_o/A_i edo D_o/D_i < 2) batezbesteko logaritmikoa eta batezbesteko aritmetikoa ia bat datoz.

Bero-transmisiorako erresistentzia

$$R=\left(\frac{\Delta r}{k\cdot A_{BL}}\right) \tag{8.12}$$

da. Geometria honetako sistemetan, luzera unitateko bero-jarioa (Q/L) eman ohi da.

$$\frac{Q}{L}=\frac{\Delta T}{\left(\frac{\Delta r}{\pi\cdot k\cdot D_{BL}}\right)} \tag{8.13}$$

8.3 adibidea

Altzairuzko (k = 45 J/smK) hodi baten barruan, lurruna kondentsatzen ari da 170 ºC-an. Hodiaren kanpoko horma 10 ºC-an dago. Hodiaren barne-diametroa 10 cm-koa eta lodiera 8 mm-koa badira, kalkula dezagun hodi-metroko kanporatzen den beroa.

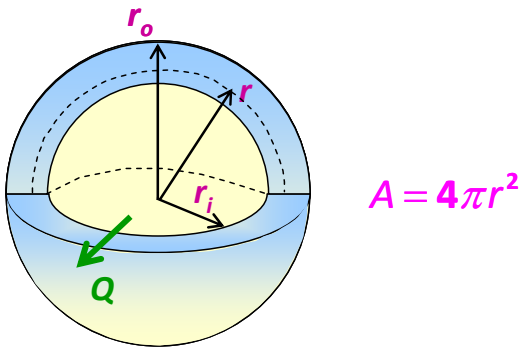
Ebazpena

Egoera geldikorra lortuta dagoela hartuko da. Bestalde, hodi barruko gainazalak 170 ºC-ko tenperatura duela onartuko da, kondentsatzen ari den lurrunaren konbekzio-koefizientea oso handia delako.
Hodiaren D_i, D_o, D_{BL} eta Δr hauek dira, hurrenez hurren (m): 0,1/0,116/0,1078/0,008.

$$\frac{Q}{L}=\frac{\Delta T}{\left(\frac{\Delta r}{\pi\cdot k\cdot D_{BL}}\right)}=\frac{(170-10)\,\cancel{ºC}}{\left(\frac{0{,}008\,m}{\pi\cdot 45\,W/\cancel{m}\,\cancel{K}\cdot 0{,}116\,\cancel{m}}\right)}=3{,}28\cdot 10^5\,W/m$$

8.7.3 Esfera hutsak

Honelako sistemak gas likidotuen eta likidoen tangetan aurki daitezke. Esferaren barne-gainazaleko tenperatura T_1 bada eta kanpo-gainazaleko tenperatura T_2 bada, bero-jarioa erradioaren norabidean gertatzen da. Bero-jarioaren norabidea T_1 eta T_2 tenperaturen araberakoa da. Demagun r_i eta r_o direla esferaren barne- eta kanpo-erradioak (ikusi 8.7 irudia).



8.7 irudia. Eroapen bidezko bero-transmisioa esfera hutsaren barnean.

Fourier-en ekuazioan A = 4·π·r^2 ordezkatzen bada,

$$Q\cdot\int_{r_i}^{r_o}\frac{dr}{4\pi r^2}=\int_{T_1}^{T_2}k\cdot dT \quad \therefore \quad Q=k\cdot A_{BG}\cdot\frac{\Delta T}{\Delta r} \quad \therefore \quad Q=\frac{\Delta T}{\left(\dfrac{\Delta r}{k\cdot A_{BG}}\right)} \tag{8.14}$$

A_{BG} = esferaren kanpo- eta barne-azaleren arteko batezbesteko geometrikoa izanik.

$$A_{BG}=\sqrt{A_0\cdot A_i}=\pi\cdot D_0\cdot D_i \tag{8.15}$$

Esfera hutsean bero-transmisiorako erresistentzia

$$R=\left(\frac{\Delta r}{k\cdot A_{BG}}\right) \tag{8.16}$$

da.

Beraz, sistemaren geometria edozein izanda ere, eroapen bidezko bero-transmisioak adierazpen matematiko bera du, baina kasu bakoitzean dagokion azalera erabili behar da.

8.4 adibidea

Altzairuzko tanga esferiko baten barruan nitrogeno likidoa gordetzen da. Esferaren kanpoko horma 293 K-ean dago, eta barneko gainazala 80 K-ean dagoela har daiteke. Esferaren barne-diametroa 2 m eta hormaren lodiera 1 cm dira. Altzairuaren *k* = 45 J/smK bada, kalkula dezagun nitrogenoaren aldera sartzen den beroa.

Ebazpena

Egoera geldikorra dela onartuko da. Kasu honetan, bero-jarioaren noranzkoa kanpoaldetik barrualdera da. Tangaren dimentsioak hauek dira:
D_i / D_0 / Δr (m) = 2 / 2,02 / 0,01 eta A_{BG} = π·2·2,02 = 12,69 m^2.

$$Q=\frac{\Delta T}{\left(\dfrac{\Delta r}{k\cdot A_{BG}}\right)}=\frac{(293-80)\,\cancel{K}}{\left(\dfrac{0{,}01\,\cancel{m}}{45\,W/\cancel{m}\,\cancel{K}\cdot 12{,}69\,\cancel{m^2}}\right)}=1{,}22\cdot 10^7\,W$$

8.8 HORMA KONPOSATUAK: BERO-TRANSFERENTZIAKO KOEFIZIENTE GLOBALA (*U*)

Sarri, horma lauak, zilindrikoak zein esferikoak, geruza batez baino gehiagoz osatuta egoten dira, eta, gehienetan, bero-galera murrizteko, isolatzailez inguratzen dira. Hala, etxeetako hormak adreiluzkoak izan arren, isolatzaile-geruza eduki dezakete; ur beroa daramaten hodiak, metalezko hodiaren gainetik, geruza isolatzaile batez estalita daude; nitrogeno likidoa gordetzeko tanga esferikoak isolatzailez estalita daude. Beste kasuren batean, zenbait material paraleloan ezarrita egon daitezke.

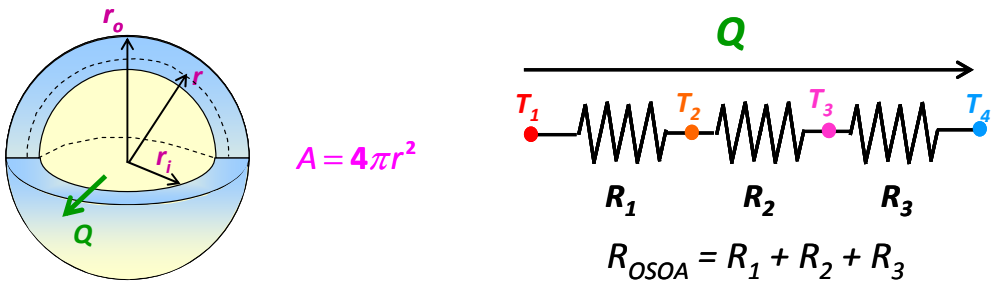
8.8.1 Geruza anitzeko horma lauak

8.8 irudian hiru geruzaz osatutako horma konposatuaren irudia agertzen da. Hiru geruzek azalera bera dute ($A = A_1 = A_2 = A_3$), eta egoera geldikorra lortutakoan, bero berak zeharkatzen du geruza bakoitza eta sistema osoa.

Sistema osoan indar eragilea edo tenperatura-gradientea geruza bakoitzaren tenperatura-jauzien batukaria da:

$$\Delta T_{OSOA} = (T_1 - T_4) = (T_1 - T_2) + (T_2 - T_3) + (T_3 - T_4)$$

$$Q = \frac{\Delta T_{OSOA}}{\left(\frac{\Delta X_1}{A k_1} + \frac{\Delta X_2}{A k_2} + \frac{\Delta X_3}{A k_3}\right)} = \frac{T_1 - T_2}{\left(\frac{\Delta X_1}{A k_1}\right)} = \frac{T_2 - T_3}{\left(\frac{\Delta X_2}{A k_2}\right)} = \frac{T_3 - T_4}{\left(\frac{\Delta X_3}{A k_3}\right)}$$



8.8 irudia. Eroapen bidezko bero-transmisioa, seriean jarritako hiru geruzaz osatutako horma lau konposatuan barrena.

Hala, *N* geruzaz osatutako horma lauaren kasuan, geruza guztien azalera bera denez, bero-jarioaren abiadura azalera unitateko eman ohi da, adierazpen honek islatzen duen moduan:

$$Q = \frac{\Delta T_{OSOA}}{\sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\Delta X_i}{A \cdot k_i}\right)} \tag{8.17}$$

Bero-transmisioko koefiziente globala*, *U, honela definitzen da:

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_{OSOA} = \frac{\Delta T_{OSOA}}{\left(\frac{1}{U \cdot A}\right)} \tag{8.18}$$

Definizio horren arabera, *U*-k horma konposatu osoak egiten duen erresistentzia osoaren berri ematen du $\left(R=\frac{1}{U\cdot A}\right)$. Bero-transmisioko koefiziente globalaren dimentsioa Energia/azalera·denbora·tenperatura-diferentzia da.

Kasu honetan, azalera guztiak berdinak izanik eta horma seriean jarrita egonik, 8.17 eta 8.18 ekuazioak berdintzen badira:

$$\frac{1}{U\cdot A}=\left(\frac{\Delta X_1}{A\cdot k_1}\right)+\left(\frac{\Delta X_2}{A\cdot k_2}\right)+\cdots+\left(\frac{\Delta X_N}{A\cdot k_N}\right) \tag{8.19}$$

edo

$$\frac{1}{U}=\left(\frac{\Delta X_1}{k_1}\right)+\left(\frac{\Delta X_2}{k_2}\right)+\cdots+\left(\frac{\Delta X_N}{k_N}\right) \tag{8.20}$$

lortzen da, geruza guztien azalera berdina baita.

Seriean kokatutako *N* geruzaz osatutako sisteman, $\frac{1}{U\cdot A}=\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\Delta X_i}{A_i k_i}\right)$ da. Horrek tartean dauden erresistentzia guztiak hartu behar ditu kontuan.

8.5 adibidea

Labe baten horma adreiluzkoa da, 15 cm-ko lodierakoa (*k* = 0,40 W/mK). Labe aldeko hormaren tenperatura 650 ºC eta kanpoaldekoa 50 ºC dira. Kostu energetikoak murrizteko, kanpoaldetik material isolatzaile baten (*k* = 0,04 W/mK) geruza batez estaltzea pentsatu da. Kalkula dezagun zer lodiera izan behar duen geruza horrek, urteko kostu energetikoak % 60 murriztu nahi badira.
Datuak: energiaren kostua 0,10 € /kWh da. Labeak 8.000 h/urte dihardu lanean.

Ebazpena

Labearen dimentsioak ematen ez direnez, azalera unitateko kalkulatuko da. Lehenik eta behin, isolatzailerik gabe kanporatzen den beroa kalkulatuko da Fourier-en legea erabiliz:

$$\frac{Q}{A}=\frac{(650-50)\,\cancel{ºC}}{\left(\frac{0{,}15\,m}{0{,}4\,W/m\cancel{K}}\right)}=1600\,W/m^2$$

Urte osoan, beraz, $1600\,W/m^2\cdot 8000h=12800\ kWh/m^2$ energia galtzen du, eta 1.280 €-ko kostu energetikoa du, hormaren metro karratuko.

Kostu energetikoak % 60 murrizteko (5.120 kWh-ko energia-galera), bero-galerak $1600\,W/m^2\cdot 0{,}4=640\ W/m^2$ izan behar du. Hori erresistentzia berri bat eranstean (isolatzaile-geruza) lortzen da.

$$640\,{}^{W}\!/_{m^2} = \frac{(650-50)\,{}^{\circ}\!\cancel{C}}{\left(\dfrac{0{,}15\,m}{0{,}4\,{}^{W}\!/_{m\cancel{K}}}\right)+\left(\dfrac{\Delta X\,m}{0{,}04\,{}^{W}\!/_{m\cancel{K}}}\right)}.$$

Adierazpen horretatik ΔX askatzen bada, 22,5 mm-ko lodierako geruzaz estali behar dela kalkulatzen da. Hala, 512 €-ko kostua baitu ($5.120\,kWh \cdot 0{,}10\,{}^{€}\!/_{kWh}$).

Bero-transmisioko koefiziente globala erabiliz ere ebatz daiteke:

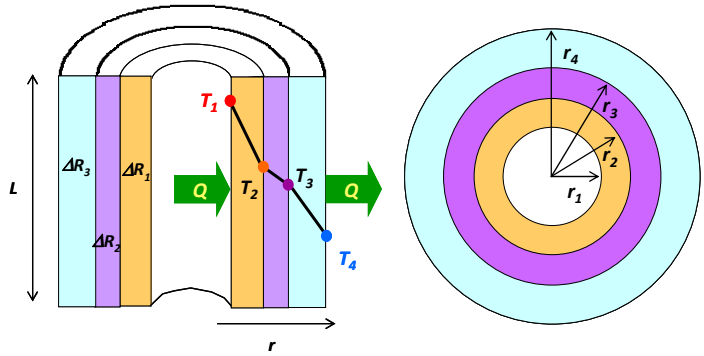
Sistemarentzako:

$$\frac{1}{U} = \left(\frac{0{,}15}{0{,}4}\right)+\left(\frac{\Delta X_2}{0{,}04}\right)$$

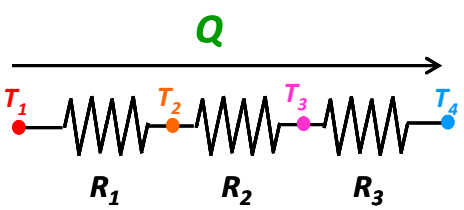
$640\,{}^{W}\!/_{m^2} = \dfrac{(650-50)\,{}^{\circ}\!\cancel{C}}{\left(\dfrac{1}{U}\right)}$ izanik, ΔX = 22,5 mm lortzen da.

8.8.2 Geruza anitzeko zilindroak

8.9 irudian hiru geruzaz osatutako zilindroaren irudia agertzen da, geruza bakoitzaren lodiera eta eroankortasun-koefizientea Δr_i eta k_i izanik, hurrenez hurren.



$$\left(\begin{aligned}
(A_1)_{BL} &= \frac{A_2 - A_1}{\ln\left(\dfrac{A_2}{A_1}\right)} \\
(A_2)_{BL} &= \frac{A_3 - A_2}{\ln\left(\dfrac{A_3}{A_2}\right)} \\
(A_3)_{BL} &= \frac{A_4 - A_3}{\ln\left(\dfrac{A_4}{A_3}\right)}
\end{aligned}\right)$$



$R_{OSOA} = R_1 + R_2 + R_3$

$$Q = \frac{\Delta T_{OSOA}}{\left(\dfrac{\Delta r_1}{(A_1)_{BL}\,k_1}+\dfrac{\Delta r_2}{(A_2)_{BL}\,k_2}+\dfrac{\Delta r_3}{(A_3)_{BL}\,k_3}\right)}$$

$$Q = \frac{T_1 - T_2}{\left(\dfrac{\Delta r_1}{(A_1)_{BL}\,k_1}\right)} = \frac{T_2 - T_3}{\left(\dfrac{\Delta r_2}{(A_2)_{BL}\,k_2}\right)} = \frac{T_3 - T_4}{\left(\dfrac{\Delta r_3}{(A_3)_{BL}\,k_3}\right)}$$

8.9 irudia. Eroapen bidezko bero-transmisioa, seriean jarritako hiru geruzaz osatutako zilindroaren barnean ($A_i = 2\pi \cdot r_i \cdot L$).

Hala, *N* geruzaz osatutako zilindroaren kasuan, geruza guztien luzera bera denez, bero-jarioaren abiadura hodi-luzera unitateko ematen da:

$$\frac{Q}{L}=\frac{\Delta T_{OSOA}}{\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\Delta r_i}{\pi\cdot k_i\cdot\left(D_i\right)_{BL}}\right)} \tag{8.21}$$

Horma lauetan ez bezala, sistema hauetan muturreko bi azalerak desberdinak dira. Barruko azalera $2\cdot\pi\cdot r_i\cdot L$ da; kanpoaldeko azalera, berriz, $2\cdot\pi\cdot r_o\cdot L$. Beraz, bero-transmisioko koefiziente globala definitzean, barruko edo kanpoko azalerarentzat defini daitezke, U_i eta U_o, hurrenez hurren.

$$Q=U_i\cdot A_i\cdot\Delta T_{OSOA}=U_o\cdot A_o\cdot\Delta T_{OSOA}=\frac{\Delta T_{OSOA}}{\left(\frac{1}{U_i\cdot A_i}\right)}=\frac{\Delta T_{OSOA}}{\left(\frac{1}{U_o\cdot A_o}\right)} \tag{8.22}$$

N geruzaz osatutako zilindro hutsen kasuan, adierazpen hauek erabiliko dira (barruko eta kanpoko azalerak $A_i = \pi\cdot D_i\cdot L$ eta $A_o = \pi\cdot D_o\cdot L$ izanik, hurrenez hurren) (adibidean, $D_i = D_1$ eta $D_o = D_4$ izango lirateke):

$$\frac{1}{U_i\cdot D_i}=\frac{\Delta r_1}{\pi\cdot k_1\cdot\left(D_1\right)_{BL}}+L+\frac{\Delta r_N}{\pi\cdot k_N\cdot\left(D_N\right)_{BL}} \tag{8.23}$$

$$\frac{1}{U_o\cdot D_o}=\frac{\Delta r_1}{\pi\cdot k_1\cdot\left(D_1\right)_{BL}}+L+\frac{\Delta r_N}{\pi\cdot k_N\cdot\left(D_N\right)_{BL}} \tag{8.24}$$

8.8.3 Geruza anitzeko esferak

8.10 irudian hiru geruzaz osatutako esfera hutsaren irudia agertzen da, geruza bakoitzaren lodiera eta eroankortasun-koefizientea Δr_i eta k_i izanik, hurrenez hurren. Arestian azaldutako bi geometrietan gertatzen den bezala, egoera geldikorra lortutakoan, bero berak zeharkatzen du geruza bakoitza eta sistema osoa.

Hala, *N* geruzaz osatutako esfera hutsaren kasuan, bero-jarioaren abiadura adierazpen honek ematen du:

$$Q=\frac{\Delta T_{OSOA}}{\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\Delta r_i}{k_i\cdot\left(A_i\right)_{BG}}\right)} \tag{8.25}$$

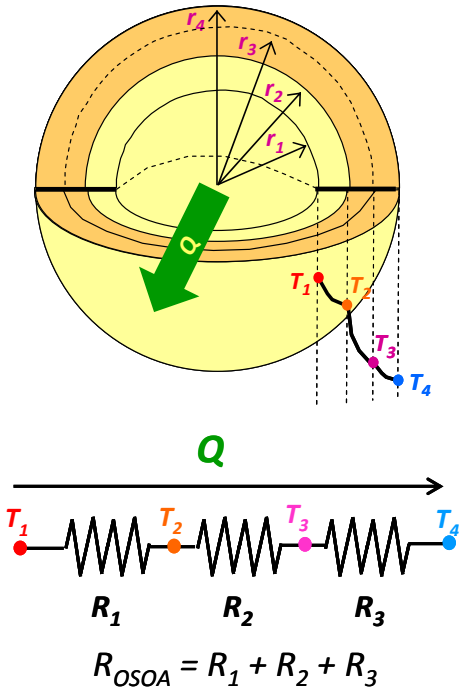
Sistema geometriko hauetan ere muturreko bi azalera desberdin daude, barrukoa eta kanpokoa. Beraz, U_i zein U_o defini daitezke, zilindroentzat erabili den notazio berarekin.

$$Q=U_i\cdot A_i\cdot\Delta T_{OSOA}=U_o\cdot A_o\cdot\Delta T_{OSOA}=\frac{\Delta T_{OSOA}}{\left(\frac{1}{U_i\cdot A_i}\right)}=\frac{\Delta T_{OSOA}}{\left(\frac{1}{U_o\cdot A_o}\right)} \tag{8.26}$$

N geruzaz osatutako esfera hutsen kasuan, adierazpen hauek erabiliko dira (barruko eta kanpoko azalerak $A_i = \pi\cdot D_i^2$ eta $A_o = \pi\cdot D_o^2$ izanik, hurrenez hurren) (adibidean, $D_i = D_1$ eta $D_o = D_4$ izango lirateke):

$$\frac{1}{U_i \cdot D_i} = \frac{\Delta r_1}{\pi \cdot k_1 \cdot (D_1)_{BG}} + \cdots + \frac{\Delta r_N}{\pi \cdot k_N \cdot (D_N)_{BG}} \tag{8.27}$$

$$\frac{1}{U_o \cdot D_o} = \frac{\Delta r_1}{\pi \cdot k_1 \cdot (D_1)_{BG}} + \cdots + \frac{\Delta r_N}{\pi \cdot k_N \cdot (D_N)_{BG}} \tag{8.28}$$



$$\begin{pmatrix} (A_1)_{BG} = \sqrt{A_2 \cdot A_1} \\ (A_2)_{BL} = \sqrt{A_3 \cdot A_2} \\ (A_3)_{BL} = \sqrt{A_4 \cdot A_3} \end{pmatrix}$$

$$Q = \frac{\Delta T_{OSOA}}{\left(\frac{\Delta r_1}{(A_1)_{BG} k_1} + \frac{\Delta r_2}{(A_2)_{BG} k_2} + \frac{\Delta r_3}{(A_3)_{BG} k_3} \right)}$$

$$Q = \frac{T_1 - T_2}{\left(\frac{\Delta r_1}{(A_1)_{BG} k_1} \right)} = \frac{T_2 - T_3}{\left(\frac{\Delta r_2}{(A_2)_{BG} k_2} \right)} = \frac{T_3 - T_4}{\left(\frac{\Delta r_3}{(A_3)_{BG} k_3} \right)}$$

8.10 irudia. Eroapen bidezko bero-transmisioa, seriean jarritako hiru geruzaz osatutako esferaren barnean.

8.8.4 Paraleloan eraikitako horma konposatuak

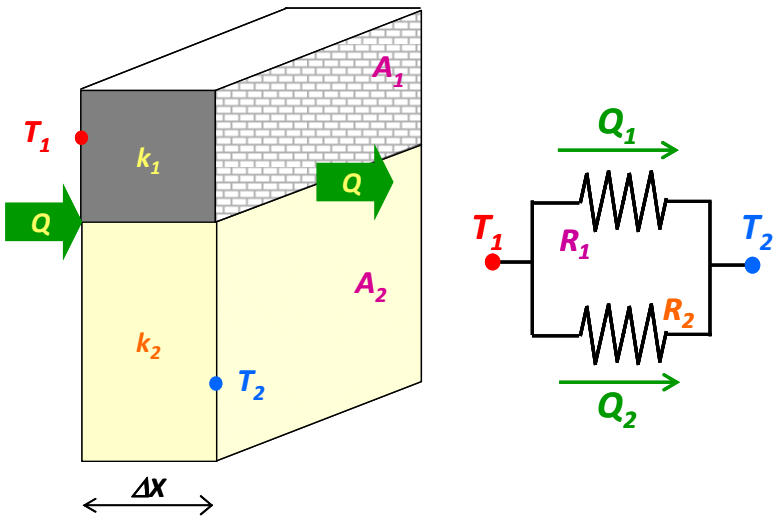
Kasu bereziren batean, hormako zenbait eremu material desberdinez osatuta egon daitezke, 8.11 irudian agertzen den bezala. Zirkuitu elektrikoekin egindako analogiaren arabera, horma konposatuak egiten duen erresistentzia baliokidea paraleloan kokatuta dauden erresistentzien baliokidea da. Kasu honetan bero-jarioa bi dimentsiokoa izan arren, hurbilketa gisa norabide bakarrekoa dela har daiteke, hauek suposatuz: (a) bero-jarioarekiko perpendikularrak diren azalerak isotermikoak dira, eta (b) bero-jarioarekiko paraleloak diren gainazalak adiabatikoak dira.

Bero-jarioa gertatzeko indar eragilea bera da bi materialetan, baina bakoitzak bere erresistentzia jartzen duenez, material bakoitza bero-jarioaren emari desberdinek zeharkatuko dute. Horma osorik zeharkatzen duen bero-jarioa geruza bakoitza zeharkatzen duen bero-jarioen batura da. Hala, lodiera bereko eta paraleloan eraikitako *N* materialez osatutako horma baten kasuan, bero-jarioaren abiadura honela adieraz daiteke:

$$Q = \frac{\Delta T}{\left(\frac{\Delta X}{\sum_{i=1}^{N} (k_i \cdot A_i)} \right)} \tag{8.29}$$

Bero-transmisioko koefiziente globala erabiltzen bada, balio hau izango du:

$$\frac{1}{U \cdot A} = \frac{\Delta X}{k_1 \cdot A_1 + k_2 \cdot A_2 + \cdots + k_N \cdot A_N} \tag{8.30}$$



$$Q_{OSOA} = Q_1 + Q_2$$

$$Q_1 = \frac{T_1 - T_2}{\left(\frac{\Delta X}{k_1 \cdot A_1}\right)} \quad \therefore \quad Q_2 = \frac{T_1 - T_2}{\left(\frac{\Delta X}{k_2 \cdot A_2}\right)}$$

$$Q = \frac{T_1 - T_2}{\frac{\Delta X}{(k_1 \cdot A_1 + k_2 \cdot A_2)}}$$

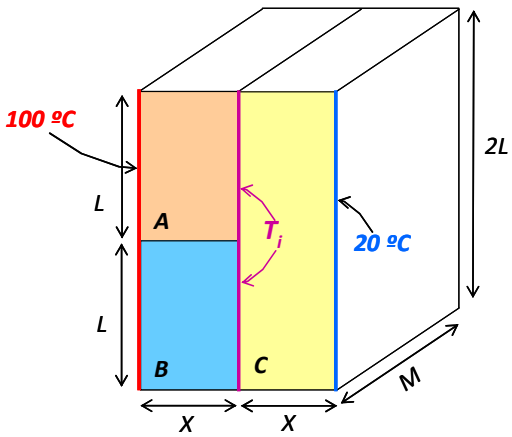
$$\frac{1}{R_{OSOA}} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}$$

8.11 irudia. Paraleloan eraikitako horma konposatuaren barneko bero-jarioa.

8.6 adibidea

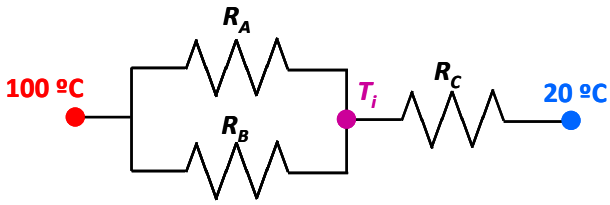
Kalkula ditzagun irudian agertzen den horma laua zeharkatzen duen bero-jarioa eta T_i tenperaturak.

X = 0,1 m; L = 1 m; M = 1 m
k_A (W/mK) = 1; k_B (W/mK) = 0,5; k_C (W/mK) = 2.



Ebazpena

Sistemaren analogoa den zirkuitu elektrikoa honako hau da:



A eta B erresistentziak paraleloan daudelako eta haien erresistentzia baliokidea C erresistentziarekin seriean dagoelako:

$$Q = \frac{\Delta T_{OSOA}}{\left(\frac{X}{k_A \cdot A_A + k_B \cdot A_B}\right) + \left(\frac{X}{k_C \cdot A_C}\right)} = \frac{(100-20)K}{\left(\frac{0,1}{1 \cdot 1 + 0,5 \cdot 1}\right)\frac{K}{W} + \left(\frac{0,1}{2 \cdot 2}\right)\frac{K}{W}}$$

$A_A = A_B = 1 \cdot 1$ m^2, $A_C = 2$ m^2 izanik.

Ebatzita, $Q = 872,7$ W bero-jarioa lortzen da.

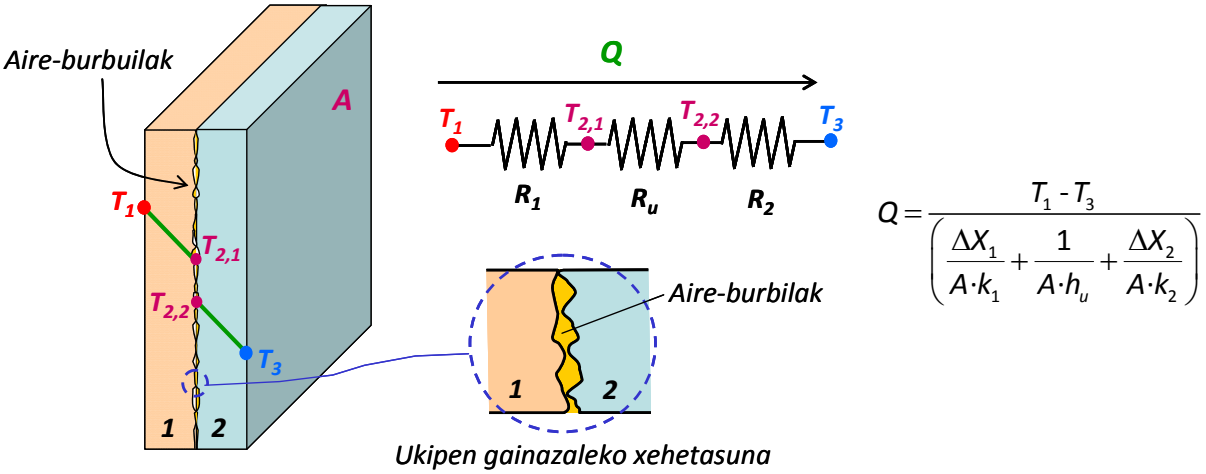
AC eta BC kontaktu-gainazalen tenperatura berdina dela jotzen bada (T_i):

$$Q = 872,7\,W = \frac{\Delta T_C}{\left(\frac{X}{k_C \cdot A_C}\right)} = \frac{(T_i - 20)K}{\left(\frac{0,1}{2 \cdot 2}\right)\frac{K}{W}}$$

Hortik, $T_i = 41,8$ ºC tenperatura lortzen da.

8.9 UKIPEN- EDO KONTAKTU-ERRESISTENTZIA

Maiz, bi gainazal solido elkar ukitzen dutela jartzean, bien arteko ukipena ez da osoa izaten, gainazalak guztiz leunak izan beharrean latzak direlako. Maila mikroskopiko eta makroskopikoan, kontakturik gabeko guneak sortzen dira (normalean, aire-burbuilaz beteak). Horren eraginez, bi materialen faseartean tenperatura-jauziak edo -gradienteak sortzen dira, 8.12 irudian agertzen den bezala. Fasearteko tenperatura-jauzia fasearteko erresistentziak sortzen du, eta ukipen-erresistentzia (R_u) deritzo. Erresistentzia horiek gas-burbuilaz beteta egoten direnez, eroapen-koefiziente baxua dute, eta sisteman zeharreko bero-jarioa aztertzean kontuan hartu beharreko terminoa izan daiteke.



$$Q = \frac{T_1 - T_3}{\left(\frac{\Delta X_1}{A \cdot k_1} + \frac{1}{A \cdot h_u} + \frac{\Delta X_2}{A \cdot k_2}\right)}$$

8.12 irudia. Kontaktu- edo ukipen-erresistentzia.

Ezinezkoa gertatzen denez erresistentzia horri zer eroapen-koefiziente eta lodiera dagozkion jakitea, konbekzio-erako koefiziente gisa eman daiteke (h_u). Ukipen-erresistentzia (R_u) honela ematen da:

$$R_u = \frac{1}{h_u \cdot A_u} \qquad (8.31)$$

h_u ukipenaren konbekzio-koefizientea eta A_u ukipen-azalera dira. Bi gainazalak elkartuta dauden presioaren, burbuiletan dagoen gasaren eta material solidoaren araberakoa da erresistentzia. Oro har, ukipen-presioa handitzen den heinean, ukipen-erresistentzia txikitu egiten da (hau da, h_u handitu).

Bero-transmisioko koefiziente globalean ukipenari dagokion erresistentzia kontuan hartzen bada, adierazpen hau lortuko litzateke (8.12 irudiko horma lauaren kasuan):

$$\frac{1}{U \cdot A} = \left(\frac{\Delta X_1}{A \cdot k_1}\right) + \left(\frac{1}{A_u \cdot h_U}\right) + \left(\frac{\Delta X_2}{A \cdot k_2}\right) \tag{8.32}$$

8.10 KONBEKZIO BIDEZKO BERO-TRANSMISIOA DIMENTSIO BAKARREAN ETA EGOERA GELDIKORREAN

Ingeniaritza kimikoan, sarri hozten edo berotzen da horma solido baten inguruko jariagaia. Gainazal solido baten inguruan mugitzen ari den jariagaiaren muinaren eta gainazalaren arteko bero-transmisioa ***konbekzio*** bidezkoa da, hau da, jariagaiaren mugimenduari dagokiona. Jariagai baten muinean gertatzen den bero-transmisioa konbekzio-mekanismoz gertatzen da, eta bi mekanismoren batukaria da: bata, jariagaiaren molekulen arteko eroapen bidezkoa (arestian ikusi den mekanismoa) eta bestea, jariagaiaren mugimendu makroskopikoari dagokiona, konbekzio bidezkoa, alegia.

Konbekzio-mekanismoa bi modutakoa izan daiteke, jariagaiaren mugimendu makroskopikoaren jatorriaren arabera:

(1) ***Berezko konbekzioa***. Jariagaiaren tenperatura-diferentziak jariagaiaren dentsitate-diferentzia dakar, eta horrek mugimendua sortzen du. Adibidez, lapiko batean ura berotzen jartzen bada, oinarriko gainazal beroaren inguruko jariagaia lapikoaren goian dagoena baino arinagoa da; horregatik, goranzko mugimendua jasango du, eta goiko jariagai hotzago eta astunagoak, berriz, beheranzko mugimendua jasango du. Hala, korronteak sortzen dira, eta mugimendu makroskopikoa eragiten dute.

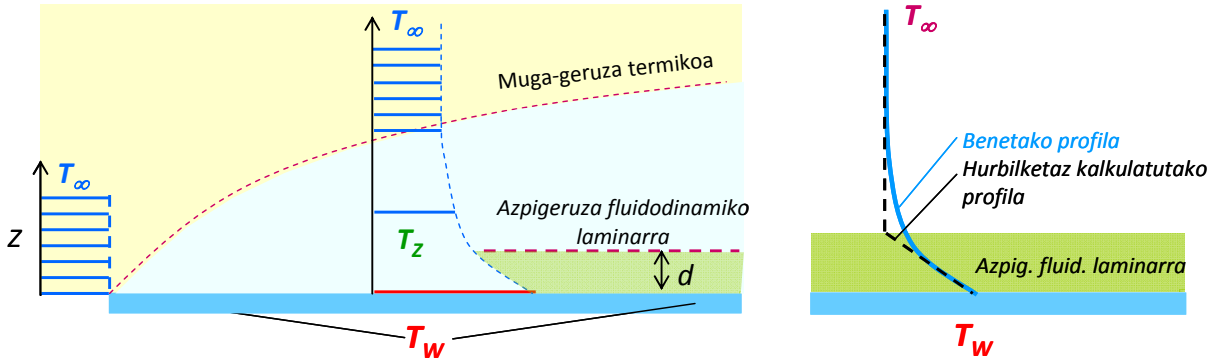
(2) ***Konbekzio indartua***. Jariagaiaren mugimendu makroskopikoa kanpotik eragiten da, ponpa edo haizagailu baten bidez irabiatuz, adibidez.

Begi-bistakoa da konbekzio indartuak berezkoak baino bero-jario handiagoa eragiten duela. Horregatik, kafe beroa hozteko, koilaraz irabiatzen da.

Gainazal solido bat ukitzen duen jariagaian, abiadura-profilarekin gertatzen zen bezala (ikus 6. gaia), tenperaturaren muga-geruza sortzen da (8.13 irudian). Muga-geruza termikoak jariagaiaren eremu bat adierazten du, eta haren tenperatura solidoaren tenperaturaren mende dago, hau da, tenperatura-profila garatzen da eremu horretan ($dT_Z/dZ \neq 0$). Muga-geruza termikoaren lodiera $(T_Z - T_\infty) = 0{,}99 \cdot (T_W - T_\infty)$ berdintzak ematen du, T_Z jariagaiaren tenperatura Z posizioan izanik.

Likido eta gasen eroapen-koefizienteen balioak txikiak dira (ikusi 8.3 irudia). Haietan, jariagaiaren mugimendu makroskopikoz gertatzen den bero-transmisioa (konbekzio bidezkoa) eroapenarekin gertatzen dena baino askoz ere nabarmenagoa da. Sistema horietan, eroapen bidezko bero-transmisioa batez ere azpigeruza fluidodinamiko laminarrean gertatzen da, eta muga-geruza zurrunbilotsuan, erabat konbekzio bidezkoa da. 8.13 irudian agertzen den benetako tenperatura-profila garatzen da. Sisteman garatzen den tenperatura-gradiente nabarmenena gainazal solidoaren inguruetan dagoen azpigeruzan

dago. Horregatik, muga-geruzaren teoria aplikatuz, benetakoaren antzeko hurbilketa hau egin daiteke: bero-jariorako, erresistentzia guztia gainazalaren inguruak egiten du (azpigeruza fluidodinamiko laminarrak), eta, ondorioz, tenperatura-gradiente osoa (T_W - T_∞) hor gertatzen da.



8.13 irudia. Muga-geruza termikoa eta azpigeruza fluidodinamiko laminarrean dagoen tenperatura-gradientea.

Azpigeruza honetan zeharreko bero-transmisioa eroapen bidezkoa da, baina azpigeruzaren lodiera (δ) jakitea zaila denez, konbekzio-koefizientea definitzen da. T_w tenperaturan dagoen gainazal solidoaren eta T_∞ muineko tenperatura daukan jariagai baten arteko bero-jarioaren abiadura Newton-en legeak ematen du:

$$Q = k \cdot A \cdot \frac{dT}{\delta} = h \cdot A \cdot \left(T_W - T_\infty\right) \tag{8.33}$$

$$h = \frac{k \cdot \frac{dT}{\delta}}{\left(T_W - T_\infty\right)} \tag{8.34}$$

$$Q = \frac{\text{indar eragilea}}{\text{erresistentzia}} = \frac{T_W - T_\infty}{\left(\frac{1}{h \cdot A}\right)} \tag{8.35}$$

Adierazpen horri Newton-en legea deritzo. *A*, jariagaiaren eta gainazalaren arteko kontaktu-azalera da, eta *h* konbekzio-koefizientea.

h-ren dimentsioa energia/denbora·azalera·tenperatura-diferentzia da. Konbekzio-mekanismoaren bidezko bero-transmisioa gerta dadin sistemak duen erraztasuna da, eta $\left(\frac{1}{h \cdot A}\right)$ terminoak erresistentzia adierazten du.

h-n aldagai hauek eragiten dute: sistemaren geometriak, jariagaiaren abiadurak eta propietate fisikoek (dentsitatea, biskositatea, eroapen-koefizientea, bero espezifikoa). Esperimentalki, dimentsio-analisiaren bidez edo mugimendu kantitatearen eta masaren garraioekin duen antzekotasuna jakinez zenbatesten da *h*. *h*-ren balioa sistema bakoitzaren araberakoa den arren, 8.2 taulan agertzen diren balio tipikoak eman daitezke.

8.2 taulan ikusten denez, *h* koefizientearen balioa handiagoa da konbekzio indartuan berezkoan baino; era berean, gasetan likidoetan baino txikiagoa da (kontuan hartu muga-geruzan eroapenez gertatzen dela transmisioa, eta gasen eroankortasuna likidoena baino baxuagoa dela). Fase-aldaketa gertatzen denean (likidoak irakiten duenean edo lurruna

kondentsatzen denean), konbekzio-koefizienteak izugarri handitzen dira. Sistema askotan, fase-aldaketa gertatzen ari den mintzak jartzen duen erresistentzia baztertu egin daiteke.

8.2 Taula. *h*-ren balioaren ohiko tarteak sistema batzuetan.

Sistema	h (W/m^{2}K)
Berezko konbekzioa	
Gasak	<25
Likidoak	50-1000
Konbekzio indartua	
Gasak	25-250
Likidoak	50-20000
Fase-aldaketa (kondentsazioa eta irakitea)	2500-100000

Konbekzio-mekanismoa dimentsio-analisiaz aztertzen bada, dimentsio gabeko zenbaki edo erlazio batzuk definitzen dira. 8.3 taulan aipatzen dira haietako batzuk.

8.3 Taula. Bero-transmisioko dimentsio gabeko zenbakiak, eta haien esangura fisikoa.

Zenbakia	Izena	Definizioa*	Esangura fisikoa
Pr	Prandtl	$\frac{C_p \mu}{k}$	Mugimendu kantitatearen barreiapena/barreiapen termikoa
Nu	Nusselt	$\frac{hL}{k}$	Konbekzio bidezko bero-jarioa/eroapen bidezko bero-jarioa
Re	Reynolds	$\frac{LV\rho}{\mu}$	Inertzia-indarrak/marruskadura-indarrak
Gr	Grashof	$\frac{\beta g \Delta T L^3 \rho^2}{\mu^2}$	Flotazio-indarrak/Likatasun-indarrak

*Oharra: *L*-k luzera dimentsioa du, eta diametroa zein luzera izan daiteke, geometriaren arabera.

Prandtl zenbakiak muga-geruza hidrodinamikoa eta termikoaren lodieren arteko erlazioa adierazten du. Pr = 1 denean, bi muga-geruzen lodierak berdinak dira; Pr > 1 denean muga-geruza hidrodinamikoa, muga-geruza termikoa baino lodiagoa da eta Pr < 1 denean, muga-geruza hidrodinamikoa, muga-geruza termikoa bainoa meheagoa da.

Dimentsio-analisiaren bidez adierazpen orokor hau lortzen da, eta, hortik, *h* kalkula daiteke:

$$\mathrm{Nu} = f(\mathrm{Re}, \mathrm{Pr}, \mathrm{Gr}) \tag{8.36}$$

Konbekzio indartuan eta jarioa zurrunbilotsua denean, flotazio-indarrak baztergarriak dira inertzia-indarren aldean, hau da, Grashof zenbakiaren eragina baztergarria da Re zenbakiaren aldean. Horregatik, sistema horietarako korrelazioek adierazpen orokor hau dute:

$$\mathrm{Nu} = f(\mathrm{Re}, \mathrm{Pr}) \tag{8.37}$$

Berezko konbekzioan eta jarioa laminarra denean, ordea, sisteman ez dago zurrunbilorik. Horregatik, flotazio-indarrek garrantzia hartzen dute, eta Gr zenbakiaren eragina Re zenbakiarena baino nabarmenagoa denez, honelako adierazpenak lortzen dira:

$$\mathrm{Nu} = f(\mathrm{Pr}, \mathrm{Gr}) \tag{8.38}$$

Kasu partikular bakoitzean, ekuazio hauek forma partikularrak hartzen dituzte. Adibide gisa, 8.4 taulan ematen dira horietako batzuk.

8.4 Taula. Konbekzio-koefizientearen kalkulurako hainbat adierazpen.

Korrelazioa	*Geometria*	*Baldintzak*
INDARTUA		
$\mathrm{Nu_D} = 0{,}023 \cdot \mathrm{Re}_D^{4/5} \cdot \mathrm{Pr}^n$	Barne-jarioa hodian 0,6 < Pr < 160 Re > 10000	Berotu n = 0,4 Hoztu n = 0,3
BEREZKOA		
$\mathrm{Nu} = a \cdot (\mathrm{Gr} \cdot \mathrm{Pr})^m$	Kanpo-jarioa zilindro horizontalean Jario laminarra	a = 0,53 m = 0,25
$\mathrm{Nu} = a \cdot (\mathrm{Gr} \cdot \mathrm{Pr})^m$	Kanpo-jarioa xafla horizontalean Jario laminarra	a = 0,54 m = 0,33

8.7 adibidea

5 cm-ko barne-diametroa duen altzairuzko hodi baten barrutik etanoa igarotzen da 5 kg/min-ko emariaz eta 1 atm-ko presioan. Hodiaren sarrera eta irteera 20 eta 80 ºC-an daude, hurrenez hurren. Kalkula dezagun etanoak eta hodiaren hormak osatutako sisteman h-k duen balioa.

Datuak: sistema osoarentzat batez besteko tenperatura erabiliko da: 50 ºC.

μ =0,0098 cP ; C_P = 0,45 kcal/kg ºC ; k = 2,09·10^{-2} kcal/hmºC

Geometria honentzat, $\mathrm{Nu} = 0{,}023 \cdot \mathrm{Re}^{0,8} \cdot \mathrm{Pr}^{0,4}$ dela har daiteke.

Ebazpena

$$\mathrm{Re} = \frac{5\,\cancel{kg}/\cancel{min} \cdot \frac{1\,\cancel{min}}{60s} \cdot 0{,}05\,\cancel{m} \cdot \frac{1}{0{,}00196\,m^{\cancel{2}}}}{9{,}8 \cdot 10^6\,\cancel{kg}/\cancel{ms}} = 2{,}17 \cdot 10^5$$, hau da, ingurune zurrunbilotsua dago.

$$\mathrm{Pr} = \frac{C_p \mu}{k} = \frac{0{,}45\,\cancel{kcal}/\cancel{kg}\,ºC \cdot 9{,}8 \cdot 10^{-6}\,\cancel{kg}/\cancel{m}\,\cancel{s}}{2{,}09 \cdot 10^{-2}\,\cancel{kcal}/\cancel{h}\,\cancel{m}\,ºC \cdot \frac{1\,\cancel{h}}{3600\,\cancel{s}}} = 0{,}76$$

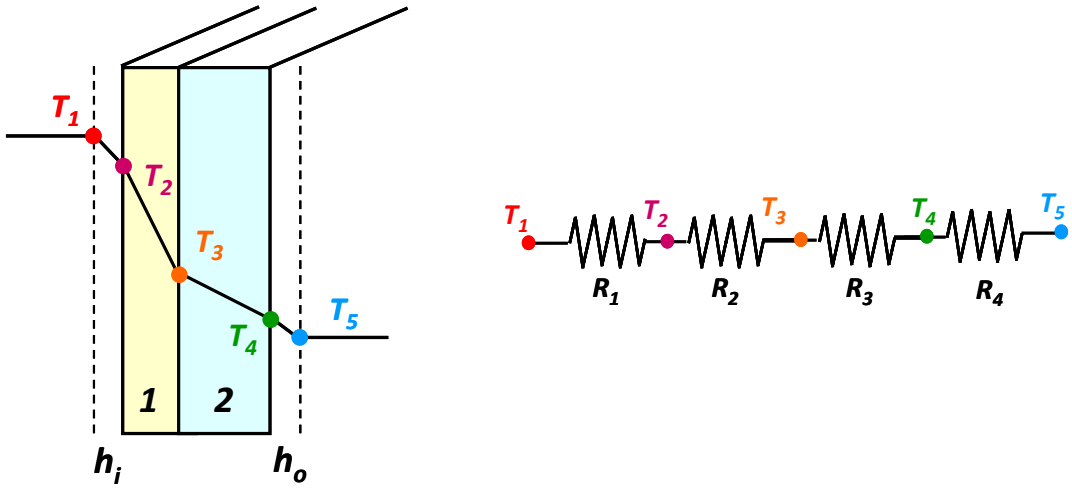
$$\mathrm{Nu} = 383 = \frac{h \cdot 0{,}05m}{2{,}09 \cdot 10^2\,kcal/\cancel{h}\,m ºC \cdot \frac{1\,\cancel{h}}{3600s}}$$

Hortik h = 0,044 kcal/sm^{2}ºC dela kalkula daiteke.

8.11 MEKANISMO KONBINATUAK: BERO-TRANSFERENTZIAKO KOEFIZIENTE GLOBALA (*U*)

8.14 irudiko sisteman, bi geruzaz osatutako hormak jariagai beroa eta jariagai hotza bereizten ditu (adibidez, bero-trukagailuan). Tenperatura altuko gunetik tenperatura baxuko gunera bero-jarioa gertatuko da. Bero-transferentzia zenbait mekanismoz gertatzen da, eta

bakoitzak erresistentzia bat jartzen du. Ohartu gaitezen lau erresistentziak seriean kokatzen direla.



8.14 irudia. Konbekzio eta eroapen bidezko bero-transmisioa.

(1) Lehenik, tenperatura altuan dagoen jariagaiak hormaren inguruan geldikor dagoen mintzean jartzen duen erresistentzia, konbekzio bidezkoa. Balioa $R_1 = \dfrac{1}{h_i \cdot A_i}$ da, eta bertako gradientea T_1 - T_2 da.

(2) Ondoren, 1 materialak jartzen duena, eroapen bidezkoa. Balioa $R_2 = \dfrac{\Delta X}{k_1 \cdot A_1}$ da, eta gradientea T_2 - T_3 da.

(3) Gero, 2 materialarena, $R_3 = \dfrac{\Delta X}{k_2 \cdot A_2}$, eta gradientea T_3 - T_4 da.

(4) Azkenik, gune hotzeko jariagaiak hormaren inguruko mintzean eskaintzen duena, konbekzio bidezkoa. $R_4 = \dfrac{1}{h_o \cdot A_o}$ da, eta bertako gradientea T_4 - T_5 da.

Bero-transmisioko koefiziente globala kalkulatzen bada (horma lauak direnez, $A_i = A_o = A_1 = A_2 = A$ da):

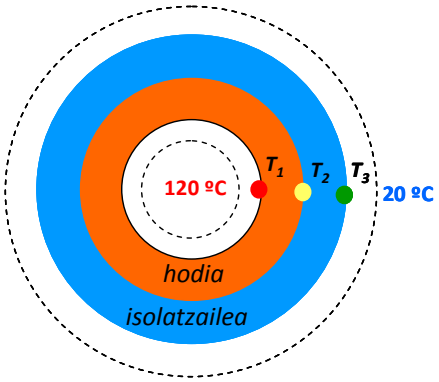
$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_i} + \frac{\Delta X_1}{k_1} + \frac{\Delta X_2}{k_2} + \frac{1}{h_0} \tag{8.39}$$

Horma lauak izan ordez 2 geruzaz osatutako zilindro hutsak edo esfera hutsak badira, U_o eta U_i kalkula daitezke, eta erresistentzia bakoitzean dagokion azalera erabili behar da.

	Zilindroak		Esferak	
U_i	$\dfrac{1}{U_i} = \dfrac{1}{h_i} + \dfrac{D_i \cdot \Delta X_1}{D_{BL,1} \cdot k_1} + \dfrac{D_i \cdot \Delta X_2}{D_{BL,2} \cdot k_2} + \dfrac{D_i}{D_o \cdot h_0}$	U_i	$\dfrac{1}{U_i} = \dfrac{1}{h_i} + \dfrac{A_i \cdot \Delta X_1}{A_{BG,1} \cdot k_1} + \dfrac{AD_i \cdot \Delta X_2}{A_{BG,2} \cdot k_2} + \dfrac{AD_i}{A_o \cdot h_0}$
U_o	$\dfrac{1}{U_o} = \dfrac{D_o}{D_i \cdot h_i} + \dfrac{D_o \cdot \Delta X_1}{D_{BL,1} \cdot k_1} + \dfrac{D_o \cdot \Delta X_2}{D_{BL,2} \cdot k_2} + \dfrac{1}{h_0}$	U_o	$\dfrac{1}{U_o} = \dfrac{A_o}{A_i \cdot h_i} + \dfrac{A_o \cdot \Delta X_1}{A_{BG,1} \cdot k_1} + \dfrac{A_o \cdot \Delta X_2}{A_{BG,2} \cdot k_2} + \dfrac{1}{h_0}$

8.8 adibidea

10 cm-ko barne-diametroko eta 4 cm-ko lodierako hodi zilindriko baten barnetik (k = 500 W/mK) likido bat igarotzen da, 120 ºC-an (tenperatura konstantea). Hodia geruza isolatzaile batez estalita dago kanpoaldetik (4 cm-ko lodiera, eta k = 0,05 W/mK). Hodiaren kanpoaldeko airearen tenperatura 20 ºC da. Kanpoalderako h_o = 20 W/m^{2}K eta barrualderako h_i = 4.000 W/m^{2}K direla har daiteke.
Kalkula dezagun: (a) bero-transmisioko koefiziente globala barruko azalerarentzat; U_i (b) hodi-metroko galtzen den beroa; eta (c) tenperaturen profil kualitatiboa.



1 geruza
Hodia: D_i = 0,1 m
ΔX = 0,04 m
D_0 = 0,18 m
D_{BL} = 0,136 m

2 geruza
Isolatzailea: D_i = 0,18 m
ΔX = 0,04 m
D_0 = 0,26 m
D_{BL} = 0,2176 m

(a) Bero-jarioak hodi barruko jariagaiaren muinetik kanpoko airearen muinerako bidean, seriean kokatutako lau erresistentzia zeharkatu behar ditu. U_i kalkulatzen bada:

$$\frac{1}{U_i}=\frac{1}{h_i}+\frac{D_i\cdot\Delta X_1}{D_{BL,1}\cdot k_1}+\frac{D_i\cdot\Delta X_2}{D_{BL,2}\cdot k_2}+\frac{D_i}{D_o\cdot h_0}$$

$$\frac{1}{U_i}=\frac{1}{4000}+\frac{0{,}1\cdot 0{,}04}{0{,}136\cdot 500}+\frac{0{,}1\cdot 0{,}04}{0{,}2176\cdot 0{,}05}+\frac{0{,}1}{0{,}26\cdot 20}=$$

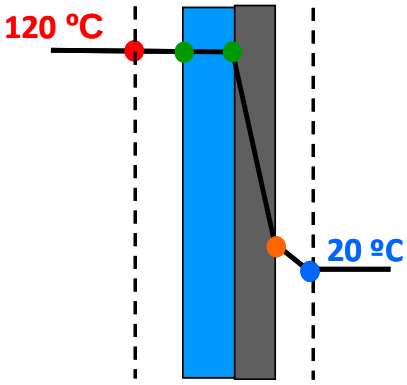
$$\frac{1}{U_i}=\cancel{\frac{1}{4000}}+\cancel{\frac{1}{17000}}+\frac{1}{2{,}72}+\frac{1}{52}$$

$$U_i=2{,}58\,{}^{W}\!/_{m^2K}$$

Seriean dauden lau erresistentzietatik, barruko jariagaiak konbekzioz egiten duena eta hodiaren hormak eroapenez egiten duena baztertu egin daitezke, isolatzaileak eta kanpoko aireak egiten dutenekin alderatuz gero.

(b) $\frac{Q}{L}=U_i\cdot\pi\cdot D_i\cdot\Delta T_{OSOA}=2{,}58\cdot\pi\cdot 0{,}1\cdot(120-20)=81\,{}^{W}\!/_{m}$

(c) Lehen esandakoagatik, $T_1 \approx T_2 \approx$ 120 ºC izango da.



Era berean, isolatzaileak duen erresistentzia (1/2,72) kanpoko konbekzioak jartzen duena baino 19 aldiz handiagoa denez (52/2,72), bi geruza horietan tenperatura-gradiente hauek daude:

Isolatzaile-geruzan = (T_2 - T_3)

Hodiaren kanpoko gainazalaren eta airearen artean ≈ 19·(T_3 - 20)

T_3 kalkulatu nahi bada, kanpoko geruzan konbekzio bidezko

bero-transmisioari dagokion legea aplikatu besterik ez dago:

$$\frac{Q}{L} = 81\ {}^{W}\!/_{m} = h_o \cdot \pi \cdot D_o \cdot (T_3 - 20) = 20 \cdot \pi \cdot 0{,}26 \cdot (T_3 - 20)$$
$$T_3 = 29{,}9 ºC$$

8.12 GAINAZAL HEDATUAK: HEGATSAK

Horma baten eta jariagai baten arteko bero-transmisioa handitzeko erabiltzen diren gainazal hedatuak dira hegatsak. Adibide batekin azalduko da haien efektua.

Demagun hodi zilindriko baten barrutik irakiten ari den likido bat igarotzen dela, eta hodiaren kanpoaldean airea dagoela. Barrualdeko jariagaia fasez aldatzen ari denez (*h* oso handia 8.2 taularen arabera), mintz horren erresistentzia baztergarria da. Halaber, hodia metalezkoa eta oso lodia ez bada, haren eroapen bidezko erresistentzia ere baztertu daiteke. Sistema horrentzat, U_i hau da:

$$\frac{1}{U_i} = \frac{A_i}{h_0 \cdot A_0} \tag{8.40}$$

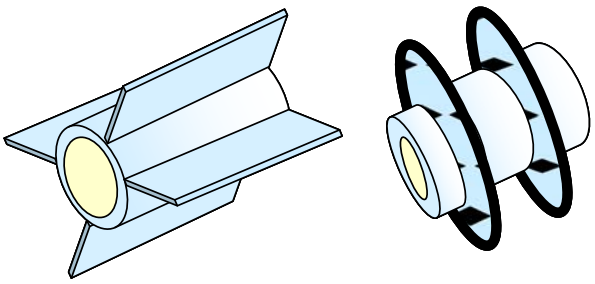
Adierazpenaren arabera, sistema honetan bero-transmisioaren abiadura kanpoaldeko konbekzio-koefizienteak mugatzen du. Bero-jarioa handitu nahi bada (U_i handitu nahi bada), bi aukera agertzen dira:

- Kanpoaldeko jariagaian jario zurrunbilotsua eragin, h_o handitu dadin. Irtenbide horrek bero-transmisioa hobetzen eta bero-jarioa handitzen du, baina oso proportzio txikian.
- Sistema honen barruko azalera aldatu gabe kanpoaldeko azalera (A_o) handitu. Hori egiteko, hegatsak erabiltzen dira. Hala, h_o aldatzen ez den arren $h_o \cdot A_o$ handitu egiten da, eta, beraz, U_i ere handitu egiten da.

Hegatsak egitura askotakoak izan daitezkeen arren, oro har, 8.15 irudian agertzen diren bi hauek aipa daitezke:

-***luzerako hegatsak***: hodiaren luzera-norabidean eransten zaizkio.

-***hegats erradialak***: disko-antzeko hegatsak dira, erradioaren norabidean eransten zaizkionak.



(a) *Luzerako hegatsa*, (b) *hegats erradiala*

8.15 irudia. Hegasdun hodiak, luzerako norabidean (a) eta norabide erradialean.

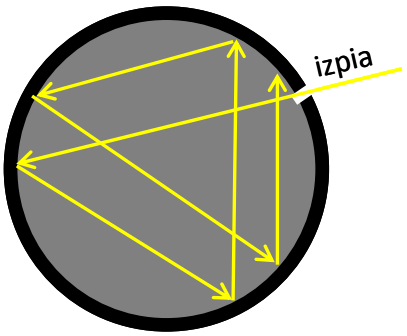
8.13 ERRADIAZIO BIDEZKO BERO-TRANSMISIOA

Materia osatzen duten elektroiek, atomoek eta molekulek bibrazio- eta errotazio-mugimenduak pairatzen dituzte tenperatura bat izateagatik (zero absolutuan izan ezik). Hala, materiak energia igortzen du, molekulak maila energetiko desberdinen artean mugitzean sortua. Energia hori uhin elektromagnetiko edo fotoi eran igortzen eta transmititzen da espazioko norabide guztietan, eta erradiazioa deritzo. Inolako euskarri materialen beharrik ez denez, hutsean ere transmiti daiteke erradiazioa, eroapen eta konbekzio bidezko bero-transmisioan ez bezala. Materiak igortzen duen energia espektro osoko uhinez osatuta dago: izpi kosmikoetatik (uhin luzera txikienekoak) irrati-uhinetaraino (uhin luzera handienekoak), eta, tartean, argi ultramorea, argi ikusgaia eta infragorria daude. Bero-transmisioaren ikuspuntu praktiko batetik begiratuta, 0,1-100 μm-ko uhinek eragiten dute tenperatura-aldaketa, eta ***erradiazio termiko*** deritze. Uhin-tarte horrek argi ultramorea, ikusgaia eta infragorria barne hartzen ditu.

8.14 GORPUTZ BELTZAREN ERRADIAZIOA

Erradiazio termikoaren ikuspuntutik, tenperatura eta uhin-luzera guztietan igor dezakeen erradiazio maximoa igortzen eta absorbatzen duen gorputza da gorputz beltza edo igorle ideala.

Gorputz beltza benetako gorputzen ahalmen igorle eta absorbatzailea neurtzeko erabiltzen den patroia da. 8.16 irudian agertzen den gorputz beltzean (esfera huts isotermoa, kanpoarekiko guztiz isolatua), gorputzera heltzen den erradiazioa gorputzean bertan metatzen da; talketan absorbatzen da, kanporatu gabe. Horren ondorioz, gorputzak absorbatu duen energia osoa igorri egingo du. Hau da, gorputz beltzaren ahalmen igorle eta absorbatzailea osoa da.



8.16 irudia. Gorputz beltz ideala.

Uhin-luzera bakoitzerako gorputz beltz (edo ideal) baten ahalmen igorlea Planck-en legeak ematen du:

$$W_\lambda = \frac{C_1}{\lambda^5\left(e^{C_2/\lambda T}-1\right)} \qquad (8.41)$$

W_λ gorputzak bolumen unitateko igortzen duen energia da (W/m^3) (ahalmen igorle monokromatikoa), eta C_1 eta C_2 erradiazio-konstanteak dira ($3{,}7415\cdot10^{-16}$ Wm^2 eta $1{,}4388\cdot10^{-2}$ mK, hurrenez hurren). Ekuazioan ikusten den bezala, zenbat eta tenperatura altuagoa izan, orduan eta ahalmen igorle monokromatiko handiagoa dauka. Gorputz beltzaren ahalmen igorle osoa ahalmen igorle monokromatikoen batura da, eta, matematikoki, integralaren bidez adierazten da (Stefan-Boltzmann-en legea):

$$W_b = \int_0^{\infty} W_\lambda \cdot d\lambda = \sigma \cdot T^4 \tag{8.42}$$

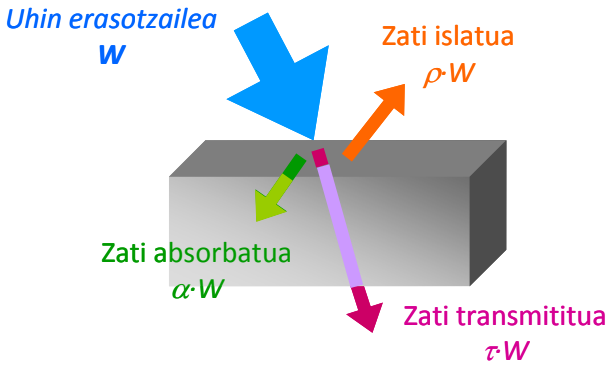
W_b gorputz beltzaren azalera unitateko ahalmen igorlea da (W/m^2), eta σ Stefan-Boltzmann-en konstantea da: 5,670·10^{-8} W/m^{2}K^4.

Erradiazio termikoari hiru gauza gerta dakizkioke materiarekin topo egiten duenean: absorbatzea, islatzea edo materiaren barnera transmititzea, 8.17 irudian agertzen den bezala.

Uhin erasotzailetik absorbatutako zatia α absortzio-koefizienteak adierazten du; islatzen den zatia, berriz, ρ islapen-koefizienteak ematen du, eta transmititzen den zatia τ transmisibitate-koefizienteak ematen du. Ondorioz:

$$\alpha + \tau + \rho = 1 \tag{8.43}$$

Gorputz baten α = 1 bada, gorputz beltza da; gorputz baten ρ = 0 bada, opakua dela esaten da.



8.17 irudia. Gorputz baten aurka eraso egiten duen uhinak jasaten dituen prozesuak.

Erradiazio termikoan, materiaren beste propietate garrantzitsua emisibitatea edo ***igortze-koefizientea*** (ε) da, gorputzaren ahalmen igorlearen eta tenperatura berean dagoen gorputz beltzaren ahalmen igorlearen arteko erlazio gisa definitua.

$$\varepsilon = \frac{W}{W_b} = \frac{W}{\sigma \cdot T^4} \tag{8.44}$$

Ingurunearekin oreka termikoan dagoen gorputz baten kasuan, $\alpha = \varepsilon$ da. Gorputz beltzaren kasuan, beraz, $\alpha = \varepsilon = 1$ da. Ahalmen igorle maximoa gorputz beltzarena denez, $0 < \varepsilon < 1$ (beltza) betetzen da; benetako gorputzen igortze-koefizientea 0 eta 1 artekoa da. Gorputza idealtasunetik zein gertu dagoen adierazten duen zenbakia da emisibitatea; 1etik gertuago dagoena idealtasunetik (beltz izatetik) gertuago dago.

Benetako gorputzen eredu bat ezartzeko, gorputz grisak izeneko sistemak erabiltzen dira. Honela definitzen dira: α eta ε monokromatikoak uhin-luzerarekiko independenteak diren gorputzak. Benetako gorputzetan, ordea, hori ez da betetzen. Hala ere, kasu praktiko gehienetan, hurbilketa gisa, α eta ε-ren batezbesteko balioak konstantetzat har daitezke, eta gorputz gristzat har daitezke.

Beraz, hau da benetako gorputzaren azalera unitateko ahalmen igorlea:

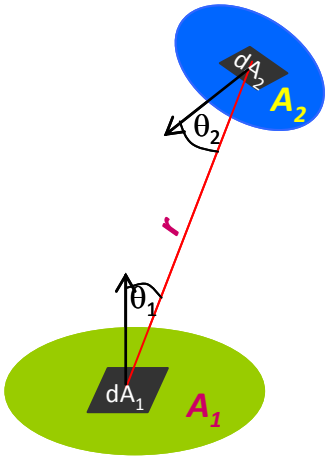
$$W = \varepsilon \cdot \sigma \cdot T^4 \tag{8.45}$$

Hau da, tenperatura berean dagoen gorputz beltzak igorriko lukeenaren zati bat besterik ez luke igorriko ($\sigma < 1$ baita).

Stefan-Boltzmann-en legearen arabera, tenperatura baxuetan (< 300 K) erradiazio termikoaren ahalmena baztergarria da eroapena edo konbekzioa gertatzen diren sistemetan. Hala ere, tenperatura altuetako sistemetan (labeak, batez ere) edo hutsa dagoen sistemetan, garrantzi nabarmena hartzen du beroa transmititzeko mekanismo horrek.

8.14.1 Forma edo ikuspegi-faktorea erradiazio termikoan

Orain arte ahalmen igorle osoa erabili da, hau da, norabide guztietan gertatzen denaren batukaria. Hala ere, kasu praktikoetarako interes gehiago izan dezake norabide finko bateko erradiazioa zenbatzeak. Hala, norabide batean gainazal igorletik distantzia finkora dagoen gainazal batera heltzen den erradiazioa bi gainazalen arteko angelu solidoaren (θ_1 eta θ_2 angeluek emana), bi azaleren (A_1 eta A_2) eta distantziaren (r) araberakoa da (r^2-rekiko alderantziz proportzionala, alegia) (ikusi 8.18 irudia).



8.18 irudia. Ikuspegi-faktorearen eratorpenean eragina duten aldagaiak.

F_{12} ikuspegi-faktorea da, eta 1 gainazalak igortzen duen erradiazio osotik 2 gainazalera heltzen den zatikia adierazten du. Modu berean, F_{21} ikuspegi-faktoreak adierazten du 2 gainazalak igortzen duen energiaren zein zatiki heltzen den 1 gainazalera. Beraz, faktore geometrikoa da, dimentsiogabea.

Gainazal batek igortzen duen erradiazioaren zati bat bere buruari hel dakioke, geometria aproposa bada. Hala, 8.19 irudian agertzen diren geometrietan, $F_{11} = 0$ eta $F_{22} = 1$ diren moduan, $0 < F_{33} < 1$ izango da (zati bat inguruetara baitoa). 1 gainazala esferaren kanpo-gainazala da eta kanpoaldera igortzen badu, bere burua ezin duenez ikusi, igortzen duena ez da bere gainazalera heltzen. 2 gainazala esferaren barrualdeko gainazala da, eta igortzen duen guztia bere buruari doakio. 3 gainazalak, ordea, bere buruaren zati bat ikusten duenez, igortzen duenaren zati bat bere buruari helduko zaio ($0 < F_{33} < 1$).

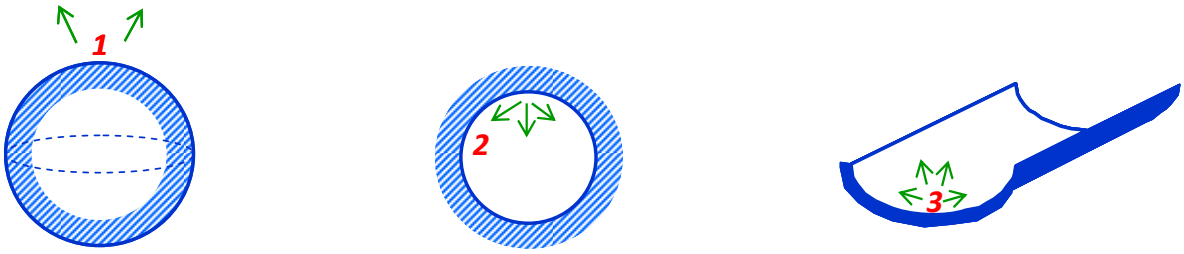
Sistema bat N gainazal beltzez osatuta badago, eta bakoitzaren azalera A_j bada ($j = 1,\ldots,N$), bi baldintza hauek beteko dira:

(a) Gainazalak binaka harturik, elkarrekikotasun-teorema. Edozein j eta k gainazalentzat:

$$A_j \cdot F_{jk} = A_k \cdot F_{kj} \tag{8.46}$$

(b) Edozein *j* gainazalentzat, berak igortzen duen energia guztia azalera guztien artean banatzen da (bere burua barne); energiaren iraupen-legea:

$$F_{j1} + F_{j2} + \cdots + F_{jj} + \cdots + F_{jN} = 1 \qquad (8.47)$$



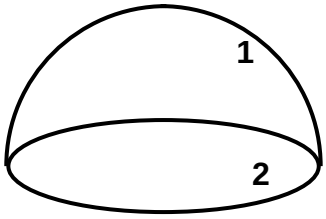
Esfera, barrualdetik isolatuta — *Esfera, kanpoaldetik isolatuta* — *Plano biribildua, azpialdetik isolatua*

8.19 irudia. Esferaren kanpo-azalera (1), esferaren barne-azalera (2) eta plano biribilduaren barne-azalera (3).

8.9 adibidea

Esferaerdi eta plano batez osatutako sistema itxia kanpoaldetik termikoki isolatuta dago, hots, bero-trukea aurrez aurre dauden aurpegien artean ematen da. Esferaerdiaren diametroa *D* bada, kalkula ditzagun sistemako ikuspegi-faktore guztiak.

Ebazpena



Esferaerdiaren azalera $A_1 = \pi \cdot D^2$ da.
Planoaren azalera $A_2 = (\pi/4) \cdot D^2$ da.
$F_{22} = 0$ da (planoak ezin du bere burua ikusi)

$1 = F_{21} + F_{22}$; $F_{21} = 1$, hau da, planoak igorritako guztia esferaerdiari heltzen zaio.

Elkarrekikotasun-teorema aplikatuz:

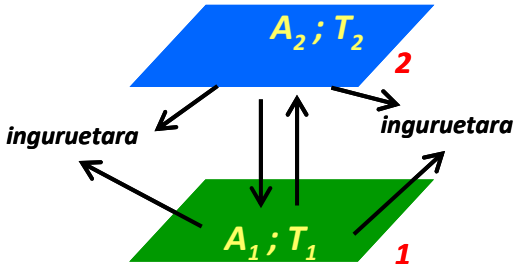
$\pi \cdot D^2 \cdot F_{12} = (\pi/4) \cdot D^2 \cdot 1$ eta askatuz, $F_{12} = 0{,}25$.

Hau da, esferaerdiak igortzen duenaren % 75 bere buruari heltzen zaio, eta % 25 besterik ez da 2 gainazalera heltzen.

8.15 GAINAZAL BELTZEN ARTEKO ERRADIAZIO BIDEZKO BERO-TRUKEA

Gainazal beltz batek igortzen duen erradiazio termikoa norabide guztietan hedatzen da. Inguruetan beste gainazal beltz bat badago, 8.20 irudian bezala, 1 gainazalak igortzen duen erradiazioaren zatiki bat besterik ez da 2 gainazalera heltzen, beste guztia inguruetan galtzen da. Demagun 8.20 irudiko 1 eta 2 gainazal beltzak ditugula, kanpoaldera begira dauden aurpegiak termikoki isolatuta daudela eta $T_1 > T_2$ dela.

Ikusten den bezala, 1 gainazalak igortzen duen erradiazioaren zati bat 2 gainazalari heltzen zaio, baina beste zati bat aldamenetatik inguruetan “galtzen” da; era berean, 2 gainazalak igortzen duen zati bat besterik ez da 1 gainazalera heltzen.



8.20 irudia. Bi gainazal lau beltz, aurrez aurre.

1 gainazaletik 2 gainazalera (eta alderantziz) erradiazioz heltzen diren bero-jarioak:

$$Q_{1\to 2} = \sigma \cdot F_{12} \cdot A_1 \cdot T_1^4 \tag{8.48}$$

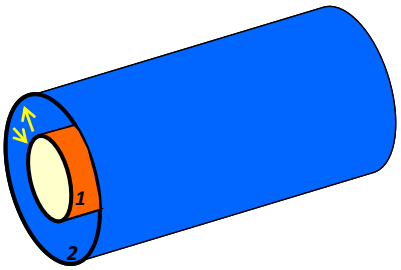
$$Q_{2\to 1} = \sigma \cdot F_{21} \cdot A_2 \cdot T_2^4 \tag{8.49}$$

Egoera geldikorra lortzean, hau da 1 eta 2 gainazalen arteko bero-jario garbia ($Q_{1\leftrightarrows 2}$):

$$Q_{1\rightleftarrows 2} = Q_{1\to 2} - Q_{2\to 1} = \sigma \cdot F_{12} \cdot A_1 \cdot \left(T_1^4 - T_2^4\right) \tag{8.50}$$

Bibliografian, geometria desberdinen ikuspegi-faktoreen kalkulu grafikorako irudiak aurki daitezke.

8.10 adibidea



Bitez luzera infinituko bi hodi zilindriko zentrokide, biak gainazal beltzak, eta T_1 = 500 K eta T_2 = 300 K. Kalkula dezagun bi gainazalen arteko bero-jario garbia $A_2 = 5 \cdot A_1$ bada.

Demagun hodien arteko bero-trukea aurrez aurre dauden aurpegien artean ematen dela soilik. Bestalde, hodien luzera infinitua bada, muturreko hutsunetik inguruetara galtzen den beroa arbuiagarria da (tunel baten barruan bageunde, zenbat eta luzeagoa izan, orduan eta argi gutxiago ikusiko genuke bi muturretan).

Ebazpena

1 zilindroaren kanpo-gainazalak bere burua ikusten ez duenez F_{11} = 0 da, eta, ondorioz, F_{12} = 1 da. Elkarrekikotasun-teorematik ($A_1 \cdot 1 = 5 \cdot A_1 \cdot F_{21}$) F_{21} = 0,20 lortzen da.

$$Q_{1\rightleftarrows 2} = \sigma \cdot F_{12} \cdot A_1 \cdot \left(T_1^4 - T_2^4\right)$$

$Q_{1\leftrightarrows 2}/A_1 = 5{,}67 \cdot 10^{-8}\ \mathrm{W/m^2K^4} \cdot 1 \cdot (500^4 - 300^4)\ \mathrm{K^4}$

$Q_{1\leftrightarrows 2}/A_1 = 3{,}08\ \mathrm{kW/m^2}$.

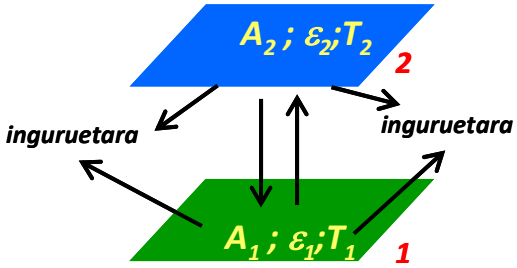
8.16 GAINAZAL GRISEN ARTEKO ERRADIAZIO BIDEZKO BERO-TRUKEA

8.21 irudiko bi gainazalak grisak badira, bakoitzak bat baino emisibitate txikiagoa izango luke. Sistema honetan, faktore geometrikoez gain, emisibitateak ere kontuan hartu behar dira bi gainazalen arteko bero-trukea azaltzeko. Adierazpen honek 1 eta 2 gainazal grisen arteko bero-jario garbia adierazten du, $\tilde{F}_{12}$ ikuspegi-faktore globala izanik.

$$Q_{1\rightleftarrows 2} = \sigma \cdot \tilde{F}_{12} \cdot A_1 \cdot \left(T_1^4 - T_2^4\right) \tag{8.51}$$

$$\frac{1}{\tilde{F}_{12}} = \frac{1}{F_{12}} + \left(\frac{1}{\varepsilon_1} - 1\right) + \frac{A_1}{A_2}\left(\frac{1}{\varepsilon_2} - 1\right) \tag{8.52}$$

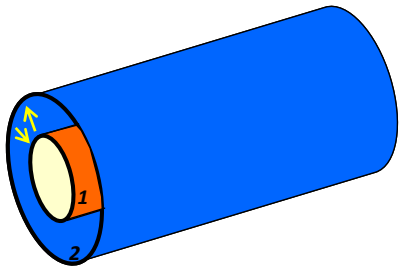
$\tilde{F}_{12}$ ikuspegi-faktore globalak, sistemaren geometria ez ezik, gainazalen emisibitateak ere kontuan hartzen ditu.



8.21 irudia. Aurrez aurre dauden bi gainazal gris lauen arteko erradiazio bidezko bero-trukea.

Ikuspegi-faktore globaletik erator daitekeenez, bera baino askoz ere azalera handiagoz (A_2) inguratuta dagoen azalera txiki baten (A_1) kasuan, $\tilde{F}_{12} = \varepsilon_1$ da.

8.11 adibidea



Bitez luzera infinituko bi hodi zilindriko zentrokide, biak gainazal grisak, T_1 = 500 K eta T_2 = 300 K, eta ε_1 = 0,75 eta ε_2 = 0,5. Kalkula dezagun bi gainazalen arteko bero-jario garbia (a) $A_2 = 5 \cdot A_1$ bada, (b) $A_2 >> A_1$ bada.

8.10 adibidean bezala, hodien arteko bero-trukea aurrez aurre dauden aurpegien artean gertatzen da soilik.

Ebazpena

F_{11} = 0 denez (zilindroaren kanpo-gainazalak ez duelako bere burua ikusten), F_{12} = 1 da. Elkarrekikotasun-teorematik ($A_1 \cdot 1 = 5 \cdot A_1 \cdot F_{21}$) F_{21} = 0,20 lortzen da.

$$Q_{1\rightleftarrows 2} = \sigma \cdot \tilde{F}_{12} \cdot A_1 \cdot \left(T_1^4 - T_2^4\right)$$

(a) $\frac{1}{\tilde{F}_{12}} = \frac{1}{F_{12}} + \left(\frac{1}{\varepsilon_1} - 1\right) + \frac{A_1}{A_2}\left(\frac{1}{\varepsilon_2} - 1\right) = \frac{1}{1} + \left(\frac{1}{0{,}75} - 1\right) + \frac{1}{5}\left(\frac{1}{0{,}5} - 1\right) = 0{,}652$; $\tilde{F}_{12} = 1{,}534$

$Q_{1\rightleftarrows 2}/A_1 = 5{,}67 \cdot 10^{-8}\ \mathrm{W/m^2K^4} \cdot 1{,}534 \cdot (500^4 - 300^4)\ \mathrm{K^4}$

$Q_{1\rightleftarrows 2}/A_1 = 4{,}72\ \mathrm{kW/m^2}$.

(a) $\frac{1}{\tilde{F}_{12}} = \frac{1}{F_{12}} + \left(\frac{1}{\varepsilon_1} - 1\right) + \frac{A_1}{A_2}\left(\frac{1}{\varepsilon_2} - 1\right) = \frac{1}{1} + \left(\frac{1}{0{,}75} - 1\right) + \cancel{\frac{A_1}{A_2}\left(\frac{1}{0{,}5} - 1\right)} = 1{,}333$; $\tilde{F}_{12} = 0{,}75$

$Q_{1\rightleftarrows 2}/A_1 = 5{,}67 \cdot 10^{-8}\ \mathrm{W/m^2K^4} \cdot 0{,}75 \cdot (500^4 - 300^4)\ \mathrm{K^4}$

$Q_{1\rightleftarrows 2}/A_1 = 2{,}31\ \mathrm{kW/m^2}$. Gainazal beltzak balira baino bero-truke txikiagoa gertatzen da.

8.17 ERRADIAZIO BIDEZKO BERO-TRANSMISOKO KOEFIZIENTEA, h_R

Ez da erosoa laugarren berreturako ekuazioak erabiltzea, Stefan-Boltzmann-en legean bezala. Kalkuluak errazteko, ingeniaritzan, bero-transmisioko lege zinetikoak adierazten duen moduko ekuazio sinpleagoak erabiltzen dira, era honetan:

$$Q_{1\to 2} = \frac{\text{indar eragilea}}{\text{erresistentzia}} = \frac{\Delta T}{R} = A_1 \cdot h_R \cdot (T_1 - T_2) \tag{8.53}$$

h_R erreadiazio bidezko bero-transmisioko koefizientea da, konbekzio-koefizientearen dimentsio berekoa. Definizioz,

$$Q_{1\rightleftarrows 2} = \sigma \cdot \tilde{F}_{12} \cdot A_1 \cdot \left(T_1^4 - T_2^4\right) = h_R \cdot A_1 \cdot (T_1 - T_2) \tag{8.54}$$

Beraz,

$$h_R = \frac{\sigma \cdot \tilde{F}_{12} \cdot \left(T_1^4 - T_2^4\right)}{(T_1 - T_2)} \tag{8.55}$$

moduan kalkula daiteke.

8.12 adibidea

Hodi zilindriko batek gela handi bat zeharkatzen du. Hodiaren kanpo-gainazala grisa (ε_1 = 0,8) da, eta 500 K-ean dago. Gelako hormak (ε_2 = 0,5) 300 K-ean badaude, kalkula dezagun hodiaren kanpo-gainazala eta hormaren gainazalen artean erradiazio bidezko bero-jario garbia azalera unitateko.

Ebazpena

$A_1 <<< A_2$ denez, $\tilde{F}_{12}$ = 0,8 dela har daiteke.

$$h_R = \frac{5{,}67 \cdot 10^8 \, W/m^2K^4 \cdot 0{,}8 \cdot \left(500^4 - 300^4\right) K^4}{(500 - 300) K} = 12{,}34 \, W/m^2K$$

$$\frac{Q_{1\rightleftarrows 2}}{A_1} = 12{,}34 \, W/m^2K \cdot (500 - 300) K = 2{,}47 \, kW/m^2$$

8.18 EROAPEN, KONBEKZIO ETA ERRADIAZIO BIDEZKO MEKANISMO KONBINATUAK: BERO-TRANSFERENTZIAKO KOEFIZIENTE GLOBALA (*U*)

Sistema gehienetan, mekanismo bat baino gehiago gertatzen da aldi berean. Arestian ikusi da paraleloan zein seriean gertatzen den bero-jarioan erresistentzia baliokideak nola kalkulatzen diren:

Seriean kokatutako erresistentziak:

$$R_{BAL} = \sum_{1}^{N} R_i \tag{8.56}$$

Paraleloan kokatutako erresistentziak:

$$\frac{1}{R_{BAL}} = \sum_{1}^{N} \frac{1}{R_i} \tag{8.57}$$

Erresistentzia horiek zenbait mekanismoren ondorioz gerta daitezke:

Eroapen bidezko erresistentzia:

$$R_K = \frac{\Delta X}{k \cdot A} \tag{8.58}$$

Azalera geometriaren araberakoa da.

Konbekzio bidezko erresistentzia:

$$R_h = \frac{1}{h \cdot A} \tag{8.59}$$

Erradiazio bidezko erresistentzia:

$$R_R = \frac{1}{h_R \cdot A} \tag{8.60}$$

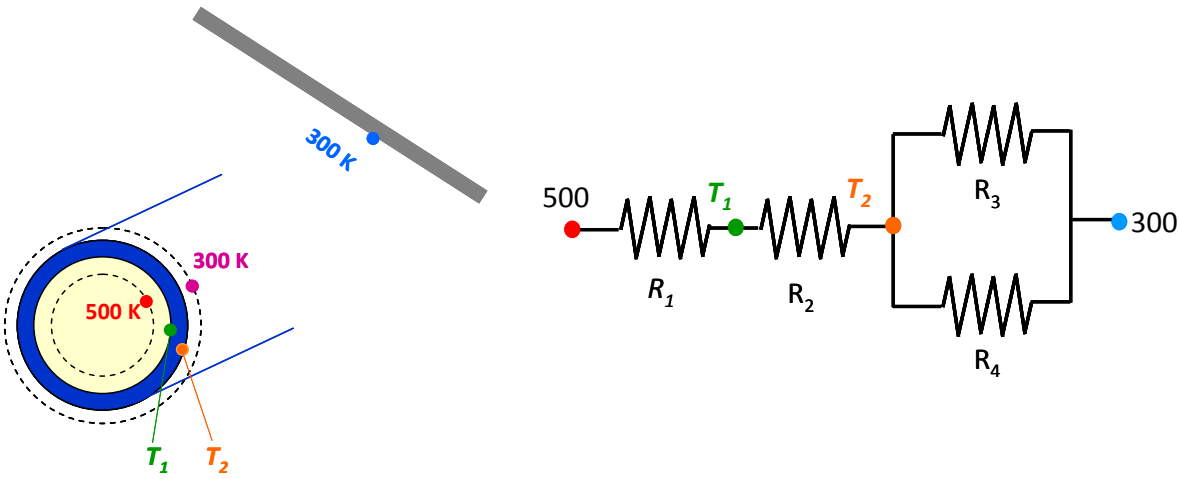
Bero-transmisioko koefiziente globala erabiltzen bada, U_i edo U_o erabiliko dira sistema osoaren barruko eta kanpoko azalerekin (A_i eta A_o) (horma lauen kasuan $A_i = A_o$ denez, $U_i = U_o$ da):

$$\frac{1}{U_i \cdot A_i} = \frac{1}{U_o \cdot A_o} = R_{OSOA} \tag{8.61}$$

8.13 adibidea

Hodi zilindriko batek gela handi bat zeharkatzen du. Hodiaren barrutik 500 K-ean asetako lurruna igarotzen da. Hodiaren kanpo-gainazala grisa da (ε_1 = 0,75), eta hormen gainazalak beltzak direla har daiteke. Gelako tenperatura 300 K da (hormen gainazalen berdina). Kalkula dezagun (a) hodi-luzerako kanporatzen den bero-jarioa (b) erradiazio bidezko bero-transmisioko koefizientearen balioa (c) erradiazioz kanporatzen den bero-jarioa (d) konbekzioz kanporatzen den bero-jarioa.

Datuak: D_i = 10 cm; ΔX = 1 cm; k = 50 W/mK; h_i = 1500 W/m^{2}K; h_o = 20 W/m^{2}K
D_{BL} = 10,97 cm.



Ebazpena

Irudian marraztu den erresistentzia-sarea zeharkatuko du bero-jarioak. R_1 hodiaren barruko jariagaiaren konbekzio bidezko erresistentzia, R_2 hodiaren hormaren eroapen bidezko erresistentzia, R_3 kanpoaldeko jariagaiaren konbekzio bidezko erresistentzia eta R_4 hodiaren kanpo-gainazalaren eta gelako hormen arteko erradiazio bidezko erresistentziak izanik. R_1 eta R_2 seriean daude, baina hodiaren kanpo-gainazaletik gelako hormetara paraleloan gertatzen diren konbekzioz eta erradiazioz gertatzen da trukea.

Lehenik eta behin, erradiazio-koefizientea kalkulatuko da.
Hodiaren kanpo-azalera gelako hormena baino askoz ere txikiagoa denez eta F_{12} = 1 denez, $\tilde{F}_{12} \approx 0{,}75$ da (ε_1 = 0,75 delako). h_R kalkatzeko ekuazioan ordezkatuz, h_R = 11,6 W/m^{2}K lortzen da.

R (m^{2}K/W)	**R$_1$** ($1/A_i \cdot h_i$)	**R$_2$** ($\Delta X/k \cdot A_{BL}$)	**R$_3$** ($1/A_o \cdot h_o$)	**R$_4$** ($1/A_o \cdot h_R$)
A_k (m^2)	$\pi \cdot L \cdot 0{,}1$	$\pi \cdot L \cdot 0{,}1097$	$\pi \cdot L \cdot 0{,}12$	$\pi \cdot L \cdot 0{,}12$
R_k (K/W)	$1/\ \pi \cdot L \cdot 0{,}1 \cdot 1500$	$0{,}01/(50 \cdot \pi \cdot L \cdot 0{,}1097)$	$1/\ \pi \cdot L \cdot 0{,}12 \cdot 20$	$1/\ \pi \cdot L \cdot 0{,}12 \cdot 11{,}6$

R_3 eta R_4-ren erresistentzia baliokidea kalkulatzen bada (paraleloan daudela kontuan hartuz):

$$R_{BAL} = \frac{1}{(h_o + h_R)A_o} = \frac{1}{31{,}6 \cdot \pi \cdot L \cdot 0{,}12} \, K/W$$

$h_o + h_R = h_{BAL}$ = 31,6 W/m^{2}K izanik.

Orain, seriean kokatuta dauden R_1, R_2 eta R_{BAL} erresistentziek osatzen dute sistema.

Hodiaren kanpoko azalera oinarritzat harturik U_o kalkulatuko da:

$$\frac{1}{U_o \cdot A_o} = \frac{1}{h_i \cdot A_i} + \frac{\Delta X}{k \cdot A_{BL}} + \frac{1}{h_{BAL} \cdot A_o} \quad ; \quad \frac{1}{U_o} = \frac{D_o}{h_i \cdot D_i} + \frac{\Delta X \cdot D_o}{k \cdot D_{BL}} + \frac{1}{h_{BAL}}$$

Balioak ordezkatuz, $\frac{1}{U_o} = \frac{0{,}12}{1500 \cdot 0{,}10} + \frac{0{,}01 \cdot 0{,}12}{50 \cdot 0{,}1097} + \frac{1}{31{,}6} = \cancel{\frac{1}{1250}} + \cancel{\frac{1}{4571}} + \frac{1}{31{,}6}$ lortzen da.

Barruko jariagaiak konbekzioz eta hodiaren hormak eroapenez egiten duten erresistentziak arbuiagarriak dira kanpoko jariagaiak, konbekzioz, eta erradiazioak egiten dutenarekiko.

$U_o \approx$ 31,6 W/m^{2}K dela har daiteke. Honen arabera, $T_1 \approx T_2 \approx$ 500 K da.

(a) $\frac{Q}{L} = \pi D_o U_o \Delta T_{OSOA}$; $\frac{Q}{L} = \pi \cdot 0{,}12 \cdot 31{,}6 \cdot (500 - 300) = 2383 \, W/m$

(b) h_R = 11,6 W/m^{2}K

(c), (d) kanporatzen den bero osoa, hodi-metroko, 2.383 W da. Hodiaren kanpo-gainazalera heldu den beroak bi bide (mekanismo) hartzen ditu, aldi berean: konbekzio bidezkoa eta erradiazio bidezkoa. Beraz, bero-jario osoa bi bideetakoaren batura da:

Q_{OSOA}/L = 2383 W/m = $(Q/L)_{Konb}+(Q/L)_R$.

$\left(\frac{Q}{L}\right)_R = \pi D_o h_R \Delta T$; $\left(\frac{Q}{L}\right)_R = \pi \cdot 0{,}12 \cdot 11{,}6 \cdot (500 - 300) = 875 \, W/m$ erradiazioz.

$\left(\frac{Q}{L}\right)_{Konb} = \pi D_o h_o \Delta T$; $\left(\frac{Q}{L}\right)_{Konb} = \pi \cdot 0{,}12 \cdot 20 \cdot (500 - 300) = 1508 \, W/m$ konbekzioz.

9. GAIA

BERO-TRANSMISIORAKO EKIPOAK: BERO-TRUKAGAILUAK

Instalazio kimikoetan, maiz, bi jariagairen artean bero-trukea gauzatzen da, energia aprobetxatzearren. Adibidez, 400 ºC-an lan egiten duen erreaktoretik irteten den gasaren energia termikoa erabil daiteke destilagailua elikatu behar den nahaste hotza berotzeko. Zentral nuklear batean, erregaiaren fisioak sortzen duen energia ur-lurruna berotzeko erabiltzen da, ondoren turbinan elektrizitatea sortzeko. Gaur egun energia hain garestia izanik, eduki energetiko altuko iturriak ahal den hobekien erabili behar dira haien energia beste sistema batek aprobetxa dezan.

Instalazio kimikoetan, gehienbat, jariagaiekin lan egiten da, likido eta gasekin. Haiek berotu edo hoztu egin behar dira prozesuko hainbat urratsetan. Beste batzuetan, fasez aldatu behar dira, kondentsatu edo irakiarazi. Jariagai beroen eta jariagai hotzen energia termikoa (beroa) trukatzeko ekipoari ***bero-trukagailu*** deritzo.

Bero-trukagailuak bi jariagairen arteko kontaktu termikoa lagundu egin behar du, ahalik eta erresistentzia txikiena eskainiz (hau da, bero-transmisiorako koefiziente globalak —*U*— ahalik eta handiena izan behar du). Ekipo horien diseinua kritikoa da prozesu baten ekonomian, energiaren aurrezpen optimoa eta tamaina egokiak prozesu baten kostuak asko murrizten baititu.

9.1 JARIAGAIEN ARTEKO BERO-TRUKEA: ENTALPIA ETA BERO SORRA

Jariagai bero bati beroa kentzen zaionean edo jariagai hotz bati beroa ematen zaionean, bi gauza gerta dakizkioke:

(a) Hoztea, lehenengo kasuan, eta berotzea, bigarren kasuan, hau da, tenperatura-aldaketa jasatea. Hori gertatzen denean, esaten da jariagaiak bero sentikorra trukatu (eman edo hartu) duela. Adibidez, ura 20 ºC-tik 45 ºC-ra berotzen denean edo airea 30 ºC-tik 10 ºC-ra hoztean, bi jariagaiek tenperatura-diferentzia jasan dutenez, bero sentikorra trukatu dutela esaten da.

Jariagai baten $\dot{m}$ emari masikoari T_1-etik T_2-ra berotzeko eman behar zaion bero sentikorrak entalpia-aldaketa sortzen du. T_1 eta T_2 tarterako bero espezifikoaren batez besteko balioa hartzen bada:

$$Q\left(\frac{\text{energia}}{\text{denbora}}\right) = \Delta H = \dot{m}\cdot\overline{C_P}\cdot\left(T_2 - T_1\right) \tag{9.1}$$

(b) Tenperatura-aldaketarik jasan gabe, fasez aldatzea (kondentsatzea edo irakitea). Prozesu horretan izugarrizko energia-aldaketak gertatzen dira, eta bero horri bero sor deritzo. Adibidez, 100 ºC-an aseta dagoen ur likidoari beroa ematen bazaio, irakin egiten du tenperatura aldatu gabe, guztia lurrun bihurtu arte.

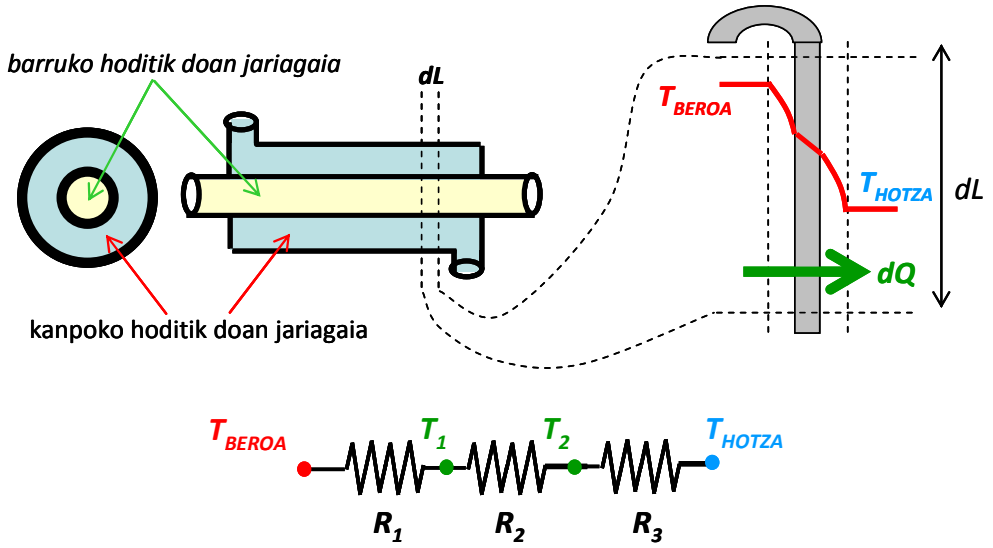
Horrelako egoeran jariagaiak galdu edo irabazi duen beroa fase-aldaketarako erabili du.

$$Q\left(\frac{\text{energia}}{\text{denbora}}\right) = \dot{m}\cdot\lambda \tag{9.2}$$

Adibidez, 100 ºC-an asetako kilogramo bat ur irakiteko edo kondentsatzeko, 2.257 kJ bero eman edo kendu behar zaio, hurrenez hurren. λ-ren balioak konposatu eta baldintza anitzetarako taulatuta daude bibliografian.

9.2 HODI BIKOITZEKO BERO-TRUKAGAILUAK

Jariagai bero eta hotz baten artean beroa trukatzeko ekiporik sinpleena hodi bikoitzeko bero-trukagailua da. Eraginkortasun mugatua dutela eta, emari txikien arteko trukerako erabiltzen dira. 9.1 irudian ikusten den bezala, bi hodi zentrokidez eraikia dago. Jariagai bat barruko hoditik dabil; bestea, berriz, bi hodien arteko eraztunetik. Hala gertatzen da bien arteko bero-trukea. Barruko hoditik jariagai beroak zein hotzak zirkula dezake. Hala ere, hemendik aurrerako azalpenerako, jariagai beroa barruko hoditik doala hartuko da.



9.1 irudia. Hodi bikoitzeko bero-trukagailua, hodiaren barnean dagoen tenperatura-gradientea eta bi jariagaien arteko bero-trukerako erresistentziak.

Bi jariagaien arteko bero-trukean, jariagai beroaren muinetik jariagai hotzaren muinera heltzeko, beroak seriean kokatutako hiru erresistentzia gainditu behar ditu; lehendabizi, barruko hoditik doan jariagaiaren konbekzio-erresistentzia $\left(\frac{1}{h_i \cdot A_i}\right)$; ondoren, barruko hodiaren hormaren eroapen-erresistentzia $\left(\frac{\Delta X}{k \cdot A_{BL}}\right)$; eta, azkenik, bi hodien arteko eraztunetik doan jariagaiaren konbekzio-erresistentzia $\left(\frac{1}{h_o \cdot A_o}\right)$, —$A_i$ eta A_o barruko hodiaren barne- eta kanpo-diametroa izanik—.

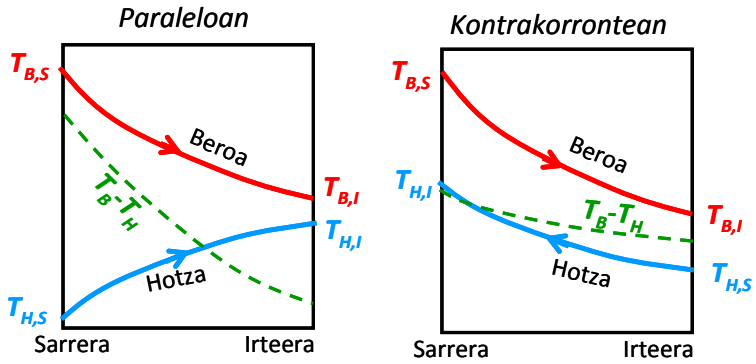
Bero-trukagailuan, bi jariagaien jarioak bi konfigurazio izan ditzake:

(1) ***Jario paraleloa***, jariagai biak trukagailuko mutur beretik sartu eta irteten direnean. Egitura honekin bi jariagaien arteko tenperaturen hurbilketa mugatua dago, hau da, jariagai beroaren eta hotzaren irteerako tenperaturak, gehienez ere, berdinak izan daitezke (hori gertatzeko, luzera infinituko trukagailua beharko litzateke). 9.2 irudiko ezkerreko egitura izango litzateke.

(2) ***Kontrakorronteko jarioa***, bi jariagaiak kontrako noranzkoan zirkulatzen dutenean, jariagai beroa jariagai hotza irteten den muturretik sartzen denean. Egitura honekin diharduten trukagailuetan bi jariagaien arteko tenperaturen hurbilketa ez da mugatua, hau da, jariagai hotzaren irteerako tenperatura jariagai beroaren irteerako tenperatura baino altuagoa izan daiteke. Jario paralelokoek baino eraginkortasun handiagoa

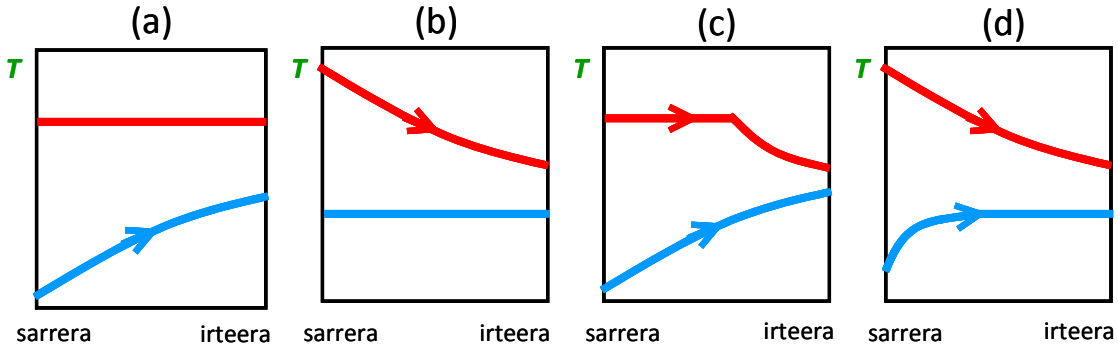
daukatenez, tamaina txikiagoa behar dute. 9.2 irudiko eskuineko egitura izango litzateke.

9.2 irudian, egitura horietan lortzen diren tenperatura-profilak marrazteaz gainera, indar eragilea ere marrazten da ($T_B - T_H$). Ikusi den bezala, sistema bateko bero-jarioa indar eragilearekiko proportzionala da. Aipagarria da bero-transmisiorako indar eragilea, hau da, jariagai beroaren eta hotzaren arteko tenperatura-diferentzia, ez dela konstantea trukagailu osoan zehar. Hori bi egiturekin gertatzen den arren, askoz ere nabarmenagoa da paraleloan diharduen ekipoan. Sarreran, bi jariagaien tenperaturak oso desberdinak dira, eta indar eragile handia dago ($T_{B,S} - T_{H,S}$). Horregatik, trukagailuaren sarreran bero-truke handia egingo dute; hala ere, trukagailuan aurrera doazen heinean, bi jariagaien tenperaturak berdinduz doaz, eta irteeran daukaten indar eragilea ($T_{B,I} - T_{H,I}$) eta bero-trukea txikienak dira. Beste era batera esanda, bero-trukea ez da uniformeki gertatzen trukagailuan zehar. Kontrakorrontean diharduen trukagailuan indar eragilea berdinagoa da trukagailu osoan zehar.



9.2 irudia. Paraleloan eta kontrakorrontean diharduten hodi bikoitzeko bero-trukagailuetako jariagaien tenperatura-profila, trukagailuan zehar. Nomenklatura:
Jariagai beroaren sarrerako tenperatura: $T_{B,S}$
Jariagai beroaren irteerako tenperatura: $T_{B,I}$
Jariagai hotzaren sarrerako tenperatura: $T_{H,S}$
Jariagai hotzaren irteerako tenperatura: $T_{H,I}$

Bi jariagaietako batek fase-aldaketa jasango balu, tenperatura profilak bestelakoak izango lirateke, 9.3 irudian agertzen den bezala.



9.3 irudia. Hodi bikoitzeko bero-trukagailuko tenperatura-profilak fase-aldaketa dagoenean: (a) lurruna kondentsatzen ari da, (b) likidoa irakiten ari da, (c) trukagailuaren lehen zatian lurruna kondentsatzen ari da, eta dena likido eran dagoenean, hoztu egiten da, (d) trukagailuaren lehen zatian likidoa berotu egiten da irakin arte.

9.3 HODI BIKOITZEKO BERO-TRUKAGAILUAREN ENERGIA-BALANTZEAK

Bero-trukagailuan, energiaren iraupen-legeko termino mekanikoak (energia potentziala eta zinetikoa) baztergarriak dira termino entalpikoen aldean (5.5 ekuazioan). Gainera, erreakzio kimikorik ez badago eta ponpaketarik ez bada erabiltzen, jariagaiak irabazten edo galtzen duen beroa entalpia aldatzeko erabiltzen du.

$$Q = \Delta H \tag{9.3}$$

Jariagai beroaren entalpia-balantzea:

Bero sentikorra trukatzen badu:

$$Q\left(\frac{\text{energia}}{\text{t}}\right) = \dot{m}_B \cdot \overline{C_{P,B}} \cdot \left(T_{B,S} - T_{B,I}\right)^* \tag{9.4}$$

Bero sorra trukatzen badu:

$$Q\left(\frac{\text{energia}}{\text{t}}\right) = \dot{m}_B \cdot \lambda_B \tag{9.5}$$

Jariagai hotzaren entalpia-balantzea:

Bero sentikorra trukatzen badu:

$$Q\left(\frac{\text{energia}}{\text{t}}\right) = \dot{m}_H \cdot \overline{C_{P,H}} \cdot \left(T_{H,I} - T_{H,S}\right) \tag{9.6}$$

Bero sorra trukatzen badu:

$$Q\left(\frac{\text{energia}}{\text{t}}\right) = \dot{m}_H \cdot \lambda_H \tag{9.7}$$

Egoera geldikorrean trukagailua ideala bada, hau da, ingurunera berorik galtzen ez bada, jariagai beroak emandako beroa jariagai hotzak bereganatzen du.

9.4 HODI BIKOITZEKO BERO-TRUKAGAILUAREN DISEINUA

Ekipo hauen diseinua egitean, trukatu behar den bero-jariorako (*Q*) beharrezkoa den trukagailuaren azalera (*A*) kalkulatzen da. Diseinua errazteko, hurbilketa hauek egingo dira:

1. Trukagailuak egoera geldikorrean dihardu.
2. Ingurumenean galtzen den beroa baztergarria da.
3. Bi jariagaien bero espezifikoak konstante mantentzen dira trukagailuan zehar, sarrera eta irteerako baldintzen batez besteko balioan ($\overline{C}_{P,B}$ eta $\overline{C}_{P,H}$).

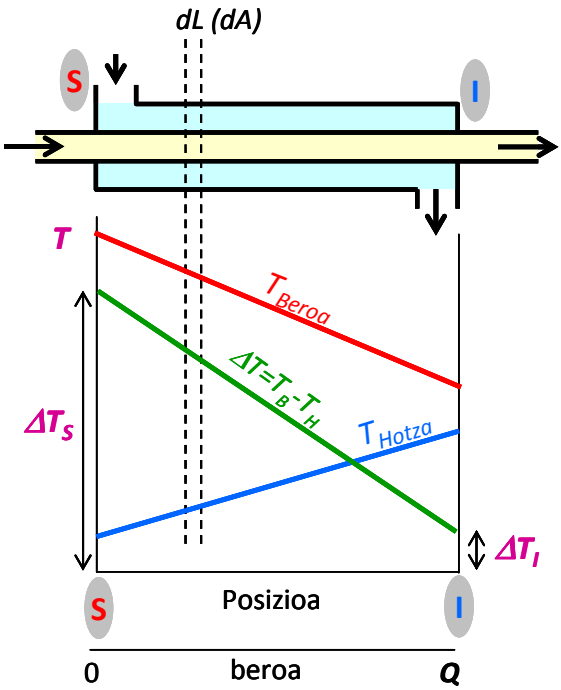
Hirugarren hurbilketak trukagailuan zeharreko tenperatura-profilak lerro zuzenak izatea ahalbidetzen du. Bero-trukagailuaren diseinu-ekuazioa lortzeko, paraleloan diharduen ekipoa hartuko da, nahiz eta kontrakorrontean diharduenarekin helburu bera lortu.

Demagun trukagailuan bero-transmisiorako koefiziente globala *U* dela (mementoz ez da bereiziko kanpoko ala barruko azalerarekiko den). 9.4 irudian ikusten den bezala, trukagailu osoan zehar indar eragilea ($T_B - T_H$) posizioarekin aldatzen denez, azterketa egiteko *dL*

∗ Oharra: zeinu positiboa izateko, horrela erabiliko da, nahiz eta ($T_{B,I} - T_{B,S}$) den era zehatza.

luzerako zati estu bat hartuko da, bero-trukerako *dA* azalerakoa. Zati estu horretan, jariagai beroaren eta hotzaren tenperaturak konstantetzat har daitezkeenez, hau da bien arteko bero-trukea:

$$dQ = U \cdot dA \cdot \left(T_B - T_H\right) = U \cdot dA \cdot \Delta T \tag{9.8}$$



9.4 irudia. Hodi bikoitzeko bero-trukagailuko indar eragilearen profila, posizioarekiko eta trukatzen den beroarekiko.

9.4 irudian ikusten den bezala, indar eragilea ($\Delta T = T_B - T_H$) posizioarekin eta trukatutako beroarekin linealki aldatzen da. ΔT vs. Q lerroaren malda kalkulatzen bada:

$$\frac{d\Delta T}{dQ} = \frac{\Delta T_S - \Delta T_I}{Q} \tag{9.9}$$

ΔT_S eta ΔT_I trukagailuaren sarrera- eta irteera-puntuetako indar eragileak dira, eta Q, trukagailu osoan trukatu behar den beroa.

Bi ekuazioak konbinatzen badira eta sarrera- eta irteera-tartean integratzen bada:

$$\int_{\Delta T_S}^{\Delta T_I} \frac{d\Delta T}{U \cdot \Delta T} = \frac{\Delta T_S - \Delta T_I}{Q} \cdot \int_0^A dA = \frac{\left(\Delta T_S - \Delta T_I\right)}{Q} \cdot A \tag{9.10}$$

Integrala ebazteko, U-ren eta ΔT-ren arteko erlazioa jakin behar da. Bi egoera aztertuko dira:

1- U konstantea bero-trukagailu osoan

U konstantea bada, integraletik kanpora atera daiteke, eta diseinu-ekuazio hau lortzen da, non $(\Delta T)_{BL}$ trukagailuaren sarreran eta irteeran dauden indar eragileen batezbesteko logaritmikoa baita:

$$Q = U \cdot \mathrm{A} \cdot \left(\Delta \mathrm{T}\right)_{BL} \tag{9.11}$$

$$(\Delta T)_{BL} = \frac{\Delta T_S - \Delta T_I}{\ln\left(\frac{\Delta T_S}{\Delta T_I}\right)} \tag{9.12}$$

2- U aldakorra bero-trukagailuan

U konstantea ez bada, integraletik ezin daiteke atera, eta *ΔT*-rekin duen erlazioarekin ordezkatu behar da. Adibidez, linealki aldatuko balitz:

$$U = a + b \cdot \Delta T \tag{9.13}$$

Integrala ebaztean, adierazpen hau lortuko litzateke:

$$Q = A \cdot \frac{U_I \cdot \Delta T_S - U_S \cdot \Delta T_I}{\ln\left(\frac{U_I \cdot \Delta T_S}{U_S \cdot \Delta T_I}\right)} \tag{9.14}$$

U_S eta U_I bero-transmisiorako koefiziente globalaren sarrera eta irteerako balioak izanik.

Adierazpen horietan ez dira bereizi U_i eta U_o. Jakina denez, lortutako bi ekuazioetan hodiaren barruko azalera erabiltzen bada (A_i), beretzat definitutako koefizientea (U_i) erabili behar da, eta A_o erabiltzen bada, U_o erabili behar da.

9.1 adibidea

Hodi bikoitzeko trukagailu batean, 7500 kg/h etilenglikol ($\overline{C_p}$ = 2,56 kJ/kgK) hozten da 70 ºC-tik 35 ºC-ra, 20 ºC-an dagoen 8000 kg/h ur ($\overline{C_p}$ = 4,18 kJ/kgK) erabiliz.

Kalkula dezagun (a) zenbat bero trukatzen duten, (b) uraren irteerako tenperatura, (c) trukagailuak zer azalera izan behar duen.

Datuak: U_o = 1700 kJ/hm^{2}K da, eta trukagailu osoan konstantea dela har daiteke.

Ebazpena

(a) Etilenglikolaren eta uraren entalpia-balantzea eginez, trukatzen duten beroa kalkulatuko da.

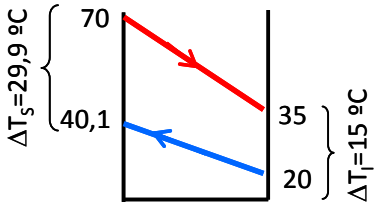
Etilenglikola: Q = (7500 kg/h)·(2,56 kJ/kgK)·(70 - 35)ºC = 6,72·10^5 kJ/h

Bero hori jariagai hotzak bereganatzen du:

(b) Ura: Q = 6,72·10^5 kJ/h = (8000 kg/h)·(4,18 kJ/kgK)·(T - 20) ºC

Hortik, uraren irteerako tenperatura kalkulatzen da: T = 40,1 ºC

(c) Ez da aipatzen paraleloan edo kontrakorrontean zirkulatzen duten. Bi jariagaien sarrera eta irteerako tenperaturak behatuta, ohartzen gara uraren irteerako tenperatura (40,1 ºC) etilenglikolaren irteerako tenperatura (35ºC) baino altuagoa dela.



Paraleloan lan eginez ezin daiteke hori lortu, bai ordea kontrakorrontean lan eginez (kontuan izan paraleloan jariagai hotzaren irteerako tenperaturak ezin duela jariagai beroaren irteerako tenperatura gainditu).

Diseinu-ekuazioan erabili beharreko $(\Delta T)_{BL}$ = 21,6 ºC bada:

$Q = U \cdot A \cdot (\Delta T)_{BL}$ = 6,72·105 kJ/h = 1700·A_0·21,6

Eta hortik: A_o = 18,3 m^2

Trukagailuaren barruko hodiaren kanpo-azalerak 18,3 m^2-koa izan behar du tenperatura horiek lortu ahal izateko.

9.2 adibidea

Hodi bikoitzeko bero-trukagailu batean, 35 ºC-an dagoen 7500 kg/h etilenglikol ($\overline{C_P}$ = 2,56 kJ/kgK) 70 ºC-ra berotu nahi da, 104 ºC-an kondentsatzen ari den lurruna erabiliz.
Kalkula dezagun (a) zenbat bero trukatzen duten, (b) zer lurrun-emari kondentsatzen den, (c) trukagailuak zer azalera behar duen.
Datuak: U_o = 2600 kJ/hm^{2}K; lurrunaren kondentsatze-beroa: λ = 2230 kJ/kg

Ebazpena

Jariagai beroa kondentsatzen ari den lurruna denez, bero sorra trukatzen du.

(a) Etilenglikolaren entalpia-balantzea eginez:

Q = (7500 kg/h)·(2,56 kJ/kgK)·(70 - 35)ºC = 6,72·10^5 kJ/h

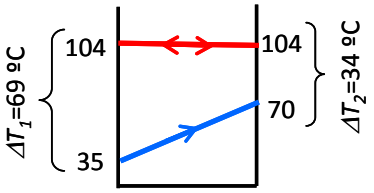
Bero hori lurrunak ematen dio:

(b) Lurrunaren energia-balantzetik:

Q = 6,72·105 kJ/h = ($\dot{m}$ kg/h)·(2230 kJ/kg)

$\dot{m}$ = 301,3 kg/h kondentsatzen ari den lurrun-emaria.

(c) Jariagai beroaren tenperatura aldatzen ez denez, paraleloan zein kontrakorrontean egitura bera du.



$(\Delta T)_{BL}$ = 49,5 ºC izanik, diseinu-ekuazioan ordezkatuz, zer azalera behar duen kalkulatzen da:

$Q = U_o \cdot A_o \cdot (\Delta T)_{BL}$ = 6,72·105 kJ/h = 2600·A_0·49,5 . Eta hortik: A_o = 5,2 m^2

9.3 adibidea

Altzairuzko hodi bikoitzeko bero-trukagailu batean, 5000 kg/h etilbentzeno berotu nahi da 20 ºC-tik 80 °C-ra, 110 °C-an asea dagoen ur-lurruna erabiliz (barruko hoditik igarotzen da).

Kalkula dezagun: (a) zer luzera izan behar duen trukagailuak, (b) ur-lurrunaren zer emari erabili behar den.

Datuak: Barruko hodia: D_i = 5 cm D_o = 5,5 cm;
h_i = 10000 kcal/hm^2°C; $k_{altzairua}$ = 35 kcal/hm°C;
$\overline{C_{P,etilb}}$ = 0,46 kcal/kg °C $\lambda_{lurruna}$ = 531 kcal/kg

Etilbentzenoaren alderako h_o (kcal/hm^2°C):
(20 ºC-an dagoen muturrean) = 600
(80 ºC-an dagoen muturrean) = 1200
Linealki aldatzen dela har daiteke.

Ebazpena

Lehenik eta behin, bero-transmisiorako koefiziente globala (U_i) kalkulatuko da, trukagailuaren bi muturretarako:

Etilbentzenoa 20 ºC-an dagoen muturrean (*S*):

$$\frac{1}{U_i}=\frac{1}{10000}+\frac{0{,}0025\cdot 0{,}05}{35\cdot 0{,}0525}+\frac{0{,}05}{600\cdot 0{,}055}=\cancel{\frac{1}{10000}}+\cancel{\frac{1}{14700}}+\frac{1}{660};\ U_i=660\,{}^{kcal}\!/_{hm^2K}$$

Etilbentzenoa 80 ºC-an dagoen muturrean (*I*):

$$\frac{1}{U_i}=\frac{1}{10000}+\frac{0{,}0025\cdot 0{,}05}{35\cdot 0{,}0525}+\frac{0{,}05}{1000\cdot 0{,}055}=\cancel{\frac{1}{10000}}+\cancel{\frac{1}{14700}}+\frac{1}{1100};\ U_i=1100\,{}^{kcal}\!/_{hm^2K}$$

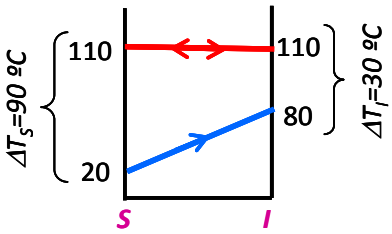
Bi jariagaiek trukatu behar duten beroa etilbentzenoaren energia-balantzea ebaztean lortuko da:

$$Q=5000\cdot 0{,}46\cdot(80-20)=1{,}35\cdot 10^5\,{}^{kcal}\!/_{h}$$

Erabili behar den ur-lurrun emaria energia-balantzea ebaztean lortuko da:

$$Q=1{,}35\cdot 10^5\,{}^{kcal}\!/_{h}=\dot{m}_{Lurruna}\cdot 531 \qquad ; \quad \dot{m}_{Lurruna}=254\,{}^{kg}\!/_{h}$$

Trukagailuaren azalera kalkulatzeko, diseinu-ekuazioa erabiliko da:



S muturrean	I muturrean
$(\Delta T)_S$ = 90 ºC	$(\Delta T)_I$ = 30 ºC
$U_{i,S}$ = 660 kcal/hm^{2}K	$U_{i,I}$ = 1100 kcal/hm^{2}K

$$Q=1{,}35\cdot 10^5\,{}^{kcal}\!/_{h}=A_i\cdot\frac{U_I\cdot\Delta T_S-U_S\cdot\Delta T_I}{\ln\left(\frac{U_I\cdot\Delta T_S}{U_S\cdot\Delta T_I}\right)}=A_i\cdot\frac{1100\cdot 90-660\cdot 30}{\ln\left(\frac{1100\cdot 90}{660\cdot 30}\right)}$$

A_i = 2,74 m^2.

Hodien luzera: A_i = 2,74 m$_2$ = $\pi\cdot D_i\cdot L$ = $\pi\cdot$0,05 m$\cdot L$.

L = 17,5 m luzerako hodiak behar dira.

9.5 ZIKINKERIA-FAKTOREA

Bero-trukagailua, erabili ahala, zikinduz eta zahartuz doa, jariagaiek daramaten zikinkeria ezarri egiten delako (adibidez, urak daramatzan kaltzio- eta magnesio-gatzak prezipitatu egiten dira hormaren inguruan, eta karezko geruza osatzen da) edo, jariagai korrosiboak badira, hodiak herdoildu eta hondatu egiten dituztelako. Horregatik, trukagailua berria zenean zituen ezaugarriekin alderatuz, zahartzean edo zikintzean bero-transmisiorako erresistentzia handitu egiten da, serian dagoen erresistentzia handitzen delako. Erresistentzia horri ***zikinkeria-erresistentzia*** deritzo (R_Z), eta kontuan hartu behar da bero-

transmisiorako koefiziente globalean. Erresistentziari dagokion koefizientea ***zikinkeria-faktorea*** da (h_Z), konbekzio-koefizientearen dimentsio berekoa.

Hodiaren barne-gainazalean eta kanpo-gainazalean zikinkeria dagoenean, erresistentziak hauek dira:

$$R_{Z,i} = \frac{1}{h_{z,i} \cdot A_i} \tag{9.15}$$

eta

$$R_{Z,o} = \frac{1}{h_{z,o} \cdot A_o} \tag{9.16}$$

Zikinkeria barrualdetik zein kanpoaldetik doan jariagaiak sor dezakeenez, $R_{Z,i}$ eta $R_{Z,o}$ bereizi behar dira. Uo erabiltzen denean hodiaren bi aldeetan zikinkeria badago:

$$\frac{1}{U_{o,ZIKINA}} = \frac{D_o}{h_i \cdot D_i} + R_{Z,i} + \frac{\Delta X \cdot D_o}{k \cdot D_{BL}} + R_{Z,o} + \frac{1}{h_o} \tag{9.17}$$

Trukagailua berria denean eta garbia dagoenean dituen ezaugarriekin alderatuz, $U_{ZIKINA} < U_{GARBIA}$ dela ohartu gaitezke. Ondorioz, zikina edota zaharkitua dagoen trukagailu batek bero-trukerako erresistentzia handiagoa du, eta azalera berean bero gutxiago trukatuko du.

$$\frac{1}{U_{o,ZIKINA}} = \frac{1}{U_{o,GARBIA}} + R_Z \tag{9.18}$$

Zikinkeria-erresistentzien ohiko balioak 9.1 taulan agertzen dira.

9.1 Taula. Zikinkeria-faktorearen ohiko balioak.

Jariagai mota	R_Z (m^2K/W)
Itsasoko ura	$1{,}5 \cdot 10^{-4}$
Galdaretako ur tratatua	$2 \cdot 10^{-4}$
Hozte-likidoa	$2 \cdot 10^{-4}$

9.4 adibidea

Hodi bikoitzeko bero-trukagailu batean, 7500 kg/h etilenglikol ($\overline{C_p}$ = 2,56 kJ/kgK) hozten da 70 ºC-tik 35 ºC-ra, kontrakorrontean, 20 ºC-an dagoen 8000 kg/h ur ($\overline{C_p}$ = 4,18 kJ/kgK) erabiliz. Denbora luzean lanean jardun ondoren, ohartzen gara etilenglikolaren irteerako tenperatura 45 ºC dela. Kalkula dezagun (a) U_o-ren balioa egoera horretan, (b) zikinkeria-faktorea.

Datuak: $U_{o,GARBIA}$ = 1700 kJ/hm^{2}K

Ebazpena

Trukagailu berri eta garbiaren ebazpena 9.1 adibidean egin da, eta ikusi da *Ao* = 18,3 m^2-ko azalera behar duela.

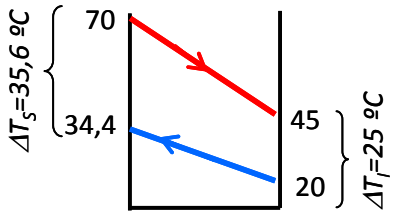
Oraingo baldintzetan, energia-balantzea askatzen bada:

Jariagai beroa: Q = (7500 kg/h)·(2,56 kJ/kgK)·(70 - 45)ºC = 4,8·105 kJ/h

Ohar gaitezen garbia zegoenean baino bero gutxiago trukatzen duela.

Jariagai hotza: $Q = 4{,}8 \cdot 10^5$ kJ/h = (8000 kg/h)·(4,18 kJ/kgK)·(T - 20)ºC

T = 34,4 ºC



Diseinu-ekuazioa:

ΔT_{BL} = 30 ºC lortzen da.

$Q = 4{,}8 \cdot 10^5$ kJ/h = $U_{o,ZIKINA} \cdot 18{,}3\ m^2 \cdot 30$ ºC

$U_{o,ZIKINA} = 875$ kJ/hm^{2}K

$$\frac{1}{U_{o,ZIKINA}} = \frac{1}{U_{o,GARBIA}} + R_z \quad ; \quad R_z = \frac{1}{875} - \frac{1}{1700} = 5{,}5 \cdot 10^{-4}\ hm^2K/kJ$$

9.6 BERO-TRUKAGAILU MOTAK

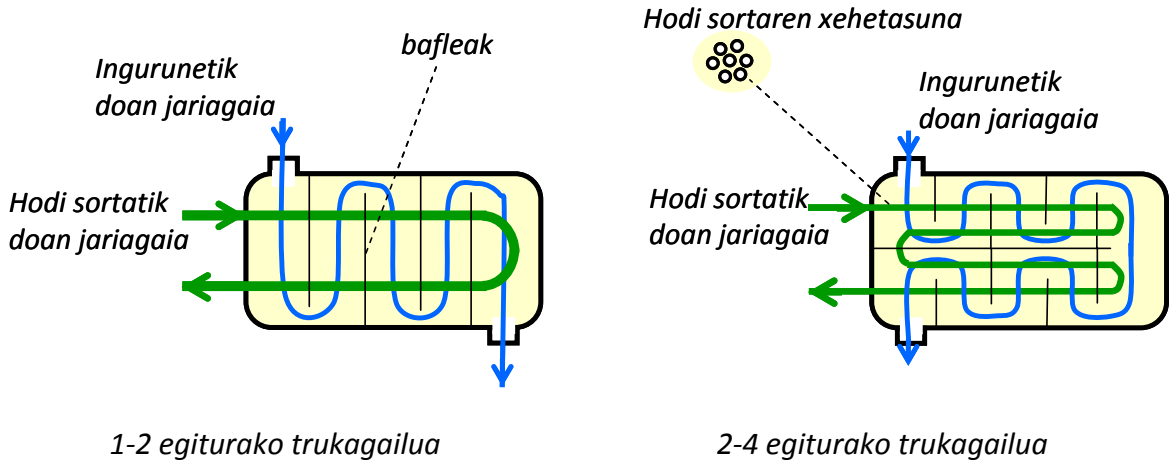
Hodi bikoitzeko bero-trukagailuak gutxi erabiltzen dira industrian, eraginkortasun txikia baitute. Jariagai beroaren eta hotzaren arteko kontaktu termikoa laguntzen duten azalera handiagoko trukagailu eraginkorragoak erabiltzen dira industrian.

Bestelako bero-trukagailuen artean, hauek aipa daitezke, garrantzi industrialaren arabera:

9.6.1 Hodia eta ingurunea erako bero-trukagailuak.

Jariagai baten jarioa ingurune baten barruan dagoen hodi sorta batean banatzen da. Beste jariagaia ingurunetik doa, hodi sorta inguratuz. Horrelako egiturak izugarri handitzen duenez bero-trukerako azalera, hodi bikoitzekoak baino eraginkorragoak dira.

Ingurunetik doan jariagaiaren alderako konbekzio-koefizientea handitzeko, eta, beraz, U handitzeko, zurrunbilotasuna eragiten da bafleak edo pantailak ezarriz (ikusi 9.5 irudia).



9.5 irudia. 1-2 eta 2-4 egiturako hodia eta ingurunea erako bero-trukagailuak, bafle eta hodi sortaren xehetasunekin.

Horrelako trukagailuetan, hodi sortatik doan jariagaiak hainbat aldiz zeharkatu dezake trukagailua, joan-etorriak eginez; ingurunetik doan jariagaiak ere behin baino gehiagotan zeharkatu dezake trukagailua. Era horretako trukagailuak izendatzeko, N-M erako nomenklatura erabiltzen da.

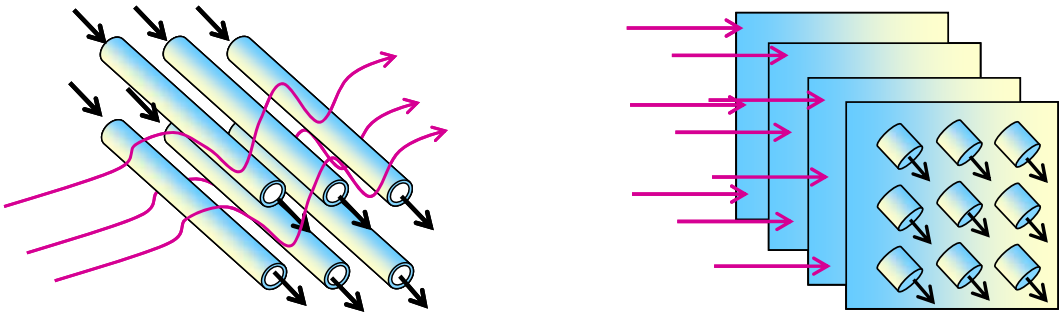
N: ingurunetik doan jariagaiak trukagailua zenbat aldiz zeharkatzen duen

M: hodi sortatik doan jariagaiak trukagailua zenbat aldiz zeharkatzen duen

9.5 irudian agertzen dira 1-2 eta 2-4 egiturako bero-trukagailuen eskema.

9.6.2 Jario gurutzatuko bero-trukagailuak.

Jariagai bat hodi sortaren barrutik doa, eta beste jariagaiak kanpotik zirkulatzen du, aurrekoarekiko perpendikularrean. Normalean, gas eta likidoen arteko trukerako erabiltzen da; likidoa hodietatik zirkularazten da, eta gasa kanpotik doa. Kanpoaldetik doan jariagaia bideratzeko, hegatsak erabil daitezke. 9.6 irudian agertzen dira trukagailu hegasdunen eta hegatsik gabeen eskemak.



Hegatsik gabekoa *Hegasduna*

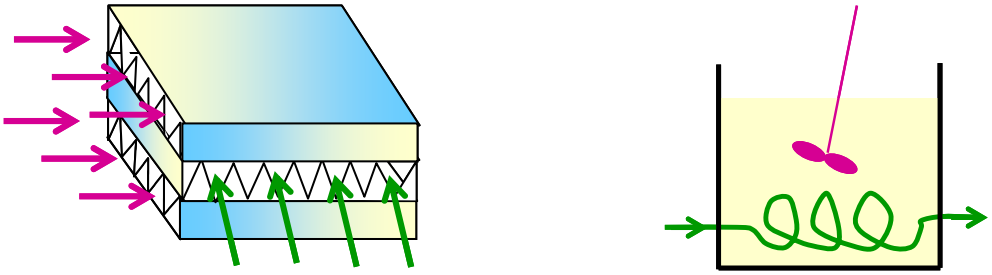
9.6 irudia. Jario gurutzatuko bero-trukagailuak.

9.6.3 Bero-trukagailu trinkoak.

Bolumen unitateko bero-trukerako azalera handiena eskaintzen dutenak dira (700 m^2/m^3-raino). Xafla uzkurtuz osatutako matrizez eratzen dira, eta bi jariagaien jarioak gurutzatuak dira. 9.7 irudian agertzen da ekipo hauen eskema.

9.6.4 Hodibihur-erako bero-trukagailuak.

Tangetako likidoak berotu edo hozteko erabiltzen dira. Hozteko edo berotzeko erabiltzen den jariagaia zilindrikoki biribildutako (hodibihurra) hodiaren barrutik doa, eta hodibihurra tanga barruan sartuta dago. Tanga-erako erreaktore kimikoen tenperatura kontrolatzeko maiz erabiltzen den sistemaren eskema agertzen da 9.7 irudian.



Bero-trukagailu trinkoa *Hodibihur-erakoa*

9.7 irudia. Bero-trukagailu trinkoa eta hodibihur-erako bero-trukagailua.

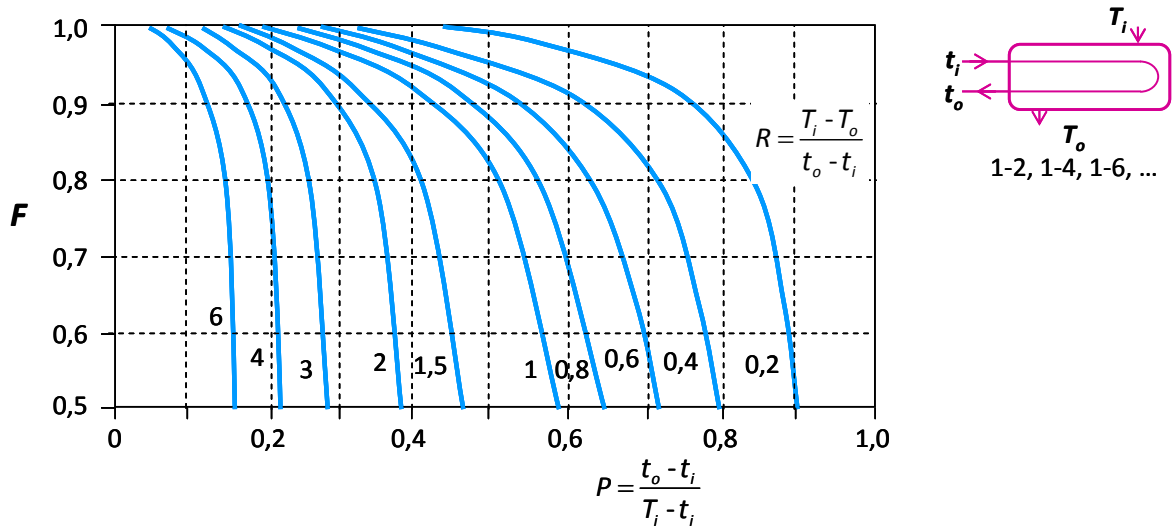
9.7 BESTELAKO BERO-TRUKAGAILUEN DISEINUA

Hodi bikoitzeko bero-trukagailuen diseinuan, trukagailuaren sarrera eta irteerako indar eragilearen batezbesteko logaritmikoa erabiltzen da. Ekipo hauen egitura dela eta, oso zaila da indar eragilearen batez besteko balioa jakitea. Horregatik, ekipo hauen diseinua egiteko orduan, hodi bikoitzeko bero-trukagailuan kontrakorrontean zirkulatuko balute izango luketen batez besteko indar eragilea (ΔT_{BL}*) erabiltzen da, zuzenketa-faktore (*F*) batez zuzendua.

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_{BL}^{*} \cdot F \tag{9.19}$$

$$F = \frac{\text{benetako } \Delta T}{\Delta T_{BL}^{*}} \tag{9.20}$$

F-ren kalkulua esperimentalki egiten da, eta bibliografian, grafiko eran jasota dago trukagailu motaren arabera. 9.8 irudian hodia eta ingurunea egiturako 1-2, 1-4, 1-6… konfigurazioko trukagailuen *F* kalkulatzeko grafikoa azaltzen da.



9.8 irudia. 1-2, 1-4, 1-6... egiturako hodia eta ingurunea erako bero-trukagailuen *F* zuzenketa-faktorea kalkulatzeko grafikoa.

9.5 adibidea

1-4 egiturako hodia –eta ingurunea erako bero-trukagailu batean, 2,5 kg/s ur berotu behar da 15 ºC-tik 85 ºC-ra. Horretarako, 160 ºC-an sartzen den olio beroa 5,2 kg/s-ko emariarekin zirkularaziko da ingurunetik. Bero-transmisioko koefiziente globalaren batez besteko balioa U_o = 350 W/m^{2}K bada, kalkula dezagun (a) bero-trukagailuak izan behar duen azalera, (b) hodien luzera.

Datuak: ura eta olioaren batez besteko $\overline{C_P}$ (kJ/kg K): ura = 4,18; olioa= 2,35

Hodi sorta bakoitzean 15 hodi daude, eta bakoitzaren kanpo-diametroa D_o = 25 mm da.

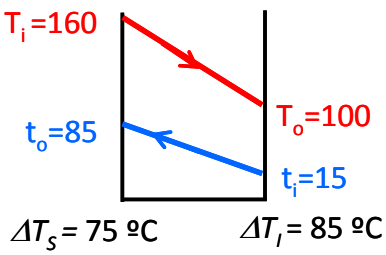
Ebazpena

Urarentzako energia-balantzea:

Q = (2,5 kg/s)·(4,18 kJ/kgK)·(85 - 15)ºC = 7,315·10^5 W

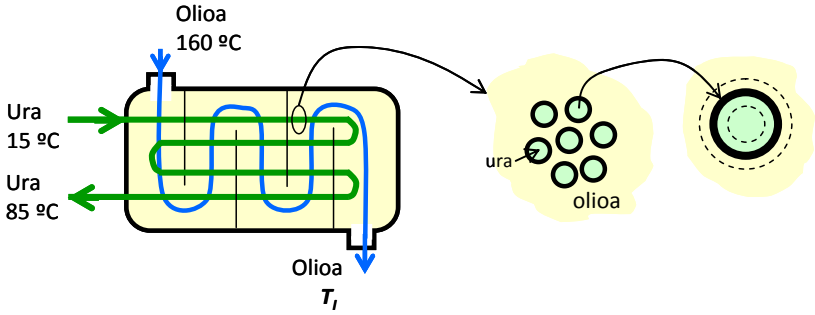
Olioaren energia-balantzea:

$Q = 7{,}315 \cdot 10^5$ W = (5,2 kg/s)·(2,35 kJ/kgK)·(160 - T_l)ºC



T_l = 100 ºC

$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_{BL} \cdot F$ = 7,315·105 W



ΔT_{BL} = 79,9 ºC
R = (160-100)/(85-15) = 0,86
P = (85-15)/(160-15) = 0,48

9.8 irudiko grafikoan begiratuz, $F \approx 0{,}87$ lortzen da.

Diseinu-ekuazioa:

$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_{BL} \cdot F$ = 7,315·105 W = 350 (W/m^{2}K)·A_o·79,9 (ºC)·0,87

A_o = 30 m^2

(b) 30 m^2 = 15·π·D_o·L = 15·π·0,025·L; L = 25 m

10. GAIA

MASA-TRANSFERENTZIARAKO MEKANISMOAK

Masa-transferentzian oinarritutako prozesuek garrantzi handia daukate ingeniaritza kimikoan. Adibidez, industria kimikoan, lehengaiek purutasun-maila bat behar dute; erreaktore kimikoaren irteerako nahastea (produktuak, bihurtu gabeko lehengaia, azpiproduktuak…) bereizi egiten da. Konposatu kimikoen nahasteak bereizteko, mugimendu kantitatearen transferentzian oinarritutako eragiketak (iragazketa, jalkipena eta abar) edo masa-transferentzian oinarritutako eragiketak erabiltzen dira. Lehenengoak nahaste heterogeneoak bereizteko eta bigarrenak nahaste homogeneoak bereizteko erabiltzen dira. Masa-transferentzian oinarritutako bereizte-eragiketak dira, besteak beste, destilazioa, absortzioa eta erauzketa.

Eragiketa horiek egiteko ekipoak diseinatzeko (tamaina jakiteko, alegia), prozesuaren abiadura jakin behar da. Ondoren ikusiko den bezala, masa-transferentziarako zenbait mekanismo daude, eta prozesuaren abiaduran eragin nabarmena dute. Masa-transferentziarako mekanismoak barreiapen molekularra eta konbekzioa dira.

10.1 ABIADURA-LEGEA MASA-TRANSFERENTZIAN

Bero-transmisioan gertatzen den bezala, masa-transferentzia gerta dadin indar eragilea behar da, hau da, sistemak orekatik aldenduta egon behar du. Nahaste bateko eremu bitan A osagaiaren kontzentrazioak $C_{A,1}$ eta $C_{A,2}$ badira, biak desberdinak diren bitartean masa-transferentzia sortuko da, eta indar eragilea $\Delta C_A = C_{A,1} - C_{A,2}$ izango da ($C_{A,1} > C_{A,2}$ bada).

Lege zinetikoaren arabera,

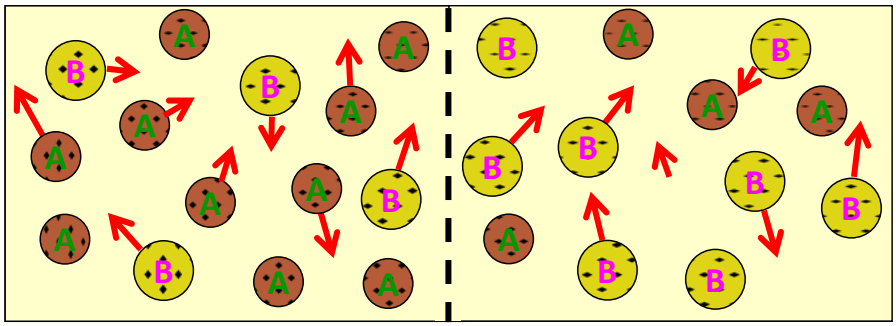
$$N_A\left(\frac{mol}{denbora}\right)=\frac{\text{indar eragilea}}{\text{erresistentzia}}=\frac{\Delta C_A}{R} \qquad (10.1)$$

Eratorriko den masa-jarioaren abiadura (N_A) indar eragilearekiko proportzionala eta sistemak eskaintzen duen eragozpen edo erresistentziarekiko alderantziz proportzionala da. Masa-transferentzia gertatzen den mekanismoaren araberakoa da erresistentzia.

10.2 BARREIAPEN MOLEKULARRA NORABIDE BAKARREAN: FICK-EN LEGEA

Jariagaiaren muinean, molekula indibidualen ausazko eta ordenarik gabeko mugimenduak konposatu baten mugimenduan eragiten duen prozesuari ***barreiapen molekular*** deritzo. Jariagaiaren muinean, molekulak lerro zuzenean mugitzen dira, eta ibilbidean beste molekula batzuekin (berdinak edo beste konposatu kimiko baten molekulak) talka egin dezakete, eta beren abiadura eta norabidea aldatu.

10.1 irudiko sisteman, A eta B osagaien nahaste bitarra dago tenperatura eta presio konstantean. Sistemaren erdiko hesiak bi eremu bereizten ditu: ezkerreko eremua, A osagaian kontzentratua, eta eskuineko eremua, B osagaian kontzentratua.



10.1. irudia. Nahaste bitar baten barreiapen molekularra.

Zer gertatzen da sistema horretan barrera desagertzean? Molekulen norabide guztietako etengabeko mugimenduagatik, A eta B molekulak eremu batetik bestera pasako dira. A molekula gehienak ezkerreko eremuan daudenez, ezkerretik eskuinera alderantzizko noranzkoan baino molekula gehiago mugituko dira (Bren kasuan, alderantziz). Masa-garraio hori ***barreiapen molekular*** deritzon mekanismoaren bidez gertatzen da, eta beti kontzentrazio handiagoko eremutik kontzentrazio baxuagoko eremurantz gertatzen da. Barreiapenak eremu guztian kontzentrazioa uniforme izan arte irauten du. Bero-transmisioko eroapen termikoaren baliokidea da.

Sinplifikazio gisa, demagun kontzentrazio-gradientea norabide bakarrean gertatzen dela (*Z* norabidea). A eta B osagaiek osatutako nahaste bitarraren muinean, A osagaiaren barreiapen-abiadurak Fick-en legeari jarraitzen dio (*Z* norabidea kontzentrazio-diferentzia dagoen norabidea izanik):

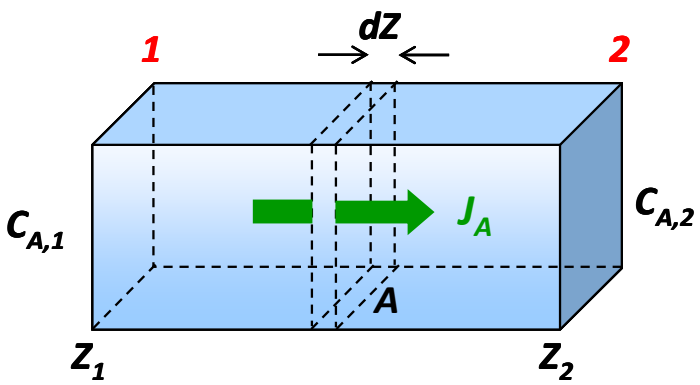
$$J_A = -D_{AB} \cdot \frac{dC_A}{dZ} \qquad (10.2)$$

J_A sistemaren mol-zentroarekin batera mugitzen den erreferentzia-sistema batekiko A osagaiaren barreiapen-abiadura da azalera-unitateko; C_A A osagaiaren kontzentrazioa; *Z* barreiapena gertatzen den norabidea; eta D_{AB} barreiapen-koefizientea.

D_{AB} koefizienteak A eta B osagaiez osatutako nahaste bitar baten muinean A osagaiak barreiatzeko duen erraztasunaren berri ematen du. Azalera barreiapen-norabidearekiko perpendikularra da. Fick-en legean agertzen den zeinu negatiboak adierazten du jarioaren noranzkoa eta kontzentrazio-gradientearen noranzkoa desberdinak direla.

(10.2) ekuazioak ibilbide diferentzialean gertatzen den kontzentrazio-aldaketa diferentziala ematen du. Luzera finitu batean gertatzen den barreiapena kalkulatzeko, Fick-en legea integratu beharra dago.

$$J_A = -D_{AB} \cdot \left(\frac{\Delta C_A}{\Delta Z} \right) = \frac{\Delta C_A}{\left(\frac{\Delta Z}{D_{AB}} \right)} \qquad (10.3)$$



10.2. irudia. Nahaste bitar baten barreiapen molekularra *Z* norabidean.

Fick-en legean agertzen den kontzentrazio-diferentzia barreiapena sorrarazten duen indar eragilea da. Izendatzailean agertzen den $\Delta Z/D_{AB}$ terminoak barreiapenari inguruneak berak jartzen dion eragozpena edo erresistentzia adierazten du. Hau da, D_{AB} handiagoa den heinean, masa-jarioari egiten dion erresistentzia txikiagoa da.

Nahastearen mol-zentroarekin batera mugitzen den behatzailearekiko Aren barreiapen-abiadura ematen du (10.2) ekuazioak. Moletan zenbatu ordez masatan zenbatzen bada, nahastearen masa-zentroarekiko ematen da, eta j_A gisa adierazten da. Hala ere, praktikotasunari begira, erabilgarriagoa da finko dagoen behatzailearekiko adierazpena. Balio horri N_A deritzo.

Har ditzagun A eta B osagaiez osatutako nahastearen jarioa *Z* norabidean eta nahastearen batez besteko *v* abiadura. Aren mugimendua (A+B) osotasunaren translazioari dagokionaren eta Aren barreiapenari dagokionaren arteko batura da:
Beraz,

$$N_A = C_A \cdot v - D_{AB} \cdot \frac{dC_A}{dZ} \tag{10.4}$$

Brentzat, berdin:

$$N_B = C_B \cdot v - D_{AB} \cdot \frac{dC_B}{dZ} \tag{10.5}$$

Osotasunaren (A+B) jarioa:

$$N = N_A + N_B = C \cdot v = \left(C_A + C_B\right) \cdot v \tag{10.6}$$

Kontzentrazio osoa, A eta B molekulei dagokienez, $C = \frac{N_A + N_B}{V}$ da (V bolumena izanik).

(10.4) ekuazioan ordezkatzen bada, eta $C_A/C = y_A$ (mol-frakzioa) dela kontuan izanik, adierazpen hau lortzen da:

$$N_A = -C \cdot D_{AB} \cdot \frac{dy_A}{dZ} + y_A \cdot \left(N_A + N_B\right) \tag{10.7}$$

Adierazpen hori Fick-en legea da, espazioan finko dagoen behatzaileak neurtzen duen Aren barreiapen-abiadura, alegia, mol/t·azalera.

$-D_{AB} \cdot \frac{dC_A}{dZ}$ terminoak sistemaren mol-zentroarekiko Aren barreiapena zenbatzen du, eta $y_A \cdot \left(N_A + N_B\right)$ terminoak, berriz, finko dagoen behatzailearekiko (A+B) osotasunaren mugimendua. 10.1 taulan, Fick-en legearen adierazpenak azaltzen dira zenbait erreferentziaren arabera.

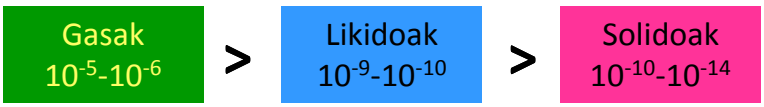
10.1 Taula. Fick-en legearen adierazpenak.

Unitatea	Behatzailearen erreferentzia-sistema	Adierazpena
mol/(azalera/denbora)	Sistemaren mol-zentroa	$J_A = -D_{AB} \cdot \frac{dC_A}{dZ}$
mol/(azalera/denbora)	Espazioan finko	$N_A = -C \cdot D_{AB} \cdot \frac{dy_A}{dZ} + y_A \cdot \left(N_A + N_B\right)$
masa/(azalera/denbora)	Sistemaren masa-zentroa	$j_A = -D_{AB} \cdot \frac{d\rho_A}{dZ}$ *
masa/(azalera/denbora)	Espazioan finko	$n_A = -\rho \cdot D_{AB} \cdot \frac{dw_A}{dZ} + w_A \cdot \left(n_A + n_B\right)$ *

* w_i, i osagaiaren masa-frakzioa; ρ, nahastearen dentsitatea.

10.2.1 Barreiapen-koefizientearen (D_{AB}) balioespena

Fick-en legean agertzen den D_{AB} barreiapen-koefizienteak esangura fisiko hau du: A osagaiak A eta B nahastearen barnean barreiatzeko duen gaitasuna. Aldagai horren gain, tenperaturak, presioak eta sistemaren konposizioak eragiten dute. Oro har, gas-faseko nahasteen barreiapen-koefizientea likido-fasekoa baino hainbat magnitude handiagoa da, eta likido-egoerakoa, solido-fasekoa baino hainbat magnitude handiagoa. Gas-fasean molekulak elkarrengandik oso sakabanatuta daudenez, oztopo gutxi dute barreiatzeko; likido-egoeran molekulen arteko kohesioa handiagoa denez, oztopo gehiago dute; eta, azkenik, solido egoeran, oso mugikortasun txikia dute (10.3 irudia):



10.3 irudia. Barreiapen-koefizientearen balioen ordenak, materiaren egoeraren arabera, m^2/s unitatean.

Maiz, zaila izaten da barreiapen-koefizientea esperimentu bidez lortzea. Horrelako kasuetan, koefizientearen balioespenak erabiltzen dira. Bibliografian, D_{AB}-ren balioa zenbatesten duten hainbat korrelazio enpiriko aurkitu daitezke A eta B osagaien propietate fisikoetan oinarrituta. Gas-faseko barreiapenerako hainbat adierazpenen artean, Gilliland-en ekuazioa azpimarratu daiteke, erabilera errazeko adierazpena baita. Bi osagairen bolumen molarrak erabiltzen ditu barreiapen-koefizientea kalkulatzeko:

$$D_{AB}(cm^2/s) = \frac{0{,}0043 \cdot T^{1,5}}{P \cdot \left(V_A^{1/3} + V_B^{1/3}\right)^2} \cdot \sqrt{\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}} \qquad (10.8)$$

T = sistemaren tenperatura absolutua (K)
P = sistemaren presio totala (atm)
V_A, V_B = A eta B osagaien bolumen molarrak bakoitzaren irakite-tenperatura normalean (cm^3/mol)
M_A, M_B = A eta B osagaien pisu molekularrak (g/mol)

Dena den, esperimentalki behatu denez, gas-faseko barreiapenean, D_{AB}-ren eta tenperatura absolutuaren eta presioaren arteko erlazioa hau da:

$$D_{AB} \propto \frac{T^{1,5}}{P} \qquad (10.9)$$

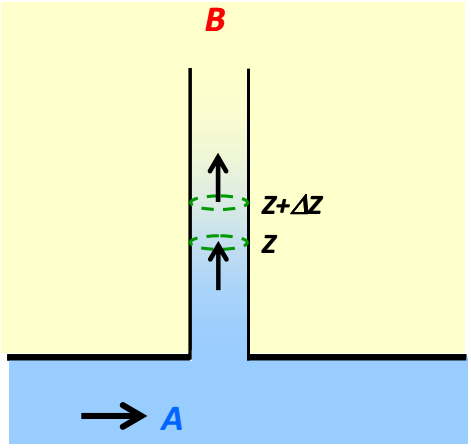
Likido-egoerako nahasteetan, barreiapen-koefizientea oso sentikorra da kontzentrazioarekiko. Likido-faseko barreiapen-koefizientea kalkulatzeko, ez dago gas-fasean bezalako teoria sendorik, baina, oro har, tenperaturarekin handitzen dela eta likatasunarekin txikitzen dela behatu da:

$$D_{AB} \propto \frac{T}{\mu} \qquad (10.10)$$

10.3 BARREIAPEN MOTAK

Demagun hodi batetik A osagaia doala eta hodiko puntu batean tutu estu bat ezartzen dela (10.3 irudia). Tutuaren goiko ahoa zabalik dago B osagaiaz osatutako ingurunera. Hodian eta tutuaren goiko ahoan Aren kontzentrazioa desberdina denez, A barreiatu egiten da. Egoera

geldikorrean, denbora-tarte batean, *Z* altueran dagoen *S* gainazalera sartzen diren Aren molak *Z+ΔZ* altuerako *S* gainazaletik irteten dira.



$$N_{A,Z} - N_{A,Z+\Delta Z} = 0$$

$$\frac{N_{A,Z} - N_{A,Z+\Delta Z}}{\Delta Z} = 0$$

$$\Delta Z \to 0 \qquad \frac{dN_A}{dZ} = 0$$

10.4 irudia. Egoera geldikorrean, A osagaiaren barreiapen molekularra B osagaiaren muinean.

$$\frac{dN_A}{dZ} = 0 \tag{10.11}$$

Egoera geldikorrean, barreiapen bidezko jario molarra (N_A) berdina da barreiapena gertatzen den noranzkoko edozein distantziatan. A eta B osagaien nahaste bitarraz eratutako sistemetan, hiru egoera ager daitezke:

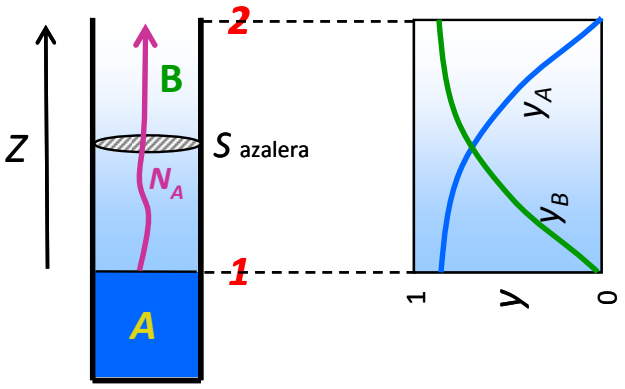
(1) Osagai bakarraren barreiapena (A) osagai geldikorraren (B) barnean.

(2) A eta B osagaien barreiapen ekimolekularra kontrako noranzkoan.

(3) A eta B osagaien barreiapen ez-ekimolekularra kontrako noranzkoan.

10.3.1 Osagai bakarraren barreiapena (A) osagai geldikorraren (B) barnean.

Egoera hau absortzioan edo likido bat lurruntzean gertatzen da.



10.5 irudia. Egoera geldikorrean, A osagaiaren barreiapen molekularra B osagai geldikorraren muinean.

Demagun 10.5 irudiko probetaren azpialdean A likidoa (purua) dagoela, eta probetaren goiko ahoa B osagaiaz osatutako ingurunera zabalik dagoela. Likidoaren gainazalarekin

kontaktuan dagoen gas-fasean (1 puntuan) Ak duen presio partziala Raoult-en legearen bidez kalkula daiteke:

$$P_{A,1} = P_A^0 \cdot x_A \tag{10.12}$$

x_A = 1 da, osagai purua delako. Beraz, 1 puntuan Aren mol-frakzioa $y_{A,1} = P_A^0 / P$ izango da. Probetaren goiko ahoa B osagaiaz betetako ingurunera lotuta dagoenez, $y_{A,2} \rightarrow 0$ dela har daiteke (probetaren goiko ahoan ia dena B osagaia da). A osagaiaren barreiapena eragiten duen indar eragilea $y_{A,1} - y_{A,2}$ da. Probetan dagoen B osagaia geldikor dagoenez:

$$N_B = 0 \tag{10.13}$$

Fick-en ekuazioan ordezkatuz, eta barreiapena gertatzen den 1 eta 2 gainazalen artean integratzean:

$$\int_{y_{A,1}}^{y_{A,2}} \frac{dy_A}{(1 - y_A)} = \frac{N_A}{-D_{AB} \cdot C} \cdot \int_{Z_1}^{Z_2} dZ \tag{11.14}$$

Sistema bitarra izanik $y_A + y_B = 1$ denez:

$$N_A = D_{AB} \cdot C \cdot \frac{\left[y_{A,1} - y_{A,2} \right]}{\left(y_B \right)_{BL} \cdot \left(Z_2 - Z_1 \right)} \tag{11.15}$$

$(y_B)_{BL}$ barreiapena gertatzen den 1 eta 2 puntuetan geldikor dagoen osagaiaren mol-frakzioen batezbesteko logaritmikoa da.

Egoera geldikorrean

$$\frac{dN_A}{dZ} = -\frac{d\left(\frac{dy_A}{(1 - y_A)} \right)}{dZ^2} = 0 \tag{11.16}$$

denez, Aren kontzentrazio-profila (zehazki y_A) lortzen da Z norabidean (ikusi 10.5 irudia). Ohartu gaitezen Bren profila $y_B = 1 - y_A$ eginez lortuko dela.

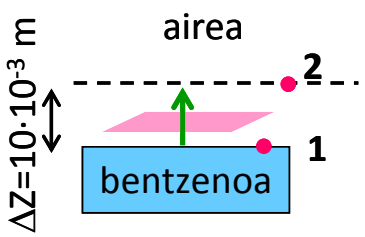
$$\left(\frac{1 - y_{A_2}}{1 - y_{A_1}} \right) = \left(\frac{1 - y_{A_2}}{1 - y_{A_1}} \right)^{Z/\Delta Z} \tag{11.17}$$

10.1 adibidea

Atmosferara zabalik dagoen 2 m-ko diametroko tanga zilindriko batean bentzeno likidoa gordetzen da. Ingurunearen eta bentzenoaren tenperatura 22 ºC da. Tenperatura horretan, bentzenoaren lurrun-presioa 10,3 kN/m^2 dela balioets daiteke. Likidoaren gainean geldikor dagoen 10 mm-ko lodierako aire-geruza baten bitartez lurruntzen da bentzenoa. Kalkula dezagun bentzenoa lurruntzeagatik zenbat diru galtzen den egun bakoitzeko.
Datuak: bentzenoaren kostua 0,1 €/l. Bentzenoaren dentsitatea 880 kg/m^3. Bentzeno-aire sistemaren barreiapen-koefizientea (22 ºC, 1 atm) 0,09 cm^2/s.

Ebazpena

Geldikor dagoen aire-mintzaren barneko barreiapena denez, 11.14 adierazpena erabiliko da (A bentzenoa eta B airea izanik).



Presioa baxua denez, barreiapena gertatzen den gas-faseko kontzentrazio osoa gas idealen legearekin kalkulatuko da:

$C = P/RT = 41{,}33$ mol/m^3

(1) $y_{A,1} = P_{A,1}/P = (P_A^0 \cdot x_{A,1})/P = 10{,}3 \cdot 1/101{,}3 = 0{,}1017$; $y_{B,1} = 1 - y_{A,1} = 0{,}8983$

(2) $y_{A,1} \approx 0$ (airearen muineko bentzenoaren edukia baztertu daiteke); $y_{B,2} = 1$

$(y_B)_{BL} = 0{,}9482$.

Balio horiekin, $N_A = 3{,}99 \cdot 10^{-3}$ mol/sm^2 barreiatzen dela kalkulatzen da. Egoera geldikorrean, irudiko azalera barreiapen bidez zeharkatzen duten bentzeno-molak lurrundutako molak dira.

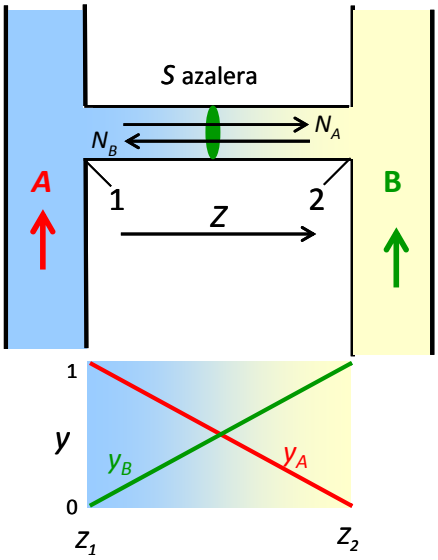
Airera zabalik dagoen tangaren azalera = $\pi \cdot R^2 = 3{,}14$ m^2.

Egun bakoitzean lurruntzen den bentzenoa = 1082 mol = 96 l

Galera ekonomikoa = 9,6 €/egun

10.3.2 A eta B osagaien barreiapen ekimolekularra kontrako noranzkoan.

Honelako sistemak nahaste idealen destilazioan edo erreakzio katalitikoetan ager daitezke. Destilazioan, osagai lurrunkorrenaren mol bat likidotik lurrunera igarotzen den bitartean, osagai astunenaren mol batek kontrako ibilbidea egiten du.



10.6 irudia. A eta B osagaien barreiapen ekimolekularra kontrako noranzkoan.

Demagun presio berean dauden 10.6 irudiko bi hodiak ditugula, eta batetik A osagaia eta bestetik B osagaia doazela. Puntu batean, diametro oso estuko tutu batez lotzen dira bi hodiak. Tutuko 1 eta 2 puntuen artean A-ren eta Bren indar eragile bana agertzen denez, $(y_{A,1} - y_{A,2})$ eta $(y_{B,2} - y_{B,1})$, biak barreiatuko dira, kontrakorrontean. Gainera, sistemako presioa konstante manten dadin, barreiapen ekimolekularra izango da.

$$N_B = -N_A$$

Fick-en ekuazioan ordezkatuz, eta barreiapena gertatzen den 1 eta 2 gainazalen artean integratzean:

$$N_A = D_{AB} \cdot C \cdot \frac{\left[y_{A,1} - y_{A,2} \right]}{\left(Z_2 - Z_1 \right)} \tag{11.18}$$

Egoera geldikorrean

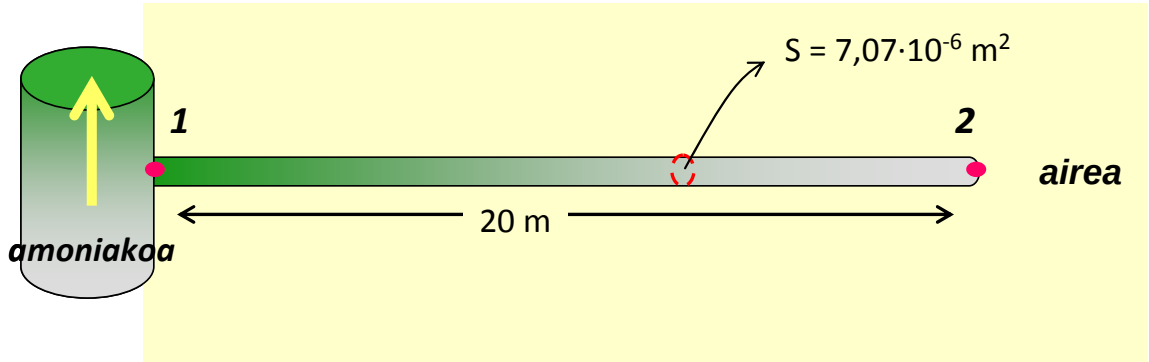
$$\frac{dN_A}{dZ} = 0 = \frac{d^2 y_A}{dZ^2} \tag{11.19}$$

denez, Aren kontzentrazio-profila lortzen da *Z* norabidean (10.6 irudian irudikatua):

$$\left(\frac{y_A - y_{A_1}}{y_{A_2} - y_{A_1}} \right) = \frac{Z}{\Delta Z} \tag{11.20}$$

10.2 adibidea

Hodi barruko presioa 1 atm-an mantentzeko, amoniakoa daraman hodi batek aireztapen bat du airera irekita. Aireztapena 3 mm-ko diametroko eta 20 m-ko luzerako tutu estu baten bitartez egiten da. Sistema osoa 25 ºC-an badago, kalkula dezagun (a) hodi-barrura sartzen den eta amoniakoa kutsatzen duen aire-emaria, (b) hoditik 0,3 kmol/h amoniakok zirkulatzen badu, airearen mol-frakzioa.
Datuak: $D_{URA\text{-}AIREA}$ (1 atm, 25 ºC) = $0{,}28 \cdot 10^{-4}$ m^2/s



Ebazpena

(a) Sistema honetan amoniakoa (A) eta airea kontrakorrontean eta ekimolekularki barreiatzen direnez, 11.17 adierazpena erabiliko da.

Sistemako kontzentrazio osoa: $C = P/RT$ = 1 atm/[0,082 atm·l/K·mol· 298 K] = 40,92 mol/m^3

(1) puntua: A purutzat joko da; beraz, $y_{A,1}$ = 1 (zehazki esateko, aire pixka bat izango du, baina baztertu egin daiteke, gero ikusiko denez).

(2) puntua: airea dela jo daiteke: $y_{A,1}$ = 0

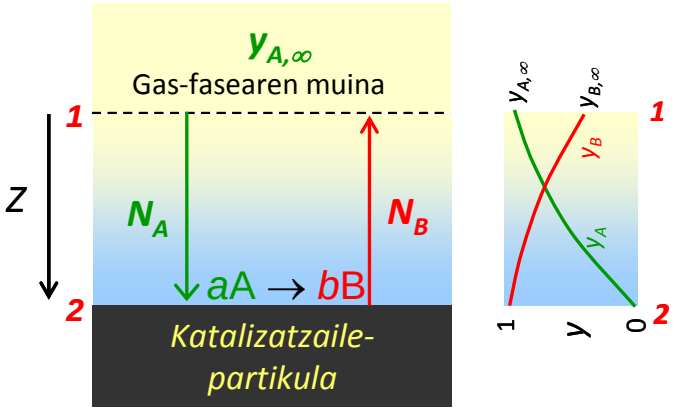
Ekuazioan ordezkatzen bada, N_{NH3} = $4{,}05 \cdot 10^{-10}$ mol NH_3/s-ko barreiapena lortzen da. Barreiapena kontrakorrontean gertatzen denez eta ekimolekularra denez, hodira beste hainbeste aire-mol sartzen dira.

(b) Hodiko amoniakoaren jarioa: F_{NH3} = 0,3 kmol NH_3/s
Aireztapen-hoditik F_{AIREA} = $1{,}46 \cdot 10^{-9}$ kmol aire/h sartzen bada, hodi barruan airearen mol-frakzioa y_{AIREA} = $4{,}87 \cdot 10^{-9}$ da (erabat baztergarria).

10.3.3 A eta B osagaien barreiapen ez-ekimolekularra kontrako noranzkoan.

Honelako egoerak erreakzio kimiko katalitikoak dauden sistemetan gerta daitezke. 10.7 irudiko partikula katalitikoaren gainazalean gas-faseko *a*A → *b*B erreakzioa gertatzen da. Partikula katalitikoaren gainazalera heltzeko, A osagaiak gas-faseko muinetik katalizatzailearen gainazalera barreiatu behar du mintzaren barnean. Katalizatzailearen gainazalean erreakzioz sortutako B osagaia katalizatzailearen gainazala utzi eta gas-faseko muinera pasatzeko, katalizatzailearen inguruko mintza barreiapen bidez zeharkatu behar du. Bien barreiapena kontrakorrontean gertatzen den arren, *a* eta *b* koefiziente estekiometrikoen arabera, ekimolekularra (*a* = *b* denean) edo ez-ekimolekularra izan daiteke.

$$N_B = -\frac{b}{a} N_A$$



10.7 irudia. A eta B osagaien barreiapen ez-ekimolekularra kontrako noranzkoan.

10.4 GELDIKOR DAGOEN OSAGAI BATEAN BARREIATZEN DEN LURRUN BATEN BARREIAPEN-KOEFIZIENTEA ESPERIMENTU BIDEZ LORTZEA

Tenperatura eta presioa konstante mantenduz, probeta A osagai likidoz betetzen da goiko ahotik Z_0 sakonera arte. Denbora pasatu ahala, likidoa lurrundu egiten da (Aren lurruna geldikor dagoen B osagaian barreiatzen da), eta likidoaren bolumena murriztu egiten da; hala, denborarekin, likidoaren sakonera (*Z*) txikitu egiten da, 10.8 irudian agertzen den bezala.

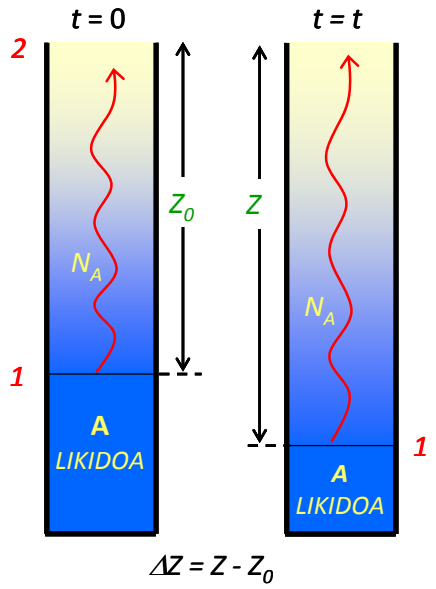
A osagaiaren masa-balantzearen arabera, lurruntzen diren A-ren molak barreiatu egingo dira:

$$-\left(\rho_{A,lik} \cdot M_A\right) \cdot A \cdot \frac{dZ}{dt} = -C \cdot D_{AB} \cdot \frac{\left(y_{A,1} - y_{A,2}\right)}{\left(y_B\right)_{BL} \cdot Z} \qquad (10.21)$$

Adierazpen hori zenbait denboratarako integratzen bada:

$$\left.\begin{aligned} \left(\frac{t}{\Delta Z}\right) &= M \cdot \Delta Z + 2 \cdot M \cdot Z_0 \\ M &= \frac{1}{2} \cdot \frac{\left(\frac{\rho_{A,lik}}{M_A}\right) \cdot \left(y_B\right)_{BL}}{C \cdot D_{AB} \cdot \left(y_{A,1}\right)} \end{aligned}\right\} \qquad (10.22)$$

M_A eta $\rho_{A,lik}$ A osagaiaren pisu molekularra eta likido-faseko dentsitatea dira, hurrenez hurren. Probetaren goiko ahoan B osagaiaren jario motela eragiten bada barreiapen-norabidearekiko perpendikularrean (probetaren barruan zurrunbilorik sortu gabe), $y_{A,2} \rightarrow 0$ dela har daiteke.



10.8 irudia. Barreiapen-koefizientea esperimentu bidez lortzeko muntaia.

Une batzuetan ΔZ neurtuz, $t/\Delta Z$ vs. ΔZ datuak irudikatzen dira, eta goiko ekuazioarekin doitzen dira. Maldatik (M), D_{AB}-ren balioa kalkula daiteke.

10.3 adibidea

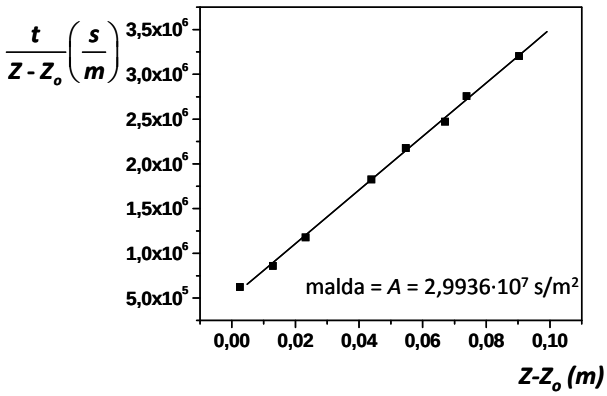
Atmosferara zabalik dagoen probeta bat 48 ºC-an dagoen CCl_4-z betetzen da, eta likidoaren mailak denborarekin duen aldaketa (Z - Z_0) neurtu da. Kalkula dezagun karbono tetrakloruroak airean duen barreiapen-koefizientearen balioa, laneko baldintzetan.
Datuak: $\rho_{CCl4,lik}$ = 1,54 kg/l P^0_{CCl4}(48 ºC) = 282 mmHg

t(s)	0	1560	11100	27360	80160	119100	165600	203400	289320
Z - Z_0 (m)	0	0,0025	0,0129	0,0232	0,0439	0,0547	0,067	0,0738	0,0903

Ebazpena

A: karbono tetrakloruroa; B: airea.

$\dfrac{t}{Z - Z_0}$ kalkulatuko da, ondoren (Z - Z_0)-rekiko irudikatzeko.



(2) puntuan: $y_{A,2} \approx 0 \quad \rightarrow y_{B,2} \approx 1$
(1) puntuan: Raoult-en legetik,
$y_{A,1}$ = 0,371
$y_{B,1}$ = 0,629
$(y_B)_{BL}$ = 0,80
$C = P/RT$ = 37,99 mol/m^3
10.21 ekuaziotik, D_{AB} = 0,0946 cm^2/s.

10.5 KONBEKZIO BIDEZKO MASA-TRANSFERENZTIA

Demagun A eta B osagaien nahastea *X* norabidean jariatzen dela (10.9 irudian), eta Aren kontzentrazioa $C_{A,\infty}$ dela. Une batean, gainazal solido lau baten gainetik pasatzen da. Gainazal solidoan Aren kontzentrazioa $C_{A,S}$ bada ($C_{A,S} > C_{A,\infty}$ izanik), *Z* norabidean —jarioarekiko perpendikularra da— Aren kontzentrazio-gradientea garatzen da, muga-geruza garatzen den heinean. Gainazal solidoak Aren kontzentrazioa aldatzen duen jariagai-eremuari ***kontzentrazioen muga-geruza*** deritzo. Muga-geruzan, ***konbekzio*** bidez transferitzen da A osagaia solidotik jariagaiaren muinera, eta jariagaiaren mugimenduaren edo zurrunbiloen bitartez gertatzen da. Muga-geruza fluidodinamikoaren eragina ere izango du; izan ere, jariagaiaren jarioa laminarra bada, zurrunbilo gutxi egongo denez, barreiapen molekularrak garrantzia izango du; jarioa zurrunbilotsua bada, berriz, konbekzioak garrantzia hartzen du. Kontzentrazioen muga-geruzaren lodiera $\left(C_{A,S} - C_A\right) = 0{,}99 \cdot \left(C_{A,S} - C_{A,\infty}\right)$ berdintzak ematen du.

Muga-geruza fluidodinamikoan, azpigeruza laminarra garatzen da solidoaren inguruko jariagai-eremuan. Han, nahaste gutxi dagoenez, masa-transferentzia barreiapen molekularraren bidez gertatzen da, eta Fick-en legeak azaltzen du (10.2 ekuazioa).

Konbekzio bidezko masa-transferentziarako Newton-en legearen arabera, gainazal solido baten eta jariagai baten muinaren arteko masa-transferentziaren abiadura honela idatz daiteke.

$$N_A = k_C \cdot A \cdot \left(C_{A,S} - C_{A,\infty}\right) \tag{10.23}$$

k_C, konbekzio bidezko masa-transferentziarako koefizientea izanik. [k_C] = mol/denbora·azalera dimentsiokoa da. Ekuazio hori konbekzio bidezko bero-transmisiorako definitu den ekuazioaren analogoa da (*h*-ren lekuan k_C eta ΔT-ren lekuan ΔC_A jarrita).

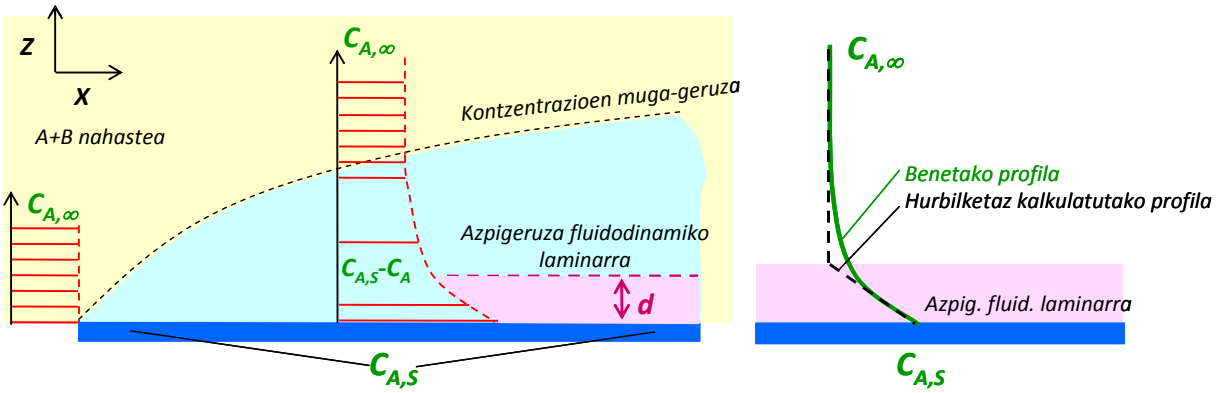
Egoera geldikorrean barreiapenez eta konbekzioz masa bera garraiatzen denez:

$$k_C = -\frac{D_{AB} \cdot \left(\dfrac{dC_A}{dZ}\right)}{\left(C_{A,S} - C_{A,\infty}\right)} \tag{10.24}$$

Argi dagoen muga-geruzak eragin nabarmena duela konbekzio-koefizientean. 10.9 irudian ikusten denez, oso antzekoak dira benetako kontzentrazio-profila eta erresistentzia guztia azpigeruza fluidodinamiko laminarrak eskainiko balu kalkulatuko litzatekeen kontzentrazio-profila.

Indar eragilea kontzentrazio moduan eman den arren, sistemaren arabera, egokiagoa izan daiteke beste unitate batzuk erabiltzea. Adibidez, gas-fasean presio partzialak edo mol-frakzioak erabiltzen dira. Hau da konbekzio bidezko masa-transferentzia adierazten duen Newton-en ekuazioaren adierazpen orokorra, *IE* indar eragilea izanik:

$$N_A = k \cdot A \cdot IE \qquad (10.25)$$



10.9 irudia. Kontzentrazioen muga-geruza eta azpigeruza fluidodinamiko laminarrean zeharreko benetako eta hurbilketazko kontzentrazio-profila.

10.2 taulan adierazten dira *IE*ren unitateen arabera erabili behar diren *k* konstantearen unitateak.

10.2 taula. Konbekzio bidezko masa-transferentziarako koefizientearen unitateak indar eragilearen (*IE*) arabera. (*A* m^2-tan eta denbora h-tan emanda)

IE	*Unitatea*	*koefizientea*	*unitatea*
ΔC_A	mol/l	k_C	$l/h \cdot m^2$
ΔP_A	atm	k_P	$mol/h \cdot atm \cdot m^2$
Δy_A	mol/mol	k_y	$mol/h \cdot m^2$

Dimentsio-analisiaren bidez zein mugimendu kantitatearekin eta bero-transmisioarekin parekatuz lortzen da masa-transferentziarako konbekzio-koefizientea.

Dimentsio-analisia egin ondoren, 10.3 taulako dimentsio gabeko zenbakiak definitzen dira konbekzio bidezko masa-transferentzian:

10.3 taula. Konbekzio bidezko masa-transferentzian erabiltzen diren dimentsio gabeko zenbakiak.

Izena	*Adierazpena*	*Esangura fisikoa*
Sherwood	$Sh = \frac{k_C \cdot L}{D_{AB}}$	Gainazaleko kontzentrazio-gradientea, edo konbekzio eta barreiapen bidezko masa-transferentziarako abiaduren arteko erlazioa
Schmidt	$Sc = \frac{\mu}{\rho \cdot D_{AB}}$	Mugimendu kantitatearen barreiapenaren eta masa-transferentziaren barreiapenaren arteko erlazioa
Grashof masikoa	$Gr_{AB} = \frac{L^3 \cdot \rho \cdot g \cdot \Delta\rho_A}{\mu^2}$	Flotazio-indarren eta marruskadura-indarren arteko erlazioa
Reynolds	$Re = \frac{D \cdot v \cdot \rho}{\mu}$	Inertzia-indarren eta marruskadura-indarren arteko erlazioa

Ohartzen bagara, Sh zenbakia bero-transmisioan erabiltzen den Nu zenbakiaren analogoa da; era berean, Sc zenbakiaren eta bero-transmisioko Pr zenbakiaren esanahi fisikoa ere analogoak dira. Schmidt zenbakiak muga-geruza hidrodinamikoa eta kontzentrazioen muga-geruzaren lodieren arteko erlazioa adierazten du.

Dimentsio gabeko zenbakien arteko erlazio ugari aurkitzen da bibliografian, sistemaren arabera. Adierazpen generikoak itxura hau du:

$$\mathrm{Sh} = f\left[\mathrm{Re}, \mathrm{Sc}, \mathrm{Gr}\right] \qquad (10.26)$$

Konbekzioa berezkoa denean (dentsitate-diferentziak berak sortzen duenean mugimendua) zurrunbilotasuna txikia denez, Re baztergarria da Gr zenbakiarekiko; konbekzio indartuan, ordea, zurrunbiloen indarra handia denez, Gr zenbakiaren eragina baztertu egin daiteke Re zenbakiarekiko.

10.6 MUGIMENDU KANTITATEAREN TRANSFERENTZIAREN, BERO-TRANSMISIOAREN ETA MASA-TRANSFERENTZIAREN ARTEKO ANALOGIA

Garraio molekularraren mekanismoen adierazpen matematiko hauek analogoak dira: mugimendu kantitatearen transferentzia, bero-transmisioa eta masa-transferentzia. Hau da, propietate hedagarri desberdinak izan arren, garraio-mekanismo berak erabiltzen dituzte, eredu berari jarraitzen diote. Zurrunbilorik gabeko jarioan (hau da, garraio edo transferentzia molekularra) hiru propietate hedagarrien garraio-ekuazioak analogoak dira, 10.4 taulan agerian geratzen den bezala. 10.10 irudian adierazten dira jariagai baten muinean gertatzen den propietate hedagarrien garraio molekularraren mekanismoa (jario laminarrekoa) eta nahaste-garraioaren mekanismoa (zurrunbiloak daudenekoa, hau da, konbekzio bidezkoa). Garraio molekularrean modu ordenatuko jariagai geruzen artean gertatzen den bezala, nahaste-garraioan jariagai geruzen arteko nahastea gertatzean ematen da propietate hedagarrien garraioa.

10.4 taula. Propietate hedagarrien garraio molekular bidezko transferentzien arteko analogia.

Propietate hedagarria	*Legea*	*Transferentzia molekularreko ekuazioa*	*Ekuazioa*
Mugimendu kantitatea	Newton	$\tau = -\mu \cdot \frac{dv}{dZ}$	*6.4*
Energia	Fourier	$q = -k \cdot \frac{dT}{dZ}$	*8.4*
Masa	Fick	$J_A = -D_{AB} \cdot \frac{dC_A}{dZ}$	*10.2*

Hiru garraio-ekuazioen proportzionaltasun-konstanteek (barreiapenak) adierazten dute propietate hedagarriak *Z* norabidearekiko zuta den jarioan garraiatzea erraza dela. Hala, ondoren definitzen diren propietate guztiek dimentsio bera dute [L^2/t]:

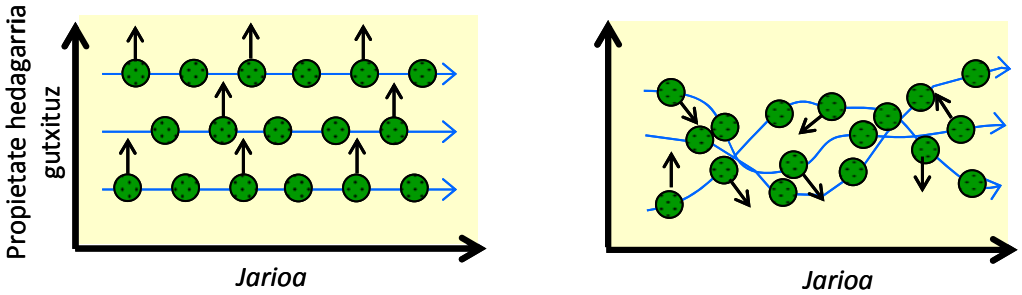
Mugimendu kantitatearen barreiapena = μ/ρ
Barreiapen termikoa = $k/\rho \cdot C_P$

Masa-barreiapena = D_{AB}

Jario laminarrean hiru propietate hedagarrien transferentziarako mekanismoak berdinak direnez, garraio-fenomenoak karakterizatzeko parametroen artean analogia hauek lor daitezke:

Reynolds-en analogia: Re > 2100, Pr = 1, Sc = 1:

$$\frac{f}{2} = \frac{k_C}{V_\infty} = \frac{h}{\rho \cdot C_P \cdot V_\infty} \tag{10.27}$$



Garraio molekularra *Nahaste-garraioa*

10.10 irudia. Propietate hedagarrien transferentziarako mekanismoak: garraio molekularra eta nahaste-garraioa (konbekzio bidezkoa).

Mugimendu kantitatea karakterizatzen duen Darcy-ren marruskadura-zenbakia (*f*), masa-transferentziarako koefizientea (k_C) eta bero-transmisiorako koefizientea (*h*) erlazionatzen ditu.

Chilton-Colburn-en analogia: 0,6 < Sc < 2500, 0,6 < Pr < 100:

$$j_H = \frac{h}{\rho \cdot C_P \cdot v_\infty} \cdot (\mathrm{Pr})^{\frac{2}{3}} \text{ : bero-transmisiorako } j \text{ faktorea} \tag{10.28}$$

$$j_D = \frac{k_C}{v_\infty} \cdot (Sc)^{\frac{2}{3}} \text{ : masa-transferentziarako } j \text{ faktorea} \tag{10.29}$$

$$j_D = j_H = \frac{f}{2} \tag{12.30}$$

11. GAIA

FASEEN ARTEKO MASA-TRANSFERENTZIA. BEREIZTE-ERAGIKETAK

Fase homogeneo bateko osagai guztiek ez dute erraztasun berdina jatorrizko fasearekin ukipenean jartzen den beste fase berri batera igarotzeko. Hala, erraztasun handieneko osagaiak bigarren fasean aberasten diren heinean, zailtasun handiena daukan osagaia jatorrizko fasean aberastuko da. Faseen arteko masa-transferentzian oinarritzen dira, besteak beste, destilazioa (likido-fasearen eta lurrun-fasearen arteko garraioa), absortzioa (likido-fasearen eta gas-fasearen arteko garraioa) eta erauzketa (bi likido disolbaezinen arteko garraioa).

Fase bakarrean ez bezala, fase anitzeko sisteman oreka lortzen denean, osagai guztien kontzentrazioek ez dute zertan berdinak izan fase guztietan. Oreka lortzean potentzial kimikoak berdintzen direnez, gerta daiteke konposatu kimikoek fase bakoitzean kontzentrazio desberdinak izatea. Nahaste homogeneoak bereizteko eragiketa asko faseen arteko masa-transferentzian oinarritua dago.

11.1 FASEEN ARTEKO MASA-TRANSFERENTZIA: MINTZ BIKOITZAREN TEORIA

Teoria honen arabera, fase bakoitzak geldikor dagoen mintz mehe bat osatzen du beste fasearekin kontaktuan dagoen eremuan (azpigeruza fluidodinamiko laminarraren inguruan) eta mintz horrek masa-transferentziari erresistentzia osoa jartzen dio. Teoria garatzeko, hurbilketa hauek egingo dira:

(1) Egoera geldikorra lortu da.

(2) Solutu bakarra dago, A osagaia (hau da, osagai bakarra garraiatzen da bi faseen artean)

(3) Fase bakoitzeko mintzak erresistentzia egiten dio haren barnetik doan A osagaiaren jarioari. Mintz horretan, nahastea geldikor dago.

(4) Fase bakoitzaren muinean osagaien kontzentrazioa uniformea da, baina, mintzaren barruan, kontzentrazio-gradientea dago.

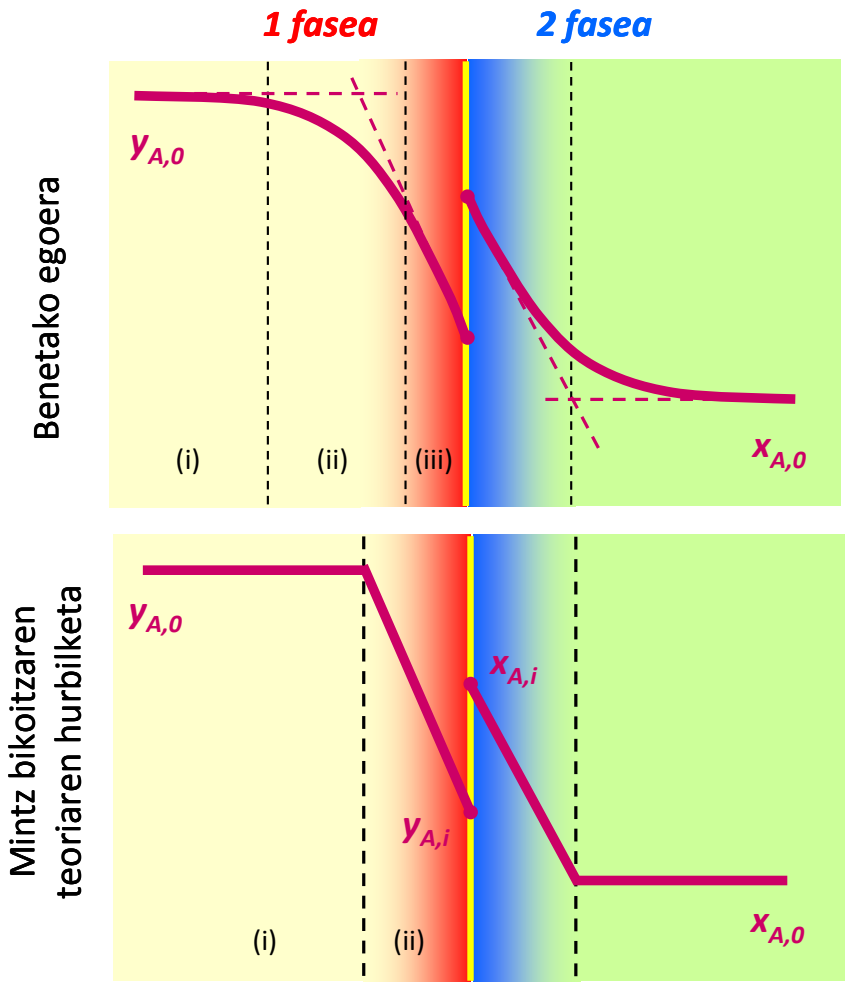
(5) Fase artean oreka lortzen da, eta, ondorioz, fasearteak ez du erresistentziarik eskaintzen. Behin faseartera helduta, molekula inolako eragozpenik gabe pasatzen da beste fasera.

(6) Ez da erreakzio kimikorik gertatzen. Ondorioz, fase batetik irteten diren molak beste fasera sartzen dira.

Demagun oreka kimikoan ez dauden bi fase (adibidez, absortzio-eragiketa bateko gasa eta likidoa, edo erauzketa-eragiketako bi likidoak) kontaktuan jartzen direla eta, horren ondorioz, A osagaiaren transferentzia gertatzen dela (11.1 irudian 1 fasetik 2 faserako norabidean).

$y_{A,0}$ eta $x_{A,0}$ A osagairen mol-frakzioak (edo kontzentrazioak) dira 1 eta 2 faseen muinean, hurrenez hurren (nahaste uniformea den eremuan, geldikor dagoen mintzaren kanpoaldean). Transferentzia gertatzen den noranzkoan Aren mol-frakzioa (edo kontzentrazioa) neurtuko balitz, 11.1 irudian bezalako profila izango litzateke. Ohar gaitezen faseartean bi faseen aldetik Aren kontzentrazioak ez direla berdinak (kasu bakoitzean, dagokion orekak ematen du kontzentrazioen orekako banaketa).

11.1 irudiaren arabera, 1 fasean kontzentrazio-gradientea nabari da, batez ere 2 fasearekin kontaktuan dagoen mintz mehe baten barnean (10.5 atalean azaldu den kontzentrazioen muga-geruza, alegia). 2 fasearen aldean, beste hainbeste gertatzen da. Fase bakoitzean, hiru eremu bereiz daitezke:



11.1 irudia. Faseartearen benetako egoera (goian) eta mintz bikoitzaren teoriaren hurbilketaz kalkulatutako egoera (behean).

(i) kontzentrazio homogeneoko eremua, muga-geruzatik kanpo, (ii) trantsizio-eremua eta (iii) muga-geruza laminarreko eremua (11.1 irudia goian). Sistema horren eredu matematikoa mintz bikoitzaren teoriak ematen du.

Teoria horren arabera, kontzentrazio-profila 11.1 irudikoa (behekoa) bezalakoa da. Bertan, bi eremu bereiz daitezke fase bakoitzean: (i) kontzentrazio homogeneoko eremua eta (ii) mintza geldikor dagoen eremua.

Faseen arteko oreka sistema bakoitzaren arabera aldatzen da. Absortzio- eta desortzio-eragiketetan likido-gas oreka gertatzen da (adibidez, Henry-ren legea bete dezakete); destilazioan, likido-lurrun oreka beteko da (ideala bada, Raoult-en legea); likido-likido erauzketan, banaketa-koefizienteak ematen duen oreka beteko da (ikusi 14. gaia).

Mintz bakoitzaren muineko nahastea geldikor dagoenez, masa-transferentzia barreiapen molekularrez gertatzen da. Hala ere, mintzaren lodiera ezezaguna eta neurtezina denez, masa-transferentziarako konbekzio-koefizienteak erabiltzen dira:

$$N_A = k_y \cdot A \cdot \Delta y_A \qquad (11.1)$$

11.1 irudiaren arabera, A solutuak seriean dauden bi erresistentzia zeharkatu behar ditu fase baten muinetik beste fasearen muinera igarotzeko.

Lehenik eta behin, 1 faseko mintza zeharkatu behar du, eta horretarako indar eragilea $\left(y_{A,0} - y_{A,i}\right)$ da; gero, 2 faseko muinera heldu aurretik, fase horri dagokion mintza zeharkatu behar du, eta horretarako indar eragilea $\left(x_{A,i} - x_{A,0}\right)$ da. Egoera geldikorrean, bi abiadurak berdinak dira:

$$N_A = k_y \cdot A \cdot \left(y_{A,0} - y_{A,i}\right) = k_x \cdot A \cdot \left(x_{A,i} - x_{A,0}\right) \qquad (11.2)$$

k_y eta k_x 1 eta 2 faseetako mintzetan masa-transferentziarako konbekzio-koefiziente indibidualak dira, hurrenez hurren; A fasearteko azalera da. Zirkuitu elektrikoen analogia eginda, A molekulak ondoz ondoko bi erresistentzia zeharkatu behar ditu 1 fasearen muinetik 2 fasearen muinera heltzeko:

$$R_1 = \left(\frac{1}{k_y \cdot A}\right) \text{ eta } R_2 = \left(\frac{1}{k_x \cdot A}\right)$$

11.2 FASEEN ARTEKO MASA-TRANSFERENTZIARAKO KOEFIZIENTE GLOBALAK

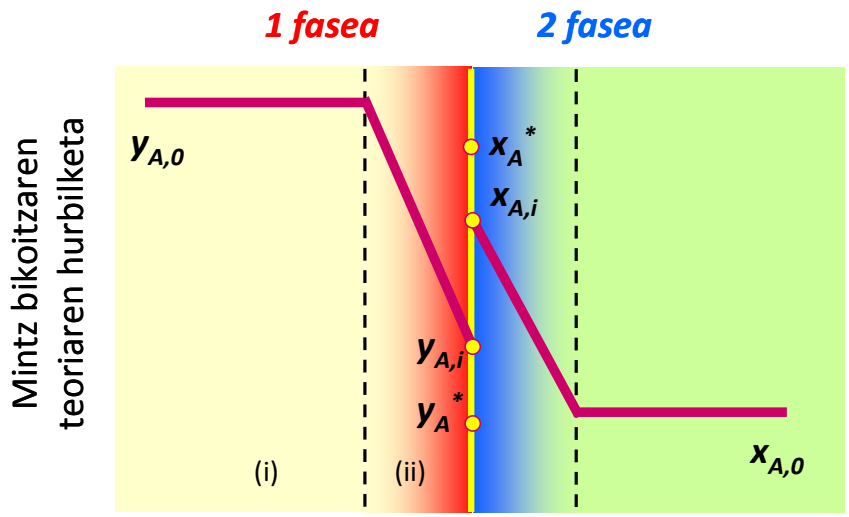
Fasearteko kontzentrazioen ($y_{A,i}$ eta $x_{A,i}$) neurketa esperimentala egitea zaila da, mintza mehea baita. Hori saihesteko, masa-transferentziarako koefiziente globalak erabiltzen dira.

$$N_A = \overline{K}_y \cdot A \cdot \left(y_{A,0} - y_A^*\right) = \overline{K}_x \cdot A \cdot \left(x_A^* - x_{A,0}\right) \qquad (11.3)$$

$\overline{K}_y$ eta $\overline{K}_x$ masa-transferentziarako koefiziente globalak dira 1 eta 2 faseetarako, hurrenez hurren. Erresistentzia globalaren berri ematen dute (bero-transmisioan definitzen zen U-ren antzera).

y_A*, 2 faseko muinarekin orekan dagoen Aren kontzentrazioa, 1 fasearen aldean.
x_A*, 1 faseko muinarekin orekan dagoen Aren kontzentrazioa, 2 fasearen aldean.

Masa-transferentziarako indar eragileak $\left(y_{A,0} - y_A^*\right)$ eta $\left(x_A^* - x_{A,0}\right)$ dira 1 eta 2 faseetarako, hurrenez hurren. 11.2 irudian, y_A* eta x_A* agertzen dira fasearteau.

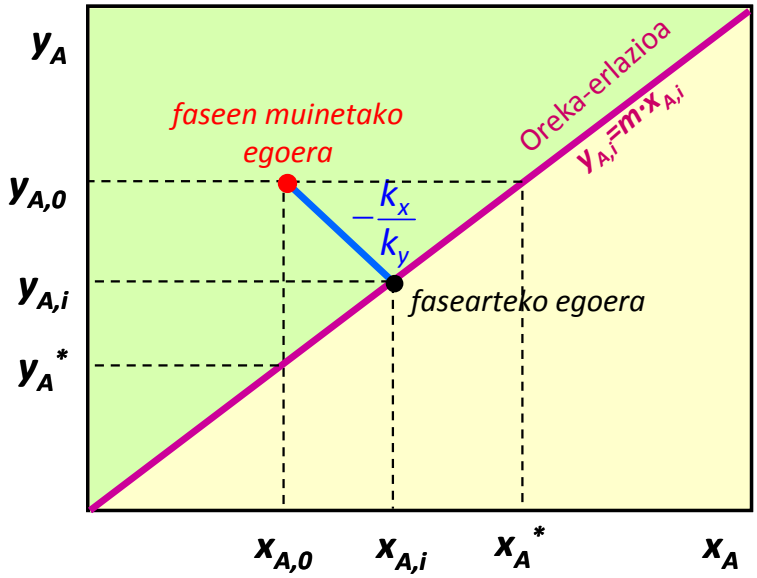


11.2 irudia. Mintz bikoitzaren teoriaren hurbilketa bidezko fasearteko konposizioen kalkulua.

11.2 irudiko kontzentrazioak 11.3 irudian agertzen dira y_A - x_A diagraman marraztuta. Azalpena argiagoa izan dadin, oreka-erlazio lineala —$y_{A,i} = m \cdot x_{A,i}$— hartu da (Henry-ren

legea betetzen den sistema, adibidez). Fase bakoitzaren muineko kontzentrazioak $y_{A,0}$ eta $x_{A,0}$ badira, masa-transferentzia 1 fasetik 2 faserako noranzkoan gertatzen da (ohartu gaitezen faseen muinetako egoera orekaren azpitik egongo balitz, masa-transferentzia kontrako noranzkoan gertatuko litzatekeela). Fasearteko kontzentrazioa oreka-lerroan dago.

Bi puntuak lotzen dituen malda $-\left(k_x/k_y\right)$ da. Sisteman nolako masa-transferentzia gertatzen den adierazten du lerro horrek. 1 faseko mintzaren erresistentzia 2 fasekoa baino askoz ere handiagoa bada (k_y << k_x) lerroa bertikala izango da, eta k_y >> k_x bada, berriz, lerroa horizontala izango da.



11.3 irudia. Mintz bikoitzaren teoriaren hurbilketa bidezko fasearteko konposizioen kalkulu grafikoa.

11.1.1 Koefiziente globalak lortzea koefiziente indibidualetatik abiatuz

Egoera geldikorra lortu ondoren, 1 faseko mintza zeharkatzen duten solutuaren molek 2 faseko mintza zeharkatuko dute.

$$N_A = k_y \cdot A \cdot \left(y_{A,0} - y_{A,i}\right) = \overline{K_y} \cdot A \cdot \left(y_{A,0} - y_A^*\right) = k_X \cdot A \cdot \left(x_{A,i} - x_{A,0}\right) = \overline{K_x} \cdot A \cdot \left(x_A^* - x_{A,0}\right)$$

1 faserako:

$$k_y \cdot A \cdot \left(y_{A,0} - y_{A,i}\right) = \overline{K_y} \cdot A \cdot \left(y_{A,0} - y_A^*\right) \tag{11.4}$$

$$\frac{1}{\overline{\overline{K_y}}} = \frac{\left(y_{A,0} - y_A^*\right)}{k_y \cdot \left(y_{A,0} - y_{A,i}\right)} \tag{11.5}$$

11.3 irudian ikusten den bezala, indar eragile osoa

$\left(y_{A,0} - y_A^*\right) = \left(y_{A,0} - y_{A,i}\right) + \left(y_{A,i} - y_A^*\right)$ da.

Beraz,

$$\frac{1}{\overline{\overline{K_y}}} = \frac{\cancel{\left(y_{A,0} - y_{A,i}\right)}}{k_y \cdot \cancel{\left(y_{A,0} - y_{A,i}\right)}} + \frac{\left(y_{A,i} - y_A^*\right)}{k_y \cdot \left(y_{A,0} - y_{A,i}\right)} \tag{11.6}$$

$k_y \cdot A \cdot \left(y_{A,0} - y_{A,i} \right) = k_X \cdot A \cdot \left(x_{A,i} - x_{A,0} \right)$ izanik, 11.6 ekuazioan ordezkatzen da. Oreka-erlazioaren malda

$$m = \frac{\left(y_{A,i} - y_A^* \right)}{\left(x_{A,i} - x_{A,0} \right)} \tag{11.7}$$

bada, hau da koefiziente globala 1 fasea oinarritzat harturik:

$$\frac{1}{\overline{\overline{K_y}}} = \frac{1}{k_y} + \frac{m}{k_X} \tag{11.8}$$

Modu berean, 2 faserako egin balitz:

$$\frac{1}{\overline{\overline{K_X}}} = \frac{1}{k_X} + \frac{1}{m \cdot k_Y} \tag{11.9}$$

Argi dago bi faseen erresistentzia indibidual erlatiboak disolbagarritasunaren (*m*) eragin nabarmena duela.

Likidoan oso disolbagarria den solutu baten kasuan (*m* oso txikia), erresistentzia osoa gas-faseko mintzak duenaren antzekoa da. Sistema hauetan, masa-transferentzia hobetu nahi denean, gas-faseko mintzak egiten duen erresistentzia murriztu behar da. Bestalde, likidoan disolbaezinak diren gasetan (*m* oso handia), erresistentzia osoa likido-faseko mintzaren oso antzekoa da. Kasu gehienetan, ordea, bi faseetako mintzen erresistentziak esanguratsuak dira, eta haien eragina kontuan hartu behar da erresistentzia osoaren kalkuluan.

Oreka-erlazioa lineala ez denean, *m* malda konposizioen araberakoa da, eta puntuz puntu aldatuko litzateke.

Koefiziente globalak lortzeko mol-frakzioak erabili diren arren, kontzentrazioak adierazteko edozein modu erabil zitekeen. 11.1 taulan agertzen dira kontzentrazioa adierazteko moduei dagozkien koefizienteak, era honetako adierazpenetarako:

$$N_A \left(\mathrm{mol}/\mathrm{hm}^2 \right) = k \cdot A \cdot IE \tag{11.10}$$

11.1 Taula. Masa-transferentziarako koefizienteak, indar eragilearen arabera (N_A-ren unitateak: mol/hm^2).

	Indar eragilea	unitateak	koefizientea	unitateak
Gas-fasean	ΔP_A	atm	k_G	mol/h·m^2·atm
	ΔC_A	mol/l	$k_{C,g}$	l/h·m^2
	Δy_A	mol/mol	k_y	mol/h·m^2
Likido-fasean	ΔC_A	mol/l	k_L	l/h·m^2
	Δx_A	mol/mol	k_x	mol/h·m^2

Hauek dira gas-faseko mintzaren koefizienteen arteko erlazioak:

$$k_G = \frac{k_C}{RT} = \frac{k_y}{P} \tag{11.11}$$

Hau da likido-faseko mintzaren koefizienteen erlazioa:

$$k_L = \frac{k_X}{C} \tag{11.12}$$

11.1 adibidea

Hauek dira gas-likido fasearte baterako koefiziente indibidualen balioak, 288 K-ean eta 2 atm-ko presioan:

k_y = 8000 mol/h m^2(mol/mol) eta k_L = 340 mol/h m^2(mol/l)
Oreka-erlazioa: P_A (mmHg) = 645·x_A
A osagaia oso diluitua dago likidoan (ura).

Kalkula ditzagun (a) gas-faseko mintzaren k_G, k_C, eta $\overline{K_Y}$, (b) likido-fasearen mintzaren k_X eta $\overline{K_X}$, (c) faseen arteko masa-transferentziarako erresistentzia globalean fase bakoitzak egiten duen ekarpena.

Ebazpena

(a) Gas-faseko mintzaren koefizienteen arteko erlazioa $k_G = \frac{k_C}{RT} = \frac{k_y}{P}$ izanik:

k_G = 8000/2 = 4000 mol/atm h m^2(mol/mol)
k_C = (8000/2) mol/atm h m^2(mol/mol) ·0,082 atm·l/Kmol·288 K = 9,44·10^4 l/h m^2.

Mementoz, ez da $\overline{K_Y}$ kalkulatuko.

(b) Likidoa ura denez eta uretan A solutua oso diluitua dagoenez,

$$C \approx \frac{\dfrac{1000\,g_{ur}}{\left(\dfrac{18\,g_{ur}}{1\,mol_{ur}}\right)}}{1\,l_{dis}} = 55{,}56\,{}^{mol}\!/_{l}$$

$k_L = \frac{k_X}{C}$ denez, k_X = 340·55,56 = 1,89·10^4 mol/h m^2.

Oreka-erlazioaren maldaren kalkulua (m):

P_A (mmHg) = $P \cdot y_A$ = 1520·y_A = 645·x_A. Hortik, y_A = 0,424·x_A eta m = 0,424 (dimentsiogabea).
Orain, $\overline{K_Y}$ eta $\overline{K_X}$ kalkula daitezke:

$$\frac{1}{\overline{K_y}} = \frac{1}{k_y} + \frac{m}{k_X} = \frac{1}{\overline{K_y}} = \frac{1}{8\cdot10^3} + \frac{0{,}424}{18{,}9\cdot10^3} = \frac{1}{8\cdot10^3} + \frac{1}{44{,}58\cdot10^3} \quad ; \quad \overline{K_y} = 6{,}78\cdot10^3\,\text{mol/hm}^2$$

$$\frac{1}{\overline{K_X}} = \frac{1}{k_X} + \frac{1}{m\cdot k_Y} = \frac{1}{1{,}89\cdot10^4} + \frac{1}{0{,}424\cdot8\cdot10^3} = \frac{1}{18{,}9\cdot10^3} + \frac{1}{3{,}39\cdot10^3}; \quad \overline{K_X} = 2{,}87\cdot10^3\,\text{mol/hm}^2$$

(c) Erresistentzia indibidualak aztertzen badira, ohartzen gara gas-faseko mintzak erresistentzia osoaren % 84,7 egiten duela.

11.2 adibidea

11.1 adibidearekin jarraituz, sistemako puntu batean gas-faseko muinean solutuaren presio partziala $P_{A,0}$= 4,5 mmHg da, eta likidoaren muineko kontzentrazioa $C_{A,0}$ = 0,083 mol/l da. Kalkula ditzagun, egoera horretan, (a) $x_{A,i}$ eta x_A^*, (b) $y_{A,i}$ eta y_A^*.

Ebazpena

y_A vs x_A grafikoa erabiliz lortuko da. Oreka-erlazioa irudikatzeko, 11.1 adibidean lortutako erlazioa erabiliko da:

$$y_A = 0{,}424 \cdot x_A$$

Gas-fasearen muina: $y_{A,0} = \dfrac{P_{A,0}}{P} = \dfrac{4{,}5}{1520} = 0{,}0030$

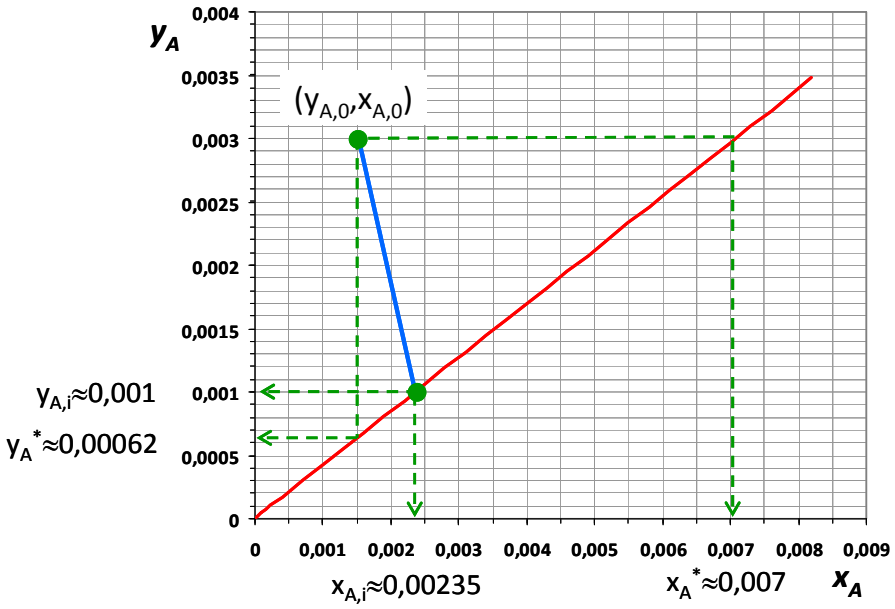
Likido-fasearen muina: $x_{A,0} = \dfrac{C_{A,0}}{C} = \dfrac{0{,}083}{55{,}56} = 0{,}0015$

Sistema karakterizatzen duen puntua marrazten da y_A vs x_A diagraman.

11.1 adibidean kalkulatu diren balioekin, $-\left(k_x/k_y\right)$ = -2,36 malda lortzen da.

Behin malda marraztuta, fasearteko konposizioak neurtzen dira:

$y_{A,i} \approx 0{,}001$ eta $y_A^* \approx 0{,}00062$ gas-fasearen alderako, eta
$x_{A,i} \approx 0{,}00235$ eta $x_A^* \approx 0{,}007$ likido-fasearen alderako.



11.3 FASEARTEKO OREKA

Bereizte-eragiketa gehienak bi fasez (gehienetan) edo gehiagoz osatutako sistemak dira. Fase guztiak orekan egongo balira, ez litzateke egongo masa-transferentziarako indar eragilerik. Fasearteko masa-transferentzian oinarritutako bereizte-eragiketak orekatik aldenduta lan egiteko diseinatzen dira, ahalik eta indar eragile handienaz, ekipoen tamaina txikia izan dadin. Masa-transferentzian zenbait oreka mota agertzen dira, kontaktuan dauden faseen arabera. Eragiketa gehienetan bi fase erabiltzen dira: likido-gas (edo lurrun) faseak, likido-likido faseak, likido-solido faseak, gas-solido faseak.

Sistema osoan tenperatura, presioa eta kontzentrazioak homogeneoak izatea da fase bakarreko sisteman oreka lortzeko baldintza, hau da, propietate hedagarrien gradienteak zero izatea. Sistema homogeneo batean osagairen baten kontzentrazio-diferentzia badago, indar eragile bat dagoelako, osagai horren transferentzia sortuko da kontzentrazio-diferentzia deuseztatzeko.

Fase anitzeko sisteman (har dezagun sistema sinpleena eta ugariena, bi fasez osatutako sistema), osagaiek bi faseetan kontzentrazio bera eduki arren, fasearteko masa-transferentzia gerta daiteke. Gainera, oreka lortzean, osagaien kontzentrazioak desberdinak izan daitezke bi faseetan. Fase anitzeko sistema orekan egon dadin, fase bakoitza bere

aldetik orekan egoteaz gainera, bi faseen tenperaturek, presioek eta osagai guztien potentzial kimikoek berdinak izan behar dute:

Sistema itxi baten (ingurunearekin masarik trukatzen ez duen sistema) potentzial kimikoa konposatuaren molaldaketarekiko Gibbs-en energia aske gisa definitzen da:

$$\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial N_i} \right)_{T,P,N_{j \neq i}} \tag{11.13}$$

Zoritxarrez, potentzial kimikoaren erabilera ez da zuzena, zaila delako esperimentu bidez neurtzea. Horregatik, *iheskortasun* (f_i) parametroa erabiltzen da:

$$\left(d\mu_i \right)_T = \left(RT \cdot d \ln f_i \right)_T \tag{11.14}$$

Era berean, *iheskortasun-koefizientea* (ν_i) da iheskortasunaren eta gas ideala balitz izango zukeen presio partzialaren arteko erlazioa, eta gas idealaren portaerarekiko duen desbideraketaren berri ematen du:

$$\nu_i = \frac{f_i}{P_i} \tag{11.15}$$

Nahastean konposatuaren iheskortasunaren eta osagai puruari legokiokeen iheskortasunaren arteko erlazio gisa definitzen da a*ktibitatea* (a_i):

$$a_i = \frac{f_i}{f_i^0} \tag{11.16}$$

Nahastean *i* osagaiak idealtasunarekiko duen desbideratze-mailaren berri ematen du aktibitate-koefizienteak, eta honela definitzen da:

$$\gamma_i = \frac{a_i}{x_i} \tag{11.17}$$

Nahaste ideala denean (hau da, *i* konposatuaren eta nahasteko beste konposatuen arteko elkarrekintza nulua denean), $\gamma_i = 1$ da.

11.3.1 Fasearteko masa-transferentzian oinarritutako bereizte-eragiketen oreka-erlazioak

C konposatuz osatutako nahaste homogeneoa bereizi nahi bada, jatorrizko fasearekin nahastezina den bigarren fasea behar da. Bereizi ahal izan dadin, osagaien bi faseetako mol-frakzioek desberdinak izan behar dute.

i osagaiaren oreka-erlazioa (K_i) honela definitzen da:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} \tag{11.18}$$

Hau da, *i* osagaiak bi faseetan dituen mol-frakzioen arteko erlazioa da, x_i jatorrizko faseko mol-frakzioa eta y_i bigarren faseko mol-frakzioa.

Bereiztea gerta dadin, jatorrizko nahastea osatzen duten konposatu guztien oreka-erlazioek desberdinak izan behar dute; bi osagairenak berdinak izango balira, biak hein edo proportzio berean banatuko lirateke bi faseetan.

Bereiztea gerta dadin:

$$K_1 \neq K_2 \neq \cdots \neq K_C \tag{11.19}$$

eta

$$\frac{y_1}{x_1} \neq \frac{y_2}{x_2} \neq \cdots \neq \frac{y_C}{x_C} \tag{11.20}$$

bete behar da.

i eta *j* konposatuen *hautakortasun-erlatiboa* (α_{ij}) *i* eta *j* konposatuen oreka-erlazioen arteko erlazio gisa definitzen da; i eta j konposatuak bereizteko, $\alpha_{ij} \neq 1$ izan behar du nahitaez.

$$\alpha_{ij} = \frac{K_i}{K_j} = \frac{\left(y_i / x_i \right)}{\left(y_j / x_j \right)} \tag{11.21}$$

11.3.2 Faseen erregela: Gibbs-en erregela

Oreka kimikoak sailkatzeko eta oreka definitzeko zenbat aldagai behar diren jakiteko (askatasun-graduak), Gibbs-en erregela erabiltzen da. ψ fasez eta *C* konposatuz osatutako sistemaren askatasun-graduak (*AG*) honela kalkulatzen dira:

$$AG = C - \psi + 2 \tag{11.22}$$

Bi fasez osatutako sistemetan, *AG* = *C* da. Askatasun-graduak sistemaren oreka definitzeko finka daitezkeen aldagai intentsiboen (T, P, x_i) kopurua adierazten du. Aldagai intentsiboak masa kantitatearen mendekoak ez diren aldagaiak dira. Adibide gisa, destilazioan (L-V oreka), absortzioan (G-L oreka) eta erauzketan (L-L oreka) erabiliko diren orekak aztertuko dira.

L-V oreka: destilazioa

Nahaste bitarrean bi konposatu eta bi fase badaude, askatasun-graduak bi dira.

Aldagai intentsiboak P, T, x_1 eta y_1 dira ($x_2 = 1 - x_1$ eta $y_2 = 1 - y_1$ direlako). Sistema horien orekak irudikatzeko, bi aldagai finkatu behar dira. Normalean, tenperatura eta x_i edo presioa eta x_i finkatzen dira. 12. gaian azaltzen dira (T vs x_1, isobarikoa) eta (x_1 vs y_1, isobarikoa) erako erlazioak.

L-G oreka: gasen absortzioa

Sistema hauetan bi fase eta hiru konposatu agertzen direnez, askatasun-graduak hiru dira.

Sistema horretako aldagai intentsiboak P, T, x_1, x_2, y_1, y_2 dira. Absortzio-eragiketa gehienetan, osagai bakarra (solutua) banatzen da bi fasetan, eta likido-faseko muina eta gas-faseko muina inertetzat hartzen dira, beste fasean disolbaezinak badira (gehienetan). Orduan, konposatu bakarrez eta bi fasez osatutako sistema bihurtzen denez, aldagai intentsiboak P, T, x_1 eta y_1 dira.

Tenperatura, presioa eta x_i aldagaiak finkatuta erabiltzen dira oreka-erlazioak. 13. gaian ikusiko dira y_i vs x_i erlazio isotermikoak.

L-L oreka: likido-likido erauzketa

Sistema hauetan bi fase eta hiru konposatu agertzen direnez, askatasun-graduak hiru dira.

Aldagai intentsiboak T, P eta x_1, x_2, y_1 eta y_2 dira. Normalean, diagrama isotermo eta isobarikoak aukeratzen dira, eta x_1-x_2-x_3 motako diagrama triangeluarrak erabiltzen dira (14. gaian azaltzen den moduan).

L-G orekaren eta L-L orekaren askatasun-graduak kalkulatzeko, hiru konposatuz osatutako sistemak direla hartu da. Benetan, osagai gehiago egon daitezke, baina horietako gehienak fase bakarrean mantentzen direnez, analisi zuzena egin da. Industria kimikoan, asko erabiltzen dira osagai anitzeko (bi baino gehiago) destilazioak, eta horrelako sistemetan askatasun-graduak ere handitu egiten dira osagai kopuruak handitu ahala.

12. GAIA

LIKIDO-LURRUN OREKA ETA DESTILAZIOA

Likido- zein gas-faseko nahaste homogeneoak bereizteko eragiketarik ezagunena destilazioa da. Gizakiak aspaldidanik erabili du, eta gaur egungo industria kimikoan berebiziko erabilera dauka. Adibidez, aireko nitrogenoa, oxigenoa eta argona bereiztea edo petrolioaren zatien bereizketa destilazioz egiten da. Destilazioan, likidoa eta lurruna bi fase nahastezinen arteko masa-transferentzia gertatzen da faseartean.

12.1 LIKIDO-LURRUN OREKA

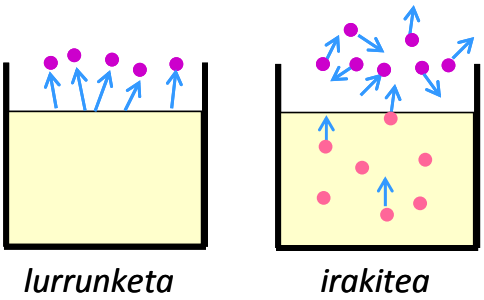
Presio finkatuan, konposatu kimiko puruaren likido- eta lurrun-faseak elkarrekin gerta daitezkeen tenperatura bakarra dago, irakite-tenperatura, alegia. Likido-egoeran konposatu purua berotzean, lurrun-presioa handitu egiten da, haren gaineko gasaren presioa berdindu arte.

Lurrun-burbuilak sortzeko, likido-faseko molekulen arteko erakarpen-indarra gainditu beharra dago. Lurrundutako burbuilak likidoaren muinean sortzen dira eta likidoaren gainazalera igotzen dira, eta gasera pasatzen.

Lurrunketa: Likidoaren gainazaleko fenomenoa da, eta edozein tenperaturatan gertatzen da. Likidoaren muinean ezin da gas-burbuilarik sortu, lurrun-presioa gainazaleko presioa baino baxuagoa delako.

Irakitea: Gainazaleko fenomenoa izateaz gainera, muineko fenomenoa ere bada. Likidoaren muinean gas-burbuilak sortzen dira, lurrun-presioa likidoaren gainazalekoa baino handiagoa izan baitaiteke.

Likido-faseko molekulak etengabeko mugimenduan daude, eta gainazalaren inguruko molekula batzuk molekulen arteko erakarpen-indarra gainditzeko adina energia badaukate, lurrun-fasera pasatzen dira; hala gertatzen da lurruntzea. Prozesua itzulezina da. Destilazio eragiketan irakite-fenomenoa gertatzen da.



12.1. irudia. Lurrunketa eta irakitea.

Likido puru baten irakite-tenperatura haren lurrun-presioa eta likidoaren gainazaleko presioa berdintzen dituen tenperatura da. Likido puruen kasuan, lurrun-presioaren eta tenperaturaren arteko erlazioak bibliografian agertzen dira. Ohiko substantzien lurrun-presioak tenperatura-tarte bateko balioetara interpolatzeko, Antoine-ren ekuazioa erabiltzen da:

$$\log P^0 = \mathrm{A} - \frac{\mathrm{B}}{T + \mathrm{C}} \qquad (12.1)$$

A, B eta C, substantzia bakoitzarentzako koefizienteak dira, eta bibliografian taulatuta agertzen dira.

Konposatu kimiko purua likido-egoeran egon daitekeen jakiteko, haren tenperatura kritikoa aztertu behar da: tenperatura kritikoaren gainetik, substantzia ezin da likido-egoeran egon. Tenperatura kritikoaren azpitik dagoen gasari ***lurrun*** deritzo, eta tenperatura kritikoaren gainetik dagoenari ***gas*** deritzo. Hala, uraren tenperatura kritikoa 374 K izanik, 393 K-ra dagoen urari lurrun deritzo; 293 K dagoen nitrogenoari, berriz, gas deritzo, haren tenperatura kritikoa 126,2 K delako.

Nahaste bitarraren kasuan (A osagai lurrunkorrena eta B osagai astunena izanik), Gibbs-en faseen erregelaren arabera, bi aldagai zehaztu behar dira oreka definitzeko. *P* (presioa), *T* (tenperatura) eta osagai baten likido- eta lurrun-konposizioak (x_A, y_A) zehatz daitezke.

Osagai lurrunkorrena irakite-tenperatura baxuena duen konposatua (lurrun-presio altuena daukana) da; osagai astuna, berriz, irakite-tenperatura altuena duen konposatua. Astun hitzak ez du zerikusirik pisuarekin edo dentsitatearekin.

Lurrun-fasean bi konposatu baldin badaude, lurrun-faseko presio totala osagai bakoitzaren presio partzialen batura da:

$$P = P_A + P_B \tag{12.2}$$

Nahaste idealek betetzen dute Raoult-en legea. Bi osagaien egitura kimikoa antzekoa bada, molekulen arteko elkarrekintza antzekoa da, eta nahastean, likidoarekin orekan dagoen gasean, osagai bakoitzaren presio partziala osagai bakoitzaren lurrun-presioarekiko proportzionala da.

Raoult-en legearen arabera:

$$\left.\begin{aligned} P_A &= P_A^0 \cdot x_A \\ P_B &= P_B^0 \cdot x_B \end{aligned}\right\} \tag{12.3}$$

dira.

Beraz, disoluzioa ideala bada, likidoarekin orekan dagoen lurrunean presio hau dago (kontuan hartu nahastea bitarra bada $x_A + x_B = 1$ dela):

$$P = P_A^0 \cdot x_A + P_B^0 \cdot (1 - x_A) \tag{12.4}$$

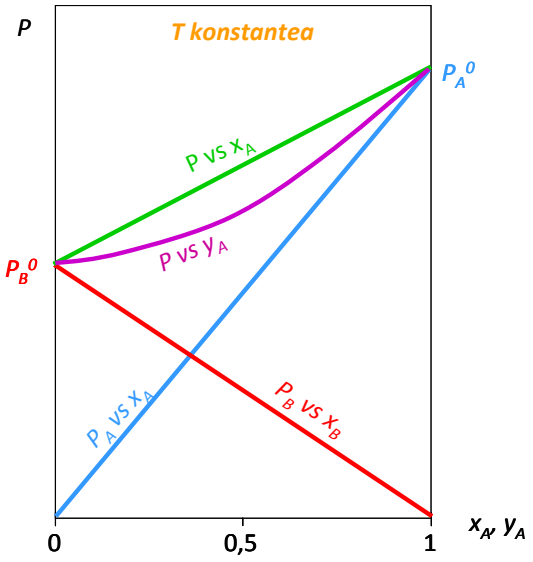
Horrelakoak dira tolueno-bentzeno eta oktano-heptano sistemak. Beste sistema askotan, ordea, idealtasunarekiko desbideratzeak nabari dira.

12.2 NAHASTE IDEALEN OREKA-ERLAZIOAK

12.2.1 Lurrun-presioen diagrama

Nahastea ideala bada, tenperatura konstantean, 12.2 irudikoa bezalako lurrun-presioen diagrama eraiki daiteke. Era berean, lurrun-fasean osagai lurrunkorrenaren mol-frakzioa y_A bada, Dalton-en erlazioa ere beteko da.

$$P = \frac{P_A}{y_A} = \frac{P_A^0 \cdot x_A}{y_A} \tag{12.5}$$



12.2 irudia. Nahaste ideal baten lurrun-presioen diagrama tenperatura konstantean.

Raoult-en legea betetzen duen nahaste bitar batean, A eta B osagaien lurrun-faseko presio partziala likido-fasean daukaten mol-frakzioarekiko proportzionala da, eta osagai bakoitzaren lurrun-presioa da proportzionaltasun-erlazioa. Lurrun-faseko presio osoa bi osagaien presio partzialen batura da (P vs x_A). Tenperatura aldatzean, lurrun-presioak aldatzen direnez, irudiko lerroak ere aldatu egiten dira (P_A eta P_B lerroen malda handiagoa da, eta ordenatuen ardatzean gorago daude). Irudi berean, lurrun-faseko presio totala lurrun-faseko mol-frakzioarekiko irudikatu da (P vs y_A), eta, ikus daitekeen bezala, aldea dago bi lerroen artean. Bi lerro horien artean aldea dagoenez, likidoa eta lurruna batera existitzen diren tenperatura-tarte bat dago. Osagai puruen kasuan, bi lerroak bat datoz.

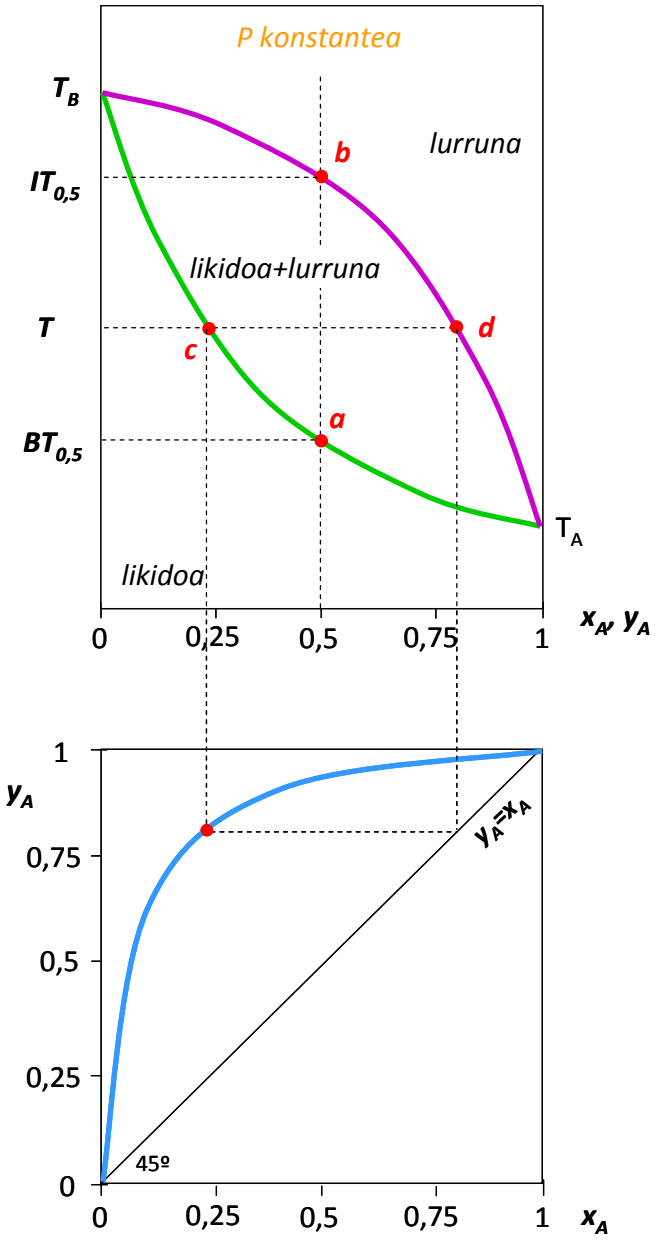
12.2.2 Irakite-tenperaturen diagrama (T-x_A-y_A diagrama)

Diagrama hau presio konstantean emana dago. Tenperatura bakoitzeko nahastearen likido- eta lurrun-faseetako konposizioak agertzen dira, 12.3 (a) irudian agertzen den bezala.

Likido-egoeran dagoen A osagai purua (x_A = 1) berotzen bada, likidoaren tenperaturak gora egiten du. Laneko presioan Aren irakite-tenperatura (T_A) lortzean, A osagaia irakiten hasten da, eta, tenperatura aldatu gabe, lurrun-fasera pasatzen da. Azken likido apurra lurrun bihurtu arte. tenperaturak aldatu gabe dirau. Behin A osagai guztia lurrun-eran dagoenean, tenperatura igotzen hasten da. T_A baino tenperatura altuagoetan, A osagai guztia lurrun-eran dago (y_A = 1). Osagai astun puruari (B) gauza bera gertatzen zaio bere irakite-tenperaturan (T_B).

Nahaste bitarren portaera erabat bestelakoa da. Demagun likido-egoeran dagoen A eta Bren nahaste ekimolekularra (x_A = 0,5) berotzen dela. Nahastea berotzean, nahastearen egoera adierazten duen puntua absiza berean bertikalki gora doa, dagokion tenperatura arte.

T_A tenperaturan, oraindik ez da irakiten hasi, eta likido-egoeran dirau. **a** puntuko tenperatura hartzen duenean, lehen lurrun-burbuila sortzen da likidoaren muinean (irakiten hasten da). Tenperatura horri ***burbuila-tenperatura*** deritzo. Gehiago berotzean, orekan dauden bi faseak (likidoa eta lurruna) batera existitzen dira. T tenperaturan, **c** likido-fasea eta **d** lurrun-fasea egongo lirateke orekan, x_A eta y_A konposizioekin, hurrenez hurren.



12.3. irudia. (a) Nahaste idealaren T-x_A-y_A edo irakite-tenperaturen diagrama. (b) x_A-y_A edo oreka-diagrama.

Ohartu gaitezen lurrun-fasean (**d** puntuan) osagai lurrunkorrenaren mol-frakzioa hasierako disoluziokoa baino handiagoa dela (y_A > 0,5), eta likido-fasean (**c** puntuan), berriz, osagai astunenaren mol-frakzioa hasierako disoluziokoa baino handiagoa dela (x_A < 0,5). Nahastea berotzen jarraitzean, gero eta lurrun gehiago eta likido gutxiago egongo litzateke. **b** puntuko tenperatura lortzen duenean, hasierako nahastea ia guztiz lurrunduta dago, likido-egoeran azken hondarra besterik ez baita gelditzen. Tenperatura horri ***ihintz-tenperatura*** deritzo, eta hori baino tenperatura altuagoan, y_A = 0,5 konposizioko lurrun-fasea besterik ez dago. Alderantzizko prozesuan lurrun-faseko nahastea (y_A = 0,5) hoztean, T_B lortu arren, nahasteak lurrun-fasean dirau. Tenperatura baxuago bateraino hoztu beharko litzake lurrunaren muinean lehen likido-tanta sortu arte (kondentsatzen hasteko): hori **b** puntuko ihintz-tenperatura hartzean gertatzen da.

Jatorrizko konposizio desberdinekin lortzen diren burbuila-tenperatura guztiak lerro batez doitzen badira, burbuila-tenperaturen lerroa lortzen da. Lerro horrek T-x_A erlazioa ematen du, hau da, konposizio bakoitzeko nahastea zer tenperaturatan irakiten hasten den. Era berean, ihintz-tenperatura guztiak lerro batez doitzen badira, konposizio bakoitzeko nahasteak irakiteari zer tenperaturatan uzten dion jakin daiteke ihintz-tenperaturen lerroa lortzen baita. Ohartu gaitezen osagai puruetan berdinak direla burbuila- eta ihintz-tenperaturak.

Irakite-tenperaturen diagrama fase-diagrama ere bada, tenperatura eta konposizio bakoitzean dauden faseen berri ematen baitu. Burbuila-tenperaturen azpiko eremu guztian likido-egoera besterik ez dago; eta ihintz-tenperaturen goiko eremu guztian lurrun-fasea besterik ez dago. Bi lerroen arteko eremuan, bi faseak (likidoa eta lurruna) orekan batera existitzen dira.

Burbuila-tenperaturen lerroak eta ihintz-tenperaturen lerroak ixten duten azalerak bereizte-eremua osatzen du. Nahaste bitarren bereizte-maila handiagoa izan dadin (y_A eta x_A desberdinagoak izan daitezen), bi lerroek ahalik eta banatuen egon behar dute.

Irakite-tenperaturen diagrama eraikitzeko, Raoult-en legetik abiatzen da (12.4 ekuazioa). Gainera,

$$y_A = \frac{P_A}{P} \tag{12.6}$$

izanik, ekuazio hauek lortzen dira:

Burbuila-tenperaturen lerroa:

$$x_A = \frac{P - P_B^0}{P_A^0 - P_B^0} \tag{12.7}$$

Ihintz-tenperaturen lerroa:

$$y_A = \frac{P_A^0}{P} \cdot x_A \tag{12.8}$$

Osagai lurrunkorrenaren eta osagai astunenaren lurrun-presioen arteko erlazioa ***lurrunkortasun erlatibo*** deritzo (α_{AB}).

$$\alpha_{AB} = \frac{P_A^0}{P_B^0} = \frac{\left(y_A / x_A \right)}{\left(y_B / x_B \right)} \tag{12.9}$$

Nahaste bitarra bereizteko erraztasunaren berri ematen du horrek: zenbat eta handiagoa α_{AB}, orduan eta hein desberdinagoan bihurtzen dira bi osagaiak lurrun. Ohartu gaitezen α_{AB} = 1 denean bi osagaiak hein berean pasatzen direla lurrun-fasera, eta, hala, lurrun-likido orekan oinarritutako eragiketaz (destilazioa, adibidez) nahastea bereiztezina da.

Hainbat kasutan, batez ere nahaste idealetan, lurrunkortasun erlatiboa konstantetzat har daiteke konposizio-tarte guztirako, eta oreka-konposizioak erlazionatzeko adierazpen hau erabil daiteke:

$$y_A = \frac{\alpha_{AB} \cdot x_A}{1 + \left(\alpha_{AB} - 1 \right) \cdot x_A} \tag{12.10}$$

12.2.3 Oreka-konposizioen diagrama (x_A-y_A diagrama)

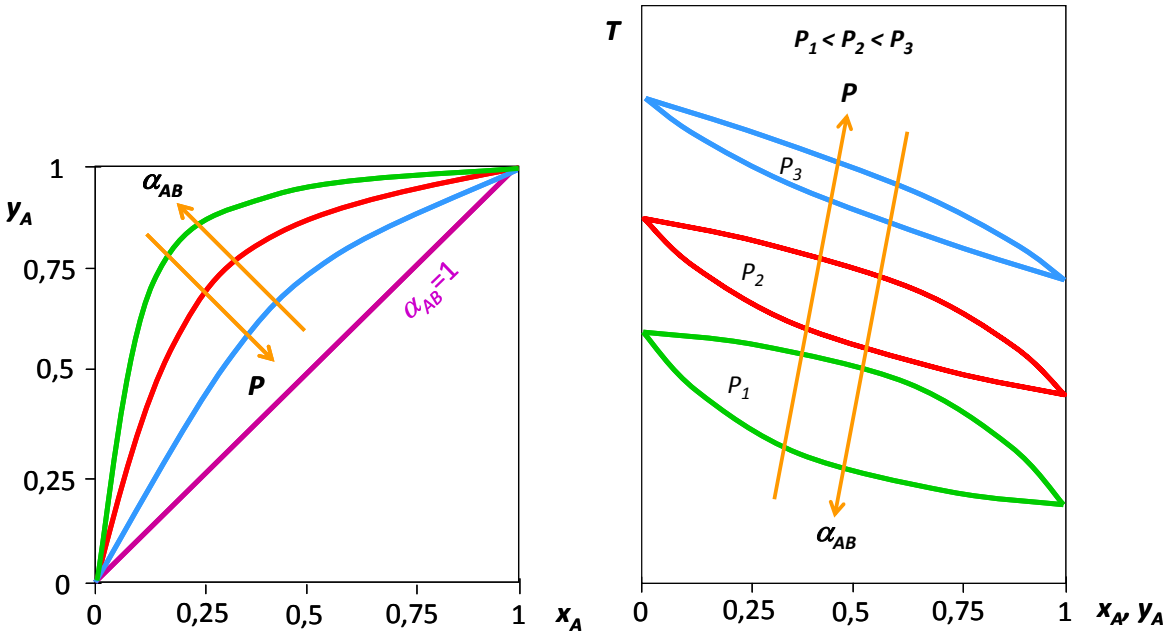
Presio konstantean emandako diagrama honek orekan dauden likido- eta lurrun-faseetako konposizioak erlazionatzen ditu (mol-frakziotan emanda). Diagrama hau eraikitzeko, lurrun-tenperaturen diagramatik abiatzen da: tenperatura bakoitzerako x_A eta y_A-ren balioak irudikatzen dira, eta 12.3 (b) irudian bezalako diagramak lortzen dira.

Era berean, lerro diagonala (45º lerroa edo $x_A = y_A$) marrazten da, lagungarria baita. 12.3 (a) irudian ikusten denez, tenperatura guztietan —osagai puruen irakite-tenperaturetan izan ezik— $x_A < y_A$ denez, diagrama honetan, oreka puntuek diagonalaren goialdean egon behar dute. Ohartu gaitezen osagai puruak dauzkagunean oreka-puntuak diagonalean daudela, zeren $x_A = y_A$ baita.

12.2.4 Presioaren eragina T-x_A-y_A eta x_A-y_A diagrametan

Irakite-tenperaturen diagrama presio desberdinetan eraikitzen bada, irakite-tenperaturak aldatu egiten direnez, beste diagrama batzuk lortuko dira. Presioa handitzean irakite-tenperaturak altuagoak dira —bi lerroak tenperatura altuagoetara aldatzen dira—, eta, gainera, bi lerroak bata bestetik gertuago daude (α_{AB} txikiagoa da). 12.4 irudian agertzen da, eskematikoki, presioa handitzeak irakite-tenperaturen eta oreka-konposizioen diagrametan zer eragin daukan.

Presio altuetan likido- eta lurrun-faseetako konposizioak (x_A eta y_A, hurrenez hurren) berdinagoak dira presio baxuetakoekin alderatuz (presio altuetan α_{AB} txikitu egiten da). Horregatik, destilazioa eraginkorragoa izan dadin, ahalik eta presio baxuenean egiten da (sarri, presio atmosferikoaren azpitik).



12.4 irudia. Presioaren eragina *T*-x_A-y_A eta irakite-tenperaturen diagrametan.

12.1 adibidea

n-heptanoz (C_7) eta *n*-oktanoz (C_8) osatutako sistemak Raoult-en legea betetzen dutela suposaturik (konposatuen egitura kimikoa antzekoa izanik, suposizio egokia da), 101,33 kPa-eko presioko oreka-diagramak irudikatuko dira. Era berean, 385 K-eko lurrun-presioen diagrama irudikatuko da.

Antoine-ren ekuazioan erabiltzeko konstanteen balioak hurrengo taulakoak dira, P^0 kPa-etan eta T K-etan izanik:

Konposatua	*A*	*B*	*C*
n-heptanoa	13,9008	2932,72	-55,6356
n-oktanoa	14,2368	3304,16	-55,2278

Ebazpena

Lehenik eta behin, 101,33 kPa presioan osagai bakoitzak duen irakite-tenperatura kalkulatuko da:

$$\left.\begin{aligned} \ln 101{,}33 &= 13{,}9008 - \frac{2932{,}72}{T_{C_7} - 55{,}6356} \\ \ln 101{,}33 &= 14{,}2368 - \frac{3304{,}16}{T_{C_8} - 55{,}2278} \end{aligned}\right\} \qquad \begin{aligned} T_{C_7} &= 371{,}6\,K \\ T_{C_8} &= 398{,}8\,K \end{aligned}$$

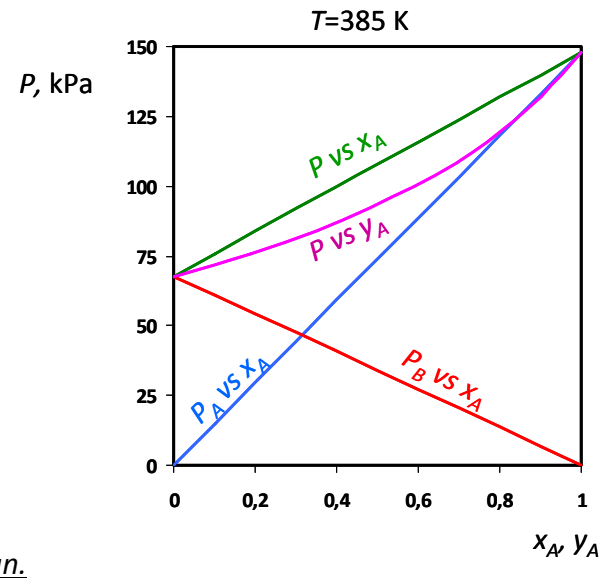
Osagai lurrunkorrena C_7 da (arestian erabilitako ekuazioetan A osagaia, alegia).

Lurrun-presioen diagrama 385 K-ean

Tenperatura horretan osagai bien (C_7 eta C_8) lurrun-presioak 147,9 eta 67,8 kPa dira, hurrenez hurren. 1 taulan agertzen dira kalkulatutako balioak.

1 taula: oreka-datuak 385 K-ean

x_{C7}	P_{C7}(kPa)	P_{C8}(kPa)	P(kPa)	y_{C7}
0	0	67,8	67,8	0
0,1	14,8	61,1	75,9	0,19
0,2	29,6	54,3	83,9	0,35
0,3	44,4	47,5	91,9	0,48
0,4	59,2	40,7	99,9	0,59
0,5	74,0	33,9	107,9	0,69
0,6	88,7	27,1	115,9	0,77
0,7	103,5	20,4	123,9	0,84
0,8	118,3	13,6	131,9	0,90
0,9	133,1	6,8	139,9	0,95
1	147,9	0	147,9	1



T-x-y eta x-y oreka-diagramak 101,33 kPa-ean.

101,33 kPa-eko presioan bi osagaien irakite-tenperaturak finkatuta izanik (371,6 eta 398,8 K), tarte horretarako tenperaturaren balio batzuk hartu dira, eta 2 taula bete da.

2 taula: oreka-datuak 101,33 kPa-ean

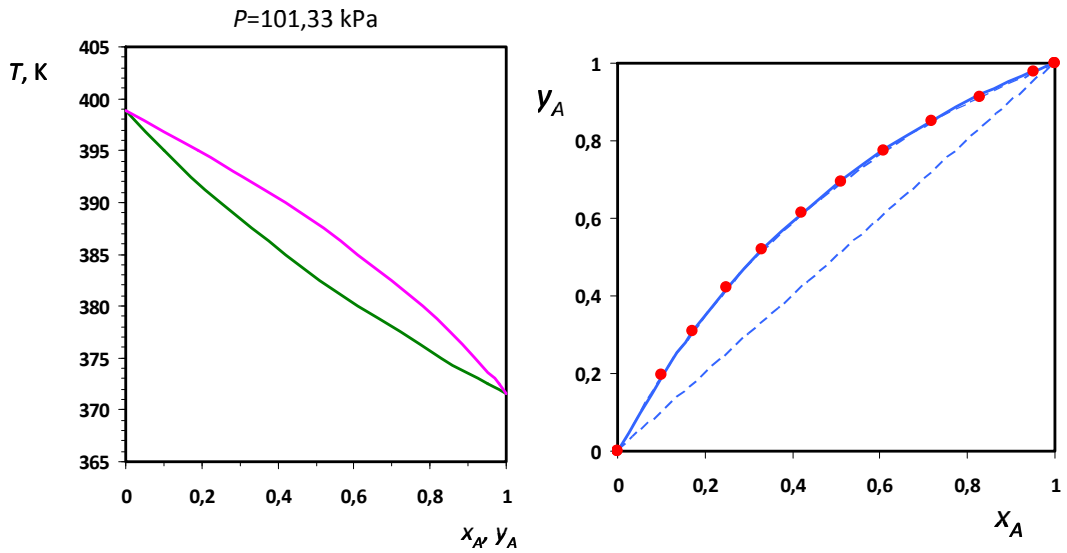
T(K)	P^0_{C7}(kPa)	P^0_{C8}(kPa)	α_{AB}	x_{C7}	y_{C7}
371,6	101,33	44,38	2,28	1	1
372,5	104,10	45,72	2,28	0,95	0,98
375	111,92	49,60	2,26	0,83	0,92
377,5	120,20	53,74	2,24	0,72	0,85
380	128,94	58,15	2,22	0,61	0,78
382,5	138,17	62,85	2,20	0,51	0,70
385	147,91	67,85	2,18	0,42	0,61
387,5	158,17	73,16	2,16	0,33	0,52

2 taula. jarraipena					
390	168,98	78,80	2,14	0,25	0,42
392,5	180,34	84,78	2,13	0,17	0,31
395	192,29	91,12	2,11	0,10	0,19
398,8	211,60	101,33	2,09	0	0

2 taulako datuen arabera, tenperatura-tarte osorako nahastearen lurrunkortasun erlatiboaren batez besteko balioa 2,19 delako:

$$y_A = \frac{2{,}19 \cdot x_A}{1 + 1{,}19 \cdot x_A}$$

y_A vs. x_A diagraman ekuazio horrekin (hurbilketa) irudikatzen den oreka-diagrama puntuen bitartez marraztuta azaltzen da.



12.3 NAHASTE IDEALEKIKO DESBIDERATZEAK

Nahaste guztiak, ordea, ez dira arestian aipatutako ekuazioetara doitzen. Disoluzio oso diluituetan, Henry-ren legea betetzen da. Horren arabera, osagai baten gasaren presio partziala likido-faseko mol-frakzioarekiko proportzionala da, baina ez lurrun-presioaren adinakoa:

$$P_A = H_A \cdot x_A \tag{12.11}$$

Disoluzioa osatzen duten bi substantziaren egitura kimikoak desberdintzen diren heinean, idealtasunarekiko (Raoult-en legearekiko) desbideratzea handiagoa da. Hainbat nahaste bitarren kasua da hori. Adibidez, ura eta etanola nahasten direnean, bolumen osoa osagaien bolumenen batura baino txikiagoa da.

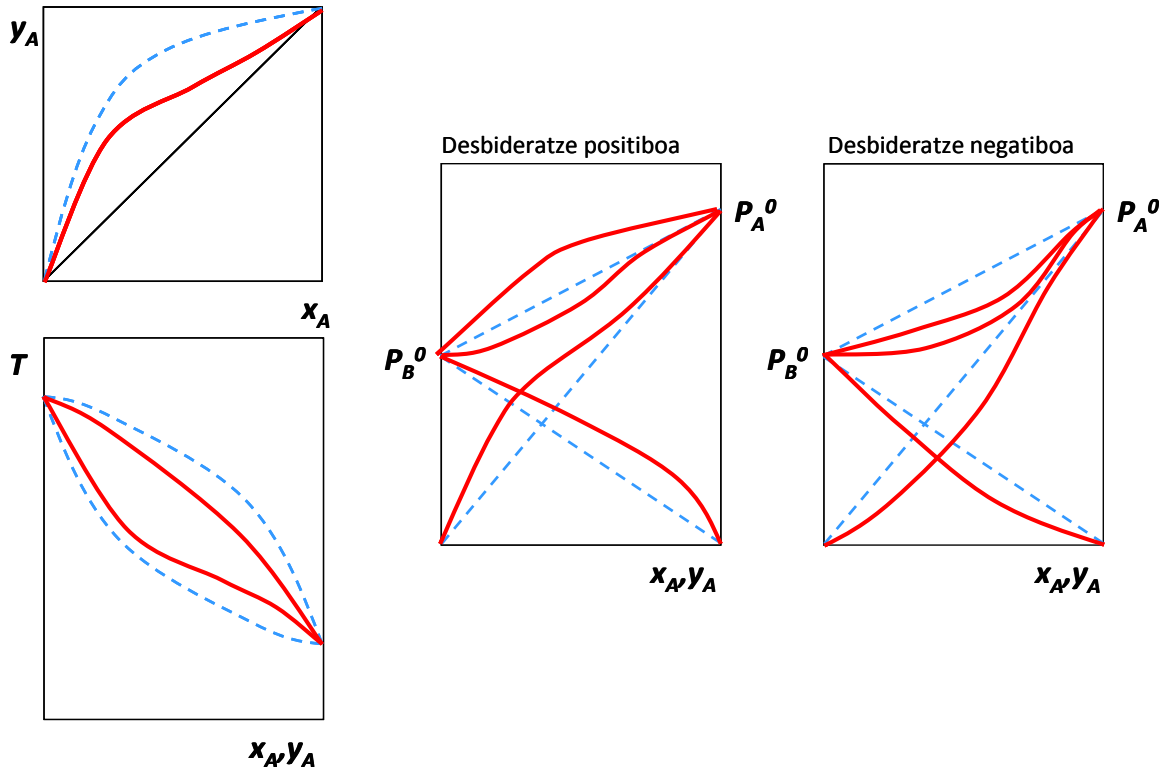
Desbideratzeak kontuan hartzeko, Raoult-en legea moldatzen duen lege enpiriko hau erabil daiteke:

$$P_i = \gamma_i \cdot P_i^0 \cdot x_i \tag{12.12}$$

γ_i, likido-faseko *i* osagaiaren aktibitate-koefizientea izanik. *i* osagaia oso kontzentratua denean, aktibitate-koefizienteak batera jotzen du. Disoluzioa ideala denean, beraz, $\gamma_A = \gamma_B = 1$ da. Aktibitate-koefizienteak kalkulatzeko Van Laar, Wilson edo Margules-en metodoak erabil daitezke.

Nahastea osatzen duten molekulak oso desberdinak badira, aldaratze-indarrak sor daitezke konposatu desberdinetako molekulen artean. Idealtasunarekiko desbideratze horri desbideratze positibo deritzo ($\gamma_i > 1$), eta nahaste gehienek dute portaera hori. Adibidez, molekula polarrak (uraren kasua) eta ez-polarrak (hidrokarburo organikoak) nahastean, aldaratze-indar izugarriak sortzen dira. Horrelako sistemetan, konposatuen aktibitate-koefizienteak bat baino handiagoak izaten dira, eta lurrunean, Raoult-en legeak ematen duena baino kantitate gehiago dago osagai bakoitzetik.

Bestalde, molekulen artean erakarpen-indarrak sortzen badira, esaten da Raoult-en legearekiko desbideratze negatiboa dutela, eta aktibitate-koefizienteak bat baino txikiagoak dira (lurrunean, Raoult-en legeak ematen duena baino kantitate gutxiago dago) ($\gamma_i < 1$). Horrelakoak dira, adibidez, hidrogeno-zubiak sortzen dituzten nahasteak. Desbideratzeak oso handiak direnean, azeotropoak sor daitezke.



12.5 irudia. Benetako disoluzioen T-x_A-y_A eta x_A-y_A oreka-diagramak eta nahaste ez-idealen lurrun-presioen diagrama: desbideratze positiboduna eta negatiboduna (disoluzio idealen marrak ez-jarraitu eta urdinak dira).

12.4 NAHASTE AZEOTROPIKOAK

Idealtasunarekiko desbideratzeak oso handiak direnean, ***azeotropo*** deritzen nahaste mota bereziak sor daitezke. Nahaste azeotropikoen irakite-tenperatura konstantea da (burbuila- eta ihintz-tenperaturak berdinak dira), eta, ondorioz, $y_A = x_A$ denez, $\alpha_{AB} = 1$ da —lurrun-faseko eta likido-faseko konposizioak berdinak dira—. Horregatik, ezinezkoa da azeotropo bat destilazio arruntaz bereiztea, baina gerta daiteke baldintzak aldatzean (presioa) azeotropoa desagertzea.

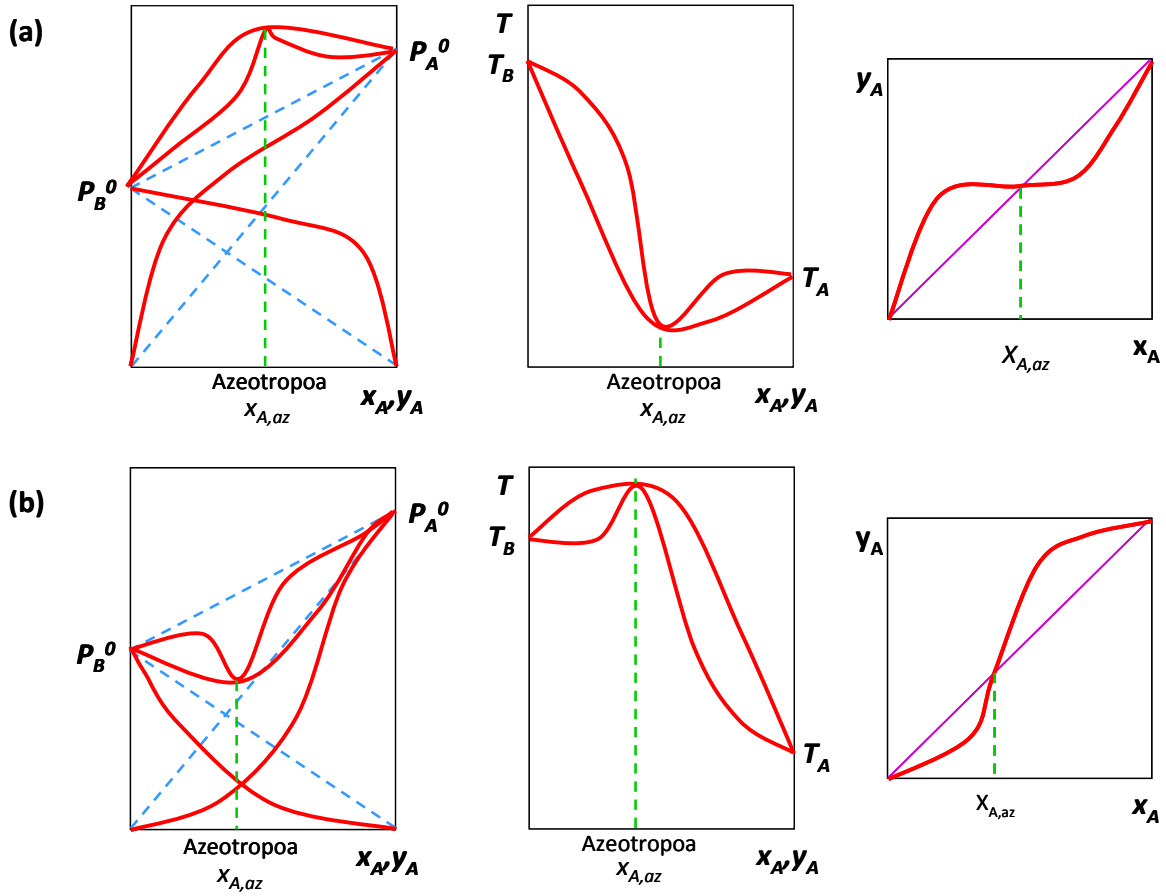
Azeotropoaren irakite-tenperatura osagai lurrunkor puruarena baino baxuagoa (***irakite-tenperatura minimoko azeotropoa***) edo osagai astun puruarena baino altuagoa (***irakite-tenperatura maximoko azeotropoa***) izan daiteke. Lehenengoek desbideratze positiboa dute,

eta azkenengoek, desbideratze negatiboa. 12.1 taulan azeotropoen adibide batzuk agertzen dira.

12.1 Taula. Nahaste azeotropikoen adibideak.

Azeotropoaren konposizioa (molen %) eta Irakite-tenperatura normalak (1 atm)	
Irakite-tenperatura minimoko azeotropoak	*Irakite-tenperatura maximoko azeotropoak*
Ura (% 10,6) – Etanola (% 89,4) T = 78,2 ºC	HCl (% 11,1) – Ura (% 88,9) T = 110 ºC
CS_2 (% 61,0) – Azetona (% 39,0) T = 39,25 ºC	Azetona (% 65,5) – Kloroformoa (% 34,5) T = 64,5 ºC
Bentzenoa (% 29,6) – Ura (% 70,4) T = 69,25 ºC	HNO_3 (%40,4) – Ura (%59,6) T = 122 ºC

12.6 irudian agertzen dira idealtasunarekiko desbideratzeak oso handiak direnean sortzen diren azeotropoen oreka-diagramak.



12.6 irudia. (a) Irakite-tenperatura minimoko azeotropo baten oreka-diagramak, (b) irakite-tenperatura maximoko azeotropoaren oreka-diagramak. $x_{A,az}$ azeotropoan A osagaiern mol-frakzioa.

Irakite-tenperatura minimoko azeotropoa osa dezakeen nahaste batean (12.6(a) irudia) konposizio azeotropikoari dagokiona baino osagai lurrunkor gutxiago badago ($0 < x_A < x_{A,az}$), bi faseak batera existitzen diren eremuan osagai lurrunkorrena nagusitzen da lurrunean ($x_A < y_A$). Baldin eta nahasteak konposizio azeotropikoak baino osagai lurrunkor gehiago badauka ($x_{A,az} < x_A < 1$), lurrunean osagai astunena nagusitzen da ($x_A > y_A$) —ezohiko portaera da—.

Bestalde, irakite-tenperatura maximoko azeotropoa osa dezakeen nahastean (12.6(b) irudia) konposizio azeotropikoari dagokiona baino osagai lurrunkor gutxiago badago —ezohiko portaera da—, osagai astuna nagusituko da lurrunean; aldiz, nahastean osagai lurrunkorrenaren konposizioa konposizio azeotropikoa baino handiagoa bada —ohiko portaera—, osagai lurrunkorrena nagusituko da lurrunean. Era berean, konposizio azeotropikoa baldin badago, osagai lurrunkorrenaren mol-frakzioa berdina da lurrunean eta likidoan.

12.5 LIKIDO-LURRUN OREKAN OINARRITUTAKO BEREIZTE-ERAGIKETAK: DESTILAZIOA

Masa-transferentzian oinarritutako bereizte-eragiketa da destilazioa, eta likidoaren eta lurrunaren arteko kontaktua gertatzen da. Osagaien lurrunkortasunak desberdinak badira, osagai lurrunkorrena proportzio handiagoan pasatuko da lurrunera likido-lurrun faseartean zehar. Bi osagaien lurrunkortasun erlatiboa batekoa ez bada, nahasteak destilazioz bereiz daitezke.

Gizakiak nahasteak bereizteko erabili duen lehenengo eragiketetako bat da destilazioa (pattar alkoholikoen ekoizpena, lekuko). Industrian maiz erabiltzen da gaur egun (petrolioaren fintze-prozesuan, petrokimikan, gas naturalaren prozesamenduan eta abarretan). Ondoren, nahaste bitarren destilazioa azalduko da, konposatu anitzeko nahasteen destilazioak printzipio berdinei jarraitzen baitie. Askoz ere sinpleagoa denez nahaste bitarren destilazioa aztertzea konposatu anitzen nahasteen destilazioa aztertzea baino, horixe aztertuko dugu. Bi destilazio mota bereiziko dira:

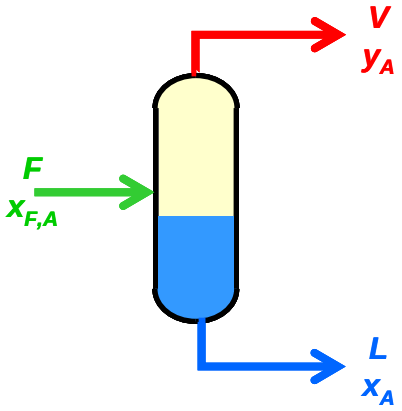
(a) **Destilazio bakuna**. Bereizi nahi den nahastea tenperatura eta presio egokira eramaten da; sortzen den lurruna (azeotroporik osa ez badezake) osagai lurrunkorrenaz aberasten da, eta, gero, likido-fasetik bereizten da. Destilazio bakunen artean **bat-bateko destilazioa** (*flash* edo orekakoa izenez ere ezaguna) eta **destilazio diferentziala** bereizi daitezke. Destilazio bakuna eraginkorra da lurrunkortasun erlatibo handiko nahasteak bereizteko, baina purutasun handia lortu nahi denean, ez dira eraginkorrak.

(b) **Errektifikazio-destilazioa**. Konposatuak purutasun handiz lortu nahi direnean erabiltzen da. Destilagailu-ontziaren goialdean zutabe bat erabiltzen da. Zutabearen goialdetik irteten den lurruna (osagai lurrunkorrenetan aberatsa) kondentsatu egiten da; kondentsatu horren zati bat (errefluxua) zutabera itzultzen da likido-eran, eta beste zati bat, ordea, produktu gisa (destilatua) kanporatzen da. Zutabean, kontrakorrontean jartzen dira kontaktuan gorantz doan lurruna eta beherantz doan likidoa, eta, hala, etengabeko lurruntze eta kondentsatze partzialak gertatzen dira. Horrenbestez, masa-transferentzia areagotu egiten da, eta destilatuan osagai purua nahi bezainbesteko purutasunaz lor daiteke (orekak eskaintzen duen mugaren barruan).

12.5.1 Bat-bateko destilazioa (flash edo orekakoa)

Lurrunkortasun erlatibo handiko nahasteak bereizteko erabiltzen da, baina bereizte-maila handia behar denean ez da hain eraginkorra. Elikadura likidoa (*F* emari molarra, A-ren mol-frakzioa $x_{F,A}$) presurizatu eta berotu ondoren, iratotze-balbula batetik pasarazten da faseen bereizketa-ganberara sartzeko. Hala likidoaren lurruntze partziala gertatzen da, hots, bereizte-ganberan orekan dauden bi faseak (likidoa, *L* eta lurruna, *V*) bereizi egiten dira, korronte bakoitzean A osagaiaren mol-frakzioak x_A eta y_A izanik (ikusi 12.7 irudia). Aurkako

eragiketari kondentsatze partzial deritzo (elikadura lurrun-eran dagoenean). Destilazio honek era jarraituan lan egiten du.



12.7 irudia. Flash destilagailua.

Egoera geldikorraren masa-balantzea egiten bada (mol/t unitatetan):

Sistema osoa: $$F = L + V \tag{12.13}$$

A osagaia: $$F \cdot x_{F,A} = L \cdot x_A + V \cdot y_A \tag{12.14}$$

Bi ekuazioak konbinatuz, ***eragiketa-lerroa*** deritzon adierazpena lortzen da:

$$y_A = \frac{F \cdot x_{F,A}}{V} - \frac{L}{V} \cdot x_A \tag{12.15}$$

Destilagailuak behar den bezala lan egiten badu, likido- eta lurrun-faseak orekan irteten direnez, oreka-erlazioa beteko da:

$$y_A = f\left(x_A\right) \tag{12.16}$$

Lurrunkortasun erlatiboa konstantea bada, 12.10 ekuazioko oreka-erlazioa erabil daiteke.

<u>*Ebazpen analitikoa*</u>

Destilagailutik irteten diren bi faseetako emariak eta konposizioak kalkulatzeko, (12.13-12.16) ekuazioak batera ebatzi behar dira.

<u>*Ebazpen grafikoa*</u>

(12.13-12.16) ekuazioak T-x_A-y_A edo x_A-y_A oreka-diagrametan ebazten dira grafikoki.

x_A-y_A oreka-diagraman (12.15) ekuazioa (- L/V) maldako lerro zuzena da. $x_A = x_{F,A}$ denean, $y_A = x_{F,A}$ denez, eragiketa-lerroaren abiapuntua (F) diagonalean dago ($x_{F,A}$, $x_{F,A}$) puntuan. Ftik abiatuz, (- L/V) maldako lerro zuzenak eta oreka kurbak bat egiten duten puntuak irteerako konposizioak ematen ditu (12.8(a) irudia). Diagrama horrek ez du adierazten, ordea, destilazioa zer tenperaturatan egin behar den.

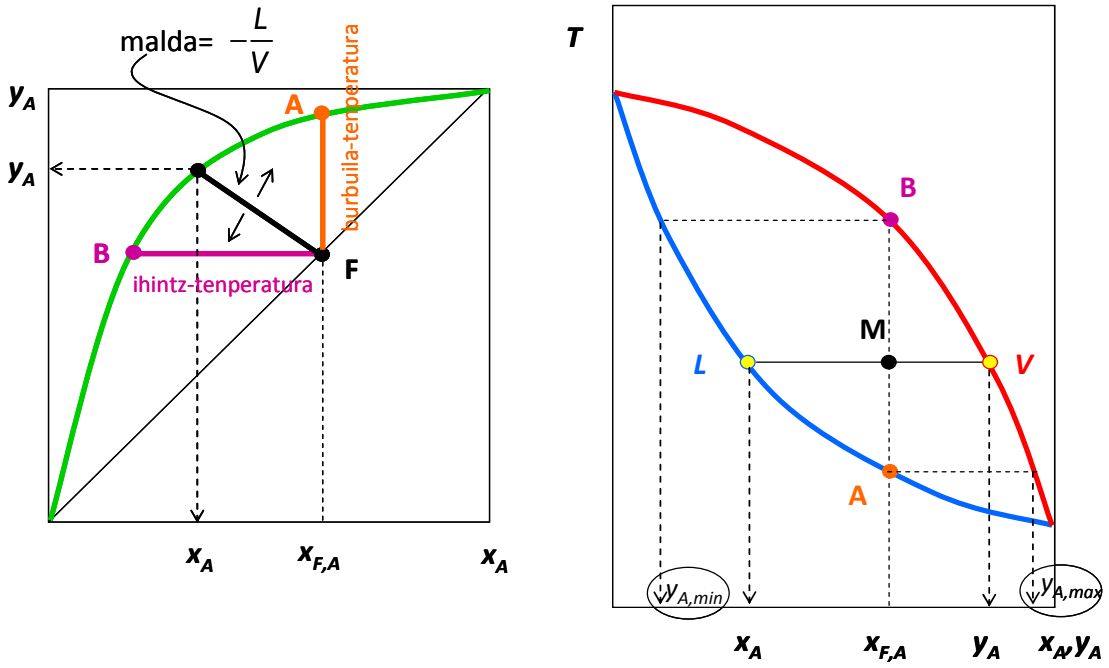
Destilagailuaren eragiketa-malda balio maximo (- L/V = -∞) eta minimo (- L/V = 0) baten artean mugatuta dago. Likidoa eta lurruna, bi faseak, batera egon daitezen, nahastearen burbuila-tenperatura eta ihintz-tenperaturaren tartean lan egin behar da: lehen kasuan, nahastearen zatirik handienak likido-egoeran dirau, lehen lurrun-burbuila sortzen da ($F \approx L$ eta $V \approx 0$) eta - L/V = -∞ da (12.8 irudiko A puntua). Bigarren kasuan, nahastearen zatirik handiena lurrunduta dago eta azken likido apurra geratzen da ($F \approx V$ eta $L \approx 0$), eta (- L/V = 0) da (12.8 irudiko B puntua).

Masa-balantzea T-x_A-y_A diagraman ere ebatz daiteke, eta destilazioa zer tenperaturatan egiten den adierazten du. T-x_A-y_A diagraman orekako faseen erregela (edo palankaren erregela) erabil daiteke. Nahastea M puntura eramatean, orekan dauden L eta V faseetan banatzen bada:

$$L \cdot \overline{LM} = V \cdot \overline{MV} \tag{12.17}$$

$\overline{LM}$ eta $\overline{MV}$ luzerak 12.8 irudiko grafikoan neurtzen dira erregela baten bidez.

Flash destilazio bakarrarekin, burbuila-tenperaturan edo ihintz-tenperaturan lan eginez lortzen dira bereizte-maila handienak. 12.8 irudiko T-x_A-y_A diagramari erreparatuta, osagai lurrunkor puruena destilazioa A puntuan egitean lortuko da (sortzen den lurrunean y_A maximoa izango da), eta B puntuen lan eginez lortuko da B osagai puruena (x_A minimoa). Hala ere, ezinezkoa da horrela lan egitea, lurrun-emari (lehen kasuan) eta likido-emari (azken kasuan) guztiz baztergarriak lortuko bailirateke.



12.8 irudia. Flash destilazioa: masa-balantzearen ebazpen grafikoa.

12.2 adibidea

Moletan % 50 n-heptanoz (C_7) eta % 50 n-oktanoz (C_8) osatutako nahaste baten 1000 mol/h bereizi nahi da flash destilazioz 101,33 kPa-eko presioan, n-heptanoa % 65 izan arte. Kalkula ditzagun (a) destilagailutik irteten diren bi faseen emariak (b) beste fasearen konposizioa (c) destilazioa zer tenperaturatan egin behar den.

Ebazpena

1 adibidean lortu dira T-x_A-y_A eta x_A-y_A datuak, eta $y_A = \dfrac{2{,}19 \cdot x_A}{1 + 1{,}19 \cdot x_A}$ ekuazioak x_A-y_A datuak doitzen dituela ikusi da.

Masa-balantzeak egiten badira mol/h-etan:

Sistema osoa: $1000 = L + V$

C_7 osagaia: $1000 \cdot 0{,}5 = L \cdot x_{C7} + V \cdot y_{C7}$

C_7 osagai lurrunkorrena izanik, C_7 nagusitzen da lurrunean, eta, horregatik, y_{C7} = 0,65 izan behar denez: $500 = L \cdot x_{C7} + V \cdot 0{,}65$

Ebazpen analitikoa

Likidoa eta lurruna orekan irteten direnez, $0{,}65 = \dfrac{2{,}19 \cdot x_{C7}}{1 + 1{,}19 \cdot x_{C7}}$ da. Hortik, x_{C7} = 0,46 lortzen da.

Masa-balantzeetan ordezkatuz, L = 789,5 mol/h eta V = 210,5 mol/h emariak lortuko dira. Ebazpen analitikoaren bidez destilazio-tenperatura jakiteko, orekako datuak eraikitzeko erabilitako Antoine-ren ekuaziora joan behar da.

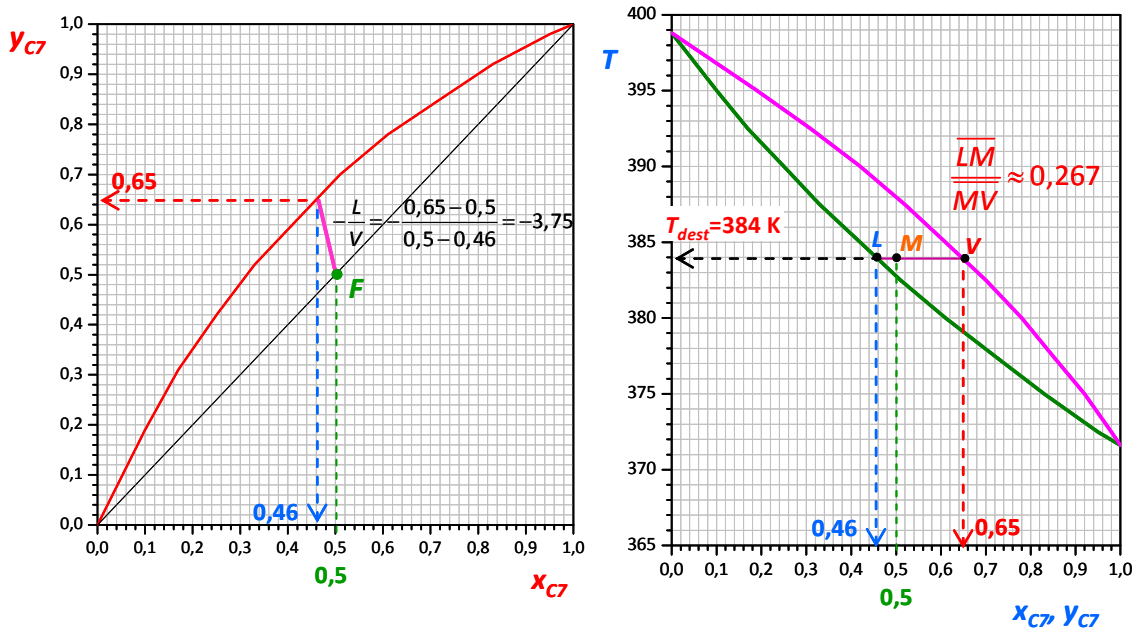
Ebazpen grafikoa (x_A-y_A diagraman)

Elikadura-puntua (F) kokatu ondoren (diagonalean, $x_{C7} = y_{C7}$ = 0,5) destilagailuaren eragiketa-puntua kokatu behar da. Irteerako lurrunean y_{C7} = 0,65 da, eta puntu hori oreka-marraren gainean dago. F eta irteerako puntua lerro zuzen batez (eragiketa-lerroa) lotzean, x_{C7} = 0,46 kalkulatzen da. ($-L/V$) = -3,75 denez, masa-balantzean ordezkatuz, L eta V kalkulatzen dira (789,5 eta 210,5 mol/h, hurrenez hurren).

Ebazpen grafikoa (T-x_A-y_A diagraman)

Elikaduran n-heptanoaren mol-frakzioa 0,5 da eta bertikalean gora eramaten da, M punturaino. Puntu hori ezegonkorra da, eta L eta V faseetan bereizten da. V fasearen kokapena y_{C7} = 0,65 den puntuak ematen du. Tenperatura berean (lerro horizontala), L puntua kokatzen da eta diagraman x_{C7} = 0,46 konposizioa irakurtzen da.

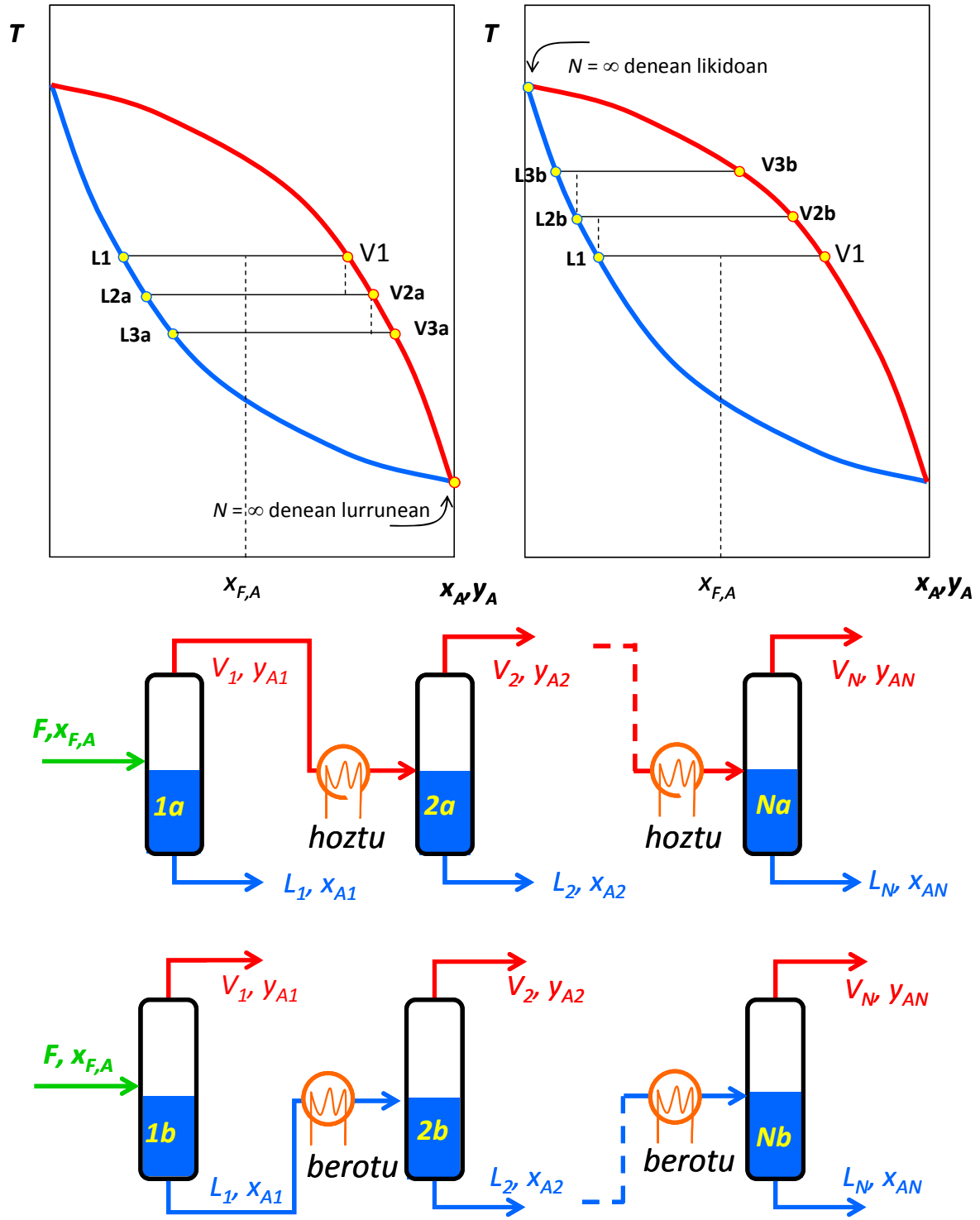
L eta V korronteen emariak kalkulatzeko palankaren erregela erabiliz, $\dfrac{\overline{LM}}{\overline{MV}} \approx 0{,}267$ lortzen da. Bukatzeko, masa-balantzetik L eta V kalkulatzen dira.



12.5.2 Bat-bateko destilazioa (flash edo orekakoa): etapa anitzen sekuentziak

Arestian aipatu den bezala, flash destilazioa lurrunkortasun-diferentzia handiko osagaiak bereizteko egokia da, eta purutasun handiko konposatuak lortzeko aukera mugatuta dago.

Purutasun handiko konposatuak lortu nahi direnean, seriean kokatutako destilagailuen sekuentziak erabiltzen dira. Osagai lurrunkorraz aberasteko, destilagailu batetik irteten den lurruna hoztu eta hurrengo destilagailua elikatuko da horrekin; horrela, nahi bezain beste urrats egin daitezke (purutasun handiagoa lortzeko, ekipo gehiago behar dira). Modu berean, osagai astunenaz aberastu nahi bada, ekipo batetik irteten den likidoa berotu, eta hurrengo destilagailua elikatzen da horrekin. Eragiketa horien azalpen grafikoa 12.9(a) irudian agertzen da, eta 12.9(b) irudian, destilagailu sekuentzien topologia azaltzen da.



12.9. irudia. Flash destilagailuen sekuentziak (a) osagai lurrunkorrena aberasteko, (b) osagai astunena aberasteko.

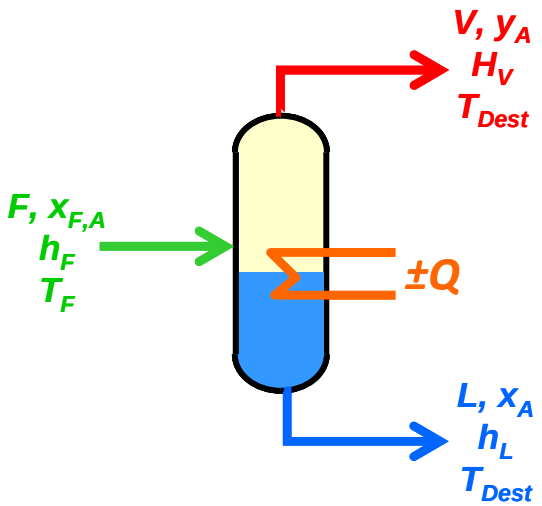
12.5.3 Bat-bateko destilazioa gauzatzeko behar den beroaren kalkulua: entalpia-balantzeak

Egoera geldikorrean, entalpia-balantzeak adierazpen honi jarraitzen dio, energia/denbora eran:

$$F \cdot h_F + Q = V \cdot H_V + L \cdot h_L \tag{12.18}$$

h_F, H_V eta h_L elikaduraren eta lurrun- eta likido-faseen entalpia molarrak dira. Q, inguruarekin trukatzen duen beroa da.

Prozesua adiabatikoa bada, Q = 0 izango da, eta, beraz, destilazioa gauzatzeko, elikadurak energia izan beharko du.



12.10. irudia. Korronteen entalpiak Flash destilazioan.

Hiru korronteen entalpiak honela kalkulatzen dira:

Elikadura-korrontea:

$$h_F = x_{F,A} \cdot \int_{T_{Erref}}^{T_F} C_{P_{A,F}} \cdot dT + \left(1 - x_{F,A}\right) \cdot \int_{T_{Erref}}^{T_F} C_{P_{B,F}} \cdot dT \tag{12.19}$$

Korronte likidoa:

$$h_L = x_A \cdot \int_{T_{Erref}}^{T_{Dest}} C_{P_{A,L}} \cdot dT + \left(1 - x_A\right) \cdot \int_{T_{Erref}}^{T_{Dest}} C_{P_{B,L}} \cdot dT \tag{12.20}$$

Lurrun-korrontea:

$$H_V = y_A \cdot \left[\int_{T_{Erref}}^{T_A} C_{P_{A,L}} \cdot dT + \lambda_A + \int_{T_A}^{T_{Dest}} C_{P_{A,V}} \cdot dT \right] + \left(1 - y_A\right) \cdot \left[\int_{T_{Erref}}^{T_B} C_{P_{B,L}} \cdot dT + \lambda_B + \int_{T_B}^{T_{Dest}} C_{P_{B,V}} \cdot dT \right] \tag{12.21}$$

Adierazpen horietan, L eta V azpindizeek likido- eta lurrun-fasea adierazten dute, hurrenez hurren. F azpiindizeak, berriz, elikadurari dagokion fasea adierazten du. T_A eta T_B A eta B osagaien irakite-tenperaturak dira, hurrenez hurren. λ_A eta λ_B A eta B osagaien lurrunketa-beroak (bero sorrak) dira, hurrenez hurren.

2.*3 adibidea*

12.2 Adibideko destilazioan, kalkula ditzagun (a) destilazioa adiabatikoki gauzatu nahi bada, likido-egoerako elikadura-korrontearen tenperatura, (b) elikadura 350 K-ean badago, ingurunearekin trukatu behar duen beroa.

Datuak:

konposatua	$\overline{C_{P,L}}$ (J/molK)	$\overline{C_{P,V}}$ (J/molK)	λ (J/mol)
n-heptanoa (A)	200	220	32100
n-oktanoa (B)	230	250	34900

Ebazpena

12.2 adibidearen arabera, F = 1000 mol/h elikatzean, L = 789,5 mol/h eta V = 210,5 mol/h korronteak lortu dira, x_A = 0,46 eta y_A = 0,65 konposiziodunak.

T_A = 371,6 K, T_B = 398,8 K eta T_{Dest} = 384 K dira.

(a) Adiabatikoa bada, Q = 0 da.

Korronteen entalpiak kalkulatuko dira.

Elikadura likido-egoeran sartuko da:

$$h_F = 0{,}5\cdot\int_{T_{Erref}}^{T_F} 200\cdot dT + 0{,}5\cdot\int_{T_{Erref}}^{T_F} 230\cdot dT = 215\cdot\left(T_F - T_{Erref}\right) J/mol$$

$$h_L = 0{,}46\cdot\int_{T_{Erref}}^{384} 200\cdot dT + 0{,}54\cdot\int_{T_{Erref}}^{384} 230\cdot dT = 216{,}2\cdot\left(384 - T_{Erref}\right) J/mol$$

$$H_V = 0{,}65\cdot\left[\int_{T_{Erref}}^{371{,}6} 200\cdot dT + 32100 + \int_{371{,}6}^{384} 220\cdot dT\right] + 0{,}35\cdot\left[\int_{T_{Erref}}^{398{,}8} 230\cdot dT + 34900 + \int_{398{,}8}^{384} 250\cdot dT\right] =$$

$$= -2{,}08\cdot 10^5 + 210{,}5\cdot T_{Erref}\ J/mol$$

Erreferentzia-tenperatura gisa 384 K hartzen bada, eta energia-balantzea ebazten bada:

$$1000\left(mol/h\right)\cdot 215\cdot\left(T_F - 384\right)\left(J/mol\right) + 0 = 789{,}5\left(mol/h\right)\cdot 0 + 210{,}5\left(mol/h\right)\left(-1{,}27\cdot 10^5\right)\left(J/mol\right)$$

T_F = 383,4 K.

(b) Orain, T_F = 350 K da. Erreferentzia-tenperatura 350 K hartuko da.

$$h_F = 0\, J/mol$$

$$h_L = 0{,}46\cdot\int_{350}^{384} 200\cdot dT + 0{,}54\cdot\int_{350}^{384} 230\cdot dT = 7350{,}8\, J/mol$$

$$H_V = 0{,}65\cdot\left[\int_{350}^{371{,}6} 200\cdot dT + 32100 + \int_{371{,}6}^{384} 220\cdot dT\right] + 0{,}35\cdot\left[\int_{350}^{398{,}8} 230\cdot dT + 34900 + \int_{398{,}8}^{384} 250\cdot dT\right] = -1{,}34\cdot 10^5\, J/mol$$

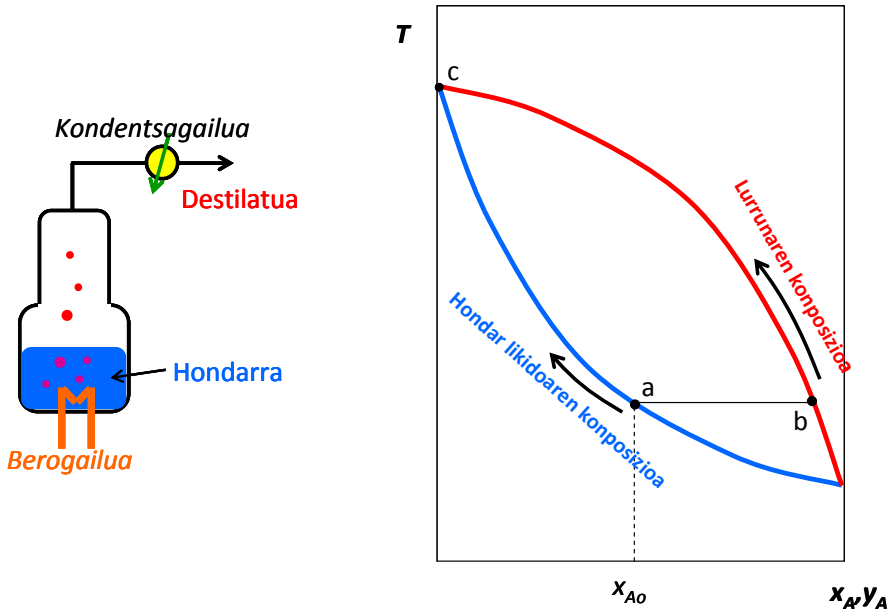
Energia-balantzea askatuz:

$$10^3\cdot\left(mol/h\right)\cdot 0\left(J/mol\right) + Q = 789{,}5\left(mol/h\right)\cdot 7{,}35\cdot 10^3 + 210{,}5\left(mol/h\right)\left(4{,}03\cdot 10^5\right)\left(J/mol\right)$$

Q = 9,063·10^7 J/h berotu beharko litzateke.

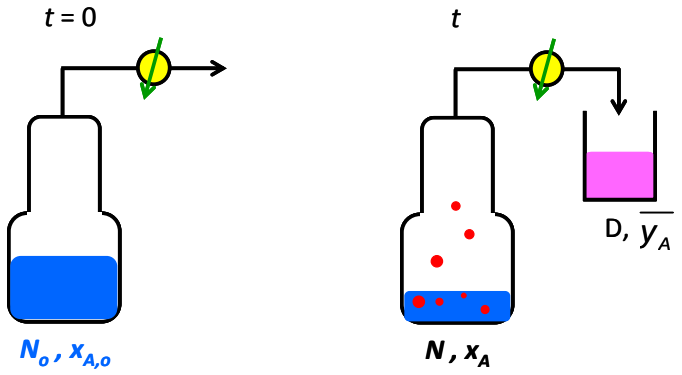
12.5.4 Destilazio diferentziala

Batez ere laborategi-eskalan erabiltzen da, lurrunkortasun erlatibo handiko nahasteak bereizteko. Egoera ez-geldikorrean dihardu. Bereizi nahi den nahastea destilazio-ontzian sartzen da eta berotu egiten da. Nahastearen burbuila-tenperaturara heltzean, likidoaren muinean sortzen den lurruna ekipoaren goiko aldetik irteten da; kondentsatu ondoren, likido-eran jasotzen da (***destilatua***), eta ontzian hondar-likidoa geratzen da (***hondarra***). Praktikan, oso zaila da destilazio mota hau zehazki gauzatzea, gora alde egiten duen lurrunaren zati bat (txikia bada ere) kondentsatuta ontzira erortzen baita berriro (errefluxu-maila txiki bat sortzen da). Osagai lurrunkorrenaz aberastuta dagoen lurruna sistematik kanporatzean, ontzian geratzen den nahaste likidoan osagai astunena nagusituz doa. Gainera, destilazioa aurrera doan heinean, nahastearen irakite-tenperatura handitu egiten da (osagai astunenaz aberasten ari baita) eta sortzen diren lurrun-burbuiletan osagai lurrunkor gutxiago doa (ikusi 12.11 irudian T-x_A-y_A diagraman destilazio diferentzialaren eskema).



12.11. irudia. Destilagailu diferentzialaren eskema eta eragiketaren garapena oreka-diagraman.

Destilagailu horren diseinua egiteko, masa-balantzea egingo da, egoera ez-geldikorreko sistema dela kontuan hartuz. Denbora-tarte oso labur batean likidotik lurrunera pasatu den osagai lurrunkorrena zenbatzen bada:



12.12. irudia. Destilagailu diferentzialaren operazioa.

Ontzian sartutako Aren molak = Hondarreko Aren molak + Destilatuko Aren molak

$$x_A \cdot dL = \left(x_A - dx_A\right)\cdot\left(L - dL\right) + y_A \cdot dL \tag{12.21}$$

$dx_A \cdot dL$ baztertzen bada eta t = 0 eta t = t tarteen artean integratzen bada, Rayleigh-en ekuazioa (12.22) lortzen da. Ekuazio horrekedozein unetan osagai lurrunkorrenaren banaketa nolakoa den adierazten du.

$$\ln\left(\frac{N_0}{N}\right) = \int_{x_A}^{x_{A,0}} \frac{dX_A}{y_A - x_A} \tag{12.22}$$

Rayleigh-en ekuazioaren integrazio analitikoak, α_{AB} konstantea bada, adierazpen honetara eramaten gaitu:

$$\ln\left(\frac{N_0}{N}\right) = \left(\frac{1}{\alpha_{AB} - 1}\right)\cdot\ln\left(\frac{x_{A,0}}{x_A}\right) + \left(\frac{\alpha_{AB}}{\alpha_{AB} - 1}\right)\cdot\ln\left(\frac{1 - x_A}{1 - x_{A,0}}\right) \tag{12.23}$$

Orekaren erlazio matematikorik ez badago edo integratzea erraza ez bada, Rayleigh-en ekuazioa grafikoki ebazten da.

Ohartu gaitezen ezen, flash destilazioan ez bezala, destilazio mota honetan lurrun-burbuilek, sortu ahala, likidoaren gainazaletik alde egiten dutela. Beraz, lurrunaren konposizioa denboran zehar aldatuz doa (hasieran A osagaian aberatsa den arren, denborarekin B osagaian aberastuz doa). Destilatuaren ontzian konposizio desberdineko lurruna biltzen ari denez, lurrunaren batez besteko konposizioa ematen da, eta arestian aipatutako masa-balantzearekin kalkula daiteke.

$$\overline{y_A} = \frac{N_0 \cdot x_{A,0} - N \cdot x_A}{D} \tag{12.24}$$

Destilazio mota honekin, osagai astunena ezin daiteke aldi berean purutasun handiz eta ugari lortu.

2.4 adibidea

Moletan % 75 *n*-heptano (C_7) eta % 25 *n*-oktano (C_8) den nahaste baten 1000 mol bereizi nahi dira destilazio diferentzialez, 101,33 kPa-eko presioan. Kalkula ditzagun (1) *n*-heptanoa molen % 65 izan arte destilatu nahi bada, (1a) destilatuaren eta hondarraren molak (1b) hondarreko heptanoaren mol-frakzioa (1c) destilatu guztia ontzi berean bilduko balitz, destilazioaren batez besteko konposizioa; (2) hondarrean 200 mol geratzen diren arte destilatzen bada (2a), azken unean dagoen hondarraren konposizioa.

Ebazpena

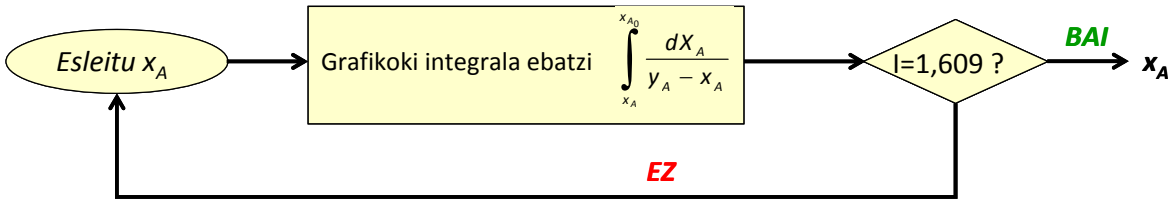
(1) Rayleigh-en ekuazioa grafikoki zein analitikoki ebatz daiteke. Analitikoki ebazteko, y_A = f(x_A) oreka-erlazioa integralean ordezkatu behar da. 1 adibidean kalkulatu da lanerako presioari dagokion oreka-erlazioa $y_A = \frac{2{,}19 \cdot x_A}{1 + 1{,}19 \cdot x_A}$ dela. Ekuazio hori Rayleigh-en ekuazioan ordezkatu eta integratzen bada, ikusten da N = 349,1 mol dela.

Grafikoki ebazteko lehenik eta behin $\left(\frac{1}{y_A - x_A}\right)$ vs x_A grafikoa irudikatu behar da.

Grafiko horretan integralaren goiko (0,60) eta beheko (0,75) mugak kokatuta daudenez, kurbaren azpiko azalera kalkulatzen da (grafikoki integratuz, 1,05), eta, ondorioz, N = 350 mol. Beraz, hondarrean *n*-heptanoa molen % 60 izateko, 650 mol destilatu behar izan dira.

Destilatuaren batez besteko konposizioa % 83 da *n*-heptanoan.

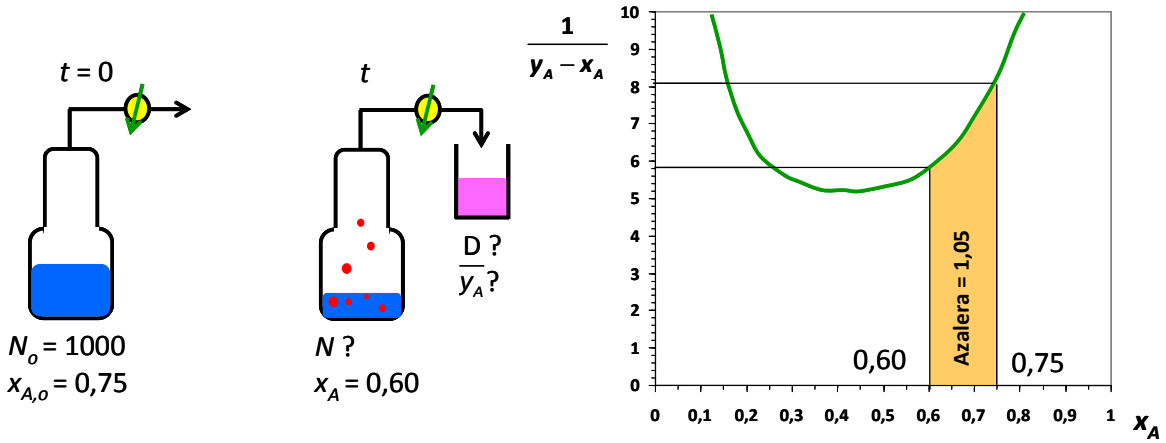
(2) Kasu honetan, integralaren balioa $\ln(N_0/N)$ = 1,609 da. Integralaren goiko muga ($x_{A,o}$ = 0,75) ezaguna den arren, beheko muga (x_A) ez da ezagutzen. Beraz, haztapen bidez ebatziko da, sekuentzia honi jarraituz:



Taula honetan agertzen da prozesuaren eboluzioa.

Urratsa	x_A	*Integrala*	*Errorea (%)*
1	0,40	2,139	33,0
2	0,45	1,880	16,8
3	0,50	1,616	0,4
4	0,501	1,609	~0

Beraz, hondarrean, osagai lurrunkorrenaren mol-frakzioa destilazioa eteten den unean 0,501 da.



12.6 ERREFLUXU-DESTILAZIO JARRAITUA

Flash destilazioa lurrunkortasun erlatibo handiko nahasteak bereizteko erabiltzen da. Lurrunkortasun erlatiboa bat izatetik gertu badago, errefluxu-destilazioa erabiltzen da osagai lurrunkorrena eta astunena purutasun handiz lortzeko.

Errefluxuarekin lan egitean, ***zutabe erretiludunak*** erabiltzen dira, nahiz eta dorre beteekin ere lan egin daitekeen. Ekipora elikagaia sartzen da, eta, behin ekipo barruan dagoela, lurrunak behetik gora zirkulatzen du, eta likidoak, berriz, goitik behera. Lurruna osagai lurrunkorrenaz aberastuz doa, likidoa osagai astunenaz aberasten doan heinean.

Zutabearen goiko aldetik irteten den lurrun-emariaren zati bat kondentsatu eta likido-eran zutabera itzultzen da (errefluxua), lurrunaren kontrako norantzan zirkulatuz; masa-transferentzia areagotzen denez, osagai lurrunkorrena nagusitzen da lurrunean. Zutabearen

goialdeari ***doitze-eremu*** deritzo, eta osagai lurrunkorrena nagusitzen den eremua da (ikusi 12.13 irudia). Goialdetik irteten den korrontea ***destilatua*** (*D*) da.

Modu berean, elikadura sartu den eremuan, azpialdean, likidoaren zati bat irakinarazi egiten da, eta berriro ekipora sartzen da; hala, goitik behera datorren likidoarekin kontaktua du kontrakorrontean, masa-transferentzia areagotzeko. Horrela lan eginez, behealdetik irteten den likidoa osagai astunenaz aberasten da. Zutabearen behealdeari ***agortze-eremu*** deritzo, eta osagai astunena nagusitzen den eremua da (ikusi 12.13 irudia). Behealdetik irteten den korrontea ***hondar-korrontea*** da (*B*).

Bereizi nahi den nahastea ideala bada, lurruntzen den mol bakoitzeko mol bat kondentsatzen da (bi konposatuen bero sorrak berdinak badira). Hori hala izanik, doitze-eremuan goitik behera doan likido-emaria (*L*) eta behetik gora doan lurrun-emaria (V_d) konstante mantentzen dira. Era berean, agortze-eremuan gauza berbera gertatuko da (L_a eta V_a hurrenez hurren).

Destilazioa egiteko zutabe erretiludunak McCabe-Thiele-ren hurbilketa-metodoaz diseinatuko dira. Dorrean bero-galera handiak gertatzen ez badira eta nahaste-beroa baztergarria bada, nahastea bereizteko behar den etapa kopurua kalkulatzeko metodo egokia da; bestela, entalpiak erabiltzen dituen Ponchon-Savarit-en metodoa erabili beharko litzateke.

McCabe-Thiele-ren hurbilketa-metodoan, y_A-x_A oreka-diagrama erabiltzen da elikadura jakin batekin bereizte-maila finkoa lortzeko, horretarako beharrezkoa den etapa kopurua (erretilu kopurua) kalkulatzeko. Metodo hori erabiltzeko nahitaezkoa da datu hauek jakitea:

- elikaduraren kondizioak eta emaria (F, T_F eta $x_{F,A}$).
- destilatuaren eta hondar-likidoaren konposizioak.
- errefluxu-erlazioa.

Zutabe horien barruan erretiluak daude, eta erretilu bakoitzetik likidoa eta lurruna orekan irteten dira, baldin eta eragiketa ideala bada. Goialdetik irteten den lurruna guztiz kondentsatzen da (kondentsagailu osoa), eta behetik irteten den likido zatiki bat berriro lurruntzen da (lurrungailu partziala).

Demagun 12.13 irudiko errefluxu-destilagailu jarraitua dugula. Bereizi nahi den nahastea elikatzen da (*F*, mol/t), eta korronte horretan osagai lurrunkorrenaren mol-frakzioa $x_{F,A}$ da. Destilatuaren emari osoa eta destilatuaren osagai lurrunkorrenaren mol-frakzioa *D* (mol/t) eta $x_{D,A}$ dira, hurrenez hurren. Hondar-korrontearen emari osoa *B* (mol/t) da, eta, han osagai astunenaren mol-frakzioa $x_{B,A}$ da. Errefluxu-korrontearen emaria *L* (mol/t) da, eta konposizioa, $x_{D,A}$.

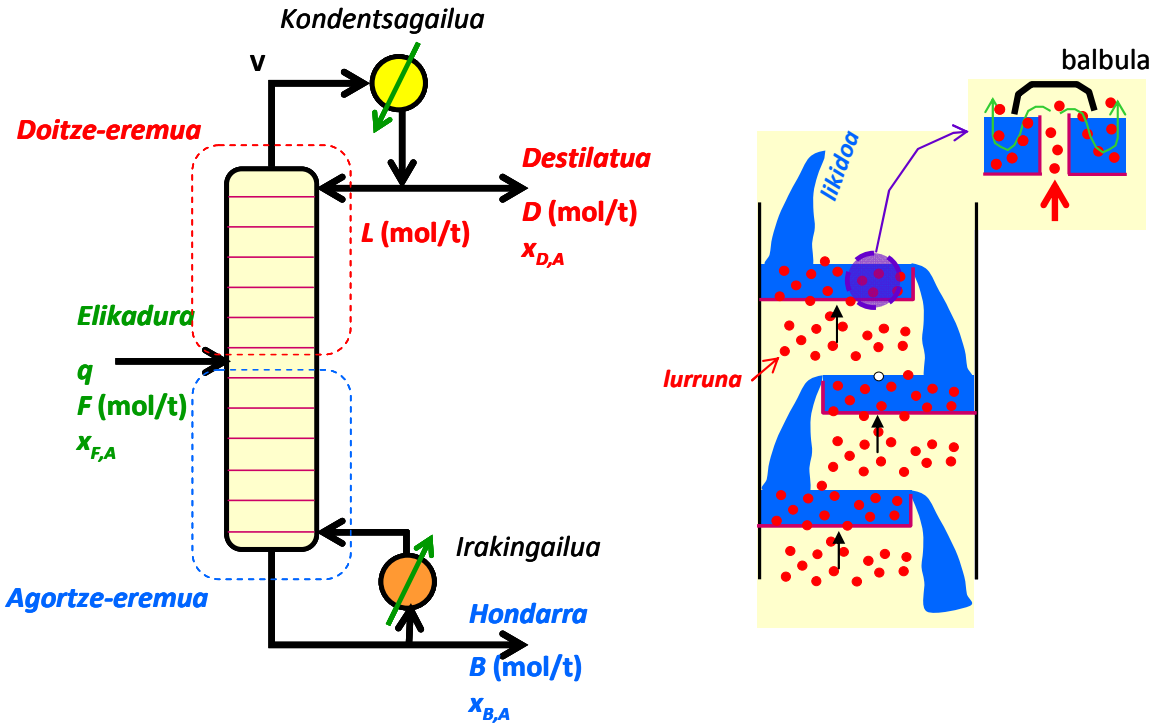
Destilatuaren eta hondar-likidoaren emariak zutabe osoari egindako masa-balantzeetatik lor daitezke (mol/t eran):

Sistema osoa (mol/t)
$$F = D + B \tag{12.25}$$

A osagaia (mol/t)
$$F \cdot x_{F,A} = D \cdot x_{D,A} + B \cdot x_{B,A} \tag{12.26}$$

Kondentsagailuan masa-balantzea egitean:

$$V_d = D + L \tag{12.27}$$



12.13 irudia. Errefluxu-destilazio jarraitua dorre erretiludunean (ezkerrean) eta likido eta lurrunaren kontaktuaren xehetasuna (eskuinean).

Errefluxu-erlazioa (R) da zutabera likido-eran itzultzen den korrontearen eta destilatu gisa kanporatzen den emariaren arteko erlazioa:

$$R = \frac{L}{D} \tag{12.28}$$

12.6.1 Doitze-eremuko eragiketa-lerroa

12.14 irudian marra ez-jarraituez inguratu den sisteman masa-balantzeak eginez (mol/t):

Sistema osoa:
$$V_d = D + L \tag{12.29}$$

A osagaia:
$$V_d \cdot y_{n,A} = D \cdot x_{D,A} + L \cdot x_{A,n+1} \tag{12.30}$$

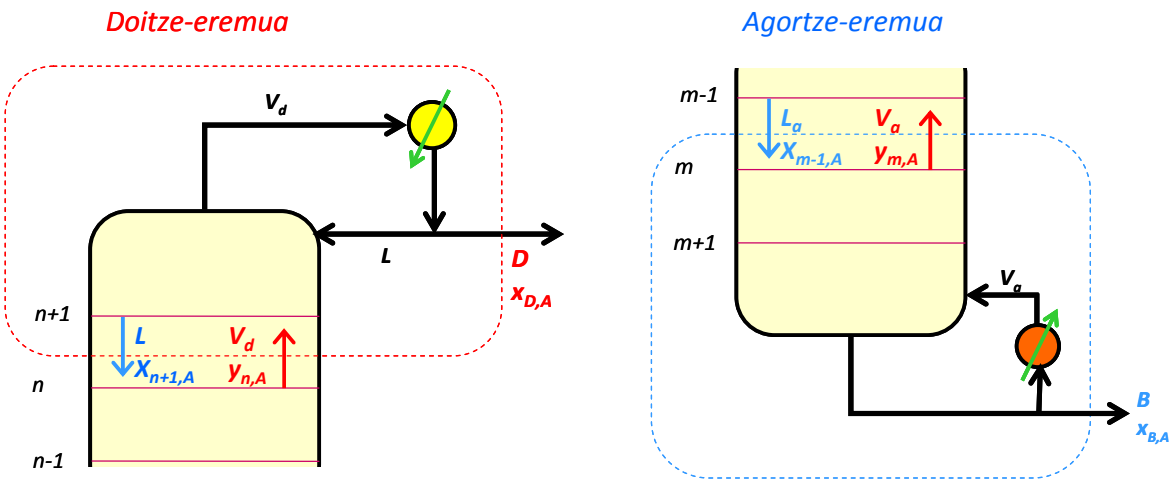
Eta, hortik:

$$y_{n,A} = \frac{L}{V_d} \cdot x_{n+1,A} + \frac{D \cdot x_{D,A}}{V_d} \tag{12.31}$$

Errefluxu-erlazioa erabiltzen bada, ***doitze-eremuko eragiketa-lerroa (DEL)*** lortzen da:

$$y_{n,A} = \frac{R}{R+1} \cdot x_{n+1,A} + \frac{x_{D,A}}{R+1} \tag{12.32}$$

Doitze-eremuan behetik gora doan lurruneko eta goitik behera doan likidoko A osagaiaren konposizioak erlazionatzen ditu *DEL* lerroak. Doitze-eremuko osagai lurrunkorrarenaren masa-balantzea da ekuazio hori. y_A vs. x_A oreka-diagraman, $R/(R+1)$ maldako lerro zuzena da, eta jatorrian ordenatuak $x_{D,A}/(R+1)$ balio du (12.17 irudia). Gainera, $x_{n+1,A} = x_{A,D}$ denean, $y_{n,A} = x_{D,A}$ da, hau da, *DEL*a diagonalean dagoen D puntutik pasatzen da ($x_{D,A}$, $x_{D,A}$ koordenatuak dauzka).



12.14 irudia. Doitze- eta agortze-eremuak.

12.6.2 Agortze-eremuko eragiketa-lerroa

12.14 irudian marra ez-jarraituez inguratuta agertzen den agortze-eremuko masa-balantzeak eginez (mol/t):

Sistema osoa: $$L_a = V_a + B \tag{12.33}$$

A osagaia: $$L_a \cdot x_{m-1,A} = V_a \cdot y_{m,A} + B \cdot x_{B,A} \tag{12.34}$$

Hortik, ***agortze-eremuko eragiketa-lerroa (AEL)*** lortzen da:

$$y_{m,A} = \frac{L_a}{V_a} \cdot x_{m-1,A} - \frac{B \cdot x_{B,A}}{V_a} \tag{12.35}$$

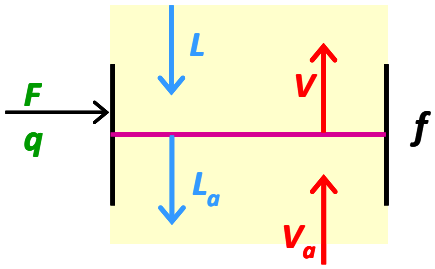
Ekuazio hori agortze-eremuko osagai lurrunkorrenaren masa-balantzea da. Haren malda agortze-eremuko L_a/V_a da, eta jatorrian daukan ordenatua $\left(-\frac{B \cdot x_{B,A}}{V_a}\right)$ da (12.17 irudia).

Agortze-eremuan behetik gora doan lurruneko eta goitik behera doan likidoko A osagaiaren konposizioak erlazionatzen ditu *AEL* lerroak. Gainera, $x_{m-1,A} = x_{B,A}$ denean, $y_{m,A} = x_{B,A}$ da, hau da, *AEL*a diagonalean dagoen eta ($x_{B,A}$, $x_{B,A}$) koordenatuak dauzkan B puntutik pasatzen da.

12.6.3 Elikaduraren lerroa

Doitze- eta agortze-eremuetako L eta L_a likido-korronteen arteko erlazioa lortzeko, elikadura zein egoeratan sartzen den aztertu behar da. Horretarako, elikaduraren f erretiluaren entalpia-balantzea egin behar da. Sinplifikatuz, q = $\frac{L_a - L}{F}$ deitzen bada (elikatzen den mol bakoitzeko lurruntzen diren molak), ***elikadura-eremuko eragiketa-lerroa (EEL) edo q lerroa*** lortzen da:

$$y_{f,A} = \frac{q}{q-1} \cdot x_{f,A} - \frac{x_{F,A}}{q-1} \tag{12.36}$$

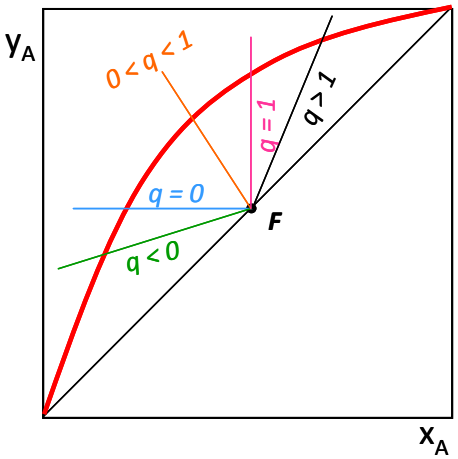


12.15 irudia. Elikadura-eremua.

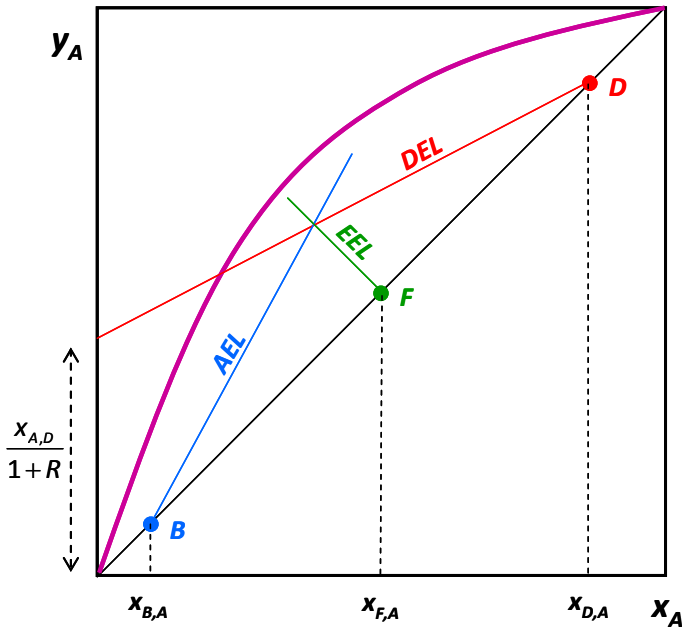
Ekuazio hori ($x_{A,F}$, $x_{A,F}$) koordenatuak dauzkan F puntutik pasatzen da, eta $\left(\frac{q}{1-q}\right)$ malda du.

Elikaduraren zenbait egoera kontuan hartuta *EEL* lerro hauek izan daitezke:

Egoera	*q*
Lurrun gainberotua	< 0
Lurrun asea	= 0
Likidoa + lurruna	0 < *q* < 1
Likido asea	= 1
Likido azpihoztua	> 1



12.16 irudia. Elikadura-eremuko eragiketa-lerroa elikaduraren hainbat egoeratarako.

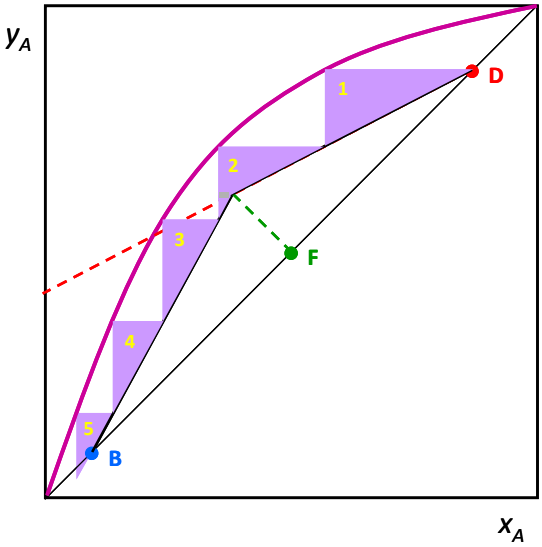


12.17 irudia. *DEL*, *AEL* eta *EEL* lerroen irudikapena.

12.17 irudiari erreparatuz, *DEL* lerro finko batentzat *EEL* elikadura-lerroa aldatzen bada, *AEL* lerroa ere aldatu egiten da. Errefluxu-erlazioaren aldaketak *DEL* eta *AEL* lerroen malden aldaketa dakar, eta, horren ondorioz, prozesuan behar den etapa kopurua ere aldatu egingo da, 12.6.5 atalean ikusiko den bezala.

12.6.4 Etapa ideala edo erretilu kopuruaren kalkulua

Behin *DEL*a, *EEL*a eta *AEL*a irudikatuta, destilazioa egiteko zenbat etapa ideal behar diren (hau da, zenbat erretilu) kalkulatzen da grafikoki. *D* puntutik abiatuz, lerro horizontala marraztu behar da orekarekin elkartu arte, eta hortik lerro bertikala marraztu behar da *DEL* edo *AEL* lerroa ebaki arte. Horrelako maila bakoitza etapa teoriko bat da. Prozedura horri jarraitzen zaio B puntura heldu arte, eta marrazten diren maila guztien baturak ekipoak behar dituen erretilu kopurua ematen du. 12.18 irudian azaltzen den adibidean, 5 etapa (erretilu) beharko lirateke.

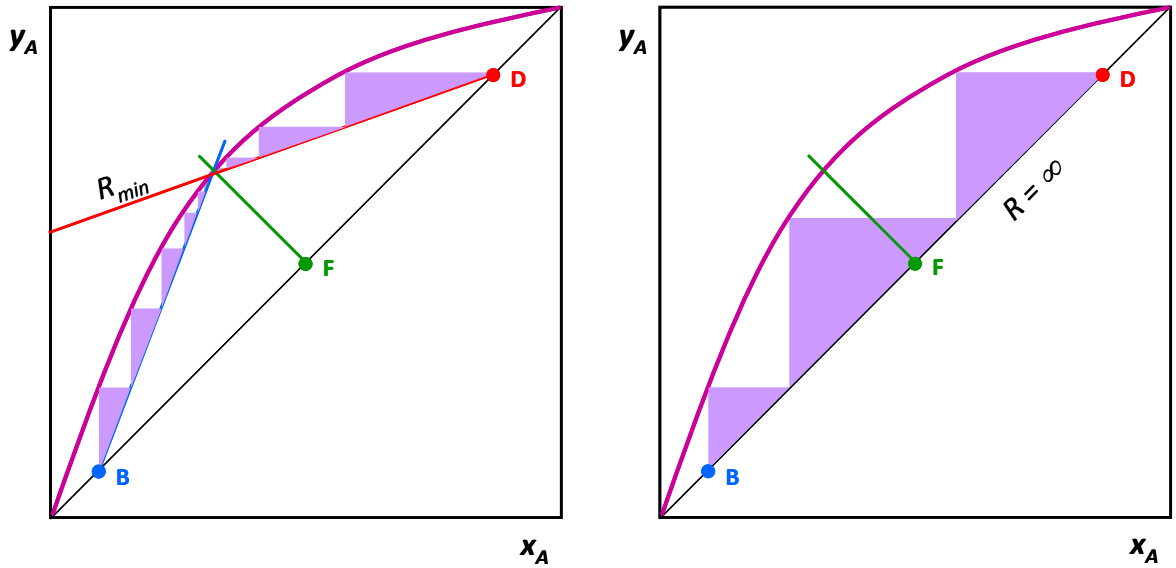


12.18 irudia. McCabe-Thieleren metodo grafikoa errefluxu-destilazio jarraitua egiteko zenbat etapa ideal behar diren kalkulatzeko.

12.6.5. Errefluxu-erlazioaren eragina

DEL lerroa errefluxu-erlazioaren (*R*) araberakoa denez, bereizte-maila finko bat lortzeko behar den etapa kopurua ere *R*-ren araberakoa da. Errefluxu-erlazioa handitzen den heinean, *DEL* lerroa diagonaletik gertuago dago; $R = \infty$ denean (destilagailutik ez da produkturik ateratzen, burutik irteten den guztia zutabera itzultzen da), *DEL*a diagonalarekin bat dator, *AEL*arekin batera (ikusi 12.19 eskuineko irudia). Hala, bereizte-maila finkoa lortzeko etapa gutxiago behar da, eta $R = \infty$ denean etapa kopurua minimoa da (N_{min}). Horrela lan egitean, ekipoaren kostua minimoa izango litzateke (erretilu gutxien behar baitu horrela), baina eragiketa-kostuak infinituak izango lirateke (ikusi 12.20 irudia). Tarte osoan nahastearen lurrunkortasun erlatiboa konstante mantentzen bada, Fenske-ren ekuazioak ematen du etapa kopuru minimoa, grafikoki ere kalkulatzeko aukera izan arren:

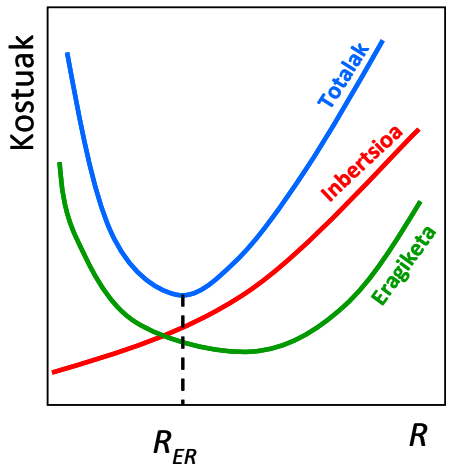
$$N_{\min} = \frac{\log\left[\left(\frac{x_{D,A}}{1-x_{D,A}}\right)\cdot\left(\frac{1-x_{B,A}}{x_{B,A}}\right)\right]}{\log \alpha_{AB}} - 1 \qquad (12.37)$$



12.19 irudia. *DEL* eta *AEL* lerroen irudikapena errefluxu-erlazioa minimoa (ezkerrean) eta infinitua (eskuinean) denean.

R txikiagoa den neurrian, *DEL* lerroaren malda txikitu egiten da eta jatorrian daukan ordenatuaren balioa $\left(\frac{x_{D,A}}{1+R}\right)$ handitzen da. Hala, *DEL* lerroak, elikaduraren *EEL* lerroak eta oreka-lerroak bat egiten duten puntuak *R*-ren balio minimoa ematen du (R_{min}); hori baino balio txikiagoa erabiliko balitz, *DEL* eta *EEL* lerroek oreka zeharkatu ondoren elkar ebakiko lukete, eta hori ezinezkoa da. R_{min} errefluxu-erlazio minimoarekin lan egitean, infinitu etapa behar dira; izan ere, masa-transferentzia emateko indar-eragilea zero egiten da hiru lerroen ebaki-puntuan. Horregatik, era horretan lan eginez gero eragiketa-kostuak minimoak izango lirateke, baina ekipoaren kostua infinitua izango litzateke (ikusi 12.20 irudia).

Eragiketetan, errefluxu-erlazioaren balio optimoa ($R_{min} < R_{er} < \infty$) ikuspegi ekonomikoa kontuan hartuta kalkulatzen da. Zutabearen goialdeko lurruna kondentsatzeko erabiltzen den kondentsagailua eta behealdeko likidoa irakinarazteko erabiltzen den irakingailua osoak badira, ez dute bereizterik eragiten eta ez dira etapatzat hartzen. Baina partzialak izango balira, bereiztea eragingo lukete, eta bakoitza etapa gehigarri gisa kontsideratu beharko litzateke.



12.20 irudia. Kostuen aldaketa errefluxu-erlazioaren arabera.

12.5 adibidea

101,33 kPa-ean, *n*-heptanoz (A) eta *n*-oktanoz (B) osatutako nahaste baten 1000 mol/h ($x_{F,A}$ = 0,5) bereizi nahi dira errefluxu-destilazioz, destilatuan molen % 90 *n*-heptanoa eta hondar-likidoan molen % 10 *n*-heptanoa izateko. Elikadura-likidoa asea bada, kondentsagailu osoa erabiltzen bada eta irakingailua partziala bada, kalkula ditzagun (a) erabil daitekeen errefluxu-erlazio minimoa; (b) minimoa baino % 50 gehiago erabiltzen bada, zenbat erretilu beharko diren; (c) $R = \infty$ bada, bereizi ahal izateko, zenbat etapa behar diren.

Ebazpena

(a) Prozedura honi jarraitu zaio:

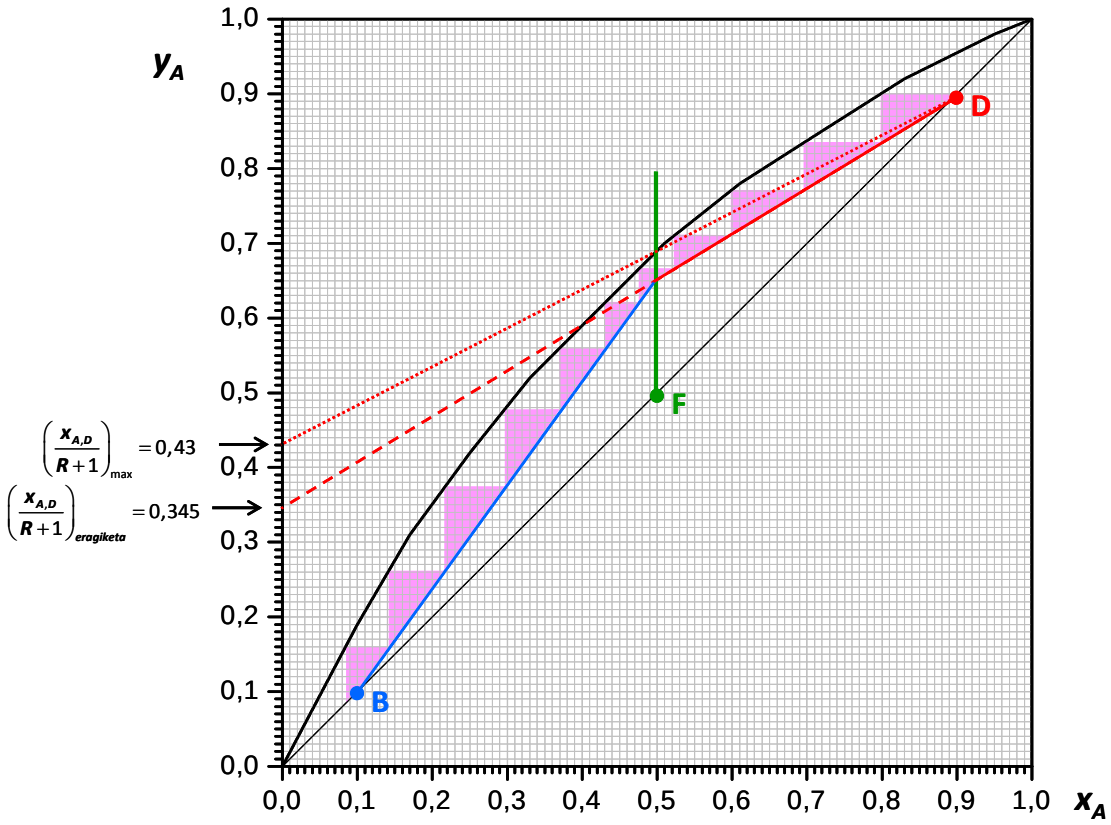
(1) oreka-datuekin, 101,33 kPa-eko presioari dagokion y_A-x_A oreka-diagrama marraztu da.

(2) zutabe osoaren masa-balantzetik:

Sistema osoa: $1000 = D + B$

n-heptanoa: $1000 \cdot 0{,}5 = D \cdot 0{,}90 + B \cdot 0{,}10$

Horren ondorioz, D = 500 mol/h eta B = 500 mol/h dira.



(3) F, B eta D puntuak kokatu dira diagraman.

(4) elikaduraren q lerroa edo *EEL*a marrazten dira: q = 1 denez (likido asea delako), F puntutik irteten da lerro bertikala.

(5) R_{min} kalkulatzen da. Irudian, *DEL*ak, *EEL*ak eta orekak bat egiten duten puntuari dagokion *DEL* maldak edo jatorriko ordenatuak ematen du balioa:

Jatorrian daukan ordenatua $\left(\dfrac{x_{D,A}}{R+1}\right)_{\max}$ = 0,43 bada, R_{min} = 1,093 da.

(b) (6) Eragiketarako errefluxu-erlazioari dagokion *DEL*a marrazten da: R_{er} = 1,64.

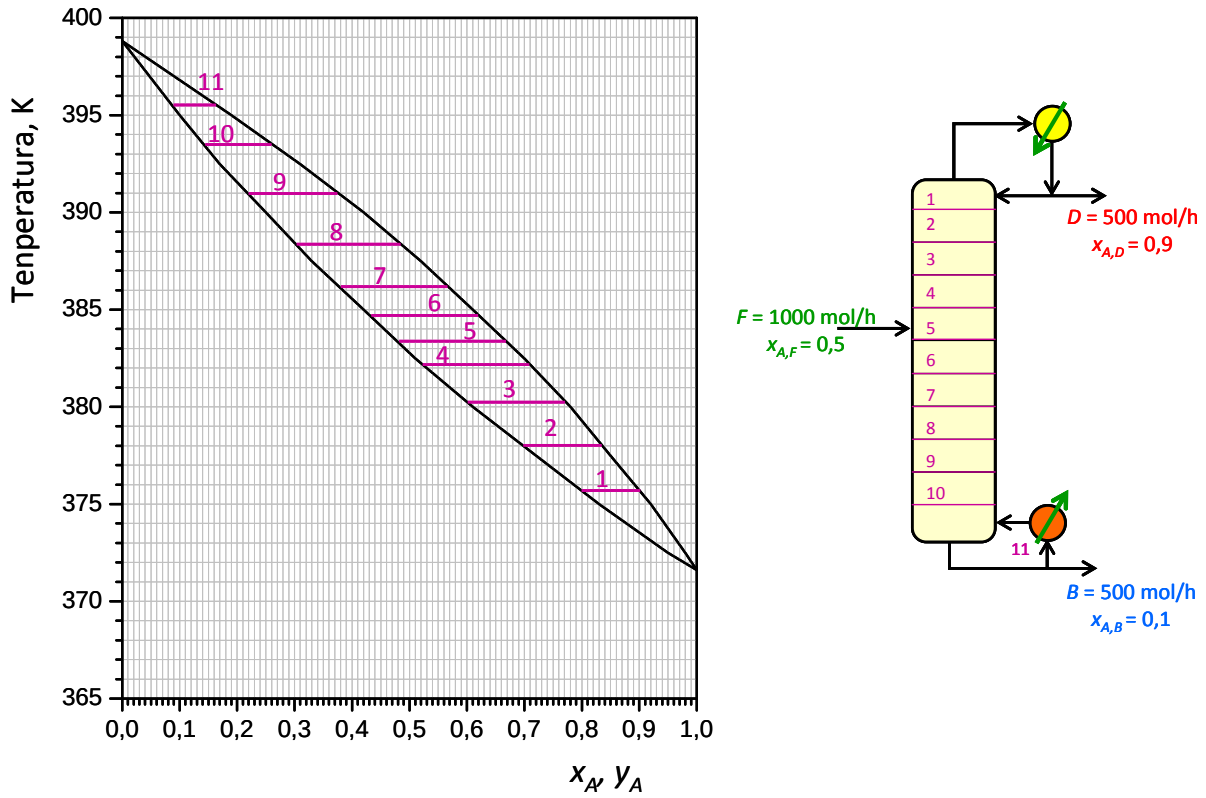
Jatorrian daukan ordenatua $\left(\dfrac{x_{D,A}}{R+1}\right)_{er}$ = 0,345 da.

(7) *EEL*a eta *DEL*a marraztuta izanik, *AEL*a marrazten da.

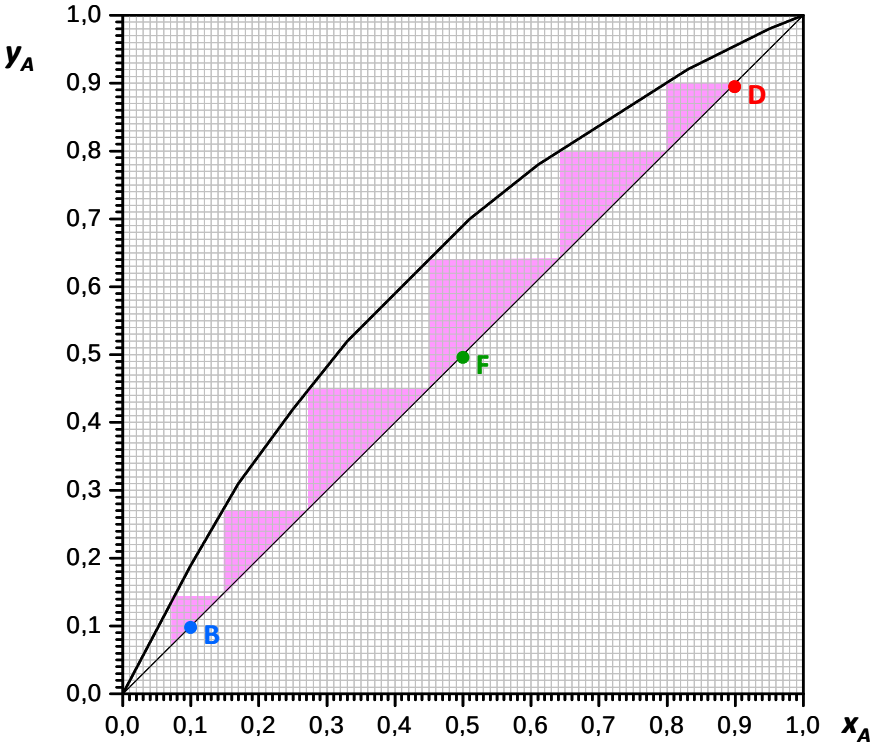
(8) *D*tik *B*ra heltzeko mailak marrazten dira, *DEL*a eta *AEL*a eta oreka-lerroa erabiliz.

Elikadura 5. erretiluan sartuko litzateke, eta, irakingailua partziala denez, guztira behar diren 11 etapetatik 10 erretilu izango lirateke, 11. etapa irakingailu baita.

Ondoko irudian agertzen da ekipo honen barne-egitura eta erretilu bakoitzean lortzen den bereizte-maila, eta y_A eta x_A balioak agertzen dira.



(c) Errefluxu-erlazioa infinitua denean *DEL*a eta *AEL*a diagonalean daude. Irudiaren arabera, 6 etapa ideal beharko lirateke, gutxienez, bereizte-maila lortzeko.

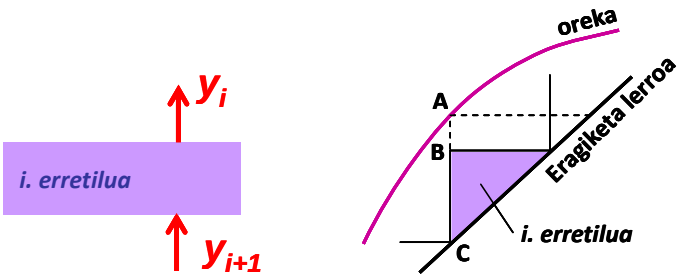


12.7 ERRETILUEN ERAGINKORTASUNA

Orain arteko azalpenetan, erretilu bakoitzean oreka lortu dela hartu da. Hala ere, benetako eragiketak burutzen direnean hori ez da betetzen, erretiluen funtzionamendua ez delako ideala —faseen arteko ukipena egokia ez delako edo faseen arrastea eman daitekeelako—. Horregatik, etapa bakoitzean ez da orekarik lortzen eta eragiketa egin ahal izateko behar den etapa kantitatea, idealki lan egiten denean kalkulatutakoa baino handiagoa da. Erretiluen eraginkortasuna horrela definitzen da (gas fasearentzako) (12.21 irudian oinarritua):

$$E = \frac{y_{i+1} - y_i}{y_{i+1} - y_i^*} \qquad (12.38)$$

Eraginkortasuna, erretiluan lortzen den konposizio aldaketa (y_{i+1} - y_i) eta oreka lortu izan balu izango zukeen konposizio aldaketaren (y_{i+1} - y_i^*) arteko erlazioa da, 12.21 irudian $\frac{\overline{BC}}{\overline{AC}}$ luzeren erlazioa, alegia.



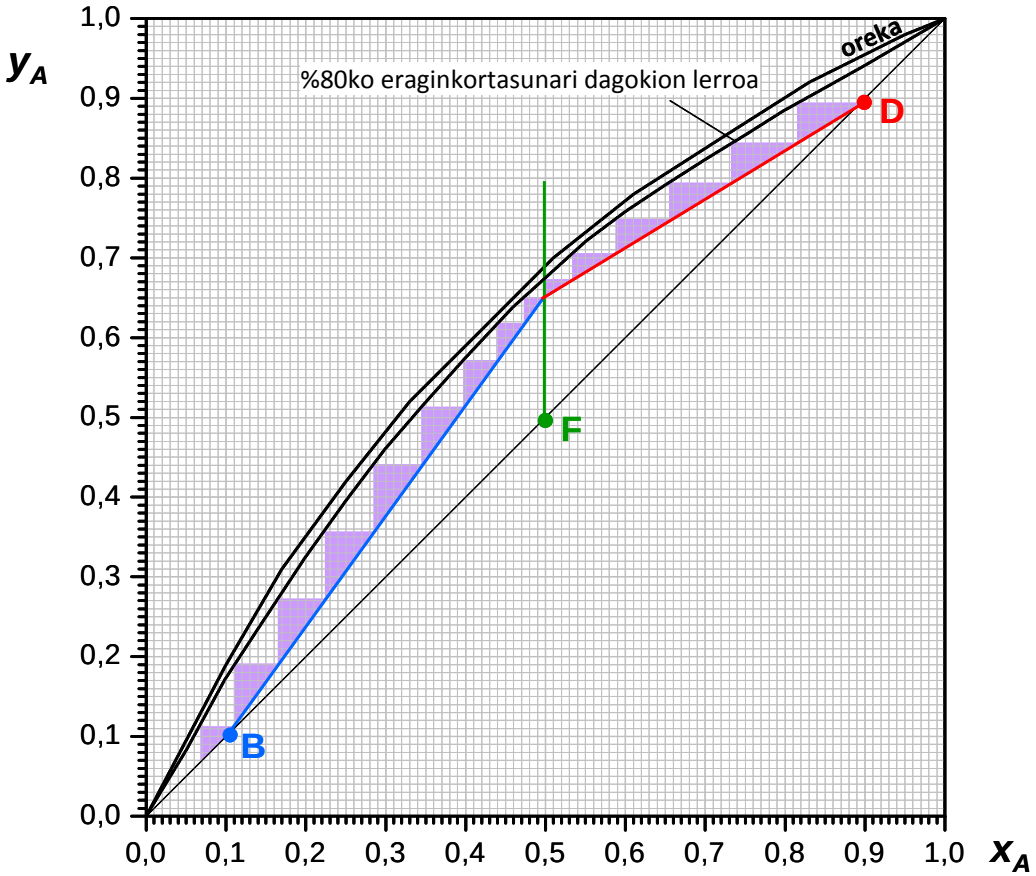
12.21 irudia. Erretiluaren eraginkortasuna gas fasearentzako. Marra ez-jarraitua etapa idealari dagokio.

12.6 adibidea

Erretiluen eraginkortasuna %80koa bada, kalkulatu dezagun R_{er} = 1,64 denerako zenbat erretilu beharko diren 12.5 adibideko destilazio eragiketa burutzeko.

Ebazpena

Erretiluen eraginkortasuna %80koa bada, oreka lerroaren azpialdean benetan lortzen den lerroa marraztuko da (oreka lerroa eta zutabeko eremu bakoitzeko eragiketa lerroaren artean, 12.21 irudian agertzen den moduan).



Eragiketarako 15 erretilu behar dira.

12.8 BURBUILA- ETA IHINTZ-TENPERATUREN KALKULUA

Nahaste baten burbuila-tenperatura irakiten hasten deneko tenperatura da. Osagai bakoitzeko $y_i = K_i \cdot x_i$ erako ekuazio bat egongo da,

$$K_i = \frac{P_i^0}{P} \tag{12.39}$$

izanik.

Ekuazio horrek adierazten du *i* osagaia likidoan eta lurrunean nola banatzen den. Raoult-en legea eta Dalton-en legea betetzen badute, adierazpen hauek lortzen dira:

$$\left.\begin{aligned} P\cdot y_i &= P_i^0\cdot x_i \\ y_i &= \frac{P_i^0\cdot x_i}{P} = K_i\cdot x_i \\ x_i &= \frac{P\cdot y_i}{P_i^0} \end{aligned}\right\} \qquad (12.40)$$

12.7.1 Burbuila-tenperaturaren kalkulua

Nahastean *C* osagai badaude, guztien mol-frakzioen batuketaren emaitzak bat izan behar du:

$$1 = \sum_{i=1}^{C} K_i\cdot x_i \qquad (12.41)$$

K_i aldagaia tenperaturaren funtzioa denez, tenperatura bakarrak —nahastearen burbuila-tenperaturak, alegia— beteko du goiko baldintza. Sistema haztatuz ebazten da.

12.7.2 Burbuila-tenperaturaren kalkulua

Nahastean C osagai badaude, guztien mol-frakzioen baturak bateko emaitza eman behar du:

$$1 = \sum_{i=1}^{C} \frac{y_i}{K_i} \qquad (12.42)$$

K_i aldagaia tenperaturaren funtzioa denez, tenperatura bakarrak —nahastearen ihintz-tenperaturak, alegia— beteko du goiko baldintza. Sistema haztatuz ebatziko da.

12.6 adibidea

(a) *n*-heptanoz (1) eta *n*-oktanoz (2) osatutako nahaste bitar likidoan x_1 = 0,65 eta x_2 = 0,35 badira, kalkula dezagun sistemak zer burbuila-tenperatura duen 101,33 kN/m^2-ko presioan ; (b) 101,33 kN/m^2-ko presioan, y_1 = 0,65 eta y_2 = 0,35 izango badira, nahastearen ihintz-tenperatura.

Ebazpena

Hauek dira 1 eta 2 osagaien Antoine-ren ekuazioak:

$$\left.\begin{aligned} \ln P_1^0 &= 13{,}9008 - \frac{2932{,}72}{T - 55{,}6356} \\ \ln P_2^0 &= 14{,}2368 - \frac{3304{,}16}{T - 55{,}2278} \end{aligned}\right\}$$

<u>(a) Burbuila-tenperatura:</u> Burbuila-tenperaturan:

$$f(T) = \frac{x_1}{101{,}33}\cdot\exp\left(13{,}9008 - \frac{2932{,}72}{T - 55{,}6356}\right) + \frac{x_2}{101{,}33}\cdot\exp\left(14{,}2368 - \frac{3304{,}16}{T - 55{,}2278}\right) - 1 = 0$$

T (K)	K_1	y_1	K_2	y_2	*f(T)*
390	1,668	1,084	0,778	0,272	-0,3561
395	1,898	1,233	0,899	0,315	-0,5482
385	1,460	0,949	0,670	0,234	-0,1832
380	1,272	0,827	0,574	0,201	-0,0280
379,05	1,239	0,805	0,557	0,195	-0,0004

Beraz, nahaste likido honen burbuila-tenperatura 379,05 K da, eta sortzen den lehen lurrun-burbuilaren konposizioa y_1 = 0,805 eta y_2 = 0,195 da.

(b) Ihintz-tenperatura: Ihintz-tenperaturan:

$$f(T) = \frac{y_1 \cdot 101,33}{\exp\left(13,9008 - \frac{2932,72}{T - 55,6356}\right)} + \frac{x_2 \cdot 101,33}{\exp\left(14,2368 - \frac{3304,16}{T - 55,2278}\right)} - 1 = 0$$

T (K)	*1/K1*	x_1	$1/K_2$	x_2	*f(T)*
390	0,5997	0,38978	1,2859	0,450	0,160
395	0,5270	0,34253	1,1121	0,389	0,268
385	0,6851	0,44529	1,4935	0,523	0,032
387,5	0,6406	0,41640	1,3850	0,485	0,099
383,86	0,7066	0,45930	1,5464	0,541	-0,001

Beraz, nahaste likido honen ihintz-tenperatura 383,86 K da, eta azken likido tantaren konposizioa x_1 = 0,459 eta x_2 = 0,541 da.

13. GAIA

GAS-LIKIDO OREKA ETA ABSORTZIO-/DESORTZIO-ERAGIKETA

Gas-likido faseen arteko masa-transferentzian oinarritutako bereizte-eragiketek erabilera zabala daukate industria kimikoan. Horrelakoak dira, besteak beste, absortzioa, desortzioa eta humidifikazioa. Absortzioa gas-korronteak garbitzeko erabiltzen da maiz, eta, amoniakoa ekoizteko prozesuan, CO_2-a ezabatzeko metodoa da. Bero-trukagailuetan erabilitako ur epela hozteko, aire lehorrarekin kontaktuan jartzen da. Gero, gas-likido oreka azalduko da eta, bukatzeko, absortzio- edo desortzio-eragiketak azalduko dira.

13.1 LIKIDO-GAS OREKA

Gas-faseko nahaste bat likido-fase batekin kontaktuan jartzean osagairen bat bi faseetan disolbagarria bada, osagai hori bi faseetan banatuko da. Oreka lortzen denean, sistema ideala bada, Raoult-en legearen arabera banatuko dira osagaiak bi faseetan (gas-fasean, osagai baten presio partziala likido-faseko mol-frakzioarekiko proportzionala da).

$$P_A = P_A^0 \cdot x_A \tag{13.1}$$

Raoult-en ekuazioak aplikazio zabala dauka nahaste idealen destilazioan. Beste sistema batzuetan, ordea —absortzioaren kasuan, adibidez—, gas-faseko solutua oso diluitua dago, eta idealtasunarekiko desbideraketak agertzen dira. Horrelako sistema askotan, solutuaren likido-faseko mol-frakzioa eta gas-faseko presio partziala Henry-ren legeak erlazionatzen ditu:

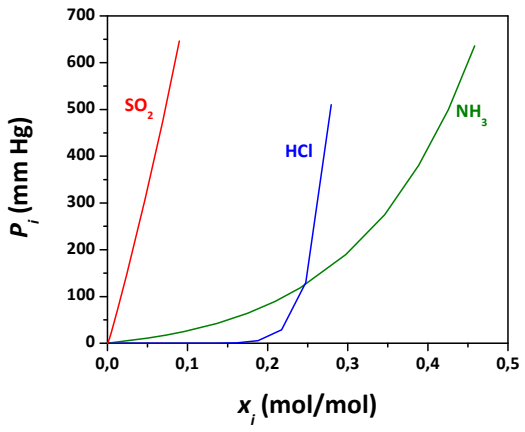
$$P_A = H_A \cdot x_A \tag{13.2}$$

H_A Henry-ren konstantea izanik.

Sistema askok ez du Henry-ren legeak aurreikusten duen linealtasuna, hots, oreka-erlazio ez-linealak dituzte. Horregatik, sistema askotan oreka-datuak esperimentalki neurtu behar dira. 13.1 taulan eta 13.1 irudian agertzen dira uretan disolbatutako gas batzuen oreka-datuak.

13.1 Taula. Hainbat soluturen Henry-ren konstantea (0ºC).

Gasa	*H_A (atm/mol)*	*Iruzkina*
NH_3	2,0	Uretan disolbagarria
C_2H_6	268	Tarteko disolbagarritasuna
O_2	$2{,}5 \cdot 10^4$	Uretan disolbaezina
CO	$3{,}5 \cdot 10^4$	Uretan disolbaezina



13.1 irudia. NH_3 (lerro berdea), SO_2 (lerro gorria) eta HCl-aren (lerro urdina) disolbagarritasuna uretan 0 ºC-an.

Likido baten muinean gas batek duen disolbagarritasuna hainbat aldagairen araberakoa da. Eragin gehien daukaten aldagaiak, besteak beste, nahastearen konposizioa, sistemaren tenperatura, presio totala eta likido-faseko kontzentrazioa dira. Esperimentalki ikusi denez, sistema gehienetan disolbagarritasuna honela aldatzen da:

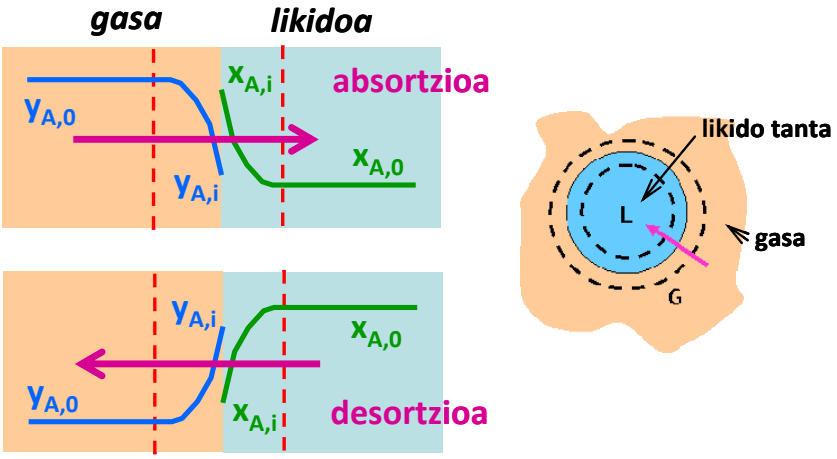
- Tenperatura handitzean, likidoan disolbagarritasuna txikitu egiten da, eta absortzioa ez dago faboratua; bai, ordea, desortzioa.
- Solutuaren presio partziala handitzean, likidoan disolbagarritasuna handitu egiten da; absortzioa faboratzen duen heinean, desortzioa ez du faboratzen.
- Presio totalaren eragina $P > 5$ atm denean igartzen da. Zenbat eta presio handiagoa, orduan eta faboratuagoa dago absortzioa.

13.2 ABSORTZIOA ETA DESORTZIOA

Gas-fasean dagoen solutu bat (edo gehiago) likido ez-lurrunkor batekin kontaktuan jartzean, likido-fasera transferitu daiteke (likidoan disolbagarria bada). Eragiketa horri ***absortzio*** deritzo, eta gas-faseko nahasteak bereizteko erabiltzen da. Horretarako erabiltzen den likidoari disolbatzaile deritzo, eta fase batetik bestera transferitzen den osagaia solutua da. Absortzio-eragiketaren aplikazioen artean, gas-fasetik kutsatzaileak ezabatzea edo gas-faseko osagai baliozkoak berreskuratzea daude.

Alderantzizko prozesuari ***desortzio*** (ingelesez, *stripping*) deritzo. Hartan, likido-egoerako nahastea gas batekin ukipenean jartzean, likidoan dagoen osagai bat (edo gehiago) gasera transferitzen da. Erabileren artean, absortzioan erabilitako disolbatzailea berreskuratzeko erabiltzen da, batez ere.

Benetako sistemetan solutu bat baino gehiago egon arren, disolbatzailea selektiboa bada, jo daiteke fase batetik bestera solutua bakarrik garraiatzen dela. Aurrerantzean, solutu bakarreko (A deituko zaio) sistemak azalduko dira. Era berean, gas-faseko muina likidoan disolbaezina dela joko da (inertea edo geldoa) eta likido-faseko muina gasera ez dela pasatzen joko da. Mintz bikoitzaren teoriaren arabera, absortzio- eta desortzio-eragiketetan gertatzen den prozesu fisikoa 13.2 irudian agertzen da.



13.2 irudia. Absortzioaren eta desortzioaren ikuspegi fisikoa.

Bi eragiketak fase arteko masa-transferentziaz gertatzen dira. Likido- eta gas-faseetako mintzek eskaintzen dizkioten erresistentziak gainditu behar ditu solutuak, beste fasean disolbatu aurretik.

11. gaian ikusi da fase arteko masa-transferentziarako abiadura fasearteko azalerarekiko proportzionala dela (11.1 ekuazioa). Horregatik, eragiketa hauek egiteko orduan, ezinbestekoa da fasearteko azalera handitzea. Eragiketak ekipo berezietan egiten dira. Modu berean, masa-transferentziaren abiadura indar eragilearen araberakoa denez, orekatik ahalik eta aldenduen lan egiten da eragiketa hauetan.

Fase batetik besterako solutuaren transferentzia bigarren fasearekiko daukan afinitatearen araberakoa da. Afinitate hori disolbagarritasunaren araberakoa da, ***absortzio fisikoa*** denean. Erabiltzen den disolbatzaileak solutuarekin inolako erreakzio kimikorik ez duenean, absortzio fisikoa baino ez da gertatzen. Horrelakoak dira oxigeno-ur, nitrogeno-ur, bentzeno-olio astun sistemak.

Hala ere, horrelako sistema fisikoetan indar eragilea txikia izaten da, eta masa-transferentzia areagotzeko, ***absortzio kimikoa***k erabiltzen dira. Horretarako, bereziki aukeratutako disolbatzaileak erabiltzen dira, solutuarekin erreakzio kimikoak jasan eta afinitatea handitzeko. Horren ondorioz, indar eragilea handiagotu eta masa-transferentziarako abiadura areagotu egiten dira.

Absortzio kimikoko sistemak bi modutakoak izan daitezke, erreakzio kimikoaren itzulgarritasunaren arabera:

(a) Absortzio kimiko ez-itzulgarria, solutuak eta disolbatzaileak jasaten duten erreakzioa itzulezina bada. Ekoizpen txikiko instalazioetan erabiltzen da. Horrelako sisteman ezinezkoa da disolbatzailea berreskuratzea. Horrelakoa da CO_2-NaOH sistema urtsua. Gaseko CO_2-a sosaren disoluzio urtsuan disolbatzen da, eta CO_2 eta OH^- artean erreakzio ez-itzulgarria gertatzen da.

(b) Absortzio kimiko itzulgarria, solutuak eta disolbatzaileak jasaten duten erreakzioa itzulgarria denean. Disolbatzailea berreskuratu eta berriro erabil daiteke. Horrelako disolbatzaileak ekoizpen-maila handiko instalazioetan erabiltzen dira, dirua aurreztu baitaiteke haiekin. Horrelako sistemak H_2S-DEA (dietilamina) edo CO_2-MEA (metiletilamina) dira.

$$CO_2 + R_1NH_2 \leftrightarrows R_1NH_2COO$$

Absortzio kimikoaren adibide asko daude industrian. Adibidez, azido nitrikoaren eta azido sulfurikoaren ekoizpen-prozesuen azken etapak dira. Azido nitrikoaren prozesuan, NO_2 gasa urarekin absorbatzen da —$NO_2 + H_2O \rightarrow HNO_3 + NO$ erreakzioa emanez— eta, azido sulfurikoaren kasuan, SO_3-a uretan absorbatzen da —$SO_3 + H_2O \rightarrow H_2SO_4$ erreakzioa emanez—.

Disolbatzailea berreskuratu eta berriro erabiltzeak dirua aurreztea dakar kasu gehienetan. Disolbatzailea hainbat modutan berreskura daitekeen arren, desortzioa eta destilazioa erabiltzen dira gehien.

Absortziorako disolbatzaile egokiena aukeratzea kritikoa da, eragiketa-kostuak minimoak izan daitezen. Disolbatzaile egokiena aukeratzeko orduan, hiru faktore aztertu behar dira:

(a) Absortzio-ahalmena (solutuarekiko daukan afinitatea). Solutuarekin afinitate handia izan behar du eragiketa eraginkorra izateko.

(b) Hautakortasun handia izan behar du, eta interes gabeko beste solutuekiko inertea izan.

(c) Erraz berreskuratzekoa izan behar du, eragiketa-kostuak gehiegi handi ez daitezen.

Faktore horietaz aparte, beste faktore batzuk ere aztertu behar dira, korrosibitatea (ekipoen isolamendua saihesteko), biskositatea (ponpaketa garestitu dezake), toxikotasuna eta lurrunkortasuna (gasera ahalik eta gutxien pasa dadin), besteak beste.

13.3 ABSORTZIO ETA DESORTZIORAKO EKIPOAK

Orain arte esandakoaren arabera, bi faseen arteko masa-transferentzia abiadura handiz gerta dadin, bi faseek kontaktu sakona izan behar dute denbora batez. Bai absortzioa eta bai desortzioa ekipo berdinetan gertatzen dira.

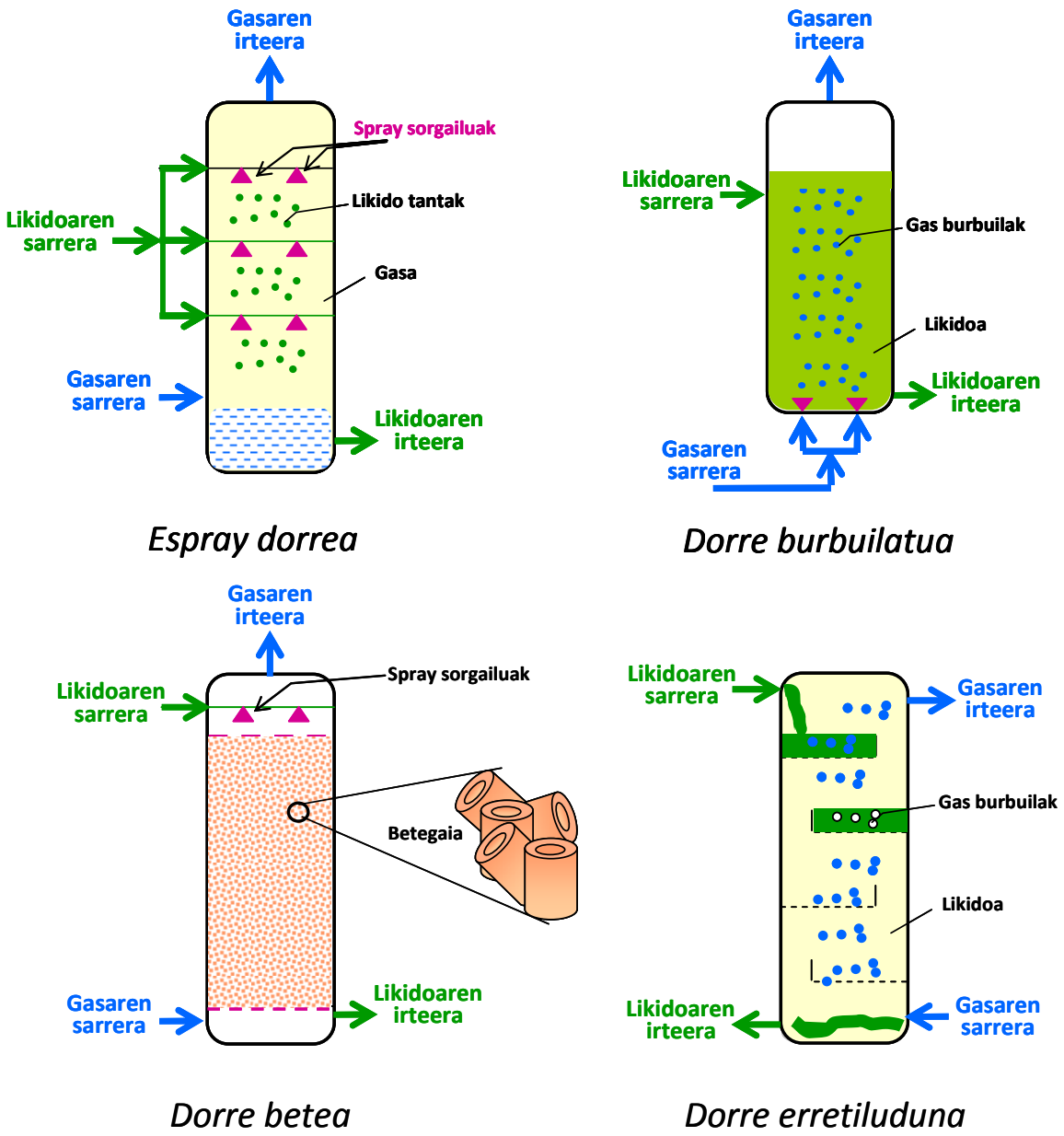
Industrian absortzioa edo desortzioa gertatzeko erabiltzen diren ekipoen artean, ***dorre beteak*** eta ***dorre erretiludunak*** erabiltzen dira gehien, eskala handiko eragiketetan batez ere. Hala ere, badaude beste ekipo batzuk, hainbat aplikaziotan erabilera dutenak. Adibidez, ***esprai-dorreak*** edo ***tanga burbuilatuak*** eskala txikiko aplikaziotan erabiltzen dira, bereizte-maila handia behar ez denean. 13.3 irudian eragiketa hauei dagozkien ekipoen eskemak azaltzen dira.

Dorre beteak zutikako dorreak dira, eta barrualdea fasearteko azalera handitzeko betegarriz beteta dago. Ekipo horietan, likidoak eta gasak kontrakorrontean zein paraleloan zirkula dezakete. Likidoak betegarria bustitzen du, eta gasaz inguratuta dago. Kontrakorrontean badihardute, likidoak goitik beherako bidea egiten du (grabitatearen eraginez) eta gasak behetik gorakoa; paraleloan zirkularaztean, normalean biek dorrearen behealdetik gorako noranzkoan zirkulatzen dute.

Dorre erretiludunak zutikako dorreak dira, eta zutabeko hainbat altueratan (sakabanatuta) erretiluak kokatzen dira. Erretilu bakoitzean likidoa dago (bere gaineko erretilutik datorren likidoa, eta bere azpiko erretilura erortzen dena), eta behetik gora doan gasa erretiluan dagoen likidoarekin kontaktuan dago; hala, masa-transferentzia gertatzen da. Erretilu idealean, likidoak eta gasak orekan irteten dira.

Ondoren, dorre beteen eta dorre erretiludunen diseinua azalduko da absortzio- zein esortzio-eragiketetarako. Aurrerantzean eratorriko diren adierazpenak lortzeko, ondoren azaltzen diren suposizioak egingo dira:

- Gas- eta likido-faseen muinean osagai bakarra disolbatuko da, eta solutu deituko zaio (A osagaia).
- Gas-faseko muina osatzen duen konposatua likidoan disolbaezina da, eta konposatu horri gas-faseko inerte deritzo. Era berean, likido-faseko muina osatzen duen konposatua gas-fasean disolbaezina da, eta konposatu horri likido-faseko inerte deritzo. Horregatik, gaseko eta likidoko inerteen emariak konstante irauten dute ekipo osoan.
- Tenperatura eta presioa konstante mantentzen dira denboran eta ekipo osoan.
- Erretilutik irteten diren likido eta gasak orekan daude, hau da, etapa ideala gertatzen da.



13.3 irudia. G-L eragiketak (absortzioa eta desortzioa) gauzatzeko ekipo batzuk.

13.4 ABSORTZIO-ERAGIKETA DORRE BETEETAN

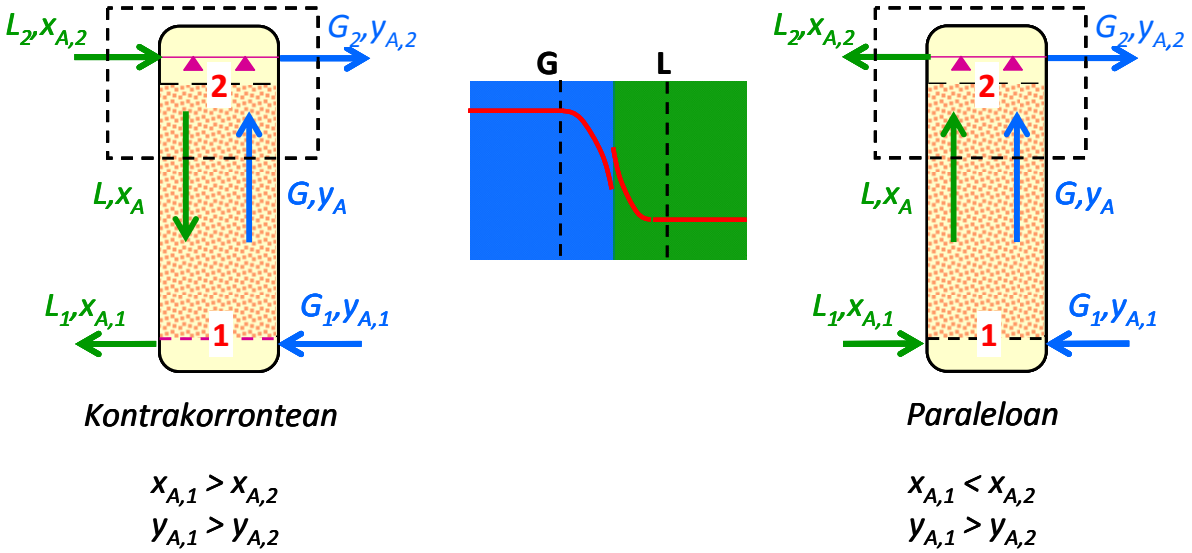
Dorre betean lan egitean bada, bi faseek paraleloan zein kontrakorrontean zirkulatu dezakete. Bi faseak paraleloan zirkularazten badira, kontaktuan jartzen diren unean bi faseen arteko solutuaren kontzentrazio-diferentzia handia denez, masa-transferentzia abiadura handiz gertatzen da, baina, dorrean aurrera egin ahala, indar eragilea murriztuz doa. Ekipoa oso luzea denean (infinitua), bi faseak orekan irteten dira.

Bi faseak kontrakorrontean zirkularazten badira, dorre osoan zehar indar eragilea mantentzen da, eta, hala, eragiketa eraginkorragoa da. Industriako eragiketa gehienak era horretan egiten dira.

Dorre beteen diseinua azaltzeko, absortzio-eragiketa hartuko da adibidetzat. Hala, tratatu beharreko gas-fasean A solutua kontzentrazio handian dago, eta haren kontzentrazioa gutxitzeko, likidoarekin kontaktuan jarriko da. Eragiketaren helburua $y_{A,1}$ kontzentrazioan dagoen solutua $y_{A,2}$ kontzentraziora murriztea da.

$x_{A,1}$ eta $x_{A,2}$ likido-faseko solutuaren mol-frakzioak dira, dorre beteko 1 eta 2 puntuetan.
$y_{A,1}$ eta $y_{A,2}$ gas-faseko solutuaren mol-frakzioak dira, dorre beteko 1 eta 2 puntuetan.
G eta L gas- eta likido-faseen emari molarrak dira.

13.4 irudian lerro ez-jarraituz marraztutako sistema osoarentzat eta A solutuarentzat masa-balantzeak egiten dira, kontrakorrontean eta paraleloan zirkulatzen dutenerako, egoera geldikorrean:



13.4 irudia. Dorre beteko absortzioa kontrakorrontean eta paraleloan.

Masa-balantzeak, mol/denbora unitateetan:

Gaia	*Kontrakorrontean*	*Paraleloan*
Sistema osoa	$G + L_2 = G_2 + L$	$G + L = G_2 + L_2$
Solutua	$G \cdot y_A + L_2 \cdot x_{A,2} = G_2 \cdot y_{A,2} + L \cdot x_A$	$G \cdot y_A + L \cdot x_A = G_2 \cdot y_{A,2} + L_2 \cdot x_{A,2}$

Dorre beteko edozein puntutan gas-faseak duen mol-frakzioa askatzen bada:

Kontrakorrontean:

$$y_A = \left(\frac{L}{G}\right) \cdot x_A + \frac{G_2 \cdot y_{A,2} - L_2 \cdot x_{A,2}}{G} \tag{13.3}$$

Paraleloan:

$$y_A = -\left(\frac{L}{G}\right) \cdot x_A + \frac{G_2 \cdot y_{A,2} + L_2 \cdot x_{A,2}}{G} \tag{13.4}$$

Solutuaren masa-balantzeak diren 13.3 eta 13.4 ekuazioak y_A vs x_A grafikoan marraztu daitezke. Lerro horiek (L/G) eta ($-L/G$) maldakoak dira, kontrakorrontean eta paraleloan diharduten ekipoentzat, hurrenez hurren. Lerro horiei ***eragiketa-lerro*** deritze. Zutabe barruan A solutua gas-fasetik likido-fasera transferitzen da, eta likidoaren muinean disolbatzen da. Beraz, zutabean, gas- eta likido-faseen emari totalak (G eta L) aldatuz doaz, L handitu eta G txikitu egiten baitira (desortzioan alderantzizkoa gertatzen da). Hori dela eta, 13.3 edo 13.4 ekuazioek ematen dituzten eragiketa-lerroak y_A vs x_A diagraman marrazten badira, ez dute malda konstantea, hau da, ez dira lerro zuzenak.

Lerro zuzenekin lan egitea lerro ez-zuzenekin lan egitea baino erosoagoa denez, arestian emandako eragiketa-lerroak moldatu egingo dira lerro zuzen bihur daitezen. Hori lortzeko, solutuaren kontzentrazioa soluturik gabeko oinarrian emango da.

Hala, aldagai hauek erabiliko dira:

G' (gas-faseko inerte-molak/denbora), L' (likido-faseko inerte-molak/denbora), X_A (likido-fasean solutuaren molak/likido-faseko inerte-molak) eta Y_A (gas-fasean solutuaren molak/gas-faseko inerte-molak) badira:

$$X_A = \frac{x_A}{1 - x_A} \tag{13.5}$$

$$Y_A = \frac{y_A}{1 - y_A} \tag{13.6}$$

Nahastean solutua oso diluitua dagoenean, $X_A \approx x_A$ eta $Y_A \approx y_A$ bihurtzen dira, baina, beste kasuetan, alde handia izan dezakete.

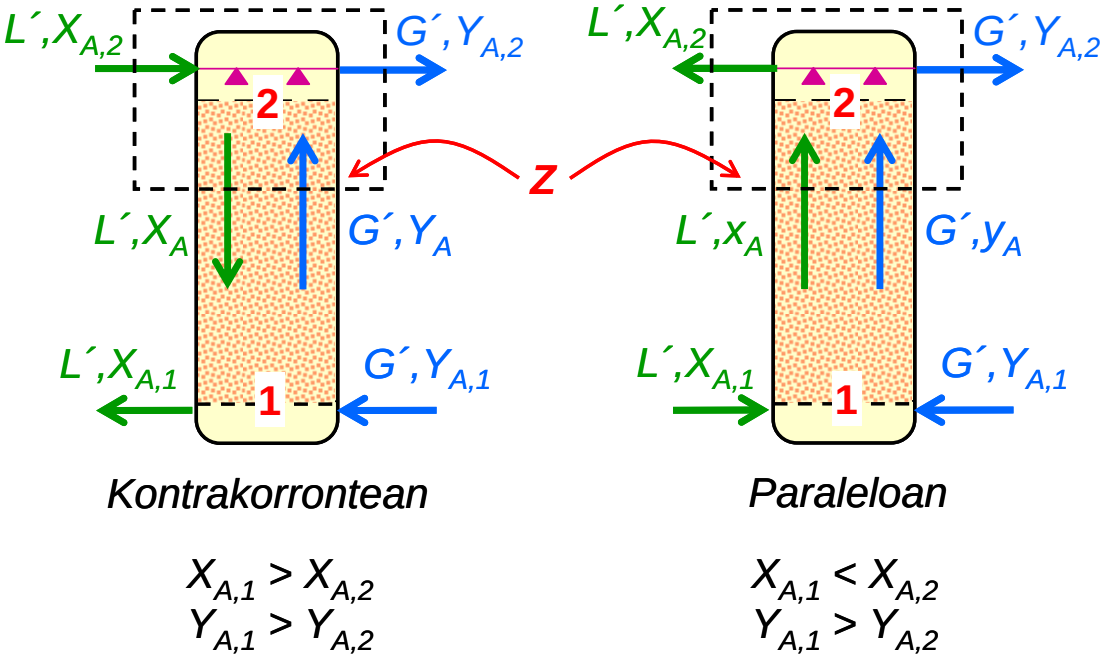
Soluturik gabeko oinarriko aldagai horiek hartzen badira, zutabeko puntu guztietan L' eta G' konstante mantentzen dira. Aldagai horiekin masa-balantzeak egiten badira, eragiketa-lerro hauek lortzen dira:

Paraleloan:

$$Y_A = \left(-\frac{L'}{G'}\right) \cdot X_A + \frac{G' \cdot Y_{A,2} + L' \cdot X_{A,2}}{G'} \tag{13.7}$$

Kontrakorrontean:

$$Y_A = \left(\frac{L'}{G'}\right) \cdot X_A + \frac{G' \cdot Y_{A,2} - L' \cdot X_{A,2}}{G'} \tag{13.8}$$

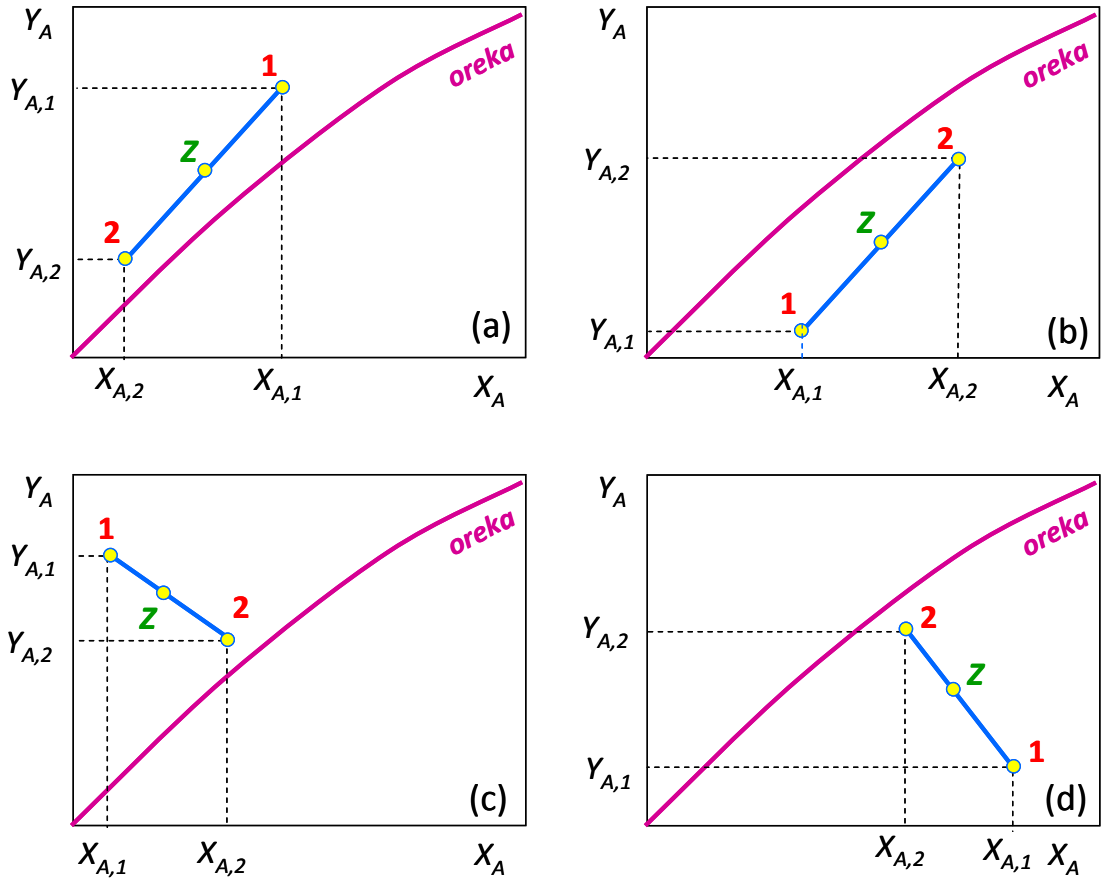


13.5 irudia. Dorre beteetako absortzioa kontrakorrontean eta paraleloan, soluturik gabeko oinarrian.

Solutuaren masa-balantzetik, likido-fasean disolbatu behar den solutu kantitatea kalkula daiteke, eta ***garbitze-maila*** deritzo:

$$G' \cdot \left(Y_{A,1} - Y_{A,2} \right) \tag{13.9}$$

Y_A vs X_A diagraman orekari dagokion lerroa marraztu da. Gas-likido oreka edozein modutakoa izan daitekeenez (Henry-ren legea bete dezake, edo erlazio ez-linealari jarrai diezaioke), 13.6 irudian oreka-erlazio generikoa agertzen da —orekako kontzentrazioak Y_A eta X_A moduan emanda daude—.



13.6 irudia. Eragiketa-lerroak eta oreka hainbat kasutarako: (a) absortzioa kontrakorrontean; (b) desortzioa kontrakorrontean; (c) absortzioa paraleloan; eta (d) desortzioa paraleloan.

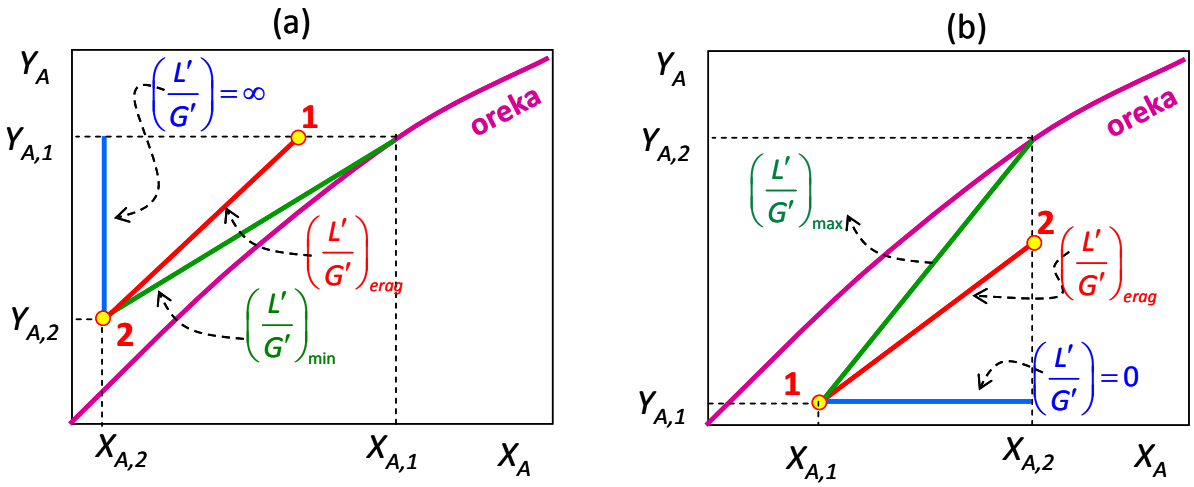
13.7 eta 13.8 ekuazioetan emandako eragiketa-lerroak lerro zuzenak dira Y_A vs X_A diagraman, eta zutabeko 1 eta 2 puntuak biltzen ditu (13.6 irudia). Lerro honetako *Z* puntuak adierazten du dorre beteko *Z* puntuan solutua nola banatzen den bi faseetan, hau da, likido- eta gas-faseetako kontzentrazioen berri ematen du. Irudiari erreparatuta, absortzioan, eragiketa-lerroaren puntu guztietan, gas-faseko Aren kontzentrazioa orekako kontzentrazioa baino handiagoa da (eragiketa-lerroa orekaren goialdean dago). Desortzioa gertatuko balitz, eragiketa-lerroak berdinak izango lirateke (13.7 eta 13.8 ekuazioak, paraleloan eta kontrakorrontean egiten direnerako, hurrenez hurren), baina bi lerroak orekaren azpialdean kokatuko lirateke.

Absortzio-eragiketan garbitu nahi den gas-emaria, gasaren konposizioa eta lanerako presioa finkatuta egon ohi dira. Dorre betearen barnean jariagaien presio-erorketa, garbitze-maila eta disolbatzailearen aukera zehaztuta egon daitezke, edo, beste kasu batzuetan, diseinatzailearen esku dago haiek ezartzea. Datu guztiak kontuan harturik, ingeniari kimikoak

zutabe barruko betegarria, zutabearen diametroa, zutabearen altuera eta likido/gas erlazio ekonomikoenari buruz erabaki behar du.

13.4.1 Disolbatzaile-emari minimoa absortzioa kontrakorrontean gertatzean

Kontrakorrontean lan eginez, absortzio-eragiketa batekin solutuaren kontzentrazioa $Y_{A,1}$ izatetik $Y_{A,2}$ izatera murriztu nahi da disolbatzaile likido egokia erabiliz (ikusi 13.7(a) irudia). Demagun erabiliko den disolbatzaile likidoan solutuaren kontzentrazioa $X_{A,2}$ dela (disolbatzaile purua bada zero izango litzateke, baina gerta daiteke disolbatzaileak solutu apur bat edukitzea). Solutuari egindako masa-balantzearen arabera, gas-fasetik bereizi behar den solutu-emaria $G'\cdot(Y_{A,1} - Y_{A,2})$ da.



13.7 irudia. Eragiketa-lerroak disolbatzaile-emari infinituarentzat, minimoarentzat eta eragiketa-errealarentzat (a) absortzioan; (b) desortzioan.

Garbitze-maila jakin bat lortzeko oso disolbatzaile-emari handia erabiltzen bada ($L \rightarrow \infty$), eragiketa-lerroaren malda infinitua da (13.7 irudian, lerro bertikala). Modu horretan lan eginez bereizte-maila maximoa lortzen den arren [$G'\cdot(Y_{A,1} - Y_{A,2})$] eragiketa-kostuak handiegiak izango liratekeenez, horrela ez da lanik egiten.

Likido-emaria gutxitzen bada, eragiketa-lerroaren malda apaldu egiten da. Likidoaren emaria txikitzen jarraitzen bada, eragiketa-lerroak oreka ukituko luke, eta hori gertatzen denean malda minimoa da ($(L'/G')_{min}$). Hori baino malda txikiagorik (likido-emari gutxiagorik) ezin da erabili, eragiketa-lerroak oreka-lerroa zeharkatuko bailuke. Likido-emari minimoarekin lan egitean, disolbatzailearen kostuak minimoak izango lirateke, baina zutabe azpiko inguruetan (1 puntua) masa-transferentziarako indar eragilea (eragiketa-lerroa eta oreka-lerroaren arteko distantzia) oso txikia denez, zutabeak altuera handiegia behar du, eta, horrenbestez, kostu finkoak izugarri handitzen dira. Hori saihesteko, likido-emari minimoa baino gehiago erabiltzen da, $(L'/G')_{erag}$, alegia. Printzipio heuristikoetan oinarrituz, absortzio prozesuetarako $\left(\frac{L'}{G'}\right)_{erag} \approx 1{,}4\cdot\left(\frac{L'}{G'}\right)_{min}$ erabili ohi da.

13.4.2 Gas-emari minimoa desortzioa kontrakorrontean egitean

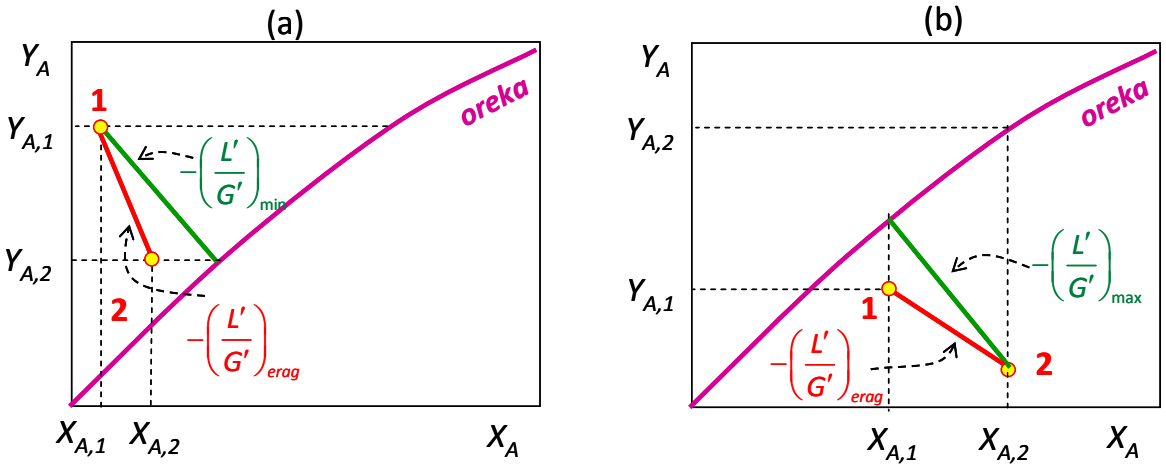
Era berean, desortzio-eragiketa kontrakorrontean egiten bada, erabil daitekeen gas-emari infinitua eta minimoa daude (ikusi 13.7(b) irudia). Muturreko bi balio horiekin lan egingo balitz, eragiketa-kostuak izugarri handiak izango lirateke lehen kasuan, eta dorre betearen altuera infinitua beharko litzateke bigarren kasuan (beraz, kostu finkoak infinituak izango

lirateke). Horregatik, benetako eragiketan tarteko gas-emaria erabiltzen da, $(L'/G')_{erag}$ malda, alegia.

Printzipio heuristikoek diotenez, desortzio-prozesuetarako $\left(\frac{L'}{G'}\right)_{erag} \approx 0{,}7 \cdot \left(\frac{L'}{G'}\right)_{max}$ erabili ohi da.

13.4.3 Disolbatzaile-/gas-emari minimoa absortzioa/desortzioa paraleloan egitean

Printzipioz, ez dago inolako muga termodinamikorik paraleloan lan egitean, gas edo likidoaren emariari dagokionez. Hala ere, oreka-kurbaren itxuraren arabera, absortzioa egitean, likido-emari minimoa egon daiteke nahi den bereizte-maila lortu ahal izateko. Era berean, desortziorako ere gas-emari minimoa egon daiteke bereizte-maila finkatua lortzeko. Balio horiek 13.8 irudian agertzen dira.



Nahi den garbitze-maila:
YA,1 → YA,2

Nahi den garbitze-maila:
XA,2 → XA,1

13.8 irudia. Eragiketa errealetarako eragiketa-lerroak eta mugakoak paraleloan lan egiten duen absortziorako (a) eta desortziorako (b).

13.1 adibidea

15 ºC eta 1 atm-n, airean dagoen Cl_2 gasa uretan disolba daiteke. Marraztu dezagun oreka-erlazioa P_{Cl2} vs x_{Cl2}, y_{Cl2} vs x_{Cl2} eta Y_{Cl2} vs X_{Cl2} diagrametan, $0 \leq X_{Cl2} \leq 10^{-3}$ tarterako.

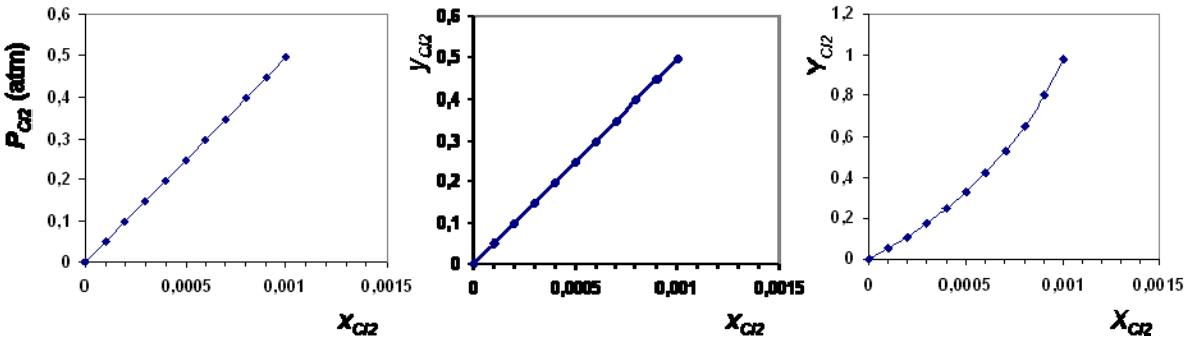
Datuak: oreka-erlazioa P_{Cl2} *(atm)* $= 495 \cdot x_{Cl2}$ da; P_{Cl2} (atm) aireko kloroaren presio partziala da, eta x_{Cl2} uretako kloroaren mol-frakzioa.

Ebazpena

Dalton-en legearen arabera, $y_{Cl_2} = \frac{P_{Cl_2}}{P}$ da. Soluturik gabeko oinarrian mol-frakzioak kalkulatzeko, 13.5 eta 13.6 ekuazioak erabiliko dira. Oreka-lerroaren muturra $X_{Cl2} = 10^{-3}$ bada, $x_{Cl2} \approx 10^{-3}$ da, eta, ondorioz, $P_{Cl2} \leq 0{,}495$ eta $Y_{Cl2} \leq 0{,}495$ dira. Ondoko taula eraiki da, x_{Cl2}-ri balioak emanez; taulako beste zutabeetan, X_{Cl2}, P_{Cl2}, y_{Cl2}, Y_{Cl2} kalkulatu dira.

x_{Cl2}	X_{Cl2}	P_{Cl2} (atm)	y_{Cl2}	Y_{Cl2}
0	0	0	0	0
0,0001	0,00010	0,050	0,050	0,052
0,0002	0,00020	0,099	0,099	0,110
0,0003	0,00030	0,149	0,149	0,174
0,0004	0,00040	0,198	0,198	0,247
0,0005	0,00050	0,248	0,248	0,329
0,0006	0,00060	0,297	0,297	0,422
0,0007	0,00070	0,347	0,347	0,530
0,0008	0,00080	0,396	0,396	0,656
0,0009	0,00090	0,446	0,446	0,803
0,001	0,00100	0,495	0,495	0,980

Taulako datuak irudikatuta, oreka-diagrama hauek lortu dira:



13.2 adibidea

15 ºC-an eta 1 atm-an Cl_2-a daukan airea (molen % 50 Cl_2) garbitu nahi da; edukia % 20raino gutxitu nahi da. Horretarako, dorre bete batean, ur garbiarekin kontaktuan ipiniko da, kontrakorrontean. Kalkula ditzagun (a) zer ur-emari minimo erabil daitekeen, eta (b) minimoa baino % 50 ur gehiago sartzen bada, zutabetik irteten den likidoaren Cl_2-edukia.

Ebazpena

Soluturik gabeko oinarriko oreka-datuak 13.1 adibidean lortu dira. A Cl_2-ari deituz:

Kalkulurako oinarria: 100 kmol/h aire "zikin" (G_1 = 100 kmol/h) hartzen bada.

(1) Puntuan (behealdea): G' = 50 kmol/h aire, $Y_{A,1}$ = 1 izanik.

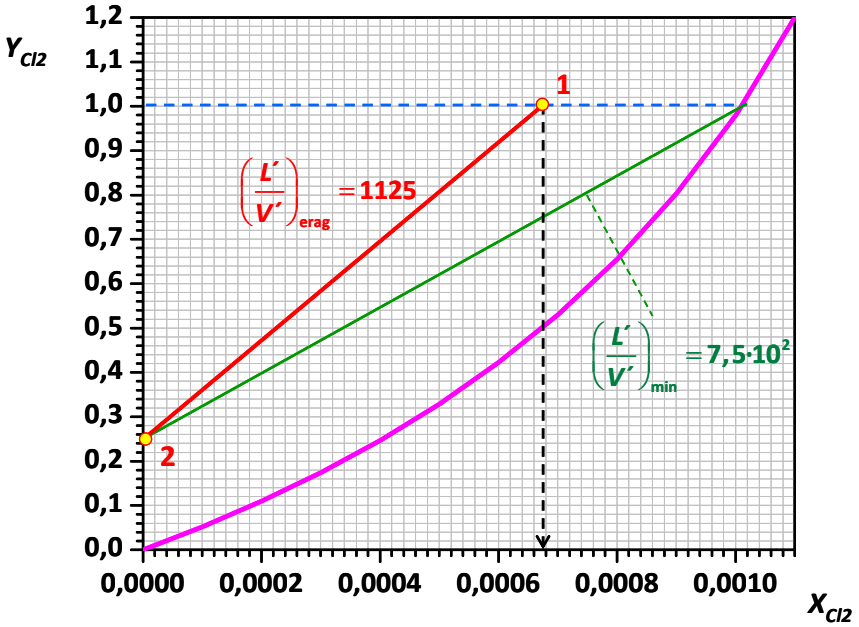
(2) Puntuan (goialdea): G' = 50 kmol/h aire, $Y_{A,2}$ = 0,2/0,8 = 0,25 eta L' ezezaguna da, $X_{A,2}$ = 0 da.

Y_A vs X_A grafikoan, oreka-lerroa marraztu da. Modu berean, zutabearen goialdeko 2 puntua marraztuko da (0, 0,25) puntua, alegia.

(a) Zer ur-emari minimo erabili behar den kalkulatzeko, 2 puntutik abiatzen den eta ($0,25 < Y_A < 1$) tartean oreka-kurbaren ukitzailea den lerro zuzena marraztuko da, eta haren malda kalkulatuko da:

$(L'/G')_{min} = 7,5\cdot10^2$. Beraz, $L'_{min} = 3,75\cdot10^4$ kmol/h da.

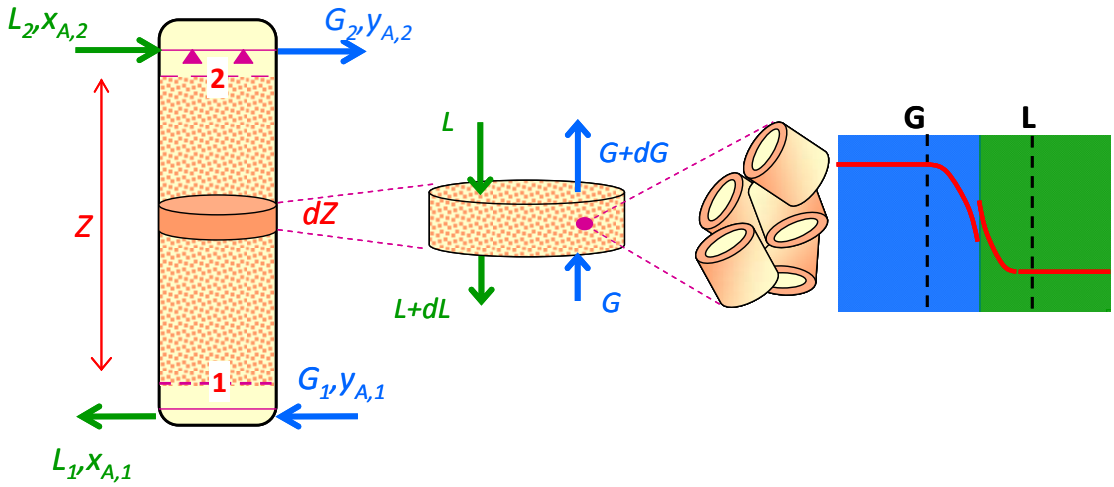
(b) Eragiketan erabiliko den $(L'/G')_{erag}$ = 1125 da.



Zutabearen azpialdetik irteten den likidoaren kloro-edukia X_A = 6,7·10^{-4} dela ikusten da grafikoan; beraz, $x_A \approx$ 6,7·10^{-4} da.

13.5 ABSORTZIO ETA DESORTZIORAKO DORRE BETEEN ALTUERAREN KALKULUA

Absortzio- edo desortzio-eragiketa dorre betean egiten denean, dorreak behar duen gutxieneko altueraren kalkulua azalduko da. Horretarako, kontrakorrontean diharduen absortzio-eragiketa aukeratuko da. 13.9 irudiko dorre betean *dZ* altuerako xafla hartu da; zati horretan, A osagaiaren kantitate txiki bat gasetik likidora pasatzen da, faseartean zehar. Egoera geldikorrean badihardu:



13.9 irudia. Dorre betean *dZ* altuerako xafla, eta hor gertatzen den masa-transferentzia.

Honela idatz daiteke *dZ* altuerako xaflan gertatzen den Aren masa-transferentziaren abiadura:

$$dN_A = k_y \cdot dA \cdot (y_A - y_{A,i}) = k_x \cdot dA \cdot (x_{A,i} - x_A) \qquad (13.10)$$

$$dN_A = K_y \cdot dA \cdot (y_A - y_A^*) = K_x \cdot dA \cdot (x_A^* - x_A) \qquad (13.11)$$

Xafla horretan fasearteko azalera *dA* = a·S·dZ gisa adieraziko da, *S* dorrearen sekzioa izanik. *a* parametroa masa-transferentziarako azalera da (bolumen-unitateko betegarriak eskaintzen duen azalera).

$$dN_A = k_y \cdot a \cdot S \cdot dZ \cdot (y_A - y_{A,i}) = k_x \cdot a \cdot S \cdot dZ \cdot (x_{A,i} - x_A) \qquad (13.12)$$

$$dN_A = K_y \cdot a \cdot S \cdot dZ \cdot (y_A - y_A^*) = K_x \cdot a \cdot S \cdot dZ \cdot (x_A^* - x_A) \qquad (13.13)$$

Era berean, $dN_A = d(V \cdot y_A) = -d(L \cdot y_A)$ denez, gas-faserako deribatzen bada:

$$dN_A = d(G \cdot y_A) = d\left(G' \cdot \frac{y_A}{1 - y_A}\right) = G' \cdot \frac{dy_A}{(1 - y_A)^2} = G \cdot \frac{dy_A}{(1 - y_A)} \qquad (13.14)$$

Beraz, $G \cdot \frac{dy_A}{(1 - y_A)} = k_y \cdot a \cdot S \cdot dZ \cdot (y_A - y_{A,i})$ ekuazioa zutabeko 1 eta 2 puntuen artean integratuz, dorre beteak behar duen gutxieneko altuera kalkula daiteke. Horretarako, zutabe osoan $k_y \cdot a$ eta *G*-aren batez besteko balioak erabiliko dira.

$$\left(\overline{\frac{G}{k_y \cdot a \cdot S}}\right) \cdot \int_{y_{A,1}}^{y_{A,2}} \frac{dy_A}{(1 - y_A) \cdot (y_A - y_{A,i})} = Z \qquad (13.15)$$

$\left(\overline{\frac{G}{k_y \cdot a \cdot S}}\right)$ terminoak luzera dimentsioa du, eta gas-fasean oinarritutako ***transferentziarako unitatearen altuera*** gisa ezagutzen da (***HTU$_g$***, *Height of the Transfer Unit*). Haren balioa zutabean tratatzen den emariaren araberakoa eta betegarriak eskaintzen dituen propietateen araberakoa da. Esanahi fisiko hau du: tratatu behar den emariarekin eta dorrea eraikita dagoen betegarriarekin, masa-transferentzia gerta dadin unitateak izan behar duen altuera, hau da, betegarriaren eraginkortasuna.

$\int_{y_{A,1}}^{y_{A,2}} \frac{dy_A}{(1 - y_A) \cdot (y_A - y_{A,i})}$ terminoa dimentsiogabea da, eta gas-fasean oinarritutako ***transferentziarako altuera unitatea*** (***NTU$_g$***, *Number of Transfer Unit*) deritzo. Eragiketaren zailtasunaren berri ematen du: zenbat eta zailagoa den bereiztea, orduan eta handiagoa izango da NTU_g.

Dorre betearen altuera, Z, honela kalkulatuko da:

$$Z = HTU_g \cdot NTU_g \qquad (13.16)$$

Gas-fasea oinarritzat erabili ordez, likido-fasea erabili izan balitz, honela kalkulatuko litzateke dorrearen altuera:

$$\left(\overline{\frac{L}{k_x \cdot a \cdot S}}\right) \cdot \int_{x_{A,1}}^{x_{A,2}} \frac{dy_A}{(1 - x_A) \cdot (x_{A,i} - x_A)} = Z \qquad (13.17)$$

$\left(\overline{\dfrac{L}{k_x \cdot a \cdot S}}\right)$ = HTU_l: likido-fasean oinarritutako transferentziarako unitatearen altuera gisa ezagutzen da (HTU_l, *Height of the Transfer Unit*).

$\displaystyle\int_{x_{A,1}}^{x_{A,2}} \frac{dx_A}{(1-x_A)\cdot(x_{A,i}-x_A)}$ = NTU_l: likido-fasean oinarritutako transferentziarako altuera unitatea (NTU_L, *Number of Transfer Unit*).

Dorre betearen altuera, Z, honela kalkulatuko da:

$$Z = HTU_l \cdot NTU_l \tag{13.18}$$

Masa-transferentziarako koefiziente globalak erabiliko balira, prozedura hau erabiliko litzateke:

Oinarria	*NTU*	*HTU*	*Z*
Gas-fasea	$\left(\overline{\dfrac{G}{\overline{K_y} \cdot a \cdot S}}\right)$ = $HTU_{O,g}$	$\displaystyle\int_{y_{A,1}}^{y_{A,2}} \frac{dy_A}{(1-y_A)\cdot(y_A - y_A^*)}$ = $NTU_{O,g}$	$HTU_{O,g} \cdot NTU_{O,g}$
Likido-fasea	$\left(\overline{\dfrac{L}{\overline{K_x} \cdot a \cdot S}}\right)$ = $HTU_{O,l}$	$\displaystyle\int_{x_{A,1}}^{x_{A,2}} \frac{dx_A}{(1-x_A)\cdot(x_A^* - x_A)}$ = $NTU_{O,l}$	$HTU_{O,l} \cdot NTU_{O,l}$

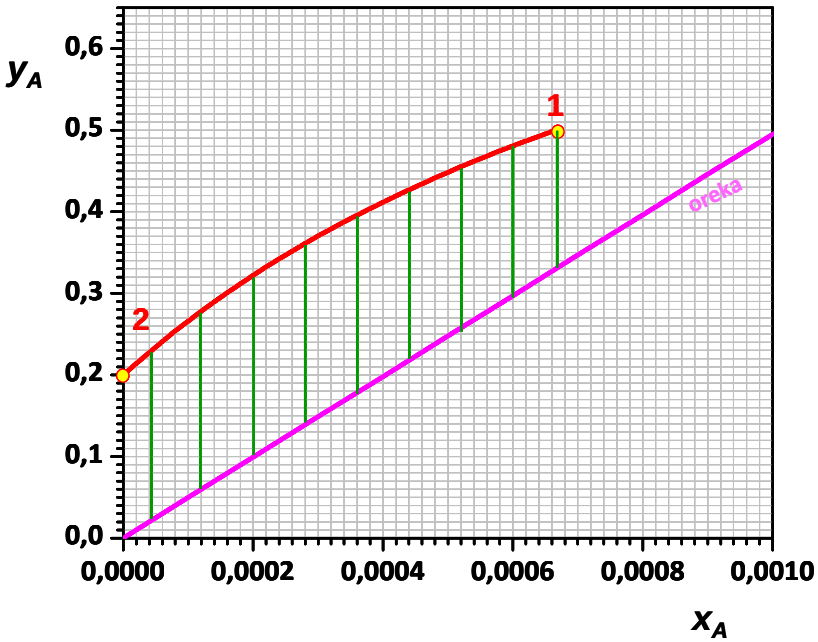
13.3 adibidea

13.2 adibideko eragiketa burutzeko, kalkula dezagun dorre beteak gutxienez zer altuera izan behar duen, 100 kmol/h aire "zikin" elikatzen badira.

Datuak: eragiketa-baldintzetan sistema honentzat $\overline{K_y} \cdot a$ = 50 kmol/hm^3 dela hartuko da. Dorre betearen sekzioa S = 1 m^2 da.

Ebazpena

Sistema honentzat y_{Cl2} vs x_{Cl2} diagramarako oreka kalkulatu da. Kloroa solutua denez, A osagaia izango da aurrerantzean. $y_{A,1}$ = 0,5 izatetik $y_{A,2}$ = 0,2 izatera murriztu nahi da. Gas-faseko koefiziente globala erabiltzen bada, integrala ebazteko y_A^* balioak kalkulatu behar dira zutabeko hainbat puntutarako (10. gaian azaldu da nola kalkulatzen den).



Dorre beteko 1 eta 2 puntuen arteko balio batzuekin taula hau bete da:

y_A	$1-y_A$	y_A^*	$(y_A - y_A^*)$	$\frac{1}{(1-y_A)\cdot(y_A - y_A^*)}$
0,500	0,500	0,34	0,160	12,500
0,481	0,519	0,3	0,181	10,659
0,455	0,545	0,26	0,195	9,405
0,427	0,573	0,22	0,207	8,431
0,396	0,604	0,18	0,216	7,669
0,361	0,639	0,14	0,221	7,080
0,322	0,678	0,1	0,222	6,643
0,278	0,722	0,06	0,218	6,354
0,200	0,800	0,02	0,180	6,944

Integralaren ebazpen grafikoa egiteko, taulako azken zutabea vs. lehen zutabea irudikatuko da. Azpiko azalera kalkulatuz, $NTU_{O,g}$ = 2,31 da.
$HTU_{O,g}$ kalkulatzeko:

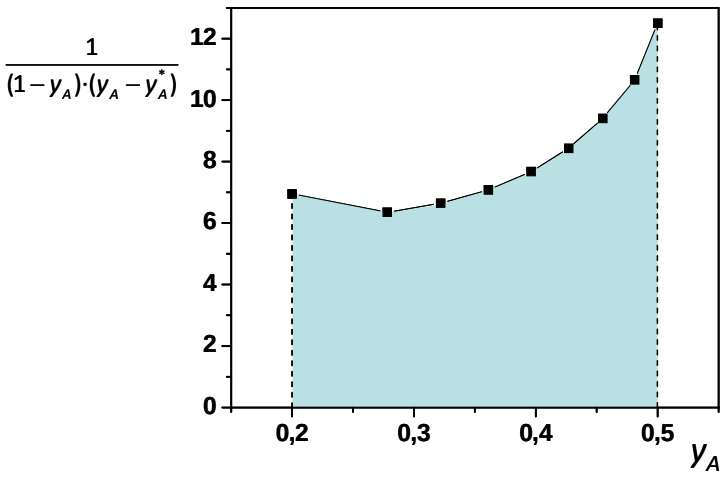
Zutabeko (2) puntuan G_2 = 100 kmol/h da.

Zutabeko (1) puntuan G_1 = 62,5 kmol/h (50 kmol/h aire garbi eta 12,5 kmol/h Cl_2)

Zutabe osorako batez besteko G = 81,25 kmol/h da.

$$HTU_{O,g} = \left(\frac{\overline{G}}{\overline{K_y}\cdot a\cdot S}\right) = \frac{81{,}25\,kmol/h}{50\,kmol/hm^3\cdot 1m^2} = 1{,}625\,m$$

Dorre betearen altuera = 3,75 m da.



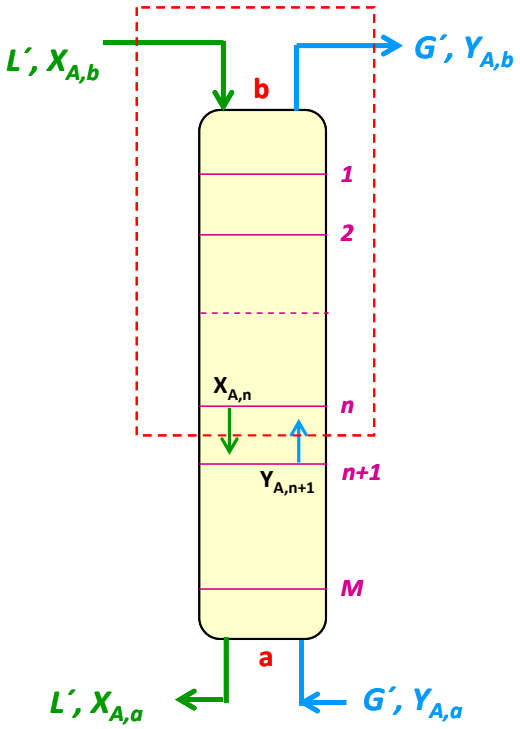
13.6 ABSORTZIOA ETA DESORTZIOA DORRE ERRETILUDUNETAN

Horrelako ekipoak destilaziorako erabilitakoen berdinak dira. Likidoak eta gasak kontrakorrontean zirkulatu behar dute, likidoa goitik behera eta gasa behetik gora.

Lehen aipatu den bezala, soluturik gabeko oinarrian emandako konposizioak erabiltzen badira, hau da kontrakorrontean egiten den absortzio baterako eragiketa-lerroa, zutabearen azpialdeari **a** eta zutabearen goialdeari **b** deituz:

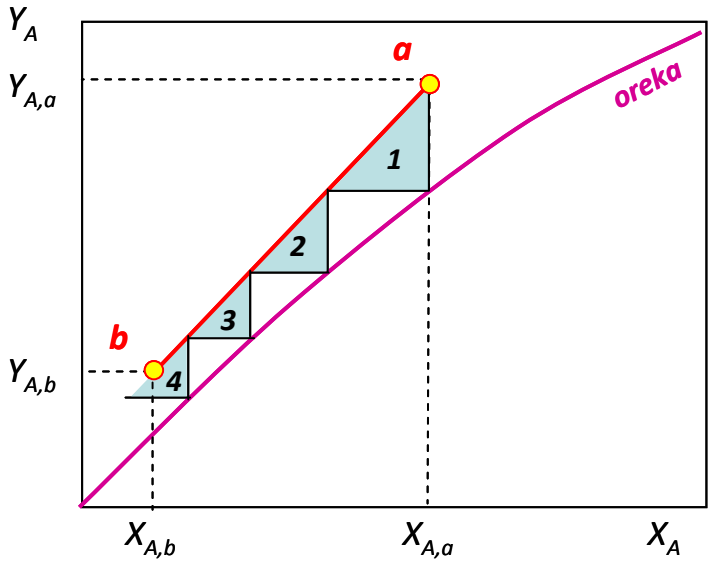
$$Y_A = \left(\frac{L'}{G'}\right)\cdot X_A + \frac{G'\cdot Y_{A,b} - L'\cdot X_{A,b}}{G'}$$

Lerro zuzen horrek zutabeko edozein puntuan gora doan gaseko eta behera doan likidoko solutuaren kontzentrazioak erlazionatzen ditu, 13.10 irudian agertzen den bezala.



13.10 irudia. Dorre erretiluduneko absortzio-eragiketa.

Eragiketa burutzeko zenbat etapa behar diren McCabe-Thiele-ren metodo grafikoaz kalkulatzen da —destilazioan egiten den antzera—, erretilu bakoitzean gasa eta likidoa orekan irteten direla kontuan harturik. 13.11 irudian agertzen da ekipo erretiludun bateko absortzio-eragiketa egiteko behar den erretilu kantitatea kalkulatzeko ebazpen grafikoa. Marraztu den adibidean lau etapa teoriko behar direnez, lau erretiluz eraikitako dorrea erabili beharko litzateke, erretiluen eraginkortasuna % 100 dela hartzen bada.



13.11 irudia. Absortzioa gertatzeko behar den erretilu kantitatearen ebazpen grafikoa.

13.4 adibidea

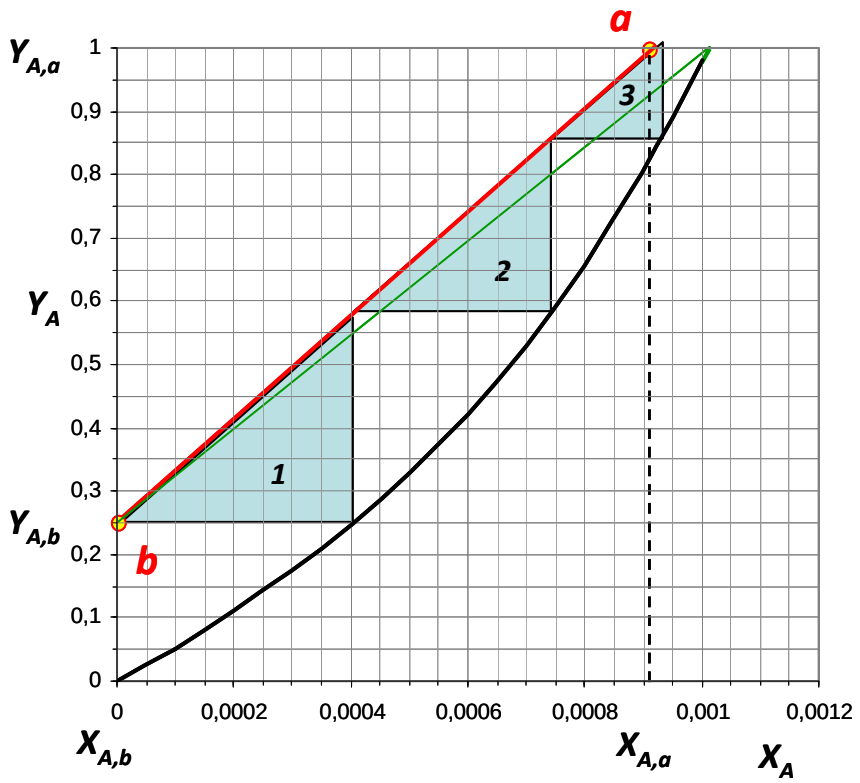
15 ºC-an eta 1 atm-an, Cl_2-a daukan airea (molen % 50 Cl_2) garbitu nahi da; edukia % 20raino gutxitu nahi da. Horretarako, dorre erretiludunean, ur garbiarekin kontaktuan ipiniko da, kontrakorrontean. Kalkula ditzagun (a) minimoa baino % 10 ur gehiago sartzen bada, zutabetik irteten den likidoaren Cl_2-edukia, (b) horretarako zenbat erretilu behar diren.

Ebazpena

Gas "zikinaren" 100 kmol/h-eko emaria hartzen bada, G' = 50 kmol/h eta $Y_{A,a}$ = 1 lortzen da. Erabiltzen den likidoa garbia denez, $X_{A,b}$ = 0 da. Irteerako gasean solutuaren kontzentrazioa $Y_{A,b}$ = 0,25 izatea nahi da.

(a) (2) adibidean kalkulatu da $(L'/G')_{min}$ = 750 dela. Eragiketan erabili beharreko malda, berriz, 8.125 izanik, Y_A vs X_A diagraman marraztu da. Grafikoan begiratuz, likidoan irteten den solutuaren kontzentrazioa $X_{A,a}$ = 0,00091 da.

(b) Erretiluak zenbatzeko, eskailerak marraztuko dira, **a** puntutik hasita eta **b** punturaino. Irudiaren arabera 4 erretilu beharko lirateke eragiketa burutzeko.


a
b
1
2
3
$Y_{A,a}$
Y_A
$Y_{A,b}$
1
0,9
0,8
0,7
0,6
0,5
0,4
0,3
0,2
0,1
0
0
0,0002
0,0004
0,0006
0,0008
0,001
0,0012
$X_{A,b}$
$X_{A,a}$
X_A

14. GAIA

LIKIDO-LIKIDO OREKA ETA ERAUZKETA

Erauzketarekin, jatorrizko nahastearekin partzialki disolbaezina den disolbatzaile likidoaz kontaktuan jarriz bereizten dira likido-egoerako nahasteko osagaiak (solutua). Solutua bigarren likidoan disolbatzeko prozesua, propietate fisikoen desberdintasunean baino gehiago, desberdintasun kimikoan oinarritzen den eragiketa da. Kontaktuan jarri ondoren, dentsitate-desberdintasunagatik bereizten dira bi faseak. Bereiztea eraginkorra izan dadin aukeratu behar den disolbatzaileak solutuarentzako afinitate handiagoa izan behar du. Erauzketa burutu ondoren, destilazioan ez bezala konposatu berri bat gehitu zaionez, solutua eta disolbatzailea bereizi behar dira. Likido-likido eragiketen aplikazio industrialaren adibide gisa, hauek aipa daitezke: propano likidoarekin arrainen gibeleko oliotik A eta D bitaminak erauztea, HF erabiliz *p*-xilenoa erauztea *o*-xilenoak eta *m*-xilenoak osatutako nahastetik, eta bentzenoz amonio sulfato disoluziotik kaprolaktama erauztea.

14.1 LIKIDO-LIKIDO OREKA

Fase biko sistema orekan badago, bi faseetako tenperaturak eta presioak berdinak izateaz gainera, bi faseetako potentzial kimikoek berdinak izan behar dute:

$$\mu_i^{\,I} = \mu_i^{\,II} \tag{14.1}$$

Ekuazio hori garatzean, aktibitate-koefizienteen eta mol-frakzioen funtziora murrizten da, eta likido-likido orekan baldintza hau betetzen da osagai bakoitzarentzat:

$$(\gamma_i \cdot x_i)^I = (\gamma_i \cdot x_i)^{II} \tag{14.2}$$

14.2 NAHASTE HIRUTARREN KONPOSIZIOA IRUDIKATZEKO DIAGRAMAK

Likido-likido erauzketak eta sistemen orekak triangelu-diagrametan zein diagrama cartesiarrean irudika daitezke.

Likido-likido erauzketaren kasurik sinpleenak hiru konposatu likido dauzka (nahaste hirutarra). Bereizi nahi den nahastea solutuaz (C) eta diluitzaileaz (A) osatuta dago (elkar guztiz disolbagarriak direnez, biak fase bakarrean daude). Nahaste horri disolbatzailea (B) gehitzen zaio, jatorrizko fasearekin partzialki nahastezina dena. Ondorioz, bi fase sortzen dira; bata, A osagaitan aberatsa den fase Findua (hemendik aurrera *R*) eta bestea, disolbatzailetan aberatsa den fase Erauzia (hemendik aurrera *E*). C solutua bi faseetan banatzen da, A eta B osagaietan daukan disolbagarritasun handiagatik.

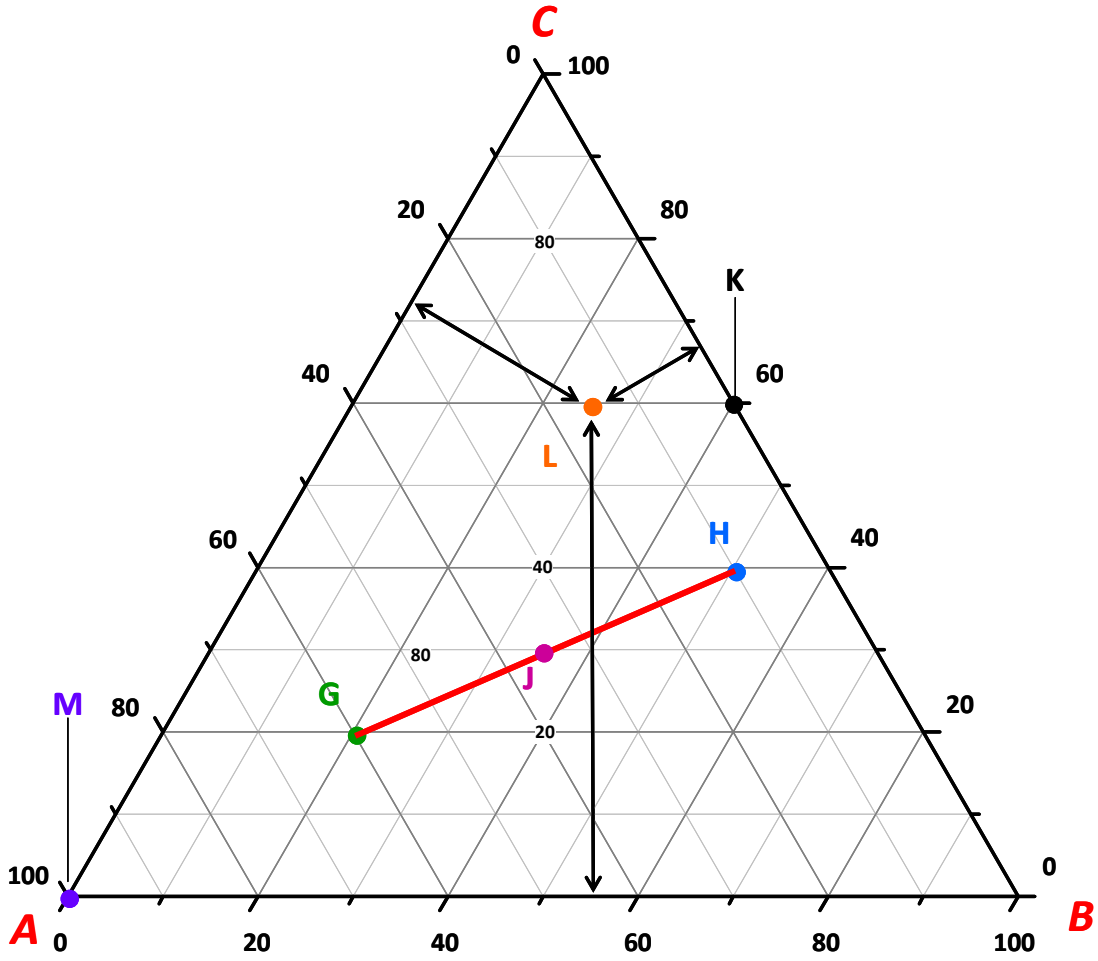
14.2.1 Triangelu-diagramak

Diagrama triangelu aldeberdin batean marrazten da. Erpin bakoitzean osagai bat irudikatzen da. Diagrama horren propietateak hauek dira, eta 14.1 irudian agertzen dira:

- Masa erako ehunekoak adierazten dira.
- Diagramako erpin bakoitzak erpin horretan irudikatutako osagaiaren % 100 adierazi nahi du (M puntuak % 100 A osagaiaz osatutako nahastea adierazten du).
- Diagramako ertz bakoitzak bi erpinetan irudikatutako osagaien nahaste bitarrak adierazten ditu. (Adibidez, K puntuak Bren % 40 eta Cren % 60 den nahastea adierazten du).
- Diagrama barruko puntuak hiru osagaien nahastea adierazten du.
- Osagai bakoitzaren ehunekoa osagaiaren erpinaren kontrako ertzetik abiatuz kalkulatzen da. Adibidez, L puntuak % 60 C (AB ertzetik hasita hirurogeigarren lerroa da, C erpinerantz mugituz), % 25 B (CA ertzetik hasita, B erpineranzko hamargarren lerroa da) eta % 15 A dauka.

- G konposizioko nahaste bati H konposizioko nahastea gehitzen bazaio, nahaste erresultantea (J) GH lerroaren gaineko punturen batean kokatzen da, nahasten diren emarien arabera. Era berean, G konposizioko nahaste bati J konposizioko nahastea kentzen bazaio, nahaste erresultantea GJ lerro zuzenaren luzapenean kokatzen da (*palankaren erregela*).

$$G(kg)\cdot\overline{GJ} = H(kg)\cdot\overline{JH}\ ^{1} \qquad (14.3)$$



14.1 irudia. Triangelu-diagrama.

Hala, G konposizioko 100 kg eta H konposizioko 100 kg nahasten badira, J nahaste erresultanteak 200 kg dauzka, honela: 60 kg C, 70 kg A eta 70 kg. Beraz, Jren konposizioa % 30 C, % 35 A eta % 35 B da.

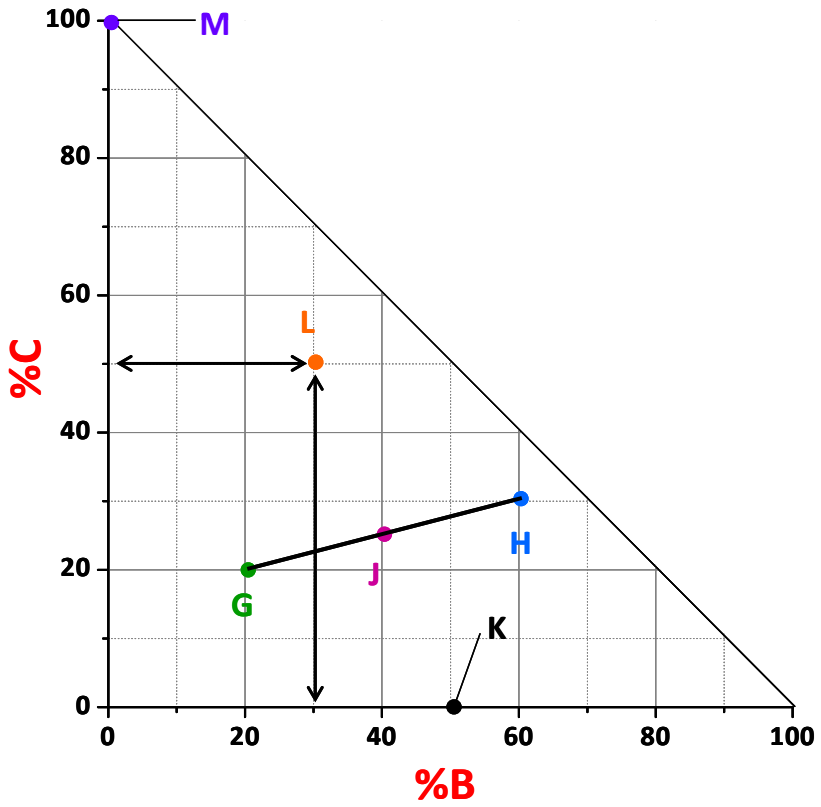
14.2.2 Diagrama cartesiarrak

Nahaste hirutarrean hiru osagaien ehunekoen baturak ehun izan behar duenez, hiru osagaietatik biren ehunekoak definitzen badira, hirugarrenarena finkatuta gelditzen da. Horregatik, diagrama cartesiarra erabil daiteke, bi osagairen ehunekoak irudikatuz bakarrik. Solutua (C) ordenatuen ardatzean eta disolbatzailea (B) abzisen ardatzean irudikatzea da ohikoena.

Diagrama honen propietateak, triangelu-diagramarenak bezalakoak dira, salbuespen hauekin:

[1] Emariak balira, masa/denbora erabiliko litzateke.

- Ordenatuan, Cren ehunekoa adierazten da (M puntuak % 100 C den nahastea adierazten du); abszisan, berriz, Bren ehunekoa adierazten da. Ordenatuko puntuek ez daukate Brik, A eta Cren nahasteak dira; abszisako puntuek, berriz, ez daukate Crik (A eta Bren nahasteak dira).
- Diagramako ertz bakoitzak ertzak biltzen dituen erpinetan irudikatutako osagaien nahaste bitarra adierazten du. (Adibidez, K puntuak % 50 B eta % 50 A den nahastea adierazten du).
- C eta Bren ehunekoak diagraman irakurtzen dira. A osagaiaren ehunekoa 100 – (% C + % B) da. Adibidez, L puntuko konposizioa % 50 C, % 30 B eta % 20 A da.
- G konposizioko nahaste bati H konposizioko nahastea gehitzen bazaio, nahaste erresultantea (J) GH lerroaren gaineko punturen batean kokatzen da, nahasten diren emarien arabera. Era berean, G konposizioko nahaste bati J konposizioko nahastea kentzen bazaio, nahaste erresultantea GJ lerro zuzenaren luzapenean kokatzen da (*palankaren-erregela*).



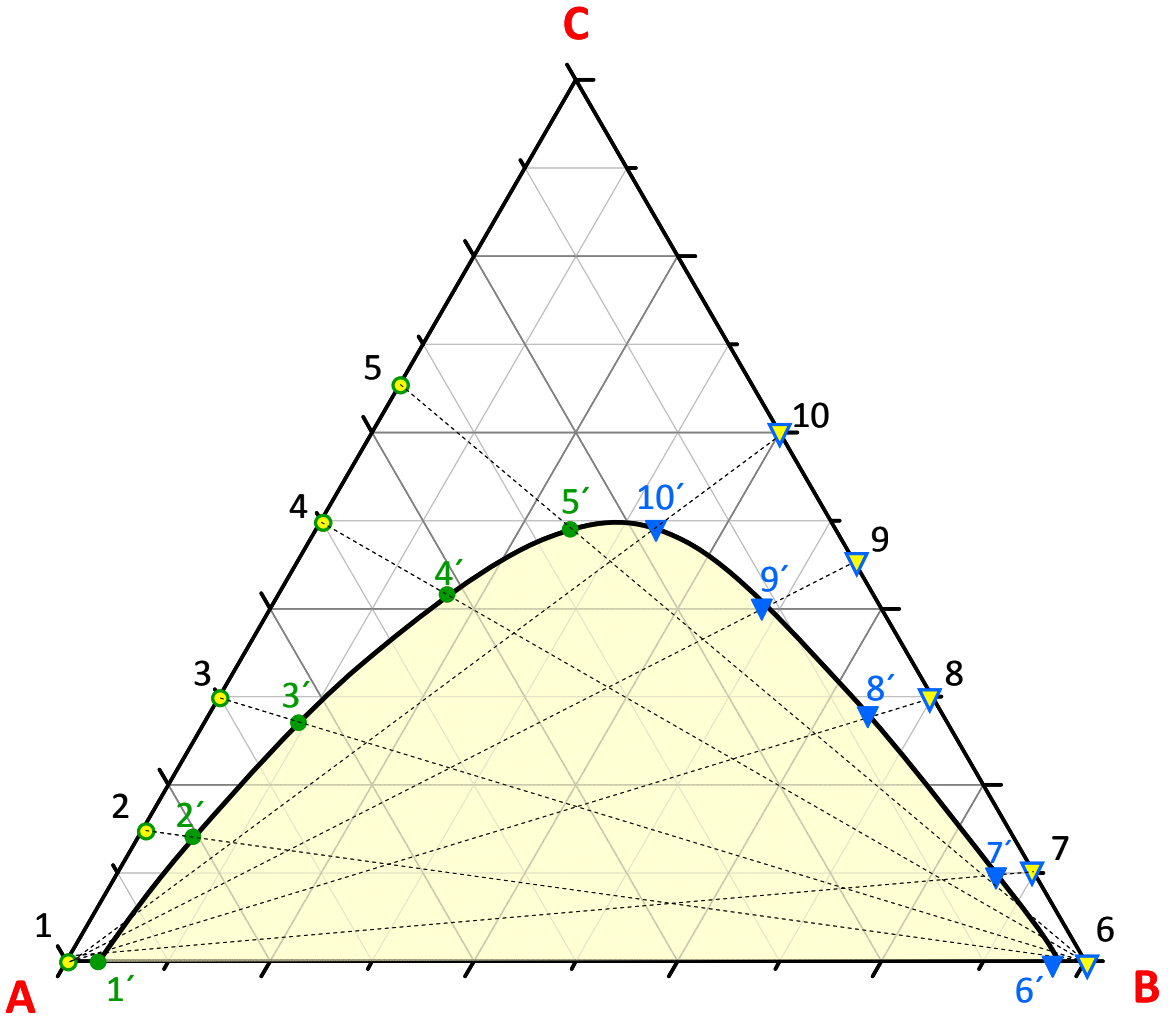
14.2 irudia. Diagrama cartesiarra.

14.3 DISOLBAGARRITASUN-EREMUAREN LORPEN ESPERIMENTALA

Likido-likido erauzketa egiteko, bi fase nahastezin sortu behar direnez, hiru osagaiak daudeneko disolbagarritasun-eremuak eta orekak definituta egon behar dute. A, B eta C hiru osagaiz osatutako nahaste batean, hiru bikotetatik bi guztiz disolbagarriak badira (har ditzagun C-A eta C-B bikoteak guztiz disolbagarriak direla) eta bat bakarra disolbagaitza bada (A-B bikotea disolbagaitza), disolbagarritasun-eremuaren (asetze-kurba) lorpen esperimentala, lausotze-puntuaren metodoaz lor daiteke.

Konposizio desberdineko A eta Cren nahaste bitarretatik abiatuz, irabiatzen diren bitartean, B osagaia gehitzen zaie tantaz tanta, nahastea gardena izatetik lausotzen hasten den arte; une horretan, nahastea disolbagarria izatetik disolbagaitza izateko puntua lortzen da. Modu berean, B eta Cren nahaste bitarrei A gehitzen zaie, lausotu arte. Hala lortutako puntuen leku geometrikoak disolbagarritasun-eremua definitzen du (ikusi 14.3 irudia).

1, 2, 3, 4 eta 5 nahasteei B osagaia gehitzean, nahaste bakoitzaren konposizioaren puntua Bren erpinerantz hurbilduz doa; 1´, 2´, 3´, 4´ eta 5´ puntuak lausotasuna lortu direnekoak dira; bakoitzari B gehiago gehituko bagenio, bi fase sortuko lirateke. Modu berean, 6, 7, 8, 9 eta 10 puntuek adierazten duten nahasteei A osagaia gehitzean gune lausoa agertzean 6´, 7´, 8´, 9´ eta 10´ puntuak lortzen dira. 1´-2´-3´-4´-5´-10´-9´-8´-7´-6´ lerroak disolbagarritasun-eremua definitzen du; eremu barruko nahasteak disolbagaitzak dira, eta orekan dauden bi fasetan banatzen da. Eremutik kanpoko nahasteak fase bakarrean egon daitezke. 14.3 irudian, disolbagaitzak direneko eremua ilundutako azalerak adierazten du.



14.3 irudia. Solugarritasun eremuaren lorpen esperimentala.

Disolbagarritasun-eremua tenperaturarekin aldatzen denez, tenperatura konstantean eraiki behar da diagrama. Tenperatura igotzean, osagaiak elkarren disolbagarriagoak direnez, disolbagarritasun-eremua txikiago bihurtzen da (hau da, disolbagarriak direneko eremua zabalagoa da). Laneko presioa altuegia ez bada (<50 atm), presioak ez du eragiten disolbagarritasun-eremuaren azaleran.

14.3.1 Banatze-zuzenaren eta banatze-kurbaren lorpen esperimentala

Disolbagarritasun-eremu barruko nahasteak orekan dauden bi fasetan banatzen dira. A osagaian (diluitzailean) aberatsa den faseari ***findu*** deritzo (hemendik aurrera, *R* hizkiaz adieraziko da); B osagaian (disolbatzailean) aberatsa den faseari ***erauzia*** deritzo (aurrerantzean, *E* hizkiaz adieraziko da). ***Oreka-lerroak edo banatze-zuzenak*** fase finduko eta fase erauziko konposizioak batzen dituen lerro zuzenak dira. Ezaugarri hauek dituzte:

- Lerro zuzenak dira.
- Ez dute elkar gurutzatzen.
- Edozein malda izan dezakete; positiboa, negatiboa, zero, eta aldakorra sistema berean.
- Fase finduko (*R*) eta fase erauziko (*E*) konposizioak lotzen ditu.

Nahaste hirutar bakoitzak bere banatze-zuzenak dauzka, esperimentalki lortu beharrekoak (ez dago nahasteen banatze-zuzenak aurreikusteko lege edo adierazpenik). A, B eta C osagaiez osatutako hirukote bakoitzerako hainbat nahaste disolbagaitz prestatzen dira banatze-inbutuetan, eta oso ongi nahasten dira (hiru osagaien arteko kontaktu sakona bermatzeko) (14.4(a) irudiko 1, 2, 3 eta 4 nahasteak); ondoren, geldirik uzten dira denbora luzez, bi faseak orekaren arabera bereizi daitezen. Kontuan izan bi faseen dentsitateak desberdinak direla: fase astunena inbutuaren behealdean dago, eta haren gainean fase arinena metatuz doa. Behin oreka lortuta (luzaroan atsedenean utzi ondoren), fase bakoitzeko laginak analizatzen dira osagai bakoitzaren ehunekoa kalkulatzeko. Hala, C solutuak fase finduan eta fase erauzian dituen masa-ehunekoei $x_{R,C}$ eta $y_{E,C}$ deitzen zaie. 1 puntua *R1* fasean eta berarekin orekan dagoen *E1* fasean banatu da. Hala, *R1-E1* lerro zuzena banatze-zuzena da; berdin gertatzen da beste nahasteekin.

Efektu praktikoetarako, sistema bakoitzarentzat banatze-zuzen batzuk baino ez dira lortzen. Esperimentalki lortutako banatze-zuzenekin banatze-kurba eraikitzen da, eta esperimentalki lortu ez diren banatze-zuzenak interpolatzeko erabiltzen da.

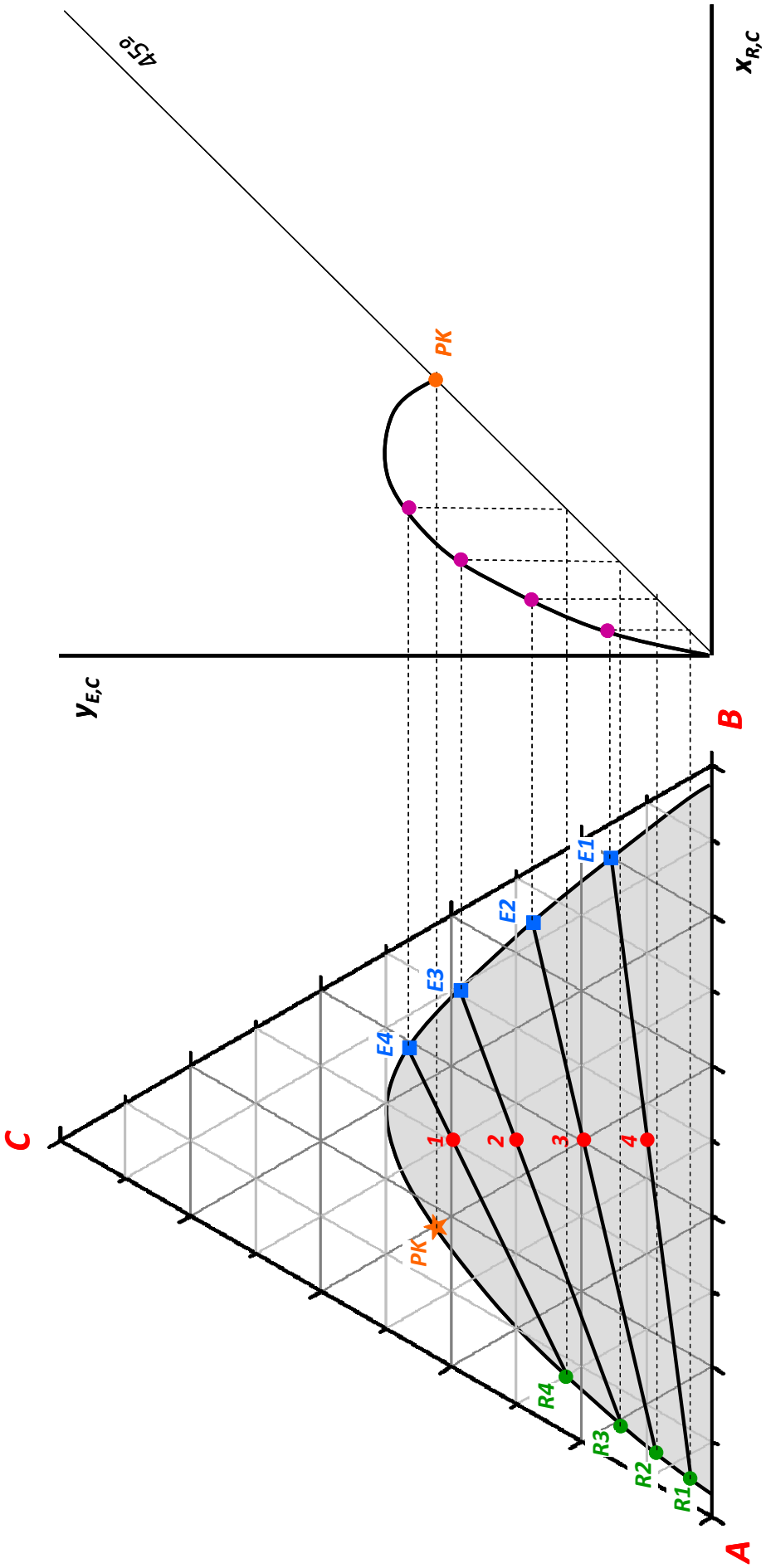
Fase erauzian solutuak duen konposizioaren eta fase horrekin orekan dagoen fase finduan solutuak duen konposizioaren arteko erlazioari ***banatze-koefiziente*** (*Kc*) deritzo, eta solutuak bi likidoekiko duen afinitatearen adierazlea da:

$$K_C = \frac{y_{E,C}}{x_{R,C}} \tag{14.4}$$

Banatze-koefizientearen balioa banatze-zuzenen maldaren araberakoa da: $K_C = 1$ denean, banatze-zuzena horizontala da; $K_C > 1$ denean, C solutuaren kontzentrazioa handiagoa da fase erauzietan fase finduetan baino; $K_C < 1$ denean, berriz, fase finduetan fase erauzietan baino handiagoa da C solutuaren kontzentrazioa.

Banatze-kurba diagrama cartesiarrean irudikatzen da, eta $x_{R,C}$ eta $y_{E,C}$ ehunekoak adierazten dira. Beraz, 14.4(a) irudiko banatze-zuzen bakoitza ($x_{R,C}$, $y_{E,C}$) koordenatuko puntu bihurtzen da diagrama horretan. 45º-ko lerroa lagungarri gisa marrazten da. Lerro horretako puntuek C-ren ehuneko bera daukate fase finduan eta fase erauzian.

14.4(b) irudian agertzen da 14.4(a) irudiko sistemari dagokion banatze-kurba, eta hau da eraikitzeko prozedura: fase finduko puntutik marra horizontala eramaten da, 45º-ko lerroarekin elkartu arte, eta, hala, horrekin, marra bertikala marrazten da. Modu berean, fase erauziko puntutik lerro horizontala marrazten da, bertikalean marraztutako lerroarekin elkartu arte.



14.4 irudia. Banatze-koefizienteen kurbaren lorpena.

14.4 irudiko PK puntuari ***puntu kritiko*** deritzo, eta sisteman fase findua eta fase erauzia puntu berean daudela adierazten du. A, B eta C osagaiez osatutako hirukote bakoitzaren konposizio kritikoa berezia da. PKri banatze-kurban dagokion PK puntua, noski, 45º-ko diagonalean kokatua dago, $x_{R,C} = y_{E,C}$ baita.

Hala eraikitako banatze-kurbarekin eta disolbagarritasun-eremuaren diagramarekin, edozein banatze-zuzen interpola daiteke. Horretarako, banatze-kurba eraikitzeko erabili den prozeduran oinarritu behar da, eta alderantzizko urratsak egin.

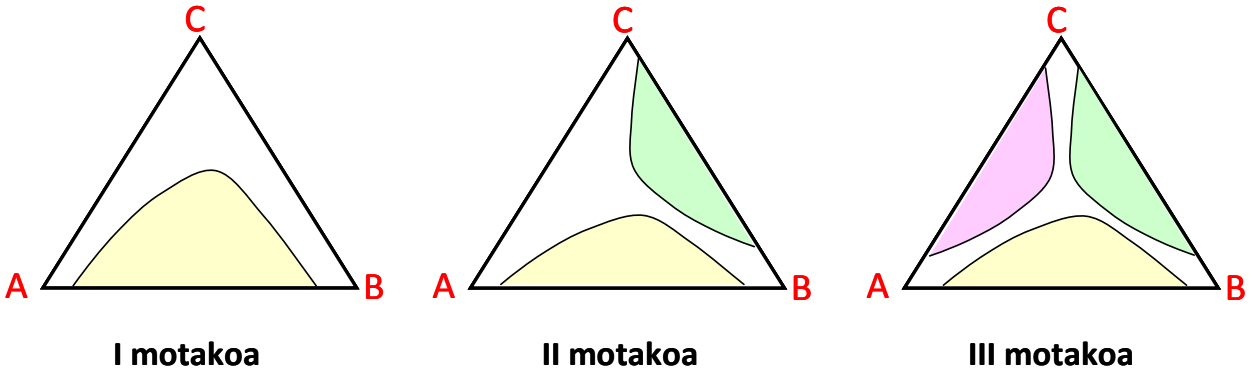
Banatze-kurbaren eraikuntza azaltzeko triangelu-diagrama erabili den arren, prozedura berberari jarraituz ere lor daiteke diagrama cartesiarra erabilita.

14.4 NAHASTE HIRUTARREN OREKA MOTAK

Likido-likido erauzketak hiru likidoren nahastea erabiltzen du. Hiru konposaturekin (A, B eta C) osatzen diren hiru bikoteen (A-B, A-C eta B-C) disolbagarritasun-mailak desberdinak izan daitezke, eta hiru motatako orekak agertzen dira:

- *I motako oreka: bikote bakarra partzialki disolbagaitza, beste biak guztiz disolbagarriak*

  Oreka mota ohikoena da. Horrelakoak dira, adibidez, ur-etanol-bentzeno edo azeton-ur-metilisobutilzetona sistemak.



14.5 irudia. Nahaste hirutar likidoen oreka motak.

- *II motako oreka: bi bikote partzialki disolbagaitzak, bikote bakarra guztiz disolbagarria*

  Irudian, A-C bikotea hartu da guztiz disolbagarri gisa. Gerta daiteke bi disolbagarritasun-eremuek bat egitea, hots, eremu bakarra izatea. Horrelakoak dira, adibidez, ur-metiletilzetona-klorobentzeno edo n-hexano-anilina-metilziklopentano sistemak.

- *III motako oreka: hiru bikoteak partzialki disolbagaitzak*

  Ez dira oso ugariak, eta industria-mailako eragiketetan ez daukate aplikaziorik. Gerta daiteke hiru disolbagarritasun-eremuek bat egitea, hots, eremu bakarra izatea. Horrelakoa da, adibidez, nitrometano-etilenglikol-alkohol lauriko sistema.

14.5 LIKIDO-LIKIDO ERAUZKETARAKO DISOLBATZAILEA AUKERATZEA

Likido-likido erauzketaz solutua behar bezala bereizteko erabiltzen den disolbatzaileak baldintza batzuk bete behar ditu; besteak beste, hauek:

(a) Banatze-koefizientea (K_C)

Solutu bakarra badago, bereizte-maila handia izan dadin, K_C ahalik eta handiena izatea komeni da. Ohartu gaitezen $K_C = 1$ bada bereiztea lortzen dela, baina, $K_C > 1$ den heinean, fase erauzian kontzentratuago lortzen dela.

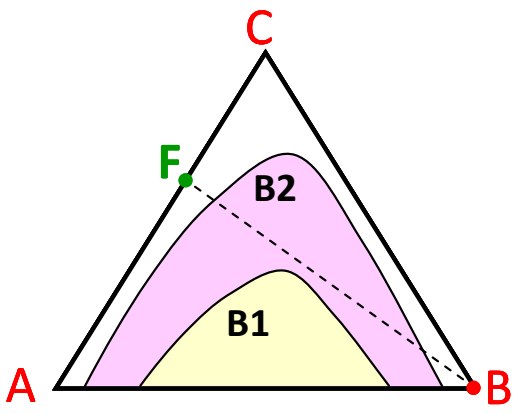
(b) Hautakortasuna (bereizte-faktorea) (β)

Bereizte-faktorea bi osagairen banatze-faktoreen arteko erlazioa da:

$$\beta = \frac{K_C}{K_A} \tag{14.5}$$

Solutuaren eta diluitzailearen banatze-koefizienteek ahalik eta desberdinenak izan behar dute, bien arteko bereizketa egin ahal izateko, hau da, $\beta \neq 1$ izan behar du.

(c) Disolbagarritasun-eremua



14.6 irudia. Bi disolbatzailerekin sortutako eremuak.

Disolbatzailea aukeratzeko orduan, disolbagarritasun-eremuaren hedadura begiratu behar da. Zenbat eta zabalagoa izan bi faseko eremua, orduan eta konposizio desberdineko nahaste gehiago bereiz daitezke. 14.6 irudian agertzen diren B1 eta B2 disolbatzaileak alderatuta, B2 disolbatzailearekin A-C nahaste gehiago bereiz daitezke.

Adibidez, *F* konposizioko elikadura B2 disolbatzaile puruarekin erauzketaz bereiz badaiteke ere, B1 disolbatzaile puruarekin bereizezina da, ezinezkoa baita nahastea fase biko eremuan izatea.

(d) Disolbatzailearen berreskuragarritasuna

Behin A eta C bereizita, fase erauzian dagoen C eta harekin dagoen B bereizi behar dira, eta, ondoren, B disolbatzailea berriro erabili ahal izango da. Beraz, B bereizteak erraza izan behar du.

(e) Dentsitatea

Zenbat eta handiagoa izan fase finduaren eta erauziaren dentsitateen arteko aldea, orduan eta errazago bereizten dira grabitatearen eraginez, eta, hala, ekipo txikiagoak behar dituzte.

(f) Gainazal-tentsioa

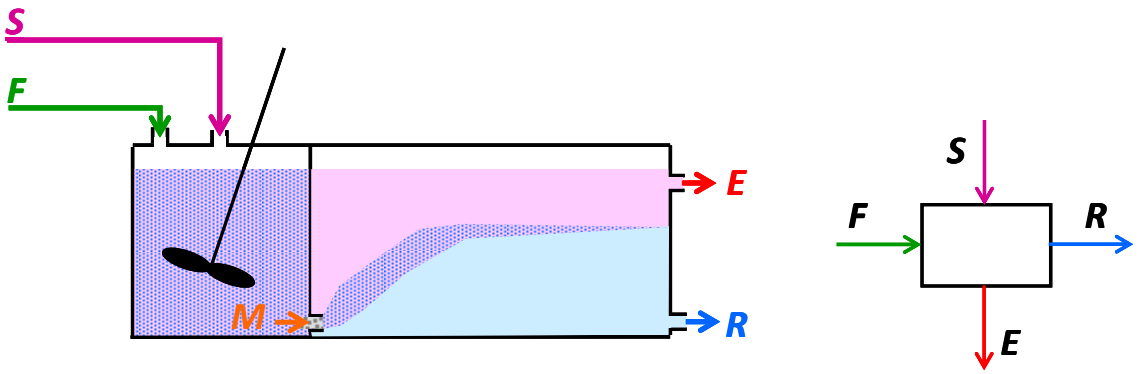
Zenbat eta handiagoa izan, orduan eta errazago bereizten dira bi faseak, baina orduan eta zailagoa da bi faseen artean kontaktu sakona izatea.

(g) Beste ezaugarri batzuk

Disolbatzaileak kimikoki inertea izan behar du, lurrunkortasun txikikoa, biskositate baxukoa, merkea, ez toxikoa, ezta sukoia ere.

14.6 LIKIDO-LIKIDO ERAUZKETA ETAPA BAKARREAN

Likido-likido erauzketa egiteko ekiporik sinpleena ***nahasgailua–fase-bereizgailua*** izeneko ekipo bikoitza da. Eragiketa erraza denez eta malgutasun handia eskaintzen duenez, sarri erabiltzen da ekipo mota hori. Bereizi nahi den nahastea (elikadura, *F*) eta disolbatzailea (*S*) tangara sartzen eta etengabe irabiatzen dira, hiru osagaien artean kontaktu sakona bermatzeko; *M* nahastea lortzen da. Tanga horretatik geldikor eta atsedenean dagoen tangara igarotzen da nahastea, eta, han, bi faseak bereizi egiten dira grabitatearen eraginez: fase astunena behealdean metatzen den heinean, fase arinena horren gainean metatzen da. 14.7 irudian agertzen da horrelako ekipo baten eskema; era jarraituan lan egiten du. Ekipoek era ez-jarraituan ere lan egin dezakete, baina laborategietan besterik ez da egiten, normalean, industrian modu jarraituan lan egiten baita. Ekipoak modu egokian lan egiten badu, bi faseak orekan irteten dira, eta etapa burutuko da.



14.7 irudia. Nahasgailu–fase-bereizgailu erako ekipoa eta korronteen banaketa (fase erauzia arinena dela hartu da) eta adierazpen eskematikoa (eskuinean).

14.6.1 Eragiketaren diseinua

Aurrerantzean, bereizi nahi den elikaduraren emari masikoari *F* deituko diogu (kg/h), eta nahaste horretan solutuaren pisu-ehunekoa $x_{F,C}$ izango da. Disolbatzailearen emari masikoari *S* (kg/h) deituko diogu, eta korronte horretan solutuaren kontzentrazioa $y_{S,C}$ izango da (disolbatzailea purua bada, $y_{S,C} = 0$ izango da). Elikadura eta disolbatzailea ekipora sartzean, nahasgailuan *M* (kg/h) nahastea sortzen da, eta solutuaren konposizioa $x_{M,C}$ da. Behin egoera geldikorra lortutakoan, masa-balantzeak eginez gero, nahastearen emaria eta konposizioa kalkula daitezke:

Sistema osoa: $$F + S = M \tag{14.6}$$

Solutua: $$F \cdot x_{F,C} + S \cdot y_{S,C} = M \cdot x_{M,C} \tag{14.7}$$

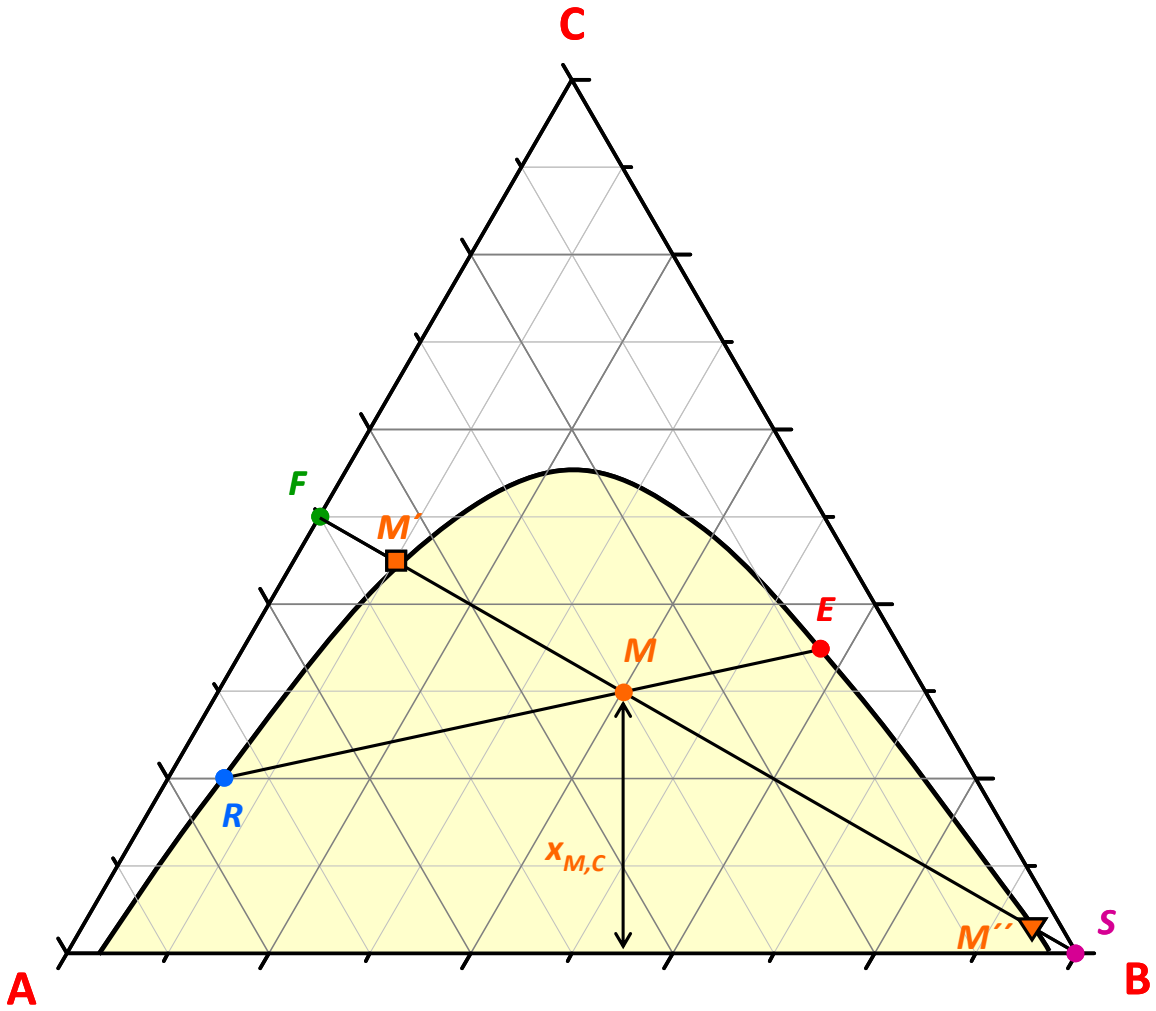
Nahasteak nahasgailua utzi eta bereizgailurako bidea hartzen du; han, grabitatearen eraginez, orekan dauden bi faseak —findua (*R*) eta erauzia (*E*)— bereizten dira. Bi fase horietan solutuaren kontzentrazioak $x_{R,C}$ eta $y_{E,C}$ badira eta masa-balantzea egiten bada:

Sistema osoa: $$M = R + E \tag{14.8}$$

Solutua: $$M \cdot x_{M,C} = R \cdot x_{R,C} + E \cdot y_{E,C} \tag{14.9}$$

$x_{R,C}$ eta $y_{E,C}$-ren balioak orekakoak dira, eta triangelu-diagraman irakur daitezke.

Orain arte ebazpen analitikoa azaldu da, nahiz eta fase findu eta erauzietako konposizioak nahitaez triangelu-diagramatik lortu behar diren. Modu berean, ebazpen grafikoa egin daiteke, ondoren azaltzen den gisan. Azalpena triangelu-diagraman ematen den arren (ikusi 14.8 irudia), koordenatu cartesiarretan eraikitako diagraman ere berdin egiten da.



14.8 irudia. Etapa baten ebazpen grafikoa.

F nahastearen eta *S* disolbatzailearen puntuak irudikatzen dira, konposizioak ezagunak baitira. *M* nahaste-puntua *FS* lerro zuzenaren gainean egongo da. Haren kokapen zehatza 14.7 ekuaziotik $x_{M,C}$ kalkulatzean lor daiteke.

$$x_{M,C} = \frac{F \cdot x_{F,C} + S \cdot y_{S,C}}{M} \tag{14.10}$$

Beste era batera ere lor daiteke *M* puntua kokatzea. Horretarako, palankaren erregela erabiliko da diagraman: $\overline{FS}$ luzera grafikoan neurtzen da, eta $\overline{FM}/\overline{SM}$ luzeren erlazioa palankaren erregelak ematen du:

$$F(kg/h) \cdot \overline{FM} = S(kg/h) \cdot \overline{SM} \tag{14.11}$$

M puntua kokatu ondoren, fase biko eremuan dagoenez, orekan dauden *R* eta *E* faseetan banatuko da. *E* eta *R* puntuak kokatzeko *M* puntutik igarotzen den banatze-zuzena erabiliz, *R*

eta *E*-ren emariak kalkula daitezke palankaren erregela erabiliz: $\overline{RE}$ luzera neurtzen da, eta, grafikoan, $\overline{RM}$ eta $\overline{EM}$ luzerak neurtzen dira:

$$R(kg/h)\cdot\overline{RM} = E(kg/h)\cdot\overline{EM} \tag{14.12}$$

14.8 irudiari erreparatuz, *M´* eta *M´´* puntuak agertzen dira irudikatuta. Lehenak erauzketa gerta dadin erabili beharreko gutxieneko disolbatzailearen emaria kalkulatzeko puntua ematen du, eta bigarrenak, berriz, erabil daitekeen disolbatzailearen emari maximoa:

$$S_{\min} = \frac{F\cdot\overline{FM'}}{\overline{SM'}} \tag{14.13}$$

$$S_{\max} = \frac{F\cdot\overline{FM''}}{\overline{SM''}} \tag{14.14}$$

14.6.2 Ekipoaren eraginkortasuna (η) eta etekina (ζ)

Fase erauzira igaro den solutu kantitatearen eta erabili den disolbatzaile kantitatearen arteko erlazio gisa definitzen da horrelako ekipoaren eraginkortasuna:

$$\eta = \frac{E\cdot y_{E,C}}{S} \tag{14.15}$$

Fase erauzira igaro den solutu kantitatearen eta elikatu den solutu kantitatearen (*F* korrontean soilik) arteko erlazio gisa definitzen da horrelako eragiketaren etekina:

$$\zeta = \frac{E\cdot y_{E,C}}{F\cdot x_{F,C}} \tag{14.16}$$

Ohar gaitezen etekina $0 < \zeta < 1$ den bitartean, eraginkortasuna 1 baino handiagoa izan daitekeela.

14.1 adibidea

A eta C osagaien nahaste baten 1000 kg/h (pisuan, % 50 C osagai) erauzten da B disolbatzaileaz nahasgailu—fase-bereizgailu bakar batean. Kalkula ditzagun (a) bereizi ahal izateko erabil daitekeen disolbatzailearen emari minimoa eta maximoa; (b) 500 kg/h disolbatzaile erabiltzen bada, sortzen diren bi faseetako emaria eta konposizioak; (c) fase finduan Cren edukia % 10 izateraino murriztu nahi bada, erabili behar den disolbatzailearen emaria; (d) (c) ataleko eragiketa gauzatzen bada, etaparen eraginkortasuna.
Datuak: disolbatzaile purua erabiliko da. Sistema horren oreka- eta disolbagarritasun-kurbak irudian agertzen dira.

Ebazpena

Lehenik eta behin, *F* eta *S* puntuak irudikatzen dira, dagozkien konposizioak kontuan hartuta. Datu hauek ezagutzen ditugu: F = 1000 kg/h ; $x_{F,C}$ = 0,5; $y_{S,C}$ = 0.

(a) Palankaren erregela erabiliko da disolbatzailearen emari minimoa eta maximoa kalkulatzeko:
Grafikoan, $\overline{FS}$ = 12,8 unitate, $\overline{FM'}$ = 1,4 unitate eta $\overline{SM'}$ = 11,4 unitate direla neurtzen da. Modu berean, $\overline{FM''}$ = 12,1 unitate eta $\overline{SM''}$ = 0,7 unitate direla neurtzen da.
Beraz, 14.10 ekuazioaren arabera: S_{min} = 123 kg/h eta S_{max} = 17285 kg/h dira.

(b) Analitikoki ebazten bada, $M1 = F + S$ = 1500 kg/h eta $x_{M,C}$ = 0,33 lortzen dira.

M nahastea bi fasetan banatzean, *M1* puntutik igarotzen den banatze-zuzenaren arabera banatzen da. Ondorioz, *R1* eta *E1* puntuak marraztu daitezke diagraman, eta haien konposizioak irakur daitezke: $x_{R,C}$ = 0,16; $y_{E,C}$ = 0,42. Beraz, 14.5 eta 14.6 ekuazioak ebatziz, *E1* = 1000 kg/h eta *R1* = 500 kg/h lortzen da.

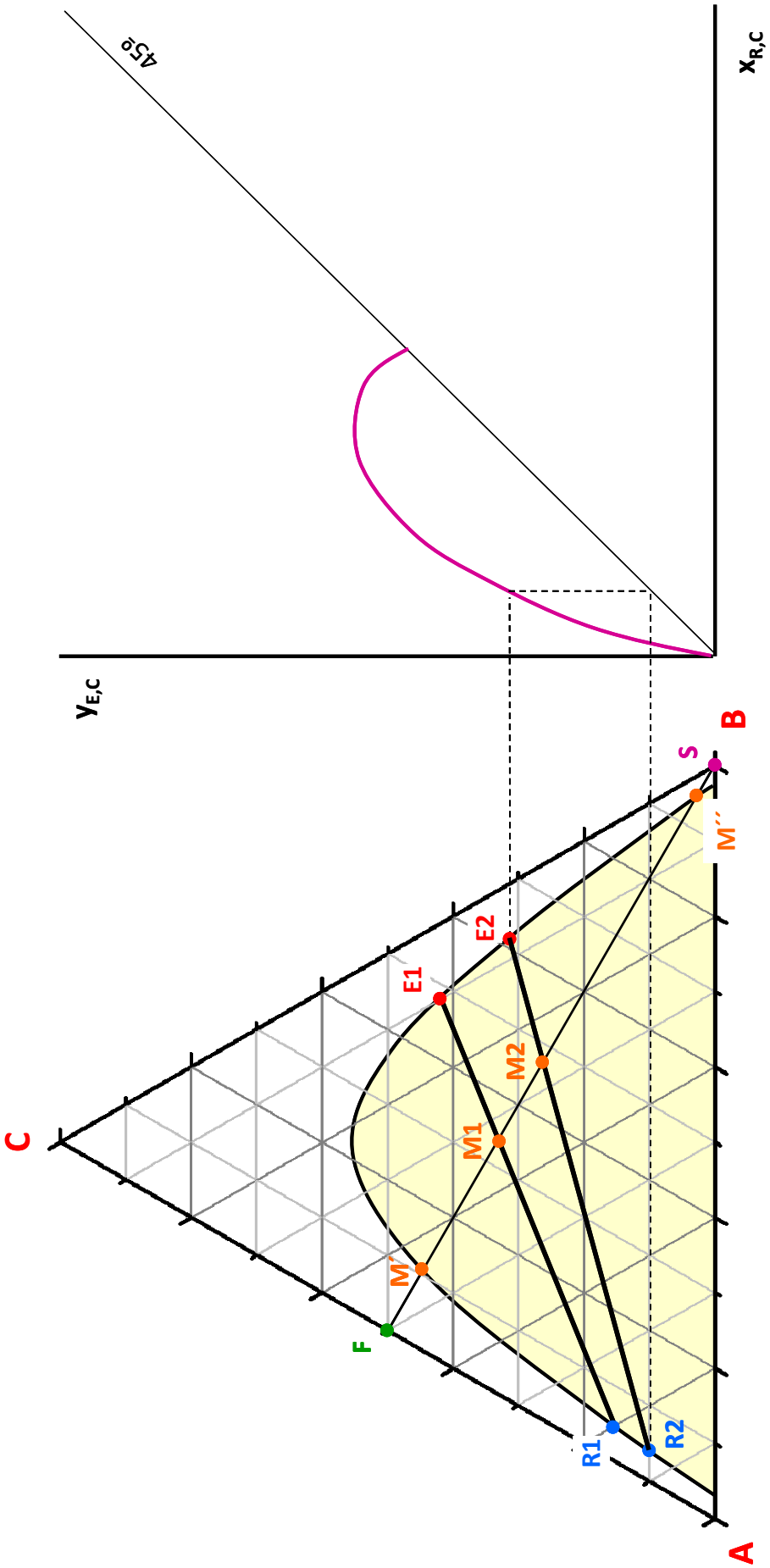
Grafikoki ebatziz gero, lehenik eta behin, *M1* puntua kokatu behar da, bai 14.7 ekuazioa ebatziz, bai palankaren erregela erabiliz. Grafikoan luzerak neurtuz, FS luzera = 12,8 unitate dira. 14.8 ekuaziotik, $1000\cdot\overline{FM1} = 500\cdot\overline{SM1}$ denez, $\overline{FM1}/\overline{SM1}$ = 0,5 lortzen da. Bi ezezaguneko eta bi ekuazioko sistema askatzean:
$\overline{FM1}/\overline{SM1}$ = 0,5 eta $\overline{FS}$ luzera = 12,8 unitate. Sistema ebatziz, $\overline{FM1}$ = 4,3 unitate eta $\overline{SM1}$ = 8,5 unitate izanik, *M1* puntua irudikatzen da.
Ondoren, banatze-zuzenaren luzera neurtzen da: $\overline{E1R1}$ = 9,8 unitate, $\overline{R1M1}$ = 6,4 unitate eta $\overline{E1M1}$ = 3,4 unitate. 14.9 ekuaziotik: *E1*= 1000 kg/h eta *R1* = 500 kg/h.

Ebazpen grafikoa

(c) Horrela lan eginez, fase finduan Cren edukia % 50 izatetik % 16 izatera murriztu da. Haren edukia % 10 izateraino murrizteko disolbatzaile gehiago erabili behar da. Ebazpen grafikoa erabiliko da.

Kasu honetan, *F* eta *S* kokatuta daude, eta baita *R2* ere ($x_{R,C}$ = 0,1 egiten duen puntua). Nahasketaren masa-balantzeari dagokion lerroa marraztu daiteke jada. *R2* fase findua *E2* fase erauziarekin orekan dagoenez, *R2*-ri dagokion banatze-zuzena interpolatu behar da, banatze-kurbaren laguntzaz ($x_{R,C}$ = 0,1 eta $y_{E,C}$ = 0,315). Nahastearen *M2* puntua bi lerro zuzen horiek ebakitzen diren puntuak ematen du, bera baita bi baldintzak betetzen dituen puntu bakarra.
$x_{M,C}$ = 0,265 dela irakur daiteke. $\overline{FM2}$ = 6,1 unitate eta $\overline{SM2}$ = 6,7 unitate neurtzen dira. Beraz, 14.8 ekuaziotik *S* = 910 kg/h erabili behar da; nahastearen emaria *M2* = 1910 kg/h izanik.
Fase findu eta erauzien emari hauek lortu dira: *E2* = 1450 kg/h eta *R2* = 460 kg/h.

(d) Disolbatzailearen *S* = 910 kg/h emaria erabili da, eta Cren masa hau erauzi da: $E2\cdot y_{E,C}$ = 1450·0,315 = 457 kg/h. Horren ondorioz, ekipoaren eraginkortasuna η = 0,502 kg C/kg S da.


C
F
M´
E1
E2
M1
M2
R1
R2
S
M´´
A
B
$y_{E,C}$
$x_{R,C}$
ΔSº

14.7 LIKIDO-LIKIDO ERAUZKETA ETAPA ANITZETAN

Etapa batean egindako bereizte-maila areagotu egin daiteke ekipo gehiagorekin lan eginez. Gainera, horrela lan egitean, handitu egiten da ekipoen eraginkortasuna, eta disolbatzaile gutxiago behar da helburu bera lortzeko, ekipo bakarreko eragiketarekin alderatzen bada.

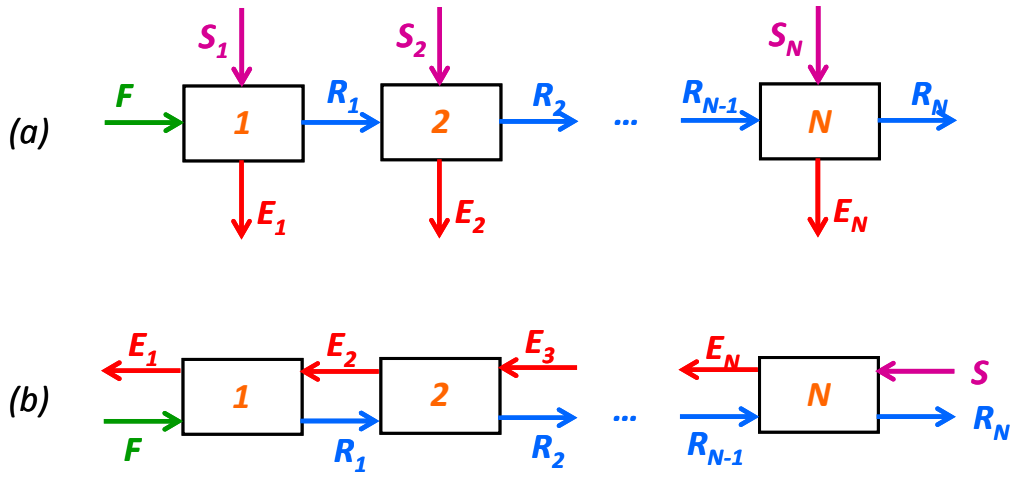
Zenbait ekipoz osatutako sistemak bi eratakoak izan daitezke, disolbatzaileak eta elikadurak zirkulatzen duten moduaren arabera (10.9 irudia):

(1) *Korronte gurutzatuko sistema*:

Ekipo baten bi faseak nahasi eta bereizi ondoren, fase findua hurrengo ekipora sartzen da elikadura gisa, eta fase erauzia kanporatu egiten da. Hurrengo ekipora disolbatzaile berria sartzen da. Komertzialki gutxien erabiltzen den egitura izan arren (disolbatzaile gehiegi erabili behar da), egitura hori ere azalduko dugu hemen.

(2) *Kontrakorronteko sistema:*

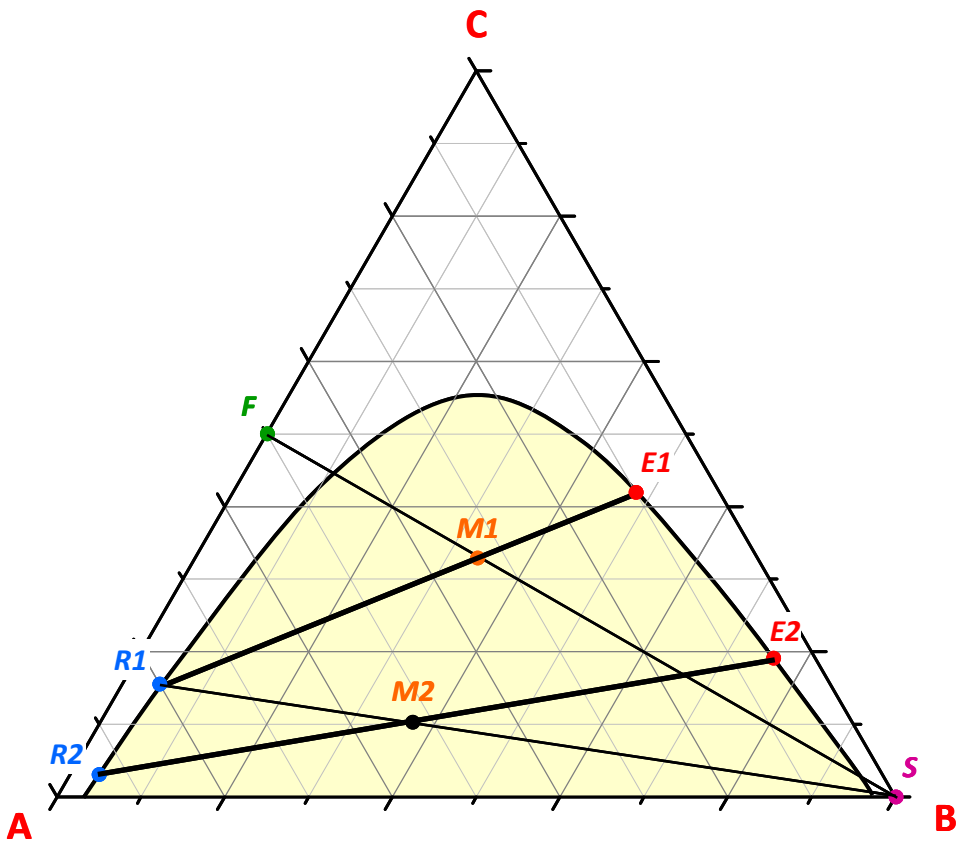
Komertzialki gehien erabiltzen den egitura da, eraginkorragoa baita. *S* disolbatzailea azken ekipora sartzen da, eta *F* elikadura, lehen ekipora; ekipo bakoitzeko fase findu eta erauziak hurrengo eta aurreko ekipoetara sartzen dira, hurrenez hurren, elikadura eta disolbatzaile gisa.



14.9 irudia. Etapa anitzeko egiturak: (a) korronte gurutzatua; (b) kontrakorrontea.

14.8 KORRONTE GURUTZATUKO SISTEMEN DISEINUA

Ekipo bakarrean erabilitako ekuazio berberak erabil daitezke. Lehen ekipotik irteten den fase findua (*R1*, $x_{R,C}$) bigarren ekipoko elikadura bihurtzean, bigarren ekipoaren ebazpenean elikadura *R1* da, eta solutuaren konposizioa, $x_{R,C}$. Adibidez, 14.10 irudian agertzen da korronte gurutzatuan lan egiten duten bi etapatan lortzen diren faseen puntuak eta konposizioak, etapa bakoitzaren elikadura/disolbatzaile erlazioa 2 denean.



14.10 irudia. Bi etapako korronte gurutzatuko sistema.

14.2 adibidea

A eta C osagaien nahaste baten 1000 kg/h (pisuan, % 50 C osagai) B disolbatzaile puruaz erauzten da korronte gurutzatuko nahasgailu–fase-bereizgailu sisteman. Fase finduan Cren edukia % 10 izateraino murriztu nahi bada, kalkula dezagun etapa bakoitzean elikadura/disolbatzaile erlazioa 3 bada zenbat etapa erabili behar diren gutxienez .
Datuak: sistema honen oreka eta disolbagarritasun-kurbak irudian agertzen dira.

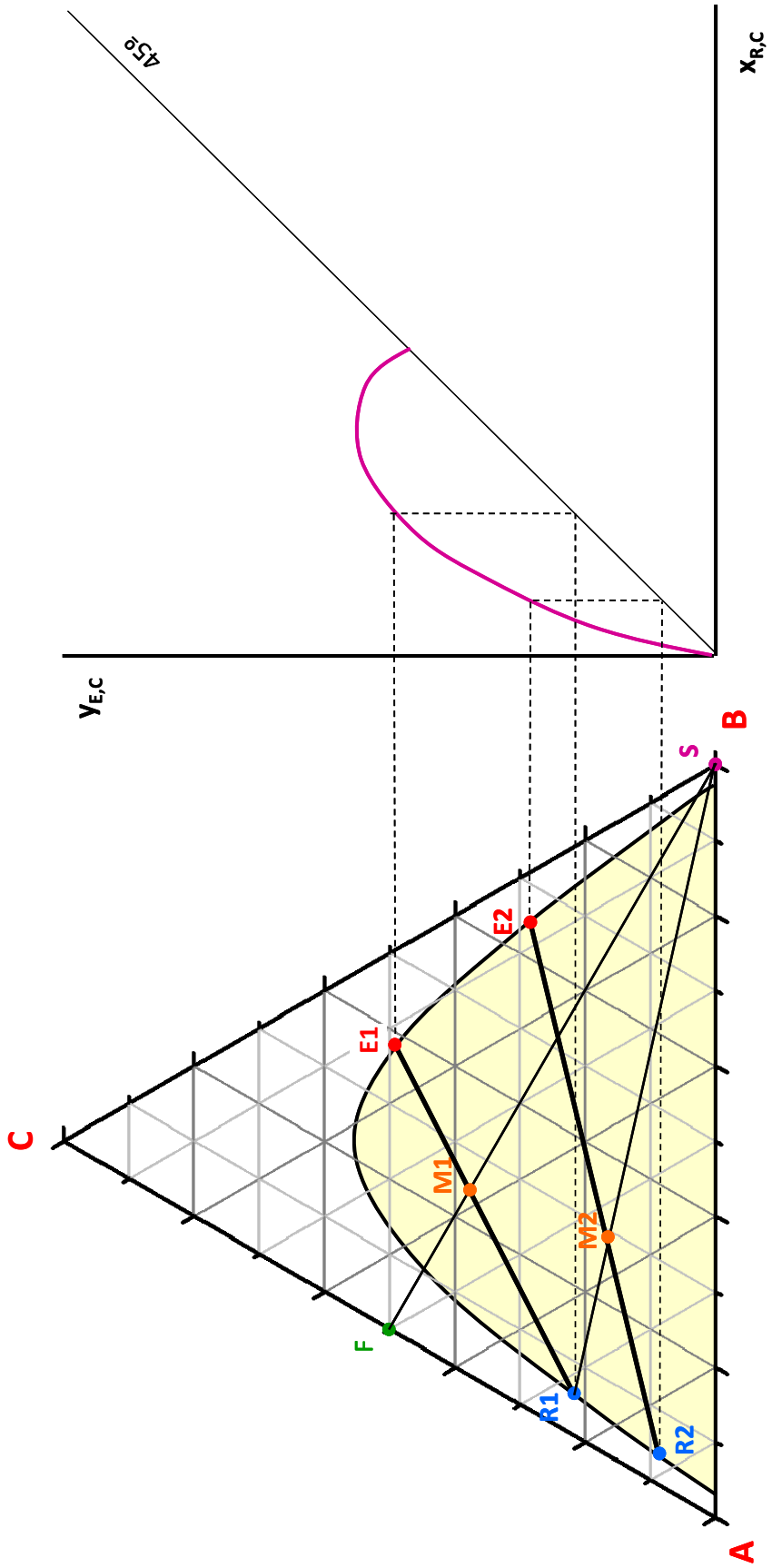
Ebazpena

1. etapa
$F + S1$ = 1333,3 kg/h = $M1$ da, $S1$ = 1000/3 = 333,3 kg/h baita.
$x_{M,C,1}$ = 0,375 (irudian $M1$ puntua)
Lortzen diren bi faseen emariak eta konposizioak:
$E1 + R1 = M1$ = 1333,3 kg/h
Grafikoan begiratuz: $x_{R,C,1}$ = 0,22 eta $y_{E,C,1}$ = 0,49 dira.
Masa-balantzea eginez: $E1 \cdot 0{,}49 + R1 \cdot 0{,}22$ = 500 kg/h
$E1$ = 765,5 kg/h (fase erauzian 375 kg/h C osagai erauzten da)
$R1$ = 567,8 kg/h (fase finduan 125 kg/h C osagai geratzen da)
Etapa bakarrean ezin izan da fase finduko Cren edukia % 10 izatera heldu, % 22 izateraino murriztu da.

2. etapa
F = 567,8 kg/h (% 22 C); $S2$ = 189,3 kg/h
$x_{M,C,2}$ = 0,165 (irudian $M2$ puntua)

Lortzen diren bi faseen emariak eta konposizioak hauek dira:
$E2 + R2 = M2 = 757{,}1$ kg/h
Irudian begiratuz: $x_{R,C,2} = 0{,}09$ eta $y_{E,C,2} = 0{,}275$
Palankaren erregela aplikatuz:
$E2 \cdot 7{,}4$ unitate = $R2 \cdot 5$ unitate
$E2 = 305{,}3$ kg/h (fase erauzian 87,1 kg/h C osagai erauzten da)
$R2 = 451{,}8$ kg/h (fase finduan 40,6 kg/h C osagai geratzen da)

Beraz, bi etapa behar dira, eta hasierako nahastetik 462 kg/h erauztea lortu da orotara.



14.2 adibidearen ebazpen grafikoa.

Emari horiek guztiak gutxi gorabeherakoak dira, grafikoan irakurtzea ez baita oso zehatza. Prozesu osoaren eraginkortasuna 0,884 kgC/kg S da, etapa bakarrean baino handiagoa.

14.9 KONTRAKORRONTEAN LAN EGITEN DUTEN SISTEMEN DISEINUA

14.9(b) irudiko sisteman lan egiten bada, solutua agortzen doan heinean (R_1, R_2, ..., R_{N-1}), fase finduko nahastea disolbatzailetan aberatsagoa den korrontearekin kontaktuan jartzen da (E_3, E_4, ..., S) hurrenez hurren, ekipo guztietan masa-transferentziarako indar eragile handia mantenduz.

Sistema osoarentzat masa-balantzea egiten bada:

Sistema osoa: $$F + S = E_1 + R_N = M \tag{14.17}$$

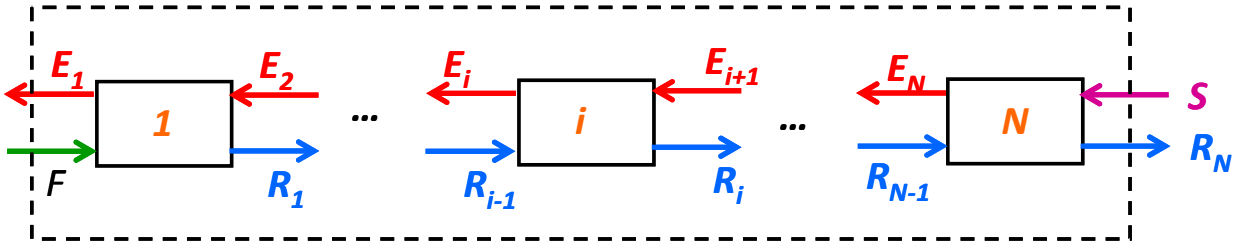
Solutua: $$F \cdot x_{F,C} + S \cdot y_{S,C} = E_1 \cdot y_{E,C} + R_N \cdot x_{R,C} = M \cdot x_{M,C} \tag{14.18}$$

Hortik, $F - E_1 = \Delta$ ***fokua*** lortzen da.

Edozein i etapako fase findua (R_i) hurrengo etapako ($i+1$) elikadura da; fase erauzia (E_i), berriz, aurreko etapako ($i-1$) disolbatzaile bihurtzen da. (i) ekipoan masa-balantzeak eginez:

Sistema osoa: $$E_i + R_i = E_{i+1} + R_{i-1} = M_i \tag{14.19}$$

Solutua: $$E_i \cdot y_{E,C,i} + R_i \cdot x_{R,C,i} = E_{i+1} \cdot y_{E,C,i+1} + R_{i-1} \cdot x_{R,C,i-1} = M_i \cdot x_{M,C,i} \tag{14.20}$$



14.11 irudia. Kontrakorrontean jarritako nahasgailu–fase-bereizgailu sistema.

Lehen etapatik N. etaparaino masa-balantzea egiten bada (14.11 irudian marra etenez irudikatutako eremua):

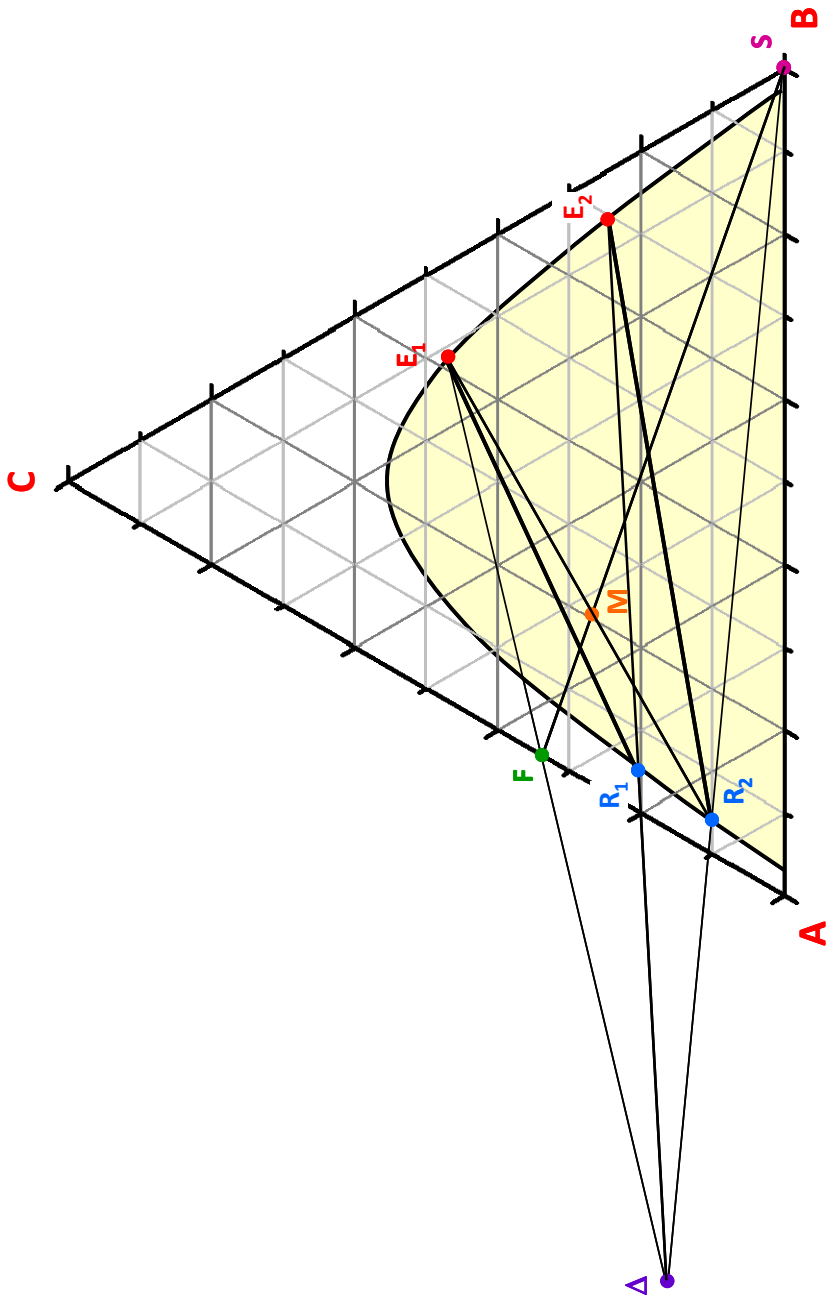
Sistema osoa: $$F + E_{N+1} = E_1 + R_N \tag{14.21}$$

Solutua: $$F \cdot x_{F,C} + S \cdot y_{S,C} = E_1 \cdot y_{E,C,1} + R_N \cdot x_{R,C,N} \tag{14.22}$$

14.21 ekuaziotik $R_N - E_{N+1} = F - E_1 = \Delta$ lortzen da. Hori edozein etapatarako egin daiteke (1,...., N). Ondorioz, R_iE_{i+1} zuzen guztiek foku berdina daukate, Δ alegia; FE_1 eta R_NS zuzenak ere Δ fokutzat daukate.

Ebazpen grafikoa egiteko, urrats hauei jarraitzen zaie (14.12 irudian, bi etapako sistemarentzat irudikatua):

(i) $F + S = M$ eta $F \cdot x_{F,C} + S \cdot y_{S,C} = M \cdot x_{M,C}$ ebatziz, $x_{M,C}$ lortzen da, eta M puntua grafikoan irudikatzen da.
(ii) Azken etapan lortu nahi den fase finduko konposizioa ($x_{R,C,N}$) jakinda, M puntutik pasatzen den R_NE_1 lerroa marrazten da.
(iii) FE_1 eta SR_N lerroak bat egiten duten puntuan Δ fokua marrazten da.
(iv) R_1 lortzen da E_1 puntuarekin (banatze-zuzenarekin).
(v) Δ fokua erabilita, R_1-etik pasatzen den lerroa luzatuz E_2 lortzen da.
(vi) Etapa guztietan prozedura berdinari jarraitzen zaio.



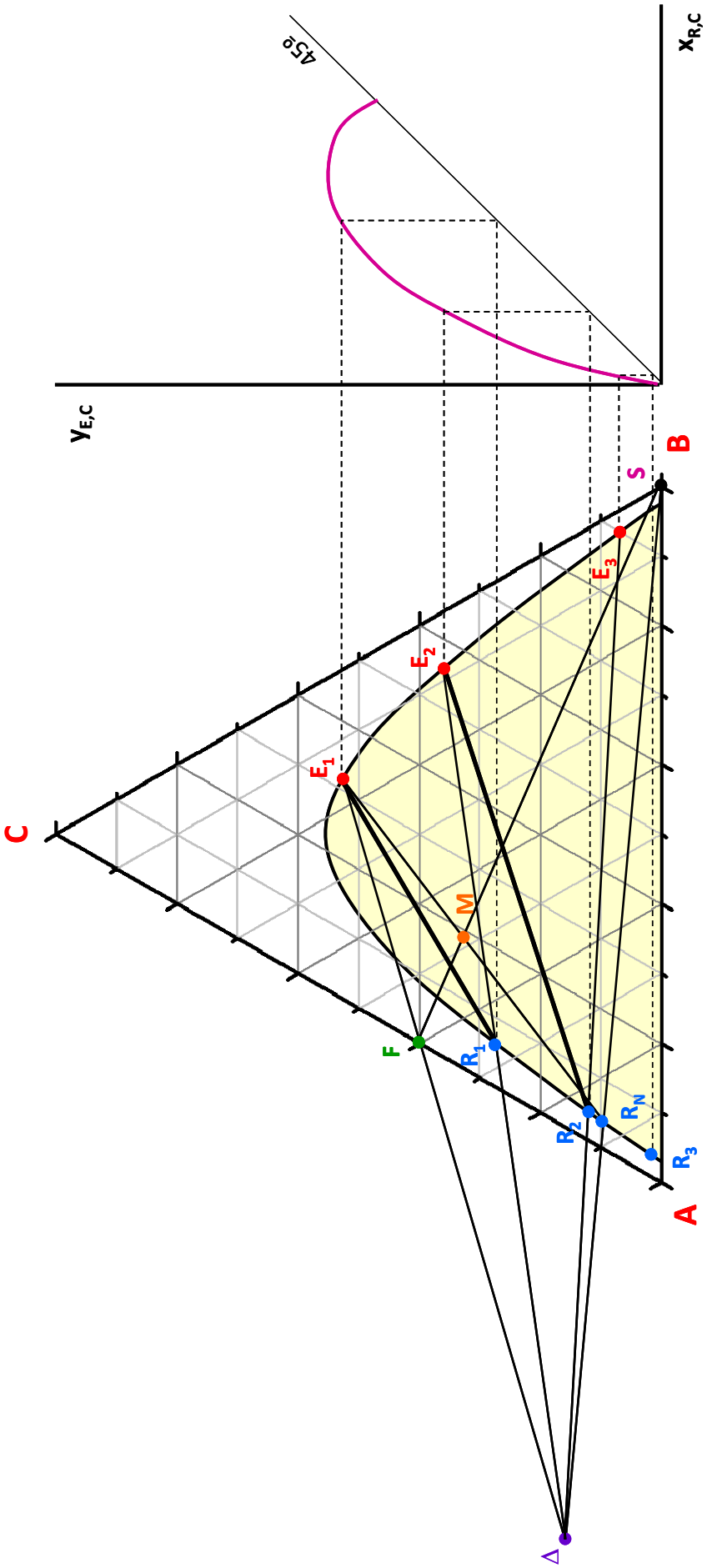
14.12 irudia. Kontrakorrontean eraikitako bi etapatako sistemako Δ fokuaren lorpena.

14.3 adibidea

A eta C osagaien nahaste baten 1000 kg/h (pisuan, % 40 C osagai) B disolbatzaile puruaz erauzten da, kontrakorrontean jarritako nahasgailu–fase-bereizgailu sisteman, azken finduan Cren kontzentrazioa % 10 izan arte. Horretarako, 200 kg/h disolbatzaile erabiltzen bada (B purua), kalkula dezagun zenbat etapa behar diren eta eragiketaren eraginkortasuna.

Ebazpena

Lehenik eta behin, nahastearen M puntua lortu eta irudikatuko da ($x_{R,N.C}$ = 0,1 da):
$F + S = M$ = 1000 + 200 = 1200 kg/h
$F \cdot x_{F,C} + S \cdot y_{S,C} = M \cdot x_{M,C}$; $1000 \cdot 0{,}4 + 200 \cdot 0 = 1200 \cdot x_{M,C}$; $x_{M,C}$ = 0,333 da.
M puntua marraztuta, $R_N E_1$ lerroa marratzen da, eta $y_{E,1,C} \approx 0{,}535$ dela ikusten da.
Ondoren, Δ fokua marraztuko da.


C
E1
E2
E3
S
B
M
F
R1
R2
RN
R3
A
Δ
yE,C
xR,C
ΔSp

Lehen etapan, $x_{R,1,C} \approx 0{,}27$, $y_{E,1,C} \approx 0{,}535$ konposizioko fase findu eta erauziak lortzen dira.
Bigarren etapan, $x_{R,2,C} \approx 0{,}125$, $y_{E,2,C} \approx 0{,}36$ konposizioko fase findu eta erauziak lortzen dira.
Bi etapatan helburua lortzen ez denez, hirugarren etapa bat eskatzen du.
Hirugarren etapan, $x_{R,3,C} \approx 0{,}02$, $y_{E,3,C} \approx 0{,}07$ konposizioko fase findu eta erauziak lortzen dira.

Hiru etapako eragiketa erabili behar da. Prozesuaren eraginkortasuna kalkulatzeko, $E_1 \cdot y_{E1}$ kalkulatuko da:

$E_1 + R_3 = 1200$ kg/h
$E_1 \cdot 0{,}535 + R_3 \cdot 0{,}02 = 1000 \cdot 0{,}40$

Sistema hori askatzean, $R_3 = 471{,}8$ kg/h eta $E_1 = 728{,}2$ kg/h lortzen da. Beraz, orotara, 389,6 kg/h C erauzi denez, sistemak 1,945 kg C/kg S eraginkortasunaz dihardu.

14.10 GUZTIZ NAHASTEZINAK DIREN NAHASTEN ERAUZKETA KORRONTE GURUTZATUETAN

Kasu berezi honetan, har daiteke A eta B guztiz disolbaezinak direla kontzentrazio-tarte guztietan; hala, fase batetik bestera solutua bakarrik igarotzen da. Horrelako sistemaren adibidea piridina-ur-klorobentzeno (ura eta klorobentzenoa zeharo disolbaezinak) sistema da. Kasu horiek ebazteko, soluturik gabeko oinarrian emandako konposizioak erabiltzen dira.

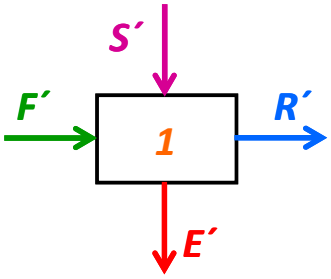
$$X_{F,C} = \left[\frac{C}{A+B}\right]_F \tag{14.23}$$

$$Y_{S,C} = \left[\frac{C}{A+B}\right]_S \tag{14.24}$$

$$X_{R,C} = \left[\frac{C}{A+B}\right]_R \tag{14.25}$$

$$Y_{E,C} = \left[\frac{C}{A+B}\right]_E \tag{14.26}$$

Elikadura A eta C osagaiez osatuta dago; disolbatzailea B eta C osagaiez osatuta dago; sortzen diren fase finduek A eta C besterik ez daukate; sortzen diren fase erauziek B eta C besterik ez daukate.



14.13 irudia. Korronte gurutzatuko ekipoaren eskema soluturik gabeko oinarrian.

Nahasgailuan eta fase-bereizgailuan masa-balantzeak egiten badira (masa/t):

Nahasgailuan:

(A+B): $$F' + S' = M' \tag{14.27}$$

Solutua: $$F' \cdot X_{F,C} + S' \cdot Y_{E,C} = M' \cdot X_{M,C} \tag{14.28}$$

Fase-bereizgailuan:

(A+B): $$R' + E' = M' \quad (14.29)$$

Solutua: $$R' \cdot X_{R,C} + E' \cdot Y_{E,C} = M' \cdot X_{M,C} \quad (14.30)$$

Elikaduran eta fase findu guztietan (A + B) = A da (B-rekin guztiz disolbagaitza delako), eta disolbatzailean eta fase erauzi guztietan (A + B) = B da. Beraz, masa-balantzea moldatzen bada:

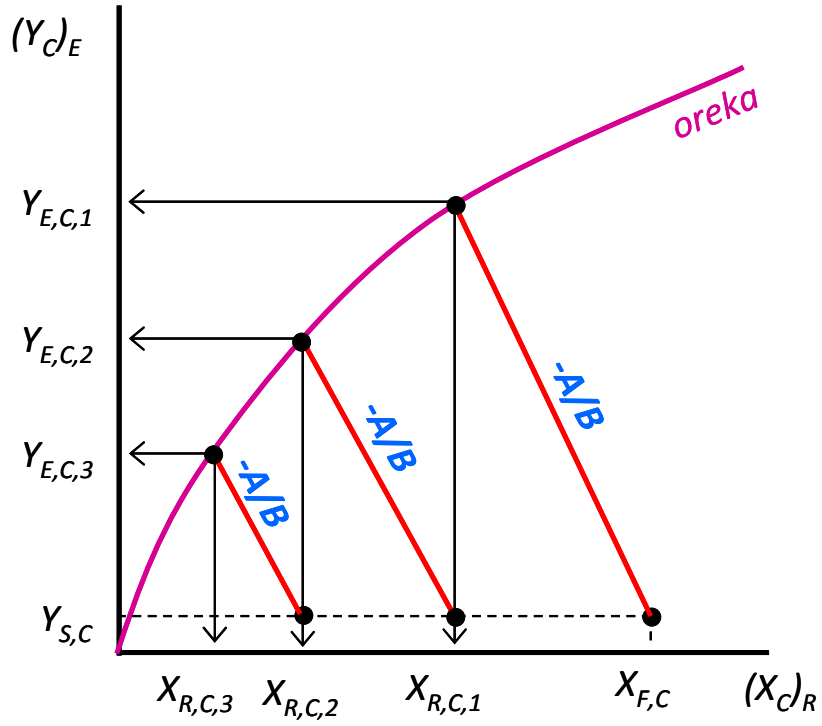
Solutua: $$A \cdot X_{F,C} + B \cdot Y_{S,C} = A \cdot X_{R,C} + B \cdot Y_{E,C} \quad (14.31)$$

Ekuazio horretatik eragiketa-lerro hau lortzen da:

$$\frac{Y_{E,C} - Y_{S,C}}{X_{R,C} - X_{F,C}} = -\frac{A}{B} \quad (14.32)$$

Ekuazio hori ($X_{F,C}$,$Y_{S,C}$) puntutik igarotzen den (-A/B) maldako lerro zuzena da, eta oreka-lerroarekin bat egiten duen puntuak ($X_{R,C}$,$Y_{E,C}$) balioak ematen ditu.

14.13 irudian, hiru etapako sistemaren diseinua agertzen da. Sistema horretan, hiru ekipoetan elikadura/disolbatzaile erlazio (A/B) bera erabiltzen da (hiru maldak berdinak dira).



14.13 irudia. Masa-balantzeen irudikapena guztiz nahastezinak diren nahasteen erauzketan.

14.4 adibidea

A eta C osagaien 10.000 kg/h nahaste (% 30 C, solutua) B disolbatzaile puruaz erauzten da korronte gurutzatuko sisteman lan egiten duten bi ekipoko sisteman. Ekipo bakoitzean 5000 kg/h disolbatzaile erabiltzen bada, kalkula dezagun azken etapatik irteten den fase finduko C solutuaren kontzentrazioa.

Datuak: C osagaia guztiz disolbagarria da A eta B osagaietan; A eta B, ordea, bata bestean guztiz disolbaezinak dira. Orekako datuak irudian agertzen dira.

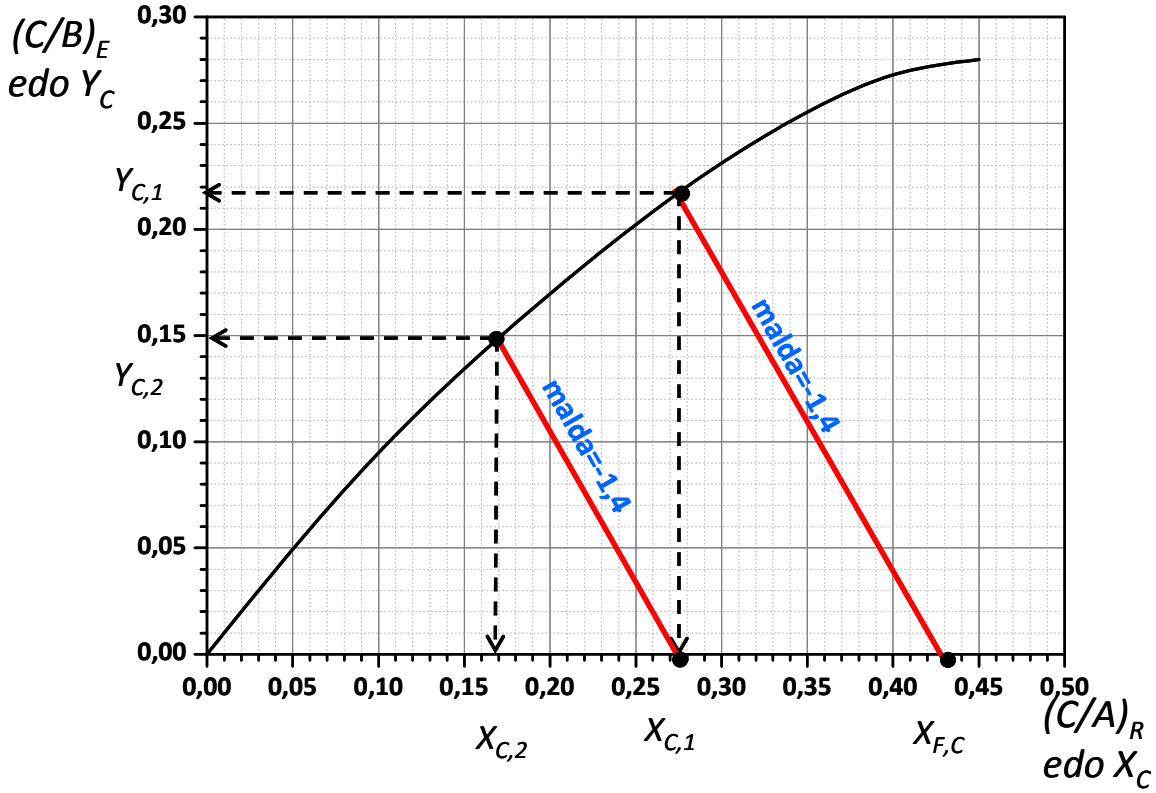
Ebazpena

$X_{F,C}$ = 3000/7000 = 0,43 eta $Y_{S,C}$ = 0 (disolbatzailea purua delako)
A = 7000 kg/h eta B = 5000 kg/h dira

Lehen etapan:
Elikaduraren puntua: ($X_{F,C}$, $Y_{S,C}$) = (0,43, 0) da.
Puntu horretatik abiatuz, (-A/B = -1,4) maldako lerroa marrazten da orekarekin topo egin arte. Orduan, $X_{1,C} \approx 0{,}275$ eta $Y_{1,C} \approx 0{,}22$ irakurtzen dira irudian.

Bigarren etapan:
Elikaduraren puntua: ($X_{1,C}$, $Y_{S,C}$) = (0,275, 0) da.
Puntu horretatik abiatuz, (-A/B = -1,4) maldako lerroa marrazten da orekarekin topo egin arte. Orduan, $X_{2,C} \approx 0{,}17$ eta $Y_{2,C} \approx 0{,}15$ irakurtzen dira irudian.

Beraz, azken etapako fase finduan solutuaren konposizioa % 17 da.



15. GAIA

ZINETIKA ETA OREKA KIMIKOA

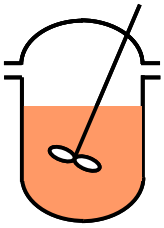
Industria kimikoan, erreakzio kimikoek garrantzi nabarmena daukate, haiek baitira prozesu kimiko gehienen ardatza (eraldaketa kimikoak gertatzen baitira).

Erreakzio kimikoen ingeniaritzak erreakzio kimikoak aztertzen ditu, eta industria-eskalara eraman ahal izateko erreaktoreak diseinatzeaz arduratzen da. Prozesu kimikoetan, fase-aldaketa, tenperatura eta kontzentrazioen aldaketa fisikoez aparte, aldaketa kimikoak ere gertatzen dira (erreakzio kimikoak, alegia).

Erreakzio kimikoetan, erreakzioaren abiadura ezagutzeaz gainera, jakin behar da haren gainean zelako eragina daukaten sistemako aldagaiek (osagaien kontzentrazioek, tenperaturak, presioak). Hori ikertzeaz arduratzen da ***zinetika kimikoa*** deritzon jakintza-arloa.

Erreakzio kimikoaren abiadura ***ekuazio zinetikoa***ren bidez adierazten da. Erreakzio-abiadura edo ekuazio zinetikoa jakinez gero, erreaktorearen irteeran erreaktoreak diseinatzeko oinarrizko informazioa ematen duten kontzentrazio-denbora profilak kalkula daitezke.

Bestalde, ***termodinamikak*** erreakzio kimikoen ***oreka*** (hau da, zein mugataraino gerta daitekeen erreakzioa) eta ***erreakzio-beroa*** (berez gerta daitekeen ala ez jakiteko) aztertzen ditu.



$$aA + bB + \cdots \leftrightarrows rR + sS + \cdots$$

ZINETIKA KIMIKOA
Erreakzio kimikoaren abiadura

TERMODINAMIKA
Erreakzio kimikoaren oreka
Erreakzio-beroa

5 minutuan, Atik 12 molek erreakzionatu dute.

Hodi-formako erreaktore batek zer bolumen izan behar du Rtik 60 mol/s lortzeko?.

Denbora oso luzearen ondoren, Atik 45 molek erreakzionatu dute.

Tenperatura aldatzean, Atik 40 molek erreakziona dezakete, gehienez.

Erreakzioa gerta dadin, 40000 kcal/h-ko beroa eman behar da.

15.1 irudia. Zinetika kimikoak eta termodinamika kimikoak erreakzio kimikoekin daukaten harremana.

Zinetika kimikoak eta termodinamika kimikoak erreakzio kimikoekin daukaten harreman estua 15.1 irudian ikus daiteke, bakoitzak ematen dituen erantzunetan ohartzen bagara.

15.1 ERREAKZIO-ABIADURA

Erreaktore homogeneoan, erreakzio-abiadura honela definitzen da: denbora- eta bolumen-unitateko desagertzen (sortzen) den erreaktibo (produktu) kantitatea (normalean, molak), eta r_i gisa adierazten da (i osagaiaren abiadura).

Demagun erreakzio homogeneo hau gauzatzen dela:

$$aA + bB + \cdots \leftrightarrows rR + sS + \cdots$$

Osagai bakoitzaren erreakzio-abiadura defini daiteke:

A erreaktiboa desagertzen delako:

$$(-r_A) = -\frac{1}{V}\cdot\frac{dN_A}{dt} \tag{15.1}$$

Erreaktibo guztientzako analisi berdina egin daiteke. R produktua sortzen delako:

$$(r_R) = \frac{1}{V}\cdot\frac{dN_R}{dt} \tag{15.2}$$

Produktu guztientzako analisi berdina egin daiteke. N_i erreaktorean dagoen *i* osagaiaren mol kantitatea da, eta *V* nahasteak betetzen duen bolumena.

Hala egiten bada erreaktibo eta produktu ororentzat, abiadura guztiak desberdinak izan daitezke, a, b, …, r, s, … koefiziente estekiometrikoen arabera. Horregatik, erreakzio-abiadura normalizatua ($\overline{R}$) kalkulatzen da:

$$-\frac{1}{a}\cdot(-r_A) = \cdots = +\frac{1}{r}\cdot(r_R) = \cdots = \overline{R} \tag{15.3}$$

$\overline{R}$ erabiltzean, osagai guztiak abiadura bakarraren mende idatz daitezke. Horretarako, osagai mugatzailearen desagertze-abiadura erabiltzen da. Osagai mugatzailea estekiometriaren arabera lehenengo desagertuko litzatekeen erreaktiboa da. Hortik aurrera, A osagaia izango da osagai mugatzailea, eta beraren erreakzio-abiadura hau da:

$$(-r_A) = -\frac{dN_A}{V\cdot dt} \tag{15.4}$$

Nahasteak betetzen duen bolumena denboran aldatzen ez bada, $N_A/t = C_A$ izanik:

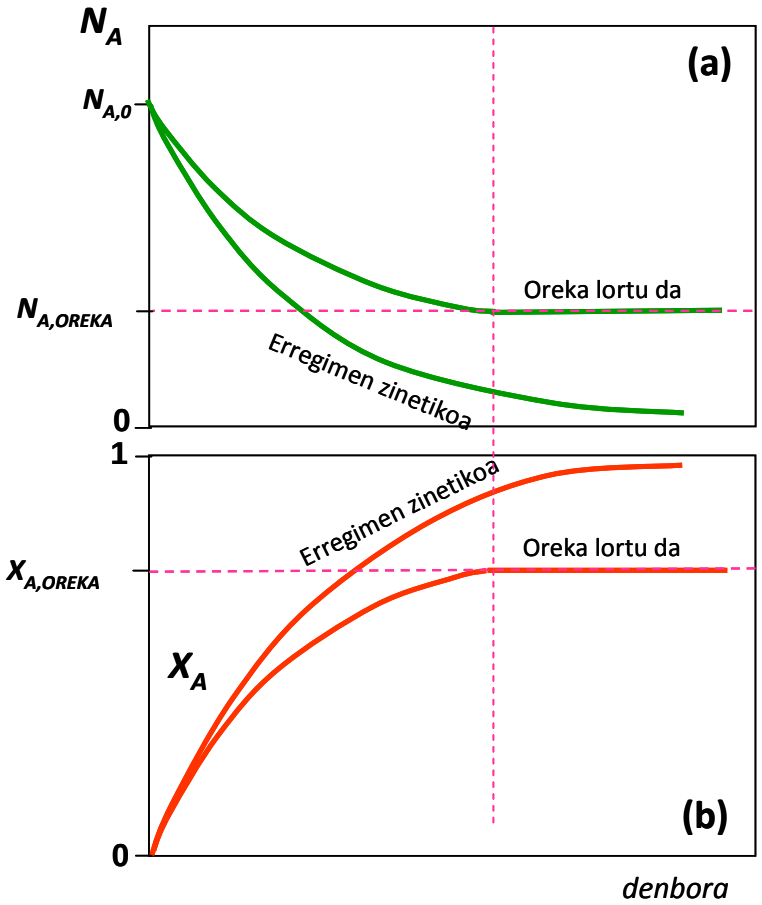
$$(-r_A) = -\frac{dC_A}{dt} \tag{15.5}$$

Gaiaren azalpenerako, aurrerantzean nahastearen bolumena konstantea dela hartuko da.

15.2 BIHURTZE-MAILA (X_A) (A, osagai mugatzailea da)

Masaren iraupenaren legean azaldu den arren (4 gaia), gogora dezagun bihurtze-mailaren definizio eta adierazpen matematikoa. Bihurtze-maila (X_A) erreakzioaren hedapen-maila adierazteko erabiltzen den parametroa da, eta hasierako (sarrerako) Aren mol bakoitzeko erreakzionatu duen mol kantitatea adierazten du[1]. 15.2 irudian, bihurtze-maila eta denboran zehar erreakzionatu gabe dirauten Aren molen eboluzioak irudikatzen dira.

[1] Erreaktore barruko molak osagai mugatzailearen bihurtze-mailaren funtzioan ematen dituen taula estekiometrikoa 4.1 Taulan azaldu da.



15.2 irudia. (a) N_A-ren eta (b) X_A-ren eboluzioak denboran zehar. Erregimen zinetikoa dagoen bitartean, erreakzioak aurrera jarraitzen du, eta, oreka lortzen denean, X_A ez da aldatzen ($X_{A,OREKA}$).

Erreaktore ez-jarraituan bihurtze-maila:

$$X_A = \frac{N_{Ao} - N_A}{N_{Ao}} \tag{15.6}$$

Erreaktore jarraituan bihurtze-maila:

$$X_A = \frac{F_{Ao} - F_A}{F_{Ao}} \tag{15.7}$$

Osagai mugatzailearen erreakzio-abiadura:

$$(-r_A) = \frac{N_{Ao}}{V} \cdot \frac{dX_A}{dt} \tag{15.8}$$

Erreakzio-abiaduraren definiziotik eratortzen denez, erreakzio-abiadura une batetik bestera aldatu egiten da, erreaktoreko konposizioa aldatu egiten delako. Hori gertatzen denean, ***erregimen zinetikoa*** dagoela esaten da. Hala ere, hainbat kasutan erreaktore barruko konposizioa konstantea izatera hel daiteke, oreka lortu delako (ikus 15.2 irudia). Erreakzio-abiadura N_A vs denbora edo X_A vs denbora kurben malda da. Argi ikusten da erregimen zinetikoa dagoenean abiadura aldatu egiten dela denboran zehar eta, behin oreka lortu denean, erreakzio-abiadura (kurbaren malda) zero bihurtzen dela.

15.3 EKUAZIO ZINETIKOA

Erreakzio-abiadurak tenperaturarekin eta konposizioarekin duen erlazio matematikoa adierazten du ekuazio zinetikoak. Erreakzio homogeneoetan talken teoria betetzen dela onar daitekeenez, oinarrizko erreakzio baten abiadura molekulen arteko talka kopuruarekiko proportzionala dela onar daiteke. Erreaktibo molekulen arteko talka kopurua erreaktiboen kontzentrazioarekiko eta tenperaturarekiko proportzionala da. Hori dela eta, erreakzio homogeneoen ekuazio zinetikoak bi aldagai hauen funtzio bereizi gisa eman daitezke:

$$\left(-r_A\right) = k(T)\cdot f(C_i) \tag{15.9}$$

$k(T)$ konstante zinetikoa da, eta tenperaturaren mendekoa da; $f(C_i)$ kontzentrazioen funtzioa da. Normalean, erreaktiboen kontzentrazioen araberakoa da, eta funtzio potentzial gisa jar daiteke.

aA + bB $\rightarrow$ rR + sS erreakzioan, f(C_i) = $C_A^n \cdot C_B^m$ erako funtziora doitzen da. Hala, hau da erreakzio homogeneoaren ekuazio zinetikoa:

$$\left(-r_A\right) = -\frac{dC_A}{dt} = k\cdot C_A^n \cdot C_B^m \tag{15.10}$$

n eta *m* A eta B osagaien ***erreakzio-ordena partzialak*** dira, esperimentalki neurtu beharrekoak. (*n* + *m*) baturari erreakzio-ordena total deritzo.

Erreaktibo-espezie bakoitzaren erreakzio-ordena bere koefiziente estekiometrikoaren berdina denean, ***oinarrizko erreakzioa*** dela esaten da. Kasu horietan, erreakzioa etapa bakarrean gertatzen da, idatzita dagoen moduan, alegia (Aren a molekulak Bren b molekularekin talka egiten dute, eta R osagaiko r molekula eta S osagaiko s molekula sortzen dira).

Kasu gehienak, ordea, ***ez*** dira ***oinarrizko erreakzioak***. Horietan, erreakzio osoa tarteko hainbat oinarrizko etaparen erresultantea da, baina, idatzita dagoen eran, ez da oinarrizkoa. Gainera, erreakzio-ordenak ez datoz bat koefiziente estekiometrikoekin. Oinarrizkoak ez diren erreakzioen adibidea da H_2-aren eta Br_2-aren arteko erreakzioa; erradikalen bidezko tarteko etapen bidez gertatzen da, HBr emateko.

Erreakzioa itzulgarria bada, bi noranzkoetan gertatzen diren erreakzioen abiaduren arteko diferentzia da erreakzio-abiadura garbia. Horregatik, ekuazio zinetikoak bi noranzkoetako abiaduren diferentzia hori azaldu behar du. aA + bB $\leftrightarrows$ rR + sS erreakzio itzulgarriarentzako:

$$\left(-r_A\right) = k_1\cdot C_A^n \cdot C_B^m - k_2\cdot C_R^p \cdot C_S^q \tag{15.11}$$

k_1 eta k_2 eskuinerako eta ezkerrerako erreakzioen konstante zinetikoak dira, hurrenez hurren.

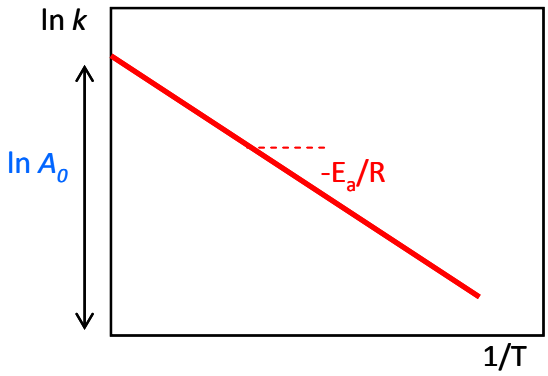
15.4 TENPERATURAREN ERAGINA: ARRHENIUS-EN EKUAZIOA

Izugarrizko eragina dauka tenperaturak erreakzio kimikoen abiaduraren gain. Zenbat eta tenperatura altuagoan egin, orduan eta azkarrago gertatzen da erreakzio kimikoa. Bien arteko erlazioa konstante zinetikoak (*k*) ematen du, eta Arrhenius-en ekuazioaz adierazten da:

$$k = A_0\cdot \exp\left(-\frac{E_a}{R\cdot T}\right) \tag{15.12}$$

E_a aktibazio-energia da (energia/mol), eta A_0, maiztasun-faktorea, k-ren dimentsio berekoa.

Aktibazio-energia erreakzioa gertatzeko behar den gutxieneko energiaren adierazlea da. Ekuazioaren logaritmoak hartzen badira, ln(k) vs (1/T) erlazioaren adierazpen grafikoa lortuko da, malda ($-E_a$/R) eta jatorriko ordenatua (lnA_0) izanik (ikusi 15.3 irudia). Erreakzioaren konstante zinetikoak bi tenperaturatan jakin behar dira, gutxienez, aktibazio-energia lortu ahal izateko.



15.3 irudia. Arrhenius-en ekuazioaren adierazpen grafikoa.

15.1 adibidea

Lehen ordenako prozesu kimiko baten konstante zinetikoak 1 h^{-1} balio du 25 ºC-an, eta 2 h^{-1} 50 ºC-an. Kalkula dezagun (a) prozesu horren aktibazio-energia, (b) lanerako tenperatura konstanteak 3 h^{-1} balio dezan.

Ebazpena

(a)

$$\left.\begin{array}{l} \ln 1 = \ln k_0 - \dfrac{E_a}{R}\cdot\dfrac{1}{298} \\ \ln 2 = \ln k_0 - \dfrac{E_a}{R}\cdot\dfrac{1}{323} \end{array}\right\} \quad E_a = 22{,}1\ kJ/mol \quad ; \quad \ln A_0 = 8{,}956 \quad ; \quad A_0 = 7{,}754\cdot 10^3\ h^{-1}$$

Beraz, 25-50 ºC bitarteko edozein tenperaturatan konstante zinetikoa ekuazio honen bidez kalkulatuko da:

$$k\ (h^{-1}) = 7{,}754\cdot 10^3\cdot e^{[-2669/T]}$$

Tenperatura-tarte horretatik kanpo, ekuazio horrek ziurgabetasuna dauka.

(b) $\ln 3 = 8{,}956 - \dfrac{22{,}1\cdot 10^3}{8{,}28}\cdot\dfrac{1}{T}$; T = 339,7 K (66,7 ºC).

15.5 ERREAKZIO KIMIKOEN SAILKAPENA

Zenbait irizpideren araberako sailkapenak adieraziko dira. Noski, beste irizpide batzuk ere har zitezkeen.

Faseen arabera

Erreakzio homogeneoak: fase bakarrean gertatzen dira. Gas-faseko erreakzio gehientsuenak honelakoak dira.

Erreakzio heterogeneoak: erreakzioan bi edo fase gehiago daudenean. Faseen arabera, azpisailkapen hau egin daiteke:

Gas-likido erreakzioak: erreakzioa likidoaren muinean gertatzen da, eta gasa faseartean barreiatzen da. Adibidez, azido nitrikoaren ekoizpen prozesuko azken urratsean ematen den erreakzioa:

$$NO_2\ (g) + H_2O\ (l) \rightarrow H_2NO_3(g)$$

Gas-solido erreakzioak: Pirita (s) + $O_2 \rightarrow SO_2 + Fe_2O_3$(s). Erreakzio hau azido sulfurikoaren ekoizpen prozesuko lehen urratsa da.

Likido-likido erreakzioak: bi fase likido disolbagaitzen artekoak. Adibidez, anilinaren ekoizpen prozesuan lehengaia den nitrobentzenoaren sintesi erreakzioa:

$$H_2NO_3\ (l_1) + C_6H_6(l_2) \rightarrow NO_3C_6H_5\ (l_2)$$

Likido-solido erreakzioak: honelakoak dira, adibidez, metalak azidoekin disolbatzea.

Solido-solido erreakzioak: adibidez, metal-oxidoak kokearekin erreduzitzea.

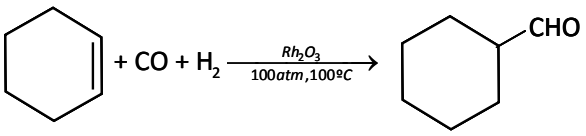
Katalizatzailearen arabera

Ez-katalizatuak: katalizatzailerik erabiltzen ez duten erreakzioak.

Katalizatuak: katalizatzaileak erabiltzen dituztenak. Besteak beste, azpisailkapen hau egin daiteke:

Homogeneoak: katalizatzailea erreakzioa gertatzen den fase berean disolbatua dagoenean. Adibidez:

olefina + CO + $H_2 \rightarrow$ aldehidoa (katalizatzaile gisa, kobalto-gatzak disolbatuta edo Rh_2O_3)



Heterogeneoak: katalizatzailea beste fase batean dagoenean. Normalean, erreakzioa likido- zein gas-egoeran gauzatzen da, eta katalizatzailea solidoa da. Adibidez, ongarrien ekoizpen prozesuan erabiltzen den amoniakoaren sintesi-erreakzioa:

$$N_2 + 3H_2 \rightarrow 2NH_3\ (Fe_2O_3 \text{ katalizatzaileaz})$$

Autokatalizatuak: sortzen diren produktuak katalizatzaile gisa diharduten erreakzioak. Horrelakoak dira hainbat esterren hidrolisi azidoa edo hartzidura-erreakzioak.

Erreakzio-beroaren arabera

Endotermikoak: erreakzioak beroa behar duenean.

$$FeO + C \rightarrow Fe + CO \qquad (\Delta H_r) = +\ 155{,}8\ kJ/mol$$

Exotermikoak: erreakzioan beroa askatzen denean.

$$C + O_2 \rightarrow CO_2 \qquad (\Delta H_r) = -\ 94{,}1\ kJ/mol$$

Itzulgarritasunaren arabera

Itzulezinak: erreakzioa noranzko bakarrean gertatzen denean.

$$CO + 1/2O_2 \rightarrow CO_2$$

Itzulgarriak: erreaktiboek produktuak sortzen dituzte, eta, aldi berean, produktuek, erreaktiboak sortzen dituzte.

$$CO + H_2O \leftrightarrows CO_2 + H_2$$

Konplexutasunaren arabera

Bakunak: $A \rightarrow B$

Oinarrizkoak: ordenak eta koefiziente estekiometrikoak berdinak direnean.

Ondoz ondokoak: $A \rightarrow B \rightarrow C$

Paraleloak: $A \rightarrow B$; $A \rightarrow C$ (lehiakideak)

$A \rightarrow R$; $B \rightarrow S$ (aldi berekoak)

15.6 OREKA KIMIKOA

Erreakzio itzulgarrietan, osagai mugatzaileak (erreaktiboa) ez du guztiz erreakzionatzen, hau da, $X_A < 1$ da. Erreaktiboek abiadura batekin erreakzionatzen dute produktuak emanez, baina, une berean, produktuek beste abiadura batekin erreakzionatzen dute erreaktiboak emanez. Horregatik, osagai mugatzailearen bihurtze-maila mugatuta dago, oreka kimikoak dioenaren arabera. $aA + bB \leftrightarrows rR + sS$ erreakzio itzulgarria bi prozesuren batura da:

(1) $aA + bB \rightarrow rR + sS$; eskuinerako erreakzio-abiadura $(-r_A)_1$ da

(2) $rR + sS \rightarrow aA + bB$; ezkerrerako erreakzio-abiadura $(-r_A)_2$ da

Bi erreakzioen baturek jatorrizko erreakzio itzulgarria osatzen dute. Erreakzio-abiadura garbi neurgarria bi erreakzio-abiaduren arteko diferentzia da:

$$(-r_A)_{GARBIA} = (-r_A)_1 - (-r_A)_2 \qquad (15.13)$$

Oreka kimikoa lortzen denean, bi noranzkotako abiadurak berdinak direnez,

$$\text{Orekan, } (-r_A)_{GARBIA} = 0 \qquad (15.14)$$

C osagai kimikoren artean gertatzen den erreakzio kimikoak, oreka kimikoa denean,

$$\sum_{i=1}^{C} n_i \cdot \mu_i = \Delta G = 0 \qquad (15.15)$$

lortuko du. n_i eta μ_i i osagaiaren koefiziente estekiometrikoa eta potentzial kimikoa dira, hurrenez hurren. Oreka kimikoa ***oreka-konstantea***ren bitartez ematen da, aktibitateen bidez (a_i) definitua.

$$K = \frac{\left(a_{R,E}\right)^r \cdot \left(a_{S,E}\right)^s}{\left(a_{A,E}\right)^a \cdot \left(a_{B,E}\right)^b} \qquad (15.16)$$

Erreaktibo eta produktuak gas idealtzat har badaitezke (presio baxuetan hurbilketa egokia), oreka-konstantea presio partzialen bidez ematen da ($K = K_P$). Hortik abiatuta, kontzentrazioak eta mol-frakzioak erabil daitezke:

Presio partzialen bidezko oreka-konstantea:

$$K_P = \frac{\left(P_{R,E}\right)^r \cdot \left(P_{S,E}\right)^s}{\left(P_{A,E}\right)^a \cdot \left(P_{B,E}\right)^b} \qquad (15.17)$$

Kontzentrazioen bidezko oreka-konstantea:

$$K_C = \frac{(C_{R,E})^r \cdot (C_{S,E})^s}{(C_{A,E})^a \cdot (C_{B,E})^b} \tag{15.18}$$

Mol-frakzioen bidezko oreka-konstantea:

$$K_y = \frac{(y_{R,E})^r \cdot (y_{S,E})^s}{(y_{A,E})^a \cdot (y_{B,E})^b} \tag{15.19}$$

Horrela definitutako oreka-konstanteak honela erlazionatuta daude, :

$$K = K_P = K_y \cdot P^{\Delta n} = K_C \cdot (R \cdot T)^{\Delta n} \tag{15.20}$$

Δn = (r + s) - (a + b) izanik. 15.16, 15.17, 15.18 eta 15.19 ekuazioetan E azpi-indizeak oreka adierazten du.

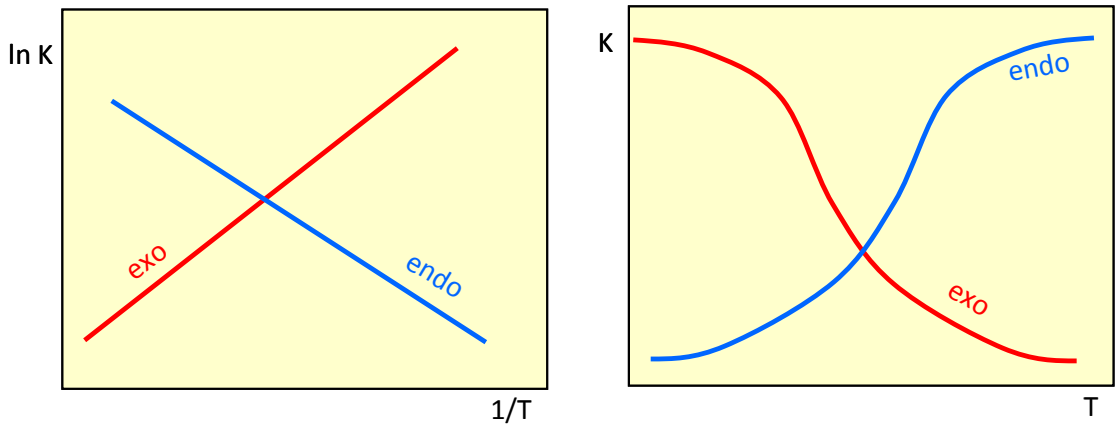
Presio-diferentzia oso handia ez denean, oreka-konstantearen gain tenperaturak baino ez du eragiten. Konstante zinetikoan ez bezala, tenperatura handitu ahala oreka-konstantea handitu edo txikitu egin daiteke. Erlazio hori Van´t Hoff-en ekuazioak ematen du:

$$\left(\frac{d \ln K}{d\left(\frac{1}{T}\right)}\right) = -\frac{\Delta H_r^0}{R} \tag{15.21}$$

Erreakzio-beroaren batez besteko balio konstantea hartzen bada, adierazpen hau lortzen da:

$$\ln\left(\frac{K_{T_1}}{K_{T_2}}\right) = -\frac{\overline{\Delta H_r}^0}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right) \tag{15.22}$$

Ekuazio horren arabera, erreakzioa endotermikoa ($\Delta H_r > 0$) edo exotermikoa ($\Delta H_r < 0$) bada, aldatu egingo da tenperaturarekin oreka-konstanteak duen erlazioa: endotermikoa denean, tenperatura handitzean *K* handitzen den moduan, exotermikoa denean tenperatura igoerak *K*-ren txikitzea dakar. 15.4 irudian agertzen da erreakzio endotermiko eta exotermikoaren oreka-konstantea tenperaturaren arabera.



15.4 irudia. Van´t Hoff-en ekuazioaren adierazpena, eta oreka-konstantearen eta tenperaturaren arteko erlazioa erreakzio endotermiko eta exotermikoarentzat.

15.7 ERREAKZIO-BEROA

Ingurumenarekiko termikoki isolatutako erreaktorean (erreaktore adiabatikoa) erreakzioa presio konstantean gauzatzen denean, erreakzioa aurrera joan ahala, bi gauza gerta dakioke nahastearen tenperaturari: hasieran baino beroago egotea edo hotzago egotea.

Lehen kasuan, beroa askatzen da, erreaktiboen entalpia produktuen entalpia baino handiagoa delako. Erreakzio horiei exotermiko deritze, eta erreakzio-beroa negatiboa da: $\Delta H_r < 0$ (askatzen den energia/erreakzionatzen duen mol).

Nahastearen tenperatura hotzagoa bada, nahasteak beroa behar du erreakzioa gauzatu ahal izateko. Erreakzio horiek endotermikoak dira, eta erreakzio-bero positiboa daukate: $\Delta H_r > 0$.

5. gaian azaldu da erreakzio-beroa kalkulatzeko prozedura.

15.8 OREKAKO BIHURTZE-MAILA

Arestian aipatu da erreakzio itzulgarrietan osagai mugatzailearen bihurtze-maila, alegia, orekako bihurtze-maila ($X_{A,E}$) maximoa dela. Oreka-konstantearen adierazpenean (K_P, adibidez) osagai bakoitzaren mol-frakzioa orekako bihurtze-mailaren funtzioan jartzen bada, tenperatura bakoitzerako $X_{A,E}$ kalkula daiteke. Orekako bihurtze-mailak tenperaturarekin duen erlazioa, kualitatiboki, oreka-konstantearen berdina da. Erreakzio exotermikoetan, zenbat eta tenperatura altuagoa izan, orduan eta orekako bihurtze-maila txikiagoa lortzen da (endotermikoa denean, alderantziz). Hala ere, orekako bihurtze-mailaren kalkuluan, tenperaturak ez ezik, eragin nabarmena daukate nahastearen konposizioak eta presioak. Ondoren, adibide batzuen bidez azalduko da orekako bihurtze-mailan aldagaiek daukaten eragina.

15.2 adibidea

Lurrun bidezko karbono monoxidoaren bihurtze-erreakzioa, *WGS* (*Water-Gas Shift*) ($CO + H_2O \leftrightarrows CO_2 + H_2$) 1 atm-ko presioan gertatzen da gas-fasean. Erreaktorera sartzen den nahastearen konposizioa hau da (moletan): CO = % 15; H_2O = % 15; CO_2 = % 10; H_2 = % 50; Inertea = % 10

Kalkula ditzagun oreka-konstantearen balioa eta orekako bihurtze-maila (a) 300 ºC-an, (b) 200 ºC-an.

Datuak: K_P (200 ºC) = 185 ΔH_r = -41 kJ/mol

Ebazpena

Oreka-konstantea (K_P) 200 ºC-an gertatzen denez, lehen urratsa 300 ºC-koa kalkulatzea izango da, eta, horretarako, Vant´ Hoff-en ekuazioa erabiliko dugu:

$$\ln\left[\frac{185}{K_{P,300ºC}}\right] = -\frac{\left[-41\cdot 10^3\right]}{8{,}28}\cdot\left(\frac{1}{473}-\frac{1}{573}\right) \quad ; \quad K_P\ (300\ ºC) = 28$$

$$K_P = \frac{\left(P_{CO_2,E}\right)\left(P_{H_2,E}\right)}{\left(P_{CO,E}\right)\left(P_{H_2O,E}\right)} = 28$$

Osagai mugatzailea CO-a izanik (estekiometrikoki elikatzen denez, ura ere mugatzailetzat har daiteke, baina erreakzio horren helburua CO-a desagertzea denez, hori aukeratuko da), hari dagozkion masa-balantzeak egingo dira:

$$P_{CO,E} = P_{CO,0}\cdot\left(1 - X_{CO,E}\right) \quad ; \quad P_{H_2O,E} = P_{CO,0}\cdot\left(\frac{P_{H_2O,0}}{P_{CO,0}} - X_{CO,E}\right)$$

$$P_{H_2,E} = P_{CO,0}\cdot\left(\frac{P_{H_2,0}}{P_{CO,0}} + X_{CO,E}\right) \quad ; \quad P_{CO_2,E} = P_{CO,0}\cdot\left(\frac{P_{CO_2,0}}{P_{CO,0}} + X_{CO,E}\right)$$

Gas-fasean osagai bakoitzak duen presio partziala Dalton-en ekuazioarekin kalkulatuko da:

$$P_{CO,0} = y_{CO,0}\cdot P \quad ; \quad P_{H_2O,0} = y_{H_2O,0}\cdot P \quad ; \quad P_{H_2,0} = y_{H_2,0}\cdot P \quad ; \quad P_{CO_2,0} = y_{CO_2,0}\cdot P$$

Oreka-konstantearen adierazpenean ordezkatzen badira,

(a) $$28 = \frac{\left(0{,}667 + X_{CO,E}\right)\left(3{,}333 + X_{CO,E}\right)}{\left(1 - X_{CO,E}\right)\left(1 - X_{CO,E}\right)} \text{ edo } \frac{\left(0{,}667 + X_{CO,E}\right)\left(3{,}333 + X_{CO,E}\right)}{\left(1 - X_{CO,E}\right)\left(1 - X_{CO,E}\right)} - 28 = 0$$

Hortik, saiakuntza- eta errore-metodoarekin[2] baliatuz $X_{CO,E}$ = 0,67 lortzen da. Hau da, 300 ºC eta 1 atm-ko baldintzan, elikadura horrekin, CO-aren % 67 besterik ez da bihurtzen orekan.

Erreaktore irteeran dagoen konposizioa hau da (%):

$CO/H_2O/H_2/CO_2/In$ = 4,95/4,95/60,04/20,05/10

(b) $$185 = \frac{\left(0{,}667 + X_{CO,E}\right)\left(3{,}333 + X_{CO,E}\right)}{\left(1 - X_{CO,E}\right)\left(1 - X_{CO,E}\right)}$$. Hortik, $X_{CO,E}$ = 0,818 lortzen da.

Ikusten denez, tenperatura altuagoetan orekako bihurtze-maila txikiagoa lortu da, erreakzioa exotermikoa delako. Erreakzio endotermikoetan aurkakoa gertatzen da.

15.3 adibidea

Butanoaren (A) deshidrogenazioz 1-butenoa (B) sortzen da gas-fasean ($A \leftrightarrows B + H_2$). 300 ºC-an oreka-konstantea K_P = 1,04 atm da. Erreaktorean A purua sartzen bada, kalkula dezagun orekako bihurtze-maila (a) 1 atm-ko presioan, (b) 2 atm-ko presioan.

Ebazpena

Kasu honetan, mol-frakzioentzako definitutako oreka-konstantea erabiliko da, K_y.

$$K_P = K_y\cdot P^{\Delta n} = \frac{\left(y_{B,E}\right)\left(y_{H_2,E}\right)}{\left(y_{A,E}\right)}\cdot P^{(2-1)} = 1{,}04\,atm$$

Taula honetan, osagaien masa-balantzea agertzen da Aren bihurtze-mailaren funtzioan:

Osagaia	t = 0 (molak)	Orekan molak	y_i
A	$N_{A,0}$	$N_{A,0}\cdot(1-X_{A,E})$	$\frac{\left(1 - X_{A,E}\right)}{\left(1 + X_{A,E}\right)}$
B	0	$N_{A,0}\cdot X_{A,E}$	$\frac{X_{A,E}}{\left(1 + X_{A,E}\right)}$
H_2	0	$N_{A,0}\cdot X_{A,E}$	$\frac{X_{A,E}}{\left(1 + X_{A,E}\right)}$
Sistema osoa	$N_{A,0}$	$N_{A,0}\cdot(1+X_{A,E})$	1

[2] Saiakuntza- eta errore-metodoa 3.2.3 atalean azaltzen da.

Oreka-konstantean osagai bakoitzaren mol-frakzioak ordezkatzen badira, adierazpen hau lortzen da:

$$K_y = \frac{\left(\frac{X_{A,E}}{1+X_{A,E}}\right)\left(\frac{X_{A,E}}{1+X_{A,E}}\right)}{\left(\frac{1-X_{A,E}}{1+X_{A,E}}\right)}$$

(a) K_y = 1,04 balio du. Ekuaziotik $X_{A,E}$ = 0,714 lortzen da.
(b) K_y = 1,04/2 balio du. Ekuaziotik $X_{A,E}$ = 0,585 lortzen da.
Gas-faseko erreakzioan, laneko presioa handitzen bada, orekako bihurtze-maila aldatu egiten da. Adibide honetan $\Delta n > 0$ denez, bihurtze-maila txikitu egin da, baina $\Delta n < 0$ denean, handitu egiten da.

15.4 adibidea

Alkohol bentzilikoaren (A) deshidrogenazioz bentzaldehidoa (B) sortzen da 300 ºC-an gas-fasean ($A \leftrightarrows B + H_2$). 300 ºC-an K_P = 1,04 atm da. Erreaktorera % 50 Az eta % 50 inertez osatutako nahastea sartzen bada, kalkula dezagun orekako bihurtze-maila 1 atm-ko presioan.

Ebazpena

Osagaien masa-balantzea eginez, taula hau betetzen da: ($N_{Inerte} = N_{A,0}$ izanik)

Osagaia	t = 0 (molak)	Orekan molak	y_i
A	$N_{A,0}$	$N_{A,0} \cdot (1- X_{A,E})$	$\frac{(1-X_{A,E})}{(2+X_{A,E})}$
B	0	$N_{A,0} \cdot X_{A,E}$	$\frac{X_{A,E}}{(2+X_{A,E})}$
H_2	0	$N_{A,0} \cdot X_{A,E}$	$\frac{X_{A,E}}{(2+X_{A,E})}$
Inertea	$N_{A,0}$	$N_{A,0}$	$\frac{1}{(2+X_{A,E})}$
Sistema osoa	$2 \cdot N_{A,0}$	$N_{A,0} \cdot (2+ X_{A,E})$	1

Oreka-konstantearen adierazpenean osagaien mol-frakzioak ordezkatzen badira, adierazpen honetara heltzen da:

$$1{,}04 = \frac{\left(\frac{X_{A,E}}{2+X_A^E}\right)\left(\frac{X_{A,E}}{2+X_{A,E}}\right)}{\left(\frac{1-X_{A,E}}{2+X_{A,E}}\right)}$$ ekuazioa haztapenez ebazten bada, $X_{A,E}$ = 0,786 lortzen da.

Ikusten denez, gas-faseko erreakzioan inertea gehitzeak orekako bihurtze-mailan eragina dauka. Adibide honetan $\Delta n > 0$ denez, orekako bihurtze-maila handitzea lortu da, baina $\Delta n < 0$ balitz, txikitu egingo litzateke.

Arestian ikusitako adibideetan lortutako emaitzak Le Chatelier-en printzipioarekin azaltzen dira. Printzipio horrekin, orekako bihurtze-mailari buruzko ondorio laburtuak —15.1 taulan azaltzen dira— atera daitezke gas-faseko erreakzio itzulgarrietarako.

15.1 Taula. Gas-faseko erreakzio itzulgarrietan, orekako bihurtze-mailan hainbat aldagaik duten eragina.

Δn	Aldagaia	Aldaketa	$X_{A,E}$
> 0	Presioa	+	-
	Presioa	-	+
	Inerteak gehitu	+	+
	Erreaktiboak gehitu	+	+
	Produktuak gehitu	+	-
< 0	Presioa	+	+
	Presioa	-	-
	Inerteak gehitu	+	-
	Erreaktiboak gehitu	+	+
	Produktuak gehitu	+	+

+: handitu.
-: txikitu.

15.9 KONSTANTE ZINETIKOAREN ETA OREKA-KONSTANTEAREN ARTEKO ERLAZIOA

Erreakzioaren mekanismoa etapa bakarrekoa bada (oinarrizkoa bada), oreka-konstantearen (K) eta konstante zinetikoen (k_1 eta k_2) arteko erlazioa zuzena da.

Adibidez,

$$ClNO_{2(g)} + NO_{(g)} \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} NO_{2(g)} + ClNO_{(g)}$$

oinarrizko erreakzioan, eskuinerako eta ezkerrerako noranzkoetan gertatzen diren erreakzio-erdien abiadurak $r_1 = k_1 \cdot C_{ClNO_2} \cdot C_{NO}$ eta $r_2 = k_2 \cdot C_{NO_2} \cdot C_{ClNO}$ dira, hurrenez hurren.

Oreka-konstantea ondokoa da:

$$K = \frac{C_{NO_2,E} \cdot C_{ClNO,E}}{C_{ClNO_2,E} \cdot C_{NO,E}} \tag{15.23}$$

Oreka lortzen denean, $r_1 = r_2$ izanik, $\frac{k_2}{k_1} = K = \frac{C_{NO_2,E} \cdot C_{ClNO,E}}{C_{ClNO_2,E} \cdot C_{NO,E}}$ betetzen da. Horrelako kasuetan, ekuazio zinetikoa bi modutan idatz daiteke:

$$r = r_1 - r_2 = k_1 \cdot C_{ClNO_2} \cdot C_{NO} - k_2 \cdot C_{NO_2} \cdot C_{ClNO}$$
$$r = k_1 \cdot \left(C_{ClNO_2} \cdot C_{NO} - \frac{C_{NO_2} C_{ClNO}}{K} \right) \tag{15.24}$$

$$r = r_1 - r_2 = k_1 \cdot C_{ClNO_2} \cdot C_{NO} - k_2 \cdot C_{NO_2} \cdot C_{ClNO}$$
$$r = k_1 \cdot \left(C_{ClNO_2} \cdot C_{NO} - \frac{C_{NO_2} C_{ClNO}}{K} \right) \tag{15.25}$$

15.5 adibidea

A ⇆ S erreakzio itzulgarria likido-egoeran gertatzen da 45 ºC-an. Oinarrizko erreakzioa bada, lor dezagun tenperatura horretarako ekuazio zinetikoa.

Datuak: 25 ºC-an, oreka-konstantea K = 12,2; 25 ºC-an eskuinerako erreakzioaren konstante zinetikoa k_1 = 1,2 h^{-1}; erreakzio-beroaren batezbestekoa ΔH_r = -14,4 kcal/mol; Aktibazio-energia E_a = 15 kcal/mol.

Ebazpena

Oinarrizko erreakzioa bada, osagai bakoitzaren ordena partziala eta koefiziente estekiometrikoak bat datoz.

$$\left(-r_A\right) = k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_S = k_1 \cdot \left[C_A - \frac{C_S}{K}\right], \quad \frac{k_1}{k_2} = K \text{ izanik.}$$

45 ºC-an k_1: $$\ln\left(\frac{1,2}{k_{45}}\right) = -\frac{15 \cdot 10^3}{1,98} \cdot \left[\frac{1}{298} - \frac{1}{318}\right] \quad ; \quad k_1(45ºC) = 5,94 \text{ h}^{-1} \text{ da.}$$

45 ºC-an K: $$\ln\left(\frac{12,2}{K_{T_2}}\right) = -\frac{14,4 \cdot 10^3}{1,98} \cdot \left(\frac{1}{298} - \frac{1}{318}\right) \quad ; \quad K(45ºC) = 2,63 \text{ da.}$$

Ondorioz, k_2(45 ºC) = 5,94/2,63 = 2,26 h^{-1} da.

Ekuazio zinetikoa hau da:

$$\left(-r_A\right)\left(mol/lh\right) = 5,94 \cdot C_A - 2,26 \cdot C_S = 5,94 \cdot \left[C_A - \frac{C_S}{2,63}\right]$$

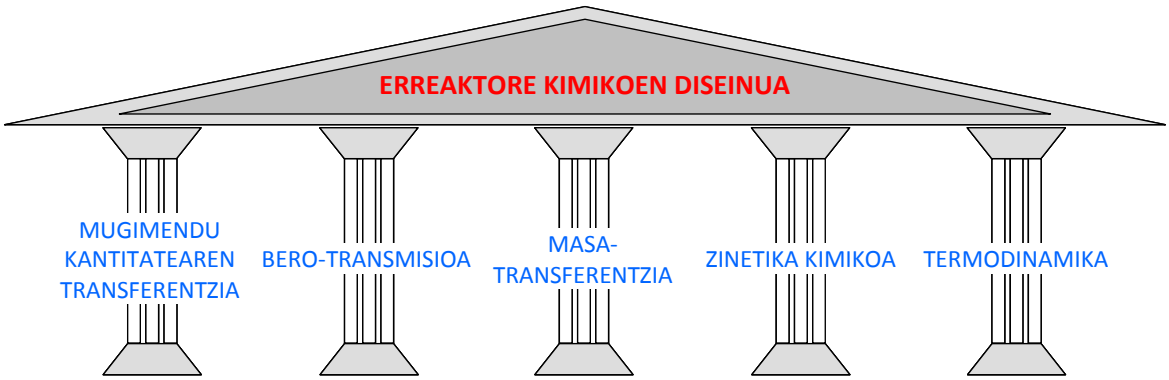
16. GAIA

ERREAKTORE KIMIKOAK DISEINATZEKO OINARRIAK

Erreaktore kimikoa erreakzio kimikoak egiteko ekipoa da. Forma, tamaina eta egitura desberdinekoak izan daitezke. Instalazio edo prozesu kimikoen oinarria da, lehengaietatik abiatuz azken buruko produktu diren konposatu kimikoak han lortzen baitira.

Erreaktore kimikoaren diseinua egiteko orduan, ingeniaritza kimikoaren kontzeptu ugari erabiltzen dira. Adibidez, erreaktore barruko fluidodinamika diseinatzeko, mugimendu kantitatearen transferentzia nola gauzatzen den aztertu behar da; erreaktore barruko eta denboran zeharreko tenperatura-profilak kalkulatzeko, bero-transmisioa eta energiaren iraupenaren legea aplikatu behar dira; erreaktibo eta produktuen arteko nahaste-maila diseinatzeko, masa-transferentzia aztertu behar da.

16.1 irudian agertzen dira erreaktore kimikoaren diseinuan eragiten duten faktoreak eta beharrezkoa den informazioa.



16.1 irudia. Erreaktore kimikoen diseinua oinarritzen den ingeniaritza kimikoaren arloak.

Erreaktore kimikoaren funtzio nagusiak hauek dira:

- Erreaktiboen arteko kontaktua laguntzea (fluxu mota egokia), erreakzioa gauzatzeko erreaktiboen arteko kontaktuak ona izan behar duelako.
- Erreaktiboen arteko kontaktu-denbora egokia eskaintzea, bihurtze-maila egokia lortzeko.
- Erreakzioa tenperatura, presio eta konposizio egokietan gauzatu ahal izatea, erreakzio-abiadura eta bihurtze-maila egokiak lortu ahal izateko.

Erreaktorearen diseinua ingeniari kimikoaren ardura da. Erreaktorearen diseinuaren helburu nagusia ekipoaren tamaina kalkulatzea da. Horretarako, hainbat faktoreren eragina dagoenez, diseinuaren ardura da agertzen diren aukeren arteko aukera egitea. Erreaktore kimikoaren diseinua egiteko orduan, aldagai hauek hartu behar dira kontuan:

- Lehengaiaren purutasuna eta konposizioa. Oso diluitua badator, erreaktorearen bolumena handia izango da, emari handiak erabili behar dituelako; oso kontzentratua badator, erreaktore isotermikoan lan egitea zaildu egin dezake, erreakzio-beroa handia izan baitaiteke.
- Prozesuaren eskala. Zein ekoizpen-mailatarako diseinatuko da? Eskala txikikoa bada (kg/egun), era ez-jarraituan lan egin dezake, eta eskala handiko ekoizpena nahi bada (t/egun), berriz, jarraian diharduten erreaktoreak komenigarriagoak dira.
- Katalizatzaile beharrik ba al dago? Erreakzio batzuk katalizatzailerik gabe oso geldoak dira, eta tamaina handiko ekipoak behar dituzte; beste batzuetan, produktu jakin bat

lortzeko erreakzio hautakorra izateko katalizatzaileak erabili behar dira. Horrelakoetan, lanerako baldintza egokienak zehaztu behar dira.

- Inerteak elikatzea onuragarria al da? Sarri, tenperaturaren kontrola errazteko edo orekako bihurtze-maila handitzeko, inerteak sartzen dira erreaktorera.
- Prozesu jarraituan ala ez-jarraituan lan egitea komeni da?
- Erreaktore mota aukeratu.
- Erreaktorearen tamaina kalkulatu.
- Ingurunearekin energia trukatu beharrik dagoen aztertu. Honen arabera, erreaktore mota aukeratu daiteke.
- Birziklaziorik behar den aztertu.
- Erreaktore-irteerako nahastea bereizteko edo arazteko ekiporik behar den aztertu. Erreaktoreak bihurtze-maila handiagoz lan egiten badu, ondorengo arazte-ekipoak saihestu daitezke.
- Erreakzio-sisteman material arriskutsurik dagoen aztertu, haiekin lan egiteak baldintza bereziak eskatzen baititu.

16.1 ERREAKTORE KIMIKOEN SAILKAPENA

Erreakzio kimikoa gauzatzen den ingurune oro erreaktore kimikoa dela ohartzen bagara, mota askotakoak aurki daitezke eguneroko bizitzan. Bazkaria egiteko lapikoak, zigarroak eta berogailu katalitikoak erreaktore kimikoak dira. Industriako erreaktore kimikoak ere mota, tamaina eta forma askotakoak dira. Gainera, industria-mailako erreakzioak egiteko, hainbat erreaktore mota erabiltzen dira.

Erreaktore kimikoen sailkapena egiteko orduan, hainbat irizpide erabil daitezke. Hona hemen irizpide batzuen araberako erreaktore kimikoen sailkapenak (irizpide gehiago ere badaude, noski):

a) *Erreaktorean dauden faseen arabera*

Erreaktore barruan erreaktiboak eta produktuak daude aldi berean une oro. Haien faseen arabera, erreaktore ***homogeneoak*** (nahastea fase bakarrean dagoenean) zein ***heterogeneoak*** (nahastean bi fase edo gehiago daudenean) izan daitezke. Ohikoena, likido- edo gas-fasean lan egitea da, nahiz eta solido-egoerako erreakzio batzuk egon badauden.

b) *Eragiketaren arabera*

Irizpide honen arabera, erreaktoreak ***ez-jarraituak***, ***jarraituak*** edo ***tartekoak*** izan daitezke. Lehen motako erreaktoreak ekoizpen-maila txikietarako aproposak dira, eta laborategian erabiltzen dira erreakzio kimikoen ekuazio zinetikoak lortzeko. Erreaktore jarraituak, aldiz, ekoizpen-maila handietarako aproposak dira, eta produktuaren uniformetasuna bermatzen dute. Tarteko erreaktoreak erreakzio finkatu batzuetarako erabiltzen dira, eta eskala handikoak (altzairugintza) zein txikikoak (jakien ekoizpena) izan daitezke.

c) *Nahaste motaren arabera*

Irizpide honen arabera, erreaktoreak ***tanga-erakoak*** edo ***hodi-formakoak*** izan daitezke. Lehen motako erreaktorean, nahaste osoa ondo nahasita dago, horretarako irabiatzaileak

erabiltzen baitira. Hodi-formako erreaktoreetan, aldiz, ez da nahasterik gertatzen jarioaren norabidean.

d) *Bero-trukearen arabera*

Erreaktore kimikoak ***isotermikoak*** dira erreaktore osoko tenperatura konstante mantentzen bada. Erreaktorearen hormak ingurunearekiko termikoki isolatuta badaude, erreaktore ***adiabatikoa*** dela esaten da. Erreaktoreak ingurunearekin beroa trukatzen badu baina isotermikotasunari eutsi gabe, ***ez-adiabatikoa eta ez-isotermikoa*** dela esaten da.

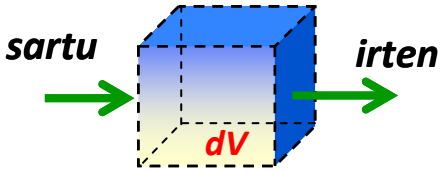
e) *Katalizatzaileen erabileraren arabera*

Erreakzio kimiko asko ezin dira gauzatu katalizatzailerik gabe baldintza normaletan, erreakzio-abiadura oso motela baitute edo hautakortasun eskasa baitute. Katalizatzailerik gabe diharduten erreaktore kimikoei erreaktore ***homogeneo*** deritze. Aldiz, katalizatzaileak erabiltzen dituzten erreaktore kimikoak erreaktore ***katalitikoak*** dira.

16.2 ERREAKTORE KIMIKOEN OINARRIZKO EKUAZIOAK

Erreaktore kimikoetan, beste sistemetan bezala, mugimendu kantitatearen, masaren eta energiaren iraupenaren legeak betetzen dira. Ondoren, masaren eta energiaren iraupenaren lege orokorrak azalduko dira.

16.2.1 Masaren iraupenaren legea



16.2 irudia. Nahastearen *dV* bolumen-elementua masaren iraupenaren legerako.

Demagun *V* bolumeneko erreaktore osoaren zati txiki bat, *dV* bolumen-elementua, eta erreaktorean erreaktibo eta produktuen nahastea dagoela (16.2 irudia). A osagaia erreakzioan parte hartzen duen konposatu kimikoa bada, masa-balantze hau dagokio[1]:

$$\begin{pmatrix}\text{A-ren}\\ \text{METATZE-abiadura}\\ dV\,\text{bolumenean}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\text{A-ren}\\ \text{SARTZE-abiadura}\\ dV\,\text{bolumenera}\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}\text{A-ren}\\ \text{IRTETE-abiadura}\\ dV\,\text{bolumenetik}\end{pmatrix}\pm\begin{pmatrix}\text{A-ren}\\ \text{SORTZE/DESAGERTZE-abiadura}\\ dV\,\text{bolumenean}\end{pmatrix}$$

$$\frac{dN_A}{dt}=F_{A,sartu}-F_{A,irten}-\left(-r_A\right)\cdot dV \qquad (16.1)$$

A osagaia erreaktiboa bada, desagertu egingo da *dV* bolumen-elementuan; produktua bada, aldiz, sortu egingo da. Horregatik, desagertzen denean zeinu negatiboa (–) erabiliko da, eta sortzen denean, berriz, zeinu positiboa (+) erabili behar da.

Adierazpen orokor hori erreaktore mota guztientzat betetzen da. Hala ere, kasu partikular batzuk aipatuko dira:

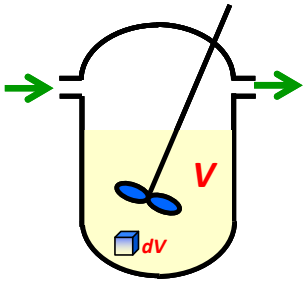
Erreaktore ez-jarraitua bada: Sartu = Irten = 0 izango lirateke.

Egoera geldikorrean badihardu: Metatzea = 0 da.

[1] Ohar gaitezen 4.1 atalean ikusitako adierazpen dela, beste era baten moldatuta egon arren.

16.2.1.1 Nahaste-erreaktore idealak

Erreaktoreko nahastea irabiatzaile batez oso ondo nahasia mantentzen bada, jo daiteke erreaktore osoko kondizioak berdinak direla. Hau da, erreaktoreko *dV* bolumen-elementu guztietan tenperatura eta kontzentrazioa berdina denez, erreakzio-abiadura ere berdina da, eta, ondorioz, masa-balantzea erreaktore osoari (*V*) egin dakioke.



16.3 irudia. Nahaste-erreaktore ideala.

16.2.1.2 Hodi-formako erreaktore idealak

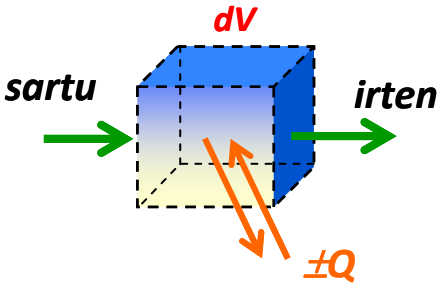
Nahastea erreaktorea den hodian aurrera doan heinean, konposizioa eta tenperatura aldatu egiten dira. Horregatik, masa-balantzea egiteko orduan, erreaktoreko zati txiki bat aukeratu behar da, *dV*.

16.4 irudia. Hodi-formako erreaktore ideala.

Masaren iraupenaren legea, beraz, *dV* bolumen elementuari dagokion zatian egin behar da, eta erreaktorearen bolumen osora hedatu behar da integralaren bidez.

16.2.2 Energiaren iraupenaren legea

Ohiko erreaktore kimikoetan energiaren iraupenaren legea aztertzean, energia mekanikoaren terminoak (zinetikoa, potentziala eta lana) arbuiagarriak dira termino entalpikoen aldean. Horregatik, energia entalpikoaren iraupenaren legea erabiltzen da:



16.5 irudia. Nahastearen *dV* bolumen diferentziala energiaren iraupenaren legerako.

$$\begin{pmatrix}\text{energiaren}\\ \text{METATZE-abiadura}\\ dV\,\text{bolumenean}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\text{energiaren}\\ \text{SARTZE-abiadura}\\ dV\,\text{bolumenera}\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}\text{energiaren}\\ \text{IRTETE-abiadura}\\ dV\,\text{bolumenetik}\end{pmatrix}$$

$$\pm\begin{pmatrix}\text{energiaren}\\ \text{SORTZE/XURGATZE-abiadura}\\ dV\,\text{bolumenean}\end{pmatrix}\pm\begin{pmatrix}\text{energiaren}\\ \text{TRUKATZE-abiadura}\\ dV\,\text{bolumenean}\end{pmatrix}$$

Energia/t $$\frac{dE}{dt}=\left(F\cdot C_P\right)_{sartu}\cdot T_{sarrera}-\left(F\cdot C_P\right)_{irten}\cdot T_{irteera}+\left(-\Delta H_r\right)\cdot\left(-r_A\right)\cdot dV\pm Q \qquad (16.2)$$

Adierazpen orokor honetan, sarrerako eta irteerako terminoak masa-jarioarekin sartzen eta irteten diren entalpiak dira. Sortze-/Xurgatze-terminoari dagokionez, erreakzio kimikoa exotermikoa bada, zeinu positiboa (+) erabiliko da (beroa sortzen baita), eta zeinu negatiboa (–) erabiliko da endotermikoa denean (beroa xurgatzen baitu). Azkenik, ingurunearekin bero-trukagailuen bitartez trukatzen duen beroa zenbatzen du trukatze-terminoak, eta (+) zeinua dauka berotu egiten denean eta (–) hoztu egiten denean.

dV bolumen-elementuan energia hau sortzen edo xurgatzen da erreakzio kimikoagatik:

$$\left(-\Delta H_r\right)\cdot\left(-r_A\right)\cdot dV \qquad (16.3)$$

Masarekin gertatzen den moduan, kasu partikularrak izan daitezke:

Erreaktore ez-jarraitua bada: Sartu = Irten = 0.

Egoera geldikorrean badihardu: Metatzea = 0.

Erreaktore adiabatikoa bada, Trukatzea = 0.

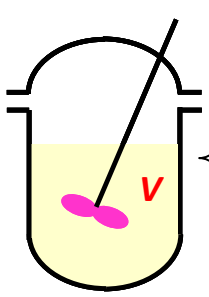
16.3 ERREAKTOREAK DISEINATZEKO ALDAGAIAK

Erreakzio kimiko bat bihurtze-maila finkatu bateraino irits dadin erreaktoreak izan behar duen tamaina kalkulatzea da erreaktore-diseinuaren helburu nagusia, betiere elikadura, tenperatura eta kondizio finkatu batzuetan lan eginez.

Erreaktoreak diseinatzean, ezinbestekoa da bertan egiten diren erreakzio kimikoen ekuazio zinetikoa ezagutzea, masa- zein energia-balantzeetan agertzen baita termino hori. Aldagai horretaz gainera, beste batzuk ere jakin behar dira erreaktorea diseinatzeko. Ondoren azalduko dira erreaktore ez-jarraitu eta jarraituak diseinatzeko erabiltzen diren diseinu-aldagaiak.

16.3.1 Erreaktore ez-jarraitua

Erreaktore mota honen ezaugarri nagusia da ez duela egoera geldikorrean lan egiten. Hori dela eta, diseinuko aldagai garrantzitsuena erreakzio-denbora da. Era ez-jarraituan diharduen erreaktore mota ohikoena nahaste-erreaktore ez-jarraitua da. Erreaktore honen diseinuan erabili beharreko aldagaiak 16.6 irudian agertzen dira.

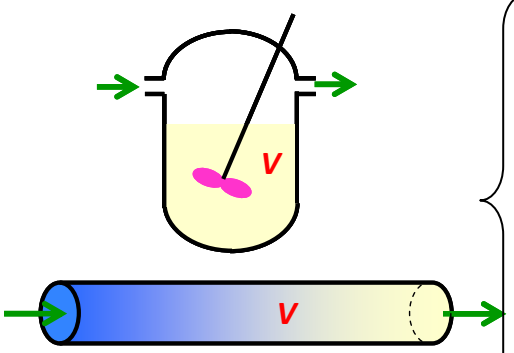


- t_R, erreakzio-denbora (*denbora*)
- N_i, i osagaiaren molak (*mol*)
- V, nahasteak betetzen duen bolumena (erreaktorearen bolumena) (*bolumena*)
- C_i, i osagaiaren kontzentrazioa (*mol/bolumena*)
- X_i, i osagaiaren bihurtze-maila
- T, tenperatura
- $(-r_i)$, i osagaiaren erreakzio-abiadura (*mol/denbora·bolumena*)

16.6 irudia. Erreaktore ez-jarraitua diseinatzeko erabiltzen diren aldagaiak.

16.3.2 Erreaktore jarraitua

Erreaktore jarraituak egoera geldikorrean erabiltzen dira (hasierako eta amaierako aldiak salbuespenak dira). Erreaktore jarraituen muturreko bi konfigurazioak nahaste-erreaktoreak eta hodi-formako erreaktoreak dira. 16.7 irudian agertzen dira erreaktore jarraituen eskema, eta diseinuan erabiltzeko aldagaiak.



- F_i, *i* osagaiaren emari molarra (*mol/denbora*)
- V, nahasteak betetzen duen bolumena (erreaktorearen bolumena) (*bolumena*)
- C_i, *i* osagaiaren kontzentrazioa (*mol/denbora*)
- Q, erreaktorera sartzen den emari bolumetrikoa (*bolumena/denbora*)
- τ, denbora espaziala (denbora)
- X_i, *i* osagaiaren bihurtze-maila
- T, tenperatura
- $(-r_i)$, i osgaiaren erreakzio-abiadura (*mol/denbora·bolumena*)

16.7 irudia. Erreaktore jarraituak diseinatzeko erabiltzen diren aldagaiak.

Erreaktore jarraituan, erreaktorera sartzen den korrontearen osagai bakoitzaren emari molarra (F_i) osagaiaren kontzentrazioaren (C_i) eta emari bolumetriko osoaren (Q) arabera idatz daiteke:

$$F_i\left(mol/t\right) = C_i\left(mol/bol\right)\cdot Q\left(bol/t\right) \tag{16.4}$$

Aipagarria da erreaktore jarraituen egoera geldikorreko eragiketan ez duela zentzurik denbora kronologikoa (t) erabiltzeak. Aldagai horren ordez, denbora espazial (τ) izeneko aldagaia erabiltzen da.

$$\tau = \frac{V}{Q} \tag{16.5}$$

Nahasteak betetzen duen V bolumenaren eta erreaktorera sartzen den Q emari bolumetrikoaren arteko erlazioa da denbora espaziala (sarrerako T eta P kondizioetan neurtuak). Erreaktorearen bolumen bereko elikadura tratatzeko beharko litzatekeen denbora da denbora espaziala. Adibidez, 30 min-ko denbora espazialak adierazten du erreaktorearen bolumenaren adinako elikadura-bolumena tratatu dela 30 minutuan.

Erreaktore jarraituetan jarioak erabiltzen direnez, bihurtze-maila era honetan definitzen da:

$$X_A = \frac{F_{A,0} - F_A}{F_{A,0}} \tag{16.6}$$

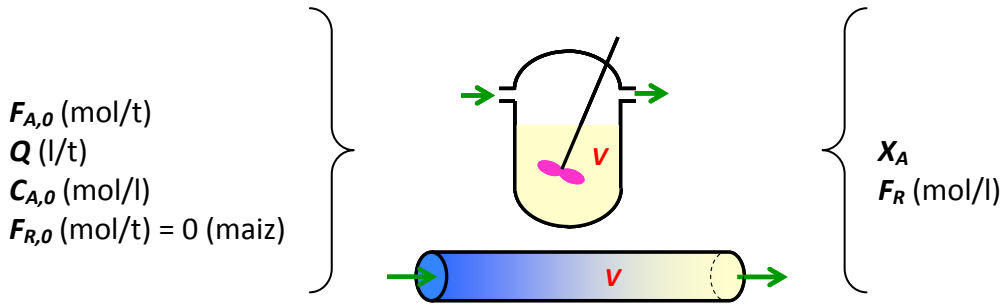
16.1 EKOIZPENA

Denbora unitateko produktuaren kantitate bat lortzea edo lehengaia desagertzea izan daiteke erreaktore kimikoen helburua. Lehenengo kasuaren adibideak (produktua ekoizten duten prozesuak) azido sulfurikoa edo metanola ekoizteko erreaktoreak izan daitezke. Osagai kutsatzaile bat erreakzio kimikoz desagerrarazi nahi denean (adibidez, lindanoaren eliminazioa), helburu nagusia erreaktiboa desagertzea da. Erreaktibo eta produktuak erreakzioaren estekiometriaz lotuta daudenez, aurrerantzean, sortzen ari den produktuarekiko definituko da erreaktorearen ekoizpena.

aA $\rightarrow$ rR erreakzio sinplearentzat, erreaktorean denbora-tarte batean (1 ordu, 1 egun, 1 urte…) lortu den R produktu kantitatea (mol edo masa) da R produktuaren ***ekoizpena (P_R)***.

16.4.1 Ekoizpena erreaktore jarraituan

Erreaktore jarraituan, produktuz aberatsa den korrontea irteten da une oro erreaktoretik. Horregatik, R-ren ***ekoizpen-abiadura (F_R)*** erabiltzen da, denbora-unitateko lortzen den ekoizpena, alegia. ***Δt denbora-tarteko R-ren ekoizpena***, berriz, ***P_R*** bezala adierazten da.



16.8 irudia. Erreaktore jarraituko R produktuaren ekoizpen-abiadura eta Δt tarteko ekoizpena kalkulatzeko aldagaiak.

Erreaktore jarraituan R produktuaren ekoizpen-abiadura honela kalkulatzen da:

$$F_R\left(mol/t\right) = F_{R,0} + \left(\frac{r}{a}\right)\cdot F_{A,0}\cdot X_A = F_{R,0} + \left(\frac{r}{a}\right)\cdot Q\cdot C_{A,0}\cdot X_A \tag{16.7}$$

Δt tarteko ekoizpena, berriz:

$$P_R\left(mol\right) = \Delta t\cdot\left[F_{R,0} + \left(\frac{r}{a}\right)\cdot Q\cdot C_{A,0}\cdot X_A\right] \tag{16.8}$$

16.1 adibidea

Erreaktore jarraitu batera 1000 l/h erreaktibo sartzen da, C_{A0} = 2 mol/l izanik. A $\rightarrow$ 2R erreakzioa gertatzen da R produktua ekoizteko. Erreaktorearen irteeran X_A = 0,70 neurtzen bada, kalkula ditzagun (a) R-ren ekoizpen-abiadura; (b) egun bakoitzeko R-ren ekoizpena.

Ebazpena

(a) Lehenik eta behin, elikadura-korronteko A lehengaiaren emari molarra kalkulatuko da:

$$F_{A_0} = Q \cdot C_{A_0} = 1000 \cdot 2 = 2000 \text{ mol/h}$$

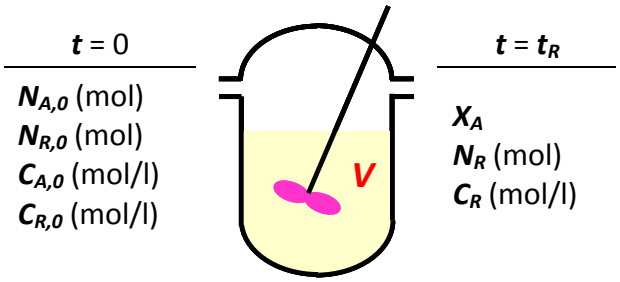
Erreakzioaren estekiometria kontuan hartuta, hau da R produktuaren emari molarra (ekoizpen-abiadura) erreaktore-irteeran:

$$F_R = \cancel{F_{R_0}} + 2 \cdot F_{A_0} \cdot X_A = 2 \cdot 2000 \cdot 0,7 = 2800 \text{ mol/h}.$$

(b) Egun oso batean lortzen den R-ren ekoizpena P_R = 2800·24 = 67,2 kmol da.

16.4.2 Ekoizpena erreaktore ez-jarraituan

Erreaktore ez-jarraituaren eragiketa ziklikoa da, hau da, kargaka dihardu. Hori dela eta, ***zikloko ekoizpena ($P_{Z,R}$)*** erabiltzen da ekoizpena adierazteko. Halaber, Δt denbora-tartean *N* ziklo gauzatu badira, tarte horretako ekoizpena *N*ren arabera kalkulatuko da.



16.9 irudia. Erreaktore ez-jarraituko R produktuaren zikloko ekoizpena eta Δt tarteko ekoizpena.

Zikloko R-ren ekoizpena:

$$P_{Z,R}\left(\text{mol}/\text{ziklo}\right) = N_{R,0} + \left(\frac{r}{a}\right) \cdot N_{A,0} \cdot X_A = N_{R,0} + \left(\frac{r}{a}\right) \cdot V \cdot C_{A,0} \cdot X_A \qquad (16.9)$$

Δt tartean R-ren ekoizpena, *N* ziklo burutu badira:

$$P_R(\text{mol}) = N_{R,0} + N \cdot \left(\frac{r}{a}\right) \cdot N_{A,0} \cdot X_A \qquad (16.10)$$

16.2 adibidea

Erreaktore ez-jarraitu batera 1000 mol A sartzen dira, A → 2R erreakzioaren bidez R produktua ekoizteko. X_A = 0,70 izan arte lanean dihardu (4 h). Une horretan, erreaktorea hustu egiten da, garbitu eta berriro bigarren ziklo bat hasten da; 2 h-ko denbora-hila izan du. Kalkula ditzagun (a) ziklo bakoitzeko R-ren ekoizpena; (b) egun bakoitzeko R-ren ekoizpena.

Ebazpena

(a) Ziklo baten amaieran erreaktorean dagoen R:

$$N_R = \cancel{N_{R_0}} + 2 \cdot N_{A_0} \cdot X_A = 2 \cdot 1000 \cdot 0,7 = 1400 \text{ mol da.}$$

Beraz, $P_{Z,R}$ = 1400 mol/ziklo

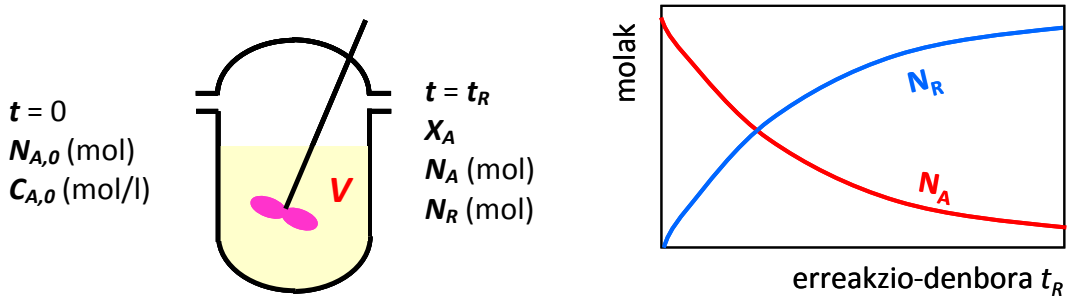
(b) Ziklo bakoitzaren iraupena 6 h da: erreakzioak 4 h irauten du. Denbora hila 2 h-koa da. Beraz, zikloak 6 h irauten badu, egun osoan (24 h) 4 ziklo oso betetzen dira. Horrela, P_R = 4·1400 = 5600 mol/egun-eko ekoizpena lortzen da.

17. GAIA

ERREAKTORE EZ-JARRAITU IDEALA

Erreaktore ez-jarraitua laborategian ekuazio zinetikoak lortzeko gehien erabiltzen den erreaktore mota da. Industrian, ekoizpen txikiak egiteko erabiltzen da (industria farmazeutikoan, adibidez), batez ere likido-faseko erreakzioak direnean. Katalizatzaile solidoa esekita behar duten erreakzioak gauzatzeko ere erabiltzen dira.

Erreaktore mota horretan, lehengaiak (erreaktiboak) hasieran sartzen dira erreaktorera, eta denbora batez (erreakzio-denbora) erreakzioa gauzatzen uzten da. Erreakzioa amaitzean, bihurtu gabeko lehengai eta produktuen nahastea irteten da erreaktoretik. Urrats horien guztien batuketa zikloa da; behin eta berriro errepikatzen da, eta zikloen tartean denbora hil bat egoten da (lehengaien karga, hustuketa eta abar egiteko behar den denbora ez-produktiboa). 17.1 irudian ikus daiteke egoera ez-geldikorrean diharduten erreaktoreen diseinua egiteko beharrezkoak diren aldagaiak eta denboran zehar erreaktore barruan erreaktiboek (A) eta produktuek (R) duten bilakaera.



17.1 irudia. Erreaktore ez-jarraitua eta erreakzioak irauten duen denboran erreaktibo (A) eta produktu (R) molen aldaketa.

Horrelako erreaktoreak diseinatzeko orduan, ***erreaktore ideala*** dela jotzen da, hau da, erreaktorean lortzen den nahastea ideala dela. Horren ondorioz, erreaktoreko bolumen-elementu guztietan baldintza berdinak daude. Hori bete dadin, ezinbestekoa da nahastearen irabiaketa egokia izatea. 17. gaian erreakzioak homogeneoak direla hartuko da, eta beraz, ekuazio zinetikoa 15.10 ekuazioa bezalakoa izango da[1].

17.1 ERREAKTORE EZ-JARRAITU IDEALAREN DISEINUA: MASA- BALANTZEA

Demagun A osagaiarekiko *n* ordena partzialeko aA $\rightarrow$ rR erreakzio homogeneoa gauzatzen dela, eta ekuazio zinetikoaren adierazpena $(-r_A) = k \cdot C_A^n$ jakina dela (hau da, *k* eta *n* ezagutzen dira).

Aren bihurtze-mailaren definizioaren arabera, une batean bihurtu gabeko Aren molak honela kalkulatzen dira:

$$N_A = N_{A,0} \cdot (1 - X_A) \tag{17.1}$$

Adierazpen hori deribatzen bada:

$$dN_A = -N_{A,0} \cdot dX_A \tag{17.2}$$

Ekuazio zinetikoa, C_A bihurtze-mailaz ordezkatzen bada, honela idatziko da:

[1] A + B + ··· $\rightarrow$ produktuak erreakzio homogeneoaren ekuazio zinetikoa $(-r_A) = -\dfrac{dC_A}{dt} = k \cdot C_A^n \cdot C_B^m \cdots$ idazten da.

$$\left(-r_A\right) = k \cdot C_A^n = k \cdot C_{A,0}^n \cdot \left(1 - X_A\right)^n \tag{17.3}$$

Erreaktore barruan nahasteak betetzen duen bolumena konstantea bada (adibidez, likido-faseko erreakzioetan, edo gas-faseko erreakzioetan, mol-aldaketarik ez badago ((r + s + ···) - (a + b + ···) = Δn = 0 bada)):

$$\frac{N_A}{V} = \frac{N_{A,0} \cdot \left(1 - X_A\right)}{V} \tag{17.4}$$

$$C_A = C_{A,0} \cdot \left(1 - X_A\right) \tag{17.5}$$

Hau da, edozein unetan Aren kontzentrazioaren eta bihurtze-mailaren arteko erlazioa zuzena da.

Nahasteak betetzen duen bolumena aldakorra izan daiteke, ordea. Adibidez, gas-faseko erreakzioan mol-aldaketa badago ($\Delta n \neq 0$ bada), nahasteak hasieran betetzen duen bolumena (V_0) eta edozein unetan betetzen duena (V) desberdinak izango dira, tenperatura eta presio konstantean lan egiten bada.

Bihurtze-mailarekin bolumena linealki aldatzen dela suposatzen bada[2]:

$$V = V_0 \cdot \left(1 + \varepsilon_A X_A\right) \tag{17.6}$$

ε_A ***bolumenaren gehienezko aldaketa-maila*** izanik, dimentsiogabea:

$$\varepsilon_A = \frac{V_{nahastea}(X_A = 1) - V_{nahastea}(X_A = 0)}{V_{nahastea}(X_A = 0)} \tag{17.7}$$

ε_A < 0 denean, nahasteak betetzen duen bolumena txikituz doa (gas-fasean Δn < 0 bada).

ε_A = 0 denean, nahasteak betetzen duen bolumena konstantea da (likido-fasean eta gas-fasean Δn = 0 bada).

ε_A > 0 denean, nahasteak betetzen duen bolumena handituz doa (gas-fasean Δn > 0 bada).

Hori guztia kontuan izanik, nahasteak betetzen duen bolumena aldakorra denez, edozein unetako Aren kontzentrazioa hasierako kontzentrazioarekin erlazionatzean, adierazpen hau lortzen da:

$$\frac{N_A}{V} = \frac{N_{A,0} \cdot \left(1 - X_A\right)}{V_0 \cdot \left(1 + \varepsilon_A X_A\right)} \tag{17.8}$$

$$C_A = \frac{C_{A,0} \cdot \left(1 - X_A\right)}{\left(1 + \varepsilon_A X_A\right)} \tag{17.9}$$

[2] Gas-faseko erreakzioan tenperatura eta presioa aldatatuko balira, nahastearen bolumena honela aldatuko litzateke: $V = V_0 \cdot \left(1 + \varepsilon_A \cdot X_A\right) \cdot \left(\frac{T}{T_0}\right) \cdot \left(\frac{P_0}{P}\right)$. $\left(1 + \varepsilon_A \cdot X_A\right)$ terminoak mol-aldaketak sortutako bolumen-aldaketa ematen du; $\left(T/T_0\right)$ eta $\left(P_0/P\right)$ terminoek tenperatura- eta presio-aldaketak sortutako bolumen aldaketa ematen dute.

17.1 adibidea

2A $\rightarrow$ B erreakzioa gas-fasean gauzatzen da, tenperatura eta presio konstantean. Kalkula dezagun ε_A-ren balioa:

(a) 100 mol A + 0 mol B sartzen badira
(b) 100 mol A + 20 mol B sartzen badira
(c) 100 mol A + 20 mol B + 20 mol inerte sartzen badira
(d) A $\rightarrow$ 2B erreakzioa izanik, 100 mol A + 0 mol B sartzen badira
(e) A $\rightarrow$ 2B erreakzioa izanik, 100 mol A + 20 mol B + 20 mol inerte sartzen badira

Ebazpena

(a)

molak	A	B	Guztira
$X_A = 0$	100	0	100
$X_A = 1$	0	50	50

$\varepsilon_A = -0,5$

(b)

molak	A	B	Guztira
$X_A = 0$	100	20	120
$X_A = 1$	0	70	70

$\varepsilon_A = -0,417$

(c)

molak	A	B	Inertea	Guztira
$X_A = 0$	100	20	20	140
$X_A = 1$	0	70	20	90

$\varepsilon_A = -0,357$

(d)

molak	A	B	Guztira
$X_A = 0$	100	0	100
$X_A = 1$	0	200	200

$\varepsilon_A = +1$

(e)

molak	A	B	Inertea	Guztira
$X_A = 0$	100	20	20	140
$X_A = 1$	0	220	20	240

$\varepsilon_A = +0,714$

Ikusten den bezala, gas-faseko erreakzioetan inerteak eragina dauka nahastean betetzen duen bolumenean. $\Delta n < 0$ bada, inertea sartzean bolumena gutxiago txikitzen da; $\Delta n > 0$ balitz, inertearen presentziak bolumena gutxiago handituko luke.

17.2 adibidea

2A $\rightarrow$ B erreakzioa gas-fasean gauzatzen da tenperatura eta presio konstantean. Erreaktore ez-jarraitua $N_{A,0}$ = 2 mol eta $N_{B,0}$ = 1 molez betetzen da 1 atm eta 298 K-ean. Kalkula ditzagun A osagaiaren % 75ek erreakzionatu duen uneko A eta B-ren kontzentrazioak.

Ebazpena

Gas-faseko nahasteak hasieran betetzen duen bolumena:
V_0 = 3 (mol)·0,082 (atm·l/K·mol)·298 (K) / 1 (atm) = 73,3 l da.
$C_{A,0} = 2,73 \cdot 10^{-2}$ mol/l eta $C_{B,0} = 1,36 \cdot 10^{-2}$ mol/l dira. Hasierako unean $M = C_{B,0}/C_{A,0}$ = 0,5 da.
Lehenik eta behin, ε_A kalkulatuko da: ε_A = -1/3, alegia.
Beraz, $V = V_0\left(1 - \frac{1}{3} \cdot X_A\right)$ erlazioa betetzen da.

$$\left.\begin{aligned} C_A &= \frac{C_{A,0}\cdot(1-X_A)}{(1+\varepsilon_A X_A)} \\ C_B &= \frac{C_{A,0}\left(M+\frac{1}{2}\cdot X_A\right)}{(1+\varepsilon_A X_A)} \end{aligned}\right\} \quad ; \quad \left\{\begin{aligned} C_A &= \frac{2{,}73\cdot 10^{-2}\cdot(1-0{,}75)}{\left(1-\frac{1}{3}\cdot 0{,}75\right)} = 9{,}1\cdot 10^{-3}\ \text{mol}/\text{l} \\ C_B &= \frac{2{,}73\cdot 10^{-2}\cdot\left(0{,}5+\frac{1}{2}\cdot 0{,}75\right)}{\left(1-\frac{1}{3}\cdot 0{,}75\right)} = 3{,}185\cdot 10^{-2}\ \text{mol}/\text{l} \end{aligned}\right.$$

Erreaktore ez-jarraituan A osagai mugatzailearen masa-balantzea egiten bada (mol/t):

– Desagertzen diren A molak = Metatutako A molak (mol/t)

$$-\frac{dN_A}{dt} = (-r_A)\cdot V \tag{17.10}$$

Bihurtze-maila aldagaitzat aukeratzen bada, eta bolumenak jasan dezakeen aldaketa kontuan hartzen bada, erreaktore ez-jarraitu idealaren diseinu-ekuazioa lortzen da:

$$C_{A,0}\cdot\int_0^{X_A}\frac{dX_A}{(-r_A)\cdot(1+\varepsilon_A\cdot X_A)} = t_R \tag{17.11}$$ [3]

Ohartu gaitezen bolumen-aldaketarik ez badago, $\varepsilon_A = 0$ dela.

Diseinu-ekuazioak hau adierazten du: erreakzioak zenbat denbora iraun behar duen hasierako kondizio batzuekin bihurtze-maila jakin bat lortzeko; erreakzio-denbora, alegia. 17.4 ekuazioko integrala ebazteko, ekuazio zinetikoak jakina izan behar du nahitaez, hau da, konstante zinetikoak eta erreakzio-ordenak ezagunak izan behar dute.

Diseinu-ekuazioa analitikoki edo grafikoki ebatz daiteke. Integrala zuzenean ebatz daitekeenean hobetsiko da ebazpen analitikoa, eta, ezinezkoa denean, ebazpen grafikoa erabiliko da. Grafikoki ebazteko,

$$\frac{C_{A,0}}{(-r_A)\cdot(1+\varepsilon_A\cdot X_A)} \quad vs \quad X_A$$

kurba marraztuko da, eta [0 - X_A] tarteko kurbaren azpiko azalerak adierazten du erreakzioak zenbat iraun behar duen. Bolumen-aldaketarik ez balego,

$$\frac{C_{A,0}}{(-r_A)} \quad vs \quad X_A$$

kurbarekin lan egin beharko litzateke.

Hemendik aurrerako azalpenak sinplifikatzeko, bolumen-aldaketarik gabeko (ε_A = 0) eta $(-r_A) = k\cdot C_A^n$ erako ekuazio zinetikoa dagokion erreakzioa hartuko da eredutzat. Gainera, A osagaia bihurtu gabe sartuko dela hartuko da ($X_{A,0}$ = 0). Hala, hemendik aurrerako azalpenetan, ekuazio zinetiko eta diseinu-ekuazio hauek erabiliko dira.

[3] Gas-faseko erreakzioan tenperatura eta presioa aldatatuko balira, diseinu-ekuazioa hau izango litzateke:

$$C_{A,0}\cdot\int_0^{X_A}\frac{dX_A}{(-r_A)\cdot(1+\varepsilon_A\cdot X_A)\cdot\left(\frac{T}{T_0}\right)\cdot\left(\frac{P_0}{P}\right)} = t_R\,.$$

$$\left(-r_A\right) = k \cdot C_A^n = k \cdot C_{A,0}^n \cdot \left(1 - X_A\right)^n \tag{17.12}$$

$$C_{A,0} \cdot \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{\left(-r_A\right)} = t_R \tag{17.13}$$

Bolumen-aldaketa balego, prozedura berdinari jarraitu beharko litzaioke.

17.2 ERREAKTORE ISOTERMIKOA

Erreakzioak irauten duen denbora-tarte osoan tenperatura aldatzen ez bada, konstante zinetikoa ere (*k*) ez da aldatuko, eta diseinu-ekuazioko integraletik kanpora atera daiteke.

$$\frac{C_{A,0}}{k} \cdot \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{C_{A,0}^n \cdot \left(1 - X_A\right)^n} = t_R \tag{17.14}$$

17.2.1 Ebazpen analitikoa

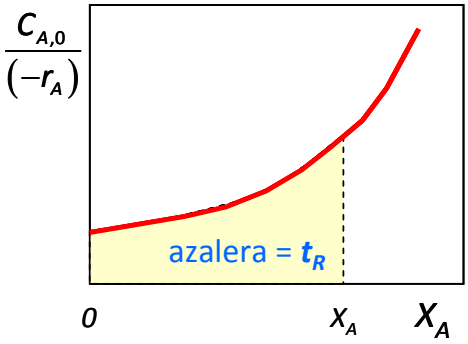
Diseinu-ekuazioan erreakzio-ordena (*n*) ezaguna bada, integralak ebazpen analitiko sinplea izan dezake, batez ere *n* = 0, 1 edo 2 den kasuetarako. Ondoren agertzen dira ordena horientzat lortzen diren ekuazio integratuak 17.1 taulan:

17.1 Taula. Ohiko ordenetarako masa-balantzearen forma integratua.

Ordena	*Adierazpen integratuak*	
n = 0	$t_R = \frac{C_{A,0}}{k} \cdot X_A$	(17.15)
	$X_A = k \cdot C_{A,0} \cdot t_R$	(17.15.a)
	$C_A = C_{A,0} - k \cdot t_R$	(17.15.b)
n = 1	$t_R = \frac{1}{k} \cdot \ln\left(\frac{1}{1 - X_A}\right)$	(17.16)
	$X_A = 1 - e^{-k \cdot t_R}$	(17.16.a)
	$C_A = C_{A,0} \cdot e^{-k \cdot t_R}$	(17.16.b)
n = 2	$t_R = \frac{1}{k \cdot C_{A,0}} \cdot \left(\frac{X_A}{1 - X_A}\right)$	(17.17)
	$X_A = \frac{k \cdot C_{A,0} \cdot t_R}{1 + k \cdot C_{A,0} \cdot t_R}$	(17.17.a)
	$C_A = C_{A,0} \cdot \left(1 - \frac{k \cdot C_{A,0} \cdot t_R}{1 + k \cdot C_{A,0} \cdot t_R}\right)$	(17.17.b)

17.2.2 Ebazpen grafikoa

Aipatu den bezala, diseinu-ekuazioa grafikoki ebazteko, $\frac{C_{A,0}}{(-r_A)}$ vs X_A kurba marraztu behar da, X_A = 0 eta lortu nahi den X_A tartean. Kurbaren azpiko azalera erreakzioa lanean eduki behar den erreakzio-denbora da (t_R). 17.2 irudian agertzen den azalera ilunduak ematen du X_A bihurtze-maila lortzeko erreakzio-denbora.



17.2 irudia. Erreaktore ez-jarraitu isotermoaren diseinu-ekuazioaren ebazpen grafikoa.

17.3 adibidea

Erreaktore isotermo batean A → 2B likido-faseko erreakzioa gauzatzen da. Erreakzioaren ekuazio zinetikoa $(-r_A)$(mol/l h) = $2 \cdot C_A$ da. Erreaktorea 2 mol/l A osagaiaz betetzen da. Kalkula ditzagun (a) % 60ko bihurtze-maila lortzeko behar den erreakzio-denbora (b) 0,2 ordu lanean aritzen bada, erreaktoreko nahastearen konposizioa (c) 0,2 ordu lanean jardun ondoren 5 mol B lortu nahi bada, erreaktoreak zer bolumen izan behar duen.

Ebazpen analitikoa

Likido-faseko erreakzioa izanik, ez da bolumen-aldaketarik nabarituko ($\varepsilon_A = 0$).
Ekuazio zinetikoa honela idazten da X_A-ren funtzioan:

$$(-r_A)(\text{mol/l h}) = 2 \cdot C_A = 2 \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A)$$

(a) $t_R = \cancel{C_{A,0}} \int_0^{0,6} \frac{dX_A}{2\cancel{C_{A,0}}(1-X_A)} = \frac{1}{2} \cdot \ln\left(\frac{1}{1-0,6}\right) = 0,458\,h$ iraun behar du.

(b) 0,2 ordu lanean jardundakoan zer bihurtze-maila lortzen den kalkulatuko da:

$$2\text{ h} = \cancel{C_{A,0}} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{2\cancel{C_{A,0}}(1-X_A)}$$

$0,2\text{ h} = \frac{1}{2} \cdot \ln\left(\frac{1}{1-X_A}\right)$; $X_A = 0,33$ bihurtze-maila lortzen da.

A eta Bren masa-balantzeetatik, amaieran A eta Bren molak lortzen dira:

$C_A = C_{A,0} \cdot (1 - X_A) = 2 \cdot (1 - 0,33) = 1,34$ mol/l

$C_B = C_{B,0} + 2 \cdot C_{A,0} \cdot X_A = 0 + 2 \cdot 2 \cdot 0,33 = 1,32$ mol/l

(c) (b) atalean ikusi da, t_R = 0,2 h bada, X_A = 0,33 dela eta C_B = 1,32 mol/l

Beraz, erreaktorean 5 mol B nahi badira, V = 5 mol/1,32 mol/l = 3,8 l bolumeneko erreaktorea behar da.

17.4 adibidea

Erreaktore isotermo batean A + B $\rightarrow$ 3C gas-faseko erreakzioa gauzatzen da. Erreakzioaren ekuazio zinetikoa $(-r_A)$(mol/l h) = $2 \cdot C_A \cdot C_B$ da. Erreaktorea 2 mol/l A eta 2,5 mol/l B osagaiez betetzen da. Kalkula ditzagun (a) Aren % 60 bihurtzeko behar den erreakzio-denbora (b) erreakzioak 0,2 h irauten badu, erreakzioa amaitzean erreaktoreko nahasteak izango duen konposizioa.

Ebazpen grafikoa

Gas-faseko erreakzioa eta $\Delta n \neq 0$ izanik, ε_A = +0,444 da.
A eta Bren masa-balantzeetatik:

$$C_A = \frac{C_{A,0} \cdot (1 - X_A)}{(1 + 0,444 \cdot X_A)} \quad \text{eta}$$

$$C_B = \frac{C_{A,0} \cdot (M - X_A)}{(1 + 0,444 \cdot X_A)}$$

$$M = C_{B,0}/C_{A,0} = 1,25 \text{ izanik}$$

Ekuazio zinetikoa honela idazten da X_A-ren funtzioan:

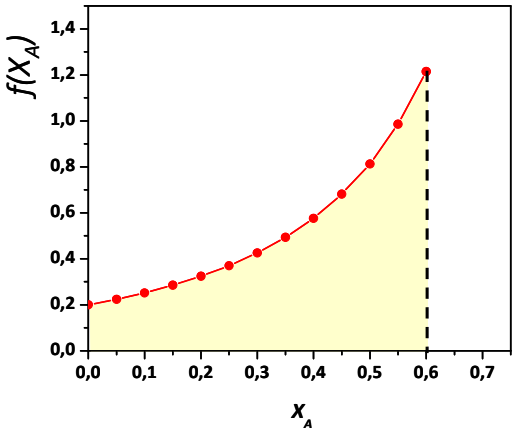
$$(-r_A) = 2 \cdot \frac{C_{A,0}^2 \cdot (1 - X_A) \cdot (1,25 - X_A)}{(1 + 0,444 \cdot X_A)^2}$$

(a) Diseinu-ekuazioan ordezkatzean, adierazpen hau lortzen da:

$$t_R = \int_0^{0,6} \frac{dX_A (1 + 0,444 \cdot X_A)}{2(1 - X_A) \cdot C_{A,0} \cdot (1,25 - X_A)} = \int_0^{0,6} f(X_A) \cdot dX_A$$

Integralaren ebazpen analitikoa bat-batekoa ez denez, grafikoki ebatzi behar da. Ondoko taula eraiki da $f(X_A) = \dfrac{(1 + 0,444 \cdot X_A)}{2 \cdot (1 - X_A) \cdot C_{A,0} \cdot (1,25 - X_A)}$ hartuta:

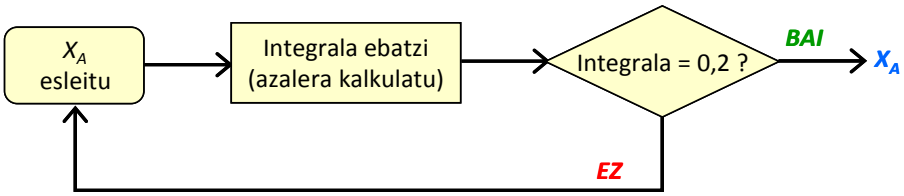
X_A	0	0,05	0,1	0,15	0,2	0,25	0,3	0,35	0,4	0,45	0,5	0,55	0,6
$f(X_A)$	0,2	0,224	0,252	0,285	0,324	0,37	0,426	0,493	0,576	0,681	0,813	0,986	1,215



Erreakzioak iraun behar duen denbora (ilundutako azalera) 0,3 h da.

(b) Ebazpena haztapenez egingo da. Prozedura honi jarraitu behar zaio:

X_A-ri balio bat esleitu → azalera kalkulatu → 0,2 h-ren berdina den ikusi.



Taula honetan agertzen da X_A-ren kalkuluaren prozesuaren eboluzioa.

X_A	t_R (h)
0,6	0,3
0,55	0,252
0,5	≈ 0,2

Beraz, 0,2 h-ko erreakzio-denboran, Aren % 50ek erreakzionatuko luke.

17.5 adibidea

Isotermikoki 45 ºC-an diharduen erreaktorean A ⇆ S erreakzio itzulgarria gertatzen da likido-egoeran. Erreaktorea A osagaiaz betetzen da, $C_{A,0}$ = 2 mol/l kontzentrazioarekin. Kalkula ditzagun (a) Sren 1,25 mol/l kontzentrazioa lortzeko behar den erreakzio-denbora, (b) orekako bihurtze-maila.

Datuak: erreakzioaren ekuazio zinetikoa $(-r_A)\left(\text{mol}/\text{lh}\right) = 5{,}94 \cdot C_A - 2{,}26 \cdot C_S = 5{,}94 \cdot \left[C_A - \frac{C_S}{2{,}63}\right]$

da.

Ebazpena

$C_A = C_{A,0} \cdot (1 - X_A)$ eta $C_S = C_{A,0} \cdot X_A$ dira, bolumen-aldaketarik ez dagoelako.
Ekuazio zinetikoan ordezkatzen badira A eta Sren kontzentrazioak, ekuazio zinetiko hau lortzen da: $(-r_A)\left(mol/lh\right) = 5{,}94 \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A) - 2{,}26 \cdot C_{A,0} \cdot X_A$

Diseinu-ekuazioan ordezkatuz, eta Sren 1,25 mol/l kontzentrazioa lortzeko, X_A = 0,625 behar da:

$$C_S = 2{,}15\, mol/l = \cancel{C_{S,0}} + C_{A,0} \cdot X_A = 2 \cdot X_A\, mol/l$$

Diseinu-ekuazioan ordezkatzen bada:

$$t_R = \cancel{C_{A,0}} \cdot \int_0^{0,625} \frac{dX_A}{5{,}94 \cdot \cancel{C_{A,0}} \cdot (1 - X_A) - 2{,}26 \cdot \cancel{C_{A,0}} \cdot X_A}$$

Analitikoki ebazten bada, t_R = 0,24 h erreakzio-denbora lortzen da.

17.6 adibidea

A → 2B erreakzio autokatalizatua isotermikoki gauzatzen da 10 l-ko bolumeneko erreaktore ez-jarraituan. Erreaktorea 2 mol A eta 0,3 mol B osagaiez betetzen da. Erreakzioaren ekuazio

zinetikoa hau da: $(-r_A)\left(\text{mol}/\text{l min}\right)=0{,}1\cdot C_A\cdot C_B$. Kalkula dezagun B osagaiaren 2,5 mol lortzeko erreakzioak zenbat denbora iraun behar duen.

Ebazpena

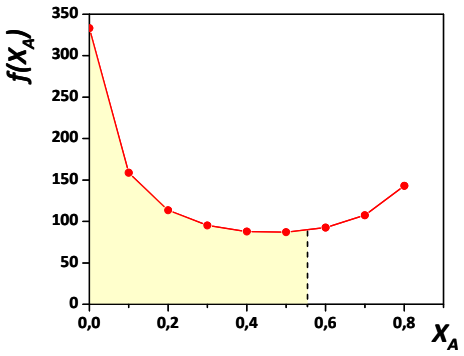
$C_{A,0}$ = 0,2 mol/l eta $C_{B,0}$ = 0,03 mol/l dira. $M = C_{B,0}/C_{A,0}$ = 0,15 da hasierako unean.
A eta Bren masa-balantzeetatik:
$C_A=0{,}2\cdot(1-X_A)$ eta $C_B=0{,}2\cdot(0{,}15+2X_A)$ direla lortzen da. Beraz, 2,5 mol B edukitzeko (C_B = 0,25 mol/l), X_A = 0,55 izan behar du.

Balio horiek ekuazio zinetikoan ordezkatzen badira, ekuazio zinetiko hau lortzen da:

$$(-r_A)\left(\text{mol}/\text{l min}\right)=0{,}1\cdot 0{,}2\cdot(1-X_A)\cdot 0{,}2\cdot(0{,}15+2X_A)$$

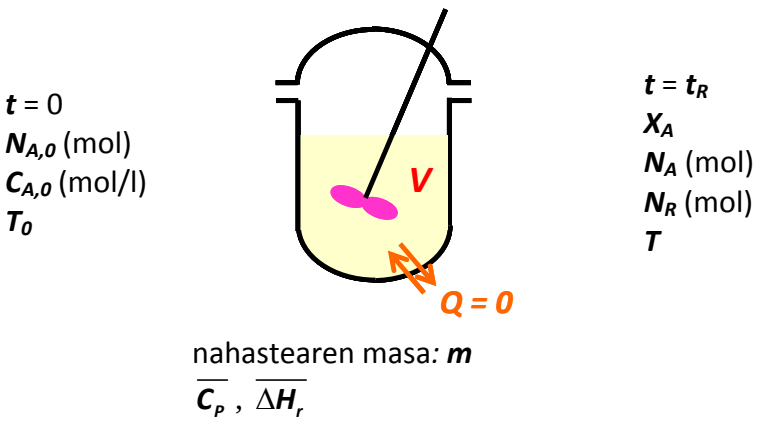
Hori diseinu-ekuazioan ordezkatu eta 0-0,55 tartean integratzen bada, grafikoki, 70,9 minutuko erreakzio-denbora behar dela ikusten da.

X_A	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8
$f(X_A)$	333,3	158,7	113,6	95,2	87,7	87,0	92,6	107,5	142,9



17.3 ERREAKTORE ADIABATIKOA

Erreaktorea ingurunearekiko termikoki isolatuta badago, erreakzioa gertatzen den heinean askatzen den beroa (exotermikoa bada) edo xurgatzen den beroa (endotermikoa bada) jasaten du nahastearen muinak, eta, hala, nahastearen tenperatura aldatu egiten da. Horregatik, diseinu-ekuazioa lortzeko, energia-balantzea ebatzi behar da, nahastearen tenperatura jakin ahal izateko.



17.3 irudia. Erreaktore ez-jarraitu adiabatikoa.

Erreaktore osoan energia-balantzea egiten bada (energia/t):

$$\begin{pmatrix} \text{Energiaren} \\ \text{METATZE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenean} \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} \text{Energiaren} \\ \text{SORTZE/XURGATZE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenean} \end{pmatrix}$$

Nahastearen bero espezifikoa eta erreakzio-beroaren batez besteko balioak hartzen badira, energia-balantzea honela eman daiteke:

$$\left(-\overline{\Delta H_r}\right)\cdot\left(-r_A\right)\cdot V = m\cdot\overline{C_p}\cdot\frac{dT}{\cancel{dt}} = \left(-\overline{\Delta H_r}\right)\cdot N_{A,0}\cdot\frac{dX_A}{\cancel{dt}} \qquad (17.18)$$

Erreakzioaren hasiera (t = 0, X_A = 0, $T = T_0$) eta amaiera (t_R, X_A, T) artean integratuz, nahastearen tenperaturaren eta bihurtze-mailaren arteko erlazioa kalkula daiteke:

$$T = T_0 + \frac{\left(-\overline{\Delta H_r}\right)\cdot N_{Ao}\cdot X_A}{m\cdot\overline{C_P}} \qquad (17.19)$$

17.19 adierazpenarekin, bihurtze-maila bat lortu denean nahastearen tenperatura kalkula daiteke. Hortik aurrerako prozedura hau da:

$$X_A \xrightarrow[\text{balantzea}]{\text{energia-}} T \xrightarrow{\text{Arrhenius}} k \xrightarrow[\text{zinetikoa}]{\text{ekuazio}} (-r_A)$$

Diseinu-ekuazioaren ebazpena grafikoa izango da.

17.7 adibidea

1 l-ko bolumeneko erreaktore adiabatikoan A $\rightarrow$ B likido-faseko erreakzioa gauzatzen da, $C_{A,0}$ = 1 mol/l izanik eta hasierako tenperatura 25 ºC izanik. Erreakzioaren ekuazio zienetikoa $(-r_A)$(mol/l min) = $k\cdot C_A$ da. Kalkula dezagun X_A = 0,55 izateko zenbait denbora iraun behar duen erreakzioak.

Datuak: Arrhenius-en ekuazioa: $k = 5\cdot10^5\cdot\exp(-5050/T)$ min^{-1}

($-\Delta Hr$) = 30 kcal/mol ; $\overline{C_V}$ = 0,95 kcal/kgºC; nahastearen dentsitatea $\overline{\rho}$ = 1,08 kg/l.

Ebazpena

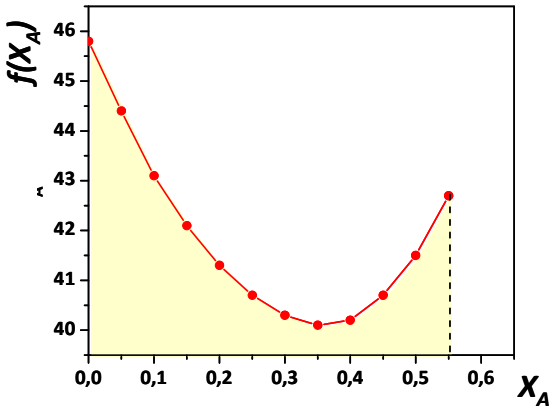
Bolumen-aldaketarik ez dagoenez, $(-r_A)$(mol/lh) = $k\cdot C_A = k\cdot C_{A,0}\cdot(1-X_A)$ adierazpena erabil daiteke. Masa-balantzea, berriz, hau da:

$$t_R = \cancel{C_{A,0}}\cdot\int_0^{0,6}\frac{dX_A}{k\cdot\cancel{C_{A,0}}\cdot\left(1-X_A\right)}$$

Integrala ebazteko, konstante zinetikoaren eta X_A-ren erlazioa lortu behar da. Horretarako, energia-balantzea erabiliko da (likido-fasean $\overline{C_P} \approx \overline{C_V}$ dela hartuz):

$$T(K) = 298(K) + \frac{30\left(kcal/mol\right)\cdot 1\left(mol\right)\cdot X_A}{1,08(kg)\cdot 0,95\left(kcal/kgK\right)} = 298 + 29,24\cdot X_A$$

X_A	T (K)	k (min^{-1})	$f(X_A)$
0	298	0,02184	45,8
0,05	299,5	0,02373	44,4
0,1	300,9	0,02575	43,1
0,15	302,4	0,02793	42,1
0,2	303,8	0,03026	41,3
0,25	305,3	0,03277	40,7
0,3	306,8	0,03546	40,3
0,35	308,2	0,03834	40,1
0,4	309,7	0,04142	40,2
0,45	311,2	0,04472	40,7
0,5	312,6	0,04825	41,5
0,55	314,1	0,05201	42,7



Kurbaren azpiko azaleratik ondorioztatzen da t_R = 25,1 min-ko erreakzio-denbora behar dela.

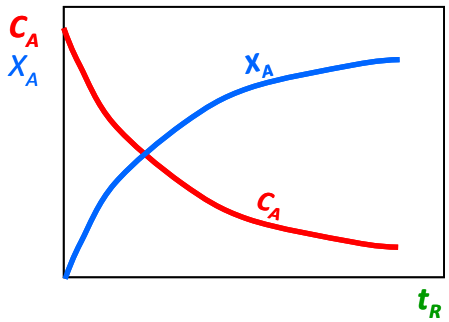
17.4 EKUAZIO ZINETIKOEN LORPENA ERREAKTORE EZ-JARRAITUAN: METODO INTEGRATUA ETA METODO DIFERENTZIALA

Ekuazio zinetikoak lortzeko isotermikoki diharduten erreaktore ez-jarraituak erabiltzen dira, sinpletasunagatik eta datuak lortzeko erraztasunagatik. Behin laborategian datu zinetikoak lortuta, ekuazio zinetikoa lortzeko (hau da, konstante zinetikoaren balioa eta erreakzio-ordenen balioa lortzeko) metodo integratua zein metodo diferentziala erabil daitezke.

Laborategian egindako saiakuntzan, denboran X_A-k duen aldaketari jarraipena egiten zaio (zuzenean C_A neurtuko den arren, bihurtze-mailaren definiziotik erraz lor daiteke haren balioa): $X_A = \dfrac{C_{A,0} - C_A}{C_{A,0}}$ baita (bolumen-aldaketarik gabeko erreakzioan).

17.2 Taula. Laborategian denboran zehar neurtutako C_A-ren balioak eta X_A-ren kalkulua.

t_R	C_A	X_A
0	$C_{A,0}$	0
t_1	$C_{A,0}$	$X_{A,1}$
...	...	...
t	C_A	X_A



17.3 irudia. C_A eta X_A-ren eboluzioa denboran zehar.

Zinetika errazeko erreakzioak azalduko dira, $(-r_A) = k \cdot C_A^n$ moduan idatz daitezkeen ekuazio

zinetikoak dauzkaten erreakzioak, alegia. Gainera, bolumen-aldaketarik ez dagoeneko kasuak azalduko dira.

17.4.1 Metodo integratua

Metodo hau erabiltzeko, balio bat esleitu behar zaio erreakzio-ordenari (n), ekuazioa integratu ahal izateko. Hala, masa-balantzea integratu ondoren lortzen den adierazpenak esperimentalki lortutako puntuak doitzen baditu, esleitutako ordena egokia delako da.

Ekuazio zinetikoak lortzeko, metodo integratua lehen urrats gisa erabiltzen da, 0, 1 eta 2 ordenetarako probak eginez. Hiruretako batek ere ez baditu datu esperimentalak doitzen, metodo diferentzialera jotzen da. 17.1taulan agertzen dira 0, 1 eta 2 ordenako erreakzioen ekuazio zinetikoak integratuta.

17.8 adibidea

Erreaktore isotermoan A $\rightarrow$ R likido-faseko erreakzioa gauzatu da 30 ºC-an. Kalkula dezagun ekuazio zinetikoa $(-r_A) = k \cdot C_A^n$ erakoa bada. Datu esperimentalak taulan agertzen dira.

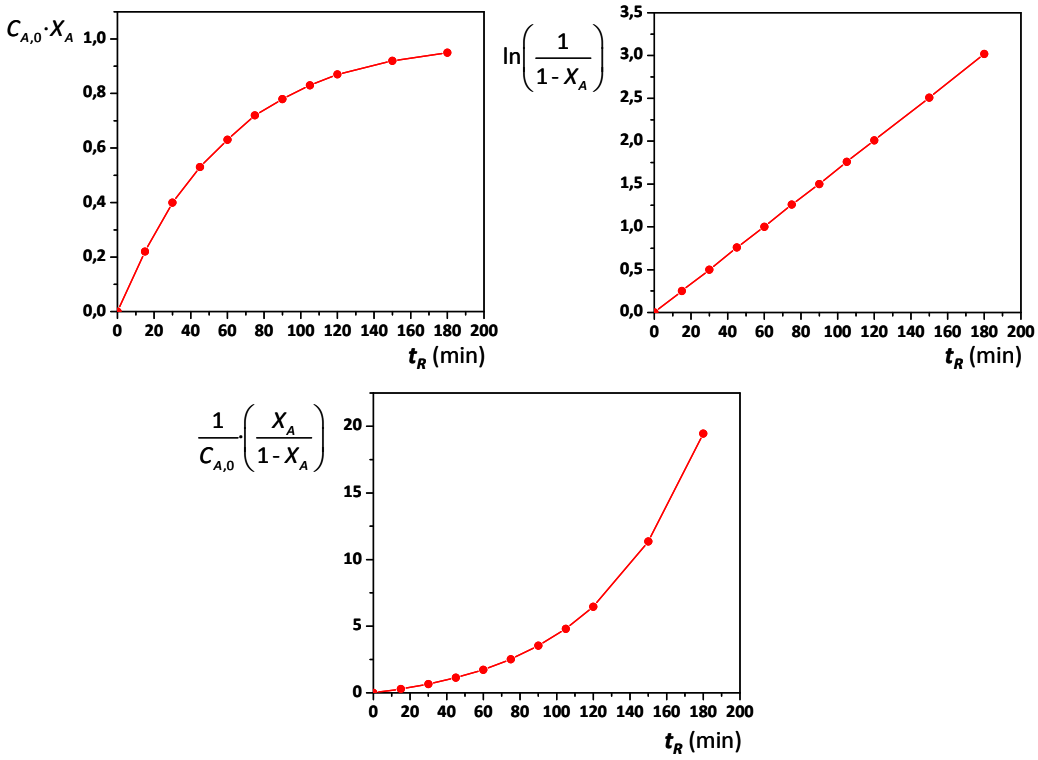
t_R (min)	0	15	30	45	60	75	90	105	120	150	180
C_A (mol/l)	1	0,778	0,605	0,47	0,366	0,284	0,221	0,172	0,134	0,081	0,0489

Ebazpena

Lehenik eta behin, denbora bakoitzean dagokion bihurtze-maila kalkulatuko da. Ondoren, ordena bakoitzari dagokion ekuazio integraturako puntuak kalkulatuko dira.

			$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$
t_R (min)	C_A(mol/l)	X_A	$C_{A,0} \cdot X_A$	$\ln\left(\frac{1}{1 - X_A}\right)$	$\frac{X_A}{C_{A,0} \cdot (1 - X_A)}$
0	1	0	0	0	0
15	0,778	0,22	0,22	0,25	0,29
30	0,605	0,4	0,4	0,5	0,65
45	0,47	0,53	0,53	0,76	1,13
60	0,366	0,63	0,63	1	1,73
75	0,284	0,72	0,72	1,26	2,52
90	0,221	0,78	0,78	1,5	3,53
105	0,172	0,83	0,83	1,76	4,81
120	0,134	0,87	0,87	2,01	6,46
150	0,081	0,92	0,92	2,51	11,35
180	0,0489	0,95	0,95	3,02	19,45

Taulako datuak irudikatzen badira, ohartzen gara 1 ordenako ekuazioak ondo doitzen dituela. Beraz, erreakzioa lehen ordenakoa da Arekiko, eta 30 ºC-an konstante zinetikoaren balioa lerro zuzenaren malda izanik, k = 0,0168 min^{-1} lortzen da.



30 ºC-an, ekuazio zinetikoa ($-r_A$) (mol/l min) = 0,0168·C_A da.

17.4.2 Metodo diferentziala

Erreakzio-abiaduraren definizioaren arabera (bolumen aldaketarik gabeko sistementzako),

$$\left(-r_A\right) = -\frac{dC_A}{dt} = C_{A,0}\frac{dX_A}{dt} \tag{17.20}$$

erreakzio-abiadura C_A vs t_R edo $C_{A,0}\cdot X_A$ vs t_R kurben malda da. Era berean, ekuazio zinetikoak itxura hau du:

$$\left(-r_A\right) = k\cdot C_A^n \tag{17.21}$$

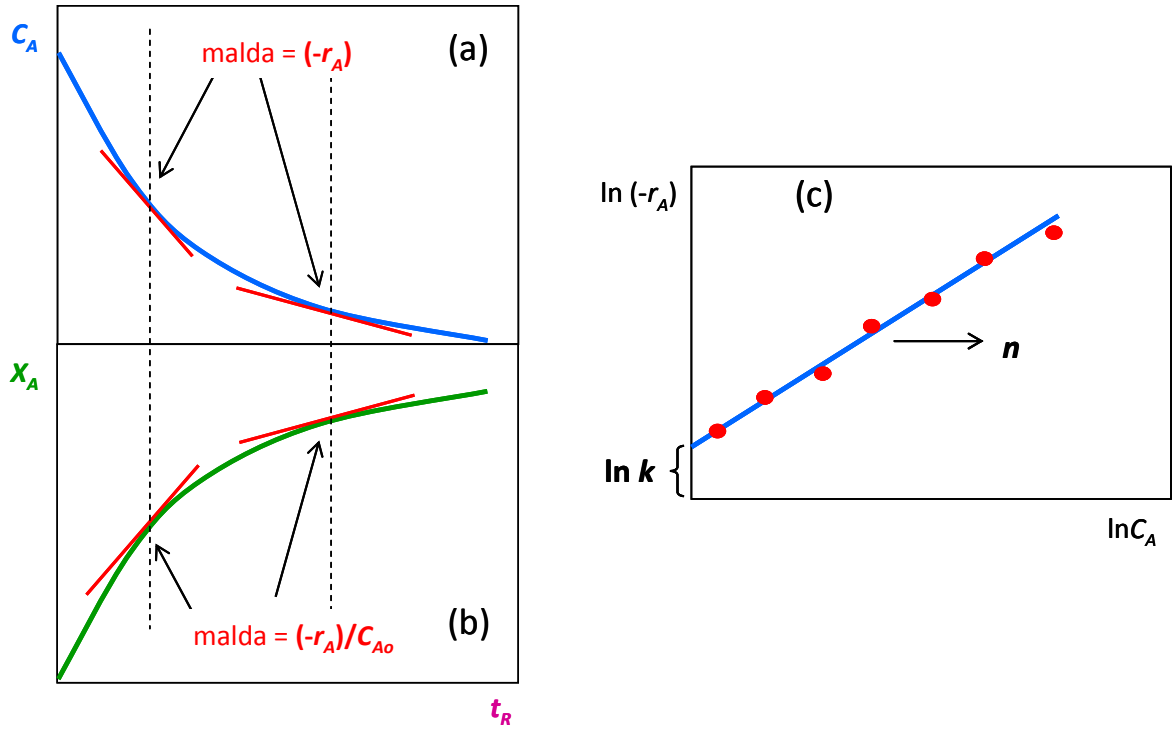
Ekuazio zinetikoan logaritmo nepertarrak hartzen badira, adierazpen hau lortzen da:

$$\ln\left(-r_A\right) = \ln k + n\cdot C_A \tag{17.22}$$

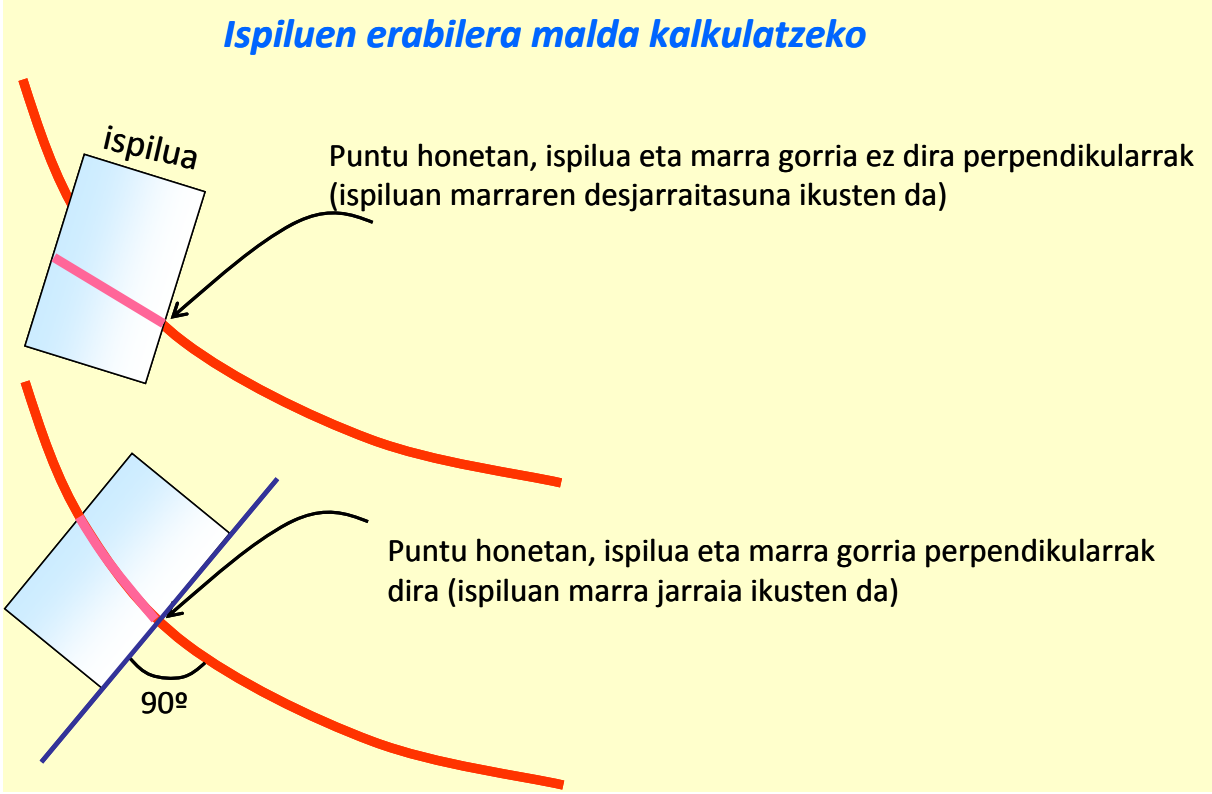
17.22 ekuazioko lerro zuzenaren maldatik erreakzio-ordena (n) kalkulatzen da, eta jatorriko ordenatutik laneko tenperaturan konstante zinetikoak duen balioa lortzen da.

Laborategian lortutako datu esperimentalekin, hainbat kontzentraziotarako (edo X_A) maldak kalkulatzen dira, 17.4(a) irudian agertzen den bezala. Horrela lortutako erreakzio-abiaduren logaritmo nepertarrak lerro zuzenera doitzen dira kontzentrazioen logaritmo nepertarrekin (17.4(b) irudia).

C_A vs t_R edo X_A vs t_R grafikoetan maldak kalkulatzeko era bat alde zuzeneko ispilua erabiltzea da. 17.5 irudian adierazten da ispilua nola erabiltzen den kurbako puntu batekiko zuta den lerroa kalkulatzeko. Puntu horretan zuta den lerroa lortutakoan, haren malda kalkulatzen da, eta, zeinua aldatuz, kurbak puntu horretan duen malda lortuko da.



17.4 irudia. (a) eta (b) erreakzio-abiaduren kalkulua C_A vs t_R eta X_A vs t_R kurbetatik abiatuz, hurrenez hurren; (c) ordenaren kalkulua.



17.5 irudia. Alde zuzeneko ispiluen erabilera kurbarekiko lerro zutak marrazteko.

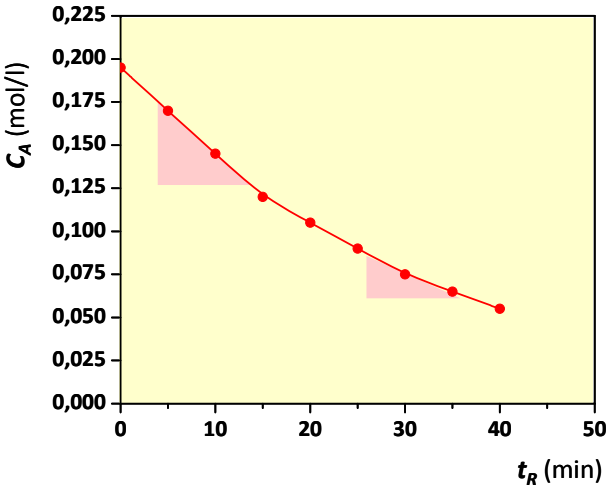
17.9 adibidea

Erreaktore isotermoan A → R likido-faseko erreakzioa gauzatu da 30 ºC-an, eta laborategian taulako datuak lortu dira. Kalkula dezagun ekuazio zinetikoa.

t_R (min)	0	5	10	15	20	25	30	35	40
C_A (mol/l)	0,195	0,17	0,145	0,12	0,105	0,09	0,075	0,065	0,055

Ebazpena

Lehenik eta behin, C_A vs. t grafikoa marraztuko da, hortik malda kalkulatzeko.

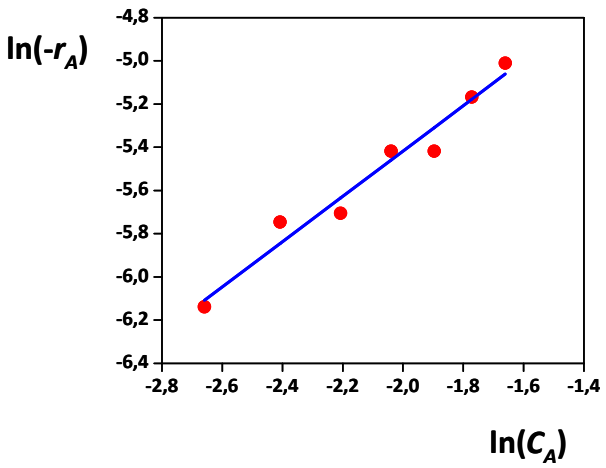


Ilundutako azaleraren malda A-ren kontzentrazio bakoitzerako erreakzio abiadura da. Ohar gaitezen C_A handietan malda handiagoa dela.

Ondoren, ispilu batez baliatuz, hainbat kontzentraziotarako maldak kalkulatuko dira, taulan agertzen den bezala.

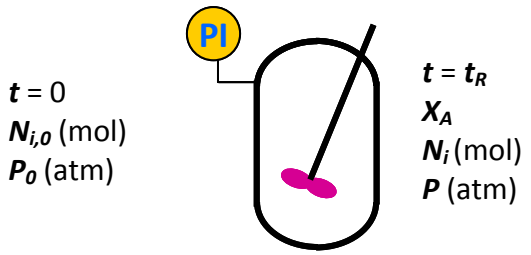
C_A (mol/l)	$(-r_A)$ (mol/l min)	$\ln C_A$	$\ln(-r_A)$
0,19	$6{,}67\cdot10^{-3}$	-1,661	-5,01
0,17	$5{,}70\cdot10^{-3}$	-1,772	-5,167
0,15	$4{,}44\cdot10^{-3}$	-1,897	-5,417
0,13	$4{,}44\cdot10^{-3}$	-2,04	-5,417
0,11	$3{,}33\cdot10^{-3}$	-2,207	-5,705
0,09	$3{,}20\cdot10^{-3}$	-2,408	-5,745
0,07	$2{,}16\cdot10^{-3}$	-2,659	-6,138

Amaitzeko, $\ln(-r_A)$ vs $\ln C_A$ irudikatzen da. Maldatik ordenaren balioa eratorriko da (n = 1,05, hau da, lehen ordenakoa) eta jatorriko ordenatutik ($\ln k$ = -3,319) 30 ºC-ko konstante zinetikoaren balioa lortuko da: k = 0,032 min^{-1}.



17.5 GAS FASEKO ERREAKZIOEN BIHURTZE-MAILAREN JARRAIPENA PRESIOA NEURTUZ

Bolumen eta tenperatura konstantean ematen diren gas-faseko erreakzioen jarraipena, $\Delta n \neq 0$ bada, sistema osoko presio neurtuz egin daiteke. Sistema osoko presioa, sistema osoko molen araberakoa da, gas idealen legea betez gero: $P = nRT/V$. 17.6 irudian agertzen da honelako erreakzio baten jarraipena nola egiten den.



17.6 irudia. Gas faseko erreakzioen jarraipena sistema osoko presioa jarraituz.

Sistema osoko presioa handitu egiten da, erreakzioa gertatu ahala mol kantitatea handitzen bada; presioa gutxitu egiten da erreakzioa eman ahala mol kantitatea gutxitzen bada. Demagun ondoko erreakzioa egiten dela:

$$aA + bB \leftrightarrows rR + sS$$

Hasieran erreaktorera sartzen diren molak hauek badira:

A	*B*	*R*	*S*	*In*	*Sistema*
$N_{A,0}$	$N_{B,0}$	$N_{R,0}$	$N_{S,0}$	N_{In}	N_0

$N_0 = N_{A,0} + N_{B,0} + N_{R,0} + N_{S,0} + N_{In}$ izanik.

Bakoitzaren presio partziala $P_i = N_i \cdot RT/V$ adierazpenaren bidez kalkula daiteke. Sistema osoko presioa, beraz:

$$P_0 = \frac{N_0 \cdot RT}{V} \tag{17.23}$$

t_R denbora ondoren osagai mugatzailearen $N_{A,0} \cdot X_A$ mol bihurtu bada, erreaktorean dauden molak ondokoak dira:

A	*B*	*R*	*S*	*In*	*Sistema*
$N_{A,0} \cdot (1 - X_A)$	$N_{B,0} - (b/a) \cdot (1 - X_A)$	$N_{R,0} + (r/a) \cdot (1 - X_A)$	$N_{S,0} + (s/a) \cdot (1 - X_A)$	N_{In}	N

$N = N_A + N_B + N_R + N_S + N_{In}$ izanik. Adierazpen hau A-ren bihurtze-mailaren araberakoa da:

$$N = N_0 + \frac{\Delta n}{a} \cdot \left(N_{A,0} \cdot X_A \right) \tag{17.24}$$

Δn koefiziente estekiometrikoen diferentzia izanik. Adierazpeneko terminoak presio moduan idazten badira, eta adierazpena birmoldatzen bada:

$$P_A = P_{A,0} + \frac{a}{\Delta n} \cdot \left(P_0 - P \right) \tag{17.25}$$

Edozein *J* erreaktiboren kasuan:

$$P_J = P_{J,0} + \frac{j}{\Delta n} \cdot \left(P_0 - P \right) \tag{17.26}$$

Edozein *K* produkturen kasuan:

$$P_K = P_{K,0} + \frac{k}{\Delta n} \cdot \left(P_0 - P\right) \tag{17.27}$$

A-ren bihurtze-maila kalkulatu nahi izanez gero:

$$X_A = \frac{a}{\Delta n} \cdot \frac{\left(P - P_0\right)}{P_{A,0}} \tag{17.28}$$

17.10 adibidea

Erreaktore isotermoan A $\rightarrow$ 2R gas-faseko erreakzioa gauzatu da 30 ºC-an bolumen konstanteko erreaktore ez-jarraituan, erreaktorea A osagai puruaz bete ondoren. Manometroaren bidez, sistemako presioaren jarraipena egin da denboran. Ondoko datuak lortu dira:

t_R (min)	0	0,2	0,9	1,2	2,1	7	19
P (mmHg)	760	870,2	1121	1181,8	1273	1425	1482

Kalkula dezagun ekuazio zinetikoa 30 ºC-an.

Ebazpena

Erreaktorea A osagai puruaz bete bada: P_0 = 760 mmHg eta $P_{A,0}$ = 760 mmHg dira. 17.28 ekuazioa erabilita, taula bete da:

t_R (min)	0	0,2	0,9	1,2	2,1	7	19
P_A (mmHg)	760	649,8	399	338,2	247	95	38
X_A	0	0,145	0,475	0,555	0,675	0,875	0,95

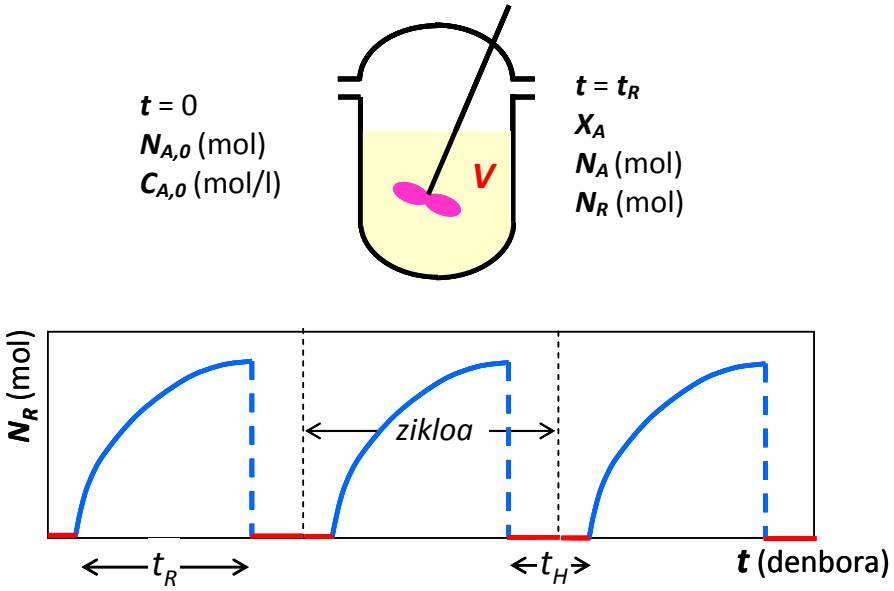
Hemendik aurrera metodo integratua zein diferentziala erabili daiteke. Lehena aukeratzen bada eta $(-r_A) = k \cdot C_A^n$ eran idazten bada, bigarren ordenako erreakzioa dela ikusten da eta k = 24,85 l/mol·min, $C_{A,0}$ = 0,04025 mol/l delako (gas idealen legearen arabera).

17.6 ERREAKTORE EZ-JARRAITUEN ERAGIKETA

Erreaktore ez-jarraituaren eragiketa ziklikoa da. Prozesua hastean, erreaktorea lehengaiz betetzen da, eta erreakzio-kondizioak hartu arte (tenperatura, irabiatze-maila eta presio egokia lortu arte), aldi bat pasatzen da erreakzioa hasi gabe. Behin erreakzioa burutzeko kondizio egokiak lortuta, erreakzioa hasten da eta, dirauen bitartean, (erreakzio-denbora) erreaktiboa desagertuz eta produktua sortuz doaz. Denbora-tarte horretan, erreaktore barruko nahastea produktuan aberastuz doa. Nahi den bihurtze-maila lortzen denean, erreakzioa eten egiten da, eta barruko nahastea hustu egiten da; hala, bigarren zikloa hasteko prest dago.

Prozesu zikliko honetan, denbora-tarte batean produktua ekoizten ari den bitartean (erreakzio-denboran, t_R), beste denbora-tarte batean ez dago ekoizpenik (erreaktorea betetzeko garaian, husteko garaian, kondizioak egokitzeko garaian eta abar) (ikusi 17.7 irudia). Erreakziorik gertatzen ez den denbora horien batura ***denbora hila*** da (t_H), eta prozesuaren ekonomian eta etekin osoan eragin handia du. Denbora kronologikoak bi denbora horiek bereizi behar ditu:

$$t = t_R + t_H \tag{17.29}$$



17.7 irudia. Erreaktore ez-jarraituaren denboran zeharreko eragiketa.

17.11 adibidea

50 l-ko bolumeneko erreaktore ez-jarraitu batean, A → B erreakzioa isotermikoki gauzatzen da, eta $C_{A,0}$ = 1 mol/l da. Erreakzio-denbora eta denbora hila 3 h eta 3 h dira, hurrenez hurren. Kalkula itzazu (a) Bren eguneko ekoizpena, (b) Aren hasierako kontzentrazio beretik abiaturik 95 mol B/egun ekoitzi nahi bada, erreakzioak zenbat denbora iraun behar duen.
Datuak: ekuazio zinetikoa $(-r_A)$(mol/l h) = $0{,}2 \cdot C_A$ da.

Ebazpena

Erreakzioa lehen ordenakoa bada A erreaktiboarekiko, masa-balantzearen adierazpena integratzean, X_A vs t_R eboluzio hau lortzen da (17.16 ekuazioaren birmoldaketa):

$$\ln\frac{1}{(1-X_A)} = k \cdot t_R$$

Hortik, $X_A = 1 - \exp(-k \cdot t_R)$ eratortzen da (17.16.a adierazpena).

Erreakzio-denbora 3 h bada, ziklo bakoitzean 0,45eko bihurtze-maila lortzen da.
Bren masa-balantzea egiten bada:

$$N_B = \cancel{N_{B,0}} + N_{A,0} \cdot X_A = V \cdot C_{A,0} \cdot \left(1 - e^{(-k \cdot t_R)}\right)$$

(a) Zikloko Bren ekoizpena (16.9 ekuazioa)

$$P_{Z,B} = 50(l) \cdot 1\left(mol/l\right) \cdot 0{,}45\left(1/ziklo\right) = 22{,}5\ mol/ziklo$$

Eguneko zenbat B ekoizten den kalkulatzeko, egun bakoitzean zenbat ziklo osatzen diren kalkulatuko da:

$$\frac{24\,\text{h}}{\text{egun}} \cdot \frac{1\,\text{ziklo}}{(3+3)\,\text{h}} = 4\,\frac{\text{ziklo}}{\text{egun}}$$

$$P_B\left(mol/egun\right) = 22{,}5\left(mol/ziklo\right) \cdot 4\left(ziklo/egun\right) = 90\ mol/egun$$

(b) B produktuaren zikloko ekoizpena kalkulatzen bada:

$$P_{Z,B}\left(\frac{\text{mol}}{\text{ziklo}}\right) = 95\frac{\text{mol}}{\text{egun}}\cdot\frac{1\text{egun}}{24\text{h}}\cdot\frac{(t_R+3)\text{h}}{1\text{ziklo}}$$

Bestalde, Bren masa-balantzetik:

$$P_{Z,B}\left(\frac{\text{mol}}{\text{ziklo}}\right) = 50(\text{mol})\cdot\left(1-\text{e}^{(-0,2\cdot t_R)}\right)$$

Biak berdintzen badira, t_R = 4,66 h-ko erreakzio-denbora eskatzen du, eta X_A = 0,606 da.

17.7 ERREAKZIO-DENBORAREN OPTIMIZAZIOA

Zenbat eta erreakzio-denbora luzeagoarekin jardun erreaktore ez-jarraituan, orduan eta produktu gehiago lortzen da ziklo bakoitzean; bestalde, ziklo bakoitzaren denbora luzatzen denez, ziklo gutxiago egin daitezke egunean. Beraz, erreaktore horiek lan egiteko denbora optimoa dute. Erreaktoreen funtzionamendua optimizatzeko irizpide bat hau da: ***produktuaren batez besteko ekoizpen-abiadura maximoa*** egiten duen erreakzio-denbora (t_R^*).

Demagun erreakzio hau gauzatzen dela erreaktore ez-jarraituan: A $\rightarrow$ R.

Erreaktorean, R produktuaren batez besteko ekoizpen-abiadura hau lortzen da:

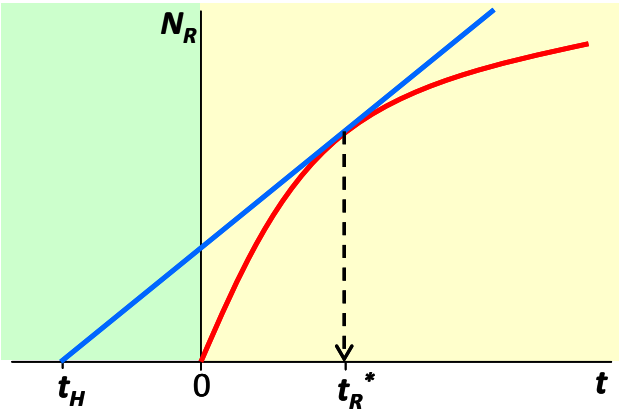
$$\overline{r_R}\left(mol/denbora\right) = \frac{N_R}{(t_R+t_H)} \tag{17.30}$$

Batez besteko ekoizpen-abiadura maximoa izan dadin, t_R aldagaiarekiko deribatuak zero izan behar du:

$$\frac{d\overline{r_R}}{dt_R} = \frac{\frac{dN_R}{dt_R}\cdot(t_R+t_H)-N_R}{(t_R+t_H)^2} = 0 \tag{17.31}$$

$$\frac{dN_R}{dt_R} = \frac{N_R}{(t_R+t_H)} \tag{17.32}$$

17.32 ekuazioan adierazten den baldintzaren interpretazio grafikoa 17.8 irudian adierazten da. Erreaktorean denborarekiko zenbat mol R dauden adierazten duen kurba erreakzio-ordenaren araberakoa da.



17.8 irudia. R produktuaren batez besteko ekoizpen-abiadura maximoa egiten duen erreakzio-denbora optimoaren kalkulu grafikoa.

17.11 adibidea

A + B $\rightarrow$ 2R erreakzioaren bidez R produktua ekoizten da erreaktore ez-jarraituan. 100 l-ko erreaktorea $C_{A,0} = C_{B,0} = 2$ mol/l-ko kontzentrazioz betetzen da eta R-ren ekoizpena hasten da isotermikoki. Denbora hila 5 h bada, kalkula dezagun erreakzio-denbora optimoa R-ren batez besteko ekoizpen-abiadura maximoa izan dadin.
Datuak: erreakzioaren ekuazio zinetikoa ($-r_A$) (mol/l h) = $0{,}1 \cdot C_A \cdot C_B$ da.

Ebazpena

A eta B erreaktiboak estekiometrikoki daudenez, une oro $C_A = C_B$ da, eta ($-r_A$) = $0{,}1 \cdot C_A^2$ erabiliko da.

Bigarren ordenakoa izanik,

$$\frac{1}{C_{A,0}} \cdot \left(\frac{X_A}{1 - X_A} \right) = k \cdot t_R$$

eta

$$X_A = \frac{k \cdot t_R \cdot C_{A,0}}{1 + k \cdot t_R \cdot C_{A,0}}$$

R-ren masa-balantzeak hau ematen du:

$$N_R = \cancel{N_{R,0}} + 2 \cdot N_{A,0} \cdot X_A = 2 \cdot V \cdot C_{A,0} \cdot \left(\frac{k \cdot t_R \cdot C_{A,0}}{1 + k \cdot t_R \cdot C_{A,0}} \right)$$

$$N_R = 2 \cdot 100 \cdot 2 \cdot \left(\frac{0{,}1 \cdot t_R \cdot 2}{1 + 0{,}1 \cdot t_R \cdot 2} \right)$$

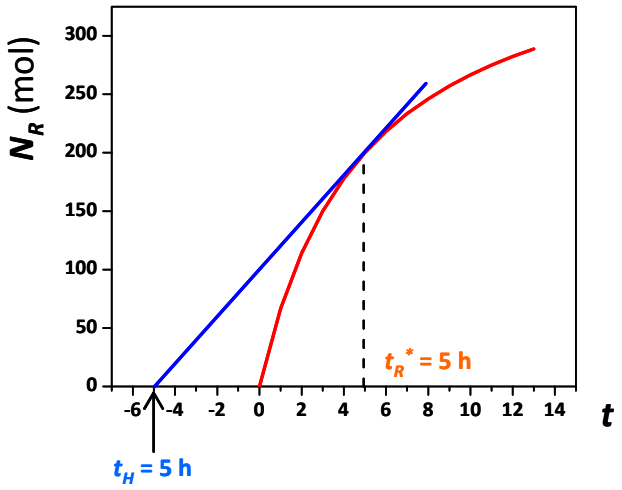
Ebazpen analitikoa

$$\frac{dN_R}{dt_R} = \frac{80 \cdot (1 + t_R \cdot 0{,}2) - 0{,}2 \cdot 80 \cdot t_R}{(1 + 0{,}2 \cdot t_R)^2}$$

$$\frac{N_R}{(t_R + t_H)} = \frac{80 \cdot t_R}{(1 + 0{,}2 \cdot t_R) \cdot (5 + t_R)}$$

Biak berdintzen badira: $t_R^* = 5$ h, eta horren arabera $X_A = 0{,}5$.

Ebazpen grafikoa



18. GAIA

ERREAKTORE JARRAITU IDEALAK

Erreaktore jarraituak ekoizpen handietarako erabiltzen dira industrian. Adibidez, amoniakoa (300 t/egun) edo azido sulfurikoa (1400 t/egun) jarraian diharduten erreaktoreetan ekoizten dira (parentesi artean substantzia horien ekoizpen-maila tipoa agertzen da).

Erreaktore horietan erreaktiboak etengabe elikatzen dira eta, bihurtze-maila bat lortu ondoren, produktuen eta bihurtu gabeko erreaktiboen nahastea etengabe irteten da erreaktoretik.

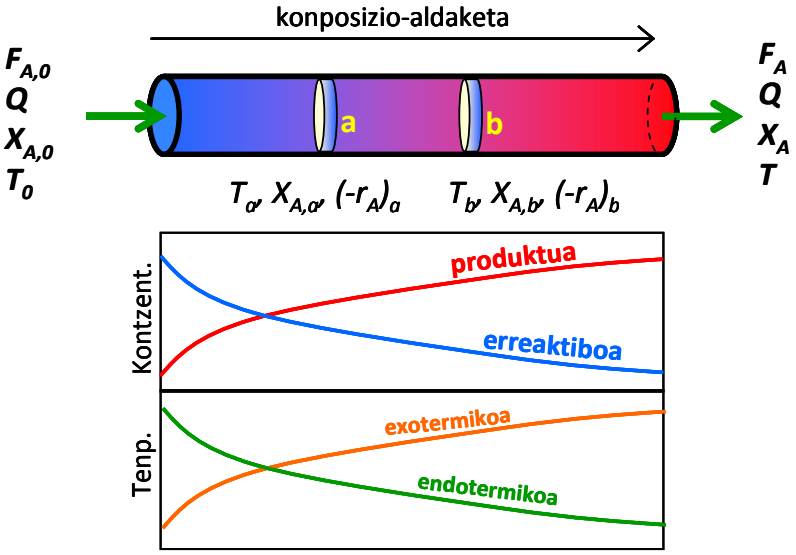
Muturreko bi motatako erreaktore jarraitu idealak bereiz daitezke: hodi-formako erreaktore idealak (PFR-*Plug-Flow Reactor*) eta nahaste perfektuzko erreaktore idealak (CSTR-*Continuously Stirred Tank Reactor*). Biak muturreko ereduak dira, eta bietan jarioaren eredua eta nahaste-maila zeharo desberdinak dira.

Praktikan, erreaktore gehienak muturreko bi ereduren batera doitzen direlako, hemen azalduko diren ereduak izango dira.

18.1 HODI-FORMAKO ERREAKTORE IDEALA (PFR)

Hodi-formako erreaktore idealean, erreaktorea den hoditik doan nahasteak erreakzioa jasaten du jarioaren norabidean aurrera egin ahala. Erreaktore hau, batez ere gas-faseko erreakzioak gauzatzeko erabiltzen bada ere, erreakzio katalitikoak gauzatzeko ere erabiltzen da, hodi barruan ohantze finkoan katalizatzailea jarriz.

Hodi-formako erreaktore idealaren jario-eredua ***pistoi-jarioa*** da. Horren arabera, jariagai-zati guztiek batez besteko abiadura lineal berdina daukate jarioaren norabidean (ondorioz, zatiak ez dira elkarrekin nahasten eta zati guztiek denbora berdina behar dute erreaktorea den hodia zeharkatzeko, hau da, egoitza-denbora berdina daukate), eta zati mehe bakoitzean nahaste perfektua lortzen da (hau da, zati mehe osoan baldintza homogeneoa dago). 18.1 irudian adierazten da hodi-formako erreaktore jarraituaren irudia, eta jarioaren norabidean agertzen diren kontzentrazio eta tenperaturen profilak.



18.1 irudia. Hodi-formako erreaktore jarraitu ideala: pistoi-jarioaren eredua, eta kontzentrazioaren eta erreaktore adiabatikoaren barneko tenperatura-profilak ardatzean zehar.

Benetako erreaktoreek, ordea, pistoi-jarioaren ereduarekiko desbideraketak dauzkate. Desbideraketa horien artean, hauek dira ohikoenak:

(a) Abiadura-gradiente erradiala. Kontuan hartu behar da, jariagaiaren jarioan sortzen den muga-geruza dela eta, jariagaiaren abiadura lineal maximoa ardatzetik doan jariagai-elementuarena dela, eta hormetatik hurbilago doan jariagai-elementuaren abiadura lineala txikiagoa dela. Desbideraketa hori are nabarmenagoa da jario laminarrean.

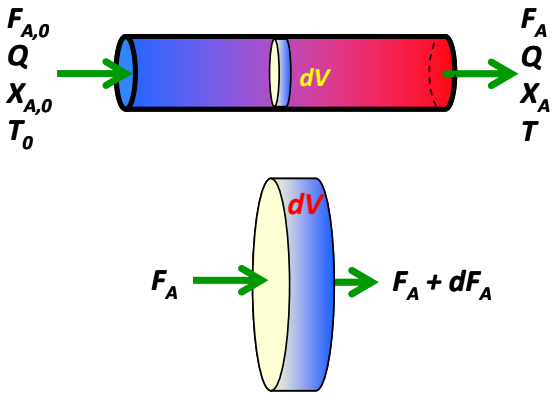
(b) Tenperatura-gradiente erradiala. Hormen inguruko jariagai-elementuen tenperatura inguruneko tenperaturatik gertuago dago. Bi desbideraketa horien erruz, zati bakoitzean ez da uniformetasunik, eta erreakzio-abiaduraren profila garatzen da erradioarekin.

(c) Ardatzean zehar konposizio-aldaketa dagoenez (hodiaren sarrerako zatian erreaktiboa kontzentratua dago, eta irteeratik gertuko zatian kontzentrazio txikia du), barreiapen molekularra sortzen da.

Hemen azalduko den hodi-formako erreaktorea idealtzat hartuko da. Gainera, erreakzio homogeneoak gauzatzeko erabiliko da, hau da, $(-r_A) = k \cdot C_A^{\,n} \cdot C_B^{\,m} \cdot \cdots$ erako ekuazio zinetikoa duten erreakzio kimikoak gauzatzeko erabiliko dira.

18.2 HODI-FORMAKO ERREAKTORE IDEALAREN DISEINU-EKUAZIOA

Erreaktoreko zatiaren posizioarekin kondizioak aldatzen direnez, A osagai mugatzailearekiko masa-balantzea *dV* bolumeneko zati mehean egingo da (ikus 18.2 irudia), egoera geldikorra lortu ondoren:



18.2 irudia. Hodi-formako erreaktore idealeko masa-balantzea.

$$\begin{pmatrix} \text{A-ren} \\ \text{SARTZE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenean} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{A-ren} \\ \text{IRTETE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenetik} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \text{A-ren} \\ \text{DESAGERTZE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenean} \end{pmatrix}$$

$$\cancel{F_A} = \cancel{F_A} + dF_A + (-r_A) \cdot dV \quad ; \quad -dF_A = (-r_A) \cdot dV \tag{18.1}$$

Erreaktore jarraituan $F_A = F_{A,0} - F_{A,0} \cdot X_A$ izanik, deribatzen bada:

$$-dF_A = F_{A,0} \cdot dX_A \tag{18.2}$$

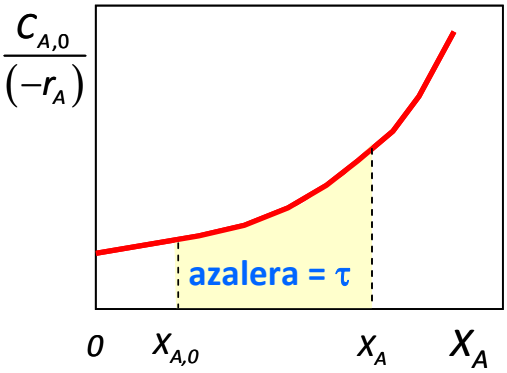
Azken adierazpen hori masa-balantzean (18.1 ekuazioan) ordezkatu eta erreaktore osoan integratzen bada ([V = 0, $X_{A,0}$] eta [V, X_A] muturren artean), hodi-formako erreaktorearen diseinu-ekuazioa lortuko da:

$$V = F_{A,0} \cdot \int_{X_{A,0}}^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} \tag{18.3}$$

$$\frac{V}{Q} = \tau = C_{A,0} \cdot \int_{X_{A,0}}^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} \tag{18.4}$$

18.4 ekuazioari erreparatuz, hodi-formako erreaktorearen diseinu-ekuazioa erreaktore ez-jarraituaren diseinu-ekuazioaren berdina da (17.13 ekuazioa); denbora kronologikoa (t_R) denbora espazialaz (τ) aldatu besterik ez da behar. Erreakzio bat bihurtze-maila finkatu bateraino gauzatzeko erreaktoreak behar duen bolumenaren berri ematen du diseinu-ekuazioak.

Diseinu-ekuazioa analitikoki zein grafikoki ebatz daiteke. Horretarako, ekuazio zinetikoaren adierazpena jakin behar da. 18.3 irudian agertzen da diseinu-ekuazioaren ebazpen grafikoa, $\frac{C_{A,0}}{(-r_A)}$ vs X_A kurbaren azpiko azalera (ilundutakoa) alegia.



18.3 irudia. Hodi-formako erreaktorearen diseinu-ekuazioaren ebazpen grafikoa.

18.1 adibidea

A → B erreakzioa likido-egoeran gauzatzen da hodi-formako erreaktore batean, isotermikoki. Erreaktorea 100 l/min-ko emariaz elikatzen da, eta $C_{A,0}$ = 1 mol/l da. Kalkula dezagun (a) erreaktoreak zer bolumen izan behar duen 0,6ko bihurtze-maila lortzeko, (b) 3000 l-ko bolumeneko erreaktorean zer bihurtze-maila lortuko litzatekeen.
Datuak: erreakzioaren ekuazio zinetikoa ($-r_A$)(mol/l min) = $0{,}1 \cdot C_A^2$ da.

Ebazpen analitikoa

(a) Hasteko, erreaktorera sartzen den Aren emari molarra kalkulatuko da:

$F_{A,0} = Q \cdot C_{A,0}$ = 100 mol/min.

Hau da ekuazio zinetikoa bihurtze-maila aldagaitzat hartzen bada:

$$(-r_A)\left(mol/l\,\text{min}\right) = 0{,}1 \cdot C_{A,0}^2 \cdot (1 - X_A)^2$$

Balioa diseinu-ekuazioan ordezkatu eta 0-0,6 tartean integratzen bada (erreaktore sarreran bihurtze-maila 0 baita):

$$\frac{V}{Q}=\tau=1\cdot\int_0^{0,6}\frac{dX_A}{0,1\cdot 1^2\cdot\left(1-X_A\right)^2}=15\text{ min}$$

15 min-ko denbora espaziala behar du. Elikatzen den emaria jakina denez, zer bolumen behar den kalkulatuko da:

V = 15 min·100 l/min = 1500 l

(b) Bigarren ordenako ekuazioa izanik, $\frac{X_A}{1-X_A}=C_{A,0}\cdot k\cdot\tau$ da (17.17 ekuazioa).

$$\frac{X_A}{1-X_A}=1\cdot 0,1\cdot\frac{3000}{100}$$

Beraz, X_A = 0,75 bihurtze-maila lortuko litzateke.

18.2 adibidea

A + B $\rightarrow$ C gas-egoerako erreakzioa hodi-formako erreaktore batean gauzatzen da, isotermikoki. Erreaktorean 250 mol/min-ko emaria elikatzen da (konposizio molarra % 40 A; % 50 B; % 10 inerte izanik). Erreaktore-sarreran $C_{A,0}$ = 1 mol/l bada, kalkula dezagun (a) erreaktoreak zer bolumen izan behar duen 0,6ko bihurtze-maila lortzeko, (b) 1000 l-ko bolumeneko erreaktorean A-ren zer bihurtze-maila lortuko litzatekeen.
Datuak: ekuazio zinetikoa ($-r_A$) (mol/l min) = $0,1\cdot C_A\cdot C_B$ da.

Ebazpen grafikoa

Gas-faseko erreakzioa denez eta $\Delta n \neq 0$ denez, lehenengo, ε_A kalkulatuko da 17.7 ekuazioan oinarrituz:

ε_A = -0,4.

Erreaktorera sartzen den emari bolumetrikoa $Q = F_{A,0}/C_{A,0}$= 250/1 = 250 l/min da.

$M = C_{A,0}/C_{B,0}$ = 1,25 bada, A eta B erreaktiboen kontzentrazioak hauek dira X_A-ren funtzioan:

$$C_A=\frac{C_{A,0}\cdot\left(1-X_A\right)}{\left(1+\varepsilon_A\cdot X_A\right)}=\frac{1\cdot\left(1-X_A\right)}{\left(1-0,4\cdot X_A\right)}\quad;\quad C_B=\frac{C_{A,0}\cdot\left(M-X_A\right)}{\left(1+\varepsilon_A\cdot X_A\right)}=\frac{1\cdot\left(1,25-X_A\right)}{\left(1-0,4\cdot X_A\right)}$$

Ekuazio zinetikoa hau litzateke:

$$\left(-r_A\right)=0,1\cdot\frac{1\cdot\left(1-X_A\right)}{\left(1-0,4\cdot X_A\right)}\cdot\frac{1\cdot\left(1,25-X_A\right)}{\left(1-0,4\cdot X_A\right)}$$

Diseinu-ekuazioak itxura hau hartzen du:

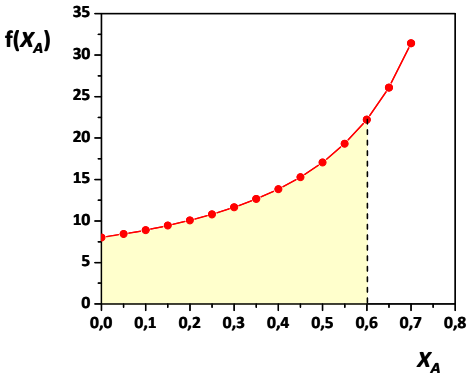
$$\frac{V}{Q}=\tau=1\cdot\int_0^{0,6}\frac{\left(1-0,4\cdot X_A\right)^2 dX_A}{0,1\cdot 1\cdot\left(1-X_A\right)\cdot 1\cdot\left(1,25-X_A\right)}$$

Grafikoki ebazteko, f(X_A) vs. X_A irudikatuko da (f(X_A) = $C_{A,0}/(-r_A)$ izanik), eta kurbaren azpiko azalera kalkulatuko da X_A = 0 eta X_A = 0,6 bitartean.

$$f(X_A)=\frac{(1-0,4\cdot X_A)^2}{0,1\cdot 1\cdot(1-X_A)\cdot 1\cdot(1,25-X_A)}$$

Kurba irudikatu ahal izateko ondoko taula eraiki da:

X_A	0	0,05	0,1	0,15	0,2	0,25	0,3	0,35	0,4	0,45	0,5	0,55	0,6	0,65	0,7
$f(X_A)$	8	8,42	8,9	9,45	10,08	10,8	11,65	12,64	13,84	15,28	17,07	19,31	22,22	26,08	31,42



Azalera = τ =7,63 min kalkulatzen da. Erreaktorearen bolumena V = 7,63 min·250 l/min = 1907 l da.

18.3 HODI-FORMAKO ERREAKTORE IDEALEN ERAGIKETA-MODUAK

Beste edozein erreaktorek bezala, hodi-formako erreaktoreak isotermikoki, adiabatikoki edo ez-adiabatikoki eta ez-isotermikoki lan egin dezake.

Isotermikoki diharduen erreaktore idealean erreaktore osoan zehar tenperatura uniformea denez, ekuazio zinetikoko konstante zinetikoa (k) integraletik kanpora atera daiteke, eta ebazpen analitikoa zein grafikoa egin daiteke. Arestian azaldu da, 18.1 eta 18.2 adibideen bitartez, horrelako ebazpena.

18.3.1 Erreaktore adiabatikoa

Erreaktorearen diseinu-ekuazioa (osagai mugatzailearen masa-balantzea, alegia) 18.4 ekuazioa da, arestian azaldu den bezala. Hala ere, erreaktoreko zati desberdinetan tenperatura desberdina izango denez, adiabatikoki diharduen erreaktorearen diseinua egiteko orduan, dV zatian energia-balantzea egin behar da erreaktoreko zati bakoitzeko tenperatura kalkulatzeko.

$$\begin{pmatrix}\text{Energiaren}\\ \text{IRTETE-abiadura}\\ dV\ \text{bolumenetik}\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}\text{Energiaren}\\ \text{SARTZE-abiadura}\\ dV\ \text{bolumenera}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\text{Energiaren}\\ \text{SORTZE-abiadura}\\ dV\ \text{bolumenean}\end{pmatrix}$$

Ohar gaitezen energia-balantzea egoera geldikorra lortu duen erreaktorean egin dela. Erreaktore barruko nahastea osatzen duen osagai bakoitzaren (i = 1, ⋯ ,C) batez besteko bero espezifikoa hartzen bada ($\overline{C_{P,i}}$) eta tenperatura-tarte guztirako erreakzio-beroaren batez besteko balioa ($-\overline{\Delta H_r}$) erabiltzen bada, hau da energia-balantzea:

$$\sum_{i=1}^{C}\left(F_i\cdot\overline{C_{P,i}}\right)\cdot dT=\left(-\overline{\Delta H_r}\right)\cdot F_{A,0}\cdot dX_A \qquad (18.5)$$

Ekuazioan $\sum_{i=1}^{C}\left(F_i \cdot \overline{C_{P,i}}\right)$ terminoa energiaren irtete- eta sartze-abiaduren erresultantea da.

Erreaktorearen sarrera (T_0, $X_{A,0}$) eta irteera (T, X_A) tartean integratuz:

$$T = T_0 + \left(-\overline{\Delta H_r}\right) \cdot F_{A,0} \cdot \int_{X_{A,0}}^{X_A} \frac{dX_A}{\sum_{i=1}^{C}\left(F_i \cdot \overline{C_{P,i}}\right)} \tag{18.6}$$

Hala, X_A bihurtze-maila duen zatiaren tenperatura kalkula daiteke. Hemendik aurrerako prozedura erreaktore ez-jarraituan azaldutakoaren berbera da:

$$X_A \xrightarrow[\text{balantzea}]{\text{energia-}} T \xrightarrow{\text{Arrhenius}} k \xrightarrow[\text{zinetikoa}]{\text{ekuazio}} \left(-r_A\right)$$

Hau da, bihurtze-maila bakoitza energia-balantzean sartu eta bihurtze-maila hori daukan erreaktore zatiko tenperatura kalkulatzen da. Ekuazio zinetikoan erabili behar den konstante zinetikoa Arrhenius-en ekuazioak ematen du. Diseinu-ekuazioa grafikoki ebatzi behar da.

18.3.2 Erreaktore ez-adiabatikoa eta ez-isotermikoa

Hala diharduen erreaktoreak ingurunearekin beroa trukatzen duen arren, bero hori ez da isotermikotasuna bermatzeko adina. Horregatik, energia-balantzean trukatze-terminoa kontuan hartu behar da:

$$0 = \begin{pmatrix} \text{Energiaren} \\ \text{SARTZE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenera} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \text{Energiaren} \\ \text{IRTETE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenetik} \end{pmatrix} \pm \begin{pmatrix} \text{Energiaren} \\ \text{SORTZE/XURGATZE} \\ \text{-abiadura} \\ dV \text{ bolumenean} \end{pmatrix} \pm \begin{pmatrix} \text{Energiaren} \\ \text{TRUKATZE} \\ \text{-abiadura} \\ dV \text{ bolumenean} \end{pmatrix}$$

$$\sum_{i=1}^{C}\left(F_i \cdot \overline{C_{P,i}}\right) \cdot dT = \left(-\overline{\Delta H_r}\right) \cdot F_{A,0} \cdot dX_A + U \cdot A \cdot \left(T_{ING} - T\right) \tag{18.7}$$

T_{ING} inguruneko tenperatura, U bero-trukerako koefiziente globala eta A bero-trukerako azalera izanik.

Energia-balantzea eta masa-balantzea batera ebatzi behar dira. Ebazpena astuna izaten da, eta hurrengo ikasturte batean ikusiko dugu.

18.3 adibidea

Likido-fasean A $\rightarrow$ B + C erreakzioa gauzatzen da hodi-formako erreaktorean adiabatikoki; elikadura (100 mol/s, moleen % 100 A) 25 ºC-an sartzen da. Kalkula dezagun Aren % 80 bihurtzeko erreaktoreak izan behar duen bolumena.

Datuak: elikaduran $C_{A,0}$ = 2 mol/l da.

Ekuazio zinetikoa ($-r_A$) (mol/ls) = $k \cdot C_A$ da, eta $k = 600 \cdot e^{(-2000/T)}$ s^{-1} da.

($\overline{-\Delta H_r}$) = -5 kcal/mol da.

Osagaien batezbesteko bero espezifikoak ($\overline{C_{P,i}}$) (cal/molK): A = 15; B = 20; C = 15.

Ebazpena

Ekuazio zinetikoa ($-r_A$) (mol/ls) = $k \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A) = k \cdot 2 \cdot (1 - X_A)$ moduan idazten da.

Energiaren irtete-eta sartze-abiaduren batukaria kalkulatuko da:

$$\sum_{i=1}^{3}\left(F_i \cdot \overline{C_{P,i}}\right) = F_A \cdot \overline{C_{P,A}} + F_B \cdot \overline{C_{P,B}} + F_C \cdot \overline{C_{P,C}} = F_{A,0} \cdot (1 - X_A) \cdot \overline{C_{P,A}} + F_{A,0} \cdot X_A \cdot \overline{C_{P,B}} + F_{A,0} \cdot X_A \cdot \overline{C_{P,C}}$$

$$\sum_{i=1}^{3}\left(F_i \cdot \overline{C_{P,i}}\right) = 1500 + 2000 \cdot X_A \left(cal/sK\right)$$

(18.6) ekuazioko integrala kalkulatuko da:

$$\int_{X_{A,0}}^{X_A} \frac{dX_A}{\sum_{i=1}^{C}\left(F_i \cdot \overline{C_{P,i}}\right)} = \int_{0}^{0,6} \frac{dX_A}{1500 + 2000 \cdot X_A} = \frac{1}{2000} \cdot \ln\left(1 + \frac{1}{3} \cdot X_A\right) \left(sK/cal\right)$$

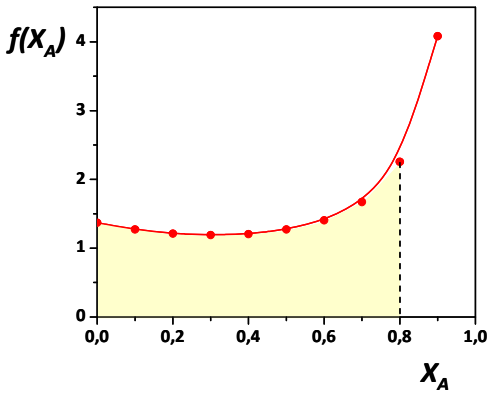
Tenperatura bihurtze-mailaren funtzioan idatziz:

$$T(ºC) = 25 + 5 \cdot 10^3 \left(\cancel{cal}/\cancel{mol}\right) \cdot 10^2 \left(\cancel{mol}/\cancel{s}\right) \cdot \frac{1}{2000} \cdot \ln\left(1 + \frac{1}{3} \cdot X_A\right) \left(\cancel{s}K/\cancel{cal}\right)$$

$$T(ºC) = 25 + 250 \cdot \ln\left(1 + \frac{1}{3} \cdot X_A\right)$$

Tenperatura kalkulatzeko adierazpenarekin, taula hau bete da, eta ($C_{A,0}/(-r_A)$ vs. X_A) irudia marraztu da:

X_A	T(ºC)	k (s^{-1})	($-r_A$)	$f(X_A)$
0	25	0,7	1,46	1,370
0,1	33,2	0,9	1,57	1,271
0,2	41,1	1,0	1,65	1,213
0,3	48,8	1,2	1,68	1,190
0,4	56,3	1,4	1,66	1,206
0,5	63,5	1,6	1,57	1,270
0,6	70,6	1,8	1,42	1,406
0,7	77,4	2,0	1,20	1,672
0,8	84,1	2,2	0,89	2,255
0,9	90,6	2,5	0,49	4,081



Kurbaren azpiko azalera (ilundutakoa) V/Q = 1,1 s izanik, erreaktorearen bolumena kalkulatuko da:

V = 0,11 s · 50 l/s = 55 l da.

18.4 HODI-FORMAKO ERREAKTORE IDEAL SORTAK

Maiz, erreaktore bakarrarekin lan egin ordez, erreaktore sortekin lan egiten da, bai ekoizpena handitzeko, bai bihurtze-maila handitzeko. Erreaktoreak *seriean* (*ondoz ondo*) zein *paraleloan* koka daitezke, 18.4 irudian ikusten den bezala.

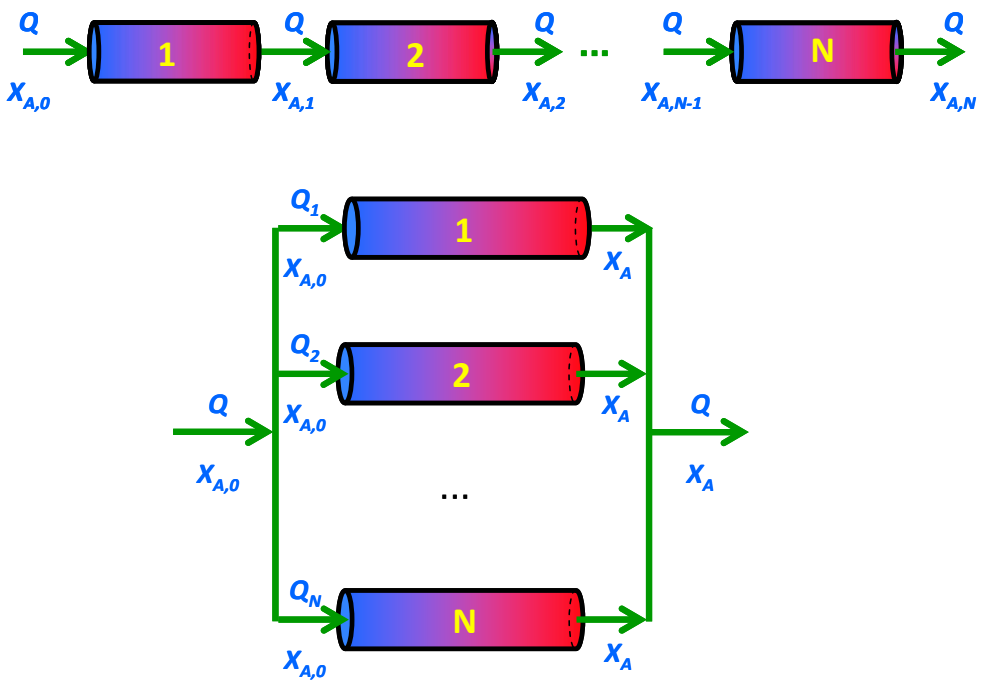
Seriean kokatutako erreaktore sortan, (*N-1).* erreaktoreko irteerako bihurtze-mailaz elikatzen da *N.* erreaktorea. Hala diharduen sisteman, irteeran lortzen den bihurtze-maila azkeneko erreaktorean lortutakoa da.

Hodi-formako erreaktorearen diseinu-ekuazioaren arabera, $\frac{C_{A,0}}{(-r_A)}$ vs X_A kurbaren azpiko azalerak erreaktorearen denbora espaziala ematen du, hau da, bolumenaren berri ematen du. 18.5 iruditik erator daitekeenez, $X_{A,N}$ bihurtze-maila lortzeko, seriean kokatutako *N* erreaktorez osatutako sistemaren denbora espazial osoa $\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{V_i}{Q}\right)$, $\sum_{i=1}^{N}V_i$ bolumeneko erreaktore bakarraren denbora espazialaren berdina da, hau da,

$$V_{Osoa} = \sum_{i=1}^{N} V_i \tag{18.8}$$

$$\tau_{OSOA} = \sum_{i=1}^{N} \tau_i \tag{18.9}$$

(sortako erreaktore guztiek tenperatura berean eta isotermikoki badihardute).



18.4 irudia. Seriean (ondoz ondo) eta paraleloan kokatutako hodi-formako erreaktore sortak.

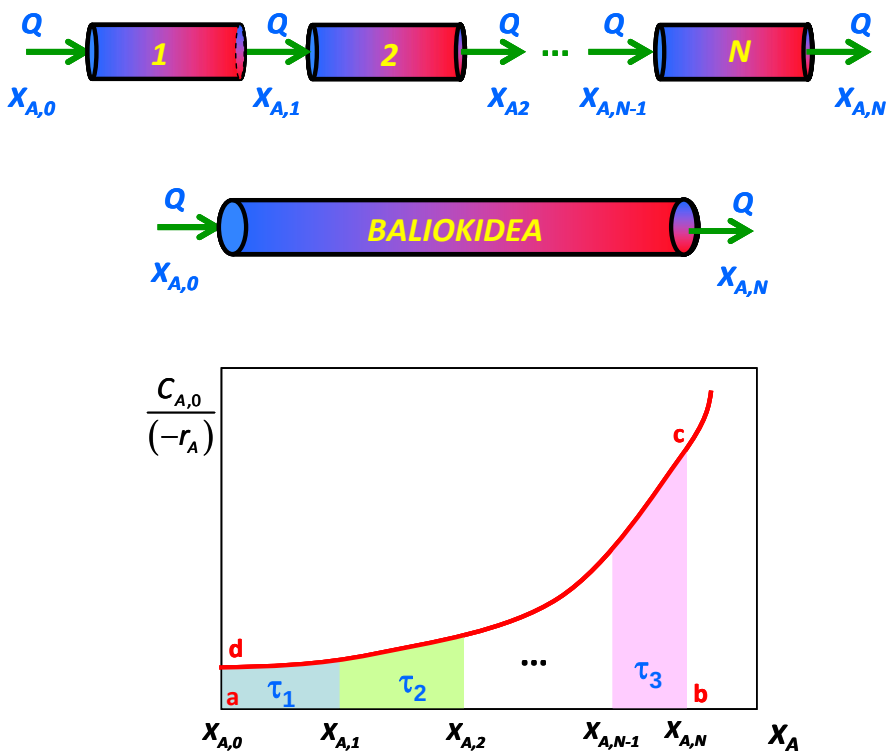
Erreaktoreak paraleloan kokatzen badira, sisteman ekoizpen maximoa lortzen da erreaktore guztietan bihurtze-maila berdina lortzen denean, hau da, guztiek denbora espazial berdina

dutenean. Bihurtu beharreko elikadura *N* korrontetan banatzen da, eta korronte bakoitza dagokion erreaktorera sartzen da:

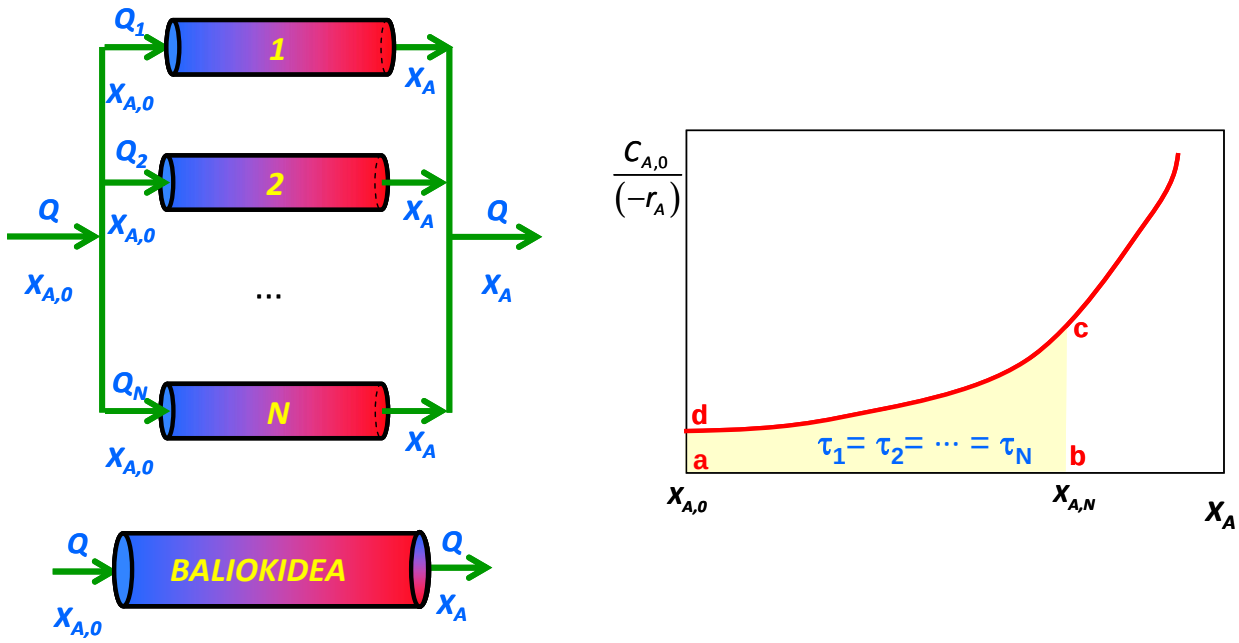
$$Q_{OSOA} = Q_1 + Q_2 + \cdots + Q_N = \sum_{i=1}^{N} Q_i \tag{18.10}$$

$$\left(\frac{V}{Q}\right)_1 = \left(\frac{V}{Q}\right)_2 = \cdots = \left(\frac{V}{Q}\right)_N \tag{18.11}$$

18.5 eta 15.6 irudietan agertzen dira seriean eta paraleloan kokatutako hodi-formako erreaktore sorten diseinu ekuazioa grafikoki marraztuta. Gonbaratzeko, sorta bakoitzaren baliokidea den erreaktorea azaltzen da. Seriean kokatutako erreaktore sortan, erreaktore bakoitzean bihurtze-maila bat lortzen da, hurrengo erreaktorean handitzen dena. Azken erreaktorean lortzen den bihurtze-maila da sorta osoan lortutakoa. Seriean kokatutako *N* erreaktore sortaren baliokidea den erreaktore batek, bihurtze-maila berdina lortu nahi bada, ***abcd*** azalerako denbora espaziala beharko luke. Paraleloan kokatutako erreaktore sortan, erreaktore guztietan bihurtze-maila berdina lortzen da, sorta osoan lortzen dena, alegia. Sortaren baliokidea den erreaktoreak ***abcd*** azalerako denbora espaziala beharko luke, sortako edozein erreaktoreren berdina.



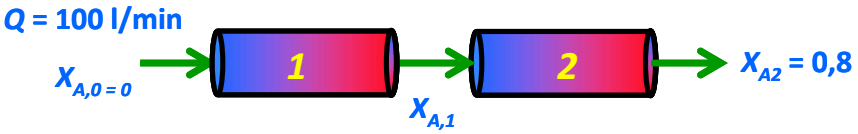
18.5 irudia. Seriean (ondoz ondo) kokatutako hodi-formako erreaktore sorta.



18.6 irudia. Paraleloan kokatutako hodi-formako erreaktore sorta.

18.4 adibidea

Seriean dauden hodi-formako bi erreaktoreko sisteman (biak bolumen berekoak) A → B likido faseko erreakzioa gauzatzen da, irteeran X_A = 0,8 izan arte. Erreaktorerako elikadura Q = 100 l/min eta $C_{A,0}$ = 1 mol/l bada, kalkula ditzagun (a) lehenengo erreaktorearen irteerako bihurtze-maila, (b) erreaktore bakoitzaren bolumena, (c) erreakzioa erreaktore bakarrean gertatuko balitz erreaktoreak izan beharko lukeen bolumena.
Datuak: erreakzioa isotermikoki gauzatzen da, eta bi erreaktoreetan tenperatura berdina da. $(-r_A)$(mol/lmin) = $1 \cdot C_A$ da.



Ebazpen analitikoa
(a)

Lehen erreaktorearen diseinu-ekuazioa:

$$\tau_1 = \cancel{C_{A,0}} \int_0^{X_{A,1}} \frac{dX_A}{1 \cdot \cancel{C_{A,0}} \cdot (1 - X_{A,1})} = \ln\left(\frac{1}{1 - X_{A,1}}\right)$$

Bigarren erreaktorearen diseinu-ekuazioa:

$$\tau_2 = \cancel{C_{A,0}} \int_{X_{A,1}}^{0,8} \frac{dX_A}{1 \cdot \cancel{C_{A,0}} \cdot (1 - X_A)} = \ln\left(\frac{1 - X_{A,1}}{1 - 0,8}\right)$$

Bien bolumena berdina denez, denbora espaziala ere berdina da: $\tau_1 = \tau_2$.

Bi ekuazioak berdinduz, $X_{A,1}$ = 0,553 lortzen da lehen erreaktorearen irteeran.

(b) $V_1 = V_2 = 80{,}5$ l.

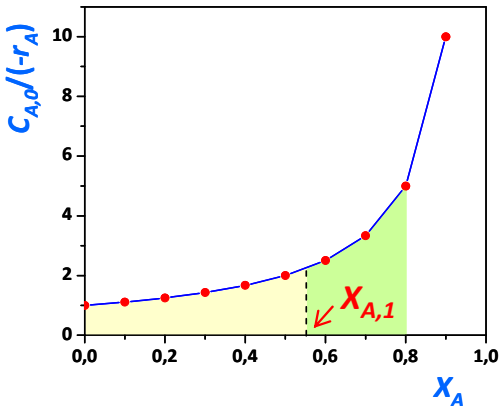
(c)

$$\tau = \cancel{C_{A,0}} \int_0^{0,8} \frac{dX_A}{1 \cdot \cancel{C_{A,0}} \cdot (1 - X_A)} = \ln\left(\frac{1}{1 - 0{,}8}\right) \qquad ; V = 161 \text{ l}$$

Ebazpen grafikoa

$\frac{C_{A,0}}{(-r_A)}$ vs X_A kurba marraztuko da, horretarako ondoko taula eraikitzen delarik.

X_A	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
$C_{A,0}/(-r_A)$	1	1,11	1,25	1,43	1,67	2	2,5	3,33	5	10

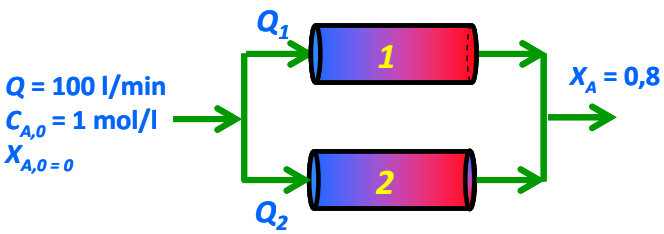


$X_{A,1}$ balioa haztapenez lortu da, eta bi azalerak berdinak izan arte aplikatu da prozedura. Irudian ilundutako azalera lehen erreaktorearen diseinu-ekuazioaren adierazpen grafikoa da, eta marrez estalitako azalera bigarren erreaktorearen diseinu-ekuazioaren adierazpen grafikoa da.

18.5 adibidea

Paraleloan dauden hodi-formako bi erreaktoreko sisteman (bolumenen arteko erlazioa $V_1 = 2 \cdot V_2$ izanik), likido-egoerako A→ B erreakzioa gertatzen da, $(-r_A)$(mol/lmin) = $1 \cdot C_A$ izanik, irteeran X_A = 0,8 izan arte. Sistemara sartzen den emari osoa Q = 100 l/min bada eta elikaduran $C_{A,0}$ = 1 mol/l bada, kalkula ditzagun ekoizpena maximoa izan dadin (a) erreaktore bakoitzera zer emari sartu behar den (b) erreaktore bakoitzak izan behar duen bolumena (c) zenbat B ekoizten den.

Ebazpena



Ekoizpena maximoa izan dadin, bi erreaktoreetan bihurtze-maila berdina lortu behar da, hau da, biek denbora espazial berdina eduki behar dute.

Lehen ordenako ekuazioa izanik, hau da erreaktore bakoitzaren diseinu-ekuazio integratua:

$$\tau = \frac{1}{k} \cdot \ln\left(1 - X_A\right)$$

(a)

$$\left.\begin{aligned} \tau_1 &= \ln\left(\frac{1}{1-0,8}\right) = 1,61\,\text{min} \\ \tau_2 &= \ln\left(\frac{1}{1-0,8}\right) = 1,61\,\text{min} \end{aligned}\right\} \qquad \frac{2 \cdot \cancel{V_2}}{Q_1} = \frac{\cancel{V_2}}{100 - Q_1} \quad ; \quad Q_1 = 66,7\,l/\text{min} \quad ; \quad Q_2 = 33,3\,l/\text{min}$$

(b) $$\frac{V_1}{(66,7)} = 1,61 = \frac{V_2}{(33,3)} \quad ; \quad V_1 = 107,4\,l \quad ; \quad V_2 = 53,6\,l$$

(c) Adar bakoitzean zenbat B ekoizten den:

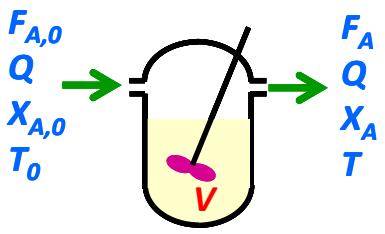
$F_{B,1} = Q_1 \cdot C_{A,0} \cdot X_A$ = 66,7 (l/min)·1(mol/l)·0,8 = 53,36 mol/min lehen adarreko erreaktorean.

$F_{B,2} = Q_2 \cdot C_{A,0} \cdot X_A$ = 33,3 (l/min)·1(mol/l)·0,8 = 26,68 mol/min bigarren adarreko erreaktorean.

Guztira, 80,04 mol/min ekoizten da.

18.5 NAHASTE PERFEKTUZKO ERREAKTORE IDEALA (CSTR)

Erreaktore mota honen ezaugarri nagusia hau da: erreaktoreko edukia guztiz nahasita egotea. Erreaktore idealean, erreaktore barruko bolumen-elementu guztiak nahasita daude, eta, horren ondorioz, erreaktore barruan baldintza homogeneoa dago. Gainera, erreaktoretik irteten den korrontea erreaktore barruko kondizio berean (tenperatura, bihurtze-maila eta kontzentrazio berean) dago. Baldintza edo hipotesi horri ***nahaste ideal edo perfektuaren eredu*** deritzo (ikusi 18.6 irudia). Erreaktorearen itxura dela eta, tanga-erako erreaktore jarraitu ere baderitze.



18.7 irudia. Nahaste perfektuzko erreaktore ideala (CSTR, *Continuously Stirred Tank Reactor*).

Nahastearen likatasuna oso handia ez bada eta irabiaketa ona bada, idealtasuna lor daiteke. Idealtasunetik desbideratzeko arrazoi nagusiak hauek dira: birziklazioak, saihesbideak eta nahasterik gabeko eremu hilak sortzea.

Horrelako kasuetan, hodi-formako erreaktoreak erabili beharrean erreaktore hauek erabiltzea hobesten da:

(a) Tenperaturaren kontrola kritikoa denean, polimerizazioen kasuan adibidez (glizerinaren nitrazioa).

(b) Erreakzioa fase anitzekoa denean. Adibidez, olioaren hidrogenazioa margarina ekoizteko.

(c) Katalizatzailea esekita eduki behar denean; etilenoaren polimerizazioan, adibidez.

18.6 NAHASTE PERFEKTUZKO ERREAKTORE IDEALAREN DISEINU-EKUAZIOA

Egoera geldikorrean diharduen erreaktorean, hau da A osagai mugatzailearen masa-balantzea, erreaktorearen bolumen osorako (*V*), egoera geldikorrean:

$$\begin{pmatrix} \text{A-ren} \\ \text{SARTZE-abiadura} \\ V \text{ bolumenean} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{A-ren} \\ \text{IRTETE-abiadura} \\ V \text{ bolumenetik} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \text{A-ren} \\ \text{DESAGERTZE-abiadura} \\ V \text{ bolumenean} \end{pmatrix}$$

$$F_{A,0} = F_A + (-r_A) \cdot V \tag{18.12}$$

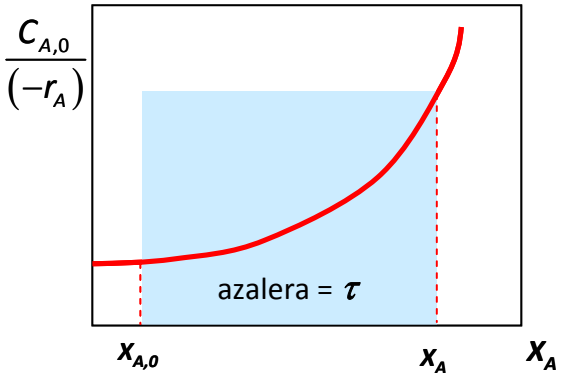
$$F_{A,0} \cdot (1 - X_{A,0}) = F_A \cdot (1 - X_A) + (-r_A) \cdot V \tag{18.13}$$

$$V = F_{A,0} \cdot \frac{(X_A - X_{A,0})}{(-r_A)} \tag{18.14}$$

$$\frac{V}{Q} = \tau = C_{A,0} \cdot \frac{(X_A - X_{A,0})}{(-r_A)} \tag{18.15}$$

Ohartu gaitezen erreakzio-abiadura erreaktore-irteerako kondizioan neurtua dagoela (irteerako X_A eta tenperatura).

Hodi-formako erreaktoreetan bezala, diseinu-ekuazioa analitikoki zein grafikoki ebatz daiteke, ekuazio zinetikoa jakina bada. 18.8 irudian agertzen da erreaktore honen ebazpen grafikoa. Ikusten da erreaktorearen denbora espaziala lauki zuzen bat dela, (X_A - $X_{A,0}$) oinarria eta irteerako kondizioan $\left(\frac{C_{A,0}}{(-r_A)}\right)$ altuera duena.



18.8 irudia. Nahaste perfektuzko erreaktore idealaren diseinu-ekuazioaren ebazpen grafikoa.

18.6 adibidea

A → B erreakzioa likido-egoeran gauzatzen da tanga-erako erreaktore jarraian, isotermikoki. Erreaktorera 100 l/min emaria elikatzen da, eta $C_{A,0}$ = 1 mol/l da. Kalkula dezagun (a) 0,6-ko

bihurtze-maila lortzeko behar den erreaktorearen bolumena (b) 3000 l bolumeneko erreaktore isotermoan lortuko litzatekeen bihurtze-maila.
Datuak: Ekuazio zinetikoa ($-r_A$)(mol/l min) = $0{,}1 \cdot C_A^2$ da.

Ebazpen analitikoa

(a) Diseinu-ekuazioaren arabera:

$$\tau = C_{A,0} \cdot \frac{X_A - X_{A,0}}{(-r_A)} = \cancel{C_{A,0}} \cdot \frac{0{,}6 - 0}{0{,}1 \cdot \cancel{C_{A,0}} \cdot C_{A,0} \cdot (1 - 0{,}6)^2} = \frac{0{,}6 - 0}{0{,}1 \cdot 1 \cdot (1 - 0{,}6)^2} = 37{,}5\text{min}$$

Beraz, 37,5 minutuko denbora espazialaz lan egin beharko luke.

Ohar gaitezen erreakzio bera kondizio berdinetan hodi-formako erreaktorean egitean (18.1 adibidea) 15 min denbora espaziala behar zuela.

(b) $\frac{3000}{100} = \cancel{C_{A,0}} \cdot \frac{X_A - 0}{0{,}1 \cdot \cancel{C_{A,0}} \cdot 1 \cdot (1 - X_A)^2}$; X_A = 0,566 (*18.1 adibideko* hodi-formakoan 0,75 lortzen zen).

18.7 adibidea

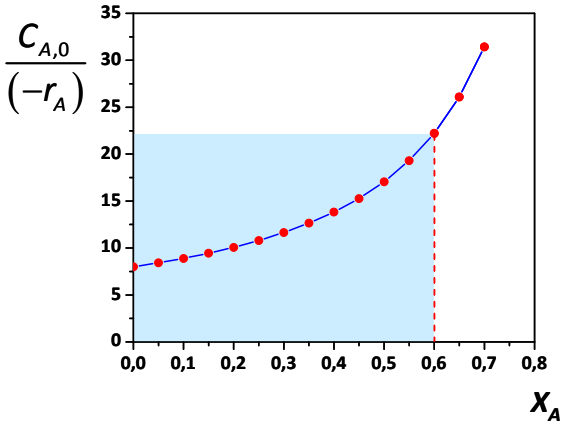
A + B $\rightarrow$ C gas-egoerako erreakzioa tanga-erako erreaktore jarraituan gauzatzen da, isotermikoki. Erreaktorera 250 mol/min emaria sartzen da (konposizio molarra % 40 A, % 50 B eta % 10 inerte da). Erreaktore-sarreran $C_{A,0}$ = 1 mol/l da. Kalkula ditzagun (a) 0,6ko bihurtze-maila lortzeko erreaktorearen bolumena, (b) 1000 l-ko bolumeneko erreaktorean lortuko litzatekeen Aren bihurtze-maila.
Datuak: ekuazio zinetikoa ($-r_A$) (mol/l min) = $0{,}1 \cdot C_A \cdot C_B$ da.

Ebazpen grafikoa

18.2 adibidean ikusi den bezala, erreakzio horren ekuazio zinetikoa hau da:

$$(-r_A) = 0{,}1 \cdot \frac{1 \cdot (1 - X_A)}{(1 - 0{,}4 \cdot X_A)} \cdot \frac{1 \cdot (1{,}25 - X_A)}{(1 - 0{,}4 \cdot X_A)}$$

Diseinu-ekuazioa ebazteko, $\frac{C_{A,0}}{(-r_A)}$ vs X_A irudikatuko da X_A = 0 eta X_A = 0,6 tartean. Azken balio horri dagokion laukizuzenaren azalerak denbora espaziala ematen du. (Irudia egiteko datuak 18.2 adibideko taulakoak dira).



Laukizuzenaren azalera denbora espazialaren berdina denez,
τ = (0,6-0)·22,22 = 13,33 min

(a) V = 3333 l
(b) V/Q = 4 min. Haztapenez ebatziko da; X_A-ri balio bat esleitu eta azalera kalkulatuko da: 4 min.

$X_A \approx$ 0,33 lortzen da.

18.6.1 Diseinurako metodo grafikoa

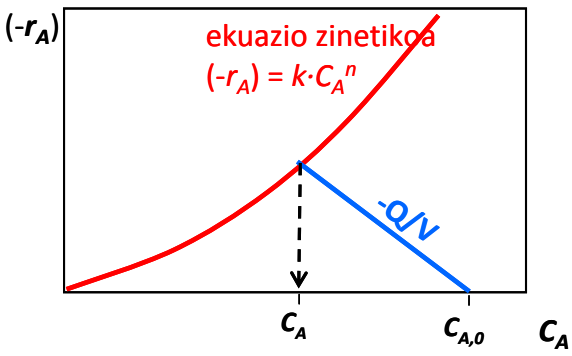
Erreaktore hauen masa-balantzeak beste modu batera ebatz daitezke, ondoren azalduko den bezala.

18.6 irudiaren arabera, A osagaiaren masa-balantzea honela idatz daiteke:

$$Q \cdot C_{A,0} = Q \cdot C_A + (-r_A) \cdot V \qquad (18.16)$$

$$(-r_A) = -\frac{Q}{V} \cdot C_A + \frac{Q}{V} \cdot C_{A,0} \qquad (18.17)$$

Masa-balantze hori grafikoki ebatziko da, $(-r_A)$ vs C_A diagraman (18.9 irudia). Horretarako, ekuazio zinetikoa diagrama berean marrazten da. Masa-balantzea $C_{A,0}$-tik abiatzen den ($-Q/V$) maldako lerro zuzena da, eta ekuazio zinetikoarekin bat egiten du erreaktore-irteerako kontzentrazioan (C_A).



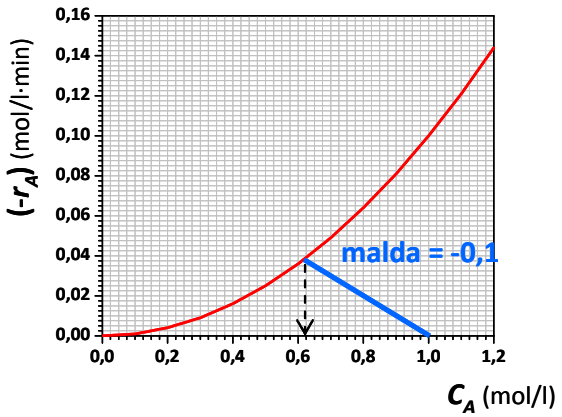
18.9 irudia. Nahaste perfektuzko erreaktore idealaren diseinu-ekuazioaren ebazpen grafikoa, $(-r_A)$ vs C_A grafikoan.

18.8 adibidea

A $\rightarrow$ B erreakzioa likido-egoeran gauzatzen da V = 1000 l bolumeneko tanga-erako erreaktore jarraitu isotermoan. Erreaktorera 100 l/min emaria sartzen da, eta erreaktore-sarreran $C_{A,0}$ = 1 mol/l da. Ekuazio zinetikoa $(-r_A)$(mol/l min) = $0{,}1 \cdot C_A^2$ bada, kalkula dezagun zer bihurtze-maila lortzen den.

Ebazpena

Ekuazio zinetikoa irudikatuko da C_A = 0 eta C_A = 1 mol/l tartean. Masa-balantzearen lerroak $-(Q/V)$ = - 0,1 min^{-1} malda badu, grafikoan C_A = 0,618 mol/l irakurtzen da. Hala, X_A = 0,382 bihurtze-maila lortzen da.



18.7 NAHASTE PERFEKTUZKO ERREAKTORE IDEALEN ERAGIKETA-MODUAK

Erreaktore mota hauek isotermikoki, adiabatikoki edo ez-adiabatikoki eta ez-isotermikoki lan egin dezakete. Erreaktore isotermikoa da orain arte aipatu eta landu dena. Erreaktoreak adiabatikoki edo ez-adiabatikoki eta ez-isotermikoki lan egiten duenean, energia-balantzea ebatzi behar da erreaktore barruko tenperatura kalkulatu ahal izateko.

18.7.1 Erreaktore adiabatikoa

Egoera geldikorrean diharduen tanga-erako erreaktore adiabatikoaren energia-balantzea egiteko orduan, erreaktore barruko nahastearen bero espezifikoa ($\overline{C_P}$), dentsitatea ($\overline{\rho}$) eta erreakzio-beroa ($-\overline{\Delta H_r}$) konstantetzat hartuko da.

Beraz, energia-balantzearen adierazpena hau da:

$$\left(-\overline{\Delta H_r}\right)\cdot\left(-r_A\right)\cdot V=\left(-\overline{\Delta H_r}\right)\cdot F_{A,0}\cdot\left(X_A-X_{A,0}\right)=\overline{Q\cdot\rho\cdot c_P}\cdot\left(T-T_0\right) \qquad (18.18)$$

Hortik tenperatura askatzen bada:

$$T=T_0+\frac{\left(-\overline{\Delta H_r}\right)\cdot F_{A,o}\cdot\left(X_A-X_{A,0}\right)}{\overline{Q\cdot\rho\cdot C_P}} \qquad (18.19)$$

Ekuazio hori ebaztean, irteerako bihurtze-mailari dagokion tenperatura kalkulatzen da. Hortik aurrera, tenperatura horri dagokion konstante zinetikoa eta ekuazio zinetikoa kalkulatu ondoren, diseinu-ekuazioa kalkulatu behar da.

18.9 adibidea

Adiabatikoki diharduen erreaktorean A $\rightarrow$ B likido-faseko erreakzioa gauzatzen da; elikadura $C_{A,0}$ = 1 mol/l, Q = 100 l/min eta T_0 = 25 ºC dira. Kalkula ditzagun (a) erreaktoreak zer bolumen izan behar duen X_A = 0,6 izateko, (b) zer bihurtze-maila lortzen den 4000 l-ko bolumeneko erreaktorean.

Datuak: $(-r_A)$(mol/l min) = $k\cdot C_A$ da.
($-\overline{\Delta H_r}$) = 30 kcal/mol ; $\overline{C_P}$ = 0,95 kcal/kgºC, $\overline{\rho}$ = 1,08 kg/l.
Arrhenius-en ekuazioa $k = 5\cdot 10^5\cdot e^{(-5050/T)}$ min^{-1} da.

Ebazpena

(a) Energia-balantzetik kalkulatzen da $T = 25 + \dfrac{30 \cdot 100 \cdot 0,6}{100 \cdot 1,08 \cdot 0,95} = 42,5ºC$ tenperaturan lan egiten duela. Arrhenius-en ekuazioaren arabera, tenperatura horri dagokion konstante zinetikoa k = 0,056 min^{-1} da. Masa-balantzea ebazten bada:

$$\tau = C_{A,0} \cdot \frac{X_{A,IRT} - X_{A,0}}{(-r_A)_{IRT}} = \cancel{C_{A,0}} \cdot \frac{0,6 - 0}{0,056 \cdot \cancel{C_{A,0}} \cdot (1 - 0,6)} = 27 \text{ min}$$ eta V = 2700 l dira.

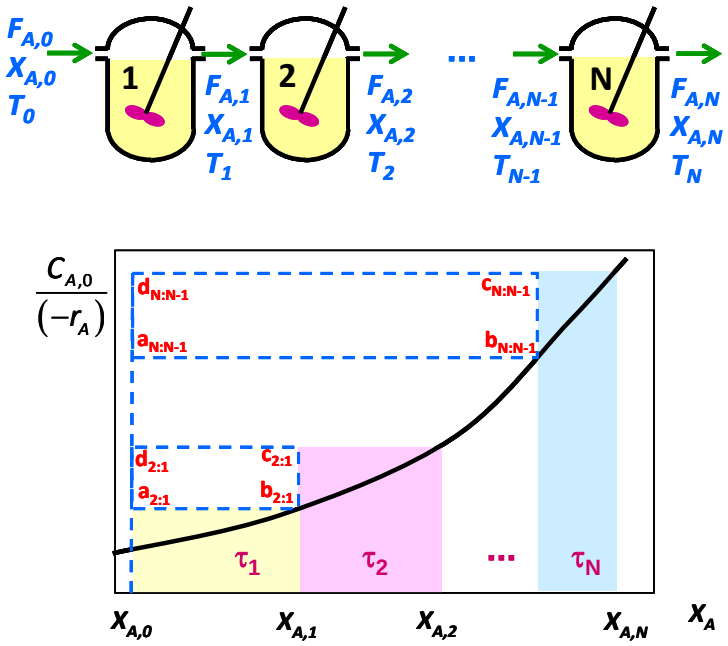
(c) Haztapenez ebatziko da. Kalkulu-prozesuaren datuak agertzen dira taulan:

X_A	T (ºC)	k (min^{-1})	τ (min)	V (l)
0,8	48,4	0,075	53,3	5330
0,7	45,5	0,065	36	3600
0,73	46,3	0,0676	39,95	3995

Beraz, erreaktorean ~0,73ko bihurtze-maila lortzen da.

18.8 NAHASTE PERFEKTUZKO ERREAKTORE SORTAK

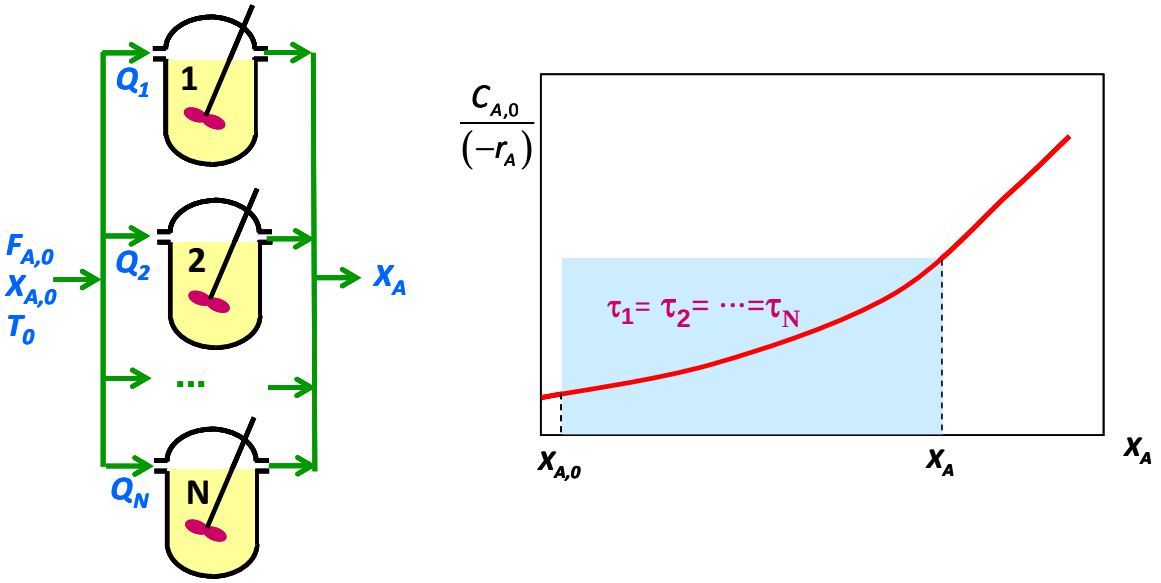
Nahaste perfektuzko erreaktore sortak seriean ala paraleloan koka daitezke, 18.10 eta 18.11 irudietan agertzen den bezala.



18.10 irudia. Seriean eraikitako erreaktore sorta eta diseinu-ekuazioaren ebazpen grafikoa.

18.8.1 Tanga-erako erreaktore sorta seriean

Bihurtze-maila finkatu bat lortzeko erreaktore handi bat erabili ordez erreaktore txikiagoz osatutako sortak erabiltzen badira, bolumen osoa txikitu egiten da. Adibidez, 18.10 irudian $X_{A,2}$ lortzeko bi erreaktore erabiliko balira, V_1 eta V_2 bolumenak izango lituzkete (irudian τ_1 eta τ_2 azalerak ematen dituzte). Bihurtze-maila berdina erreaktore bakarrean lortu nahi bada, azalera (τ) handiagoa beharko luke, marra ez-jarraituz irudikatutako azalera, $a_{2:1}b_{2:1}c_{2:1}d_{2:1}$ (2:1 azpindizeak zera esan nahi du: erreaktore baten ordez bi erreaktore erabiltzea). Hau da, bi erreaktore erabiltzean marra ez-jarraituz irudikatutako azalerak ematen duen denbora espaziala (eta, beraz, bolumena) aurreztu da.



18.11 irudia. Paraleloan eraikitako erreaktore sorta eta diseinu-ekuazioaren ebazpen grafikoa.

Argi dago: zenbat eta erreaktore gehiago erabili, orduan eta aurrezpen handiagoa lortuko da. *N-1* erreaktore erabili ordez *N* erabiltzean ere $a_{N:N-1}b_{N:N-1}c_{N:N-1}d_{N:N-1}$ marra ez-jarraituz irudikatutako azalera aurrezten da. Limitean, oso bolumen txikiko infinitu erreaktorez osatutako sorta erabiliko balitz, laukizuzen guztien azalera osoa kurbaren azpiko azalerarekin bat letorke, hau da, hodi-formako erreaktorearekin bat letorke. Beraz, ikuspegi matematiko batetik, hodi-formako erreaktorea seriean kokatutako bolumen oso txikiko tanga-erako erreaktore sortaren baliokidea da.

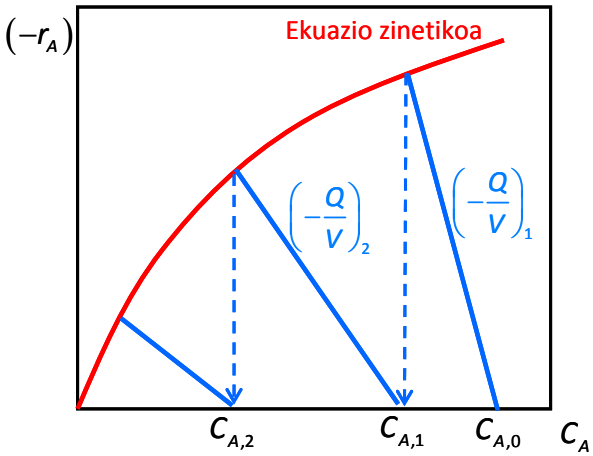
N. erreaktoreko elikadura *N-1*. erreaktoreko irteera izanik, hau da erreaktore bakoitzaren diseinu-ekuazioa:

$$\tau_N = C_{A,0} \cdot \frac{\left(X_{A,N} - X_{A,N-1}\right)}{\left(-r_A\right)_N} \qquad (18.20)$$

Sortako lehen erreaktorearen diseinu ekuazioa $\tau_1 = C_{A,0} \cdot \frac{\left(X_{A,1} - X_{A,0}\right)}{\left(-r_A\right)_1}$ da, eta bihurtu gabeko elikadura bada, $X_{A,0} = 0$ hartzen da.

Era berean, $(-r_A)$ vs C_A grafikoa erabil daiteke masa-balantzearen ebazpen grafikoa egiteko (18.12 irudia) (masa-balantzea 18.17 ekuazio eran).

Erreaktore guztiak isotermoak badira eta tenperatura berean badihardute, laukizuzenaren azalera berdina izateaz gainera (18.10 irudian), $(-Q/V)$ malda bereko lerro zuzenak izango dituzte (18.12 irudian). Erreaktoreek tenperatura desberdinetan lan egiten badute, tenperatura bakoitzari dagokion ekuazio zinetikoa erabili behar da.



18.12 irudia. Seriean kokatutako tanga-erako erreaktore sortaren ebazpen grafikoa, ($-r_A$) vs. C_A diagraman.

18.10 adibidea

Seriean dauden tanga-erako bi erreaktoretan (bolumen berekoak) A → B likido-egoerako erreakzioa gauzatzen da, irteeran X_A = 0,8 izan arte. Lehen erreaktoreko elikadura Q = 100 l/min eta $C_{A,0}$ = 1 mol/l bada, kalkula ditzagun (a) lehenengo erreaktorearen irteerako bihurtze-maila, (b) erreaktoreen bolumena, (c) erreaktoreak zer bolumen izan beharko lukeen erreakzioa erreaktore bakarrean egin izan balitz, (d) (b) ataleko bi errektoreek tenperatura desberdinean lan egingo balute lehenengo erreaktorean lortuko litzatekeen bihurtze-maila.

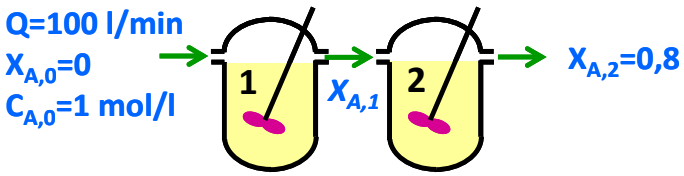
Datuak: ($-r_A$)(mol/lmin) = $k \cdot C_A$ da.

(a), (b) eta (c) ataletako erreaktoreak isotermikoak dira eta k = 1 min^{-1} balio du.

(d) atala ebazteko lehenengo erreaktorean k = 2 min^{-1} dela eta bigarren erreaktorean k = 1 min^{-1} direla hartuko da, biak isotermikoak.

Ebazpen analitikoa

(a)



Erreaktore bakoitzaren diseinu-ekuazioak:

$$\tau = \cancel{C_{A,0}} \cdot \frac{X_{A,1} - 0}{1 \cdot \cancel{C_{A,0}} \cdot (1 - X_{A,1})} \quad \text{eta}$$

$$\tau = \cancel{C_{A,0}} \cdot \frac{0{,}8 - X_{A,1}}{1 \cdot \cancel{C_{A,0}} \cdot (1 - 0{,}8)}$$

dira.

Bien bolumenak berdinak izanik denbora espazialek ere berdinak izan behar dutenez, bi ekuazioak berdinduta: $X_{A,1}$ = 0,55 lortzen da.

(b) Ekuazioan ordezkatuz, $V_1 = V_2$ = 124 l bolumeneko erreaktoreak izan behar dute.

(c) $\tau = \cancel{C_{A,0}} \cdot \dfrac{0,8-0}{1 \cdot \cancel{C_{A,0}} \cdot (1-0,8)} = 4\,\text{min}$ eta V = 400 l. Ikusten den bezala, 276 l aurreztea lortu da seriean jarritako bi erreaktore erabilita.

(d) Erreaktore bakoitzaren diseinu-ekuazioak:

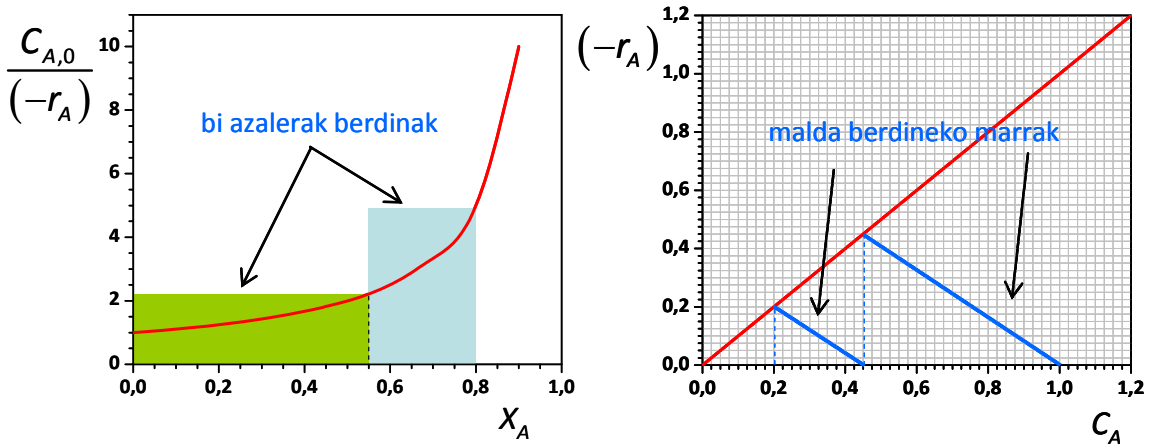
$$\tau = \frac{X_{A,1} - 0}{2 \cdot (1 - X_{A,1})} \quad \text{eta}$$

$$\tau = \frac{0,8 - X_{A,1}}{1 \cdot (1 - 0,8)}$$

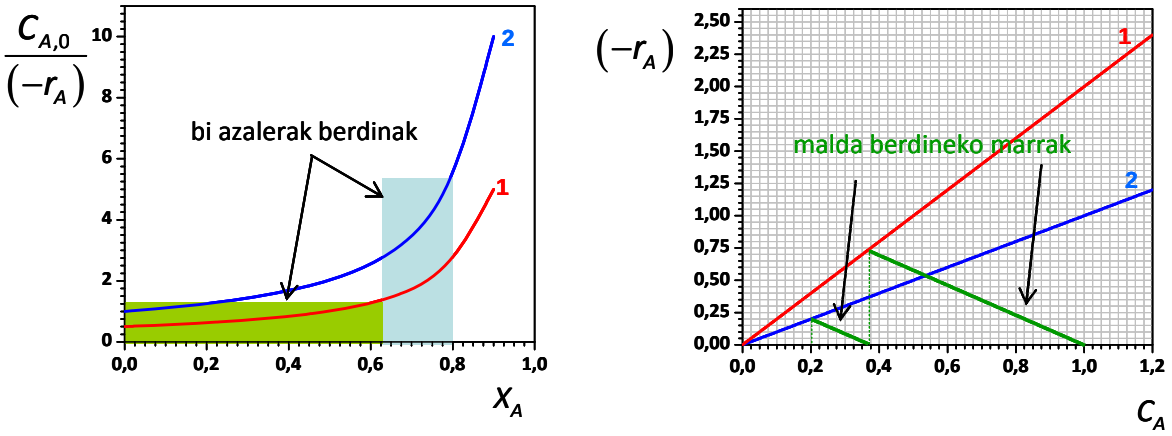
dira. Bi ekuazioak berdinduta: $X_{A,1}$ = 0,63 lortzen da. Ohartzen bagara (a) atalean baino bihurtze-maila handiagoa da, bolumen bereko erreaktorean azkarrago gertatzen baita erreakzioa.

Ebazpen grafikoak

(a), (b) eta (c) atalak:



(d) atala:



Lehen ordenako erreakzioa gertatzen denean ($(-r_A) = k \cdot C_A^n$ moduko ekuazio zinetikoarekin) N. erreaktoreetan masa-balantzea egiten bada, hau lortzen da:

$$C_{A,N} = \frac{C_{A,0}}{\prod_{i=1}^{N}\left(1 + k_i \cdot \tau_i\right)} \tag{18.21}$$

Erreaktore guztiek tenperatura berean badihardute eta guztien bolumena bera bada:

$$C_{A,N} = \frac{C_{A,0}}{\left(1 + k_i \cdot \tau_i\right)^N} \tag{18.22}$$

Adierazpen honetatik bihurtze-maila finko bat lortzeko zenbat erreaktore (*N*) behar diren lor daiteke, konstante zinetikoa eta denbora espaziala jakinak izanik:

$$N = \frac{\ln\left(\frac{C_{A,0}}{C_{A,N}}\right)}{\ln\left(1 + k_i \cdot \tau_i\right)} \tag{18.23}$$

Halaber, *N* erreaktoreko sortan bihurtze-maila finkoa lortzeko erreaktore bakoitzaren denbora espaziala kalkula daiteke:

$$\tau_i = \frac{1}{k_i} \cdot \left[\sqrt[N]{\frac{C_{A,0}}{C_{A,N}} - 1}\right] \tag{18.24}$$

18.11 adibidea

A $\rightarrow$ B likido-faseko erreakzioa isotermikoki gauzatzen da seriean kokatutako tanga-erako erreaktore-sisteman. Sistemara sartzen den emari osoa 1000 l/h da, eta $C_{A,0}$ = 5 mol/l da. Erreakzioaren ekuazio zinetikoa ($-r_A$)(mol/l h) = 1,5·C_A bada, kalkula ditzagun (a) 100 l-ko bolumeneko lau erreaktoreko sortan lortzen den bihurtze-maila osoa, (b) 100 l-ko bolumeneko lau erreaktoreko sortan A-ren % 80 bihur dadin, erreaktore sortara zer emarik sartu behar duen, (c) A-ren % 80 bihurtzeko, 100 l-ko zenbat erreaktore erabili behar diren 1000 l/h emariaz elikatuz gero.

Ebazpena

(a) Erreaktore bakoitzaren denbora espaziala = 100 /1000 h = 0,1 h da. Ekuazio zinetikoaren arabera, laneko tenperaturan, konstante zinetikoak 1,5 h^{-1} balio du.
Laugarren erreaktorearen irteeran hau da Aren kontzentrazioa:

$$C_{A,4} = \frac{5\, mol/l}{\left(1 + 1{,}5 \cdot 0{,}1\right)^4} = 2{,}86\, mol/l$$

Beraz, sisteman orotara 0,428ko bihurtze-maila lortu da. Lehen, bigarren eta hirugarren erreaktoreetan 0,13, 0,244 eta 0,34ko bihurtze-mailak lortu dira, hurrenez hurren.

(b) 0,8ko bihurtze-maila lortu nahi bada, laugarren erreaktorearen irteeran $C_{A,4}$ = 1 mol/l izan behar da.

$\tau_i = \frac{1}{1{,}5}\left[\sqrt[4]{\left(\frac{5}{1} - 1\right)}\right] = 0{,}943$ h-ko denbora espaziala beharko du erreaktore bakoitzak (eta sistema osoak 4·0,943 = 3,77 h). Beraz, elikatu behar den emaria *Q* = 100 l/0,943 h = 106 l/h izateraino murriztu behar da.

(c) *N*. erreaktorearen irteeran 0,8ko bihurtze-maila lortu nahi bada, $C_{A,N}$ = 1 mol/l da. Erreaktore bakoitzaren denbora espaziala 0,1 h izanik:

$$N = \frac{\ln\left(\frac{5}{1}\right)}{\ln(1+1{,}5\cdot 0{,}1)}$$ = 11,5, hau da, 12 erreaktore erabili beharko lirateke.

18.8.2 Tanga-erako erreaktore sorta paraleloan

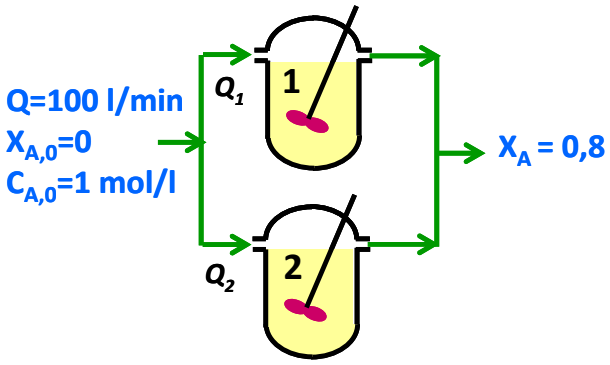
Hodi-formako erreaktoreak bezala, erreaktore hauek ere paraleloan koka daitezke, ekoizpen osoa maximizatzeko asmoz, batez ere. Hodi-formakoekin gertatzen den bezala, honelako sistemetan, ekoizpen maximoa lortzen da erreaktore guztietan bihurtze-maila berdina lortzen denean, hau da, erreaktore guztiek denbora espazial bera dutenean (ikus 18.9 eskuineko irudia).

$$Q_{OSOA} = Q_1 + Q_2 + \cdots + Q_N$$
$$\left(\frac{V}{Q}\right)_1 = \left(\frac{V}{Q}\right)_2 = \cdots \left(\frac{V}{Q}\right)_N$$

18.12 adibidea

Paraleloan dauden tanga-erako bi erreaktoreko sisteman ($V_1 = 2\cdot V_2$), likido-egoerako A $\rightarrow$ B erreakzioa gauzatzen da, irteerako bihurtze-maila 0,8 izan arte. Q = 100 l/min eta $C_{A,0}$ = 1 mol/l badira, kalkula ditzagun (a) erreaktore bakoitzera zer emari sartu behar den, (b) erreaktore bakoitzaren bolumena, (c) zenbat B ekoizten den.
Datuak: $(-r_A)$(mol/lmin) = $1\cdot C_A$ da.

Ebazpen analitikoa



(a) Bi erreaktoreen denbora espazialak berdinak izanik:

$$\tau_1 = \cancel{C_{A,0}}\cdot\frac{0{,}8-0}{1\cdot\cancel{C_{A,0}}\cdot(1-0{,}8)} = 4\,\text{min} = \tau_2$$

$$\frac{2\cdot V_2}{Q_1} = 4\,\text{min} = \frac{V_2}{100-Q_1}$$

Hortik,

Q_1 = 66,7 l/min eta Q_2 = 33,3 l/min lortzen dira.

(b) V_1 = 267 l eta V_2 = 134 l dira.

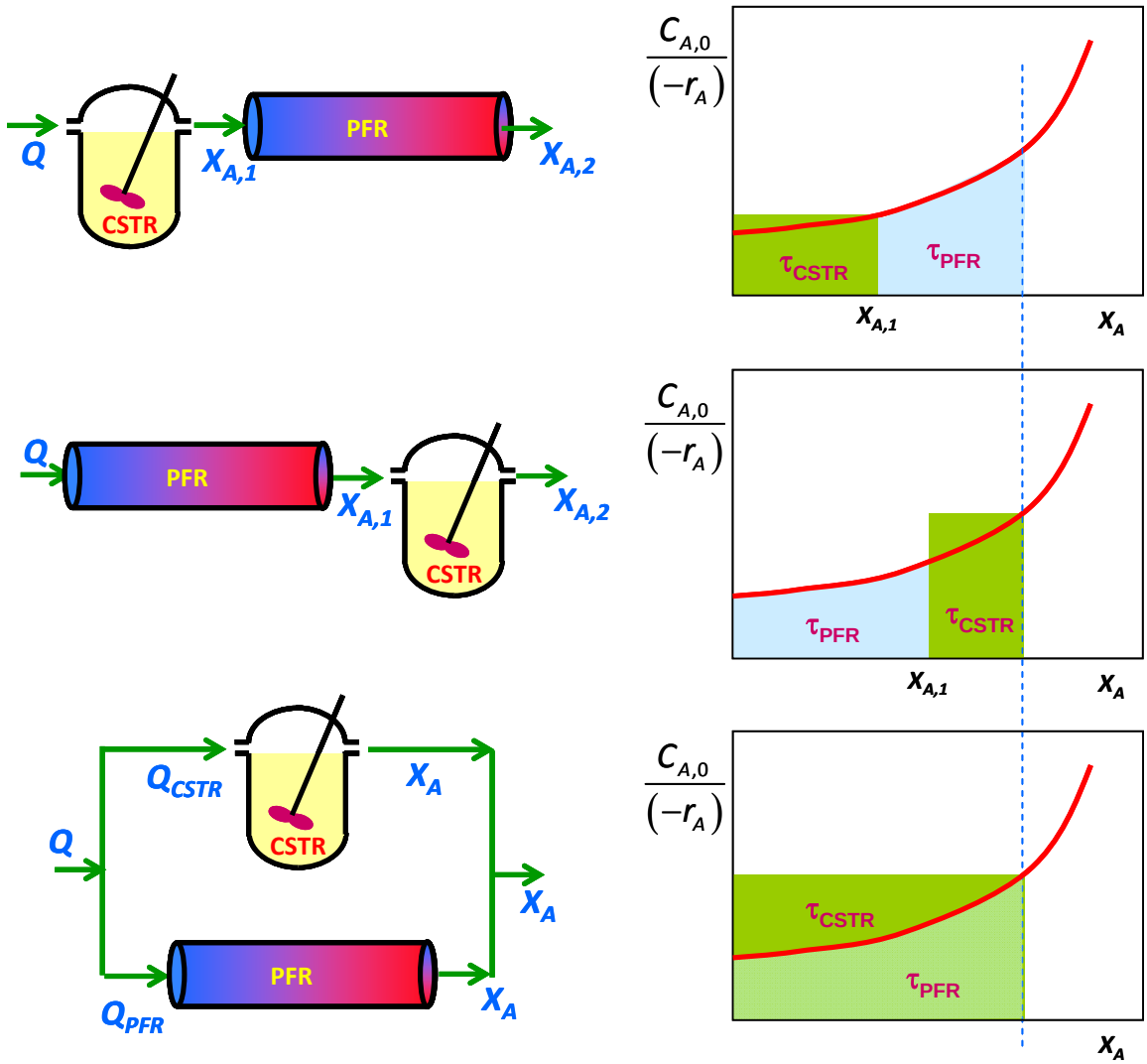
(c) $F_{B,1} = Q_1\cdot C_{A,0}\cdot X_A$ = 66,7(l/min)·1(mol/l)·0,55 = 53,36 mol/min lehen adarreko erreaktorean.

$F_{B,2}$ = $Q_2 \cdot C_{A,0} \cdot X_A$ = 33,3(l/min)·1(mol/l)·0,55 = 26,68 mol/min bigarren adarreko erreaktorean.

Guztira, 80,04 mol/min ekoizten da.

18.9 ERREAKTORE MOTA DESBERDINEZ OSATUTAKO SORTAK

Orain arte, mota bereko erreaktorez osatutako erreaktore sortak (paraleloan zein seriean osatutakoak) azaldu dira (denak hodi-formakoak ala denak tanga-erakoak). Hala ere, aipatutako bi erreaktore mota idealek elkarrekin sortak osa ditzakete, seriean zein paraleloan. Erreaktore mota desberdinez osatutako sorta hauek orain arte bezala ebazten dira. Adibide gisa, hiru kasuren ebazpen grafikoa azaltzen da 18.13 irudian.

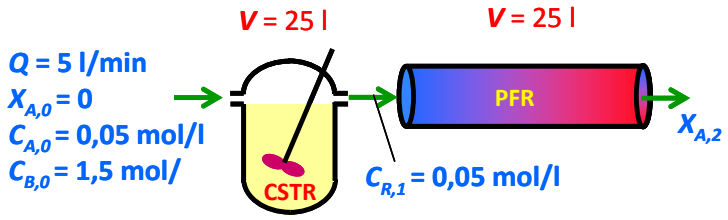


18.13 irudia. Erreaktore mota desberdinez osatutako zenbait sorta eta haien ebazpen grafikoa.

18.13 adibidea

A + B → 2R erreakzioa isotermikoki gauzatzen da irudiko sisteman. 25 l-ko bolumeneko tanga-erako erreaktorera A eta B osagaien nahastearen 5 l/min elikatzen da (0,05 mol/l A eta 1,5 mol/l B kontzentrazioz). Erreaktore horretan bihurtu ondoren, 25 l-ko bolumeneko hodi-formako erreaktorean gehiago bihurtzen da. Tanga-erako erreaktore-irteeran C_R = 0,05 mol/l neurtu da. Erreakzioaren ekuazio zinetikoa $(-r_A)$(mol/lmin) = $k \cdot C_A \cdot C_B$ modukoa bada,

kalkula ditzagun sistema osoan zer bihurtze-maila lortzen den eta sistematik irteten den nahasteak zer konposizio duen.



Ebazpena

Erreakzioaren ekuazio zinetikoa moldatzen bada, $M = C_{B,0}/C_{A,0} = 30$ izanik:

$$(-r_A)(\text{mol/lmin}) = k \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A) \cdot C_{A,0} \cdot (M - X_A) = k \cdot C_{A,0}^2 \cdot (1 - X_A) \cdot (M - X_A)$$

Sarrerako kontzentrazioen balioak ordezkatzen badira,

$$(-r_A)(\text{mol/lmin}) = k \cdot 0{,}05^2 \cdot (1 - X_A) \cdot (30 - X_A)$$

Lehen erreaktorearen irteeran $C_{R,1}$ = 0,025 mol/l kontzentrazioa badago, erreaktore honen irteeran dagoen bihurtze-maila kalkulatuko da, $C_{R,0}$ dela kontsideratuta:

$C_{R,1} = C_{R,0} + 2 \cdot C_{A,0} \cdot X_{A,1}$

$X_{A,1}$ = 0,5 bihurtze-maila lortzen da.

Lehen erreaktorean diseinu-ekuazioa aplikatzen bada:

V/Q = 25 l/5 l/min = 5 minutuko denbora espaziala dauka.

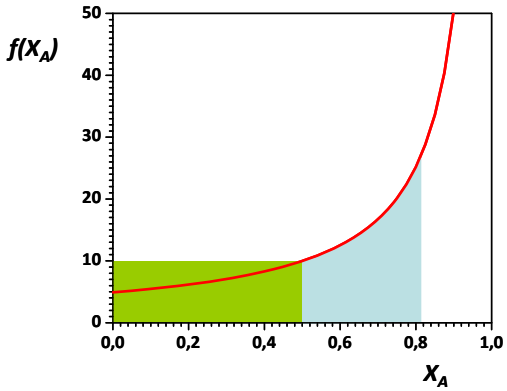
Laneko tenperaturan konstante zinetikoak k = 0,136 min^{-1} balio du.

Bigarren erreaktoreak (hodi-formakoak) tenperatura berean diharduenez, konstantearen balio bera erabiliko da.

V/Q = 5 min izanik:

$$5\,\text{min} = \int_{0,5}^{X_{A,2}} \frac{dX_A}{0{,}136 \cdot 0{,}05 \cdot (1 - X_A) \cdot (30 - X_A)}$$

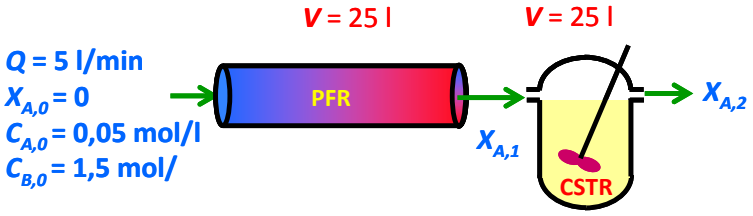
Ebazpen grafikoa egiten bada, $f(X_A) = \dfrac{1}{0{,}136 \cdot 0{,}05 \cdot (1 - X_A) \cdot (30 - X_A)}$ hartuta, haztapenez, $X_{A,2}$ ≈ 0,817 lortzen da.



18.14 adibidea

18.13 adibideko erreaktoreak ordenaz aldatuko balira, sisteman lortuko litzatekeen bihurtze-maila.
Datuak: elikadura, bi erreaktoreen bolumenak eta tenperaturak 18.14 adibidean kalkulatutakoak dira.

Ebazpena



Hodi-formako erreaktorean:

V/Q = 5 min

$$5\,\text{min} = \int_0^{X_{A,1}} \frac{dX_A}{0{,}136 \cdot 0{,}05 \cdot (1 - X_A) \cdot (30 - X_A)}$$

Ebazten bada, $X_{A,1}$ = 0,635 lortzen da.

Bigarren erreaktorearen denbora espaziala 5 minutukoa da, eta diseinu-ekuazioa ebazten bada:

$$5\ \text{min} = \frac{X_{A,2} - 0{,}637}{0{,}136 \cdot 0{,}05 \cdot \left(1 - X_{A,2}\right) \cdot (30 - X_{A,2})}$$

$X_{A,2}$ = 0,818 lortzen da.

BIBLIOGRAFIA

1. Alders L. Liquid-liquid extraction: Theory and laboratory practice. 2. edizioa Amsterdam:Elsevier, 1959.
2. Backhurts JR, Harker JH, Porter JE. Problems in Heat and Mass Transfer. Londres:Edward Arnold, 1980.
3. Badger WL, Banchero JT. Introducción a la Ingeniería Química. Madril:Ediciones del Castillo S.A.,1964.
4. Bennet CO, Myers JE. Transferencia de cantidad de movimiento, calor y materia. Bartzelona:Reverté, 1979.
5. Bird RB, Stewart WE, Lightfoot EN. Fenómemos de Transporte. Bartzelona:Reverté, 1980.
6. Calleja Pardo G, eta lankideak. Introducción a la Ingeniería Química: Madril:Síntesis, 1999.
7. Costa Novella E, eta lankideak. Ingeniería Química (1, 2, 3 eta 4 liburukiak). Madril: Alhambra Universidad, 1988.
8. Coulson JM, Richardson JF. Ingeniería Química (1, 2 eta 3 liburukiak). Bartzelona:Reverté, 1979.
9. Froment GF, Bischoff KB. Chemical Reactor Analysis and Design. 2. edizioa. New York:John Wiley and Sons, 1990.
10. González Velasco JR, eta lankideak. Cinética Química Aplicada. Madril: Síntesis, Madril, 1999.
11. Henley EJ, Rosen EM. Cálculo de los Balances de Materia y Energía. Bartzelona: Reverté, 1993.
12. Hill CG. An introduction to Chemical Engineering Kinetics and Reactor Design. New York:Wiley & Sons, 1977.
13. Himmelblau DM. Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering. 5. edizioa. New Jersey: Prentice-Hall International Editions, 1989.
14. Incropera FP, de Witt DP. Fundamentals of Heat and Mass transfer. 3. edizioa. New York: John Wiley and Sons, 1990.
15. Johnstone RE, Thring MW. Pilot Plants, Models, and Scaleup Methods in Chemical Engineering. New York: Mc-Graw-Hill, 1957.
16. Kreith F, Bohn MS. Principios de transferencia de calor. Thomson Learning, 6. edizioa. Mexiko DF: Thomson-learning, 2001.
17. Lienhard JH, Lienhard JH. A Heat transfer textbook. 3. edizioa. Cambridge:Phlogiston Press, 2002.
18. Levenspiel O. Chemical Reaction Engineering. 3. edizioa. John Wiley & Sons., 1999.
19. Martínez de la Cuesta PJ, Rus Martínez E. Operaciones de separación en ingenieria quimica: métodos de cálculo. Madril: Pearson–Prentice Hall, 2004.
20. McCabe WL, Smith JC, Harriott P. Operaciones básicas de Ingeniería Química. Madril: McGraw-Hill, 1994.

21. Munson BR, Young DF, Okiishi TH. Fundamentals of Fluid Mechanics. 4. edizioa. New York: John Wiley and Sons, 2002.
22. Perry RH, Green DW. Chemical Engineers´ Handbook. 7. edizioa. McGraw-Hill, 1997.
23. Reklaitis GV. Balances de Materia y Energía, Mexiko DF: Nueva Editorial Interamericana, 1986.
24. Seader JD, Ernest JH. Separation Process Principles. Londres: John Wiley & Sons, 1998.
25. Scott Fogler H. Elementos de Ingeniería de las reacciones químicas. 3. edizioa. Mexiko DF: Prentice-Hall, 2001.
26. Treybal RE. Operaciones de Transferencia de Masa. 2. edizioa, Mexiko DF: McGraw-Hill, 1980.
27. Welty JR, Wicks CE, Wilson RE. Fundamentos de Transferencia de Momento, Calor y Masa. 2. edizioa. Mexiko DF: Limusa Wiley, 1999.
28. Zhorov, YM. Thermodynamics of Chemical Processes. Mosku: Mir Publishers Moscow,1987.