

# DEDUCCIÓN DE LA ECUACIÓN DE CONSERVACIÓN DE UN COMPONENTE

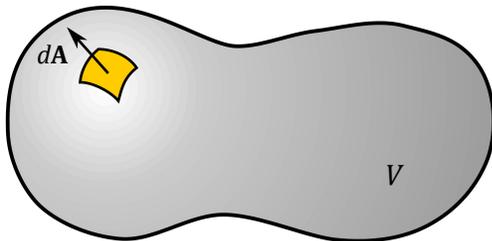
NOTA: Esta es una deducción integral para un volumen de control arbitrario. La ecuación de conservación de un componente también se puede deducir de la forma habitual, mediante un balance diferencial en un volumen de control  $\Delta x$  por  $\Delta y$  por  $\Delta z$ .

## Suposiciones

- ★ Estado transitorio.
- ★ Hay transferencia de masa del componente A en una dirección arbitraria.
- ★ Hay generación del componente A debido a una reacción química homogénea.

## Balance de componente

Considérese un volumen de control  $V$ , de forma arbitraria, fijo en el espacio. La superficie del volumen de control es  $S$ , y sobre esa superficie se toma un diferencial de área  $dA$ . Se desea establecer el balance molar del componente A (en kmol) para este volumen de control, durante un intervalo de tiempo  $\Delta t$ .



## Entrada del componente al volumen de control

La densidad de flujo molar  $\mathbf{n}_A$  (en kmol/m<sup>2</sup>·s) es el vector que representa el número de moles que cruzan una cierta superficie cada cierto tiempo. La orientación del área diferencial  $dA$  influye en cuántos moles realmente atraviesan la superficie, por lo que el número de moles que cruza la superficie está dado por el producto punto  $\mathbf{n}_A \cdot d\mathbf{A}$ .

Por definición, el vector  $d\mathbf{A}$  apunta *hacia afuera* del volumen de control, por lo que el flujo de A que entra sería:

$$-\mathbf{n}_A \cdot d\mathbf{A}$$

Las unidades de este término serían kmol/s, por lo que hay que multiplicarlo por  $\Delta t$  para obtener el número de kilomoles de A que entran al volumen de control a través de  $dA$ :

$$-\mathbf{n}_A \cdot d\mathbf{A}\Delta t$$

El flujo total que entra al volumen de control se obtiene sumando las contribuciones del flujo en toda la superficie, es decir, con la integral cerrada de área:

$$\text{entrada} = -\oint_S \mathbf{n}_A \cdot d\mathbf{A}\Delta t$$

## Generación del componente dentro del volumen de control

La generación de A en el volumen de control está dada por la velocidad de reacción  $r_A$  (en kmol/m<sup>3</sup>·s), que está definida como el número de moles de A que se producen por reacción química, por unidad de volumen y unidad de tiempo. Es importante señalar que ésta es la **reacción homogénea**, es decir, que ocurre en la misma fase en la que ocurre la transferencia de masa.

La cantidad total del componente A que se genera en el volumen de control se obtiene integrando la velocidad de reacción con respecto al volumen, y multiplicando por  $\Delta t$ :

$$\text{generación} = \int_V r_A dV\Delta t$$

## Acumulación del componente en el volumen de control

La cantidad de A que hay en el volumen de control se obtiene integrando la concentración  $C_A$  (kmol/m<sup>3</sup>) con respecto al volumen:

$$\int_V C_A dV$$

Para determinar la acumulación, se debe tomar esta cantidad al final del intervalo  $\Delta t$ , y restar la cantidad al inicio del intervalo  $\Delta t$ :

$$\text{acumulación} = \int_V C_A dV \Big|_{t+\Delta t} - \int_V C_A dV \Big|_t$$

### Balance del componente

Se escribe el balance, E - S + G = A (la salida ya está incluida en la entrada):

$$-\oint_S \mathbf{n}_A \cdot d\mathbf{A} \Delta t + \int_V r_A dV \Delta t = \int_V C_A dV \Big|_{t+\Delta t} - \int_V C_A dV \Big|_t$$

Dividiendo entre el intervalo de tiempo  $\Delta t$ :

$$-\oint_S \mathbf{n}_A \cdot d\mathbf{A} + \int_V r_A dV = \frac{\int_V C_A dV \Big|_{t+\Delta t} - \int_V C_A dV \Big|_t}{\Delta t}$$

y tomando el límite cuando  $\Delta t$  tiende a cero:

$$-\oint_S \mathbf{n}_A \cdot d\mathbf{A} + \int_V r_A dV = \frac{d}{dt} \int_V C_A dV$$

Reacomodando para dejar la ecuación igualada a cero (como ecuación de conservación):

$$\frac{d}{dt} \int_V C_A dV + \oint_S \mathbf{n}_A \cdot d\mathbf{A} - \int_V r_A dV = 0$$

La derivada con respecto al tiempo puede entrar a la integral de volumen (como derivada parcial porque  $C_A$  depende también de la posición):

$$\int_V \frac{\partial C_A}{\partial t} dV + \oint_S \mathbf{n}_A \cdot d\mathbf{A} - \int_V r_A dV = 0$$

Para poder seguir manipulando esta ecuación, es necesario convertir la integral cerrada de área en una integral de volumen, mediante el teorema de Gauss:

$$\int_V (\nabla \cdot \mathbf{F}) dV = \oint_S \mathbf{F} \cdot d\mathbf{A}$$

Para esta deducción, la función  $\mathbf{F}$  en el teorema de Gauss es la densidad de flujo molar  $\mathbf{n}_A$ , por lo que la ecuación se convierte en:

$$\int_V \frac{\partial C_A}{\partial t} dV + \int_V (\nabla \cdot \mathbf{n}_A) dV - \int_V r_A dV = 0$$

Ya que ahora las tres integrales son respecto al mismo volumen, se pueden reunir en una sola integral:

$$\int_V \left( \frac{\partial C_A}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{n}_A - r_A \right) dV = 0$$

Ahora bien, esta ecuación siempre debe ser cero para cualquier volumen de control arbitrario, por lo que el integrando debe ser idénticamente cero:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{n}_A - r_A = 0$$

Ésta es la ecuación de conservación del componente A.

### Notación

$C_A$  - concentración de la sustancia A (kmol/m<sup>3</sup>).

$n_A$  - densidad de flujo molar de A (kmol/m<sup>2</sup>·s).

$r_A$  - velocidad de reacción homogénea de A (kmol/m<sup>3</sup>·s).