

ECUACIÓN DE CONSERVACIÓN DE UN COMPONENTE

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

acumulación flujo generación

Coordenadas Rectangulares

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left[\frac{\partial n_{A,x}}{\partial x} + \frac{\partial n_{A,y}}{\partial y} + \frac{\partial n_{A,z}}{\partial z} \right] - r_A = 0$$

Coordenadas Cilíndricas

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r n_{A,r}) + \frac{1}{r} \frac{\partial n_{A,\theta}}{\partial \theta} + \frac{\partial n_{A,z}}{\partial z} \right] - r_A = 0$$

Coordenadas Esféricas

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 n_{A,r}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (n_{A,\theta} \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial n_{A,\phi}}{\partial \phi} \right] - r_A = 0$$

NOTACIÓN:

C_A = concentración molar del componente A (kmol/m³).

\mathbf{n}_A = vector densidad de flujo molar del componente A (kmol/m²·s).

r_A = velocidad de reacción homogénea del componente A (kmol/m³·s).

t = tiempo (s).

ECUACIÓN DE CONSERVACIÓN DE UN COMPONENTE

SIMPLIFICADA PARA EL CASO DE SISTEMAS DILUIDOS O PARA CONTRADIFUSIÓN EQUIMOLAR
($\mathbf{v} = 0$ para un sólido o fluido reposo)

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla C_A - \mathcal{D}_{AB} \nabla^2 C_A - r_A = 0$$

acumulación advección difusión generación

Coordenadas Rectangulares

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left[v_x \frac{\partial C_A}{\partial x} + v_y \frac{\partial C_A}{\partial y} + v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} \right] - \mathcal{D}_{AB} \left[\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right] - r_A = 0$$

Coordenadas Cilíndricas

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left[v_r \frac{\partial C_A}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial C_A}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} \right] - \mathcal{D}_{AB} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 C_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right] - r_A = 0$$

Coordenadas Esféricas

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left[v_r \frac{\partial C_A}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial C_A}{\partial \theta} + \frac{v_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial C_A}{\partial \phi} \right] - \mathcal{D}_{AB} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial C_A}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 C_A}{\partial \phi^2} \right] - r_A = 0$$

NOTACIÓN:

C_A = concentración molar del componente A (kmol/m^3).

\mathcal{D}_{AB} = difusividad del componente A en el componente B (m^2/s).

r_A = velocidad de reacción homogénea del componente A ($\text{kmol}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$).

t = tiempo (s).

\mathbf{v} = vector de velocidad del fluido (m/s).