

PROCEDIMIENTO GENERAL PARA ANÁLISIS DE
PERFILES DE CONCENTRACIÓN

1	Dibujar un diagrama del caso que se va a analizar.	
2	Seleccionar el sistema de coordenadas y establecer el origen en el diagrama.	
3	Elaborar una lista de suposiciones. Algunas suposiciones se pueden obtener de las siguientes preguntas: <ul style="list-style-type: none"> ★ ¿Estado estable o transitorio? ★ ¿En qué dirección varía la concentración? ★ ¿Hay reacción química? ★ ¿Es un caso de difusión unimolecular, de contradifusión equimolar o de contradifusión no equimolar? ★ Si existen efectos de borde, ¿se van a incluir en el análisis? ★ ¿Qué tipo de material es? ¿Sus propiedades son constantes o variables? 	
4	<p>Definir si el análisis se realizará mediante un balance diferencial o por simplificación de las ecuaciones de conservación, para obtener la ecuación diferencial del sistema.</p> <p>Mediante balance diferencial:</p> <p>a) Seleccionar un volumen de control (puede convenir dibujarlo por separado para analizarlo con más facilidad). Marcar sus medidas y determinar su volumen ΔV.</p> <p>b) Para el balance de componente, determinar entradas, salidas, generación y/o acumulación de dicho componente en el volumen de control, durante un intervalo de tiempo Δt. Las unidades de todos los términos deben ser kmol. Siempre se asume que el transporte es en la dirección positiva de los ejes.</p> <ul style="list-style-type: none"> ★ Las entradas y salidas dependen de la densidad de flujo molar \mathbf{n}_A (incluye difusión y advección). Si el sistema es diluido puede tomarse por separado la difusión \mathbf{j}_A y la advección $C_A \mathbf{v}$. ★ La generación homogénea (es decir, la que ocurre en todo el volumen de control) depende de la velocidad de reacción r_A. Si la reacción sólo ocurre en las fronteras del sistema no debe incluirse en el balance, sino en las condiciones de frontera. ★ La acumulación depende de la concentración C_A dentro del volumen de control (final – inicial). <p>c) Escribir el balance de componente: $E - S + G = A$.</p> <p>d) Dividir entre el volumen ΔV y entre el intervalo de tiempo Δt.</p> <p>e) Tomar el límite cuando $\Delta V \rightarrow 0$ y $\Delta t \rightarrow 0$ para obtener derivadas. ¡Cuidado con los signos!</p> <ul style="list-style-type: none"> ★ $\frac{df}{dx} \equiv \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$ 	<p>Mediante ecuaciones de conservación:</p> <p>a) Identificar las ecuaciones aplicables al sistema analizado, en el sistema de coordenadas que se está usando:</p> <ul style="list-style-type: none"> ★ Generalmente sólo se requiere la ecuación de conservación de un componente y la ecuación general de flujo. ★ Si hay un fluido en movimiento, puede ser necesario obtener primero el perfil de velocidad, con la ecuación de conservación de masa y la ecuación de conservación de momentum. <p>b) Simplificar las ecuaciones con base en la lista de suposiciones.</p>
5	<p>Toda la ecuación debe quedar en términos de la concentración de A, por lo que hay que realizar las siguientes sustituciones, si aparecen en la ecuación:</p> <ul style="list-style-type: none"> ★ la densidad de flujo molar \mathbf{n}_A, empleando la ecuación general de flujo simplificada para el caso que se está analizando. ★ la densidad de flujo molar por difusión \mathbf{j}_A, empleando la ley de Fick de la difusión. ★ la velocidad de reacción r_A, empleando la ecuación de velocidad de acuerdo a la cinética de la reacción. 	
6	En algunos casos, puede ser conveniente expresar la concentración en términos de fracción mol o presión parcial (el cambio también se puede hacer después de haber resuelto la ecuación diferencial).	
7	Resolver la ecuación diferencial para obtener la solución general.	
8	Establecer y aplicar las condiciones de frontera, para obtener la solución particular (perfil de concentración).	
9	Se recomienda verificar que la solución particular obtenida realmente cumple con las condiciones de frontera.	
10	Analizar el comportamiento de la solución dependiendo de los parámetros que contiene para entender las características del perfil de concentración.	
11	Obtener información adicional a partir del perfil de concentración (concentración máxima, concentración media, densidad de flujo molar, flujo molar total, etcétera).	