



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

ACTA DE EXAMEN DE GRADO

No. 00067

Matrícula: 207381124

EFFECTO EN LA CONDICION DE
SALTO EN LA CONCENTRACION DE
SALIDA DE UN SISTEMA
MULTIFASICO

En México, D.F., se presentaron a las 13:00 horas del día 1 del mes de febrero del año 2012 en la Unidad Iztapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana, los suscritos miembros del jurado:

DR. JOSE ENRIQUE BOTELLO ALVAREZ
DR. JOSE DE JESUS ALVAREZ RAMIREZ
DR. ALFONSO MAURICIO SALES CRUZ



LUCIA OCHOA OCAÑA
ALUMNA

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el último, se reunieron para proceder al Examen de Grado cuya denominación aparece al margen, para la obtención del grado de:

MAESTRA EN CIENCIAS (INGENIERIA QUIMICA)

DE: LUCIA OCHOA OCAÑA

y de acuerdo con el artículo 78 fracción III del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:

aprobar

REVISÓ

LIC. JULIO CESAR DE LARA ISASSI
DIRECTOR DE SISTEMAS ESCOLARES

Acto continuo, el presidente del jurado comunicó a la interesada el resultado de la evaluación y, en caso aprobatorio, le fue tomada la protesta.

DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE CBI

DR. JOSE ANTONIO DE LOS REYES
HEREDIA

PRESIDENTE

DR. JOSE ENRIQUE BOTELLO ALVAREZ

VOCAL

DR. JOSE DE JESUS ALVAREZ RAMIREZ

SECRETARIO

DR. ALFONSO MAURICIO SALES CRUZ

**Efecto en la Condición de Salto en la Concentración
de Salida de un Sistema Multifásico**

Tesis que presenta

I.Q. Lucía Ochoa Ocaña

Para obtener el grado de

Maestro en Ciencias (Ingeniería Química)

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA
UNIDAD IZTAPALAPA



Efecto de la Condición de Salto en la Concentración
de Salida de un Sistema Multifásico

T E S I S

Que para obtener el grado de:
MAESTRO EN CIENCIAS:
(INGENIERIA QUIMICA)

Presenta:

LUCÍA OCHOA OCAÑA

Asesor de Tesis: Dr. J. ALBERTO OCHOA TAPIA

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Departamento de Procesos e Hidráulica

Agradecimientos

Agradezco a los doctores que contribuyeron en mi formación académica y formando mi tenacidad en materia de aprendizaje, perfilando la parte analítica y cultivando la extensa teoría; personas siempre dispuestas a compartir tiempo para nuestro crecimiento, Gretchen, Alberto Soria, Álvarez Calderón, Felipe Isunza, Tomás Viveros, Ricardo Lobo.

Agradezco con cariño a Jesús Alberto Ochoa por el tiempo y la dedicación que me brindó para reforzar las bases en el área de matemáticas y fenómenos de transporte y en la discusión de los temas de interés para enriquecer el proyecto y mi formación, José Francisco quien hizo amenas muchas tardes en el cubículo, así como a Carlos y Karla Aguilar.

Agradezco a mis compañeros de generación Juan Carlos y Paty, compañeros de muchas charlas, esfuerzos, discusiones y desveladas. Agradezco a Miriam, Diego por su apoyo incondicional, a Marufo por amenizarnos los ratos críticos.

Agradezco a mis lazos más cercanos y queridos, a Josué por inyectarle vitaminas a los días flacos, compartir mucho café en las noches largas, compartir su ñoñez y por su alta tolerancia a mi estrés.

Agradezco a mi madre por creer que siempre se puede lograr más y por fomentarnos la lucha constante y la conquista de la vida diaria,

RESUMEN

El presente trabajo es un estudio teórico sobre el efecto de la discontinuidad del flux en las variables macroscópicas de un sistema multifásico por medio de un modelado, es un análisis de un sistema no tradicional. El modelo consiste en una fase fluida perfectamente mezclada con partículas porosas suspendidas donde se lleva a cabo el proceso de adsorción y reacción de primer orden. Las ecuaciones a resolver describen el comportamiento de un tanque agitado con entrada y salida continua de fluido (Tanque Agitado Continuo) o por lotes (Reactor tipo Batch). Esto es posible porque la solución obtenida del conjunto de ecuaciones permite el modelado de ambos al modificar el valor de los parámetros relacionados con el fluido y las condiciones de entrada. Las variables macroscópicas sobre las que se medirá el efecto de la discontinuidad de flux es la concentración de la partícula en la superficie y la concentración del fluido.

Comúnmente son utilizados los sistemas tradicionales que consisten en una ecuación que describe el transporte de masa en el fluido, una ecuación que describe el transporte en la partícula porosa y una ecuación que describe la continuidad del flux en la frontera entre el fluido y la partícula.

Se analiza un modelo de sistema no tradicional que considera la discontinuidad de flux en la condición de frontera entre el fluido y la partícula. Se evalúa el efecto de la discontinuidad del flux al analizar el perfil de la concentración de la partícula en su superficie para conocer los efectos que son producidos por la adsorción y la reacción interfaciales; dicho efecto también se puede conocer al evaluar la concentración de salida, los resultados obtenidos son un indicativo para determinar la viabilidad de llevar el modelo a nivel laboratorio con la finalidad de determinar el valor de los coeficientes de salto.

El conjunto de ecuaciones que describe el modelo del sistema no tradicional fue resuelto utilizando el Método de Expansión en Series de Fourier con un problema asociado de Sturm-

Liouville y la identidad de Green; además se demuestra que el resultado obtenido es idéntico al que se encuentra utilizando el Método de la Transformada de Laplace, solución reportada en el artículo por Marroquín y col., 2002. La ecuación obtenida describe la concentración de salida permite considerar cualquier condición de alimentación al tanque en función del tiempo y condiciones iniciales diferentes a cero. En el trabajo se reportan perfiles de concentración de salida del sistema utilizando las funciones escalón, pulso y oscilatorio, sin embargo, para el análisis del coeficiente de adsorción y los coeficientes de salto se utiliza la función escalón.

La contribución del trabajo consiste básicamente en conocer y evaluar el impacto del efecto de los coeficientes de salto sobre la concentración de salida de un sistema multifásico, además este resultado es un indicativo para considerar la viabilidad de evaluar el valor de los coeficientes a nivel laboratorio lo que permitirá mejorar las aproximaciones a los modelos ya existentes.

El análisis requirió la reproducción de los resultados reportados por Marroquín y col., 2002, modificando los valores del Número de Biot y el Módulo de Thiele utilizando una condición de frontera tradicional; posteriormente se trabaja con el coeficiente de adsorción, α y los coeficientes de salto que son: coeficiente de reacción, ϕ_1 y el coeficiente de adsorción, ϕ_2 , de forma tal que es posible conocer los efectos de cada uno sobre ambas concentraciones comparando y evaluando ambos perfiles de comportamiento en el tiempo.

Los resultados obtenidos para el sistema de Tanque Agitado Continuo muestran un efecto muy poco significativo sobre la concentración de salida al modificar el coeficiente de adsorción, y se presenta el mismo efecto al modificar los coeficientes de salto, sin embargo, sí fue posible observar cambios importantes en los valores del perfil de concentración en la partícula.

Los resultados obtenidos para el Reactor tipo Batch muestran efectos significativos al modificar el coeficiente de adsorción y ambos coeficientes de salto sobre la concentración del fluido y la partícula, en este caso si se recomienda llevar este sistema a nivel laboratorio, esto con la finalidad de determinar el valor de los coeficientes de salto.

Finalmente se reporta la solución aproximada para la concentración de salida de ambos sistemas multifásicos en la que se considera que gran parte de la adsorción y la reacción de primer orden se llevan a cabo en la superficie de la partícula, este tipo de casos son característicos en las investigaciones que se realizan en catálisis heterogénea, además se

realiza una comparación con la concentración de salida obtenida por la Serie de Fourier.

Contenido

1	INTRODUCCIÓN	1
2	ANTECEDENTES	5
3	PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	9
3.1	Descripción del problema	11
3.1.1	Problema utilizando la condición de frontera con salto	11
3.1.2	Problema adimensional para la condición de frontera con salto	14
3.2	Justificación	16
3.3	Hipótesis	16
4	OBJETIVOS	17
4.1	Objetivo General	17
4.2	Objetivos Particulares	17
5	SOLUCIÓN	19
5.1	Método de Solución	20

6 RESULTADOS	31
6.1 Evaluación de la solución	32
6.2 Solución utilizando la condición de frontera tradicional	33
6.3 Efecto del Coeficiente de Adsorción	50
6.4 Evaluación de los Coeficientes de Salto	55
6.4.1 Coeficiente de Salto de Reacción	57
6.4.2 Coeficiente de Salto de Adsorción	73
6.5 Concentración aproximada en el fluido	87
7 DISCUSIÓN	99
CONCLUSIONES	103
BIBLIOGRAFÍA	107
NOMENCLATURA	109
A ADIMENSIONALIZACIÓN DEL SISTEMA DE ECUACIONES	111
A.1 Parámetros adimensionales	111
A.2 Desarrollo adimensional de las ecuaciones	113
B SOLUCIÓN POR EXPANSIÓN EN SERIES DE FOURIER	119
C SOLUCIÓN ANALÍTICA DE LA TRANSFORMADA DE LAPLACE	133
D DEMOSTRACIÓN DE LA IGUALDAD DE SOLUCIONES	157

E SOLUCIÓN PARA LA CONCENTRACIÓN APROXIMADA	165
F FUNCIONALIDAD DE TIEMPO DE LA CONCENTRACIÓN DE EN- TRADA	177
G SOLUCIÓN EN ESTADO ESTACIONARIO	181
H PROGRAMA COMPUTACIONAL CODIFICADO EN “Fortran 90”	187
H.1 Estructura del Programa	187

Índice de Figuras

1.1	Sistema Multifásico integrado por un tanque agitado que contiene partículas sólidas porosas donde la concentración se encuentra en función de la posición y del tiempo, $U_p(\xi, \tau)$ y un fluido perfectamente mezclado cuya concentración es función del tiempo, $U_f(\tau)$. El sistema es alimentado por una concentración de entrada en función del tiempo, $U_{in}(\tau)$	2
3.1	Tanque Agitado Continuo con partícula porosa. Este sistema está integrado por un tanque agitado con una concentración inicial de entrada en función del tiempo $U_{in}(\tau)$ y una concentración de salida en función del tiempo $U_f(\tau)$. En el interior del tanque existen partículas esféricas porosas con una concentración en función del tiempo y la posición $U_p(\xi, \tau)$, en la superficie cómo en el interior de la partícula se lleva a cabo el proceso de difusión, adsorción y una reacción de primer orden.	10
6.1	Comportamiento de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1$ en el tiempo (τ) para el <i>Caso 01</i> y <i>Caso 02</i> con los parámetros: $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$, $Biot = 1.0$ para la función escalón.	38
6.2	Comportamiento de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1$ en el tiempo (τ) para el <i>Caso 03</i> y <i>Caso 04</i> con los parámetros: $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$, $Biot = 100.0$ para la función escalón.	38

-
- 6.3 Comparativo de la concentración en el fluido en el tiempo (τ) para diferentes valores del Número de Biot y el Módulo de Thiele con los parámetros: $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ para la función escalón. 44
- 6.4 Zoom de comportamiento de la concentración en el fluido para valores de alta concentración en el tiempo (τ) para diferentes valores del Número de Biot y el Módulo de Thiele con los parámetros: $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ para la función escalón. 44
- 6.5 Comportamiento de la concentración de la partícula, U_p en $\xi = 1.0$, en el tiempo (τ) para diferentes valores del Módulo de Thiele y Número Biot para los parámetros: $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ 45
- 6.6 Comportamiento de la concentración en el fluido en el tiempo (τ) para la función de entrada oscilatoria donde $U_{in}^k = 1 + \beta H(\tau - \tau_0) \text{Sin}(\omega\tau) = 1 + H(\tau) \text{Sin}(5\pi\tau)$ utilizando los parámetros: $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ 47
- 6.7 Comportamiento de la concentración en el fluido en el tiempo (τ) para la función de entrada pulso utilizando los parámetros: $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ 48
- 6.8 Comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Adsorción para un Módulo de Thiele = 2.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$, $\phi_1 = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$ 53
- 6.9 Comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Adsorción para un Módulo de Thiele = 5.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$, $\phi_1 = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$ 53
- 6.10 Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Reacción para $\alpha = 1.0$, Módulo de Thiele = 2.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$ 59

6.11	Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Reacción para $\alpha = 1,000.0$, Módulo de Thiele = 2.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$	59
6.12	Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Reacción para $\alpha = 1.0$, Módulo de Thiele = 5.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$	60
6.13	Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Reacción para $\alpha = 1,000.0$, Módulo de Thiele =5.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$	60
6.14	Para el Reactor tipo Batch, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Reacción para $\alpha = 1.0$, Módulo de Thiele = 2.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$	66
6.15	Para el Reactor tipo Batch, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para el Coeficiente de Salto de Reacción para: $\alpha = 1,000.0$, Módulo de Thiele = 2.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$	66
6.16	Para el Reactor tipo Batch, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Reacción para $\alpha = 1.0$, Módulo de Thiele = 5.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$	67
6.17	Para el Reactor tipo Batch, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para el Coeficiente de Salto de Reacción para: $\alpha = 1,000.0$, Módulo de Thiele = 5.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$	67

- 6.18 Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Adsorción para: $\alpha = 1.0$, Módulo de Thiele = 2.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_1 = 0.0$ 76
- 6.19 Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Adsorción para: $\alpha = 1,000.0$, Módulo de Thiele = 2.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_1 = 0.0$ 76
- 6.20 Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Adsorción para: $\alpha = 1.0$, Módulo de Thiele = 5.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_1 = 0.0$ 77
- 6.21 Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Adsorción para: $\alpha = 1,000.0$, Módulo de Thiele = 5.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_1 = 0.0$ 77
- 6.22 Para el Reactor tipo Batch, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Adsorción para: $\alpha = 1.0$, Módulo de Thiele = 2.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_1 = 0.0$ 82
- 6.23 Para el Reactor tipo Batch, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del coeficiente de Salto de Adsorción para: $\alpha = 1,000.0$, Módulo de Thiele = 2.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_1 = 0.0$ 82
- 6.24 Para el Reactor tipo Batch, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Adsorción para: $\alpha = 1.0$, Módulo de Thiele = 5.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_1 = 0.0$ 83

6.25	Para el Reactor tipo Batch, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del coeficiente de Salto de Adsorción para: $\alpha = 1,000.0$, Módulo de Thiele = 5.0 , $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_1 = 0.0$	83
6.26	Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración del fluido para la solución analítica U_f y la solución aproximada del fluido U_{fa} , la concentración analítica de la partícula U_p y la solución aproximada de la partícula U_{pa} en el tiempo (τ) para los siguientes parámetros: $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$, $\phi_1 = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$	89
6.27	Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración del fluido para la solución analítica U_f y la solución aproximada del fluido U_{fa} , la concentración analítica de la partícula U_p y la solución aproximada de la partícula U_{pa} en el tiempo (τ) para los siguientes parámetros: $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$, $\phi_1 = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$	91
6.28	Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración del fluido para la solución analítica U_f y la solución aproximada del fluido U_{fa} , la concentración analítica de la partícula U_p y la solución aproximada de la partícula U_{pa} en el tiempo (τ) para los siguientes parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 2.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$	95
6.29	Para el Reactor Batch, comparativo de la concentración del fluido para la solución analítica U_f y la solución aproximada del fluido U_{fa} , la concentración analítica de la partícula U_p y la solución aproximada de la partícula U_{pa} en el tiempo (τ) para los siguientes parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 2.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$	96
H.1	Programa	188

Índice de Tablas

6.1	Comparativo de los primeros diez valores propios encontrados utilizando <i>Biot</i> = 1.0, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$	39
6.2	Evaluación de la concentración en el fluido para el <i>Caso 01</i> y el <i>Caso 02</i> en el tiempo, τ	41
6.3	Evaluación de la concentración en el fluido en el tiempo para la función escalón.	43
6.4	Comparativo de para la concentración en la partícula en $\xi = 1$ a diferentes tiempos para los cuatro casos estudiados para la función de entrada escalón utilizando los parámetros: $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$.	46
6.5	Evaluación de la concentración del fluido en el tiempo para la función oscilatoria.	46
6.6	Evaluación de la concentración del fluido en el tiempo para la función pulso.	49
6.7	Comparativo de para la concentración del fluido a diferentes tiempos (τ), para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: <i>Biot</i> = 10.0, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$	54
6.8	Comparativo para la concentración en la partícula en $\xi = 1$ a diferentes tiempos (τ), para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: <i>Biot</i> = 10.0, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$	54

6.9	Para el Tanque Agitado Continuo, comparativo de la concentración del fluido a diferentes valores de tiempo para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 2.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$	62
6.10	Para el Tanque Agitado Continuo, comparativo para la concentración en la partícula en $\xi = 1$ a diferentes tiempos para los cuatro primeros casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 2.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$	63
6.11	Para el Tanque Agitado Continuo, comparativo para la concentración del fluido a diferentes tiempos para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 5.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$	64
6.12	Para el Tanque Agitado Continuo, comparativo para la concentración en la partícula en $\xi = 1$ a diferentes tiempos para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 5.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$	65
6.13	Para el Reactor tipo Batch, comparativo de para la concentración del fluido a diferentes tiempos para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 2.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$	70
6.14	Para el Reactor tipo Batch, comparativo de para la concentración en la partícula en $\xi = 1$ a diferentes tiempos para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 2.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$	71
6.15	Para el Reactor tipo Batch, comparativo de para la concentración del fluido a diferentes tiempos para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 5.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$	72

6.16	Para el Reactor tipo Batch, comparativo de para la concentración en la partícula en $\xi = 1$ a diferentes tiempos para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 5.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$	73
6.17	Para el Tanque Agitado Continuo, comparativo para la concentración del fluido a diferentes tiempos para los cuatro primeros casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 2.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$	78
6.18	Para el Tanque Agitado Continuo, comparativo para la concentración en la partícula en $\xi = 1$ a diferentes tiempos para los cuatro primeros casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 2.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$	79
6.19	Para el Tanque Agitado Continuo, comparativo para la concentración del fluido a diferentes tiempos utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 5.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$	80
6.20	Para el Tanque Agitado Continuo, comparativo para la concentración en la partícula en $\xi = 1$ a diferentes tiempos utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 5.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$	81
6.21	Para el Reactor tipo Batch, comparativo para la concentración del fluido a diferentes tiempos para los cuatro primeros casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 2.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$	84
6.22	Para el Reactor tipo Batch, comparativo para la concentración en la partícula en $\xi = 1$ a diferentes tiempos para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 2.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$	86
6.23	Para el Reactor tipo Batch, comparativo para la concentración del fluido a diferentes tiempos para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 5.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$	86

6.24	Para el Reactor tipo Batch, comparativo para la concentración en la partícula en $\xi = 1$ a diferentes tiempos para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 5.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$	86
6.25	Comparativo de los primero diez valores propios con su respectivo denominador D_i de la sumatoria definido en la ecuación de U_f	98
F.1	Factor de alimentación dependiente $I_{in}(\tau)$ para diferentes funciones de entrada $U_{in}(\tau)$	178
F.2	Factor de alimentación dependiente $I_{in}(\tau)$ para diferentes funciones de entrada $U_{in}(\tau)$	179

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

Se ha elegido realizar el modelado de un sistema multifásico por ser considerados el corazón de los procesos industriales, ya que toda la planta se organiza alrededor de ellos. Estos sistemas son utilizados en todos los procesos donde existe una transformación química, su impacto es tanto a nivel industrial como de laboratorio. Es posible encontrar estudios como los mostrados en la Figura (1.1) que comúnmente son utilizados para investigar los mecanismos de reacción, determinar la velocidad de adsorción y de reacción, además de sus constantes.

Existe información de modelos que describen de manera general sistemas isotérmicos en estado dinámico que no consideran la resistencia a la transferencia de masa interna ni externa, también es posible encontrar estudios que evalúan la solución de forma numérica o resuelven las ecuaciones obteniendo su solución analítica, ambas formas de evaluación son realizadas a diferentes velocidades de reacción y se consideran fenómenos de adsorción-reacción en partículas esféricas porosas, los resultados muestran los efectos que se producen en la concentración de la partícula y en la concentración del fluido al manipular diferentes condiciones de entrada.

Hasta el momento se han realizado estudios sobre las condiciones de salto de calor por Ochoa y Withaker, 1995 y sobre las condiciones de salto de momentum por Ochoa y Withaker, 1997. El estudio de las condiciones de salto de masa han sido desarrolladas por Valdés Parada, 2007.

El sistema multifásico a estudiar es posible modelarlo como Tanque Agitado Continuo que

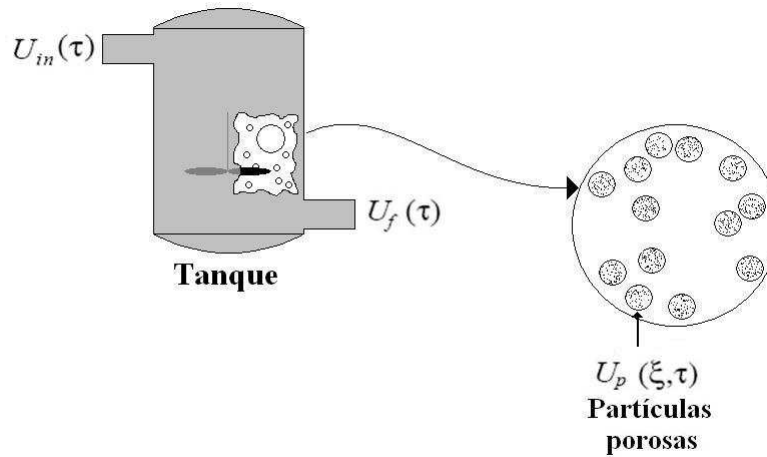


Figura 1.1: Sistema Multifásico integrado por un tanque agitado que contiene partículas sólidas porosas donde la concentración se encuentra en función de la posición y del tiempo, $U_p(\xi, \tau)$ y un fluido perfectamente mezclado cuya concentración es función del tiempo, $U_f(\tau)$. El sistema es alimentado por una concentración de entrada en función del tiempo, $U_{in}(\tau)$.

consiste en un tanque con alimentación y salida, presenta agitación vigorosa para obtener una composición uniforme en la salida del tanque como en el interior o por lotes cómo un Reactor tipo Batch, un sistema cerrado donde los reactivos se cargan inicialmente, la concentración en el tanque en cada instante es uniforme en todos los puntos y se monitorea la reacción en función del tiempo. El análisis de estos dos sistemas ofrece información sobre el efecto que producen los coeficientes de salto para comprender los fenómenos de reacción y adsorción interfaciales y será posible cuantificar parámetros cinéticos con mayor precisión lo que permitirá también mejorar los modelos de sistemas existentes que consideran una continuidad de flux y mejorar la predicción de su comportamiento.

El estudio se encuentra estructurado de la siguiente manera:

El Capítulo 2, explica brevemente los trabajos relacionados que anteceden al problema propuesto. El Capítulo 3, detalla el problema a estudiar y lo describe en forma adimensional utilizando la condición de frontera tradicional y utilizando la condición de frontera no tradicional. El Capítulo 4 describe los objetivos del trabajo. El Capítulo 5 desarrolla el Método de Expansión en Series de Fourier. El Capítulo 6 corresponde al Capítulo de

Resultados donde se presentan los efectos en la concentración de salida de ambos sistemas multifásicos al modificar el coeficiente de adsorción y los coeficientes de salto, además se incluye una solución aproximada para la concentración de salida. El Capítulo 7 consiste en una discusión de los resultados obtenidos, más adelante se presentan las conclusiones del trabajo.

Capítulo 2

ANTECEDENTES

Los trabajos vinculados con el proyecto constan de tres áreas de interés, la primera consiste en el estudio de los fenómenos en las partículas porosas, la segunda es referente a los sistemas multifásicos y la tercera a los fenómenos interfaciales.

Partículas porosas

Es de vital importancia conocer los procesos que se llevan a cabo en la partícula para comprender el comportamiento del sistema multifásico. En la superficie de la partícula como en el interior es común encontrar fenómenos de difusión, adsorción tipo Langmuir, adsorción multicapa, desorción y diferentes tipos de reacción, algunos de estos procesos se presentan simultáneamente según sea el caso. Existen estudios de partículas porosas considerando los efectos de difusión, adsorción y reacción de forma individual, utilizando en el modelo una fase gaseosa. Sin embargo tratar de modelar el comportamiento real presenta dificultades por tratarse de una partícula que puede ser no uniforme en su interior y debido a que la adsorción puede estar acompañada de la desorción simultánea.

Sarang y James, 2002, desarrollan una solución analítica para una partícula porosa de forma esférica en un modelo que considera difusión de un gas intra-partícula y adsorción lineal en la superficie simultáneamente, se considera el término de acumulación en las condiciones de frontera tipo Dirichlet. El modelo desarrollado es válido para procesos de adsorción no lineales como Langmuir, BET o Freundlich.

Álvarez y col., 2005, realizan un análisis cinético de un proceso de adsorción lineal de un gas en una partícula esférica uniformemente porosa, estudian un modelo de adsorción directo acompañado de la desorción. El modelo describe la dinámica real del proceso de adsorción y difusión simultáneas. El artículo contiene un análisis comparativo con el modelo de difusión de Fick, además debido a la desorción, se considera cíclicamente la difusión y la adsorción hasta encontrar un estado estacionario.

Sistemas multifásicos

La solución del conjunto de ecuaciones que describen el comportamiento de un sistema puede encontrarse de forma numérica y/o analítica, pero se sabe que la solución analítica ofrece la ventaja de encontrar valores muy específicos y estudiar lo que sucede de forma más puntual que la solución numérica. Los artículos consultados que resuelven de forma numérica un modelo particular son los siguientes:

Towler y Rice, 1974, analizaron un reactor continuo de tanque agitado en un modelo dinámico e isotérmico con resistencia a transferencia de masa interna.

Data y Rinker, 1983, reportan soluciones para un reactor tanque agitado donde se lleva a cabo una reacción irreversible de primer orden, la solución es general y no se especifica la forma de la partícula, el modelo incluye efectos de las resistencias a la transferencia de masa en el interior de la partícula y en la interfase.

Bidabehere y Serdan, 2005, Realizan un análisis teórico de un sistema multifásico, se consideran partículas sólidas catalíticas donde se realiza una reacción de primer orden, difusión y adsorción simultáneas. Analizaron los factores que modifican la constante de adsorción y modificaron el radio de la partícula, el estudio sirve como una aproximación en la evaluación de la cinética y el equilibrio para la adsorción.

Interfase

Whitaker, 1999, desarrolla un método que permite suavizar superficies eliminando las complejidades en una región por medio de las restricciones de escala, como el medio poroso o una región de interfase. El método de promedio volumétrico consiste en un promedio de una región representativa donde se evalúa una variable macroscópica como la concentración y la temperatura, variables en función de la posición y el tiempo. El método elimina el problema

de evaluar ecuaciones puntuales para la región debido a que hace uso de la condición de periodicidad.

Wood y col., 2000, obtienen una condición de salto para superficies catalíticas no uniformes donde se realiza el proceso de difusión y una reacción de primer orden irreversible. Parten de una condición de salto puntual para obtener una ecuación de salto que no se modifica abruptamente con la posición, es decir, utilizando el suavizado espacial y obteniendo coeficientes efectivos que contienen propiedades de la superficie catalítica.

Valencia y col., 2003, desarrollan una condición de salto entre una partícula porosa y un fluido homogéneo basados en una forma de equilibrio no local. Desarrollaron con el método del promedio volumétrico una ecuación para la partícula y una ecuación para el fluido. El resultado es una condición de salto con términos de convección, difusión, adsorción, un término de exceso de acumulación de superficie y un término más que representa el intercambio propio de las dos regiones.

Valdés y col., 2009, obtienen la condición de salto y sus coeficientes utilizando el método del promedio volumétrico; el método modificó la condición de frontera tradicional al considerar efectos producidos por la adsorción y la reacción, por lo tanto, se agregaron dos coeficientes a la condición de frontera obteniendo una condición de salto con un coeficiente referente al fenómeno de adsorción y otro para una reacción de primer orden.

Capítulo 3

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Con la revisión de los antecedentes, es posible afirmar que existe gran cantidad de procesos en ingeniería química que se realizan en sistemas multifásicos como el mostrado en la Figura 3.1 que son de amplio interés para el área industrial y de investigación. La mayoría de la información publicada sobre este tipo de equipos es obtenida por medio de análisis sobre modelos que utilizan ecuaciones promedio, es decir, no consideran los efectos interfaciales. Por tal motivo, valorizando todos los puntos anteriores, la contribución del proyecto es perfeccionar los modelos que consideran una continuidad de flux.

En el presente trabajo se realiza un análisis por medio de un modelado de un sistema multifásico considerando efectos interfaciales por medio de los coeficientes de salto que fueron previamente obtenidos por Valdés y col.,2009 utilizando el Método del Promedio Volumétrico, además considera la resistencia externa e interna a la transferencia de masa y los fenómenos de adsorción y reacción de primer orden. Con la finalidad de analizar el modelo bajo circunstancias frecuentes y prácticas en la industria o laboratorio, el análisis se detalla para diferentes funciones de entrada.

Para el análisis del sistema multifásico se toman en cuenta las siguientes consideraciones:

- El fluido se encuentra perfectamente mezclado.

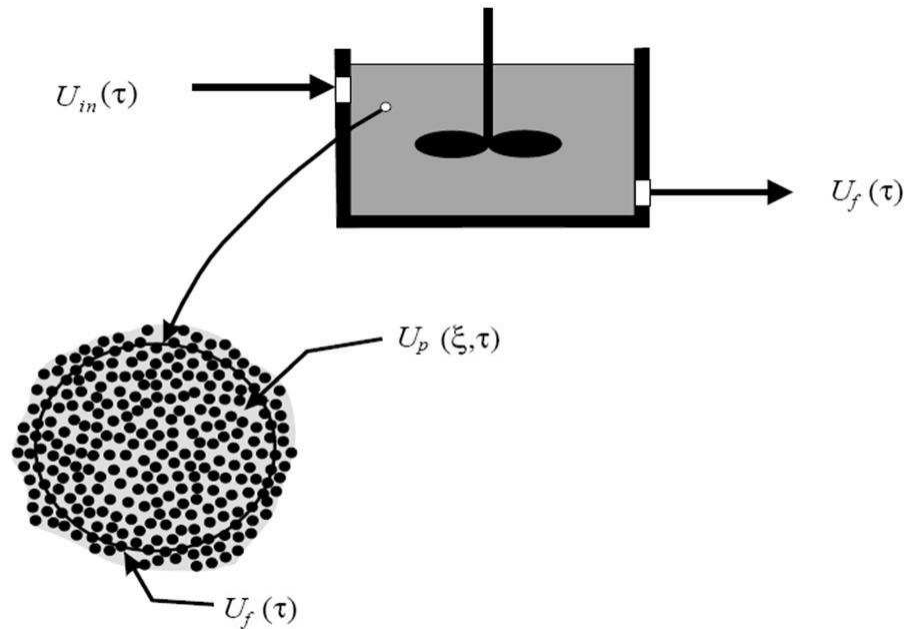


Figura 3.1: Tanque Agitado Continuo con partícula porosa. Este sistema está integrado por un tanque agitado con una concentración inicial de entrada en función del tiempo $U_{in}(\tau)$ y una concentración de salida en función del tiempo $U_f(\tau)$. En el interior del tanque existen partículas esféricas porosas con una concentración en función del tiempo y la posición $U_p(\xi, \tau)$, en la superficie cómo en el interior de la partícula se lleva a cabo el proceso de difusión, adsorción y una reacción de primer orden.

- Existe difusión en el interior de la partícula.
- La adsorción es irreversible.
- A lo largo de toda la partícula, los sitios activos ofrecen la misma posibilidad de adsorción al adsorbato, es decir, la química de superficie es uniforme en toda la partícula y no se consideran efectos debido a la desactivación de la partícula.
- Las partículas suspendidas son esféricas y uniformes en tamaño y homogéneas en su interior.
- La velocidad de las partículas es la misma que la velocidad del líquido.
- Se considera un sistema isotérmico.

3.1 Descripción del problema

El presente trabajo reporta un análisis de un sistema multifásico que contiene un fluido perfectamente mezclado y partículas porosas suspendidas donde se lleva a cabo el proceso de adsorción y reacción de primer orden. El análisis se realiza por medio de un modelado que utiliza ecuaciones obtenidas por el Método del Promedio Volumétrico que describen el transporte de masa en cada fase del sistema, además el análisis puede realizarse a diferentes sistemas modificando los parámetros que describen el comportamiento de un Tanque Agitado Continuo o un Reactor tipo Batch.

Se analizan los dos modelos con la finalidad de conocer los efectos interfaciales que se llevan a cabo entre el fluido y las partículas considerando ambos procesos. El método del promedio volumétrico aplicado en los sistemas multifásicos propuestos modifica la condición de frontera tradicional al obtener dos coeficientes interfaciales conocidos como coeficientes de salto, la condición de frontera obtenida considera la discontinuidad del flux por el coeficiente de salto de reacción y el coeficiente de salto de adsorción.

El modelo formado por las ecuaciones promedio obtenidas, permite medir el impacto de los coeficientes de salto sobre el comportamiento del perfil de las concentraciones del fluido y de la partícula en comparación con el comportamiento de los perfiles de concentración obtenidos utilizando una condición de frontera tradicional.

3.1.1 Problema utilizando la condición de frontera con salto

El sistema multifásico a analizar contiene una fase sólida dispersa γ que corresponde a las partículas porosas y una fase fluida μ , las ecuaciones que describen el problema se citan a continuación.

A través del desarrollo del suavizado espacial y utilizando las condiciones de escala del método de promedio volumétrico se obtiene la ecuación de la concentración en la partícula que describe el fenómeno de adsorción y reacción de primer orden. La Ecuación (3.1) es desarrollada en coordenadas esféricas tal como se observa en la Figura 3.1 que describe el fenómeno de estudio, además se considera que la concentración promedio intrínseca de la fase sólida tiene solo dependencia radial, es decir, $\langle C_\gamma \rangle^\gamma(r, \Theta, \Phi, t) = \langle C_\gamma \rangle^\gamma(r, t)$:

$$\varepsilon_\gamma \left(1 + \frac{a_v K_{eq}}{\varepsilon_\gamma} \right) \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \varepsilon_\gamma D_{ef} \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial r} \right) - a_v k \langle C_\gamma \rangle^\gamma \quad (3.1)$$

En donde: $\langle C_\gamma \rangle^\gamma$ es la concentración promedio intrínseca de la fase sólida, ε_γ corresponde a la fracción hueca de la partícula o la fracción que ocupa el fluido dentro de la partícula, el término a_v corresponde a la razón entre el área superficial por unidad de volumen de la partícula, K_{eq} es la constante de adsorción, su valor se relaciona directamente con los sitios ocupados, D_{ef} corresponde a la difusividad efectiva, representativo del medio en el que se difunde por considerar la tortuosidad de la trayectoria de difusión y la fracción real del área disponible a la difusión, k es la constante de reacción de primer orden, el término $a_v k$ es la constante efectiva de la reacción de primer orden. Por lo tanto el primer término de la ecuación es el término acumulativo de la concentración en el tiempo que se ve afectado por la adsorción, dicho término esta igualado a la diferencia entre el segundo término que representa la difusión en el interior de la partícula y el tercer término que hace referencia a la reacción de primer orden.

La ecuación que describe el comportamiento en el tanque agitado considerando la resistencia de transferencia de masa externa, es:

$$\varepsilon_\mu \frac{d \langle C_\mu \rangle^\mu}{dt} = \frac{1}{\tau_r} (C_{in}(t) - \langle C_\mu \rangle^\mu) + \frac{A_{fp}}{\mathcal{V}} k_f (\langle C_\gamma \rangle^\gamma |_{r=r_p} - \langle C_\mu \rangle^\mu) \quad (3.2)$$

Donde: $\langle C_\gamma \rangle^\gamma$ corresponde a la concentración promedio intrínseca de la fase líquida, \mathcal{V} es el volumen ocupado por las partículas y el fluido, ε_μ es la fracción del volumen del tanque (V) ocupada por el fluido, τ_r corresponde al tiempo de residencia del tanque agitado, es decir, el tiempo que el fluido permanece dentro del tanque, A_{fp} es el área interfacial del fluido-sólido, k_f es el coeficiente de transferencia de masa, un parámetro que agrupa todos los efectos convectivos y difusivos y directamente relacionado con la velocidad de transporte. El término C_{in} se refiere a la concentración de entrada de los reactantes al tanque, la cual puede ser una función arbitraria del tiempo.

La ecuación en el fluido representa el termino acumulativo de la concentración en el tiempo igualado a la suma de intercambio de la concentración de entrada y la concentración

del tanque y el intercambio de la concentración en el fluido con la concentración de la partícula en su superficie.

La condición de frontera permite acoplar la ecuación de la partícula y la ecuación del tanque, se encuentra en la interfase entre el fluido y la superficie de la partícula, se obtiene para la concentración promedio intrínseca de la partícula $\langle C_\gamma \rangle^\gamma(r, \Theta, \Phi, t) = \langle C_\gamma \rangle^\gamma(r, t)$, en $r = r_p$ donde r_p es el radio de la partícula esférica.

En $r = r_p$

$$-\varepsilon_\gamma D_{ef} \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial r} = k_f (\langle C_\gamma \rangle^\gamma|_{r=r_p} - \langle C_\mu \rangle^\mu) - k_{eff}^{rx} \langle C_\gamma \rangle^\gamma|_{r=r_p} - k_{eff}^{ads} \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} \Big|_{r=r_p} \quad (3.3)$$

En la Ecuación (3.3), la discontinuidad del flux se describe con los términos:

$$-k_{eff}^{rx} \langle C_\gamma \rangle^\gamma|_{r=r_p} - k_{eff}^{ads} \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} \Big|_{r=r_p} = D \quad (3.4)$$

Donde el término D corresponde a la discontinuidad. La Ecuación (3.3) es la condición de frontera que considera la ecuación de salto por incluir los términos que consideran la discontinuidad del flux. El término k_{eff}^{rx} es el coeficiente de velocidad de reacción efectiva en la inter-región, de forma análoga, el término k_{eff}^{ads} es el coeficiente de velocidad de adsorción efectiva en la inter-región, estos coeficientes consideran las propiedades de cada sistema multifásico de forma particular por tomar en cuenta las propiedades de la fase que lo integran. La ecuación en la frontera describe lo que ocurre en la interfase y sus efectos son la finalidad de nuestro estudio. La Ecuación (3.3) describe que la concentración que llega a la superficie de la partícula y después entrará a la misma por difusión, corresponde al resultado del intercambio que se lleva a cabo entre la concentración del fluido y la partícula menos el consumo del reactivo por la reacción de primer orden que se lleva a cabo en la interfase y la adsorción interfacial.

En el centro de la partícula la concentración se encuentra restringida por la física, es decir, no hay existencia de flux de masa:

$$\langle C_\gamma \rangle^\gamma = \text{finito} \quad (3.5)$$

Condiciones iniciales, $t = 0$:

$$\langle C_\mu \rangle^\mu = C_{\mu 0} \quad (3.6)$$

$$\langle C_\gamma \rangle^\gamma = C_{\gamma 0} \quad \text{para } 0 \leq r \leq r_p \quad (3.7)$$

El término $C_{\mu 0}$ es la concentración inicial en el fluido y $C_{\gamma 0}$ es la concentración inicial en toda la partícula, es decir, desde el centro donde $r = 0$ hasta la superficie donde $r = r_p$, ambos términos no homogéneos pueden adquirir valores diferentes de cero.

3.1.2 Problema adimensional para la condición de frontera con salto

El desarrollo de la adimensionalización de cada una de las ecuaciones puede consultarse con detalle en el **Apéndice A**.

Comportamiento en la partícula porosa:

$$\left(1 + \frac{a_v K_{eq}}{\varepsilon_\gamma}\right) \frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 U_p \quad (3.8)$$

Con el fin de facilitar el manejo de términos, se define:

$$\alpha = \left(1 + \frac{a_v K_{eq}}{\varepsilon_\gamma}\right) \quad (3.9)$$

Por lo tanto, la Ecuación (3.8) toma la forma:

$$\alpha \frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 U_p \quad (3.10)$$

Ecuación en el fluido:

$$\frac{dU_f}{d\tau} = \psi_{in}(U_{in} - U_f) + \psi_p(U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (3.11)$$

Condición de frontera que considera la discontinuidad del flux de masa en la superficie de la partícula donde $\xi = 1$:

$$-\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = \text{Bi}(U_p|_{\xi=1} - U_f) - \phi_1 U_P - \phi_2 \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \quad (3.12)$$

Condiciones iniciales para $\tau = 0$:

$$U_f = U_{f0} \quad (3.13)$$

$$U_p = U_{p0} \quad \text{para } 0 \leq \xi \leq 1 \quad (3.14)$$

El término U_{f0} es la concentración inicial en el fluido y U_{p0} es la concentración inicial en toda la partícula, es decir, desde el centro donde $\xi = 0$ hasta la superficie donde $\xi = 1$, ambos términos que pueden adquirir valores diferentes de cero.

Problema utilizando la condición de frontera tradicional

El problema a resolver utilizando la condición de frontera tradicional sobre la concentración de salida del tanque es muy similar al problema anterior, el sistema de ecuaciones es el mismo a utilizar excepto por la condición de frontera que se obtiene por la condición de salto al igualar cero los términos referentes a la adsorción y reacción, es decir los coeficientes de salto, obteniendo:

Condición de frontera tradicional para $r = r_p$:

$$-\varepsilon_\gamma D_{ef} \frac{d\langle C_\gamma \rangle^\gamma}{dr} = k_f (\langle C_\gamma \rangle^\gamma|_{r=r_p} - \langle C_\mu \rangle^\mu) \quad (3.15)$$

La ecuación indica que toda la concentración que llega a la superficie de la partícula se difunde en su interior, es decir, existe una continuidad en el flux.

Considerando el caso de las variables adimensionales aplicando a la condición de frontera tradicional dada se obtiene para $\xi = 1$:

$$-\frac{dU_p}{d\xi} = \text{Bi}(U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (3.16)$$

3.2 Justificación

En el proyecto se genera una ampliación del conocimiento en la comprensión de los fenómenos interfaciales al evaluar el error producido por la carencia del uso de los coeficientes de salto resaltando la importancia del uso de la condición de frontera no tradicional en un sistema multifásico.

3.3 Hipótesis

El uso de condiciones de salto en el modelado de transferencia de masa entre un medio poroso y un fluido homogéneo puede cambiar el valor de los coeficientes efectivos.

Capítulo 4

OBJETIVOS

4.1 Objetivo General

Evaluar el efecto de los coeficientes de salto sobre la concentración de la partícula en la superficie y la concentración de salida de un sistema multifásico que contenga partículas sólidas porosas dispersas en un fluido perfectamente mezclado. En las partículas se considera el fenómeno de adsorción y reacción de primer orden, además se considera las resistencias a la transferencia de masa tanto interna como externa utilizando diferentes funciones de concentración de entrada en estado dinámico.

4.2 Objetivos Particulares

- Obtener una solución por el Método de Expansión en Series de Fourier de las ecuaciones que describen el sistema multifásico considerando el efecto de adsorción y la condición de salto. En la solución se debe obtener una expresión para la concentración del fluido en función del tiempo y para la concentración de la partícula en función del tiempo y la posición, identificando en cada una de las expresiones los efectos producidos por la concentración de entrada, las condiciones de entrada y el efecto por la condición de frontera.

- Utilizando las expresiones obtenidas para ambas concentraciones, elaborar un programa que permita modelar el sistema multifásico al incorporar los valores para los diferentes parámetros considerando el coeficiente de adsorción y los coeficientes de salto y utilizando diferentes funciones de entrada.
- Utilizando el mismo programa, realizar un comparativo de la solución obtenida por el Método de Expansión en Series de Fourier y la solución analítica aproximada para la concentración del fluido y la partícula.

Capítulo 5

SOLUCIÓN

En el presente capítulo se presenta el desarrollo matemático para la solución de las ecuaciones adimensionales, debido a su extensión, el desarrollo detallado de la solución se encuentra en el **Apéndice B**. El resultado obtenido por el Método de Separación de Variables es el mismo al utilizar el Método de la Transformada de Laplace, dicho desarrollo se encuentra en el **Apéndice C**, posteriormente se comenta la comprobación de que ambos métodos ofrecen la misma solución, y se realiza una comparación algebraica de los coeficientes, demostrando que para un problema lineal existe una sola solución, la demostración de la igualdad de soluciones se encuentra desarrollada en el **Apéndice D**.

Se resolverá la Ecuación (5.1) y la Ecuación (5.2) por el método de separación de variables, y se aplicarán la condición de frontera y las condiciones iniciales dadas por las Ecuaciones (5.3)-(5.5).

La Ecuación (5.1) y la Ecuación (5.2) describen el comportamiento de la concentración en la partícula y la concentración del fluido respectivamente:

$$\alpha \frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 U_p \quad (5.1)$$

$$\frac{dU_f}{d\tau} = \psi_{in}(\mathbf{U}_{in}(\tau) - U_f) + \psi_p(U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (5.2)$$

Aplicando la condición de salto, se obtiene una condición de frontera no tradicional en la superficie de la partícula donde $\xi = 1$:

$$-\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = Bi(U_p|_{\xi=1} - U_f) - \phi_1 U_p|_{\xi=1} - \phi_2 \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \quad (5.3)$$

Las condiciones iniciales para la concentración del fluido y la partícula en $\tau = 0$ son:

$$U_f = \mathbf{U}_{f0} \quad (5.4)$$

$$U_p = \mathbf{U}_{p0} \quad \text{para } 0 \leq \xi \leq 1 \quad (5.5)$$

Los términos no homogéneos son identificados con negritas: el primer término no homogéneo es $U_{in}(\tau)$ y se refiere a la función de entrada del sistema, el segundo y el tercer término son U_{f0} y U_{p0} que se refieren a la condición inicial del fluido y la partícula respectivamente.

5.1 Método de Solución

La siguiente solución se obtiene utilizando el Método de Separación de Variables, este método es conocido también como Método de Soluciones Estacionarias, la finalidad es obtener suficientes condiciones de frontera homogéneas, posteriormente se obtiene un problema asociado de Sturm - Liouville cuya solución tiene un número infinito de soluciones asociados a los valores propios, y se aplica el Método de Expansión en Series de Fourier para encontrar A_k que multiplican a funciones periódicas.

Problema I: Problema completo

El problema completo se conforma de las Ecuaciones antes vistas (5.1) a (5.5).

El Problema Homogéneo asociado al Problema Completo es:

Para el transporte en la partícula porosa:

$$\alpha \frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 U_p \quad (5.6)$$

Ecuación en el fluido donde $U_{in}(\tau) = 0$:

$$\frac{dU_f}{d\tau} = -\psi_{in} U_f + \psi_p (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (5.7)$$

Condición interfacial considerando el salto del flux, en $\xi = 1$

$$-\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = \text{Bi}(U_p|_{\xi=1} - U_f) - \phi_1 U_p - \phi_2 \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \quad (5.8)$$

En base a la homogeneidad de las ecuaciones diferenciales y la condición de frontera, se considera el Método de Separación de Variables:

$$U_p(\xi, \tau) = F(\xi)G(\tau) \quad (5.9)$$

$$U_f(\tau) = H(\tau) \quad (5.10)$$

La substitución de las Ecuaciones (5.9) y (5.10) en la Ecuación (5.6) a la Ecuación (5.8) permite obtener:

En la partícula porosa:

$$\alpha F \frac{\partial G}{\partial \tau} = G \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial F}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 F G \quad (5.11)$$

En el fluido:

$$\frac{dH}{d\tau} = -\psi_{in}H + \psi_p(F|_{\xi=1} - H) \quad (5.12)$$

Para la condición interfacial considerando el salto del flux, en $\xi = 1$

$$-\frac{\partial F}{\partial \xi} = \text{Bi}(F|_{\xi=1} - H) - \phi_1 F - \phi_2 \frac{\partial G}{\partial \tau} \quad (5.13)$$

Por tratarse de un problema de separación de variables donde los términos son funciones de diferente variable independiente, la igualdad sólo se puede satisfacer si los dos términos son igual a la misma constante, en este caso la constante esta definida como $-\lambda^2$, por lo tanto, se puede encontrar para la Ecuación (5.11):

$$\alpha \frac{1}{G} \frac{dG}{d\tau} + \Phi^2 = \frac{1}{F} \frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{dF}{d\xi} \right) = -\lambda^2 \quad (5.14)$$

La constante $-\lambda^2$ ha sido definida negativa para no obtener valores de λ negativos. Para la función F , separando las contribuciones y despejando α , se obtiene para ξ :

$$\frac{1}{f_n} \frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{df_n}{d\xi} \right) = -\lambda_n^2 \quad (5.15)$$

Para la contribución temporal de la Ecuación (5.11):

$$\frac{dG}{d\tau} = -\frac{\lambda_n^2}{\alpha} - \frac{\Phi^2}{\alpha} = -\mu_n^2 - \phi^2 = -(\mu_n^2 + \phi^2) \quad (5.16)$$

Donde se obtiene para $G(\tau)$:

$$G(\tau) = G_0 \exp\left[\left(-\frac{\Phi + \lambda_n}{\alpha}\right)\tau\right]$$

En la expresión anterior se han utilizando las igualdades:

$$\mu_n^2 = \frac{\lambda_n^2}{\alpha} \quad (5.17)$$

$$\phi^2 = \frac{\Phi^2}{\alpha} \quad (5.18)$$

Para la ecuación del fluido se desarrolla la Ecuación (5.12) y se sustituye la contribución temporal de la Ecuación (5.16), obteniendo la expresión:

$$-(\phi^2 + \mu_n^2) = \frac{1}{h_n} [-\psi_{in} h_n + \psi_p (f_n|_{\xi=1} - h_n)] \quad (5.19)$$

Para la Ecuación (5.13) que hace referencia a la condición interfacial considerando el salto del flux, se obtiene agrupando términos por su factor común f_n y sustituyendo la contribución temporal de la Ecuación (5.16), la siguiente expresión:

$$-\left. \frac{\partial f_n}{\partial \xi} \right|_{\xi=1} = f_n|_{\xi=1} (\text{Bi} - S_n) - \text{Bi} h_n \quad (5.20)$$

Donde se ha introducido la siguiente expresión:

$$S_n = \phi_1 - \phi_2 (\phi^2 + \mu_n^2) \quad (5.21)$$

Las Ecuaciones (5.15), (5.19) y (5.20) definen un problema de Sturm Liouville, la solución para la Ecuación (5.11) sujeta a la condición de continuidad en el centro de la partícula es:

$$f_n(\xi) = \frac{\text{sen}(\lambda_n \xi)}{\xi} \quad (5.22)$$

La relación de $h(\tau)$ con $f(\xi, \tau)$ se obtiene al substituir la Ecuación (5.22) en $\xi = 1$ y la contribución del tiempo, obteniendo para la ecuación en el fluido:

$$h_n = \frac{\psi_p f_n(1)}{\psi_p - A_n} \quad (5.23)$$

Donde A_n es:

$$A_n = (\phi^2 + \mu_n^2) - \psi_{in} \quad (5.24)$$

Los valores propios, es decir los valores para λ_n se obtienen al sustituir las Ecuaciones (5.22) y (5.23) en la ecuación de frontera, obteniendo:

$$\frac{\tan \lambda_n}{\lambda_n} = \frac{\psi_p - A_n}{A_n \text{Bi} + (\psi_p - A_n)(1 + S_n)} \quad \text{para } n = 1, 2, 3, \dots \infty \quad (5.25)$$

La ecuación para obtener los valores propios se satisface si:

$$\lambda_n = n\Pi \quad \text{para } n = 1, 2, 3 \dots \infty \quad (5.26)$$

Existen n valores propios para λ , donde el valor $n = 0$ es también un valor propio que da lugar a la solución trivial.

La condición de ortogonalidad es:

$$\alpha \int_0^1 \xi^2 f_n f_m d\xi + \frac{\text{Bi}}{\psi_p} h_m h_n - \phi_2 f_n(1) f_m(1) = 0 \quad \text{para } n \neq m \quad (5.27)$$

De acuerdo a la propuesta hecha para las Ecuaciones (5.9) y (5.10) se obtiene para la solución de las Ecuaciones (5.6) a (5.8), donde la solución general es la suma de todas las soluciones particulares:

$$U_p(\xi, \tau) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n(\tau) f_n(\xi) \quad (5.28)$$

$$U_f(\tau) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n(\tau)h_n \quad (5.29)$$

Haciendo uso de la Identidad de Green:

$$\int_0^1 \xi^2 \left(f_m \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - U_p \frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{df_m}{d\xi} \right) \right) d\xi = \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \Big|_{\xi=1} f_m(1) - U_p \Big|_{\xi=1} f'_m(1) \quad (5.30)$$

Utilizando las Ecuaciones (5.6) y (5.15) y sustituyendo en la Ecuación (5.30):

$$\int_0^1 \xi^2 \left[f_m \left(\alpha \frac{\partial U_p}{\partial \tau} + \Phi^2 U_p \right) + U_p \lambda_m^2 f_m \right] d\xi = \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \Big|_{\xi=1} f_m(1) - U_p \Big|_{\xi=1} f'_m(1) \quad (5.31)$$

Sacando α de la integral:

$$\alpha \int_0^1 \xi^2 \left[f_m \left(\frac{\partial U_p}{\partial \tau} + \phi^2 U_p \right) + U_p \mu_m^2 f_m \right] d\xi = \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \Big|_{\xi=1} f_m(1) - U_p \Big|_{\xi=1} f'_m(1) \quad (5.32)$$

Usando las Ecuaciones (5.8) y (5.20) para la expresión anterior y agrupado términos, se obtiene:

$$\begin{aligned} \alpha \int_0^1 \xi^2 \left[f_m \left(\frac{\partial U_p}{\partial \tau} + (\phi^2 + \mu^2) U_p \right) \right] d\xi &= U_p \Big|_{\xi=1} [-S_m f_m(1) - \text{Bi} h_m] \\ &\quad - f_m(1) \left[-\text{Bi} U_f - \phi_1 U_p \Big|_{\xi=1} - \phi_2 \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \Big|_{\xi=1} \right] \end{aligned} \quad (5.33)$$

Despejando de la Ecuación (5.2) se puede obtener la siguiente expresión:

$$\psi_p U_p|_{\xi=1} = \frac{dU_f}{d\tau} + \psi_p U_f - \psi_{in}(U_{in}(\tau) - U_f) \quad (5.34)$$

Es importante señalar que en este paso se ha introducido el término no homogéneo: $U_{in}(\tau)$ proveniente de la Ecuación (5.7), que expresa el transporte de masa en el tanque agitado. Sustituyendo el término $U_p|_{\xi=1}$ proveniente del despeje de la ecuación anterior:

$$\begin{aligned} MD &= -S_m f_m(1) U_p|_{\xi=1} - \text{Bi} h_m U_p|_{\xi=1} + f_m(1) \left[\text{Bi} U_f + \phi_1 U_p|_{\xi=1} + \phi_2 \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \Big|_{\xi=1} \right] \\ &\quad - S_m f_m(1) U_p|_{\xi=1} - \frac{\text{Bi} h_m}{\psi_p} \left[\frac{\partial U_f}{\partial \tau} + \psi_p U_f - \psi_{in}(U_{in}(\tau) - U_f) \right] \\ &\quad + f_m(1) \left[\text{Bi} U_f + \phi_1 U_p|_{\xi=1} + \phi_2 \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \Big|_{\xi=1} \right] \end{aligned} \quad (5.35)$$

Trabajando sólo con algunos términos de la Ecuación (5.35), utilizando la Ecuación (5.22) en $\xi = 1$ y agrupando términos, es posible escribir la ecuación anterior de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} MD &= + \frac{\text{Bi} h_m}{\psi_p} \psi_{in} U_{in}(\tau) - \frac{\text{Bi} h_m}{\psi_p} \left[\frac{dU_f}{d\tau} + (\phi^2 + \mu_m^2) U_f \right] \\ &\quad - S_m f_m(1) U_p|_{\xi=1} + f_m(1) \left[\phi_1 U_p|_{\xi=1} + \phi_2 \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \Big|_{\xi=1} \right] \end{aligned} \quad (5.36)$$

Utilizando nuevamente la Ecuación (5.21), eliminando términos, y agrupando por el factor común: $\phi_2 f_m(1)$, la ecuación anterior se reduce a la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} MD &= \frac{\text{Bi} h_m}{\psi_p} \psi_{in} U_{in}(\tau) - \frac{\text{Bi} h_m}{\psi_p} \left[\frac{dU_f}{d\tau} + (\phi^2 + \mu_n^2) U_f \right] \\ &\quad + \phi_2 f_m(1) \left[\frac{\partial U_p}{\partial \tau} \Big|_{\xi=1} + (\phi^2 + \mu_n^2) U_p|_{\xi=1} \right] \end{aligned} \quad (5.37)$$

Por tal motivo, la Ecuación (B.29) se puede escribir como:

$$\begin{aligned} \alpha \int_0^1 \xi^2 \left[f_m \left(\frac{\partial U_p}{\partial \tau} + (\phi^2 + \mu_n^2) U_p \right) \right] d\xi &= \frac{\text{Bi}h_m}{\psi_p} \psi_{in} U_{in}(\tau) \\ &- \frac{\text{Bi}h_m}{\psi_p} \left[\frac{dU_f}{d\tau} + (\phi^2 + \mu_n^2) U_f \right] \\ &+ \phi_2 f_m(1) \left[\frac{\partial U_p}{\partial \tau} \Big|_{\xi=1} + (\phi^2 + \mu_n^2) U_p \Big|_{\xi=1} \right] \end{aligned} \quad (5.38)$$

Usando las representaciones de $U_p(\xi, \tau)$ y $U_f(\tau)$ dadas por las Ecuaciones (5.28) y (5.29):

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \alpha \int_0^1 \xi^2 \left[f_m f_n \left(\frac{dC_n}{d\tau} + (\phi^2 + \mu_n^2) C_n \right) \right] d\xi &= \frac{\text{Bi}h_m}{\psi_p} \psi_{in} U_{in}(\tau) \\ &- \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Bi}h_m h_n}{\psi_p} \left[\frac{dC_n}{d\tau} + (\phi^2 + \mu_n^2) C_n \right] \\ &+ \phi_2 \sum_{n=1}^{\infty} f_m(1) f_n(1) \left[\frac{dC_n}{d\tau} + (\phi^2 + \mu_n^2) C_n \right] \end{aligned}$$

Ordenando en forma tal que pueda tomarse ventaja de la condición de ortogonalidad y utilizando la condición de ortogonalidad dada por la Ecuación (5.27):

$$\frac{\text{Bi}h_n}{\psi_p} \psi_{in} U_{in}(\tau) = \left(\frac{dC_n}{d\tau} + (\phi^2 + \mu_n^2) C_n \right) \left(\alpha \int_0^1 \xi^2 f_n^2 d\xi + \frac{\text{Bi}h_n^2}{\psi_p} - \phi_2 f_n^2(1) \right) \quad (5.39)$$

La solución de esta ecuación diferencial para $C_n(\tau)$ es:

$$C_n(\tau) = \exp \left[-(\phi^2 + \mu_n^2) \tau \right] \left(C_n(0) \frac{\text{Bi}\psi_{in}}{\psi_p} K_n \int_0^\tau U_{in}(\varsigma) \exp[-(\phi^2 + \mu_n^2) \varsigma] d\varsigma \right) \quad (5.40)$$

Donde se ha utilizado la siguiente igualdad:

$$K_n = \frac{h_n}{\alpha \int_0^1 \xi^2 f_n^2 d\xi + \frac{\text{Bi} h_n^2}{\psi_p} - \phi_2 f_n^2(1)} \quad (5.41)$$

La condición inicial $C_n(0)$ se obtiene de las condiciones iniciales de U_p y U_f .

$$C_n(0) = \frac{\alpha U_{p0} \int_0^1 \xi^2 f_n(\xi) d\xi + \frac{\text{Bi}}{\psi_p} U_{p0} h_n - U_{p0} \phi_2 f_n(1)}{\alpha \int_0^1 \xi^2 f_n^2(\xi) d\xi + \frac{\text{Bi}}{\psi_p} h_n^2 - \phi_2 f_n^2(1)} \quad (5.42)$$

En el Apéndice D se observa que la Ecuación (5.40) puede ser escrita de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} C_n(\tau) = & \frac{2\psi_p}{D_n h_n} \exp[-(\phi^2 + \mu_n^2)\tau] \left(U_{f0} \text{Bi} \lambda_n^2 - \alpha U_{p0} A_n \text{Bi} \right) \\ & + \frac{2\psi_p}{D_n h_n} \exp[-(\phi^2 + \mu_n^2)\tau] \left(\alpha U_{p0} (\psi_p - A_n) [S_n + \phi_2 \lambda_n^2] \right) \\ & + \frac{2\psi_p}{D_n h_n} \exp[-(\phi^2 + \mu_n^2)\tau] \left(\text{Bi} \psi_{in} \lambda_n^2 \int_0^\tau U_{in}(\varsigma) \exp[(\phi^2 + \mu_n^2)\varsigma] d\varsigma \right) \end{aligned} \quad (5.43)$$

La ecuación anterior podemos simplificarla de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} C_n(\tau) = & \frac{2\psi_p}{D_n h_n} \exp[-(\phi^2 + \mu_n^2)\tau] \left[\text{Bi} (U_{f0} \lambda_n^2 - \alpha U_{p0} A_n) \right. \\ & \left. + U_{p0} (\psi_p - A_n) (\alpha \phi_1 - \phi_2 \Phi^2) \right] + \frac{2\psi_p}{D_n h_n} \text{Bi} \psi_{in} \lambda_n^2 I_{in}(\tau) \end{aligned} \quad (5.44)$$

Esto es posible debido a la siguiente relación:

$$\alpha S_n + \phi_2 \lambda_n^2 = \alpha \phi_1 - \phi_2 (\alpha \Phi^2 + \alpha \mu_n^2) + \phi_2 \lambda_n^2 = \alpha \phi_1 - \phi_2 \Phi^2 \quad (5.45)$$

Redefiniendo para la Ecuación (5.21):

$$S_n = \phi_1 - \phi_2 \left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha} \right) \quad (5.46)$$

Además para la Ecuación (5.24) se obtiene:

$$A_n = \left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha} \right) - \psi_{in} \quad (5.47)$$

También se introdujo para la condición de entrada:

$$I_{in}(\tau) = \exp \left[- \left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha} \right) \tau \right] \int_0^\tau U_{in}(\varsigma) \exp \left[+ \left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha} \right) \varsigma \right] d\varsigma \quad (5.48)$$

La concentración en el líquido que está dada por la Ecuación (5.29) e identificando las contribuciones en la ecuación:

$$\begin{aligned}
U_f(\tau) = & \underbrace{2\psi_p \text{Bi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(U_{f0}\lambda_n^2 - \alpha U_{p0}A_n)}{D_n} \exp\left[-\left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha}\right)\tau\right]}_{\text{Efecto de las condiciones iniciales}} \\
& - \underbrace{2\psi_p U_{p0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\alpha\phi_1 - \phi_2\Phi^2)(\psi_p - A_n)}{D_n} \exp\left[-\left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha}\right)\tau\right]}_{\text{Efecto de la condición de frontera}} \\
& + \underbrace{2\text{Bi}\psi_{in}\psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda_n^2}{D_n} I_{in}(\tau)}_{\text{Efecto de la condición de entrada}}
\end{aligned} \tag{5.49}$$

Ahora es posible obtener la concentración para la partícula a partir de las Ecuaciones (5.28), (5.45) y (5.48). Identificando las mismas contribuciones que en la Ecuación (5.49):

$$\begin{aligned}
U_p(\xi, \tau) = & \underbrace{2\text{Bi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(U_{f0}\lambda_n^2 - \alpha U_{p0}A_n)(\psi_p - A_n)}{D_n} \frac{\text{sen}(\lambda_n\xi)}{\xi \text{sen}\lambda_n} \exp\left[-\left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha}\right)\tau\right]}_{\text{Efecto de las condiciones iniciales}} \\
& + \underbrace{2U_{p0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\alpha\phi_1 - \phi_2\Phi^2)(\psi_p - A_n)^2}{D_n} \frac{\text{sen}(\lambda_n\xi)}{\xi \text{sen}\lambda_n} \exp\left[-\left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha}\right)\tau\right]}_{\text{Efecto de la condición de frontera}} \\
& + \underbrace{2\text{Bi}\psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda_n^2(\psi_p - A_n)}{D_n} \frac{\text{sen}(\lambda_n\xi)}{\xi \text{sen}\lambda_n} I_{in}(\tau)}_{\text{Efecto de la condición de entrada}}
\end{aligned} \tag{5.50}$$

El sistema esquematizado en la Figura 3.1 es representado por las Ecuaciones (5.49) y (5.50) que describen el comportamiento de la concentración del fluido $U_f(\tau)$ y la concentración en la partícula $U_p(\xi, \tau)$ respectivamente, para la concentración en la partícula es posible elegir una posición en el radio, al ser los parámetros adimensionales, se considera $0 \leq \xi \leq 1$ donde ξ es la posición en el radio de la partícula para su estudio en un intervalo de tiempo. Es posible también estudiar el comportamiento de la concentración dentro de la partícula eligiendo un valor en el tiempo.

Capítulo 6

RESULTADOS

En el capítulo anterior, se obtuvo como resultado final una expresión para la concentración del fluido a la salida del sistema multifásico, U_f y la concentración de la partícula, U_p . El resultado obtenido nos permite considerar una función de entrada, U_{in} , y además manejar una condición inicial para la partícula y el fluido donde: $U_{p0} \neq 0$ y $U_{f0} \neq 0$; es decir, el resultado obtenido considera tres términos no homogéneos de gran importancia que permiten definir el sistema multifásico.

En el presente capítulo se comprueba que al hacer la simplificación del problema obtenido para un caso particular como el reportado en el artículo de Marroquín y col., 2002 realizado por el Método de la Transformada de Laplace se obtienen los mismos resultados por Separación de Variables. En el Capítulo de Resultados primeramente se logra la reproducción de los resultados reportados en el artículo Marroquín y col., 2002, posteriormente se evalúa el efecto del coeficiente de adsorción y después se analiza de forma individual el efecto de los coeficientes de salto; finalmente se estudia el perfil de una concentración aproximada para el fluido.

En los resultados, sólo es de interés analizar el comportamiento denotado en la expresión para U_f , concentración en el fluido en el sistema multifásico, debido a que es la concentración que presenta mayor facilidad para su medición en un laboratorio, sin embargo, se reportan los resultados obtenidos para la concentración en la partícula, U_p debido a que es de nuestro interés conocer como afectan los coeficientes de salto a nuestro sistema y los cambios que se

producen en el perfil de U_p ofrecen información relevante.

6.1 Evaluación de la solución

La expresión completa para la concentración del fluido, U_f obtenida por la solución analítica con el Método de Series de Fourier es la siguiente:

$$\begin{aligned}
 U_f(\tau) = & 2\psi_p \text{Bi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{U_{f0}\lambda_n^2 - \alpha A_n U_{p0}}{D_n} \exp\left[-\frac{(\Phi^2 + \lambda_n^2)}{\alpha}\tau\right] \\
 & - 2\psi_p U_{p0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\psi_p - A_n)[\alpha\phi_1 - \phi_2\Phi^2]}{D_n} \exp\left[-\frac{(\Phi^2 + \lambda_n^2)}{\alpha}\tau\right] \\
 & + 2\psi_p \psi_{in} \text{Bi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda_n^2}{D_n} I_{in}(\tau)
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

Concentración en la partícula:

$$\begin{aligned}
 U_p(\xi, \tau) = & 2\text{Bi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(U_{f0}\lambda_n^2 - \alpha U_{p0} A_n)(\psi_p - A_n)}{D_n} \frac{\text{sen}(\lambda_n \xi)}{\xi \text{sen} \lambda_n} \exp\left[-\left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha}\right)\tau\right] \\
 & + 2U_{p0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\alpha\phi_1 - \phi_2\Phi^2)(\psi_p - A_n)^2}{D_n} \frac{\text{sen}(\lambda_n \xi)}{\xi \text{sen} \lambda_n} \exp\left[-\left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha}\right)\tau\right] \\
 & + 2\text{Bi} \psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda_n^2 (\psi_p - A_n)}{D_n} \frac{\text{sen}(\lambda_n \xi)}{\xi \text{sen} \lambda_n} I_{in}(\tau)
 \end{aligned} \tag{6.2}$$

En el capítulo anterior, en las Ecuaciones (5.49) y (5.50) que hacen referencia a U_f y U_p respectivamente, se identificaron contribuciones de las condiciones iniciales, de la condición de frontera y de la condición de entrada, ahora es necesario entender los diferentes parámetros que modifican el perfil de ambas concentraciones.

Los parámetros que están asociados directamente con el fluido son:

$$\psi_p = \frac{A_{fp}k_f r_p^2}{\varepsilon_\mu D_{ef} V}, \quad \psi_{in} = \frac{r_p^2}{\varepsilon_\mu D_{ef} \tau}$$

Parámetros asociados con el fenómeno en la partícula:

$$\Phi^2 = \frac{a_v k r_p}{\varepsilon_\gamma D_{ef}}, \quad \alpha = 1 + \frac{a_v K_{eq}}{\varepsilon_\gamma}$$

Parámetros asociados con la condición de salto:

$$Bi = \frac{k_f r_p}{D_{ef}}, \quad \phi_1 = \frac{k_{eff}^* r_p}{\varepsilon_\gamma D_{ef}}, \quad \phi_2 = \frac{k_{eff}^{ads}}{\varepsilon_\gamma r_p}$$

6.2 Solución utilizando la condición de frontera tradicional

Para reproducir los resultados reportados en el artículo de Marroquín y col., 2002, donde se utiliza una condición de frontera tradicional para el análisis del sistema multifásico, es necesario simplificar la solución completa obtenida por Expansión en Series de Fourier considerando los siguientes puntos:

- Despreciar la existencia de adsorción debido a que en el artículo de Marroquín y col., 2002 no es considerada, es decir, $\alpha = 1$.
- Utilizar una condición de frontera tradicional, es decir, el valor de los coeficientes de salto es: $\phi_1 = \phi_2 = 0$.

En las siguientes expresiones es posible observar una equivalencia entre ambos trabajos:

- La expresión simplificada para U_f obtenida es:

$$U_f(\tau) = \psi_p \text{Bi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2(U_{f0}\lambda_n^2 - U_{p0}A_n)}{D_n} \exp\left[-\frac{(\Phi^2 + \lambda_n^2)}{\alpha}\tau\right] + \psi_p \psi_{in} \text{Bi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2\lambda_n^2}{D_n} I_{in}(\tau) \quad (6.3)$$

- La expresión simplificada para U_p obtenida es:

$$U_p(\xi, \tau) = 2\text{Bi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(U_{f0}\lambda_n^2 - U_{p0}A_n)(\psi_p - A_n)}{D_n} \frac{\text{sen}(\lambda_n\xi)}{\xi \text{sen}\lambda_n} \exp\left[-\left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha}\right)\tau\right] + 2\text{Bi}\psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda_n^2(\psi_p - A_n)}{D_n} \frac{\text{sen}(\lambda_n\xi)}{\xi \text{sen}\lambda_n} I_{in}(\tau) \quad (6.4)$$

- La expresión simplificada para obtener los valores propios mostrada en el artículo de Marroquín y col., 2002, es $M(s)$:

$$M(s) = \left(-\lambda_n^2 - \Phi^2 + \psi_{in} + \psi_p\right) \cos(\lambda_n) + \left[\left(-\lambda_n^2 - \Phi^2 + \psi_{in}\right)(\text{Bi} - 1) - \psi_p\right] \frac{\text{sen}(\lambda_n)}{\lambda_n} \quad (6.5)$$

- La expresión simplificada para el coeficiente D_n , presente en la solución de U_f .

$$D_n = [A_n(\text{Bi} - 1) + \psi_p][2\lambda_n^2 + A_n\text{Bi}] + \lambda_n^2(A_n - \psi_p)[A_n - \psi_p - 2(\text{Bi} - 1)] \quad (6.6)$$

Donde se ha utilizado la siguiente expresión:

$$S_n = \phi_1 - \phi_2 \left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha}\right) \quad (6.7)$$

Una forma de verificar que los resultados que el programa proporciona para modelar el tanque agitado son correctos, es reproducir los resultados gráficos que se reportan en el artículo de Marroquín y col., 2002 al modificar el Módulo de Thiele y el Número de Biot para diferentes condiciones de entrada, además los resultados deben satisfacer las consideraciones a las soluciones planteadas para tiempos cortos, largos y la fórmula analítica del estado estacionario para la concentración del fluido.

El programa realizado para el modelaje del sistema multifásico se encuentra en el **Apéndice H**.

Obtención de los valores propios:

La expresión que permite encontrar los valores propios es $M(s)$ descrita en la Ecuación (6.5), la cual tiene un comportamiento periódico que define múltiples raíces identificadas con λ_n . El valor de tales raíces depende de los valores de: Bi , ψ_p , ψ_{in} y Φ . En el segundo término de la Ecuación (6.5), aparece la función $\text{Sen}(\lambda)/\lambda$ de comportamiento conocido y se sabe presenta una sola raíz imaginaria. Es de nuestro interés analizar como afecta el factor $+ \left[\left(-\lambda_n^2 - \Phi^2 + \psi_{in} \right) (\text{Bi} - 1) - \psi_p \right]$ a dicha función y la condición que existe para que aparezca la raíz imaginaria.

La raíz imaginaria para la función $\text{Sen}(\lambda)/\lambda$, aparece cuando: $\lambda_n \rightarrow 0$. Haciendo uso del Teorema de L'Hopital:

$$\lim_{\lambda_n \rightarrow 0} \frac{\text{sen}(0)}{0} = \frac{\text{cos}(0)}{1} = 1$$

El resultado anterior permite hacer el desarrollo para la Ecuación (6.5) cuando $\lambda_n \rightarrow 0$ encontrar el valor de $M(s)$ cuando existe una raíz imaginaria.

$$\begin{aligned} M(s) &= (-\Phi^2 + \psi_{in} + \psi_p)(1) + [-\psi_p + (-\Phi^2 + \psi_{in})(\text{Bi} - 1)](1) \\ &= \psi_{in}\text{Bi} - \Phi^2\text{Bi} \\ &= (\psi_{in} - \Phi^2)\text{Bi} \end{aligned}$$

Por lo tanto; existe una raíz imaginaria bajo la siguiente condición: $\Phi^2 > \psi_{in}$.

La raíz imaginaria se identifica con la letra μ . Para su obtención, se utiliza una ecuación equivalente de $M(s)$.

$$M(s) = (\mu^2 - \Phi^2 + \psi_{in} + \psi_p) \cosh(\mu) + [-\psi_p + (\mu^2 - \Phi^2)(\text{Bi} - 1)] \frac{\text{senh}(\mu)}{\mu} \quad (6.8)$$

La expresión final de U_p para la raíz imaginaria μ es:

$$U_p(\xi, \tau) = 2\text{Bi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(U_{f0}\mu^2 - U_{p0}A_n)(\psi_p - A_n)}{D_n} \frac{\text{senh}(\mu\xi)}{\xi \text{senh}(\mu)} \exp\left[\left(\frac{\mu^2 - \Phi^2}{\alpha}\right)\tau\right] + 2\text{Bi}\psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mu^2(\psi_p - A_n)}{D_n} \frac{\text{senh}(\mu\xi)}{\xi \text{senh}(\mu)} I_{in}(\tau) \quad (6.9)$$

La expresión final de U_f para la raíz imaginaria μ es:

$$U_f(\tau) = \text{Bi}\psi_p U_{f0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2(U_{f0}\mu^2 - U_{p0}A_n)}{D_n} \exp\left[\left(\frac{\mu^2 - \Phi^2}{\alpha}\right)\tau\right] + \text{Bi}\psi_{in}\psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2\mu^2}{D_n} I_{in}(\tau) \quad (6.10)$$

Donde $I_{in}(\tau)$ es la condición de entrada, en particular para la función escalón:

$$I_{in}(\tau) = \frac{1 - \exp\left[\left(\frac{\mu^2 - \Phi^2}{\alpha}\right)(\tau - \tau_0)\right]}{-\left(\frac{\mu^2 - \Phi^2}{\alpha}\right)}$$

La expresión para U_f en función de λ_n es la antes mostrada en la Ecuación (6.3) donde la condición de entrada $I_{in}(\tau)$ para la función escalón es la siguiente:

$$I_{in}(\tau) = \frac{1 - \exp\left[-\left(\frac{\lambda_n^2 + \Phi^2}{\alpha}\right)(\tau - \tau_0)\right]}{\left(\frac{\lambda_n^2 + \Phi^2}{\alpha}\right)}$$

Las expresiones de $I_{in}(\tau)$ para las raíces μ y λ_n para las diferentes condiciones de entrada pueden consultarse a detalle en las tablas del Apéndice F.

Perfil de la concentración del fluido y la partícula

Se ha verificado la equivalencia de los términos para las ecuaciones de la concentración en el fluido U_f y para la concentración en la partícula U_p , para el coeficiente D_n y la expresión para obtener los valores propios $M(s)$ descritas en las Ecuaciones (6.3) a (6.6) con el trabajo

de Marroquín y col., 2002, por lo tanto, con dichas ecuaciones equivalentes, es posible obtener los valores propios y con ellos obtener las gráficas que se reportan en el artículo de Marroquín y col., 2002, donde se modela un Tanque Agitado y se describe el comportamiento de $U_f(\tau)$ y de $U_p(\xi, \tau)$ en el tiempo para diferentes condiciones de entrada utilizando distintos Números de Biot y dos variaciones en el valor del Módulo de Thiele, además de un análisis para la concentración del fluido en el tiempo. Los cuatro siguientes casos elegidos para analizar contienen el valor para las siguientes variables de forma permanente:

$$\psi_p = 0.1, \quad \psi_{in} = 10.0, \quad \tau_0 = 0.0, \quad U_{f0} = 0.0, \quad U_{p0} = 0.0$$

Por modelar un Tanque Agitado, se considera el valor de $U_{f0} = 0.0$, que es valor del fluido para $\tau = 0.0$ y $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$ para los parámetros de intercambio con el fluido. Las variables a modificar en dichos casos son el Número de Biot y el Módulo de Thiele debido a que se considera el análisis de los dos primeros casos incluidos en la Figura 2 del artículo de Marroquín y col., 2002, dichas gráficas contienen el caso donde se obtiene una raíz imaginaria, por la condición antes mencionada: $\Phi^2 > \psi_{in}$. Los dos casos restantes elegidos utilizan un $Biot = 100.0$. Por lo tanto, se analizan los casos donde existe un transporte pobre de masa, o resistencia externa a la transferencia de masa, es decir $Biot = 1.0$. y dos casos donde no existe resistencia a la transferencia de masa con $Biot = 100.0$.

Experimentos a analizar para valores de $Biot = 1.0$:

Caso 01 : $\Phi = 2.0$

Caso 02 : $\Phi = 5.0$

La Tabla 6.1 muestra una comparación de raíces reportadas en el artículo de Marroquín y col., 2002 y las encontradas utilizando las ecuaciones de U_f , D_n , $M(s)$ obtenidas por el Método de Series de Fourier para un valor de $Biot = 1.0$. La tabla se realiza con la finalidad de comparar el valor de las raíces y conocer la viabilidad de la obtención de los resultados reportados para el perfil de concentración del fluido y la partícula.

Una vez que se ha comprobado que las primeras raíces poseen gran similitud debido a una diferencia aproximadamente menor a 0.001, es posible obtener las gráficas que describen el comportamiento de $U_f(\tau)$ y $U_p(\xi, \tau)$, para observar el comportamiento de los perfiles de concentración de ambos casos, véase la Figura 6.1.

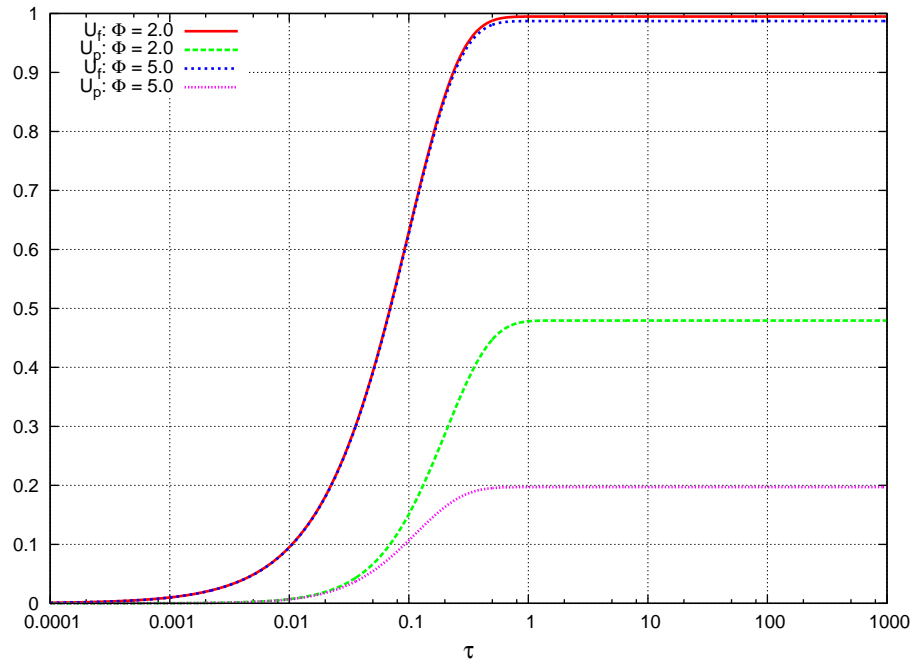


Figura 6.1: Comportamiento de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1$ en el tiempo (τ) para el *Caso 01* y *Caso 02* con los parámetros: $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$, $Biot = 1.0$ para la función escalón.

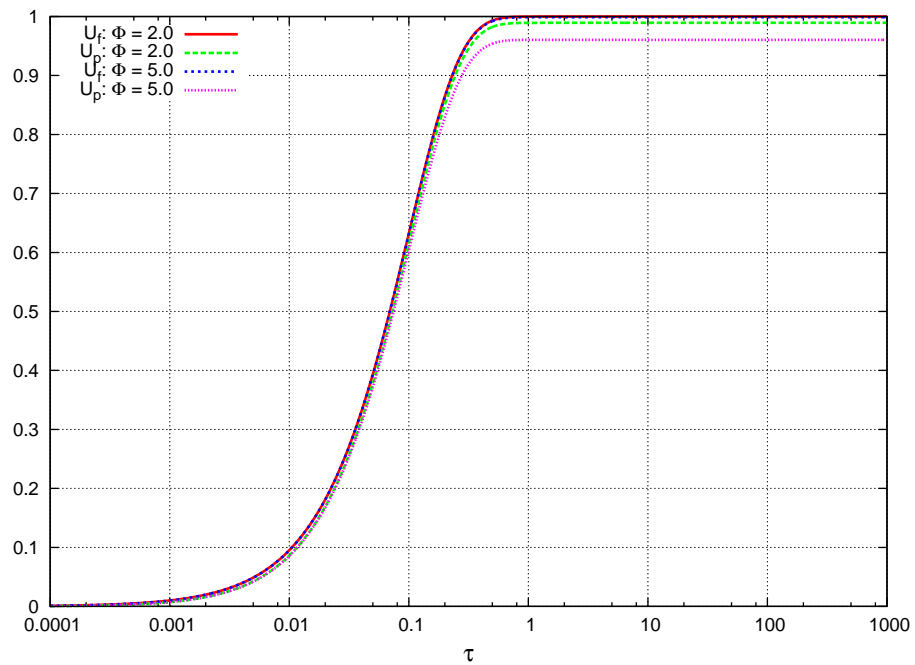


Figura 6.2: Comportamiento de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1$ en el tiempo (τ) para el *Caso 03* y *Caso 04* con los parámetros: $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$, $Biot = 100.0$ para la función escalón.

Tabla 6.1: Comparativo de los primeros diez valores propios encontrados utilizando $Biot = 1.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$.

Raíces	Marroquín		Presente trabajo	
	$\Phi=2.0$	$\Phi=5.0$	$\Phi=2.0$	$\Phi=5.0$
λ_1	1.5533	3.8720i	1.5533	3.8634i
λ_2	2.4762	1.5712	2.4762	1.5745
λ_3	4.7137	4.7124	4.7137	4.7130
λ_4	7.8542	7.8540	7.8542	7.8541
λ_5	10.9960	10.9960	10.9957	10.9956
λ_6	14.1370	14.1370	14.1372	14.1372
λ_7	17.2790	17.2790	17.2788	17.2788
λ_8	20.4200	20.4200	20.4204	20.4204
λ_9	23.5620	23.5620	23.5620	23.5620
λ_{10}	26.7040	26.7040	26.7035	26.7035

Los casos donde existe resistencia a la transferencia de masa pueden consultarse en la Figura 6.1, es posible observar un comportamiento muy semejante en el perfil para la concentración en el fluido, ambas curvas comienzan a incrementar la concentración en puntos cercanos a valores de en $\tau = 0.001$ y alcanzan su valor máximo en tiempos cercanos a $\tau = 1.0$, a partir de dicho punto, se observa un comportamiento constante en el tiempo, ambos casos presentan su valor máximo en concentración muy cercano a 1.0. Para conocer con mayor profundidad el comportamiento de la concentración del fluido se hace un análisis en el tiempo.

La concentración en la partícula muestra mayores diferencias donde se distingue claramente que la concentración en la partícula para un Módulo de Thiele = 5.0 es menor en comparación con la que presenta un Módulo de Thiele = 2.0 y esto es debido a que existe un consumo de reactante mayor por tratarse de una reacción más rápida. Ambos perfiles reportan con gran similitud en sus valores hasta $\tau = 0.05$, el perfil de la partícula para Thiele = 5.0 alcanza su máximo valor en $\tau = 0.7$, más rápidamente en comparación con el *Caso 01* que lo alcanza en $\tau = 1.0$, a partir de dichos valores en el tiempo, la concentración en la partícula es constante para ambos casos. El valor máximo de concentración en el *Caso 01* es aproximadamente de 0.48 y para el caso *Caso 02* es de 0.2, la diferencia entre ambas concentraciones es alrededor de 0.28 se debe al valor del Módulo de Thiele.

En general, para la Figura 6.1 se observa una diferencia notoria entre la concentración en el fluido y la concentración en la partícula, y se debe al Número de *Biot* = 1.0, para dicho valor se presenta una resistencia interfacial, es decir, conforme llega el reactante a la superficie de la partícula va reaccionando debido a que la limitante es el transporte de masa que llega a la partícula, por lo tanto, existe muy poco transporte de masa intrapartícula y posiblemente no existe acumulación de reactante en la superficie de la partícula.

Evaluación en el tiempo

El perfil de concentración de salida del fluido puede analizarse a diferentes tiempos bajo las mismas condiciones al tomar la condición de entrada escalón: $U_{in}^k = H(\tau - \tau_0) = H(\tau)$. La función escalón $\mathcal{U}(t - a)$, se define:

$$\mathcal{U}(t - a) = \begin{cases} 0, & 0 \leq t < a \\ 1, & t \geq a \end{cases}$$

La tabla que contiene a detalle las funciones de entrada y su valores, se encuentran en el **Apéndice F**.

Para la concentración de la partícula se utiliza la ecuación encontrada de forma analítica para el estado estacionario.

Análisis a diferentes tiempos para la concentración del fluido:

(a) Cuando $\tau \ll 1$ la ecuación $U_f(\tau)$ se reduce a:

$$U_f(\tau \ll 1) \rightarrow 1 = \text{Bi}\psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2\lambda_n^2}{D_n} \quad (6.11)$$

(b) Cuando $\tau \gg 1$ y $U_{in} = U_{in}^{\text{escalón}}(\tau) = 1$, la ecuación $U_f(\tau)$ se reduce a:

$$U_f^{\text{escalón}}(\tau \gg 1) \rightarrow U_f^{ss} = \text{Bi}\psi_{in}\psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2\lambda_n^2}{D_n \frac{(\lambda_n^2 + \Phi^2)}{\alpha}} \quad (6.12)$$

(c) La solución analítica encontrada para U_f^{ss} en estado estacionario es:

$$U_f^{ss} = \frac{\psi_{in}[\Phi \cosh(\Phi) + (\text{Bi} - 1)\sinh(\Phi)]}{\psi_{in}[\Phi \cosh(\Phi) + (\text{Bi} - 1)\sinh(\Phi)] + \psi_p[\Phi \cosh(\Phi) - \sinh(\Phi)]} \quad (6.13)$$

Análisis para la concentración de la partícula:

La solución analítica encontrada para $U_p^{ss}(\xi)$ en estado estacionario es:

$$U_p^{ss}(\xi) = \frac{\psi_{in} \text{Bi} \frac{\sinh(\Phi \xi)}{\xi}}{\psi_{in}[\Phi \cosh(\Phi) + (\text{Bi} - 1)\sinh(\Phi)] + \psi_p[\Phi \cosh(\Phi) - \sinh(\Phi)]} \quad (6.14)$$

La solución de las concentraciones en estado estacionario, U_f^{ss} y $U_p^{ss}(\xi)$, se encuentra en el Apéndice G; es importante destacar que la concentración en la partícula puede calcularse en cualquier punto del radio y que su principal diferencia con la concentración en el fluido es que su valor depende directamente del Número de Biot, es decir, está afectada por el transporte de masa.

Los resultados obtenidos para U_f utilizando los criterios antes mencionados para ambos casos, se muestran en la Tabla 6.2. Los resultados para la concentración en la partícula se muestran más adelante.

Tabla 6.2: Evaluación de la concentración en el fluido para el *Caso 01* y el *Caso 02* en el tiempo, τ .

Criterios	<i>Biot</i> = 1.0	
	$\Phi=2.0$	$\Phi=5.0$
$U_f(\tau \ll 1)$	0.9999	0.9951
$U_f^{\text{escalón}}(\tau \gg 1)$	0.9948	0.9872
U_f^{ss}	0.9948	0.9921

Resolviendo para los casos restantes mostrados en la Figura 3 del artículo de Marroquín y col., 2002, respetando el valor de las variables mencionadas para $Biot = 100.0$:

Caso 03: $\Phi = 2.0$

Caso 04: $\Phi = 5.0$

Por la condición antes mencionada: $\Phi^2 > \psi_{in}$, en *Caso 04*, aparece una raíz imaginaria, las gráficas obtenidas para ambos casos se presentan en la Figura 6.2.

Los casos donde no existe resistencia a la transferencia de masa pueden consultarse en la Figura 6.2 donde se observa un comportamiento en el perfil muy semejante a los casos anteriores, los valores para la concentración en el fluido y la partícula son muy similares, esto se debe a que no existe resistencia externa a la transferencia de masa debido al valor del Número de Biot.

El perfil de concentración del fluido para ambos casos es muy similar, no es posible distinguir claramente una diferencia en los valores entre los casos. El perfil de concentración en la partícula ofrece una mínima diferencia en su valor máximo. Los cuatro perfiles reportados, elevan sus valores de concentración en $\tau = 0.001$ y alcanzan su valor máximo en $\tau = 0.7$. La diferencia en el valor máximo para el perfil de la concentración en la partícula entre ambos casos es alrededor de 0.3.

Hasta el momento se cuenta con cuatro perfiles de comportamiento de la concentración del fluido y de la partícula en la superficie, es decir en $\xi = 1.0$. Los dos primeros casos para valores de $Biot = 1.0$, donde existe una resistencia al transporte interfacial y para los dos casos restantes donde el valor de $Biot = 100.0$ que implica un buen transporte en el sistema y una mínima resistencia al transporte interfacial, el efecto ocasionado por el transporte interfacial se ve reflejado en la diferencia de valores entre la concentración del fluido y la partícula. La diferencia de valores entre las concentraciones en la partícula para los casos con un mismo valor de Biot, se debe al Módulo de Thiele.

El Módulo de Thiele es una relación de la constante k de reacción y el coeficiente de difusión D_{ef} , de tal forma que para el *Caso 02* y *Caso 04* se presenta una reacción más rápida en comparación con el *Caso 01* y *Caso 03* por tal motivo se espera que las concentraciones de salida y de la partícula sean menores en comparación con los casos donde $\Phi = 2.0$.

Para conocer el comportamiento de los cuatro perfiles de concentración en el fluido para la función de entrada tipo escalón se muestran en la Figura 6.3. Para observar con mayor detalle las variaciones del perfil de concentración del fluido a valores de alta concentración, se presenta la Figura 6.4.

Los perfiles para la concentración en la partícula para los cuatro casos estudiados se observan en la Figura 6.5. Los valores del perfil de la concentración en la partícula a diferentes tiempos y para la concentración en estado estacionario, U_p^{ss} , se presentan en la Tabla 6.4.

De acuerdo a las gráficas del artículo que presenta Marroquín y col., 2002, es posible observar un comportamiento característico para cada caso, los cambios en el perfil son más notorios en la concentración en la partícula de acuerdo a los parámetros del Número de Biot y el Módulo de Thiele utilizados, para la concentración en el fluido dicho comportamiento no es tan perceptible a simple vista, por tal motivo se presenta la Tabla 6.3 de criterios de análisis en el tiempo de los cuatro casos presentados para la concentración en el fluido utilizando la función escalón.

Tabla 6.3: Evaluación de la concentración en el fluido en el tiempo para la función escalón.

Criterios	$Biot = 1.0$		$Biot = 100.0$	
	Caso 01	Caso 02	Caso 03	Caso 04
	$\Phi=2.0$	$\Phi=5.0$	$\Phi=2.0$	$\Phi=5.0$
$U_f(\tau \ll 1)$	0.9999	0.9951	0.9999	0.9992
$U_f^{\text{escalón}}(\tau \gg 1)$	0.9948	0.9872	0.9998	0.9989
U_f^{ss}	0.9948	0.9921	0.9998	0.9996

La Tabla 6.3 muestra los resultados esperados, es posible diferenciar para ambos casos cuando existe una mayor velocidad de reacción debido a la diferencia en los valores de la concentración, valores más bajos. Para el *Caso 02* y *Caso 04* es posible notar una pequeña disminución en la concentración del fluido en $U_f^{\text{escalón}}(\tau \gg 1)$ y U_f^{ss} en comparación con sus respectivos pares y los valores encontrados para los *Caso 01* y *Caso 03* son más cercanos entre si. Sin embargo, no es posible decir que existe una diferencia notoria para los casos con resistencia a la transferencia de masa, *Caso 01* y *Caso 02* en comparación con los casos que no presentan dicha resistencia, *Caso 03* y *Caso 04*. De acuerdo a la Figura 6.4, los cuatro perfiles alcanzan su valor máximo en un valor aproximado de $\tau = 0.7$.

En la Figura 6.5 es posible observar diferencias en el perfil de la partícula para todos los casos en comparación con los perfiles de concentración del fluido. Para la partícula es posible distinguir los casos donde no existe resistencia a la transferencia de masa, casos con el valor de la concentración más altos y los casos donde no existe dicha resistencia, además, para ambos pares de casos, es posible distinguir claramente las diferencias en los valores de la concentración en la partícula por modificar el valor del Módulo de Thiele, para $\Phi = 2.0$, se

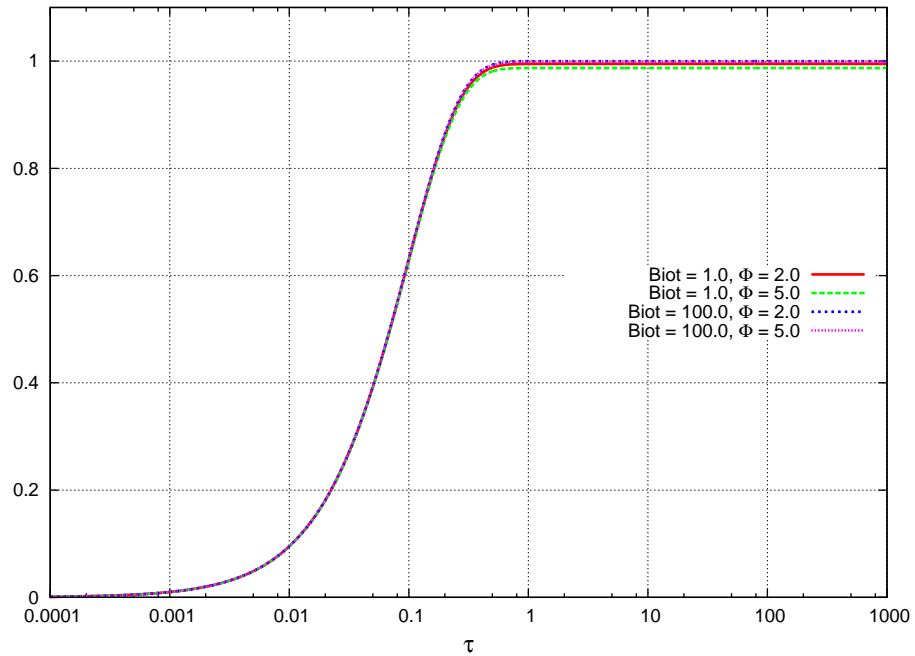


Figura 6.3: Comparativo de la concentración en el fluido en el tiempo (τ) para diferentes valores del Número de Biot y el Módulo de Thiele con los parámetros: $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ para la función escalón.

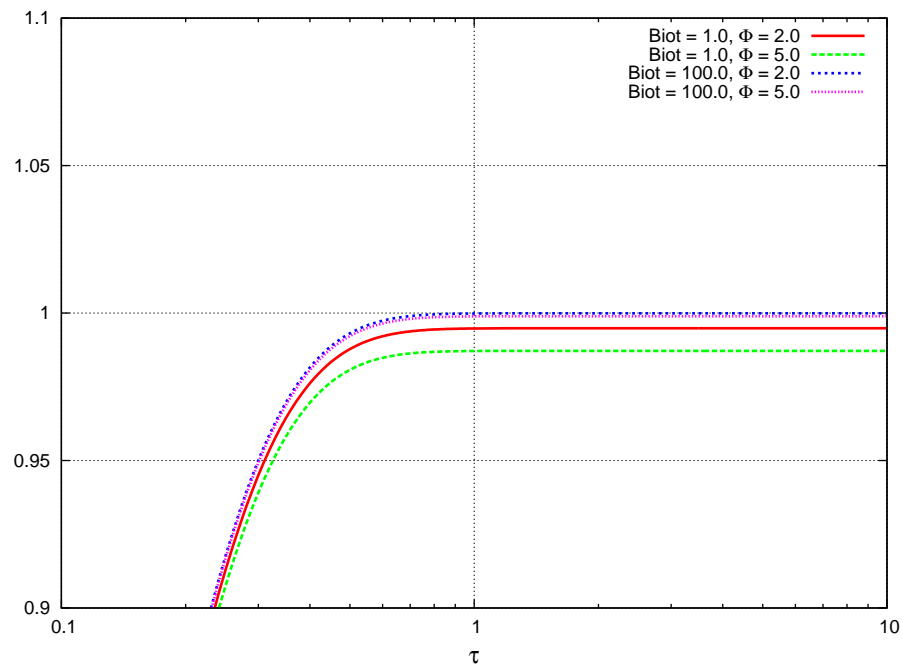


Figura 6.4: Zoom de comportamiento de la concentración en el fluido para valores de alta concentración en el tiempo (τ) para diferentes valores del Número de Biot y el Módulo de Thiele con los parámetros: $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ para la función escalón.

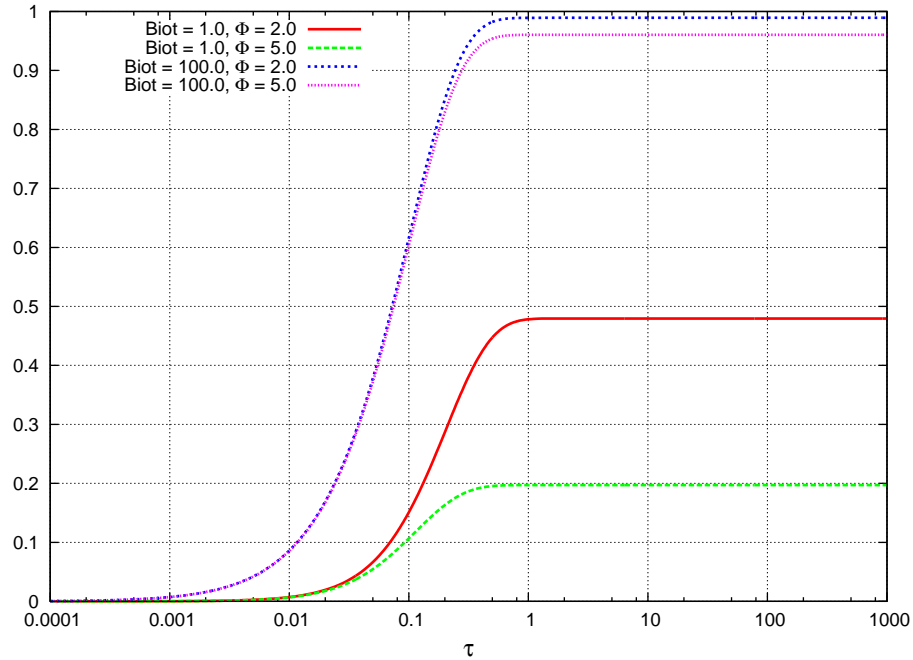


Figura 6.5: Comportamiento de la concentración de la partícula, U_p en $\xi = 1.0$, en el tiempo (τ) para diferentes valores del Módulo de Thiele y Número Biot para los parámetros: $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$.

presentan valores más altos de concentración. Los cuatro perfiles alcanzan su máximo valor en la concentración en valores cercanos a $\tau = 0.5$.

La Tabla 6.4 presenta los valores del perfil de la concentración de la partícula en el tiempo para los cuatro casos estudiados. En la tabla se agrega la concentración de la partícula en estado estacionario, U_p^{ss} , es posible ver que los valores son los mismos en los *Caso 01* y *Caso 03* para U_p^{ss} y $\tau = 10.0$. Para los valores de concentración donde $\Phi = 5.0$, casos *Caso 02* y *Caso 04* se observa que los valores no son tan similares para dichos puntos, posiblemente se debe a la existencia de una raíz imaginaria.

Los perfiles de concentración para los mismos casos modificando la función de entrada para observar el comportamiento tipo oscilatorio donde $U_{in}^k = 1 + \beta H(\tau - \tau_0) \text{Sin}(\omega\tau) = 1 + H(\tau) \text{Sin}(5\pi\tau)$ se observan en las Figuras 6.6(a) a 6.6(d).

En el perfil de la concentración en el fluido para la función oscilatoria se observa nuevamente un comportamiento muy semejante para los cuatro casos. Es posible distinguir una

Tabla 6.4: Comparativo de para la concentración en la partícula en $\xi = 1$ a diferentes tiempos para los cuatro casos estudiados para la función de entrada escalón utilizando los parámetros: $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$.

Criterios	<i>Biot</i> = 1.0		<i>Biot</i> = 100.0	
	Caso 01 $\Phi=2.0$	Caso 02 $\Phi=5.0$	Caso 03 $\Phi=2.0$	Caso 04 $\Phi=5.0$
$\tau = 0.001$	0.00024	0.00022	0.00728	0.00727
$\tau = 0.01$	0.00717	0.00676	0.08612	0.08548
$\tau = 0.1$	0.15102	0.10671	0.61624	0.60346
$\tau = 1.0$	0.47816	0.19712	0.98922	0.96045
$\tau = 10.0$	0.47953	0.19713	0.98927	0.96049
U_p^{ss}	0.47953	0.19839	0.98926	0.96116

mayor amplitud para los casos cuando el Módulo de Thiele =5.0, posiblemente se deba a los cambios bruscos de concentración por el consumo de reactivo por tratarse de una reacción más rápida, sin embargo los cuatro casos tiene un valor medio aproximado de $U_f = 1.0$. Para la concentración en la partícula es más notorio observar diferencias, es posible distinguir valores bajos de concentración cuando existe resistencia al transporte de masa, para los casos donde el Número de Biot = 100.0, el valor del perfil de la partícula es muy similar al del fluido. Para el *Caso 02* y *Caso 04* se observa valores menores en el perfil de concentración, esto se debe a que existe una reacción que es más rápida, los cambios en la concentración son más notorios, que para los casos donde $\Phi = 2$. El análisis en diferentes tiempos para la concentración del fluido utilizando la función oscilatoria es mostrado en la Tabla 6.5.

Tabla 6.5: Evaluación de la concentración del fluido en el tiempo para la función oscilatoria.

Criterios	<i>Biot</i> = 1.0		<i>Biot</i> = 100.0	
	Caso 01 $\Phi=2.0$	Caso 02 $\Phi=5.0$	Caso 03 $\Phi=2.0$	Caso 04 $\Phi=5.0$
$U_f(\tau \ll 1)$	0.9999	0.9951	0.9999	0.9992
U_f^{ss}	0.9948	0.9921	0.9998	0.9996

La Tabla 6.5, muestra dos criterios en el tiempo para la función oscilatoria, como puede observarse, para $U_f(\tau \ll 1)$ y U_f^{ss} , los valores más cercanos para la concentración del fluido se encuentra para el *Caso 03*, los demás casos presentan valores muy similares.

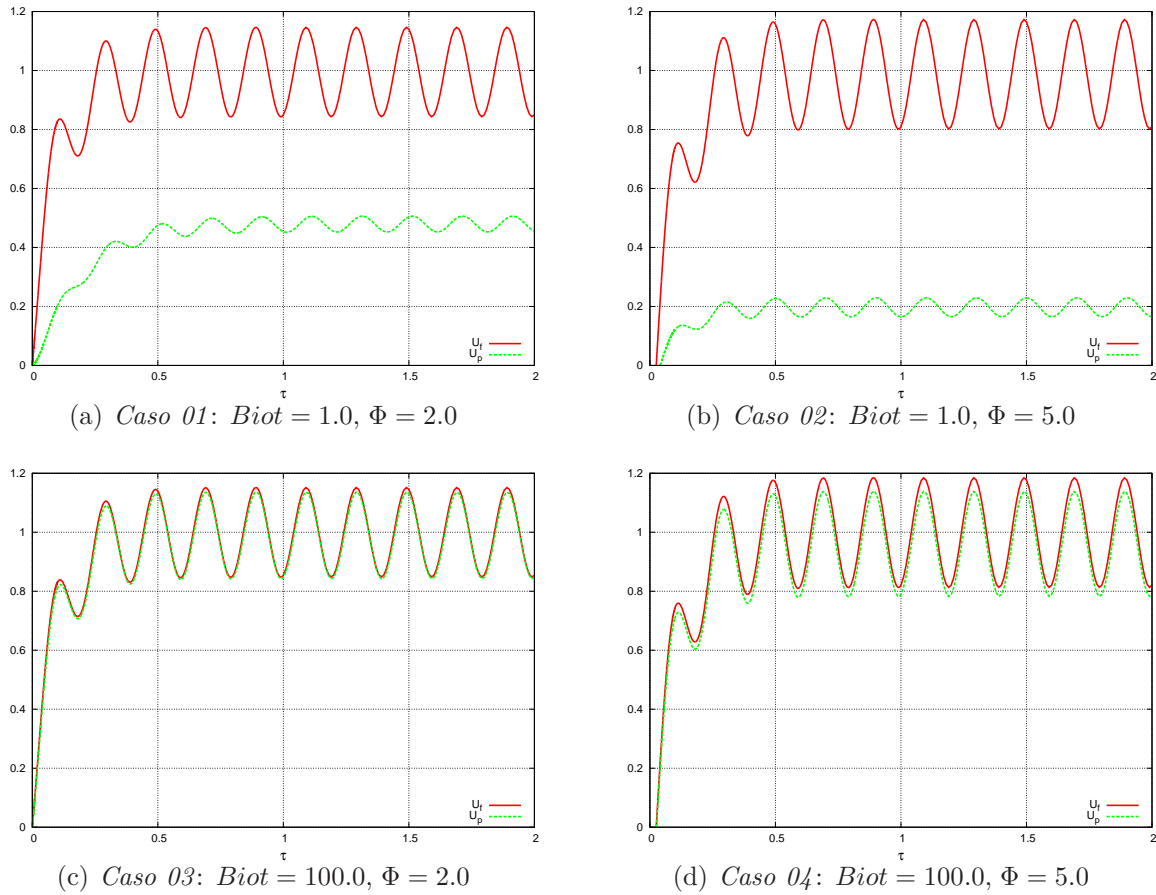


Figura 6.6: Comportamiento de la concentración en el fluido en el tiempo (τ) para la función de entrada oscilatoria donde $U_{in}^k = 1 + \beta H(\tau - \tau_0) \text{Sin}(\omega\tau) = 1 + H(\tau) \text{Sin}(5\pi\tau)$ utilizando los parámetros: $\psi_p = 0.1, \psi_{in} = 10.0, \tau_0 = 0.0, U_{f0} = 0.0, U_{p0} = 0.0$.

Los perfiles de concentración del fluido y la partícula para los cuatro casos estudiados utilizando la función pulso: $U_{in}^k = 1.0 + \delta(\tau - \tau_0) = 1.0 + \delta(\tau - 1.0)$ se presenta en las Figuras 6.7(a) a 6.7(d).

El perfil de concentración del fluido y la concentración en la partícula para la función pulso mostradas en la Figura 6.7 presenta comportamientos muy similares en comparación con las otras funciones. Para la concentración del fluido se alcanza un valor máximo aproximadamente de $U_f = 11.0$ en $\tau = 1.0$, posteriormente cerca de valores de $\tau = 2.0$, se vuelven constantes los valores de la concentración donde el valor de la concentración se encuentra muy próximo a 1.0. Para la concentración en la partícula, nuevamente se observa una difer-

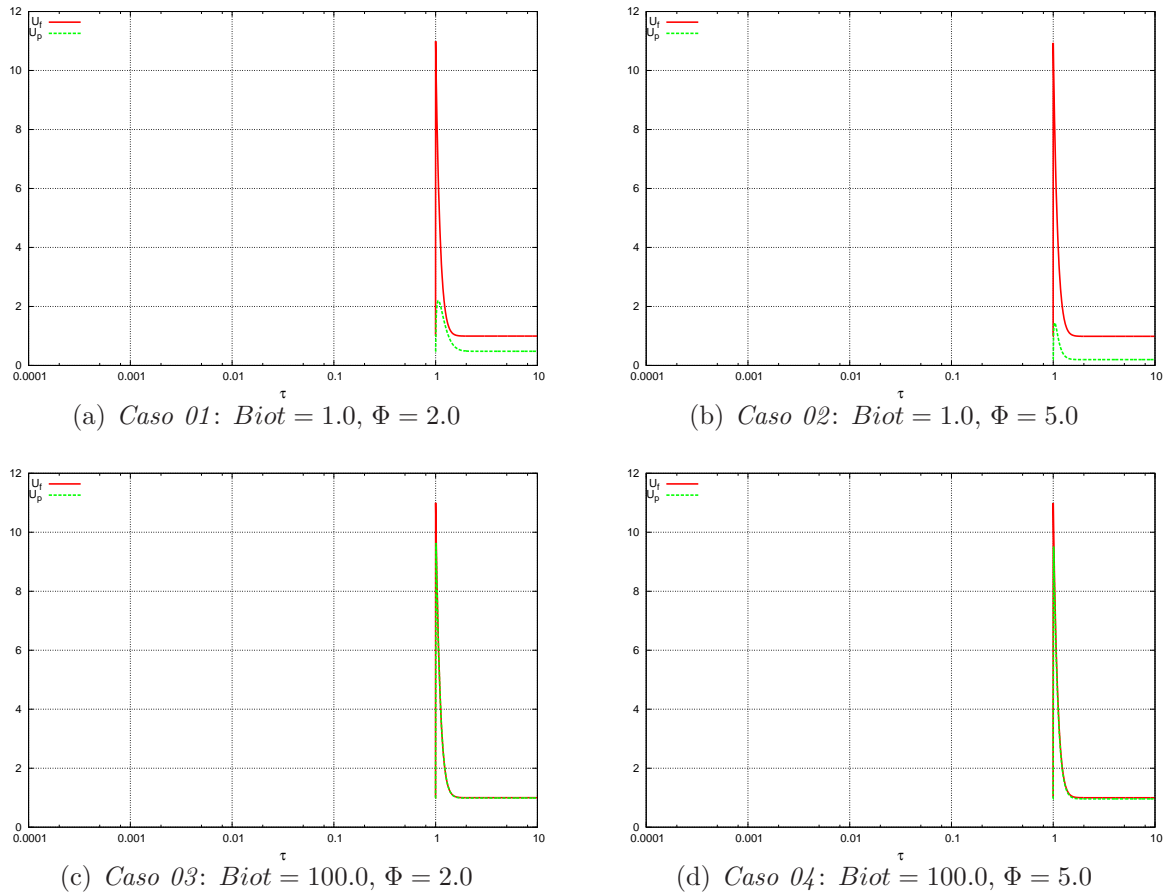


Figura 6.7: Comportamiento de la concentración en el fluido en el tiempo (τ) para la función de entrada pulso utilizando los parámetros: $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$.

encia en los valores cuando existe resistencia a la transferencia de masa, los valores de la concentración para la partícula son muy diferentes a los del fluido. Para el *Caso 01* se alcanza un valor máximo aproximado de 2.2, para el *Caso 02*, un valor aproximado de 1.6. Los casos donde existe un buen transporte de masa, se observa una concentración de la partícula muy similar a la concentración del fluido, para el *Caso 03*, el valor máximo en la concentración de la partícula se observa aproximadamente de 9.8, para el *Caso 04* un valor aproximado de 9.6, ambos en $\tau = 1.0$. Es posible distinguir también los dos casos donde ocurre una reacción más rápida, por que se logra observar notablemente una diferencia de valores más bajos en la concentración.

El análisis en el tiempo para la concentración del fluido utilizando la función pulso se observa en la Tabla 6.6.

Tabla 6.6: Evaluación de la concentración del fluido en el tiempo para la función pulso.

Criterios	$Biot = 1.0$		$Biot = 100.0$	
	Caso 01 $\Phi=2.0$	Caso 02 $\Phi=5.0$	Caso 03 $\Phi=2.0$	Caso 04 $\Phi=5.0$
$U_f(\tau \ll 1)$	0.9999	0.9951	0.9999	0.9992
U_f^{ss}	0.9948	0.9921	0.9998	0.9996

La Tabla 6.6 ofrece información muy similar del comportamiento de la concentración del fluido con otras funciones de entrada. En la función pulso el perfil de la concentración tiene su máximo en $\tau = 1.0$ y posteriormente, en $\tau = 1.2$, la concentración se vuelve constante en valores cercanos a 1.0, en los cuatro casos estudiados.

De acuerdo a los experimentos realizados, fue posible observar las variaciones en los perfiles al modificar el Número de Biot y el Módulo de Thiele. El Número de Biot es un número adimensional relacionado con el transporte de masa, cuanto mayor sea el Número de Biot, mejor será el transporte en el sistema, en el caso del Tanque Agitado, el efecto del Número de Biot se vio reflejado en el comportamiento del perfil de la concentración de la partícula, cuando el transporte es malo, $Biot = 1.0$ la concentración del fluido no llega a la partícula y se observa una diferencia en los valores de concentración, conforme el Módulo de Thiele aumenta, esa diferencia se incrementa. Para los casos donde el transporte de masa es bueno, es decir, a partir de un $Biot = 10.0$ el transporte interfacial se incrementa y la diferencia de valores entre la concentración del fluido y la partícula es menor, el Módulo de Thiele también para estos casos también incrementa la diferencia. El Módulo de Thiele presenta mayor efecto a medida que el Número de Biot disminuye.

Una vez que se ha comprobado que los experimentos realizados son válidos, porque se ha logrado obtener los valores propios que reporta Marroquín y col., 2002 y las gráficas para las diferentes funciones, se propone una serie de experimentos que muestren el efecto de la adsorción α y posteriormente se evaluarán los efectos de los coeficientes de salto ϕ_1 y ϕ_2 .

6.3 Efecto del Coeficiente de Adsorción

Para estudiar el efecto de la adsorción, se utilizan las ecuaciones obtenidas por el Método Expansión en Series de Fourier desarrolladas en el Capítulo 5, las ecuaciones consideran la existencia del efecto de adsorción y las condiciones de salto. Las ecuaciones que Marroquín y col., 2002 publican ya no pueden ser utilizadas porque no consideran dichos efectos. Para estudiar el efecto del coeficiente de adsorción, se requiere que $\alpha \neq 1$, los coeficientes de salto en el presente análisis no son considerados, por lo tanto $\phi_1 = \phi_2 = 0.0$. La función de entrada que se utiliza en el estudio del efecto del coeficiente de adsorción es la función escalón, esto se debe a que se facilita el análisis por el comportamiento del perfil de concentraciones del fluido y la partícula.

El término α es un parámetro adimensional que representa el Coeficiente de Adsorción, se encuentra relacionado con el área de la partícula disponible para la adsorción, a_v , la constante de adsorción en el equilibrio, k_{eq} y la porosidad de la partícula, ε . El coeficiente de adsorción está definido de la siguiente forma:

$$\alpha = \left(1 + \frac{a_v k_{eq}}{\varepsilon} \right) \quad (6.15)$$

Los valores que reporta la literatura para los parámetros que afectan el valor del coeficiente de adsorción son los siguientes:

- El área volumétrica de la partícula, a_v con unidades: $\frac{m^2}{m^3}$, éste parámetro se maneja con un valor aproximado de $\frac{6}{d_p}$. El valor de d_p que es el diámetro de la partícula se encuentra en un intervalo de $[0.1 - 0.5]$ cm.
- La constante de adsorción, k_{eq} adquiere valores menores a 100. Los valores cercanos a 100 para la constante representa una alta adsorción, es decir, un número grande de sitios disponibles para la adsorción se encuentra ocupado por reactante.
- La porosidad de la partícula ε , se encuentra entre los valores de $[0.25 - 0.35]$.

El coeficiente de adsorción es un término que aparece en el sistema de ecuaciones, en la ecuación que describe el transporte en la partícula, aparece multiplicando el cambio de la

concentración de la partícula en el tiempo adimensional, por tal motivo, se espera que los valores obtenidos en la concentración del fluido y la partícula para $\alpha = 1.0$ en valores de tiempo grandes sean valores muy semejantes a los valores a obtener para $\alpha \neq 1.0$.

Es importante señalar que al modificarse el valor del coeficiente de adsorción, es decir, cuando $\alpha \neq 1.0$, se modifica la ecuación para encontrar las raíces de λ_n al modificarse el factor que afecta a la función $Sen(\lambda)/\lambda$, por lo tanto, es necesario analizar la condición para encontrar una raíz imaginaria cuando $\alpha \neq 1$. Desarrollando la Ecuación (6.5) cuando $\lambda \rightarrow 0$, se encuentra la condición bajo la cual existe la raíz imaginaria: $\frac{\Phi^2}{\alpha} > \psi_{in}$.

Para conocer el efecto de la adsorción sobre la concentración del fluido en un sistema Tanque Agitado, se proponen los experimentos para los casos en que no existe resistencia a la transferencia de masa, es decir para valores de $Biot = 10.0$ con dos valores en el Módulo de Thiele: 2.0 y 5.0 para una reacción moderada y para una reacción rápida respectivamente.

Se ha seleccionado un valor de $\alpha = 1,000.0$ debido a que no se presentaron variaciones apreciables para la concentración del fluido con valores menores, incluso se estudió la variación de los valores propios al modificar los valores de α y del coeficiente D_n . Sí fue posible observar que existen diferencias en ambos al modificar el coeficiente de adsorción, sin embargo no fue posible apreciarlo en los perfiles de concentración de salida obtenidos a pesar de que el valor de α y λ_n se encuentran afectados por la exponencial en las ecuaciones para obtener $U_f(\tau)$ y $U_p(\xi, \tau)$.

Experimentos a analizar para valores del Módulo de Thiele = 2.0

Caso A01 : $\alpha = 1.0$

Caso A02 : $\alpha = 1,000.0$

Experimentos a analizar para valores del Módulo de Thiele = 5.0

Caso A03 : $\alpha = 1.0$

Caso A04 : $\alpha = 1,000.0$

Los parámetros que permanecen constantes en el experimento son los siguientes:

$$\psi_p = 0.1 \quad \psi_{in} = 10.0 \quad \tau_0 = 0.0 \quad U_{f0} = 0.0 \quad U_{p0} = 0.0 \quad \phi_1 = 0.0 \quad \phi_2 = 0.0$$

Los perfiles de concentración del fluido y de la partícula pueden apreciarse en las Figuras 6.8 y 6.9 para los *Casos A01 y A02* y para los *Casos A03 y A04*, respectivamente.

La Figura 6.8 ilustra el comportamiento de la concentración del fluido y la partícula corresponde al *Caso A01* y *Caso A02*. Para el perfil de concentración en el fluido los dos comportamientos se observan con valores muy similares, detenidamente es posible distinguir una ligera variación a concentraciones altas tomando el valor mayor para el *Caso A01* donde $\alpha = 1.0$, comportamiento esperado aunque con expectativa de observar diferencias más notorias en los valores de la concentración respecto al tiempo.

Para el perfil de la partícula, la diferencia de valores es la esperada debido a que la concentración de la partícula para $\alpha = 1,000.0$ disminuye notablemente en el tiempo en comparación con el valor para $\alpha = 1.0$.

Finalmente a tiempos grandes los perfiles de concentración del fluido alcanzan el mismo valor en $\tau = 0.7$, a partir de ese tiempo, el valor de las concentraciones es constante. Para el perfil de concentración de la partícula, se observa una diferencia en el tiempo para alcanzar el valor máximo de concentración, para el *Caso A01*, el perfil alcanza su máximo valor en $\tau = 0.5$, para el *Caso A02*, en $\tau = 200.0$, a partir de dicho tiempo, ambas concentraciones permanecen constantes con un valor aproximado de 0.9.

En la Figura 6.9 que correspondiente al *Caso A03* y *Caso A04*, ilustra el comportamiento de la concentración en el fluido y la partícula, nuevamente, los perfiles de la concentración en el fluido son muy similares, ambos perfiles alcanzan su máximo en $\tau = 0.5$ con un valor muy cercano a 1.0 en la concentración, valor que permanece constante a partir de dicho punto.

El perfil de concentración en la partícula sí muestra una diferencia en los valores de concentración al modificar el coeficiente de adsorción. El perfil del *Caso A03*, presenta un valor máximo en la concentración en $\tau = 0.5$, para el *Caso A04*, el valor máximo de concentración se presenta en $\tau = 70.0$, a partir de dicho valor en el tiempo, ambos perfiles mantienen constante el valor de concentración máximo alcanzado con un valor aproximadamente de 0.72.

La diferencia en los perfiles de concentración en la partícula entre ambas figuras se debe a la variación en el Módulo de Thiele, directamente relacionado con k de reacción, provoca que los valores de la concentración en la partícula para ambos casos sean menores cuando el

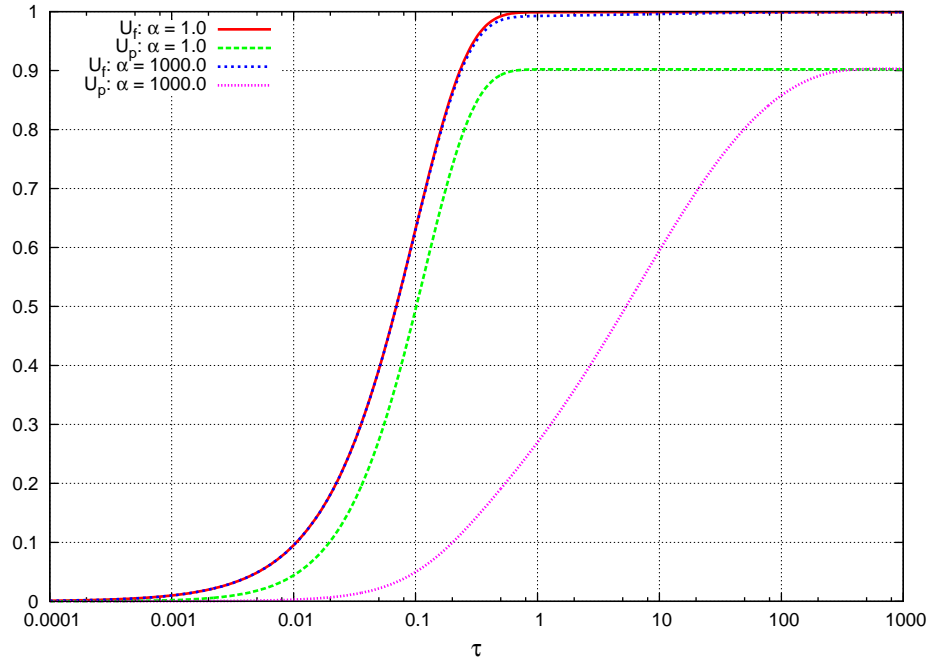


Figura 6.8: Comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Adsorción para un Módulo de Thiele = 2.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$, $\phi_1 = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$

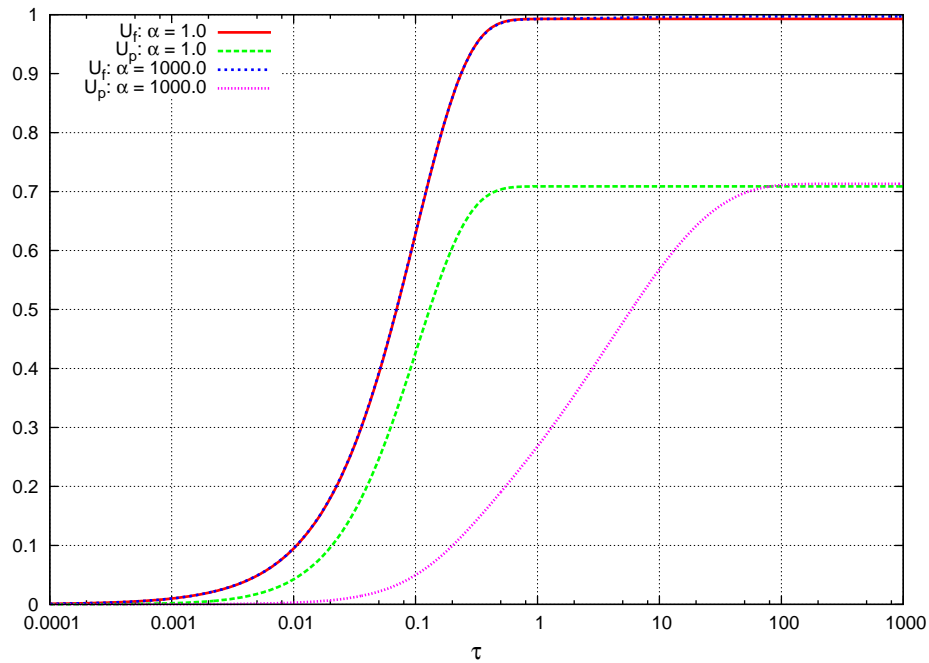


Figura 6.9: Comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Adsorción para un Módulo de Thiele = 5.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$, $\phi_1 = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$

valor del Módulo de Thiele es mayor.

Tabla 6.7: Comparativo de para la concentración del fluido a diferentes tiempos (τ), para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$.

Criterios	$\Phi = 2.0$		$\Phi = 5.0$	
	Caso A01 $\alpha=1.0$	Caso A02 $\alpha=1,000.0$	Caso A03 $\alpha=1.0$	Caso A04 $\alpha=1,000.0$
$\tau = 0.001$	0.00995	0.00995	0.00991	0.00995
$\tau = 0.01$	0.09513	0.09512	0.09471	0.09512
$\tau = 0.1$	0.63140	0.62965	0.62837	0.62965
$\tau = 1.0$	0.99898	0.99259	0.99266	0.99257
$\tau = 10.0$	0.99903	0.99597	0.99270	0.99570
U_f^{ss}	0.99903	0.99903	0.99715	0.99715

Tabla 6.8: Comparativo para la concentración en la partícula en $\xi = 1$ a diferentes tiempos (τ), para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$.

Criterios	$\Phi = 2.0$		$\Phi = 5.0$	
	Caso A01 $\alpha=1.0$	Caso A02 $\alpha=1,000.0$	Caso A03 $\alpha=1.0$	Caso A04 $\alpha=1,000.0$
$\tau = 0.001$	0.00199	0.00995	0.00194	0.00023
$\tau = 0.010$	0.04416	0.09512	0.04257	0.00291
$\tau = 0.100$	0.49504	0.62965	0.42662	0.04966
$\tau = 1.000$	0.90202	0.99259	0.70874	0.26793
$\tau = 10.00$	0.90209	0.99597	0.70877	0.56795
U_p^{ss}	0.99209	0.99209	0.71223	0.71223

En la Tabla 6.7 es posible consultar los valores de la concentración del fluido para valores específicos de tiempo. Para los *Casos 01* y *02*, es posible observar una gran similitud para los valores de concentración en el tiempo. Para los *Casos 03* y *04*, se presentan también valores muy similares de concentración en el tiempo, incluso para el *Caso 04* donde U_f^{ss} muestra un valor de 0.99715, valor se alcanzado a $\tau = 150.0$.

En la Tabla 6.8 es posible consultar los valores para la concentración de la partícula

en el tiempo. Se observan diferentes valores en la concentración para U_p , los valores de concentración son mayores en el tiempo para los casos donde el valor de $\alpha = 1.0$ y se observa que el valor para U_p^{ss} , es muy parecido al que se encuentra a $\tau = 10.0$. Analizando el *Caso A04* que presenta el valor de 0.71223 en la concentración en U_p^{ss} , se alcanza un valor muy cercano en la concentración de 0.71308 en $\tau = 270.0$.

Para el sistema de Tanque Agitado, el efecto del coeficiente de adsorción no fue posible observarlo en la concentración del fluido, los valores de concentración en el tiempo son muy similares. Los valores de concentración del fluido para los tiempos reportados en la Tabla 6.7 promedian una diferencia en los valores de concentración de 0.0028 cuando el Módulo de Thiele = 2.0, *Casos A01* y *A02*. La diferencia en valores en la concentración cuando el Módulo de Thiele = 5.0, *Casos A03* y *A04* promedia un valor de 0.0001.

El efecto del coeficiente de adsorción en la concentración de la partícula, produjo un desplazamiento en el tiempo para alcanzar el valor máximo para tiempos grandes. Para los casos reportados, a partir de $\tau = 200.0$ se obtiene el mismo valor de concentración. A medida que los valores de concentración en la partícula se incrementan, aumenta la diferencia en el tiempo. La diferencia de valores en la concentración de la partícula en los tiempos reportados en la Tabla 6.8 cuando $\Phi = 2.0$ tiene un promedio de 0.0756, para los *Casos A03* y *A04*, se obtiene una diferencia promedio en la concentración de 0.2000

6.4 Evaluación de los Coeficientes de Salto

Los coeficientes de salto de reacción y de adsorción son representados en términos de coeficientes efectivos, K_{eff}^{ad} , k_{eff}^{rx} respectivamente, estos coeficientes toman en cuenta las propiedades de cada sistema multifásico de forma particular por considerar las propiedades de las fases que lo integran. Los coeficientes están definidos en función de las propiedades fisicoquímicas de la microestructura de la partícula porosa que contiene en su interior una fracción de líquido o vacío y la microestructura de la inter-región. La inter-región es el lugar de transición entre el fluido y la partícula porosa, es un área importante porque ocurren cambios abruptos en las propiedades de las fases del sistema.

En el sistema de ecuaciones, los coeficientes de salto se encuentran en la condición de

frontera en $\xi = 1.0$. El coeficiente de salto de reacción, ϕ_1 , multiplica a la concentración de la partícula. El coeficiente de salto de adsorción ϕ_2 , multiplica el cambio de la concentración de la partícula respecto al tiempo. En la expresión de la concentración del fluido que corresponde a la Ecuación 5.49 y la expresión de la concentración en la partícula que corresponde a la Ecuación 5.50, se han señalado las contribuciones de los coeficientes para ambas soluciones.

Es posible escribir los coeficientes de salto adimensionales de la siguiente forma:

Coeficiente de Salto de reacción:

$$\phi_1 = \Phi^2 \frac{l_p}{r_p} \quad (6.16)$$

Coeficiente de Salto de adsorción:

$$\phi_2 = (\alpha - 1) \frac{l_p}{r_p} \quad (6.17)$$

Para el análisis de los coeficientes de salto, se procede a estudiarlos de forma individual con el fin de conocer el efecto particular de cada coeficiente, los experimentos se realizan suponiendo que no existe resistencia al transporte de masa del fluido a la partícula. Se trabaja con un Número de Biot = 10.0, con la finalidad de no tener limitaciones en el transporte interfacial.

Los parámetros que son considerados para evaluar numéricamente el efecto de los coeficientes son:

- El área volumétrica relacionada con el diámetro de la partícula porosa $a_{v\gamma} : l_p^{-1}$.
- Las restricciones asociadas con la ecuación de transporte efectivo en el diámetro de la partícula $r_p = 10^3 l_p$.

Para estudiar el efecto de los coeficientes de salto, se consideran los siguientes valores $\phi_1 = 1.0$ para el coeficiente de reacción y $\phi_2 = 10^{-3}(\alpha - 1) = 1.0$ para el coeficiente de adsorción.

6.4.1 Coeficiente de Salto de Reacción

El coeficiente de reacción que aparece en la condición de salto es identificado como ϕ_1 . Esta definido por la siguiente ecuación:

$$\phi_1 = \frac{k_{eff}^{rx} r_p}{\varepsilon_\gamma D_{ef}} \quad (6.18)$$

Para conocer el impacto sobre $U_f(\tau)$ y $U_p(\xi, \tau)$ es necesario considerar que no existe una limitante por el transporte de masa, por lo tanto el Número de Biot es: $Biot = 10.0$ y también se considera el Módulo de Thiele = 2.0 para una velocidad de reacción moderada y Módulo de Thiele = 5.0 para una reacción veloz, con estos valores será posible conocer si existe una dependencia del efecto del coeficiente de salto de reacción en función de la velocidad de reacción al no existir una limitante en el transporte de masa.

Los experimentos propuestos modificando el valor del Coeficiente de Adsorción con Módulo de Thiele = 2.0 son:

Experimentos con un valor de $\alpha = 1.0$:

Caso CR01: $\phi_1 = 0.0$

Caso CR02: $\phi_1 = 1.0$

Experimentos con un valor de $\alpha = 1,000.0$:

Caso CR03: $\phi_1 = 0.0$

Caso CR04: $\phi_1 = 1.0$

Los experimentos propuestos modificando el valor del Coeficiente de Adsorción con Módulo de Thiele = 5.0 son:

Experimentos con un valor de $\alpha = 1.0$:

Caso CR05: $\phi_1 = 0.0$

Caso CR06: $\phi_1 = 1.0$

Experimentos con un valor de $\alpha = 1,000.0$:

Caso CR07: $\phi_1 = 0.0$

Caso CR08: $\phi_1 = 1.0$

Los experimentos propuestos para el análisis serán de utilidad para el estudio de ambos sistemas multifásicos, el Tanque Agitado y el Reactor tipo Batch.

Efecto en el Tanque Agitado

Para el Tanque Agitado, los parámetros que permanecen constantes para los casos a estudiar son:

$$\psi_p = 0.1, \quad \psi_{in} = 10.0, \quad \tau_0 = 0.0, \quad U_{f0} = 0.0, \quad U_{p0} = 0.0, \quad Biot = 10.0$$

El perfil de concentración obtenido en el fluido y la partícula para los *Casos CR01* y *CR02*, se muestra Figura 6.10 y el perfil de concentración para los *Casos CR03* y *CR04* donde $\alpha = 1,000.0$ se muestran en la Figura 6.11.

Es posible observar en la Figura 6.10 que el efecto del Coeficiente de Salto de Reacción no es perceptible en el perfil de la concentración en el fluido. Estudiando con mayor detalle los valores propios y los valores del coeficiente D_n para casos específicos, como se presenta en la Tabla 6.25, se observa que las variaciones son mínimas al modificar el Coeficiente de Salto de Reacción, por tal motivo las variaciones que se presentan en el perfil mostrado no son perceptible a la escala de la Figura 6.10, se requiere de un análisis más riguroso a tiempos grandes, cercanos a $\tau = 100.0$ y valores de concentración muy cercano a 1.0.

El comportamiento del perfil de la concentración del fluido para los *Casos CR01* y *CR02* es muy semejante, ambos perfiles de concentración incrementan el valor rápidamente en un valor muy cercano a $\tau = 0.001$. El valor de $U_f(\tau)$ se incrementa hasta observar un valor máximo cercano a 1.0 en $\tau = 0.6$, a partir de ese valor en el tiempo, la concentración se mantiene constante para ambos perfiles.

Para la concentración de la partícula, el comportamiento en el perfil presenta mayor variación en comparación con el perfil de concentración del fluido. En la Figura 6.10, se observa una diferencia de valores para el perfil de concentración de la partícula en el tiempo,

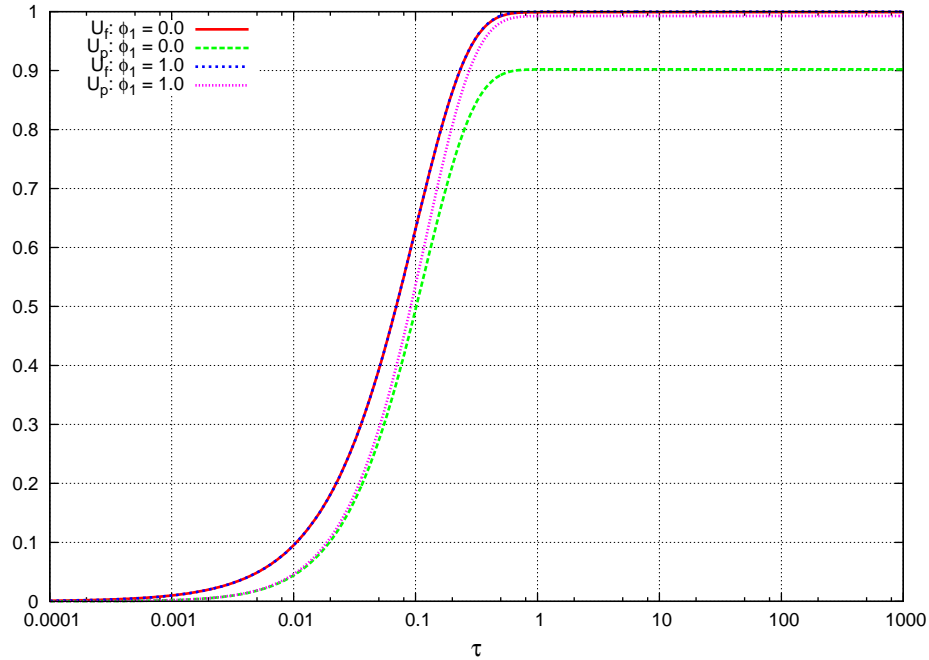


Figura 6.10: Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Reacción para $\alpha = 1.0$, Módulo de Thiele = 2.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$.

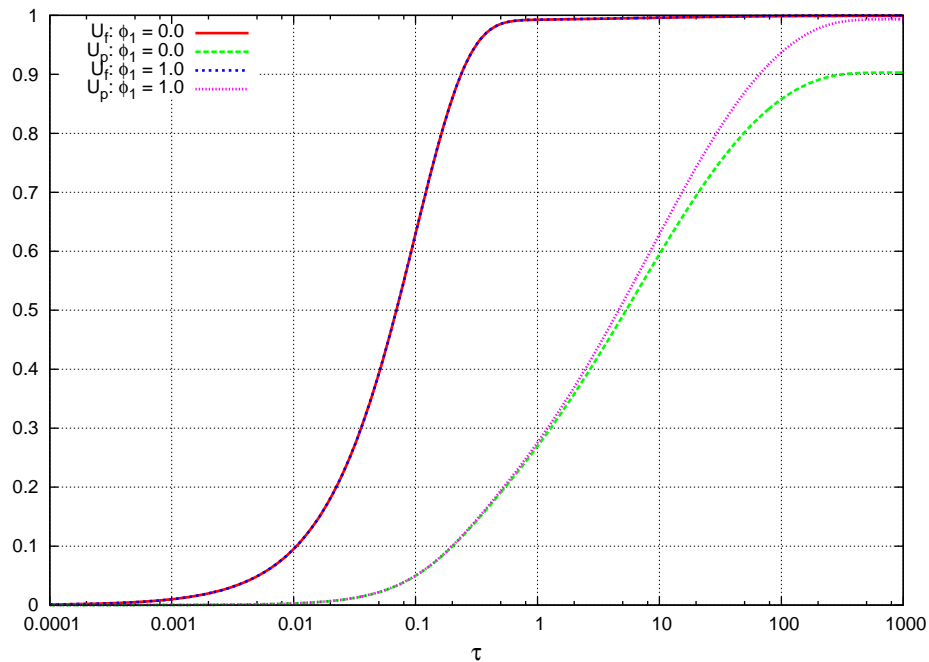


Figura 6.11: Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Reacción para $\alpha = 1,000.0$, Módulo de Thiele = 2.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$.

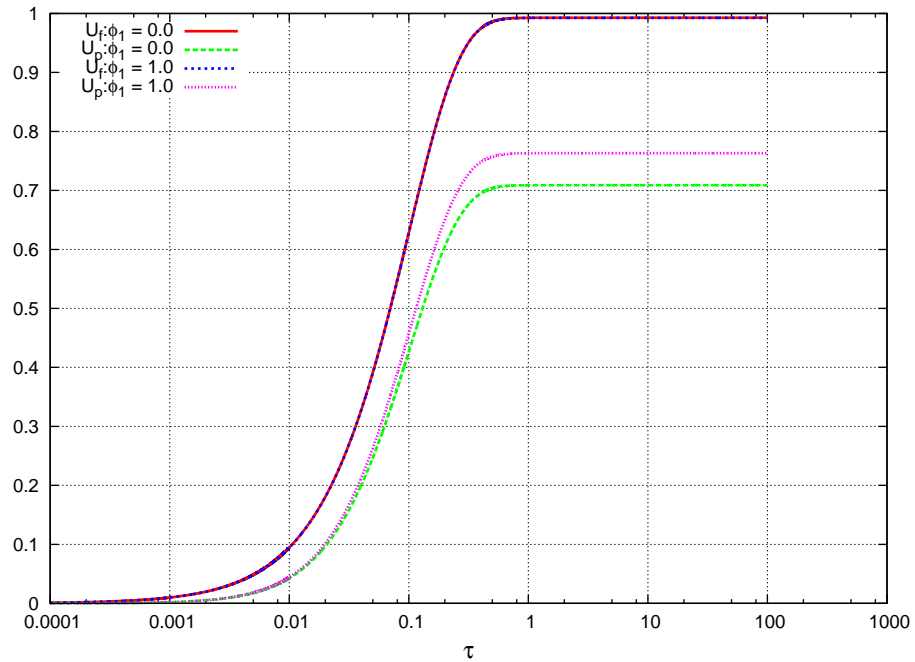


Figura 6.12: Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Reacción para $\alpha = 1.0$, Módulo de Thiele = 5.0 , $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$.

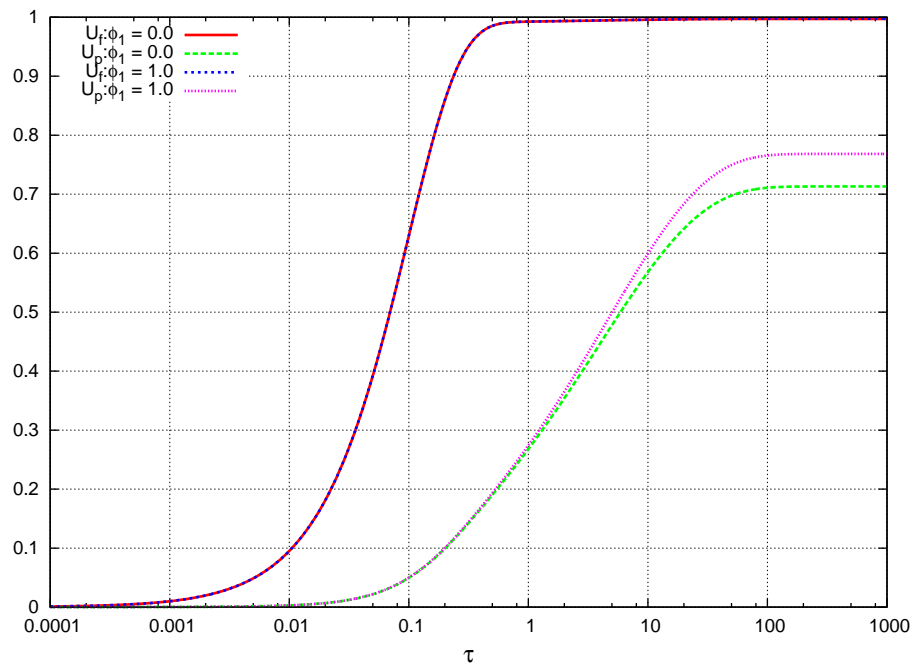


Figura 6.13: Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Reacción para $\alpha = 1,000.0$, Módulo de Thiele = 5.0 , $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$

en ambas concentraciones se observa un valor en la concentración mayor a 0.0 en un $\tau = 0.002$, ambas concentraciones crecen casi paralelamente hasta que la concentración del *Caso CR02* donde se considera el coeficiente de salto de reacción, presenta valores mayores en la concentración respecto al tiempo. Ambos perfiles de concentración presentan el valor máximo en $\tau = 0.8$. El valor máximo de concentración alcanzado corresponde al *Caso CR02* donde $\phi_1 = 1.0$, con un valor muy cercano a 1.0, para el *Caso CR01* el valor máximo de concentración es 0.9. La diferencia en el valor de concentración máxima que existe entre ambos perfiles es alrededor de 0.1.

En la Figura 6.11, se observa el mismo comportamiento del perfil del fluido en comparación con la figura anterior. El comportamiento de la partícula presenta diferencias considerables. Ambas concentraciones crecen en valores cercanos a $\tau = 0.02$ y crecen paralelamente hasta $\tau = 2.0$, el perfil de concentración del *Caso CR04* alcanza valores de concentración más altos respecto al tiempo en comparación con el *Caso CR03*, donde $\phi_1 = 0.0$. El valor máximo es alcanzado en valores cercanos a $\tau = 500.0$, la diferencia entre ambas concentraciones es nuevamente de 0.1, dato que se esperaba observar. El efecto del coeficiente de adsorción nuevamente es observado por el desplazamiento en los perfiles de la concentración de la partícula para alcanzar su valor máximo debido a que la adsorción es mayor, sin embargo, el valor de las concentraciones alcanzadas en su valor máximo es el mismo.

En la Figura 6.12 se presentan los *Casos CR05* y *CR06* donde $\alpha = 1.0$ y en la Figura 6.13 los *Casos CR07* y *CR08* donde $\alpha = 1,000.0$, los cuatro casos presentan un valor en el Módulo de Thiele para $\Phi = 5.0$.

En las Figuras 6.12 y 6.13, los perfiles de la concentración de la partícula, sí presentan diferencias en los valores de concentración respecto al tiempo, se observa una diferencia con valores mayores para la concentración que sí considera el Coeficiente de Salto, *Casos CR06* y *CR08*, la concentración donde $\phi_1 = 1.0$, tiene un valor máximo muy cercano a 0.77 y para los *Casos CR05* y *CR07* donde $\phi_1 = 0.0$, se observa un valor máximo aproximadamente de 0.71, es decir, existe una diferencia entre ambas concentraciones aproximadamente de 0.06 para el valor máximo de concentración a partir de un valor de $\tau = 1.0$.

El efecto del coeficiente de salto de reacción en el modelo del Tanque Agitado fue posible apreciarlo en la concentración de la partícula debido a las diferencia en los valores de concentración. La diferencia mayor en el valor de la concentración de la partícula se observó

para los casos donde el Módulo de Thiele = 2.0, con un valor aproximadamente de 0.1, para los casos donde el Módulo de Thiele = 5.0, se obtuvo una diferencia aproximada de 0.06 de concentración.

En la Tabla 6.9 se presentan valores de concentración del fluido a diferentes valores de tiempo para los cuatro primeros casos. La tabla muestra valores muy semejantes en todos los casos presentados cuando $\Phi = 2.0$. Se observa un ligero desplazamiento en los valores para los *Casos CR03* y *CR04*, esto se debe al valor del Coeficiente de Adsorción. Para los *Casos CR01* y *CR02*, el valor de la concentración en $\tau = 10.0$, es muy similar al obtenido por la solución en estado estacionario, sin embargo, para los *Casos CR03* y *CR04*, la diferencia de concentración entre dichos valores en el tiempo es mayor. El *Caso CR03* alcanza el valor obtenido presentado por U_f^{ss} en un $\tau = 470.0$, y para el *Caso CR04* alcanza el valor obtenido presentado por U_f^{ss} en $\tau = 740.0$, es decir, la solución obtenida en estado estacionario, permite predecir los valores de concentración en el tiempo de forma muy acertada, es necesario considerar el efecto producido por el Coeficiente de Adsorción que desplaza en el tiempo el valor máximo de concentración a obtener para obtener una buena aproximación.

Se obtuvo una diferencia promedio en los valores de concentración del fluido entre los *Casos CR01* y *CR02* de 0.00057, para los *Casos CR03* y *CR04* la diferencia promedio obtenida es 0.00022.

Tabla 6.9: Para el Tanque Agitado Continuo, comparativo de la concentración del fluido a diferentes valores de tiempo para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 2.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$.

Criterios	$\alpha = 1.0$		$\alpha = 1,000.0$	
	Caso CR01 $\phi_1 = 0.0$	Caso CR02 $\phi_1 = 1.0$	Caso CR03 $\phi_1 = 0.0$	Caso CR04 $\phi_1 = 1.0$
$\tau = 0.001$	0.00995	0.00995	0.00995	0.00995
$\tau = 0.010$	0.09513	0.09514	0.09512	0.09512
$\tau = 0.100$	0.63140	0.63155	0.62965	0.62965
$\tau = 1.000$	0.99898	0.99988	0.99259	0.99264
$\tau = 10.00$	0.99903	0.99993	0.99527	0.99630
U_f^{ss}	0.99903	0.99993	0.99903	0.99993

En la Tabla 6.10 se presentan valores de concentración de la partícula para valores específicos de tiempo para los casos donde el Módulo de Thiele = 2.0. Se observan valores mayores en la concentración para los casos donde se considera el Coeficiente de Salto de Reacción en comparación con los casos donde $\phi_1 = 0.0$.

Se observa que los valores de concentración para $\tau = 10.0$ y U_p^{ss} para los *Casos CR01* y *CR02* son iguales, sin embargo, se observan diferencias considerables para los *Casos CR03* y *CR04*, se reportan valores mayores de concentración en U_p^{ss} . Para el *Caso CR03*, en $\tau = 670.0$ se alcanza el valor de 0.90209, valor obtenido para la concentración de la partícula en estado estacionario y para el *Caso CR04* en $\tau = 450.0$, se obtiene el valor de 0.99252, el mismo valor para U_p^{ss} . El desplazamiento del valor alcanzado para la concentración de la partícula en el estado estacionario se debe al efecto del Coeficiente de Adsorción.

La diferencia promedio obtenida entre los *Casos CR01* y *CR02* es de 0.04486, para los *Casos CR03* y *CR04* la diferencia promedio obtenida es 0.00681.

Tabla 6.10: Para el Tanque Agitado Continuo, comparativo para la concentración en la partícula en $\xi = 1$ a diferentes tiempos para los cuatro primeros casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 2.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$.

Criterios	$\alpha = 1.0$		$\alpha = 1,000.0$	
	Caso CR01 $\phi_1 = 0.0$	Caso CR02 $\phi_1 = 1.0$	Caso CR03 $\phi_1 = 0.0$	Caso CR04 $\phi_1 = 1.0$
$\tau = 0.001$	0.00199	0.00202	0.00023	0.00023
$\tau = 0.010$	0.04416	0.04618	0.00291	0.00291
$\tau = 0.100$	0.49504	0.53643	0.04969	0.05002
$\tau = 1.000$	0.90202	0.99243	0.26943	0.27565
$\tau = 10.00$	0.90209	0.99252	0.59494	0.62899
U_p^{ss}	0.90209	0.99252	0.90209	0.99252

En la Tabla 6.11 se observan los valores de la concentración en el fluido para $\Phi = 5.0$, los valores reportados en la tabla son menores en comparación con los valores de la Tabla 6.9 donde $\Phi = 2.0$, esto se debe al consumo de reactante por tratarse de una reacción más rápida. Los valores de concentración reportados para los cuatro casos con diferentes valores de α son muy similares. Los valores obtenidos para la concentración en estado estacionario, son muy semejantes para $\tau = 10.0$. La diferencia promedio obtenida entre los *Casos CR05*

y *CR06* es de 0.00382, para los *Casos CR07* y *CR08* la diferencia promedio obtenida es 0.0004.

Tabla 6.11: Para el Tanque Agitado Continuo, comparativo para la concentración del fluido a diferentes tiempos para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 5.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$.

Criterios	$\alpha = 1.0$		$\alpha = 1,000.0$	
	Caso CR05 $\phi_1 = 0.0$	Caso CR06 $\phi_1 = 1.0$	Caso CR07 $\phi_1 = 0.0$	Caso CR08 $\phi_1 = 1.0$
$\tau = 0.001$	0.00991	0.00990	0.00995	0.00995
$\tau = 0.010$	0.09471	0.09464	0.09512	0.09512
$\tau = 0.100$	0.62837	0.62800	0.62965	0.62965
$\tau = 1.000$	0.99266	0.99243	0.99257	0.99257
$\tau = 10.00$	0.99270	0.99247	0.99570	0.99570
U_f^{ss}	0.99715	0.99770	0.99715	0.99770

La Tabla 6.12 muestra los valores de la concentración de la partícula en valores de tiempo específicos cuando $\Phi = 5.0$. Para los *Casos CR07* y *CR08* se presentan valores menores de concentración con respecto a los *Casos CR05* y *CR06* debido al Coeficiente de Adsorción. Los valores de concentración mayores en los diferentes tiempos se observan en los *Casos CR06* y *CR08* que son los casos donde el Coeficiente de Salto de Reacción es considerado, es decir, $\phi_1 = 1.0$

La diferencia promedio obtenida entre los *Casos CR05* y *CR06* es de 0.02818, para los *Casos CR07* y *CR08* la diferencia promedio obtenida es 0.000006.

La diferencia promedio entre los valores de los casos reportados para la concentración del fluido y la partícula en el tiempo, fue mayor en los casos donde $\alpha = 1.0$, la diferencia promedio para los casos donde $\alpha = 1,000.0$ es muy poco significativa. La diferencia promedio mayor obtenida fue mayor cuando el valor de el Módulo de Thiele es $= 2.0$. Es decir, en el modelo de Tanque Agitado se logró ver mayor efecto en el Coeficiente de Salto de Reacción cuando no se considera el efecto de adsorción y cuando se tiene una reacción moderada.

Efecto en el Reactor tipo Batch

Para el análisis en el Reactor tipo Batch, es necesario modificar los valores de los

Tabla 6.12: Para el Tanque Agitado Continuo, comparativo para la concentración en la partícula en $\xi = 1$ a diferentes tiempos para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 5.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$.

Criterios	$\alpha = 1.0$		$\alpha = 1,000.0$	
	Caso CR05	Caso CR06	Caso CR07	Caso CR08
	$\phi_1 = 0.0$	$\phi_1 = 1.0$	$\phi_1 = 0.0$	$\phi_1 = 1.0$
$\tau = 0.001$	0.00194	0.00197	0.00023	0.00023
$\tau = 0.010$	0.04257	0.04440	0.00290	0.00290
$\tau = 0.100$	0.42662	0.45714	0.04969	0.04966
$\tau = 1.000$	0.70874	0.76300	0.26792	0.26792
$\tau = 10.00$	0.70877	0.76303	0.56795	0.56795
U_p^{ss}	0.71223	0.76743	0.71223	0.76743

parámetros que están relacionados con el intercambio en el fluido, ψ_p y ψ_{in} y la concentración inicial del fluido, U_{f0} . Los parámetros que permanecen constantes para realizar los experimentos simulando un Reactor tipo Batch son los siguientes:

$$\psi_p = 0.9, \quad \psi_{in} = 0.001, \quad \tau_0 = 0.0, \quad U_{f0} = 1.0, \quad U_{p0} = 0.0, \quad Biot = 10.0$$

Los perfiles de concentración obtenidos para la concentración del fluido y la partícula para el Reactor tipo Batch utilizando un Módulo de Thiele, $\Phi = 2.0$ se muestran Figura 6.14, para los primeros dos casos con la función de entrada tipo escalón y el perfil de concentración para los casos donde $\alpha = 1,000.0$ se muestran en la Figura 6.15.

Es importante recordar que en este tipo de reactor se tiene una concentración inicial en el fluido, es decir $U_{f0} = 1.0$, por tal motivo, las concentraciones en el fluido a diferencia del tanque agitado comienzan en un tiempo inicial con un valor de 1.0. Una diferencia importante en los parámetros es $\psi_p = 0.9$ que indica que existe mayor intercambio de masa entre el fluido y la partícula. El $\psi_{in} = 0.001$ corresponde al tiempo de residencia para un Reactor tipo Batch.

En la Figura 6.14 se presenta el modelado de los *Casos CR01* y *CR02*. Se observa que el Reactor tipo Batch posee un comportamiento muy diferente en comparación con el Tanque Agitado. Los perfiles de concentración del fluido inician en valores cercanos a 0.96 debido

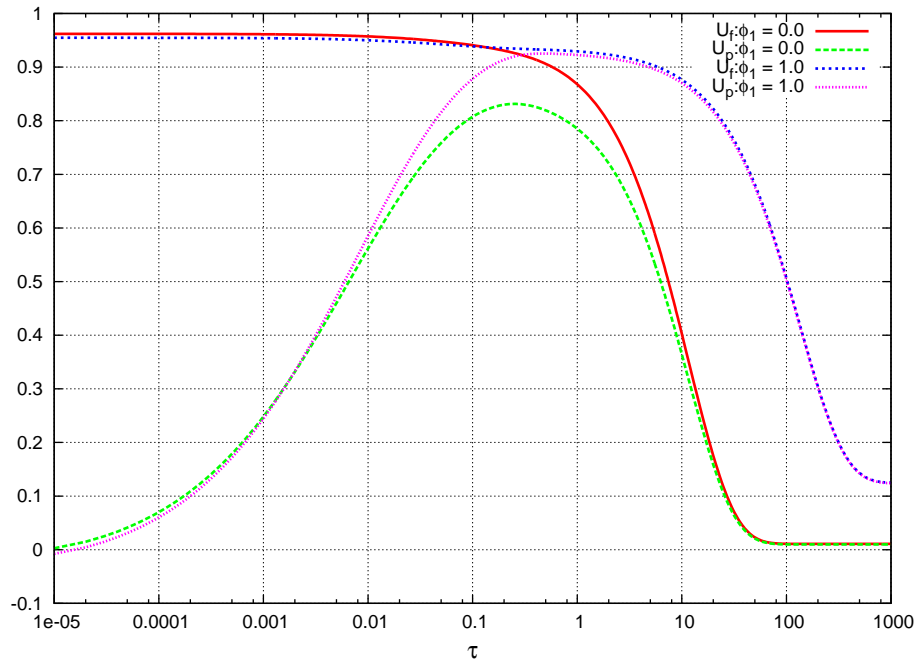


Figura 6.14: Para el Reactor tipo Batch, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Reacción para $\alpha = 1.0$, Módulo de Thiele = 2.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$.

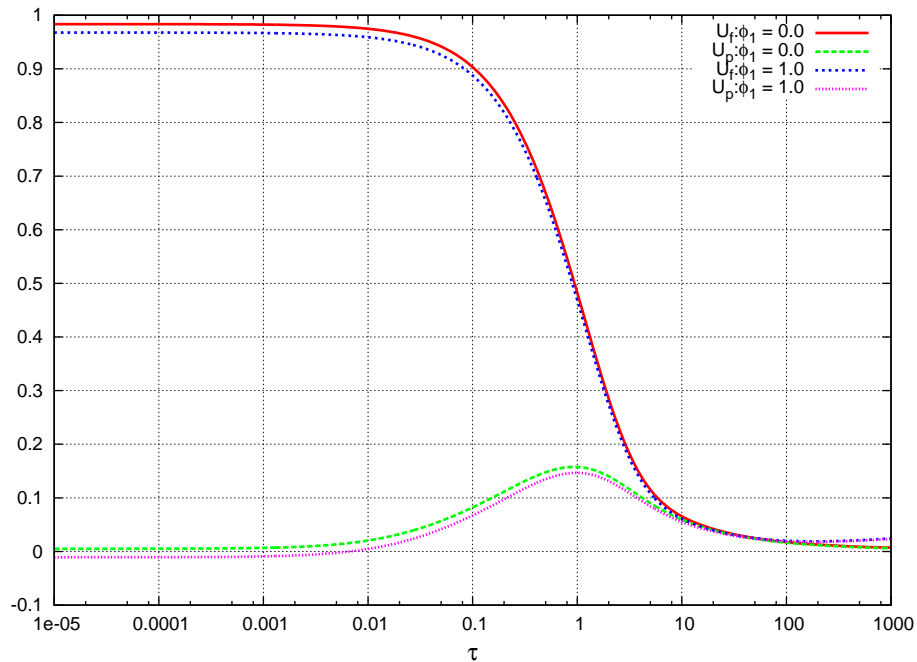


Figura 6.15: Para el Reactor tipo Batch, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para el Coeficiente de Salto de Reacción para: $\alpha = 1,000.0$, Módulo de Thiele = 2.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$

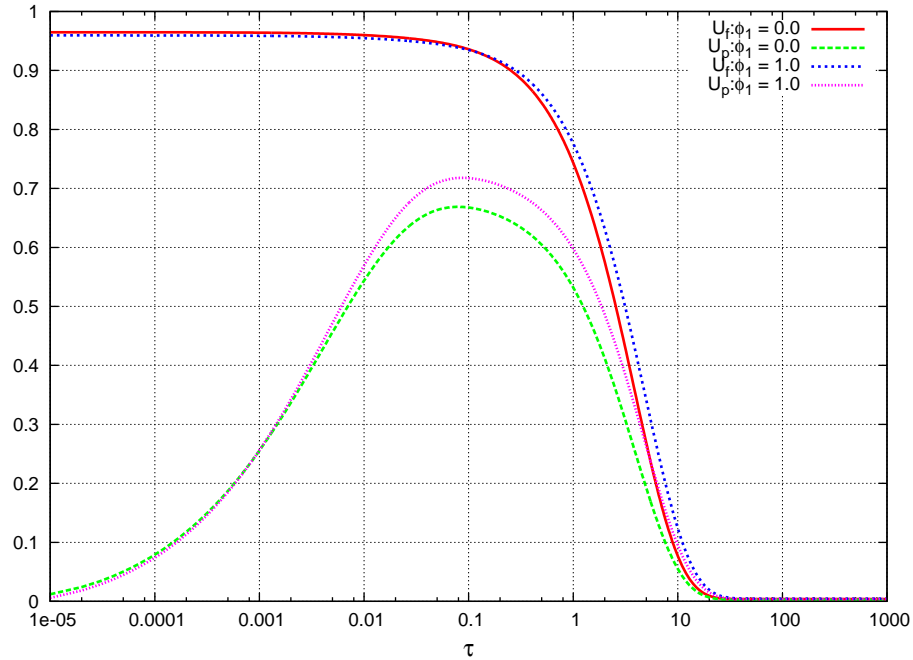


Figura 6.16: Para el Reactor tipo Batch, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Reacción para $\alpha = 1.0$, Módulo de Thiele = 5.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$.

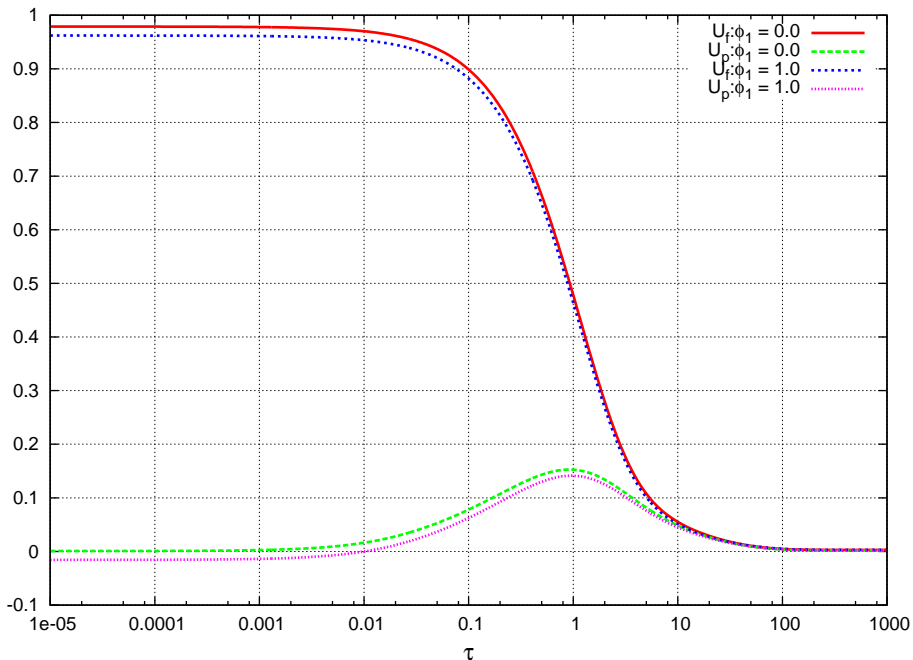


Figura 6.17: Para el Reactor tipo Batch, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para el Coeficiente de Salto de Reacción para: $\alpha = 1,000.0$, Módulo de Thiele = 5.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$

a que $U_{f0} = 1.0$. En la figura se observan diferencias en el comportamiento para ambos perfiles, para la concentración en el fluido y la partícula. Para el perfil de concentración del fluido, se observa que los valores del perfil para la concentración respecto al tiempo cuando $\phi_1 = 0.0$ son menores en comparación con el perfil de concentración cuando se considera el Coeficiente de Reacción. En la figura se observa que ambos perfiles de concentración en el fluido se comportan de forma muy similar, el comportamiento es casi paralelo hasta $\tau = 0.2$ donde los perfiles se separan, en la concentración del fluido del *Caso CR01* disminuyen los valores de la concentración respecto al tiempo, mientras que la concentración del fluido del *Caso CR02* comienza a disminuir los valores de concentración en valores muy cercanos a $\tau = 10.0$.

El comportamiento de los perfiles de la partícula también muestran diferencias notorias conforme se incrementa el valor del tiempo. Ambos perfiles tienen un comportamiento muy similar a la figura de una campana, ambos se comportan casi de forma paralela hasta $\tau = 0.01$, a partir de ese tiempo, los perfiles se modifican, para el *Caso CR01*, se alcanza un valor máximo de concentración cercano a 0.84 en $\tau = 0.3$ aproximadamente, el perfil de concentración del *Caso CR02* alcanza su valor máximo de concentración de 0.92, también en un valor aproximado a $\tau = 0.3$.

Los valores finales en $\tau = 1,000.0$ para el perfil de concentración del fluido y la partícula del *Caso CR01* tienden a un valor cercano a 0.0. El valor del para $\tau = 1,000.0$ para la concentración del fluido y la partícula del *Caso CR02* es aproximadamente de 0.12.

En la Figura 6.15 se presenta el modelado de los *Casos CR03* y *CR04*. A diferencia de la figura anterior, se observa que los comportamientos en el perfil de la concentración del fluido y la partícula muy similares, para estos dos casos, el valor del Coeficiente de Adsorción, $\alpha = 1,000.0$. Los perfiles de concentración del fluido se comportan casi paralelamente, ambos descienden los valores en el tiempo drásticamente en $\tau = 0.1$, en $\tau = 1.0$, llegan a un valor de concentración de 0.5. Es posible observar una tendencia de la concentración a un valor cercano a 0.2, valor que permanece constante a partir de $\tau = 100.0$. Es posible apreciar que el perfil para el *Caso CR03* presenta valores ligeramente mayores de concentración.

El comportamiento del perfil de concentración de la partícula conserva la forma de campana pero es mucho más pequeña, alcanza un valor máximo de concentración aproximadamente de 0.16 en $\tau = 1.0$, a partir de dicho punto, el valor de la concentración desciende con

una tendencia a 0.0 en $\tau = 1,000.0$. Es posible distinguir que existe una diferencia en los valores de concentración, donde el *Caso CR03*, presenta los valores ligeramente mayores.

Los perfiles de concentración obtenidos para la concentración del fluido y la partícula para el Reactor tipo Batch utilizando un Módulo de Thiele, $\Phi = 5.0$ se muestran Figura 6.16, para los primeros dos casos con la función de entrada tipo escalón y el perfil de concentración para los casos donde $\alpha = 1,000.0$ se muestran en la Figura 6.17.

Para los cuatro siguientes casos a observar donde el Módulo de Thiele tiene un valor de 5.0, los valores en los perfiles de concentración del fluido y la partícula, son muy similares. En la Figura 6.16 se muestran los *Casos CR05* y *CR06*. Los perfiles de concentración lucen casi paralelos en sus valores respecto al tiempo, inicialmente el valor de concentración para el *Caso CR05* es ligeramente mayor en comparación con el *Caso CR06* hasta que el valor de concentración descende en un tiempo aproximado de $\tau = 0.1$, a partir de dicho valor en el tiempo, el valor de la concentración para el *Caso CR06* es ligeramente mayor, ambos casos tienden a un valor final de 0.0 en un $\tau = 12.0$.

La Figura 6.17 se presentan los *Casos CR07* y *CR08* es muy similar a la Figura 6.15, ambas tienen un valor del Coeficiente de Adsorción, $\alpha = 1,000.0$. El comportamiento de los perfiles de concentración en el fluido y la partícula con casi los mismos. El perfil de concentración del fluido no muestra diferencias notorias en la imagen. El perfil de concentración del fluido en tiempos pequeños comienza en 0.98 y permanece casi constante hasta aproximadamente $\tau = 0.01$, a partir de dicho valor en el tiempo, los valores para la concentración descienden con una tendencia a 0.0, dicho valor se alcanza en $\tau = 100.0$.

El perfil de concentración de la partícula es casi el mismo, es posible distinguir una pequeña diferencia en el tiempo inicial, el perfil de concentración para el *Caso CR07* se observa con valores ligeramente menores que el *Caso CR08* en tiempos pequeños, ambos perfiles inician con un valor muy cercano a cero, permanecen constantes hasta $\tau = 0.007$ y a partir de dicho valor en el tiempo, los valores de concentración de ambos perfiles se incrementan hasta a llegar a un máximo valor en $\tau = 1.0$ de 0.15, descende rápidamente el valor de la concentración con tendencia a 0.0, valor que alcanza en $\tau = 100.0$.

En la Tabla 6.13 se observan los valores de concentración del fluido respecto al tiempo para los *Casos CR01* a *CR04*. La tabla sirve como un complemento y una confirmación del comportamiento de los perfiles de concentración del fluido de la Figuras 6.14 y 6.15 . Para

los *Casos CR01* y *CR02*, existe muy poca diferencia en los valores de concentración hasta $\tau = 10.0$ donde los perfiles se separan y se observa un valor menor de concentración para el *Caso CR01*. Para los *Casos CR03* y *CR04*, los valores de concentración de los perfiles son prácticamente los mismos.

Los casos que presentaron menores diferencias para los valores de concentración para el estado estacionario, U_f^{ss} y $\tau = 100.00$ fueron los *Casos CR01* y *CR03*

La diferencia promedio obtenida entre los valores del perfil de concentración del fluido para los valores de tiempo reportados en la tabla, *Casos CR01* y *CR02* es de 0.16899, para los *Casos CR03* y *CR04* la diferencia promedio obtenida es 0.01052.

Tabla 6.13: Para el Reactor tipo Batch, comparativo de para la concentración del fluido a diferentes tiempos para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 2.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$.

Criterios	$\alpha = 1.0$		$\alpha = 1,000.0$	
	Caso CR01 $\phi_1 = 0.0$	Caso CR02 $\phi_1 = 1.0$	Caso CR03 $\phi_1 = 0.0$	Caso CR04 $\phi_1 = 1.0$
$\tau = 0.001$	0.96130	0.95395	0.98257	0.96679
$\tau = 0.010$	0.95721	0.95002	0.97476	0.95897
$\tau = 0.100$	0.94085	0.93858	0.90342	0.88766
$\tau = 1.000$	0.86804	0.92933	0.48283	0.46896
$\tau = 10.00$	0.40294	0.87666	0.06560	0.06107
$\tau = 100.00$	0.01104	0.50676	0.01742	0.02004
U_f^{ss}	0.01132	0.13043	0.01132	0.13043

En la Tabla 6.14 se observan los valores de concentración del fluido respecto al tiempo para los *Casos CR01* a *CR04*. El *Caso CR01* presentó valores de concentración menores en comparación con el *Caso CR02*. Los *Casos CR03* y *CR04* presentaron valores más similares de concentración en el tiempo.

Los casos que presentaron menores diferencias para los valores de concentración para el estado estacionario, U_p^{ss} y $\tau = 100.00$ fueron los *Casos CR01* y *CR03*. El *Caso CR02* fue el caso que presentó mayores diferencias.

La diferencia promedio obtenida entre los valores del perfil de concentración para la

partícula para los valores de tiempo reportados en la tabla *Casos CR01* y *CR02* es de 0.20482, para los *Casos CR03* y *CR04* la diferencia promedio obtenida es 0.00045.

Tabla 6.14: Para el Reactor tipo Batch, comparativo de para la concentración en la partícula en $\xi = 1$ a diferentes tiempos para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 2.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$.

Criterios	$\alpha = 1.0$		$\alpha = 1,000.0$	
	Caso CR01	Caso CR02	Caso CR03	Caso CR04
	$\phi_1 = 0.0$	$\phi_1 = 1.0$	$\phi_1 = 0.0$	$\phi_1 = 1.0$
$\tau = 0.001$	0.24815	0.24433	0.00674	-0.00911
$\tau = 0.010$	0.56164	0.58717	0.02045	0.00468
$\tau = 0.100$	0.80731	0.87813	0.08221	0.06718
$\tau = 1.000$	0.78516	0.92257	0.15756	0.14669
$\tau = 10.00$	0.36446	0.87029	0.05946	0.05526
$\tau = 100.0$	0.00997	0.50306	0.01625	0.01894
U_p^{ss}	0.01022	0.12946	0.01022	0.12946

En la Tabla 6.15 se observan los valores de concentración del fluido respecto al tiempo para los *Casos CR05* a *CR08*.

Para los *Casos CR05* y *CR06*, se observan valores de concentración menores para el *Caso CR05* en todos los tiempos reportados. Para los *Casos CR07* y *CR08*, los valores de concentración de los perfiles son prácticamente los mismos.

Los cuatro casos que presentados reportan valores de concentración de muy poca diferencia ente el valor en tiempo para el estado estacionario, U_f^{ss} y $\tau = 100.00$.

La diferencia promedio obtenida entre los valores del perfil de concentración del fluido para los valores de tiempo reportados en la tabla *Casos CR05* y *CR06* es de 0.01142, para los *Casos CR07* y *CR08* la diferencia promedio obtenida es 0.01139.

En la Tabla 6.16 se observan los valores de concentración del fluido respecto al tiempo para los *Casos CR05* a *CR08*.

Los *Casos CR05* y *CR06* presentaron diferencias en los valores de concentración respecto al tiempo, para los *Casos CR07* y *CR08*, la diferencia es ligeramente menor en los valores de concentración. También para estos casos se observan valores muy bajos de concentración,

Tabla 6.15: Para el Reactor tipo Batch, comparativo de para la concentración del fluido a diferentes tiempos para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 5.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$.

Criterios	$\alpha = 1.0$		$\alpha = 1,000.0$	
	Caso CR05 $\phi_1 = 0.0$	Caso CR06 $\phi_1 = 1.0$	Caso CR07 $\phi_1 = 0.0$	Caso CR08 $\phi_1 = 1.0$
$\tau = 0.001$	0.96409	0.95876	0.97797	0.96124
$\tau = 0.010$	0.95994	0.95478	0.97016	0.95343
$\tau = 0.100$	0.93598	0.93470	0.89885	0.88218
$\tau = 1.000$	0.74344	0.77613	0.47823	0.46371
$\tau = 10.00$	0.07695	0.12369	0.05520	0.05119
$\tau = 100.0$	0.00374	0.00460	0.00469	0.00502
U_f^{ss}	0.00387	0.00479	0.00387	0.00479

aunque los datos son parecidos a los *Casos CR03* y *CR04*, se observan valores menores debido a que el Módulo de Thiele = 5.0. En el *Caso CR04*, se registran dos valores negativos para los tiempos $\tau = 0.001$ y $\tau = 0.010$.

Los casos que presentaron menores diferencias para los valores de concentración para el estado estacionario, U_p^{ss} y $\tau = 100.00$ fueron los *Casos CR01* y *CR04*. El *Caso CR02* fue el caso que presentó mayores diferencias.

La diferencia promedio obtenida entre los valores del perfil de concentración para la partícula para los valores de tiempo reportados en la Tabla 6.16 fueron: Para los *Casos CR05* y *CR06* de 0.03051, para los *Casos CR07* y *CR08* la diferencia promedio obtenida es 0.01048.

En el sistema multifásico modelando al Reactor tipo Batch se observó que para un valor del Coeficiente de Adsorción grande, $\alpha = 1,000.0$, no fue posible observar el efecto del Coeficiente de Salto de Reacción, ϕ_1 en el perfil de concentración del fluido ni de la partícula.

El efecto mayor del Coeficiente de Salto de Reacción, ϕ_1 sobre el perfil de concentración del fluido y la partícula fue posible observarlo en la Figura ?? que corresponde a los *Casos CR01* y *CR02* donde $\alpha = 1.0$ y $\Phi = 2.0$, el efecto se observa también aunque en menor medida en la Figura 6.16 para los *Casos CR05* y *CR06* donde $\alpha = 1.0$ y $\Phi = 5.0$

Tabla 6.16: Para el Reactor tipo Batch, comparativo de para la concentración en la partícula en $\xi = 1$ a diferentes tiempos para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 5.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$.

Criterios	$\alpha = 1.0$		$\alpha = 1,000.0$	
	Caso CR05	Caso CR06	Caso CR07	Caso CR08
	$\phi_1 = 0.0$	$\phi_1 = 1.0$	$\phi_1 = 0.0$	$\phi_1 = 1.0$
$\tau = 0.001$	0.25559	0.25632	0.00262	-0.01383
$\tau = 0.010$	0.54357	0.56912	0.01633	-0.00003
$\tau = 0.100$	0.66766	0.71755	0.07806	0.06247
$\tau = 1.000$	0.53199	0.59795	0.15251	0.14129
$\tau = 10.00$	0.05506	0.09529	0.04861	0.04500
$\tau = 100.0$	0.00267	0.00335	0.00355	0.00390
U_p^{ss}	0.00277	0.00369	0.00277	0.00369

Para los *Casos CR01* y *CR02*, el efecto del Coeficiente de Salto de Reacción se observó en el perfil de la concentración del fluido y la partícula, los datos de menor valor en la concentración respecto al tiempo fueron para el *Caso CR01*. En $\tau = 1,000.0$ para el perfil de concentración del fluido se encontró una diferencia importante en los valores de concentración, 0.11396, es decir, al despreciar el Coeficiente de Salto de Reacción el porcentaje del valor de concentración que se está considerando es de 91.28%, ϕ_1 La diferencia de valores para la partícula es 0.11501 y el porcentaje de valor en la concentración que se está considerando es de: 91.13%.

6.4.2 Coeficiente de Salto de Adsorción

El coeficiente de adsorción contenido en la condición de frontera se identifica: ϕ_2 , al igual que en la evaluación de ϕ_1 , se trabaja con valor de $Biot = 10.0$ donde no existe resistencia a la transferencia de masa. El Módulo de Thiele continua con los dos valores propuestos: $\Phi = 2.0$ y $\Phi = 5.0$. Se desea conocer si existe algún tipo de relación entre el Módulo de Thiele y el Coeficiente de Adsorción en el efecto del Coeficiente de Salto de Adsorción para los casos donde no existe resistencia a la transferencia de masa.

Los experimentos propuestos modificando el valor del Coeficiente de Adsorción con Módulo

de Thiele = 2.0 son:

Experimentos con un valor de $\alpha = 1.0$:

Caso CA01: $\phi_2 = 0.0$

Caso CA02: $\phi_2 = 1.0$

Experimentos con un valor de $\alpha = 1,000.0$:

Caso CA03: $\phi_2 = 0.0$

Caso CA04: $\phi_2 = 1.0$

Los experimentos propuestos modificando el valor del Coeficiente de Adsorción con Módulo de Thiele = 5.0 son:

Experimentos con un valor de $\alpha = 1.0$:

Caso CA05: $\phi_2 = 0.0$

Caso CA06: $\phi_2 = 1.0$

Experimentos con un valor de $\alpha = 1,000.0$:

Caso CA07: $\phi_2 = 0.0$

Caso CA08: $\phi_2 = 1.0$

Dichos experimentos son para ambos sistemas multifásicos.

Efecto en el Tanque Agitado

Para el Tanque Agitado se fijan los siguientes parámetros:

$$\psi_p=0.1, \quad \psi_{in}= 10.0, \quad \tau_0=0.0, \quad U_{f0}=0.0, \quad U_{p0}=0.0, \quad Biot = 10.0, \quad \Phi = 2.0$$

En los siguientes experimentos para el Tanque Agitado, es posible esperar un comportamiento del perfil de la concentración del fluido muy similar al obtenido al modificar el Coeficiente de Salto de Reacción, con muy pocas variaciones, sin embargo, sí se esperan

cambios en el comportamiento del perfil de la concentración de la partícula.

Los perfiles de concentración obtenidos con un valor del Módulo de Thiele = 2.0 para los *Casos CA01* y *CA02* se muestran en la Figura 6.18, posteriormente la Figura 6.19 muestra el comportamiento para los *Casos CA03* y *CA04*, donde $\alpha = 1,000.0$.

En la Figura 6.18, se observan los perfiles de concentración del fluido y la partícula respecto al tiempo. Los perfiles de concentración del fluido muestran un comportamiento muy similar, comportamiento esperado. Ambos perfiles alcanzan su valor máximo de concentración en $\tau = 0.7$, un valor muy cercano a 1.0, no existe diferencia notable entre los valores máximos de los perfiles. En la concentración de partícula, la diferencia de valores es notoria, nuevamente, para valores donde el Coeficiente de Salto de Adsorción es considerado se observa un efecto en la concentración disminuyendo sus valores al adsorber el reactante, es decir, sí existe un efecto al considerar el fenómeno interfacial en la partícula aunque no sea reflejado en la concentración de salida del Tanque Agitado. El valor de concentración máximo para el *Caso CA01* es aproximadamente de 0.9 que tiene lugar en $\tau = 0.7$, para el *Caso CA02* se observa un valor aproximado de 0.53 alcanzado en un valor aproximado de $\tau = 0.7$.

En la Figura 6.19 es posible observar que el efecto de los coeficientes de salto no es significativo sobre la concentración del fluido para los *Casos CA01* y *CA02*. Tampoco es posible observar un efecto significativo para la concentración en la partícula como en la figura anterior, esto posiblemente se debe al valor de $\alpha = 1,000.0$, donde la K_{eq} de adsorción es grande, lo que indica que rápidamente se adsorbe el reactante en el área disponible en la partícula, por lo que el efecto producido por la adsorción es mayor que el efecto producido por el coeficiente de salto de adsorción, o adsorción interfacial.

En la 6.20, se presentan los perfiles de concentración del fluido y la partícula para los *Casos CA05* y *CA06*. El comportamiento del perfil de concentración del fluido es muy similar y no es posible observar una diferencia. El comportamiento del perfil de concentración de la partícula muestra diferencias significativas como en la Figura 6.18. En ambos perfiles se observa que inician con valores muy cercanos a 0.0 y que elevan su valor lentamente, en $\tau = 0.01$ comienzan las diferencias en los perfiles. Para el *Caso CA05* los valores de concentración del perfil son mayores en comparación con el *Caso CA06*, en un valor aproximadamente de $\tau = 0.05$, se alcanza el valor máximo de concentración, un valor de 0.71, a partir de ese

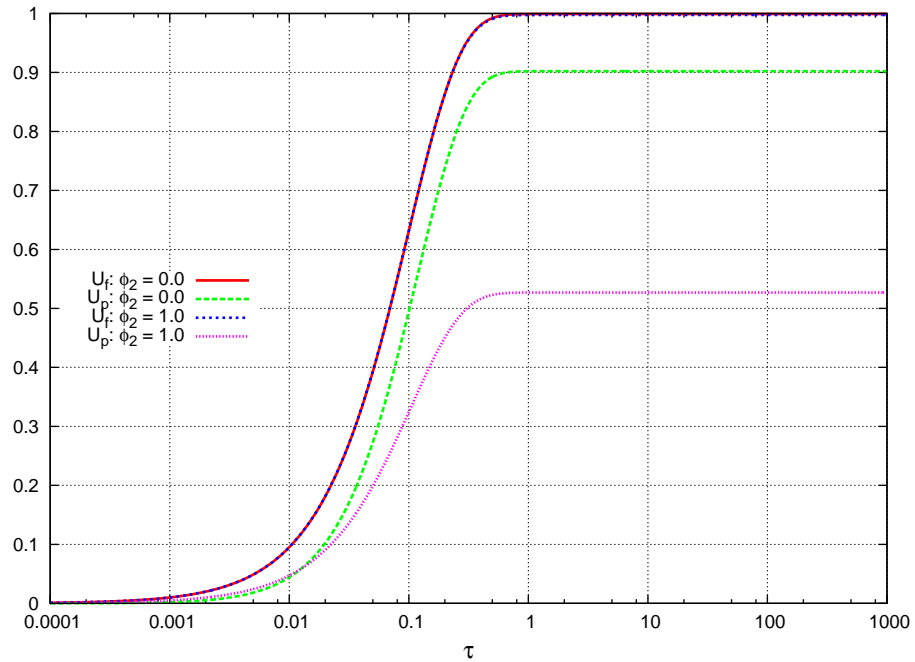


Figura 6.18: Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Adsorción para: $\alpha = 1.0$, Módulo de Thiele = 2.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_1 = 0.0$.

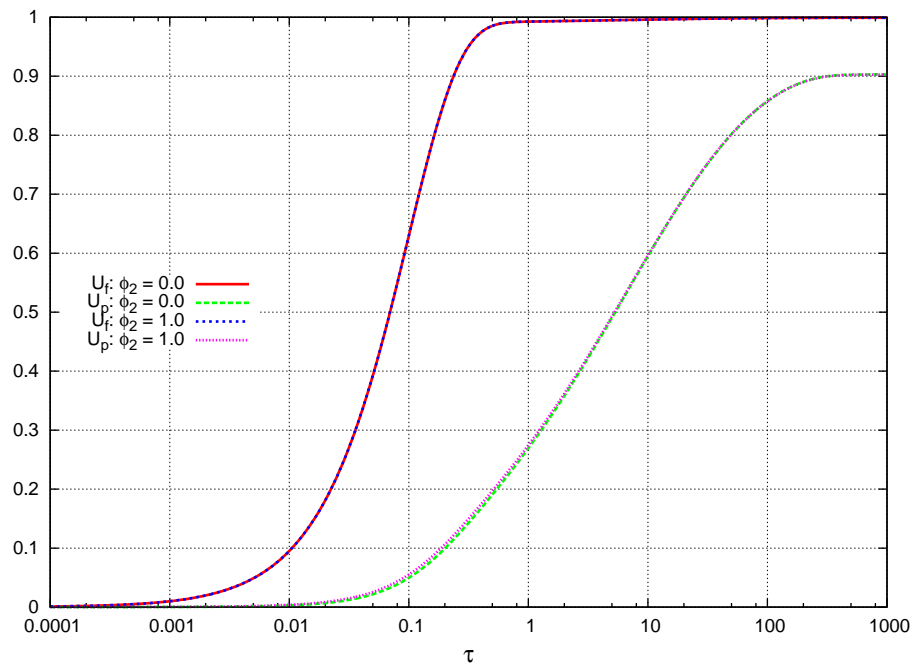


Figura 6.19: Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Adsorción para: $\alpha = 1,000.0$, Módulo de Thiele = 2.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_1 = 0.0$.

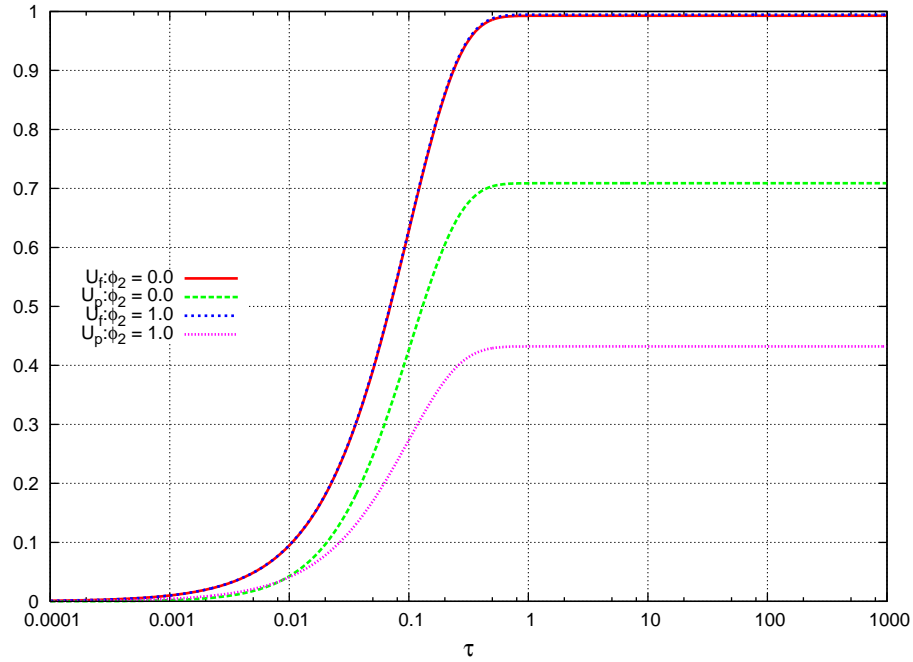


Figura 6.20: Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Adsorción para: $\alpha = 1.0$, Módulo de Thiele = 5.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_1 = 0.0$.

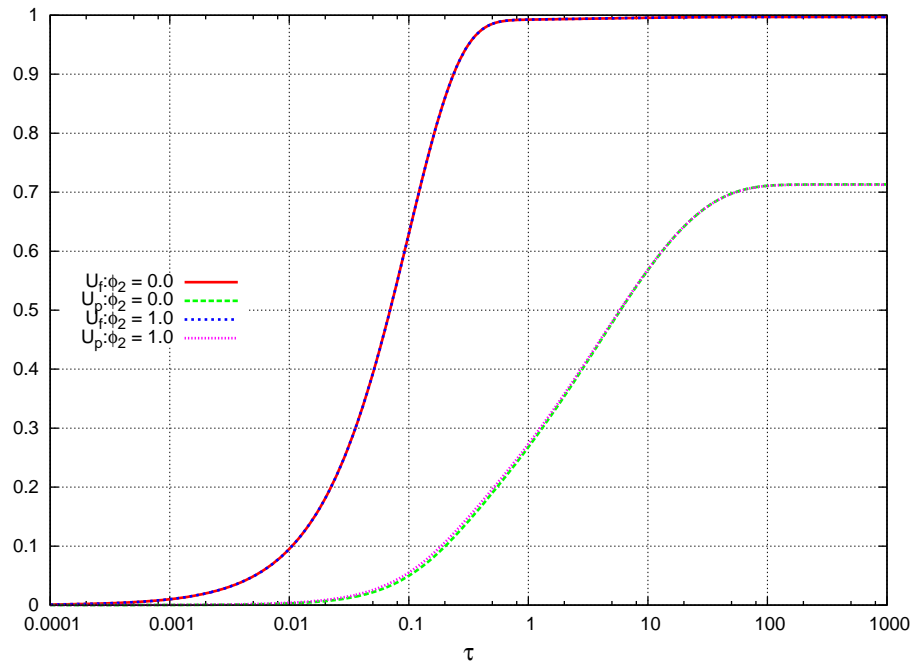


Figura 6.21: Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Adsorción para: $\alpha = 1,000.0$, Módulo de Thiele = 5.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_1 = 0.0$.

tiempo, el valor de la concentración permanece constante. En el *Caso CA06*, se presenta un valor máximo de concentración en $\tau = 0.05$ con un valor aproximadamente cercano a 0.43, el valor de concentración a partir de $\tau = 0.05$, permanece constante.

En la Figura 6.21 se presentan los perfiles de concentración del fluido y la partícula para los *Casos CA07* y *CA08*. Nuevamente, el comportamiento del perfil de concentración del fluido es muy similar y no es posible observar una diferencia. El comportamiento de ambos perfiles es muy similar al de la Figura 6.19. El perfil de concentración de la partícula presenta un comportamiento similar para ambos casos. Ambos perfiles alcanzan un valor máximo que se mantiene constante en $\tau = 70.0$ con un valor aproximado de 0.71. La diferencia de valores de la concentración de la partícula en comparación con la Figura 6.19, se debe al Módulo de Thiele.

En la Tabla 6.17 se presentan valores de concentración del fluido a diferentes tiempos, se comprueba que los valores de concentración son muy parecidos en todos los casos presentados, los valores ligeramente mayores se presentan en los *Casos CR02* y *CR04*, donde $\alpha = 1,000.0$, información que no es posible obtener de la Figuras 6.18 y 6.19 debido a que los perfiles lucen muy semejantes en sus valores. Se obtuvo una diferencia promedio en los valores de concentración del fluido entre los *Casos CR01* y *CR02* es de 0.00045, para los *Casos CR03* y *CR04* la diferencia promedio obtenida es 0.00002.

Tabla 6.17: Para el Tanque Agitado Continuo, comparativo para la concentración del fluido a diferentes tiempos para los cuatro primeros casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 2.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$.

Criterios	$\alpha = 1.0$		$\alpha = 1,000.0$	
	Caso CA01 $\phi_2 = 0.0$	Caso CA02 $\phi_2 = 1.0$	Caso CA03 $\phi_2 = 0.0$	Caso CA04 $\phi_2 = 1.0$
$\tau = 0.001$	0.00995	0.00997	0.00995	0.00995
$\tau = 0.010$	0.09513	0.09534	0.09512	0.09512
$\tau = 0.100$	0.63140	0.63216	0.62965	0.62968
$\tau = 1.000$	0.99898	0.99737	0.99259	0.99264
$\tau = 10.00$	0.99903	0.99741	0.99597	0.99598

En la Tabla 6.18 se presentan valores de concentración en la partícula para diferentes valores de tiempo. En los perfiles de concentración de los *Casos CA01* y *CA02*, es posible

observar una diferencia en los valores que aumenta conforme se incrementa el valor del tiempo a partir de $\tau = 0.10$, por los valores de concentración mostrados en $\tau = 1.0$ y $\tau = 10.0$, se deduce que el perfil ha llegado a un valor máximo que es constante con variaciones despreciables. El comportamiento de la concentración de la partícula en los *Casos CA03* y *CA04*, presenta muy ligeras variaciones en el valor de concentración para los diferentes tiempos, para estos casos, no es posible afirmar que ha llegado a su máximo valor, además se ha utilizado un valor de $\alpha = 1,000.0$ lo que indica que desplaza el perfil de concentración en el tiempo, es decir se requiere de mayor cantidad de tiempo para alcanzar su valor máximo de concentración. Se obtuvo una diferencia promedio en los valores de concentración de la partícula entre los *Casos CR01* y *CR02* es de 0.18325, para los *Casos CR03* y *CR04* la diferencia promedio obtenida es 0.00267.

Tabla 6.18: Para el Tanque Agitado Continuo, comparativo para la concentración en la partícula en $\xi = 1$ a diferentes tiempos para los cuatro primeros casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 2.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$.

Criterios	$\alpha = 1.0$		$\alpha = 1,000.0$	
	Caso CA01 $\phi_2 = 0.0$	Caso CA02 $\phi_2 = 1.0$	Caso CA03 $\phi_2 = 0.0$	Caso CA04 $\phi_2 = 1.0$
$\tau = 0.001$	0.00199	0.00489	0.00023	0.00034
$\tau = 0.010$	0.04416	0.04717	0.00291	0.00390
$\tau = 0.100$	0.49504	0.32424	0.04969	0.05526
$\tau = 1.000$	0.90202	0.52687	0.26943	0.27470
$\tau = 10.00$	0.90209	0.52689	0.59494	0.59635

En la Tabla 6.19 se presentan valores de concentración del fluido a diferentes tiempos para los *Casos CR05* al *CR08*, se comprueba que los valores de concentración son muy parecidos en todos los casos. Los valores ligeramente mayores se presentan en los *Casos CR06* y *CR08*, donde $\alpha = 1,000.0$. La diferencia de valores de concentración mayor se aprecia en los *Casos CR05* y *CR06*. Se obtuvo una diferencia promedio en los valores de concentración del fluido entre los *Casos CR05* y *CR06* es de 0.00136, para los *Casos CR07* y *CR08* la diferencia promedio obtenida es 0.00002.

En la Tabla 6.20 se presentan valores de concentración en la partícula para diferentes valores de tiempo de los *Casos CA05* al *CA08*. En los valores de los perfiles de concentración de los *Casos CA01* y *CA02*, es posible observar una diferencia significativa, los valores son

Tabla 6.19: Para el Tanque Agitado Continuo, comparativo para la concentración del fluido a diferentes tiempos utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 5.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$.

Criterios	$\alpha = 1.0$		$\alpha = 1,000.0$	
	Caso CA05	Caso CA06	Caso CA07	Caso CA08
	$\phi_2 = 0.0$	$\phi_2 = 1.0$	$\phi_2 = 0.0$	$\phi_2 = 1.0$
$\tau = 0.001$	0.00991	0.00995	0.00995	0.00995
$\tau = 0.010$	0.09471	0.09516	0.09512	0.09512
$\tau = 0.100$	0.62837	0.63080	0.62965	0.62968
$\tau = 1.000$	0.99266	0.99460	0.99257	0.99263
$\tau = 10.00$	0.99270	0.99464	0.99570	0.99571

mayores para el *Caso CA05* en todos los valores de tiempo. Por los valores presentados en $\tau = 1.0$ y $\tau = 10.0$, se deduce que el perfil ha llegado a un valor máximo que es constante con variaciones despreciables. El valor máximo alcanzado corresponde al *Caso CA05*, la diferencia entre los valores máximos de ambos casos para $\tau = 10.0$ es de 0.27666.

El comportamiento del perfil de concentración de la partícula para los *Casos CA07* y *CA08*, presenta muy ligeras variaciones en el valor de concentración para los diferentes tiempos, para estos casos, no es posible afirmar que ha llegado a su máximo valor porque posiblemente a tiempos mayores se presenten valores de concentración más altos, además se ha utilizado un valor de $\alpha = 1,000.0$ lo que indica que desplaza perfil de concentración para alcanzar el máximo nivel de concentración en el tiempo.

La diferencia promedio obtenida para los valores de concentración de la partícula entre los *Casos CR05* y *CR06* es de 0.14118, para los *Casos CR07* y *CR08* la diferencia promedio obtenida es 0.00258.

El efecto del Coeficiente de Salto de Adsorción en el sistema multifásico para Tanque Agitado no fue posible observarlo en la concentración del fluido para los ocho casos estudiados. El efecto del Coeficiente de Salto de Adsorción para la concentración de la partícula fue posible observarlo para un valor de $\alpha = 1.0$, no se presentó el efecto para un valor de $\alpha = 1,000.0$. Para los casos estudiados cuando $\alpha = 1.0$, es decir, los *Casos CA01* y *CA02* donde el Módulo de Thiele = 2.0 y para los *Casos CA05* y *CA06* donde $\Phi = 5.0$, se observan valores menores de concentración para los casos donde $\phi_2 = 1.0$, la diferencia es mayor

Tabla 6.20: Para el Tanque Agitado Continuo, comparativo para la concentración en la partícula en $\xi = 1$ a diferentes tiempos utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 5.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$.

Criterios	$\alpha = 1.0$		$\alpha = 1,000.0$	
	Caso CA05	Caso CA06	Caso CA07	Caso CA08
	$\phi_2 = 0.0$	$\phi_2 = 1.0$	$\phi_2 = 0.0$	$\phi_2 = 1.0$
$\tau = 0.001$	0.00194	0.00425	0.00023	0.00034
$\tau = 0.010$	0.04257	0.04086	0.00291	0.00390
$\tau = 0.100$	0.42662	0.27344	0.04966	0.05523
$\tau = 1.000$	0.70874	0.43209	0.26792	0.27308
$\tau = 10.00$	0.70877	0.43211	0.56795	0.56903

cuando $\Phi = 2.0$.

Para los *Casos CA01* y *CA02*, en el valor de concentración en tiempos grandes, se considera 41.7% extra en la concentración de la partícula por despreciar el Coeficiente de Salto de Adsorción. La diferencia promedio obtenida para los valores de concentración en la partícula en los valores de tiempo reportados en la Tabla 6.18 es de 0.18325.

Para *Casos CA05* y *CA06* donde $\Phi = 5.0$ la diferencia promedio obtenida para los valores de concentración en la partícula en los valores de tiempo reportados en la Tabla 6.20 es de 0.14118. Para estos casos se considera un 39.0% extra de valor en la concentración por despreciar el Coeficiente de Salto de Adsorción.

El efecto de ϕ_2 sobre la concentración de la partícula, disminuye al aumentar la rapidez de reacción, el Módulo de Thiele y es despreciable para valores de adsorción grandes.

Efecto en el Reactor tipo Batch

Para el análisis en el Reactor tipo Batch los parámetros fijo para estudiar los cuatro casos son:

$$\psi_p = 0.9, \quad \psi_{in} = 0.001, \quad \tau_0 = 0.0, \quad U_{f0} = 1.0, \quad U_{p0} = 0.0, \quad Biot = 10.0, \quad \Phi = 2.0$$

El perfil de concentración obtenido para el fluido y la partícula para los primeros dos casos

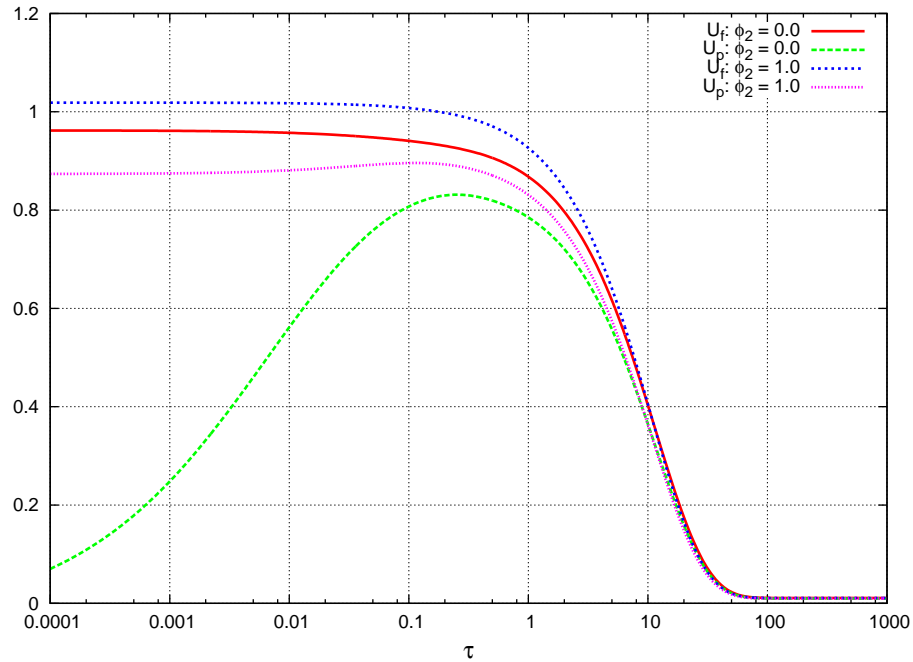


Figura 6.22: Para el Reactor tipo Batch, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Adsorción para: $\alpha = 1.0$, Módulo de Thiele = 2.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_1 = 0.0$.

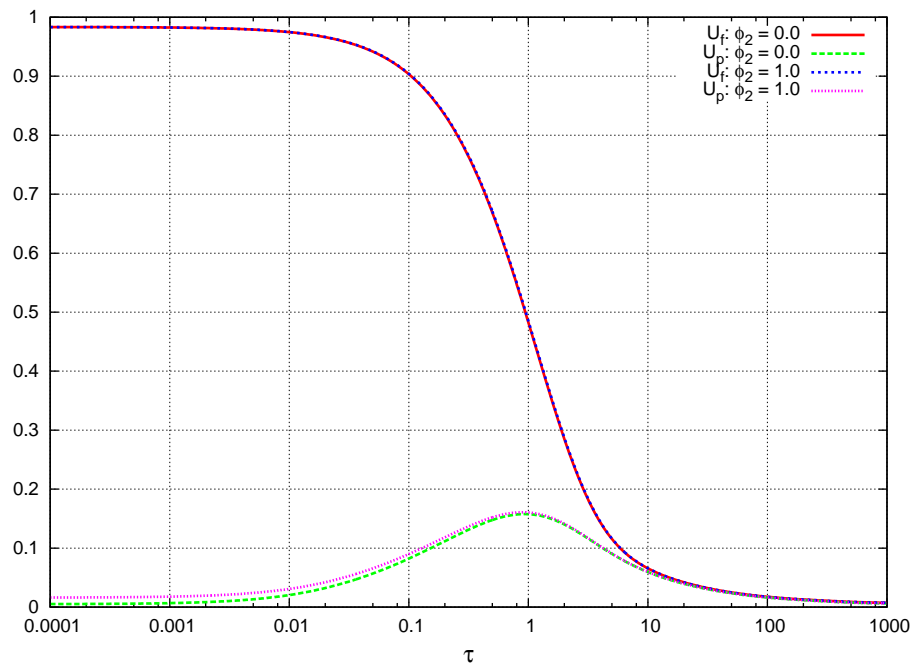


Figura 6.23: Para el Reactor tipo Batch, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del coeficiente de Salto de Adsorción para: $\alpha = 1,000.0$, Módulo de Thiele = 2.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_1 = 0.0$.

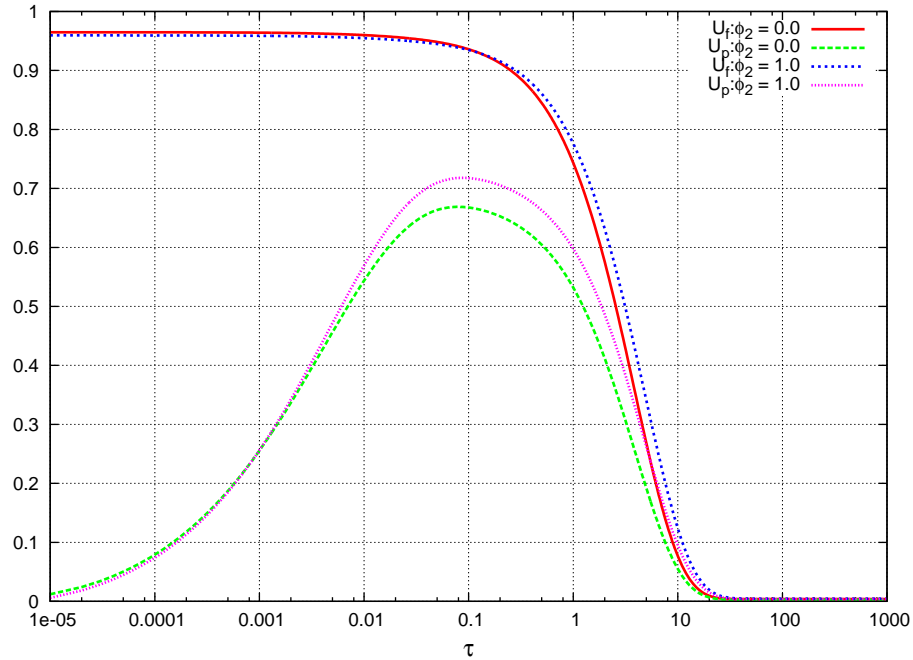


Figura 6.24: Para el Reactor tipo Batch, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del Coeficiente de Salto de Adsorción para: $\alpha = 1.0$, Módulo de Thiele = 5.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_1 = 0.0$.

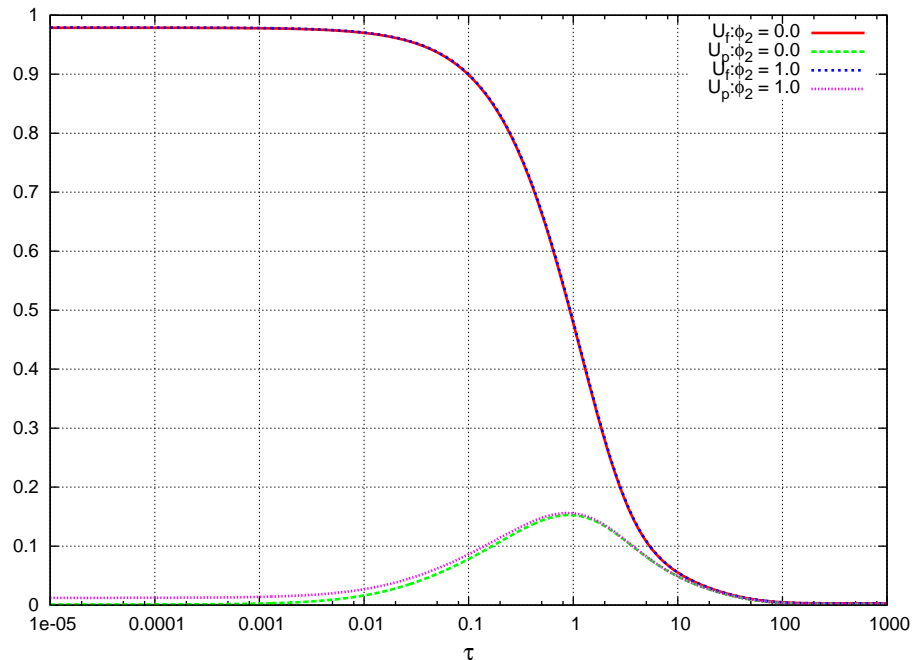


Figura 6.25: Para el Reactor tipo Batch, comparativo de la concentración en el fluido y en la partícula en $\xi = 1.0$ en el tiempo (τ) para diferentes valores del coeficiente de Salto de Adsorción para: $\alpha = 1,000.0$, Módulo de Thiele = 5.0, $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$ y $\phi_1 = 0.0$.

con la función de entrada tipo escalón se muestra Figura 6.22 y el perfil de concentración para los casos donde $\alpha = 1,000.0$ se muestran en la Figura 6.23.

En la Figura 6.22, se observa una diferencia en ambos perfiles de concentración, tanto para el fluido como para la partícula. Para el fluido se observa un mismo perfil de comportamiento aunque una diferencia de valores de concentración, para el caso donde se considera el coeficiente de salto, el intercambio con la partícula se incrementa, lo que explica una disminución de concentración, se presenta un aumento en la concentración de reactante en la partícula.

En la Figura 6.23, se observa que la diferencia en los valores de la concentración para la partícula y el fluido no son tan notorias como la observada en la Figura 6.22, para el fluido se presenta el mismo perfil, para la partícula continua el mismo comportamiento que en el caso anterior sólo que a valores mucho menores debido al valor de α , donde existe una rápida adsorción y disminuye rápidamente la concentración del reactante en la partícula.

En la Tabla 6.21 se observan los valores de concentración del fluido respecto al tiempo para los *Casos CA01* a *CA04*.

La diferencia promedio obtenida entre los valores del perfil de concentración del fluido para los valores de tiempo reportados en la Tabla 6.21 para los *Casos CA01* y *CA02* es de 0.04076, para los *Casos CA03* y *CA04* la diferencia promedio obtenida es 0.00065.

Tabla 6.21: Para el Reactor tipo Batch, comparativo para la concentración del fluido a diferentes tiempos para los cuatro primeros casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 2.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$.

Criterios	$\alpha = 1.0$		$\alpha = 1,000.0$	
	Caso CA01	Caso CA02	Caso CA03	Caso CA04
	$\phi_2 = 0.0$	$\phi_2 = 1.0$	$\phi_2 = 0.0$	$\phi_2 = 1.0$
$\tau = 0.001$	0.96130	1.01852	0.98257	0.98260
$\tau = 0.010$	0.95721	1.01739	0.97476	0.97487
$\tau = 0.100$	0.94085	1.00760	0.90342	0.90420
$\tau = 1.000$	0.86804	0.92653	0.48283	0.48556
$\tau = 10.00$	0.40294	0.40506	0.06560	0.06584
$\tau = 100.0$	0.01104	0.01094	0.01744	0.01744

En la Tabla 6.22 se observan los valores de concentración de la partícula respecto al tiempo para los *Casos CA01* a *CA04*.

La diferencia promedio obtenida entre los valores del perfil de concentración del fluido para los valores de tiempo reportados en la Tabla 6.22 son: para los *Casos CA01* y *CA02* es de 0.17988, para los *Casos CA03* y *CA04* la diferencia promedio obtenida es 0.00536.

En la Tabla 6.23 se observan los valores de concentración del fluido respecto al tiempo para los *Casos CA05* a *CA08*.

La diferencia promedio obtenida entre los valores del perfil de concentración del fluido para los valores de tiempo reportados en la Tabla 6.23 para los *Casos CA05* y *CA06* es de 0.01142, para los *Casos CA07* y *CA08* la diferencia promedio obtenida es 0.07176.

En la Tabla 6.23 se observan los valores de concentración de la partícula respecto al tiempo para los *Casos CA05* a *CA08*.

La diferencia promedio obtenida entre los valores del perfil de concentración de la partícula para los valores de tiempo reportados en la Tabla 6.23 para los *Casos CA05* y *CA06* es de 0.03054, para los *Casos CA07* y *CA08* la diferencia promedio obtenida es 0.00556.

El efecto del Coeficiente de Salto de Adsorción, ϕ_2 sobre el perfil de concentración del fluido y la partícula en un Reactor tipo Batch se observo de la siguiente manera:

Para los casos estudiados con valores del Coeficiente de Adsorción grandes, no se observó efecto del Coeficiente de Salto de Adsorción sobre el perfil de concentración del fluido ni de la partícula a los diferentes valores del Módulo de Thiele.

El efecto del Coeficiente de Salto de Adsorción, se observo para los casos donde el Coeficiente de Salto es $\alpha = 1.0$, es decir, para los casos donde no se considera el efecto de adsorción. Para los *Casos CA01* y *CA02*, donde el Módulo de Thiele es $\Phi = 2.0$, se observó un mayor efecto del coeficiente, ϕ_2 en el perfil de concentración del fluido y la partícula por la diferencia de valores de concentración respecto al tiempo, sin embargo en $\tau = 100.0$ se observa un estado estacionario donde se observan los mismos valores para los perfiles que consideran el coeficiente de salto, $\phi_2 = 1.0$ como para los perfiles que no consideran el coeficiente de salto $\phi_2 = 0.0$. En el perfil de fluido se observaron pocas diferencias, para el perfil de concentración de la partícula, se observa una diferencia importante en el valor máximo

Tabla 6.22: Para el Reactor tipo Batch, comparativo para la concentración en la partícula en $\xi = 1$ a diferentes tiempos para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 2.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$.

Criterios	$\alpha = 1.0$		$\alpha = 1,000.0$	
	Caso CA01 $\phi_2 = 0.0$	Caso CA02 $\phi_2 = 1.0$	Caso CA03 $\phi_2 = 0.0$	Caso CA04 $\phi_2 = 1.0$
$\tau = 0.001$	0.24815	0.87469	0.00674	0.01773
$\tau = 0.010$	0.56164	0.88094	0.02045	0.03078
$\tau = 0.100$	0.80713	0.89573	0.08221	0.09000
$\tau = 1.000$	0.78516	0.83115	0.15756	0.16042
$\tau = 10.00$	0.36446	0.36337	0.05946	0.05966
$\tau = 100.0$	0.00997	0.00981	0.01625	0.01628

Tabla 6.23: Para el Reactor tipo Batch, comparativo para la concentración del fluido a diferentes tiempos para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 5.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$.

Criterios	$\alpha = 1.0$		$\alpha = 1,000.0$	
	Caso CA05 $\phi_2 = 0.0$	Caso CA06 $\phi_2 = 1.0$	Caso CA07 $\phi_2 = 0.0$	Caso CA08 $\phi_2 = 1.0$
$\tau = 0.001$	0.96409	0.95877	0.97797	0.97830
$\tau = 0.010$	0.95994	0.95478	0.97016	0.97058
$\tau = 0.100$	0.93599	0.93469	0.89885	0.89994
$\tau = 1.000$	0.74344	0.77613	0.47823	0.48122
$\tau = 10.00$	0.07695	0.12369	0.05520	0.05551
$\tau = 100.0$	0.00374	0.00460	0.00469	0.00470

Tabla 6.24: Para el Reactor tipo Batch, comparativo para la concentración en la partícula en $\xi = 1$ a diferentes tiempos para los cuatro casos estudiados utilizando los parámetros: $Biot = 10.0$, $\Phi = 5.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$.

Criterios	$\alpha = 1.0$		$\alpha = 1,000.0$	
	Caso CA05 $\phi_2 = 0.0$	Caso CA06 $\phi_2 = 1.0$	Caso CA07 $\phi_2 = 0.0$	Caso CA08 $\phi_2 = 1.0$
$\tau = 0.001$	0.25559	0.25632	0.00262	0.01391
$\tau = 0.010$	0.54357	0.56912	0.01633	0.02696
$\tau = 0.100$	0.66766	0.71755	0.07806	0.08614
$\tau = 1.000$	0.53199	0.59795	0.15251	0.15557
$\tau = 10.00$	0.05506	0.09529	0.04861	0.04887
$\tau = 100.0$	0.00267	0.00354	0.00355	0.00356

de concentración obtenido en $\tau = 0.1$ de 0.0886, es decir la cantidad de concentración que no es cuantificada por no considerar el Coeficiente de Salto de Adsorción es de 9.89%.

6.5 Concentración aproximada en el fluido

Una forma entender los fenómenos que se llevan a cabo en nuestro sistema es suponer que la mayor parte de la reacción y la adsorción se realizan en la superficie de la partícula, a la solución para la concentración en el fluido que se obtiene de dicha suposición, le llamaremos solución aproximada y se representa U_{fa} , la solución obtenida para la solución aproximada en la partícula, se representa de la forma: U_{fa} . El desarrollo detallado para obtener la expresión de U_{fa} y U_{pa} , se puede consultar en el **Apéndice E**.

Para estudiar las diferencias en el perfil de la concentración del fluido obtenida por el Método de Expansión en Series de Fourier y la concentración aproximada del fluido en el Sistema Multifásico, se modela el Tanque Agitado y el Reactor tipo Batch. Para el modelado, se consideran los siguientes puntos.

- El valor de $\alpha = 1.0$, considera el caso en el que no existe el fenómeno de adsorción y $\alpha = 1,000.0$ donde existe una fuerte adsorción.
- El valor del Número de Biot = 10.0, que corresponde a un caso en el que la resistencia a la transferencia de masa es despreciable.
- El Módulo de Thiele $\Phi = 2.0$, donde existe una velocidad de reacción moderada y Módulo de Thiele $\Phi = 5.0$ para una reacción más rápida.
- Parámetro de tiempo de residencia $\psi_{in} = 10^{-3}$ para un Reactor Batch.
- En el Reactor tipo Batch se considera que la porosidad de las partículas es de $\varepsilon_{\mu\gamma} = 0.57$ que corresponde a un 5% de partículas porosas del total de la mezcla, es decir: $\psi_p = 0.9$.

Efecto del Coeficiente de Adsorción

Los experimentos modificando el Módulo de Thiele para los sistemas multifásicos son:

Experimentos propuestos modificando el valor del Módulo de Thiele = 2.0 :

Caso SA01: $\alpha = 1.0$:

Caso SA02: $\alpha = 1,000.0$:

Experimentos propuestos modificando el valor del Módulo de Thiele = 5.0:

Caso SA03: $\alpha = 1.0$:

Caso SA04: $\alpha = 1,000.0$:

Tanque Agitado

Para el Tanque Agitado, los parámetros que permanecen constantes para los casos a estudiar son:

$$\psi_p = 0.1, \quad \psi_{in} = 10.0, \quad \tau_0 = 0.0, \quad U_{f0} = 0.0, \quad U_{p0} = 0.0, \quad Biot = 10.0$$

En la Figura 6.26 se presentan los *Casos SA01* a *SA04* para el sistema Tanque Agitado. Se muestran los perfiles de la concentración del fluido y la partícula, solución obtenida por el Método Expansión en Series de Fourier, $U_f(\tau)$ y $U_p(\xi, \tau)$ y la solución aproximada del fluido y la partícula, $U_{fa}(\tau)$ y $U_{pa}(\tau)$. La figura muestra para los cuatro casos que el comportamiento del perfil de la concentración en el fluido para $U_f(\tau)$ y $U_{fa}(\tau)$, es muy cercano, el comportamiento es muy semejante.

El perfil de concentración de la partícula para $U_p(\xi, \tau)$ y $U_{pa}(\tau)$ muestra diferencias particulares para cada caso. En el *Caso SA01*, se observa un comportamiento en ambos perfiles casi paralelo y con una diferencia en el máximo valor, comportamiento muy similar para el *Caso SA03*, con una diferencia mucho más notoria para el valor máximo. En el *Caso SA02*, el comportamiento de los perfiles no es tan similar en comparación con los dos casos mencionados anteriormente, los perfiles no transcurren en el tiempo de forma paralela, se observan que los valores de concentración son menores para $U_{pa}(\tau)$ en el tiempo, sin embargo, en $\tau = 1,000.0$, los valores muestran una pequeña diferencia en el valor de la concentración, para $U_p(\xi, \tau)$ el valor aproximado es de 0.9, para $U_{fa}(\tau)$, se observa un con un valor menor, aproximadamente de 0.87. Para el *Caso SA04*, el comportamiento es semejante al *Caso SA02*, sin embargo, es posible observar valores de concentración para $U_{pa}(\tau)$ en el

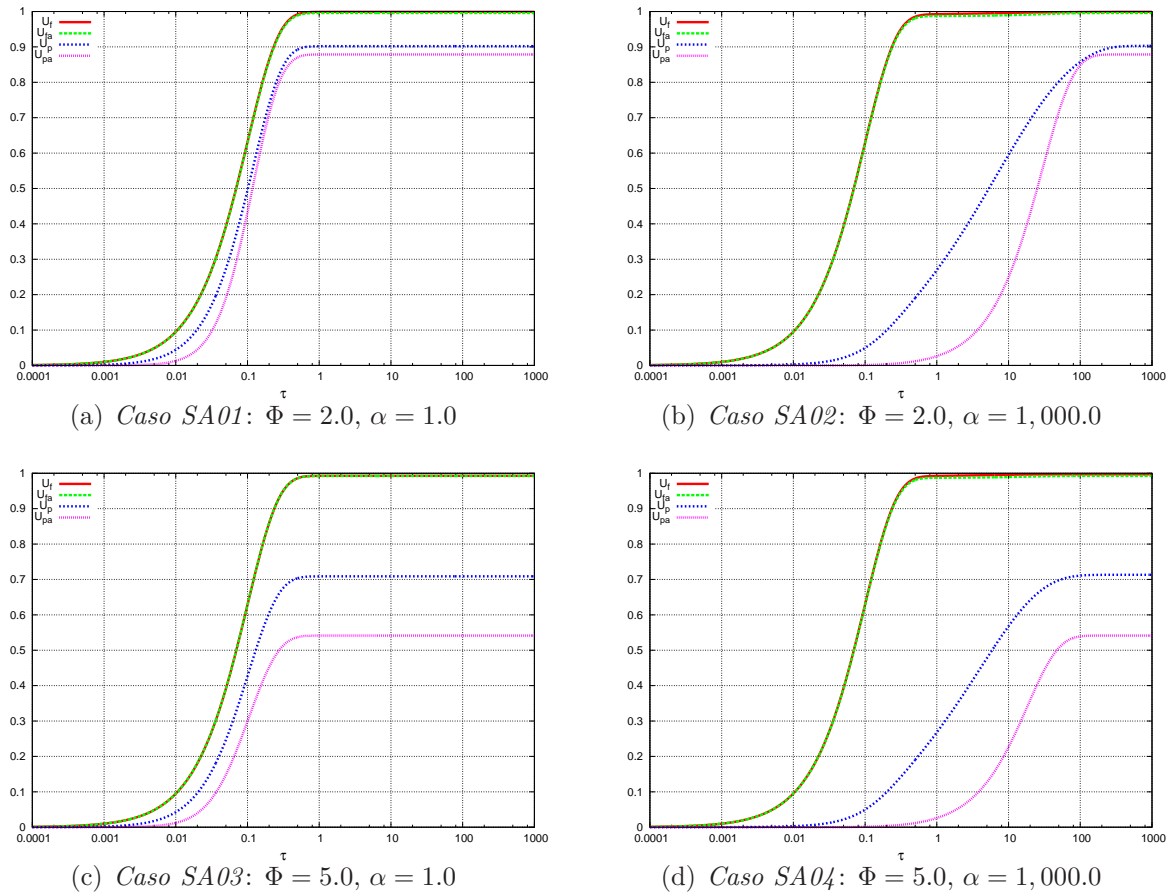


Figura 6.26: Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración del fluido para la solución analítica U_f y la solución aproximada del fluido U_{fa} , la concentración analítica de la partícula U_p y la solución aproximada de la partícula U_{pa} en el tiempo (τ) para los siguientes parámetros: $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.1$, $\psi_{in} = 10.0$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 0.0$, $U_{p0} = 0.0$, $\phi_1 = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$.

tiempo de menor valor, es decir, la diferencia de los valores de concentración entre $U_p(\xi, \tau)$ y $U_{pa}(\tau)$ es mayor en comparación con el *Caso SA02*; la diferencia de los valores entre ambas concentraciones de la partícula se debe valor del Coeficiente de Adsorción, a medida que el valor de α se incrementa, la diferencia entre los valores de ambos perfiles es mayor. La diferencia producida en los perfiles en el valor máximo es muy semejante al *Caso SA03*, efecto antes analizado, dicha diferencia depende del valor del Módulo de Thiele.

Reactor Batch

Por lo tanto, los valores de los parámetros que permanecen constantes en el análisis para el Reactor tipo Batch al modificar los valores del Coeficiente de Adsorción y los Coeficientes de Salto son:

$$\psi_p = 0.9, \quad \psi_{in} = 0.001, \quad \tau_0 = 0.0, \quad U_{f0} = 1.0, \quad U_{p0} = 0.0, \quad Biot = 10.0, \quad \Phi = 2.0$$

En la Figura 6.27 se presentan los *Casos SA01 a SA04* para el sistema Reactor tipo Batch. Se muestran los perfiles de la concentración del fluido y la partícula, solución obtenida por el Método Expansión en Series de Fourier se representan: $U_f(\tau)$ y $U_p(\xi, \tau)$ respectivamente y la solución aproximada del fluido y la partícula, $U_{fa}(\tau)$ y $U_{pa}(\tau)$.

Los perfiles de concentración del fluido en los cuatro casos son muy semejantes, los valores más cercanos entre ambos perfiles se observan en el *Caso SA01*, para los *Casos SA02 y SA03*, donde el valor del coeficiente de adsorción, $\alpha = 1,000.0$, se observa una diferencia entre los perfiles para valores de $\tau = 1.0$ a $\tau = 20.0$, debido a una curva más pronunciada con valores menores en los perfiles de $U_{fa}(\tau)$ con respecto a los perfiles obtenidos de $U_f(\tau)$. En los cuatro casos, es posible observar que el perfil de $U_{fa}(\tau)$ presenta valores ligeramente mayores en comparación con el perfil $U_f(\tau)$ para tiempos pequeños, hasta que las curvas comienzan a descender los valores de concentración.

Para el comportamiento de los perfiles de concentración de la partícula se observa en los cuatro casos estudiados que el perfil para $U_p(\tau)$ y $U_{pa}(\tau)$ no son tan parecidos. El perfil para $U_{pa}(\tau)$ en general, presenta valores más pequeños de concentración en el tiempo. Para el *Caso SA01*, la diferencia ente ambos perfiles de concentración de la partícula decrece considerablemente en $\tau = 1.0$. Para el *Caso SA01* las mayores diferencias en el comportamiento de los perfiles de concentración se encuentran aproximadamente en $\tau = 0.7$. Para el perfil de $U_{pa}(\tau)$, se registran valores muy bajos de concentración, el perfil registra valores muy cercanos a 0.0 y su valor máximo es aproximadamente de 0.04 en $\tau = 10.0$. El *Caso SA03*, es el caso donde se los perfiles presentan diferencias en mayor tiempo. En $\tau = 10.0$ los perfiles alcanzan valores muy próximos a 0.0. El *Caso SA04* es muy parecido al *Caso SA02*, el comportamiento del perfil de concentración de $U_{pa}(\tau)$ es muy similar, el valor máximo de concentración es aproximadamente de 0.03 en $\tau = 10.0$.

Efecto de los Coeficientes de Salto

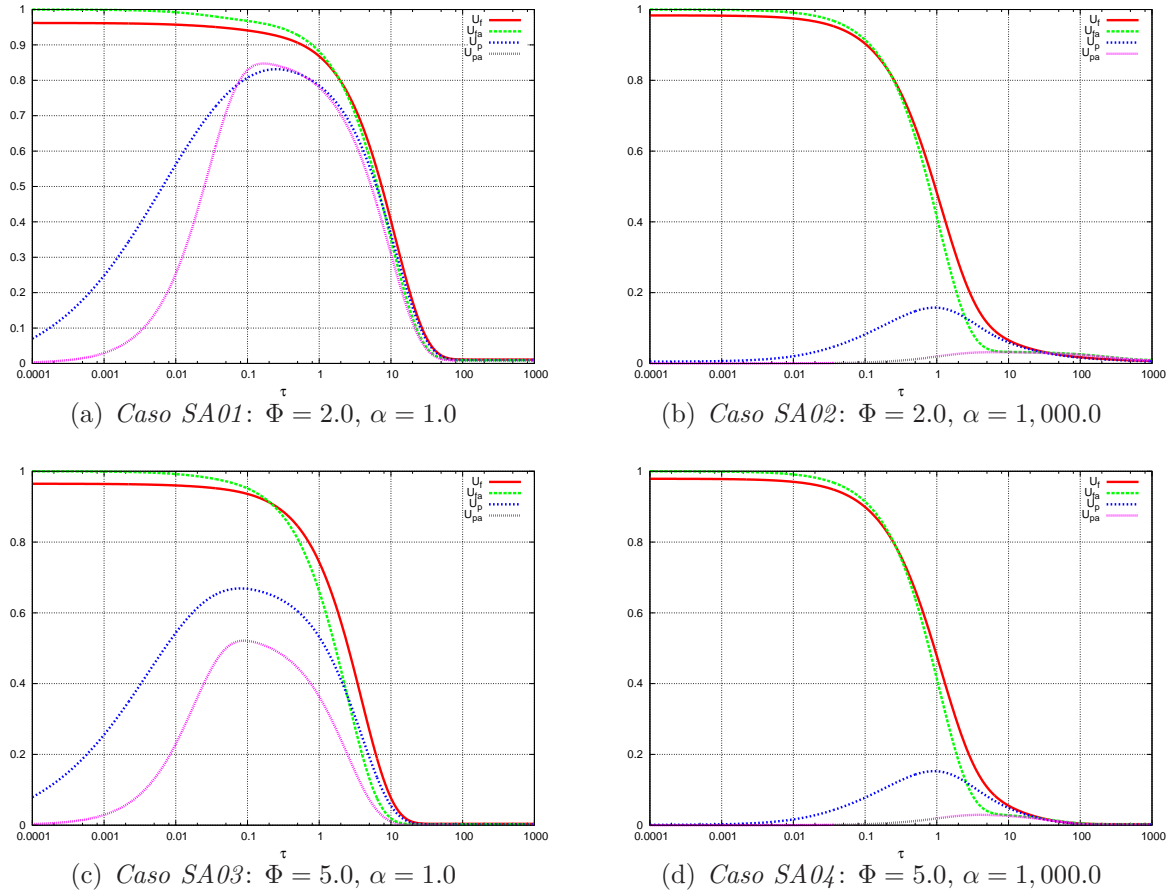


Figura 6.27: Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración del fluido para la solución analítica U_f y la solución aproximada del fluido U_{fa} , la concentración analítica de la partícula U_p y la solución aproximada de la partícula U_{pa} en el tiempo (τ) para los siguientes parámetros: $Biot = 10.0$, $\psi_p = 0.9$, $\psi_{in} = 0.001$, $\tau_0 = 0.0$, $U_{f0} = 1.0$, $U_{p0} = 0.0$, $\phi_1 = 0.0$ y $\phi_2 = 0.0$.

Una forma de analizar el efecto de los coeficientes de salto a partir de la ecuación que describe la concentración del fluido, es analizar los términos donde aparecen los coeficientes de salto y las condiciones iniciales tal como aparecen en la sumatoria.

Para los coeficientes de salto se obtiene la siguiente igualdad:

$$(\alpha\phi_1 - \phi_2\Phi^2) = \alpha\Phi^2\frac{l_p}{r_p} - \frac{l_p}{r_p}(\alpha - 1)\Phi^2 = \Phi^2\frac{l_p}{r_p}$$

Analizando los términos de la sumatoria:

$$M_n = \frac{\frac{U_{p0}(\alpha\phi_1 - \phi_2\Phi^2)(\psi_p - A_n)^2}{D_n}}{\frac{Bi(U_{f0}\lambda_n^2 - \alpha U_{p0}A_n)(\psi_p - A_n)}{D_n}} = \frac{U_{p0}(\alpha\phi_1 - \phi_2\Phi^2)(\psi_p - A_n)}{Bi(U_{f0}\lambda_n^2 - \alpha U_{p0}A_n)}$$

Si se considera que no existe concentración de reactante en el fluido en las condiciones iniciales, es decir, si $U_{f0} = 0.0$, se obtiene:

$$M_n = \frac{(\alpha\phi_1 - \phi_2\Phi^2)(\psi_p - A_n)}{-Bi\alpha A_n} = \frac{(\alpha\phi_1 - \phi_2\Phi^2)\alpha(\psi_p - A_n)}{-\alpha Bi\alpha A_n}$$

Donde se ha utilizado la siguiente igualdad:

$$\alpha A_n = \Phi^2 + \lambda_n^2 - \alpha\psi_{in}$$

$$\alpha(\psi_p - A_n) = \alpha(\psi_p + \psi_{in}) - \Phi^2 - \lambda_n^2$$

Nuevamente, para U_{f0} , se obtiene:

$$M_n = \frac{(\alpha\phi_1 - \phi_2\Phi^2)[\alpha(\psi_p + \psi_{in}) - \Phi^2 - \lambda_n^2]}{-Bi\alpha[\Phi^2 + \lambda_n^2 - \alpha\psi_{in}]} = \frac{\frac{l_p}{r_p}\Phi^2[\alpha(\psi_p + \psi_{in}) - \Phi^2 - \lambda_n^2]}{-Bi\alpha[\Phi^2 + \lambda_n^2 - \alpha\phi_{in}]}$$

Por lo tanto para la obtención del Error:

$$\frac{\frac{l_p}{r_p}\Phi^2[\alpha(\psi_p + \psi_{in}) - \Phi^2 - \lambda_n^2]}{-Bi\alpha[\Phi^2 + \lambda_n^2 - \alpha\phi_{in}]} \geq Error$$

Despejando:

$$\frac{l_p}{r_p} \Phi^2 \geq -Error \frac{Bi\alpha[\Phi^2 + \lambda_n^2 - \alpha\phi_{in}]}{[\alpha(\psi_p + \psi_{in}) - \Phi^2 - \lambda_n^2]}$$

Los experimentos propuestos modificando el valor de los Coeficientes de Salto para un valor del Módulo de Thiele = 2.0 constante en todos los casos son:

Experimentos propuestos modificando el valor del Coeficientes de Adsorción, $\alpha = 1.0$ son:

Caso SA05: $\phi_1 = 1.0$

Caso SA06: $\phi_2 = 1.0$:

Experimentos propuestos modificando el valor del Coeficientes de Adsorción, $\alpha = 1,000.0$ son:

Caso SA07: $\phi_1 = 1.0$:

Caso SA08: $\phi_2 = 1.0$:

Tanque Agitado

Los experimentos para el Tanque Agitado se presentan en la Figura 6.28 para los *Casos SA05* al *SA08*. El comportamiento de los perfiles de concentración en el fluido tienen el mismo comportamiento para la concentración $U_f(\tau)$ y $U_{fa}(\tau)$, a excepción del *Caso SA06* que no presenta el comportamiento esperado. La concentración aproximada para el fluido, $U_{fa}(\tau)$ en el sistema de Tanque Agitado, resulta ser una alternativa rápida viable para conocer el comportamiento del Tanque Agitado al considerar los coeficientes de salto.

En los perfiles de concentración de la partícula, analizando los casos propuestos a excepción del *Caso SA06*, es posible observar valores mucho menores de concentración para $U_f(\tau)$ en comparación con los valores obtenidos para $U_{fa}(\tau)$. Para el *Caso 05* se presenta la menor diferencia de valores de concentración entre ambas. Para los *Casos SA07* y *SA08* se observa una diferencia muy parecida entre ambos perfiles de concentración. La diferencia de valores $U_f(\tau)$ y $U_{fa}(\tau)$, donde la concentración aproximada pasee los valores menores, se incrementa la diferencia al incrementarse los valores de tiempo hasta modificar el comportamiento en $\tau = 100.0$, a partir de dicho punto, la diferencia de valores de concentración es

menor. Se observa una diferencia menor aproximadamente de 0.02 en el valor de concentración máximo alcanzado en $\tau = 1,000.0$

En el sistema Tanque Agitado, la concentración $U_{fa}(\tau)$ resulta ser muy buena aproximación para $U_f(\tau)$ en todos los casos estudiados. En la concentración de la partícula, se observó que la $U_{pa}(\tau)$, pose una mejor aproximación a $U_p(\xi, \tau)$ para los casos donde el Módulo de Thiele es $\Phi = 2.0$, la diferencia mayor entre ambas concentraciones se observo a valores donde $\Phi = 5.0$.

Para los casos donde se estudia los Coeficientes de Salto, en ambos coeficientes se observó una buena aproximación entre ambas concentraciones a a partir de $\tau = 100.0$. Para ϕ_1 , se encontró una buena aproximación de ambas concentraciones para el *Caso SA05*, para el *Caso SA07*, la diferencia ente ambas es mayor en tiempos menores de $\tau = 100.0$.

Para el Coeficiente de Salto de Adsorción, ϕ_2 , no fue posible evaluar el efecto donde $\alpha = 1.0$ para el *Caso SA08* se observó una muy buena aproximación en los valores de ambas concentraciones.

Reactor Batch

Los casos estudiados para el sistema multifásico Reactor tipo Batch donde se estudia el efecto de los Coeficientes de Salto se presentan en la Figura 6.29. El comportamiento encontrado para el perfil de concentración del fluido para $U_f(\tau)$ y $U_{fa}(\tau)$ presenta pocas diferencias en sus valores de concentración. Para los *Casos SA05* y *SA06* se observa que ambos perfiles presentan el mismo comportamiento, la diferencia de valores entre ambos se presenta en dos etapas. Para tiempos menores de $\tau = 5.0$, los valores de $U_f(\tau)$ son menores en comparación con $U_{fa}(\tau)$. Para tiempos mayores de $\tau = 5.0$, los valores menores de concentración en el tiempo se presentan para $U_{fa}(\tau)$. Para el tiempo $\tau = 1,000.0$, la diferencia del valor de concentración entre ambos perfiles es aproximadamente de 0.1.

Para los *Casos SA07* y *SA08* donde se estudia el efecto producido por el Coeficiente de Salto de Adsorción se encontró una mejor aproximación para estos casos en comparación con el *Caso SA05*. Nuevamente se observan diferencias en dos etapas. Para tiempos menores de $\tau = 0.5$ se presentan valores de concentración ligeramente menores para $U_f(\tau)$, para valores mayores de $\tau = 0.5$, se presentan valores ligeramente mayores para $U_f(\tau)$. Los valores de concentración para $\tau = 1,000.0$ presentan una diferencia menor de 0.01.

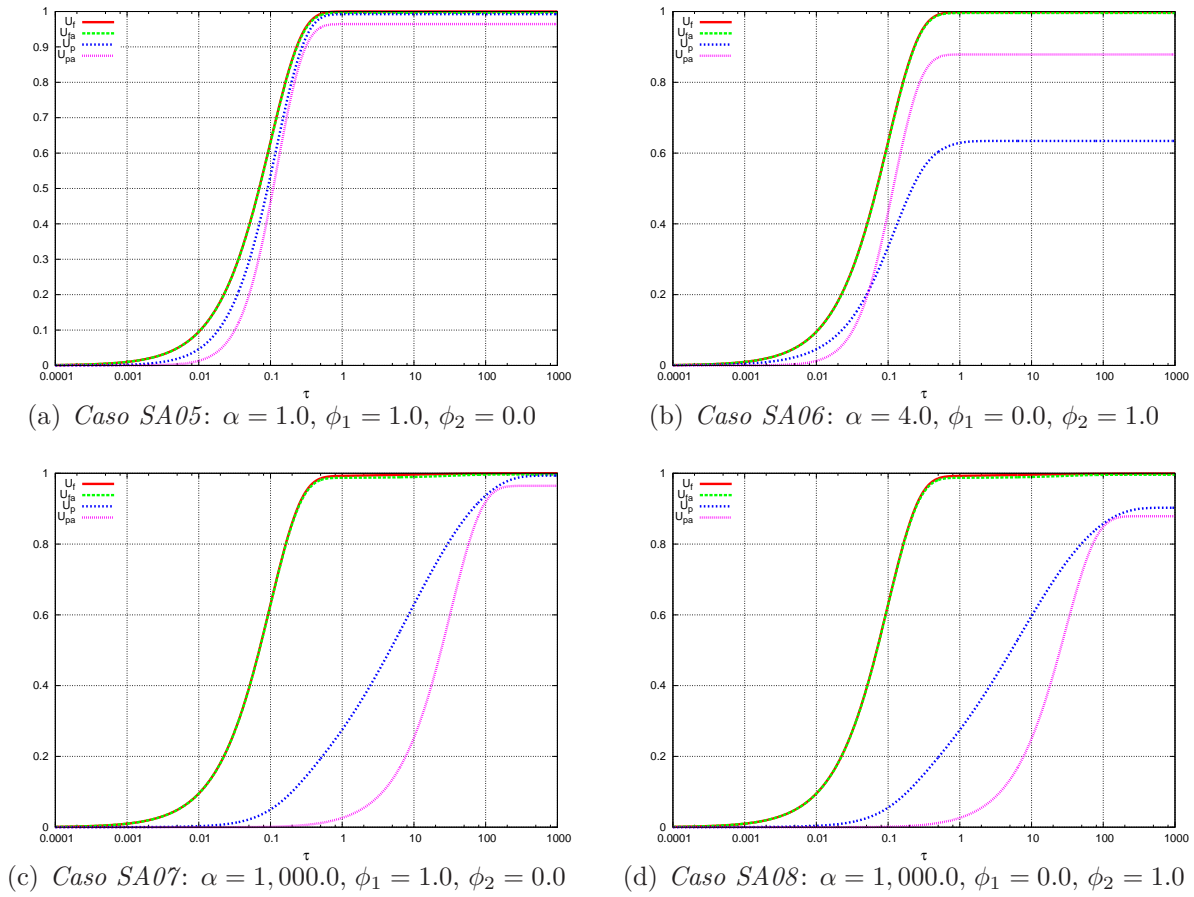


Figura 6.28: Para el Tanque Agitado, comparativo de la concentración del fluido para la solución analítica U_f y la solución aproximada del fluido U_{fa} , la concentración analítica de la partícula U_p y la solución aproximada de la partícula U_{pa} en el tiempo (τ) para los siguientes parámetros: $Biot = 10.0, \Phi = 2.0, \psi_p = 0.1, \psi_{in} = 10.0, \tau_0 = 0.0, U_{f0} = 0.0, U_{p0} = 0.0$.

Para el comportamiento de la concentración en la partícula se observa para el *Caso SA05* que existen diferencias entre los perfiles, donde los valores para $U_{pa}(\tau)$ son menores, estas diferencias dependen de la forma del perfil, similar a una campana. Para $\tau = 1,000.0$ se observa que la diferencia en los valores de concentración es aproximadamente de 0.1.

Para el sistema Reactor tipo Batch, se encontró que la solución aproximada para la concentración del fluido presenta un comportamiento muy similar para la concentración $U_f(\tau)$, el caso donde los perfiles son más próximos en sus valores es el *Caso SA01*, las diferencias en los valores de concentración para ambos perfiles se incrementan al aumentar

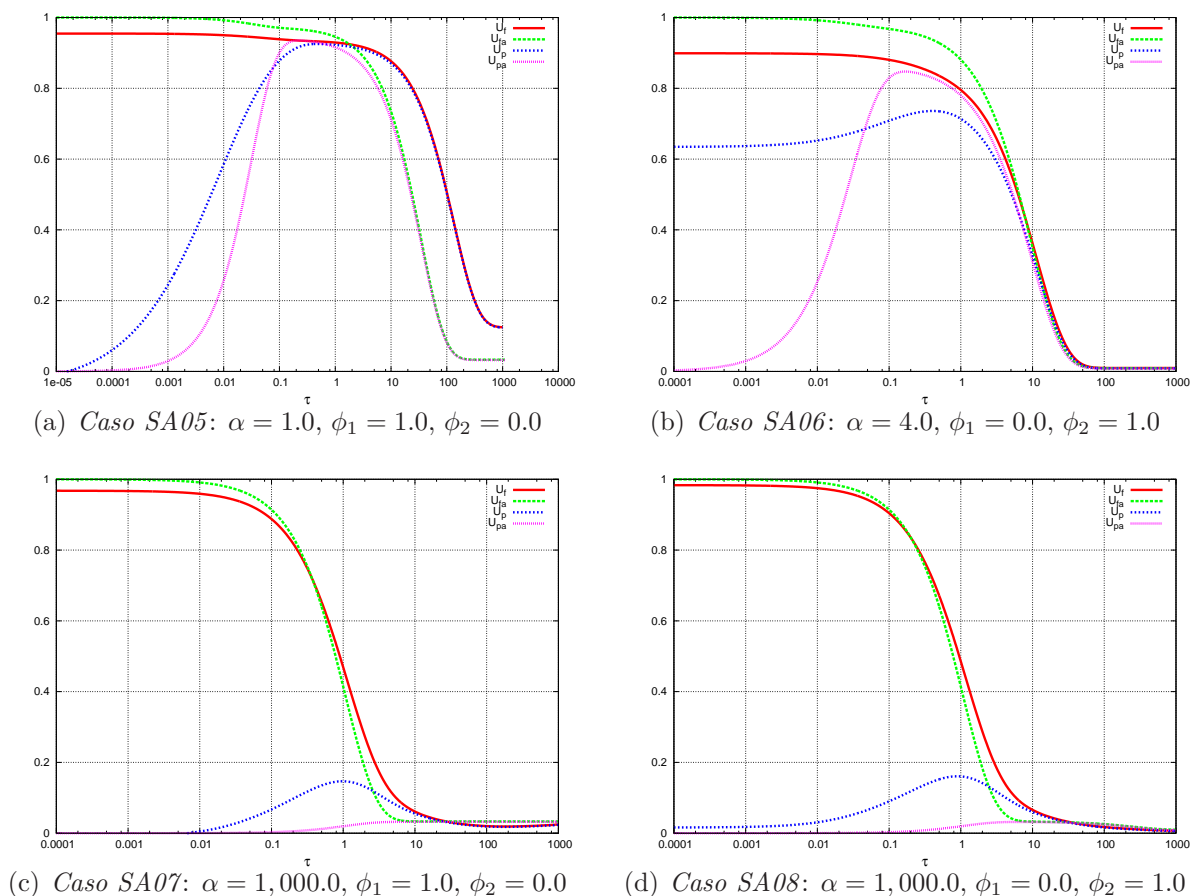


Figura 6.29: Para el Reactor Batch, comparativo de la concentración del fluido para la solución analítica U_f y la solución aproximada del fluido U_{fa} , la concentración analítica de la partícula U_p y la solución aproximada de la partícula U_{pa} en el tiempo (τ) para los siguientes parámetros: $Biot = 10.0, \Phi = 2.0, \psi_p = 0.9, \psi_{in} = 0.001, \tau_0 = 0.0, U_{f0} = 1.0, U_{p0} = 0.0$.

la adsorción, es decir cuando $\alpha = 1,000.0$.

El comportamiento de los perfiles en la partícula al modificar los Coeficientes de Salto, presentó mayores diferencias al modificar el Coeficiente de Salto de Reacción. Se encontró que el comportamiento para el Coeficiente de Salto de Adsorción es el mismo al modificar el valor α . Los valores para los perfiles de concentración del fluido son más cercanos para $\alpha = 1,000.0$.

Para el comportamiento del perfil de la partícula se observa en los cuatro primeros casos que los valores de concentración de la solución aproximada son menores en comparación con

$U_p(\xi, \tau)$. Los perfiles de concentración de valores más cercanos se presentan en el *Caso SA01*. Los *Casos SA02* y *SA04* donde $\alpha = 1,000.0$, presentan casi el mismo comportamiento.

Para el efecto producido por los Coeficientes de Salto en los perfiles de concentración en la partícula se encontró que para el Coeficiente de Salto de Reacción, el valor de $U_{pa}(\tau)$ son menores. El efecto producido para el Coeficiente de Salto de Adsorción presenta ligeras variaciones al modificar el Coeficiente de Adsorción.

Análisis de la Concentración Aproximada

La Tabla 6.25 contiene los experimentos realizados, la finalidad es conocer las variaciones de los valores propios y como se presentan los cambios en el valor para D_i , es posible observar para algunos casos que existen variaciones mínimas al modificar el valor de α , ϕ_1 , y ϕ_2 , por lo que no se generan cambios considerables en las gráficas reportadas principalmente para la concentración en el fluido.

Tabla 6.25: Comparativo de los primero diez valores propios con su respectivo denominador D_i de la sumatoria definido en la ecuación de U_f .

i	$Bi = 10 \quad \Phi = 2 \quad \phi_p = 0.9 \quad \phi_{in} = 10$									
	$\alpha = 1 \quad \phi_2 = 0$					$\alpha = 10^3$				
	$\phi_1 = 0.0$		$\phi_1 = 0.0004$		$\phi_1 = 0.0, \phi_2 = 0.0$		$\phi_1 = 0.0, \phi_2 = 1.0$		$\phi_1 = 0.0004, \phi_2 = 1.0$	
	λ_i	D_i	λ_i	D_i	λ_i	D_i	λ_i	D_i	λ_i	D_i
1	1.9782i	-0.7159E+02	1.9782i	-0.7160E+02	0.3125i	-0.5350E+02	0.2936i	-0.4741E+02	0.3130i	-0.5381E+02
2	2.8578	0.1461E+05	2.8577	0.1460E+05	4.4360	0.1575E+05	4.4411	0.1579E+05	4.4402	0.1579E+05
3	5.7287	0.1653E+06	5.7285	0.1651E+06	7.6310	0.4291E+05	7.6388	0.4296E+05	7.6383	0.4296E+05
4	8.6647	0.1024E+07	8.6645	0.1023E+07	10.7654	0.7514E+05	10.7760	0.7510E+05	10.7756	0.7511E+05
5	11.6568	0.4389E+07	11.6563	0.4387E+07	13.8716	0.1042E+06	13.8846	0.1039E+06	13.8843	0.1039E+06
6	14.6890	0.1469E+08	14.6887	0.1468E+08	16.9511	0.1222E+06	16.9662	0.1213E+06	16.9660	0.1213E+06
7	17.7493	0.4105E+08	17.7491	0.4104E+08	19.9933	0.1243E+06	20.0095	0.1227E+06	20.0093	0.1228E+06
8	20.8291	0.1001E+09	20.8289	0.1001E+09	22.9722	0.1116E+06	22.9873	0.1095E+06	22.9872	0.1095E+06
9	23.9224	0.2194E+09	23.9222	0.2193E+09	25.8397	0.9365E+05	25.8495	0.9159E+05	25.8495	0.9160E+05
10	27.0254	0.4415E+09	27.0253	0.4414E+09	28.5501	0.8774E+05	28.5519	0.8666E+05	28.5519	0.8666E+05

i	$Bi = 10 \quad \Phi = 2 \quad \phi_p = 0.9 \quad \phi_{in} = 10^{-3}$									
	$\alpha = 1 \quad \phi_2 = 0$					$\alpha = 10^3$				
	$\phi_1 = 0.0$		$\phi_1 = 0.0004$		$\phi_1 = 0.0, \phi_2 = 0.0$		$\phi_1 = 0.0, \phi_2 = 1.0$		$\phi_1 = 0.0004, \phi_2 = 1.0$	
	λ_i	D_i	λ_i	D_i	λ_i	D_i	λ_i	D_i	λ_i	D_i
1	2.3551	0.1244E+03	2.3550	0.1244E+03	2.8104	0.9825E+07	2.8108	0.9852E+07	2.8107	0.9844E+08
2	2.9376	0.8272E+03	2.9376	0.8267E+03	5.6761	0.1265E+08	5.6780	0.1273E+08	5.6778	0.1272E+08
3	5.7330	0.8796E+05	5.7328	0.8789E+05	8.6129	0.1746E+08	8.6174	0.1765E+08	8.6172	0.1764E+08
4	8.6656	0.7808E+06	8.6654	0.7803E+06	11.6085	0.2427E+08	11.6161	0.2460E+08	11.6159	0.2459E+08
5	11.6568	0.3782E+07	11.6566	0.3781E+07	14.6454	0.3300E+08	14.6564	0.3352E+08	14.6562	0.3351E+08
6	14.6890	0.1338E+08	14.6888	0.1337E+08	17.7100	0.4348E+08	17.7244	0.4423E+08	17.7243	0.4422E+08
7	17.7493	0.3852E+08	17.7492	0.3851E+08	20.7935	0.5549E+08	20.8113	0.5651E+08	20.8111	0.5650E+08
8	20.8291	0.9557E+08	20.8289	0.9555E+08	23.8899	0.6877E+08	23.9111	0.7008E+08	23.9109	0.7007E+08
9	23.9224	0.2118E+09	23.9222	0.2118E+09	26.9955	0.8299E+08	27.0200	0.8462E+08	27.0199	0.8461E+08
10	27.0254	0.4295E+09	27.0253	0.4295E+09	30.1079	0.9783E+08	30.1357	0.9979E+08	30.1356	0.9978E+08

Capítulo 7

DISCUSIÓN

Se logró reproducir los resultados obtenidos reportados por Marroquín y col., 2002, es decir, el programa proporciona los valores propios correctos y necesarios para lograr reproducir los comportamientos reportados para la concentración de la partícula en la superficie y la concentración del fluido utilizando la función escalón, pulso y oscilatorio en la condición de entrada para los casos seleccionados.

Se logró obtener resultados para conocer el efecto del Coeficiente de Adsorción en el Tanque Agitado en la concentración de la partícula y el fluido. Los resultados obtenidos muestran efecto sólo en la concentración de la superficie de la partícula, al existir adsorción es posible observar como disminuye más rápidamente su concentración. La concentración alcanzada en estado estacionario tiene el mismo valor en comparación con los casos donde no existe adsorción. El estado estacionario para los perfiles de concentración donde $\alpha = 1,000.0$ se alcanza más rápidamente para el Módulo de Thiele de mayor, es decir $\Phi = 5.0$ en comparación con $\Phi = 2.0$, a partir de $\tau = 90.0$ y $\tau = 250.0$ respectivamente.

Para los resultados obtenidos utilizando los Coeficientes de Salto, se espera observar un efecto en ambas concentraciones de los sistemas multifásicos modelados, sistemas altamente solicitados dentro de la industria química y se espera que dicho efecto tenga un impacto científico e industrial al mostrar que el uso del Promedio Volumétrico posee información valiosa que ofrece más detalles sobre el transporte de masa, sin embargo los efectos de ambos coeficientes son más notorios en la concentración de la partícula, se observó efecto en

la concentración de salida para un caso particular.

El comportamiento de los perfiles de las concentraciones obtenidos para los Coeficientes de Salto para el modelado del Tanque Agitado y el Reactor tipo Batch muestran diferencias entre ambos sistemas y se debe principalmente a los parámetros de intercambio elegidos en el fluido para el tiempo de residencia, ψ_{in} y el intercambio fluido - partícula, ψ_p , los valores elegidos para ambos sistemas son apegados a valores reales.

Los resultados obtenidos utilizando el Coeficiente de Salto de Reacción para el modelado del Tanque Agitado muestran que no se encontró variación para la concentración en el fluido, los efectos encontrados se pueden observar sólo en la concentración en la superficie de la partícula. No se encontró relación en el efecto en la concentración de la partícula al modificar el Coeficiente de Adsorción, el efecto encontrado al modificar el Coeficiente de Salto de Reacción se relaciona con el valor del Módulo de Thiele. Se observa que al no considerar el Coeficiente de Salto de Reacción, la concentración disminuye, aproximadamente 0.096 y 0.055 para $\Phi = 2.0$ y $\Phi = 5.0$ respectivamente.

Los resultados obtenidos para el Reactor tipo Batch presentan variaciones en la concentración del fluido y la concentración de la partícula. Al igual que en el Tanque Agitado, no se encontraron variaciones al modificar el valor del Coeficiente de Adsorción. Al modificar el valor del Módulo de Thiele, sólo se observó variaciones en los ambos perfiles cuando $\Phi = 2.0$, la concentración de ambos disminuye al no considerar el Coeficiente de Salto de Reacción, aproximadamente 0.12 en cada uno de los perfiles. No se observaron mayores variaciones en los casos restantes y los valores de concentración para el fluido y la partícula son muy similares a tiempos grandes, para estos casos a valores mayores de $\tau = 50.0$.

Los resultados al modificar el Coeficiente de Salto de Adsorción al modelar el Tanque Agitado muestran variaciones solamente en el perfil de la partícula, su comportamiento revela que no es posible observar un efecto a valores donde el Coeficiente de Adsorción es alto, es decir, donde $\alpha = 1,000.0$. Para los casos restantes se observa que existe una disminución de la concentración de la partícula al considerar el Coeficiente de Salto de Adsorción, el efecto mayor se observa para el valor de Módulo de Thiele, $\Phi = 2.0$, con una diferencia aproximada de 0.37 y para $\Phi = 5.0$, se reporta una diferencia aproximada de 0.28, ambos para tiempos mayores a $\tau = 1.0$.

Los resultados obtenidos para el Reactor tipo Batch al estudiar el Coeficiente de Salto de

Adsorción muestran mayor efecto en el comportamiento de la concentración de la partícula. Para valores altos del Coeficiente de Adsorción se observan variaciones mínimas, pero es posible observar efecto en ambas concentraciones para los casos donde $\alpha = 1.0$, las variaciones mayores en los valores de los ambos perfiles de concentración se observan a valores de tiempo previos al estado estacionario cuando $\Phi = 2.0$. En todos los casos para valores de tiempo a partir de $\tau = 20.0$, los valores de la concentración en ambos perfiles son aproximadamente iguales

Los resultados obtenidos al comparar los perfiles de la concentración aproximada y la concentración exacta, es decir, la solución obtenida por el Método de Expansión de Series de Fourier en el modelado del Tanque Agitado para los casos donde se utiliza una condición de frontera tradicional, muestran un perfil de concentración del fluido con valores altamente similares en todos los valores de tiempo, en los valores de los perfiles de concentración en la partícula se observa una muy buena aproximación para todos los valores de tiempo para el caso particular donde el Módulo de Thiele 2.0 y $\alpha = 1.0$, para el caso donde el Coeficiente de Adsorción es alto, se observa buena aproximación sólo para tiempo grandes. Los casos restantes presentaron mayor variación en el comportamiento de los perfiles de la partícula cuando el valor de $\Phi = 5.0$, las variaciones de valor en la concentración son aproximadamente de 0.15 a partir del estado estacionario.

Los resultados encontrados para el Reactor tipo Batch son muy similares a los obtenidos en el Tanque Agitado, la concentración en el fluido no muestra diferencias considerables en su comportamiento. El caso que mostró una mejor aproximación es para Módulo de Thiele con valor de 2.0 y $\alpha = 1.0$, sin embargo se observa que es todavía una mejor aproximación en comparación con el Tanque Agitado en todos los casos para el estado estacionario.

Los resultados obtenidos al estudiar los efectos producidos en los perfiles de concentración en el Tanque Agitado por los coeficientes de salto, en particular para el Coeficiente de Salto de Reacción, muestran que la concentración aproximada es muy similar a la concentración obtenida para la concentración del fluido, es posible observar una diferencia mayor de valores en el perfil de concentración de la partícula cuando $\alpha = 1,000.0$, sin embargo el comportamiento del perfil es el esperado. Para todos los casos, los valores de la concentración en el fluido son muy similares y para la concentración de la partícula se observa menor diferencia en valores cuando el Coeficiente de Reacción es considerado. Los valores para el estado estacionario en ambas concentraciones para estos casos son muy similares. Se observó una

inconsistencia para el caso donde $\alpha = 4.0$ y el Coeficiente de Salto de Adsorción es considerado en el comportamiento de los perfiles al observar que el perfil de concentración de la partícula para la solución aproximada es mayor cuando $\phi_2 = 1.0$

Los resultados para el modelado del Reactor tipo Batch muestran una respuesta favorable para los perfiles de la solución aproximada a tiempos grandes, se observa una mayor diferencia en los valores del perfil de la concentración de la partícula para valores del Coeficiente de Adsorción altos. La mayor variación de valores se observa en la concentración de la partícula, sin embargo para el caso donde es considerado el Coeficiente de Reacción para $\alpha = 1.0$, se observa una diferencia significativa en ambos perfiles de ambas concentraciones en el estado estacionario. De manera general, los perfiles de la concentración aproximada en el fluido son muy cercanos en comparación con la solución exacta.

CONCLUSIONES

El trabajo alcanza el Objetivo General planteado, se logró obtener una solución de un sistema de ecuaciones diferenciales parciales con tres términos no homogéneos, por lo que no se trata de un problema particular si no de un problema general que describe un sistema multifásico que por sus parámetros es posible modelar cómo un Tanque Agitado ó un Reactor tipo Batch. El modelado considera una reacción de primer orden y un proceso de adsorción que permite manejar un flujo de entrada al tanque y condiciones iniciales tanto en la partícula como en el fluido con valores diferentes a cero.

La solución es una expresión algebraica para la concentración en el fluido y la partícula en cualquier punto de la misma, para fines de estudio, se eligió sólo estudiar el perfil de concentración en la superficie de la partícula. Las expresiones involucran la contribución de las condiciones iniciales, la contribución de frontera y la contribución de entrada. La solución se obtuvo por el Método de Separación de Variables y por el Método Expansión en Series de Fourier.

Para alcanzar los objetivos particulares fue necesario crear un programa utilizando la solución exacta encontrada del fluido y la partícula que permitan simular el comportamiento del sistema multifásico completo para las diferentes condiciones de entrada y la solución aproximada. El programa calculó satisfactoriamente los resultados de los casos de estudio, esto permitió realizar un análisis comparativo mostrando el efecto de los diferentes coeficientes.

En el estudio fue posible observar el comportamiento del Coeficiente de Adsorción para ambos perfiles de concentración en el modelado del Tanque Agitado, el comportamiento del perfil de la concentración era el esperado. En el modelaje del Tanque Agitado y el Reactor

tipo Batch para el estudio del Coeficiente de Salto de Reacción se observó en los perfiles de concentración en la partícula un comportamiento diferente al esperado, es decir, debido a la existencia de una reacción interfacial se esperaba observar menor concentración en la superficie de la partícula tal como lo indica la condición de frontera, sin embargo se observó mayor cantidad de concentración en comparación con el perfil donde $\phi_1 = 1.0$, Para estos casos de estudio, los perfiles de concentración del fluido no sufrieron efecto alguno a excepción del caso particular donde se considera el Reactor tipo Batch para los parámetros $\Phi = 2.0$, $\alpha = 1.0$ y $\phi_2 = 0.0$, los perfiles de concentración mostraron una diferencia aproximada de 0.12, el perfil de mayor valor corresponde al caso donde se considera el Coeficiente de Salto de Reacción. Al comparar este comportamiento con la solución aproximada, se observa que no existe un incremento en el valor de la concentración.

En el estudio del efecto del Coeficiente de Salto de Adsorción, para ambos modelos, no se observó efecto en el perfil de concentración del fluido, fue posible observar efecto en el perfil de concentración de la partícula, el efecto observado fue el esperado, al considerar el Coeficiente de Salto de Adsorción, disminuyó la concentración en la partícula debido a la adsorción interfacial, tal como lo indica la condición de frontera; para los valores del perfil el estado estacionario, se observa el mismo valor en la concentración de la partícula en comparación con el perfil donde $\phi_2 = 0.0$.

En el estudio del efecto de los Coeficientes de Salto, no se encontró una dependencia del Coeficiente de Adsorción, sin embargo, se encontró una dependencia con el Módulo de Thiele, la diferencia en los valores del perfil de concentración de la partícula disminuye al incrementar el valor de Φ , es decir al existir una reacción rápida y considerar alguno de los Coeficientes de Salto se obtiene un comportamiento cercano al que se obtiene cuando $\phi_1 = \phi_2 = 0.0$, esto significa que siguen siendo mucho mayores los efectos que ocurren en la partícula que en la interfase al existir un buen transporte de masa interfacial.

Se encontró que la solución aproximada es muy similar a la solución exacta para ambos sistemas principalmente para tiempos grandes y las mejores aproximaciones se obtienen cuando existe una reacción moderada con $\Phi = 2.0$ y no se considera el efecto de la adsorción.

Los resultados muestran que es difícil estimar los Coeficientes de Salto en situaciones donde el transporte interfacial es efectivo y la zona interfacial es pequeña debido al espesor de la capa límite, sin embargo, los experimentos para determinar dichos coeficientes se

enfocarían para reacciones de primer orden lentas donde se carezca de adsorción. Trabajar con una capa límite de mayor espesor carecería del interés práctico por su poca eficiencia en el transporte, principalmente a nivel industrial pero brindaría información valiosa sobre la actividad interfacial.

Bibliografía

- [Álvarez y col., 2005] Álvarez Ramírez J. y col., 2005, "*Physical Consistency of Generalized Linear Driving Force Models for Adsorption in a Particle*". Ind. Eng. Chem. Res. Vol. 44, 6776-6783.
- [Bidabehere y Sedran, 2006] Bidabehere Claudia, Sedran Ulises, 2006, "*Use of stirred batch reactors for the assessment of adsorption constants in porous solid catalysts with simultaneous diffusion and reaction. Theoretical analysis.*" Chemical Engineering Science. Vol. 61, 2048-2055.
- [Datta y Rinker, 1983] Datta R., Rinker R.G. 1983, "*Transient response of continuous flow stirred reactors containing heterogeneous system for catalysis or sorption.*" Chemical Engineering Science. Vol. 38, 885-896.
- [Marroquín y col., 2002] Marroquín de la Rosa, J.O. y col., 2002, "*An analytic solution to the transient diffusion - reaction problem in particles dispersed in a slurry reactor*". Chemical Engineering Journal. Vol. 57, 1409-1417.
- [Marroquín y col., 2006] Marroquín de la Rosa, J.O. y col., 2006, "*Particle size distribution effect on catalytic conversion in a CSTR*". Chemical Engineering Journal. Vol. 116, 233-236.
- [Ochoa y Whitaker, 1995] Ochoa-Tapia J.A., Whitaker S., 1995, "*Momentum transfer at the boundary between a porous medium and a homogeneous fluid-I. Theoretical development*". Int. J. Heat Mass Transfer. Vol. 38, No. 14, 2635-2646.

- [Ochoa y Whitaker, 1995] Ochoa-Tapia J.A., Whitaker S.,1997, "*Heat transfer at the boundary at a boundary between a porous medium and a homogeneous*". Int. J. Heat Mass Transfer. Vol. 40, 2691-2707.
- [Sarang y James, 2002] Sarang Gadre, James Ritter,2002, "*New analytical solution for non-linear adsorption and diffusion in a single particle*". Chemical Engineering Science, Vol. 57, 1197 - 1204.
- [Towler y Rice, 1974] Towler B.F.,Rice R.G.,1974, "*A note on the response of a CSTR to a spherical catalyst pellet*". Chemical Engineering Science, Vol. 29, 1828-1832.
- [Valdés y col.,2007] Valdés Parada y col., 2007, "*Análisis de la respuesta transitoria de un reactor tipo tanque agitado mediante un método híbrido aproximado*". Memorias del XXVIII Encuentro nacional de la AMIDIQ, 2019-2023.
- [Valdés y col.,2009] Valdés Parada y col., 2009, "*Jump condition for diffusive and convective mass transfer between a porous medium and a fluid involving adsorption and chemical reaction*". Transport Porous Media, Vol. 78, 459-476.
- [Valencia y col.,2003] Valencia López J.J., y col.,2003, "*Mass transfer jump condition at the boundary between a porous medium and a homogeneous fluid*". Journal of Porous Media, Vol. 6, 33-49.
- [Whitaker, 1999] Whitaker,S.,1999, "*The Method of Volume Averaging*", Kluwer Academic, Dordrecht, The Netherlands.
- [Wood y col., 2000] Wood B.D., 2000, "*Jump condition at non-uniform boundaries: the catalytic surface*". Chem. Eng. Sci., Vol. 55, 5231-5245.

NOMENCLATURA

a_v	Área volumétrica de la partícula, $\frac{m^2}{m^3} = m^{-1}$
A_{fp}	Área interfacial partícula-fluido, m^2
$Bi = \frac{k_f r_p}{D_{ef}}$	Número de Biot
C_{in}	Concentración de entrada de los reactantes al tanque, $\frac{mol}{m^3}$
C_γ^*	Concentración característica asociada con el fluido, $\frac{mol}{m^3}$
$\langle C_\gamma \rangle^\gamma$	Concentración promedio intrínseca fase sólida, $\frac{mol}{m^3}$
$\langle C_\mu \rangle^\mu$	Concentración promedio intrínseca fase líquida, $\frac{mol}{m^3}$
D_{ef}	Difusividad efectiva $\frac{m^2}{s}$
k	Constante de reacción de primer orden, $\frac{m}{s}$
k_f	Coefficiente de transferencia de masa, $\frac{m}{s}$
K_{eq}	Constante de adsorción, m
k_{eff}^{rx}	Coefficiente de velocidad de reacción efectiva en la inter-región, $\frac{m}{s}$
k_{eff}^{ads}	Coefficiente de velocidad de adsorción efectiva en la inter-región, m
r_p	Radio de partícula, m
$U_f = \frac{\langle C_\mu \rangle^\mu}{C_\gamma^*}$	Concentración adimensional de la fase fluida
U_{in}	Concentración de entrada adimensional en la fase fluida
$U_p = \frac{\langle C_\gamma \rangle^\gamma}{C_\gamma^*}$	Concentración adimensional en la fase sólida
\mathcal{V}	Volumen ocupado por las partículas y el fluido, m^3

Letras griegas

$\alpha = \left(1 + \frac{a_v K_{eq}}{\varepsilon_\gamma} \right)$	Coefficiente adimensional de adsorción
ε_γ	Porosidad fase sólida (fracción hueca de la partícula)
ε_μ	Fracción del volumen del tanque ocupado por el fluido
$\phi_1 = \frac{k_{eff}^{rx} r_p}{\varepsilon_\gamma D_{ef}}$	Coefficiente de salto para la reacción
$\phi_2 = \frac{k_{eff}^{ads}}{\varepsilon_\gamma r_p}$	Coefficiente de salto para la adsorción
$\Phi^2 = \frac{a_v k r_p}{\varepsilon_\gamma D_{ef}}$	Módulo de Thiele
τ	Tiempo adimensional
τ_r	Tiempo de residencia del tanque agitado, s
$\psi_{in} = \frac{r_p^2}{\varepsilon_\mu D_{ef} \tau_r}$	Parámetro adimensional de intercambio de fluido
$\psi_p = \frac{A_{fp} k_f r_p^2}{\varepsilon_\mu D_{ef} V}$	Parámetro adimensional de intercambio fluido - partícula

Subíndices

- f Fluido
- p Partícula
- 0 Inicial
- in Entrada

Apéndice A

ADIMENSIONALIZACIÓN DEL SISTEMA DE ECUACIONES

Para trabajar con el sistema de ecuaciones, es recomendable hacer una adimensionalización con la que se obtienen parámetros ya conocidos, hacer esto permitirá comparar los resultados obtenidos con otros publicados y facilita la discusión de resultados.

A.1 Parámetros adimensionales

Propuestas para la adimensionalización:

Concentración adimensional para el fluido:

$$U_f = \frac{\langle C_\mu \rangle^\mu}{C_\gamma^*} \quad (\text{A.1})$$

Concentración adimensional para la partícula:

$$U_p = \frac{\langle C_\gamma \rangle^\gamma}{C_\gamma^*} \quad (\text{A.2})$$

Concentración adimensional de entrada:

$$U_{in} = \frac{C_{in}}{C_{\gamma}^*} \quad (\text{A.3})$$

El término C_{γ}^* representa a la concentración característica asociada con el fluido.

Posición adimensional en la partícula:

$$\xi = \frac{r}{r_p} \quad (\text{A.4})$$

Tiempo adimensional:

$$\tau = t \frac{D_{ef}}{r_p^2} \quad (\text{A.5})$$

Parámetro de intercambio del fluido:

$$\psi_{in} = \frac{r_p^2}{D_{ef}\varepsilon_{\mu}\tau_R} \quad (\text{A.6})$$

Parámetro de intercambio fluido-partícula:

$$\psi_p = \frac{r_p^2 A_{fp} k_f}{D_{ef}\varepsilon_{\mu} V} \quad (\text{A.7})$$

Número de Biot:

$$\text{Bi} = \frac{k_f r_p}{\varepsilon_{\gamma} D_{ef}} \quad (\text{A.8})$$

Módulo de Thiele:

$$\Phi = \left[\frac{a_v k r_p^2}{\varepsilon_\gamma D_{ef}} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{A.9})$$

Coefficiente de salto para la reacción:

$$\phi_1 = \frac{k_{eff}^{rx} r_p}{\varepsilon_\gamma D_{ef}} \quad (\text{A.10})$$

Coefficiente de salto para la adsorción:

$$\phi_2 = \frac{k_{eff}^{ads}}{\varepsilon_\gamma r_p} \quad (\text{A.11})$$

A.2 Desarrollo adimensional de las ecuaciones

Ecuación en la partícula:

$$\varepsilon_\gamma \left(1 + \frac{a_v K_{eq}}{\varepsilon_\gamma} \right) \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} = \varepsilon_\gamma D_{ef} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial r} \right) \right] - a_v k \langle C_\gamma \rangle^\gamma \quad (\text{A.12})$$

Para obtener la ecuación adimensional es necesario:

Despejar $\langle C_\gamma \rangle^\gamma$ de la Ecuación (A.2):

$$\langle C_\gamma \rangle^\gamma = C_\gamma^* U_p \quad (\text{A.13})$$

Despejar r de la Ecuación (A.4):

$$r = r_p \xi \quad (\text{A.14})$$

Despejar t de la Ecuación (A.5):

$$t = \frac{r_p^2}{D_{ef}} \tau \quad (\text{A.15})$$

Dividiendo la Ecuación (A.12) por ε_γ :

$$\left(1 + \frac{a_v K_{eq}}{\varepsilon_\gamma}\right) \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} = D_{ef} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial r} \right) \right] - \frac{a_v k}{\varepsilon_\gamma} \langle C_\gamma \rangle^\gamma$$

Sustituyendo $\langle C_\gamma \rangle^\gamma$ de la Ecuación (A.13) en el término de la reacción:

$$\left(1 + \frac{a_v K_{eq}}{\varepsilon_\gamma}\right) \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} = D_{ef} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial r} \right) \right] - \frac{a_v k}{\varepsilon_\gamma} (C_\gamma^* U_p)$$

Obteniendo la derivada $\frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t}$ de las Ecuaciones (A.13) y (A.15) y sustituyendo para el término acumulativo:

$$\left(1 + \frac{a_v K_{eq}}{\varepsilon_\gamma}\right) \frac{C_\gamma^*}{\frac{r_p^2}{D_{ef}}} \frac{\partial U_p}{\partial \tau} = D_{ef} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial r} \right) \right] - \frac{a_v k}{\varepsilon_\gamma} (C_\gamma^* U_p)$$

Sustituyendo r de la Ecuación (A.14) y obteniendo la derivada $\frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial \xi}$ de las Ecuaciones (A.13) y (A.14):

$$\left(1 + \frac{a_v K_{eq}}{\varepsilon_\gamma}\right) \frac{C_\gamma^*}{\frac{r_p^2}{D_{ef}}} \frac{\partial U_p}{\partial \tau} = D_{ef} \left[\frac{1}{(\xi r_p)^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left((\xi r_p)^2 \frac{C_\gamma^*}{r_p} \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) \right] - \frac{a_v k}{\varepsilon_\gamma} (C_\gamma^* U_p)$$

Al ser r_p y C_γ^* constantes y conocidos se obtiene:

$$C_\gamma^* \left(1 + \frac{a_v K_{eq}}{\varepsilon_\gamma}\right) \frac{1}{\frac{r_p^2}{D_{ef}}} \frac{\partial U_p}{\partial \tau} = C_\gamma^* \frac{1}{r_p^2} D_{ef} \left[\frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) \right] - C_\gamma^* \frac{a_v k}{\varepsilon_\gamma} U_p$$

Dividiendo por C_γ^* :

$$\left(1 + \frac{a_v K_{eq}}{\varepsilon_\gamma}\right) \frac{1}{\frac{r_p^2}{D_{ef}}} \frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{r_p^2} D_{ef} \left[\frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) \right] - \frac{a_v k}{\varepsilon_\gamma} U_p$$

Dividiendo por D_{ef} y multiplicando por r_p :

$$\left(1 + \frac{a_v K_{eq}}{\varepsilon_\gamma}\right) \frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \left[\frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) \right] - \frac{a_v k r_p}{\varepsilon_\gamma D_{ef}} U_p$$

Por último utilizando la Ecuación (A.9) que define el Módulo de Thiele, se obtiene la ecuación adimensional para la partícula:

$$\left(1 + \frac{a_v K_{eq}}{\varepsilon_\gamma}\right) \frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \left[\frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) \right] - \Phi^2 U_p \quad (\text{A.16})$$

Ecuación en el tanque agitado

$$\varepsilon_\mu \frac{d\langle C_\mu \rangle^\mu}{dt} = \frac{1}{\tau_R} (C_{in}(t) - \langle C_\mu \rangle^\mu) + \frac{A_{fp}}{V} k_f (\langle C_\gamma \rangle^\gamma|_{r=r_p} - \langle C_\mu \rangle^\mu) \quad (\text{A.17})$$

Despejando $\langle C_\mu \rangle^\mu$ de la Ecuación (A.1)

$$\langle C_\mu \rangle^\mu = C_\gamma^* U_f \quad (\text{A.18})$$

Sustituyendo $\langle C_\gamma \rangle^\gamma$ de la Ecuación (A.13) para $\xi = 1$:

$$\varepsilon_\mu \frac{d\langle C_\mu \rangle^\mu}{dt} = \frac{1}{\tau_R} (C_{in}(t) - \langle C_\mu \rangle^\mu) + \frac{A_{fp}}{V} k_f ((C_\gamma^*) U_p|_{\xi=1} - \langle C_\mu \rangle^\mu)$$

Sustituyendo $\langle C_\mu \rangle^\mu$ de la Ecuación (A.18):

$$\varepsilon_\mu \frac{d\langle C_\mu \rangle^\mu}{dt} = \frac{1}{\tau_R} (C_{in}(t) - (C_\gamma^* U_f)) + \frac{A_{fp}}{V} k_f ((C_\gamma^*) U_p|_{\xi=1} - (C_\gamma^* U_f))$$

Obteniendo la derivada $\frac{d\langle C_\mu \rangle^\mu}{dt}$ de la Ecuación (A.18) y (A.15):

$$\varepsilon_\mu \frac{C_\gamma^*}{\frac{r_p^2}{D_{ef}}} \frac{dU_f}{d\tau} = \frac{1}{\tau_R} (C_{in}(t) - (C_\gamma^* U_f)) + \frac{A_{fp}}{V} k_f ((C_\gamma^*) U_p|_{\xi=1} - (C_\gamma^* U_f))$$

Obteniendo U_{in} de la Ecuación (A.3):

$$\varepsilon_\mu \frac{C_\gamma^*}{\frac{r_p^2}{D_{ef}}} \frac{dU_f}{d\tau} = \frac{1}{\tau_R} (C_\gamma^* U_{in}(\tau) - (C_\gamma^* U_f)) + \frac{A_{fp}}{V} k_f ((C_\gamma^*) U_p|_{\xi=1} - (C_\gamma^* U_f))$$

Factorizando y eliminando C_γ^* y despejando:

$$\varepsilon_\mu \frac{1}{\frac{r_p^2}{D_{ef}}} \frac{dU_f}{d\tau} = \frac{1}{\tau_R} (U_{in}(\tau) - U_f) + \frac{A_{fp}}{V} k_f (U_p|_{\xi=1} - U_f)$$

Dividiendo por ε_μ :

$$\frac{1}{\frac{r_p^2}{D_{ef}}} \frac{dU_f}{d\tau} = \frac{1}{\varepsilon_\mu \tau_R} (U_{in}(\tau) - U_f) + \frac{A_{fp}}{\varepsilon_\mu V} k_f (U_p|_{\xi=1} - U_f)$$

Dividiendo por D_{ef} y multiplicando por r_p^2 :

$$\frac{dU_f}{d\tau} = \frac{r_p^2}{D_{ef} \varepsilon_\mu \tau_R} (U_{in}(\tau) - U_f) + \frac{r_p^2 A_{fp}}{D_{ef} \varepsilon_\mu V} k_f (U_p|_{\xi=1} - U_f)$$

Utilizando los parámetros de la Ecuación (A.6) y (A.7) para obtener la ecuación adimensional para el tanque:

$$\frac{\partial U_f}{\partial \tau} = \psi_{in} (U_{in}(\tau) - U_f) + \psi_p (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (\text{A.19})$$

Condición de frontera en $\xi = 1$:

$$-\varepsilon_\gamma D_{ef} \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial r} = k_f (\langle C_\gamma \rangle^\gamma|_{r=rp} - \langle C_\mu \rangle^\mu) - k_{eff}^{rx} \langle C_\gamma \rangle^\gamma|_{r=rp} - k_{eff}^{ads} \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} \Big|_{r=rp}$$

Sustituyendo $\langle C_\mu \rangle^\mu$ de la Ecuación (A.18):

$$-\varepsilon_\gamma D_{ef} \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial r} = k_f (\langle C_\gamma \rangle^\gamma|_{r=rp} - (C_\gamma^*) U_f) - k_{eff}^{rx} \langle C_\gamma \rangle^\gamma|_{r=rp} - k_{eff}^{ads} \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} \Big|_{r=rp}$$

Sustituyendo $\langle C_\gamma \rangle^\gamma$ de la Ecuación (A.13):

$$-\varepsilon_\gamma D_{ef} \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial r} = k_f ((C_\gamma^*) U_p|_{\xi=1} - (C_\gamma^*) U_f) - k_{eff}^{rx} (C_\gamma^*) U_p|_{\xi=1} - k_{eff}^{ads} \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} \Big|_{\xi=1}$$

Obteniendo la derivada $\frac{d \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{dr}$ de la Ecuación (A.13) y (A.14):

$$-\varepsilon_\gamma D_{ef} \frac{C_\gamma^*}{r_p} \frac{\partial U_p}{\partial \xi} = k_f ((C_\gamma^*) U_p|_{\xi=1} - (C_\gamma^*) U_f) - k_{eff}^{rx} (C_\gamma^*) U_p|_{\xi=1} - k_{eff}^{ads} \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} \Big|_{\xi=1}$$

Obteniendo la derivada $\frac{\langle C_\gamma \rangle^\gamma}{dt}$ de la Ecuación (A.13) y (A.15)

$$-\varepsilon_\gamma D_{ef} \frac{C_\gamma^*}{r_p} \frac{\partial U_p}{\partial \xi} = k_f ((C_\gamma^*) U_p|_{\xi=1} - (C_\gamma^*) U_f) - k_{eff}^{rx} (C_\gamma^*) U_p|_{\xi=1} - k_{eff}^{ads} \frac{C_\gamma^*}{\frac{r_p^2}{D_{ef}}} \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \Big|_{\xi=1}$$

Dividiendo por C_γ^* :

$$-\varepsilon_\gamma D_{ef} \frac{1}{r_p} \frac{\partial U_p}{\partial \xi} = k_f (U_p|_{\xi=1} - U_f) - k_{eff}^{rx} U_p|_{\xi=1} - k_{eff}^{ads} \frac{1}{\frac{r_p^2}{D_{ef}}} \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \Big|_{\xi=1}$$

Dividiendo por $\varepsilon_\gamma D_{ef}$:

$$-\frac{1}{r_p} \frac{\partial U_p}{\partial \xi} = \frac{k_f}{\varepsilon_\gamma D_{ef}} (U_p|_{\xi=1} - U_f) - \frac{k_{eff}^{rx}}{\varepsilon_\gamma D_{ef}} U_p|_{\xi=1} - \frac{k_{eff}^{ads}}{\varepsilon_\gamma D_{ef}} \frac{1}{\frac{r_p^2}{D_{ef}}} \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \Big|_{\xi=1}$$

Multiplicando por r_p :

$$-\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = \frac{r_p k_f}{\varepsilon_\gamma D_{ef}} (U_p|_{\xi=1} - U_f) - \frac{r_p k_{eff}^{rx}}{\varepsilon_\gamma D_{ef}} U_p|_{\xi=1} - \frac{r_p k_{eff}^{ads}}{\varepsilon_\gamma D_{ef}} \frac{1}{\frac{r_p^2}{D_{ef}}} \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \Big|_{\xi=1}$$

Eliminando términos:

$$-\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = \frac{r_p k_f}{\varepsilon_\gamma D_{ef}} (U_p|_{\xi=1} - U_f) - \frac{r_p k_{eff}^{rx}}{\varepsilon_\gamma D_{ef}} U_p|_{\xi=1} - \frac{k_{eff}^{ads}}{\varepsilon_\gamma r_p} \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \Big|_{\xi=1}$$

Haciendo uso del Número de Biot descrito en la Ecuación (A.8) y de los coeficientes de salto descritos en las Ecuaciones (A.10) y (A.11) se obtiene:

$$-\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = Bi_m (U_p|_{\xi=1} - U_f) - \phi_1 U_p - \phi_2 \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \quad (\text{A.20})$$

Apéndice B

SOLUCIÓN POR EXPANSIÓN EN SERIES DE FOURIER

La siguiente solución se obtiene utilizando el Método de Separación de Variables, posteriormente se obtiene un problema asociado de Sturm - Liouville y se aplica el Método de Expansión en Series de Fourier.

Problema I: Problema completo

El problema completo se conforma de las Ecuaciones antes vistas (5.1) a (5.5).

El Problema Homogéneo asociado al Problema Completo es:

Para el transporte en la partícula porosa:

$$\alpha \frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 U_p \quad (\text{B.1})$$

Ecuación en el fluido donde $U_{in}(\tau) = 0$:

$$\frac{dU_f}{d\tau} = -\psi_{in} U_f + \psi_p (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (\text{B.2})$$

Condición interfacial considerando el salto del flux, en $\xi = 1$

$$-\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = \text{Bi}(U_p|_{\xi=1} - U_f) - \phi_1 U_p - \phi_2 \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \quad (\text{B.3})$$

En base a la homogeneidad de las ecuaciones diferenciales y la condición de frontera, se propone:

$$U_p(\xi, \tau) = F(\xi, \tau) \quad (\text{B.4})$$

$$U_f(\tau) = H(\tau) \quad (\text{B.5})$$

La substitución de las Ecuaciones (B.4) y (B.5) en la Ecuación (B.1) a la Ecuación (B.3) permite obtener:

En la partícula porosa:

$$\alpha \frac{\partial F}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial F}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 F \quad (\text{B.6})$$

En el fluido:

$$\frac{dH}{d\tau} = -\psi_{in} H + \psi_p (F|_{\xi=1} - H) \quad (\text{B.7})$$

Para la condición interfacial considerando el salto del flux, en $\xi = 1$

$$-\frac{\partial F}{\partial \xi} = \text{Bi}(F|_{\xi=1} - H) - \phi_1 F - \phi_2 \frac{\partial F}{\partial \tau} \quad (\text{B.8})$$

Por tratarse de un problema de separación de variables se puede encontrar para la Ecuación (B.6):

$$\alpha \frac{\partial F}{\partial \tau} + \Phi^2 = \frac{1}{F} \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial F}{\partial \xi} \right) = -\lambda^2 \quad (\text{B.9})$$

Despejando α se obtiene:

$$\frac{\partial F}{\partial \tau} + \Phi^2 = \frac{1}{\alpha} \frac{1}{F} \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial F}{\partial \xi} \right) = -\frac{\lambda^2}{\alpha} \quad (\text{B.10})$$

Por la naturaleza del problema se tiene n raíces para la función F , separando las contribuciones se obtiene para ξ :

$$\frac{1}{\alpha} \frac{1}{f_n} \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial f_n}{\partial \xi} \right) = -\frac{\lambda_n^2}{\alpha} = -\mu_n^2 \quad (\text{B.11})$$

En donde se ha utilizado la siguiente igualdad:

$$\mu_n^2 = \frac{\lambda_n^2}{\alpha} \quad (\text{B.12})$$

Para la contribución temporal de la Ecuación (B.6):

$$\frac{\partial F}{\partial \tau} = -\frac{\lambda_n^2}{\alpha} - \frac{\Phi^2}{\alpha} = -\mu_n^2 - \phi^2 = -(\mu_n^2 + \phi^2) \quad (\text{B.13})$$

Donde se ha utilizando la igualdad:

$$\phi^2 = \frac{\Phi^2}{\alpha} \quad (\text{B.14})$$

Para la ecuación del fluido se desarrolla la Ecuación (B.7) y se sustituye la contribución temporal de la Ecuación (B.13), obteniendo la expresión:

$$-(\phi^2 + \mu_n^2) = \frac{1}{h_n} [-\psi_{in} h_n + \psi_p (f_n|_{\xi=1} - h_n)] \quad (\text{B.15})$$

Para la Ecuación (B.8) que hace referencia a la condición interfacial considerando el salto del flux, se obtiene agrupando términos por su factor común f_n y sustituyendo la contribución temporal de la Ecuación (B.13), la siguiente expresión:

$$-\frac{\partial f_n}{\partial \xi} \Big|_{\xi=1} = f_n|_{\xi=1}(\text{Bi} - S_n) - \text{Bi}h_n \quad (\text{B.16})$$

Donde se ha introducido la siguiente expresión:

$$S_n = \phi_1 - \phi_2(\phi^2 + \mu_n^2) \quad (\text{B.17})$$

Las Ecuaciones (B.11), (B.15) y (B.16) definen un problema de Sturm Liouville, la solución para la Ecuación (B.6) sujeta a la condición de continuidad en el centro de la partícula es:

$$f_n(\xi) = \frac{\text{sen}(\lambda_n \xi)}{\xi} \quad (\text{B.18})$$

La relación de $h(\tau)$ con $f(\xi, \tau)$ se obtiene al substituir la Ecuación (B.18) en $\xi = 1$ y la contribución del tiempo, obteniendo para la ecuación en el fluido:

$$h_n = \frac{\psi_p f_n(1)}{\psi_p - A_n} \quad (\text{B.19})$$

Donde A_n es:

$$A_n = (\phi^2 + \mu_n^2) - \psi_{in} \quad (\text{B.20})$$

Los valores propios, es decir los valores para λ_n se obtienen al substituir las Ecuaciones (B.18) y (B.19) en la ecuación de frontera, obteniendo:

$$\frac{\tan \lambda_n}{\lambda_n} = \frac{\psi_p - A_n}{A_n \text{Bi} + (\psi_p - A_n)(1 + S_n)} \quad \text{para } n = 1, 2, 3, \dots \infty \quad (\text{B.21})$$

La condición de ortogonalidad es:

$$\alpha \int_0^1 \xi^2 f_n f_m d\xi + \frac{\text{Bi}}{\psi_p} h_m h_n - \phi_2 f_n(1) f_m(1) = 0 \quad \text{para } n \neq m \quad (\text{B.22})$$

De acuerdo a la propuesta hecha para las Ecuaciones (B.4) y (B.5) se obtiene para la solución de las Ecuaciones (B.1) a (B.3):

$$U_p(\xi, \tau) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n(\tau) f_n(\xi) \quad (\text{B.23})$$

$$U_f(\tau) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n(\tau) h_n \quad (\text{B.24})$$

Haciendo uso de la Identidad de Green:

$$\int_0^1 \xi^2 \left(f_m \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - U_p \frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{df_m}{d\xi} \right) \right) d\xi = \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \Big|_{\xi=1} f_m(1) - U_p \Big|_{\xi=1} f'_m(1) \quad (\text{B.25})$$

Utilizando las Ecuaciones (B.1) y (B.11) y sustituyendo en la Ecuación (B.25):

$$\int_0^1 \xi^2 \left[f_m \left(\alpha \frac{\partial U_p}{\partial \tau} + \Phi^2 U_p \right) + U_p \lambda_m^2 f_m \right] d\xi = \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \Big|_{\xi=1} f_m(1) - U_p \Big|_{\xi=1} f'_m(1) \quad (\text{B.26})$$

Sacando α de la integral:

$$\alpha \int_0^1 \xi^2 \left[f_m \left(\frac{\partial U_p}{\partial \tau} + \phi^2 U_p \right) + U_p \mu_m^2 f_m \right] d\xi = \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \Big|_{\xi=1} f_m(1) - U_p \Big|_{\xi=1} f'_m(1) \quad (\text{B.27})$$

Usando las Ecuaciones (B.3) y (B.16) para la expresión anterior, se obtiene:

$$\begin{aligned}
\alpha \int_0^1 \xi^2 \left[f_m \left(\frac{\partial U_p}{\partial \tau} + \phi^2 U_p \right) + U_p \mu_m^2 f_m \right] d\xi &= U_p|_{\xi=1} \left[(\text{Bi} - S_m) f_m(1) - \text{Bi} h_m \right] \\
&- f_m(1) \left[\text{Bi} (U_p|_{\xi=1} - U_f) \right. \\
&\left. - \phi_1 U_p|_{\xi=1} - \phi_2 \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \Big|_{\xi=1} \right]
\end{aligned} \tag{B.28}$$

Agrupando términos y al simplificar, se obtiene:

$$\begin{aligned}
\alpha \int_0^1 \xi^2 \left[f_m \left(\frac{\partial U_p}{\partial \tau} + (\phi^2 + \mu^2) U_p \right) \right] d\xi &= U_p|_{\xi=1} [-S_m f_m(1) - \text{Bi} h_m] \\
&- f_m(1) \left[-\text{Bi} U_f - \phi_1 U_p|_{\xi=1} - \phi_2 \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \Big|_{\xi=1} \right]
\end{aligned} \tag{B.29}$$

Despejando de la Ecuación (B.2) se puede obtener la siguiente expresión:

$$\psi_p U_p|_{\xi=1} = \frac{dU_f}{d\tau} + \psi_p U_f - \psi_{in} (U_{in}(\tau) - U_f) \tag{B.30}$$

Al sustituir la igualdad de la ecuación anterior en el desarrollo, se obtiene:

$$\begin{aligned}
MD &= -S_m f_m(1) U_p|_{\xi=1} - \text{Bi} h_m U_p|_{\xi=1} + f_m(1) \left[\text{Bi} U_f + \phi_1 U_p|_{\xi=1} + \phi_2 \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \Big|_{\xi=1} \right] \\
&- S_m f_m(1) U_p|_{\xi=1} - \frac{\text{Bi} h_m}{\psi_p} \left[\frac{\partial U_f}{\partial \tau} + \psi_p U_f - \psi_{in} (U_{in}(\tau) - U_f) \right] \\
&+ f_m(1) \left[\text{Bi} U_f + \phi_1 U_p|_{\xi=1} + \phi_2 \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \Big|_{\xi=1} \right]
\end{aligned} \tag{B.31}$$

Trabajando sólo con algunos términos de la Ecuación (B.31):

$$\begin{aligned}
& - \frac{\text{Bi}h_m}{\psi_p} \left[\frac{dU_f}{d\tau} + \psi_p U_f - \psi_{in}(U_{in}(\tau) - U_f) \right] + \text{Bi}U_f f_m(1) \\
& = - \frac{\text{Bi}h_m}{\psi_p} \left[\frac{dU_f}{d\tau} - \psi_{in}(U_{in}(\tau) - U_f) \right] + \text{Bi}U_f \left(f_m(1) - h_m \right)
\end{aligned} \tag{B.32}$$

Utilizando la Ecuación (B.18) en $\xi = 1$ se obtiene la siguiente igualdad:

$$f_n(1) = \frac{\psi_p - A_n}{\psi_p} h_n \tag{B.33}$$

Haciendo uso de la Ecuación (B.33) y agrupando términos se obtiene:

$$\begin{aligned}
& - \frac{\text{Bi}h_m}{\psi_p} \left[\frac{dU_f}{d\tau} - \psi_{in}(U_{in}(\tau) - U_f) \right] + \text{Bi}U_f \left(- \frac{A_m}{\psi_p} \right) h_m \\
& = + \frac{\text{Bi}h_m}{\psi_p} \psi_{in} U_{in}(\tau) - \frac{\text{Bi}h_m}{\psi_p} \left[\frac{dU_f}{d\tau} + (\psi_{in} + A_m) U_f \right] \\
& = + \frac{\text{Bi}h_m}{\psi_p} \psi_{in} U_{in}(\tau) - \frac{\text{Bi}h_m}{\psi_p} \left[\frac{dU_f}{d\tau} + (\phi^2 + \mu_m^2) U_f \right]
\end{aligned} \tag{B.34}$$

Por lo tanto, la Ecuación (B.31) se puede escribir de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
MD & = + \frac{\text{Bi}h_m}{\psi_p} \psi_{in} U_{in}(\tau) - \frac{\text{Bi}h_m}{\psi_p} \left[\frac{dU_f}{d\tau} + (\phi^2 + \mu_m^2) U_f \right] \\
& \quad - S_m f_m(1) U_p|_{\xi=1} + f_m(1) \left[\phi_1 U_p|_{\xi=1} + \phi_2 \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \Big|_{\xi=1} \right]
\end{aligned} \tag{B.35}$$

Utilizando nuevamente la Ecuación (B.17), se obtiene:

$$\begin{aligned}
MD = & \frac{\text{Bi}h_m}{\psi_p} \psi_{in} U_{in}(\tau) - \frac{\text{Bi}h_m}{\psi_p} \left[\frac{dU_f}{d\tau} + (\phi^2 + \mu_n^2) U_f \right] \\
& - \left(\phi_1 - \phi_2(\phi^2 + \mu_n^2) \right) f_m(1) U_p|_{\xi=1} + f_m(1) \left[\phi_1 U_p|_{\xi=1} + \phi_2 \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \Big|_{\xi=1} \right]
\end{aligned} \tag{B.36}$$

Eliminando términos, y agrupando por el factor común: $\phi_2 f_m(1)$, la ecuación anterior se reduce a la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
MD = & \frac{\text{Bi}h_m}{\psi_p} \psi_{in} U_{in}(\tau) - \frac{\text{Bi}h_m}{\psi_p} \left[\frac{dU_f}{d\tau} + (\phi^2 + \mu_n^2) U_f \right] \\
& + \phi_2 f_m(1) \left[\frac{\partial U_p}{\partial \tau} \Big|_{\xi=1} + (\phi^2 + \mu_n^2) U_p|_{\xi=1} \right]
\end{aligned} \tag{B.37}$$

Por tal motivo, la Ecuación (??) se puede escribir como:

$$\begin{aligned}
\alpha \int_0^1 \xi^2 \left[f_m \left(\frac{\partial U_p}{\partial \tau} + (\phi^2 + \mu_n^2) U_p \right) \right] d\xi = & \frac{\text{Bi}h_m}{\psi_p} \psi_{in} U_{in}(\tau) \\
& - \frac{\text{Bi}h_m}{\psi_p} \left[\frac{dU_f}{d\tau} + (\phi^2 + \mu_n^2) U_f \right] \\
& + \phi_2 f_m(1) \left[\frac{\partial U_p}{\partial \tau} \Big|_{\xi=1} + (\phi^2 + \mu_n^2) U_p \Big|_{\xi=1} \right]
\end{aligned} \tag{B.38}$$

Usando las representaciones de $U_p(\xi, \tau)$ y $U_f(\tau)$ dadas por las Ecuaciones (B.23) y (5.29):

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \alpha \int_0^1 \xi^2 \left[f_m f_n \left(\frac{dC_n}{d\tau} + (\phi^2 + \mu_n^2) C_n \right) \right] d\xi &= \frac{\text{Bi}h_m}{\psi_p} \psi_{in} U_{in}(\tau) \\ &- \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Bi}h_m h_n}{\psi_p} \left[\frac{dC_n}{d\tau} + (\phi^2 + \mu_n^2) C_n \right] \\ &+ \phi_2 \sum_{n=1}^{\infty} f_m(1) f_n(1) \left[\frac{dC_n}{d\tau} + (\phi^2 + \mu^2) C_n \right] \end{aligned}$$

Ordenando en forma tal que pueda tomarse ventaja de la condición de ortogonalidad:

$$\begin{aligned} \frac{\text{Bi}h_m}{\psi_p} \psi_{in} U_{in}(\tau) &= \sum_{n=1}^{\infty} \left[\left(\frac{dC_n}{d\tau} + (\phi^2 + \mu_n^2) C_n \right) \right. \\ &\left. \left(\alpha \int_0^1 \xi^2 f_m f_n d\xi + \frac{\text{Bi}h_m h_n}{\psi_p} - \phi_2 f_m(1) f_n(1) \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

Utilizando la condición de ortogonalidad dada por la Ecuación (B.22):

$$\frac{\text{Bi}h_n}{\psi_p} \psi_{in} U_{in}(\tau) = \left(\frac{dC_n}{d\tau} + (\phi^2 + \mu_n^2) C_n \right) \left(\alpha \int_0^1 \xi^2 f_n^2 d\xi + \frac{\text{Bi}h_n^2}{\psi_p} - \phi_2 f_n^2(1) \right) \quad (\text{B.40})$$

Despejando para $C_n(\tau)$ se obtiene:

$$\frac{dC_n}{d\tau} + (\phi^2 + \mu_n^2) C_n = \frac{\frac{\text{Bi}h_n}{\psi_p} \psi_{in} U_{in}(\tau)}{\alpha \int_0^1 \xi^2 f_n^2 d\xi + \frac{\text{Bi}h_n^2}{\psi_p} - \phi_2 f_n^2(1)} \quad (\text{B.41})$$

La solución de esta ecuación diferencial para $C_n(\tau)$ es:

$$C_n(\tau) = \exp \left[-(\phi^2 + \mu_n^2)\tau \right] \left(C_n(0) \frac{\text{Bi}\psi_{in}}{\psi_p} K_n \int_0^\tau U_{in}(\varsigma) \exp[-(\phi^2 + \mu_n^2)\varsigma] d\varsigma \right) \quad (\text{B.42})$$

Donde se ha utilizado la siguiente igualdad:

$$K_n = \frac{h_n}{\alpha \int_0^1 \xi^2 f_n^2 d\xi + \frac{\text{Bi}h_n^2}{\psi_p} - \phi_2 f_n^2(1)} \quad (\text{B.43})$$

La condición inicial $C_n(0)$ se obtiene de las condiciones iniciales de U_p y U_f .

$$C_n(0) = \frac{\alpha U_{p0} \int_0^1 \xi^2 f_n(\xi) d\xi + \frac{\text{Bi}}{\psi_p} U_{p0} h_n - U_{p0} \phi_2 f_n(1)}{\alpha \int_0^1 \xi^2 f_n^2(\xi) d\xi + \frac{\text{Bi}}{\psi_p} h_n^2 - \phi_2 f_n^2(1)} \quad (\text{B.44})$$

En el Apéndice D se observa que la Ecuación (B.42) puede ser escrita de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} C_n(\tau) = & \frac{2\psi_p}{D_n h_n} \exp-(\phi^2 + \mu_n^2)\tau \left(U_{f0} \text{Bi} \lambda_n^2 - \alpha U_{p0} A_n \text{Bi} \right) \\ & + \frac{2\psi_p}{D_n h_n} \exp-(\phi^2 + \mu_n^2)\tau \left(\alpha U_{p0} (\psi_p - A_n) [S_n + \phi_2 \lambda_n^2] \right) \\ & + \frac{2\psi_p}{D_n h_n} \exp-(\phi^2 + \mu_n^2)\tau \left(\text{Bi} \psi_{in} \lambda_n^2 \int_0^\tau U_{in}(\varsigma) \exp[(\phi^2 + \mu_n^2)\varsigma] d\varsigma \right) \end{aligned} \quad (\text{B.45})$$

La ecuación anterior podemos simplificarla de la siguiente forma:

$$C_n(\tau) = \frac{2\psi_p}{D_n h_n} \exp[-(\phi^2 + \mu^2)\tau] \left[\text{Bi}(U_{f0}\lambda_n^2 - \alpha U_{p0}A_n) \right. \\ \left. + U_{p0}(\psi_p - A_n)(\alpha\phi_1 - \phi_2\Phi^2) \right] + \frac{2\psi_p}{D_n h_n} \text{Bi}\psi_{in}\lambda_n^2 I_{in}(\tau) \quad (\text{B.46})$$

Esto es posible debido a la siguiente relación:

$$\alpha S_n + \phi_2 \lambda_n^2 = \alpha\phi_1 - \phi_2(\alpha\Phi^2 + \alpha\mu_n^2) + \phi_2 \lambda_n^2 = \alpha\phi_1 - \phi_2\Phi^2 \quad (\text{B.47})$$

Redefiniendo para la Ecuación (B.17):

$$S_n = \phi_1 - \phi_2 \left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha} \right) \quad (\text{B.48})$$

Además para la Ecuación (B.20) se obtiene:

$$A_n = \left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha} \right) - \psi_{in} \quad (\text{B.49})$$

También se introdujo para la condición de entrada:

$$I_{in}(\tau) = \exp \left[- \left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha} \right) \tau \right] \int_0^\tau U_{in}(\varsigma) \exp \left[+ \left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha} \right) \varsigma \right] d\varsigma \quad (\text{B.50})$$

La concentración en el líquido que está dada por la Ecuación (B.24), es:

$$\begin{aligned}
U_f(\tau) &= \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left[-(\phi^2 + \mu_n^2)\tau\right] \left(2\psi_p \text{Bi}[U_{f0}\lambda_n^2 - \alpha U_{p0}A_n]\right) \\
&\quad - \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left[-(\phi^2 + \mu_n^2)\tau\right] \left(2\psi_p(\psi_p - A_n)U_{p0}[\alpha\phi_1 - \phi_2\Phi^2]\right) \\
&\quad + \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left[-(\phi^2 + \mu_n^2)\tau\right] \frac{2\text{Bi}\psi_{in}\lambda_n^2\psi_p}{D_n} \int_0^\tau U_{in}(\varsigma) \exp\left[+(\phi^2 + \mu_n^2)\varsigma\right] d\varsigma
\end{aligned} \tag{B.51}$$

Finalmente se identifican las contribuciones en la ecuación:

$$\begin{aligned}
U_f(\tau) &= \underbrace{2\psi_p \text{Bi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(U_{f0}\lambda_n^2 - \alpha U_{p0}A_n)}{D_n} \exp\left[-\left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha}\right)\tau\right]}_{\text{Efecto de las condiciones iniciales}} \\
&\quad - \underbrace{2\psi_p U_{p0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\alpha\phi_1 - \phi_2\Phi^2)(\psi_p - A_n)}{D_n} \exp\left[-\left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha}\right)\tau\right]}_{\text{Efecto de la condición de frontera}} \\
&\quad + \underbrace{2\text{Bi}\psi_{in}\psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda_n^2}{D_n} I_{in}(\tau)}_{\text{Efecto de la condición de entrada}}
\end{aligned} \tag{B.52}$$

Ahora es posible obtener la concentración para el sólido a partir de las Ecuaciones (5.28), (??) y (B.50):

$$\begin{aligned}
U_p(\xi, \tau) &= 2\text{Bi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(U_{f0}\lambda_n^2 - \alpha U_{p0}A_n)(\psi_p - A_n)}{D_n} \frac{\text{sen}(\lambda_n\xi)}{\xi \text{sen}\lambda_n} \exp\left[-\left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha}\right)\tau\right] \\
&\quad + 2U_{p0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\alpha\phi_1 - \phi_2\Phi^2)(\psi_p - A_n)^2}{D_n} \frac{\text{sen}(\lambda_n\xi)}{\xi \text{sen}\lambda_n} \exp\left[-\left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha}\right)\tau\right] \\
&\quad + 2\text{Bi}\psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda_n^2(\psi_p - A_n)}{D_n} \frac{\text{sen}(\lambda_n\xi)}{\xi \text{sen}\lambda_n} I_{in}(\tau)
\end{aligned} \tag{B.53}$$

En esta se puede identificar el mismo tipo de contribuciones que en la Ecuación (B.52).

$$\begin{aligned}
U_p(\xi, \tau) = & \underbrace{2\text{Bi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(U_{f0}\lambda_n^2 - \alpha U_{p0}A_n)(\psi_p - A_n) \text{sen}(\lambda_n\xi)}{D_n \xi \text{sen}\lambda_n} \exp\left[-\left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha}\right)\tau\right]}_{\text{Efecto de las condiciones iniciales}} \\
& + \underbrace{2U_{p0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\alpha\phi_1 - \phi_2\Phi^2)(\psi_p - A_n)^2 \text{sen}(\lambda_n\xi)}{D_n \xi \text{sen}\lambda_n} \exp\left[-\left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha}\right)\tau\right]}_{\text{Efecto de la condición de frontera}} \\
& + \underbrace{2\text{Bi}\psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^2(\psi_p - A_n) \text{sen}(\lambda_n\xi)}{D_n \xi \text{sen}\lambda_n} I_{in}(\tau)}_{\text{Efecto de la condición de entrada}}
\end{aligned} \tag{B.54}$$

Apéndice C

SOLUCIÓN ANALÍTICA DE LA TRANSFORMADA DE LAPLACE

Antes de entrar a la solución del problema de interés por el método de Transformada de Laplace, por la complejidad del problema debido a sus términos no homogéneos, se propone para la obtención de la solución utilizar una superposición:

Problema I: Problema Completo

Ecuación en las partículas:

$$\alpha \frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 U_p \quad (\text{C.1})$$

La ecuación en el fluido:

$$\frac{\partial U_f}{\partial \tau} = \psi_{in}(U_{in}(\tau) - U_f) + \psi_p(U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (\text{C.2})$$

La condición interfacial considerando el salto del flux:

En $\xi = 1$

$$-\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = \text{Bi}(U_p|_{\xi=1} - U_f) - \phi_1 U_p - \phi_2 \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \quad (\text{C.3})$$

Condiciones iniciales en $\tau = 0$:

$$U_f = U_{f0} \quad (\text{C.4})$$

$$U_p = U_{p0} \quad \text{para } 0 \leq \xi \leq 1 \quad (\text{C.5})$$

La superposición propuesta para la concentración en la partícula es:

$$U_p(\xi, \tau) = W_p(\xi, \tau) + u_p(\xi, \tau) \quad (\text{C.6})$$

Superposición propuesta para la concentración en el fluido:

$$U_f(\tau) = W_f(\tau) + u_f(\tau) \quad (\text{C.7})$$

Se plantea la solución del sistema de ecuaciones, de tal manera que la W_f y la W_p contengan los efectos de la alimentación no homogénea, es decir, $U_{in}(\tau)$ y para el problema de la u_f y la u_p la condición inicial del fluido donde $U_{f0} \neq 0$, obteniendo los siguientes sistemas de ecuaciones.

Problema II

Ecuación en la partícula:

$$\alpha \frac{\partial W_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial W_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 W_p \quad (\text{C.8})$$

Ecuación en el fluido:

$$\frac{\partial W_f}{\partial \tau} = \psi_{in}(U_{in}(\tau) - W_f) + \psi_p(W_p|_{\xi=1} - W_f) \quad (\text{C.9})$$

Condición interfacial considerando el salto del flux, en $\xi = 1$

$$\frac{\partial W_p}{\partial \xi} = \text{Bi}(W_p|_{\xi=1} - W_f) - \phi_1 W_p - \phi_2 \frac{\partial W_p}{\partial \tau} \quad (\text{C.10})$$

Condiciones iniciales en $\tau = 0$

$$W_f = U_{f0} \quad (\text{C.11})$$

$$W_p = 0 \quad \text{para } 0 \leq \xi \leq 1 \quad (\text{C.12})$$

Problema III

Ecuación en la partícula

$$\alpha \frac{\partial u_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial u_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 u_p \quad (\text{C.13})$$

Ecuación en el fluido:

$$\frac{\partial u_f}{\partial \tau} = -\psi_{in} u_f + \psi_p (u_p|_{\xi=1} - u_f) \quad (\text{C.14})$$

Condición interfacial considerando el salto del flux, en $\xi = 1$

$$\frac{\partial u_p}{\partial \xi} = \text{Bi}(u_p|_{\xi=1} - u_f) - \phi_1 u_p - \phi_2 \frac{\partial u_p}{\partial \tau} \quad (\text{C.15})$$

Condiciones iniciales en $\tau = 0$

$$u_f = 0 \quad (\text{C.16})$$

$$u_p = U_{p0} \quad \text{para } 0 \leq \xi \leq 1 \quad (\text{C.17})$$

Para encontrar la solución del Problema II se requiere de la Transformada de Laplace para las Ecs. (C.8) a (C.10).

Partículas:

$$\alpha s \overline{W}_p = \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial \overline{W}_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 \overline{W}_p \quad (\text{C.18})$$

En el fluido:

$$s \overline{W}_f - U_{f0} = \psi_{in} (\overline{U}_{in}(s) - \overline{W}_f) + \psi_p (\overline{W}_p|_{\xi=1} - \overline{W}_f) \quad (\text{C.19})$$

Condición interfacial (salto de flux) en $\xi = 1$:

$$-\frac{\partial \overline{W}_p}{\partial \xi} = \text{Bi} (\overline{W}_p|_{\xi=1} - \overline{W}_f) - \phi_1 \overline{W}_p - \phi_2 s \overline{W}_p \quad (\text{C.20})$$

Para la solución se proponen las siguientes superposiciones:

$$\overline{W}_p(\xi, s) = \overline{w}_p(\xi, s) + \beta(s) \overline{w}_p(\xi, s) \quad (\text{C.21})$$

$$\overline{W}_f(s) = \overline{w}_f(s) + \beta(s) \overline{w}_f(s) \quad (\text{C.22})$$

Las ecuaciones anteriores están en términos de $\overline{w}_p(\xi, s)$ y $\overline{w}_f(s)$ que son las soluciones del problema siguiente:

Problema IIA

Ecuación en la partícula:

$$\alpha s \overline{w_p} = \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial \overline{w_p}}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 \overline{w_p} \quad (\text{C.23})$$

En el fluido:

$$s \overline{w_f} - U_{f0} = -\psi_{in} \overline{w_f} + \psi_p (\overline{w_p}|_{\xi=1} - \overline{w_f}) \quad (\text{C.24})$$

Condición interfacial (salto de flux) en $\xi = 1$:

$$-\frac{\partial \overline{w_p}}{\partial \xi} = \text{Bi}(\overline{w_p}|_{\xi=1} - \overline{w_f}) - \phi_1 \overline{w_p} - \phi_2 s \overline{w_p} \quad (\text{C.25})$$

En donde $\beta(s)$ se encontrará para que las Ecs. (C.21) y (C.22) satisfagan el problema dado por las Ecs. (C.23) y (C.25).

La substitución de la Ecuación (C.21) en la Ecuación (C.23) da como resultado y por ella esta última es satisfecha.

$$\alpha s \overline{w_p} + \beta(s) \overline{w_p} = \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial \overline{w_p}}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 \overline{w_p} + \beta(s) \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial \overline{w_p}}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 \overline{w_p} \quad (\text{C.26})$$

De forma análoga la substitución de las Ecs. (C.21) y (C.22) en (C.25) da como resultado:

$$-\frac{\partial \overline{w_p}}{\partial \xi} - \beta(s) \frac{\partial \overline{w_p}}{\partial \xi} = \text{Bi}(\overline{w_p}|_{\xi=1} - \overline{w_f}) - \phi_1 \overline{w_p} - \phi_2 s \overline{w_p} + \beta(s) \text{Bi}(\overline{w_p}|_{\xi=1} - \overline{w_f}) - \phi_1 \overline{w_p} - \phi_2 s \overline{w_p} \quad (\text{C.27})$$

Lo cual indica que la Ecuación (C.21) y la Ecuación (C.22) la satisfacen idénticamente. Además la substitución de la Ecuación (C.21) y (C.22) en la Ecuación (C.19) da como resultado.

$$s\overline{w_f} + \beta(s)\overline{w_f} - U_{f0} = \psi_{in}(\overline{U_{in}}(s) - \overline{w_f} - \beta(s)\overline{w_f}) + \psi_p(\overline{w_p}|_{\xi=1} + \beta(s)\overline{w_p}|_{\xi=1} - \overline{w_f} - \beta(s)\overline{w_f}) \quad (\text{C.28})$$

$$s\overline{w_f} - U_{f0} + \beta(s)s\overline{w_f} = -\psi_{in}\overline{w_f} - \psi_{in}(\overline{U_{in}}(s) - \beta(s)\overline{w_f}) + \psi_p(\overline{w_p}|_{\xi=1} - \overline{w_f}) + \beta(s)\psi_p(\overline{w_p}|_{\xi=1} - \overline{w_f}) \quad (\text{C.29})$$

Este último resultado debido a la Ec. (C.24) se reduce a:

$$\beta(s)s\overline{w_f} = \psi_{in}(\overline{U_{in}}(s) - \beta(s)\overline{w_f}) + \beta(s)\psi_p(\overline{w_p}|_{\xi=1} - \overline{w_f}) \quad (\text{C.30})$$

Al manipular la ecuación anterior, se obtiene:

$$\beta(s)s\overline{w_f} - \psi_{in}\overline{U_{in}}(s) = -\psi_p\beta(s)\overline{w_f} + \beta(s)\psi_p(\overline{w_p}|_{\xi=1} - \overline{w_f}) \quad (\text{C.31})$$

Que podrá ser satisfecha si toma la forma de la Ec. (C.24) y para ello se requiere de la siguiente igualdad:

$$\beta(s) = \frac{\psi_{in}\overline{U_{in}}(s)}{U_{f0}} \quad (\text{C.32})$$

Con este resultados es posible escribir las Ecs. (C.24) y (C.24) de la siguiente forma:

$$\overline{W_p}(\xi, s) = \overline{w_p}(\xi, s)\beta(s) + \frac{\psi_{in}\overline{U_{in}}(s)}{U_{f0}}\overline{w_p}(\xi, s) \quad (\text{C.33})$$

$$\overline{W_f}(s) = \overline{w_f}(s)\beta(s) + \frac{\psi_{in}\overline{U_{in}}(s)}{U_{f0}}\overline{w_f}(s) \quad (\text{C.34})$$

Por ello al tomar la transformada inversa y usando el teorema de la convolución se obtiene

para la Ecuación (C.21):

$$W_p(\xi, \tau) = w_p(\xi, \tau) + \frac{\psi_{in}}{U_{f0}} \int_0^\tau U_{in}(\tau - \varsigma) w_p(\xi, \varsigma) \partial \varsigma \quad (\text{C.35})$$

y para la Ecuación (C.22)

$$W_f(\tau) = w_f(\tau) + \frac{\psi_{in}}{U_{f0}} \int_0^\tau U_{in}(\tau - \varsigma) w_f(\varsigma) \partial \varsigma \quad (\text{C.36})$$

Una vez que se obtienen las expresiones para W_p y W_f en términos de w_p y w_f dadas por las ecuaciones es necesario encontrar las soluciones de w_p y w_f sujetas a las Ecs. (C.13) a (C.17) que definen el Problema III. La solución de w_p y w_f son la solución del problema original en donde U_{in} y U_{p0} se hacen iguales a cero, es decir:

La ecuación en la partícula:

$$\alpha \frac{\partial w_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial w_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 w_p \quad (\text{C.37})$$

Ecuación en el fluido:

$$\frac{\partial w_f}{\partial \tau} = -\psi_{in} w_f + \psi_p (w_p|_{\xi=1} - w_f) \quad (\text{C.38})$$

Condición interfacial considerando el salto del flux, en $\xi = 1$

$$\frac{\partial w_p}{\partial \xi} = \text{Bi}(w_p|_{\xi=1} - w_f) - \phi_1 w_p - \phi_2 \frac{\partial w_p}{\partial \tau} \quad (\text{C.39})$$

Condiciones iniciales

$$w_f = U_{f0} \quad (\text{C.40})$$

$$w_p = U_{p0} \quad \text{para } 0 \leq \xi \leq 1 \quad (\text{C.41})$$

Debido a la linealidad del problema inicial, debe ser claro que w_p, w_f y u_p, u_f están contenidos en la solución del problema para V_p y V_f . Esto porque son la solución del problema original en donde U_{in} se hace cero y tanto U_{p0} como U_{f0} son diferentes de cero. De esta forma, la solución del problema dado por las Ecuaciones. (C.6) y (C.7) se pueden escribir:

$$U_p(\xi, \tau) = u_p(\xi, \tau) + w_p(\xi, \tau) + \frac{\psi_{in}}{U_{f0}} \int_0^\tau U_{in}(\tau - \varsigma) w_p(\xi, \varsigma) \partial \varsigma \quad (\text{C.42})$$

y

$$U_f(\tau) = u_f(\tau) + w_f(\tau) + \frac{\psi_{in}}{U_{f0}} \int_0^\tau U_{in}(\tau - \varsigma) w_f(\xi, \varsigma) \partial \varsigma \quad (\text{C.43})$$

Es decir:

$$U_p(\xi, \tau) = V_p(\xi, \tau, U_{f0}, 0) + V_p(\xi, \tau, 0, U_{p0}) + \frac{\psi_{in}}{U_{f0}} \int_0^\tau U_{in}(\tau - \varsigma) V_p(\xi, \varsigma, U_{f0}, 0) \partial \varsigma \quad (\text{C.44})$$

y

$$U_f(\tau) = V_f(\tau, U_{f0}, 0) + V_f(\tau, 0, U_{p0}) + \frac{\psi_{in}}{U_{f0}} \int_0^\tau U_{in}(\tau - \varsigma) V_f(\varsigma, U_{f0}, 0) \partial \varsigma \quad (\text{C.45})$$

En donde V_p y V_f son la solución del problema dado por:

La ecuación en la partícula:

$$\alpha \frac{\partial V_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial V_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 V_p \quad (\text{C.46})$$

Ecuación en el fluido:

$$\frac{\partial V_f}{\partial \tau} = -\psi_{in} V_f + \psi_p (V_p|_{\xi=1} - V_f) \quad (\text{C.47})$$

Condición interfacial considerando el salto del flux, en $\xi = 1$

$$\frac{\partial V_p}{\partial \xi} = \text{Bi}(V_p|_{\xi=1} - V_f) - \phi_1 V_p - \phi_2 \frac{\partial V_p}{\partial \tau} \quad (\text{C.48})$$

Condiciones iniciales

$$V_f = U_{f0} \quad (\text{C.49})$$

$$V_p = U_{p0} \quad \text{para } 0 \leq \xi \leq 1 \quad (\text{C.50})$$

SOLUCIÓN ANALÍTICA POR TRANSFORMADA DE LAPLACE

Obtención de la solución analítica del problema utilizando el Método de la Transformada de Laplace.

Ecuación en la partícula:

$$\alpha \frac{\partial V_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial V_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 V_p \quad (\text{C.51})$$

Ecuación en el fluido:

$$\frac{dV_f}{d\tau} = -\psi_{in}V_f + \psi_p(V_p|_{\xi=1} - V_f) \quad (\text{C.52})$$

Condición interfacial (salto del flux) en $\xi = 1$:

$$-\frac{\partial V_p}{\partial \xi} = \text{Bi}(V_p|_{\xi=1} - V_f) - \phi_1 V_p - \phi_2 \frac{\partial V_p}{\partial \tau} \quad (\text{C.53})$$

Condiciones iniciales para el fluido y la partícula en $\tau = 0$:

$$V_f = V_{f0} \quad (\text{C.54})$$

$$V_p = U_{p0} \quad \text{para } 0 \leq \xi \leq 1 \quad (\text{C.55})$$

En el dominio de Laplace, cuando $U_{in} = 0$ se encuentran las siguientes ecuaciones:

En las partículas:

$$(\alpha s + \Phi^2)\bar{V}_p(\xi, s) - \alpha U_{p0} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial \bar{V}_p}{\partial \xi} \right) \quad (\text{C.56})$$

En el fluido:

$$s\bar{V}_f - U_{f0} = -\psi_{in}\bar{V}_f + \psi_p(\bar{V}_p|_{\xi=1} - \bar{V}_f)$$

Agrupando para \bar{V}_f , se obtiene para el fluido:

$$\bar{V}_f(s + \psi_{in} + \psi_p) = \psi_p\bar{V}_p|_{\xi=1} + U_{f0} \quad (\text{C.57})$$

Para la condición de frontera interfacial en $\xi = 1$ se obtiene la ecuación:

$$-\frac{d\bar{V}_p}{d\xi} = \text{Bi}(\bar{V}_p|_{\xi=1} - \bar{V}_f) - \phi_1 \bar{V}_p|_{\xi=1} - \phi_2 (s\bar{V}_p|_{\xi=1} - U_{p0})$$

Agrupando términos para $\bar{V}_p|_{\xi=1}$, se obtiene

$$-\frac{d\bar{V}_p}{d\xi} = (\text{Bi} - \phi_1 - \phi_2 s)\bar{V}_p|_{\xi=1} - \text{Bi}\bar{V}_f + \phi_2 U_{p0} \quad (\text{C.58})$$

Las condiciones iniciales para el fluido y la partícula han sido incorporadas en las Ecs. (C.56) a (C.58). La solución para la Ec. (C.56) es:

$$\bar{V}_p(\xi, s) = C_1 \frac{\sinh(\beta\xi)}{\xi} + \alpha \frac{U_{p0}}{\beta^2} \quad (\text{C.59})$$

$$\beta = \sqrt{\alpha s + \Phi^2} \quad (\text{C.60})$$

La derivada de la Ecuación (C.59) es:

$$\frac{d}{d\xi} \bar{V}_p(\xi, s) = C_1 \frac{\beta\xi \cosh(\beta\xi) - \sinh(\beta\xi)}{\xi^2} \quad (\text{C.61})$$

Utilizando las Ecs. (C.59) y (C.61) en la Ec. (C.58) se obtiene en $\xi = 1$:

$$-C_1[\beta \cosh(\beta) - \sinh(\beta)] = (\text{Bi} - \phi_1 - \phi_2 s) \left(C_1 \sinh(\beta) + \alpha \frac{U_{p0}}{\beta^2} \right) - \text{Bi}\bar{V}_f + \phi_2 U_{p0}$$

$$-C_1[\beta \cosh(\beta) - \sinh(\beta) + (\text{Bi} - \phi_1 - \phi_2 s)\sinh(\beta)] = -\text{Bi}\bar{V}_f + \phi_2 U_{p0} + \alpha \frac{\text{Bi} - \phi_1 - \phi_2 s}{\beta^2} U_{p0}$$

Despejando para C_1 se obtiene:

$$C_1 = \frac{\text{Bi}\bar{V}_f - \phi_2 U_{p0} - \alpha \frac{(\text{Bi} - \phi_1 - \phi_2 s) U_{p0}}{\beta^2}}{\beta \cosh(\beta) + (\text{Bi} - 1 - \phi_1 - \phi_2 s) \sinh(\beta)} \quad (\text{C.62})$$

Al escribir la ecuación anterior en (C.57) junto con (C.59) se obtiene:

$$\begin{aligned} \bar{V}_f(s + \psi_{in} + \psi_p) &= \psi_p \frac{\text{Bi}\bar{V}_f - \phi_2 U_{p0} - \alpha \frac{(\text{Bi} - \phi_1 - \phi_2 s) U_{p0}}{\beta^2}}{\beta \cosh(\beta) + (\text{Bi} - 1 - \phi_1 - \phi_2 s) \frac{\sinh(\beta)}{\beta}} \frac{\sinh(\beta)}{\beta} \\ &\quad + \alpha \psi_p \frac{U_{p0}}{\beta^2} + U_{f0} \end{aligned} \quad (\text{C.63})$$

Ordenando la ecuación para agrupar los términos con el factor común de \bar{V}_f :

$$\begin{aligned} &\bar{V}_f \left(s + \psi_{in} + \psi_p - \psi_p \frac{\text{Bi} \sinh(\beta)}{\cosh(\beta) + (\text{Bi} - 1 - \phi_1 - \phi_2 s) \frac{\sinh(\beta)}{\beta}} \right) \\ &= -\psi_p U_{p0} \frac{\phi_2 + \frac{\alpha(\text{Bi} - \phi_1 - \phi_2 s)}{\beta^2}}{\cosh(\beta) + (\text{Bi} - 1 - \phi_1 - \phi_2 s) \frac{\sinh(\beta)}{\beta}} \frac{\sinh(\beta)}{\beta} + \alpha \psi_p \frac{U_{p0}}{\beta^2} + U_{f0} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\bar{V}_f \left((s + \psi_{in} + \psi_p) \left[\cosh(\beta) + (\text{Bi} - 1 - \phi_1 - \phi_2 s) \frac{\sinh(\beta)}{\beta} \right] - \psi_p \frac{\text{Bi} \sinh(\beta)}{\beta} \right) \\ &= \psi_p U_{p0} \frac{\phi_2 + \frac{\alpha(\text{Bi} - \phi_1 - \phi_2 s)}{\beta^2}}{+} (\alpha \psi_p \frac{U_{p0}}{\beta^2} + U_{f0}) \left[\cosh(\beta) + (\text{Bi} - 1 - \phi_1 - \phi_2 s) \frac{\sinh(\beta)}{\beta} \right] \end{aligned}$$

Despejando para \bar{V}_f se obtiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
\bar{V}_f &= \frac{U_{f0}[\cosh(\beta) + (\text{Bi} - 1 - \phi_1 - \phi_2 s) \frac{\sinh(\beta)}{\beta}]}{M(s)} \\
&- \frac{\psi_p U_{p0} \phi_2 + \frac{\alpha(\text{Bi} - \phi_1 - \phi_2 s) \sinh(\beta)}{\beta^2}}{M(s)} \\
&+ \frac{(\alpha \psi_p \frac{U_{p0}}{\beta^2})[\cosh(\beta) + (\text{Bi} - 1 - \phi_1 - \phi_2 s) \frac{\sinh(\beta)}{\beta}]}{M(s)}
\end{aligned} \tag{C.64}$$

Donde $M(s)$ es:

$$\begin{aligned}
M(s) &= (s + \psi_{in} + \psi_p) \left[\cosh(\beta) + (\text{Bi} - 1 - \phi_1 - \phi_2 s) \frac{\sinh(\beta)}{\beta} \right] \\
&- \psi_p \text{Bi} \frac{\sinh(\beta)}{\beta}
\end{aligned} \tag{C.65}$$

Por lo tanto, la Ecuación (C.64) se puede reescribir como:

$$\begin{aligned}
\bar{V}_f &= \frac{U_{f0}[\cosh(\beta) + (\text{Bi} - 1 - \phi_1 - \phi_2 s) \frac{\sinh(\beta)}{\beta}]}{M(s)} \\
&- \frac{\psi_p U_{p0} \phi_2 \frac{\sinh(\beta)}{\beta}}{M(s)} - \frac{\psi_p U_{p0} \alpha (\text{Bi} - 1 - \phi_1 - \phi_2 s)}{\beta^2 M(s)} \\
&+ \frac{\alpha \psi_p U_{p0} [\cosh(\beta) + (\text{Bi} - 1 - \phi_1 - \phi_2 s) \frac{\sinh(\beta)}{\beta}]}{\beta^2 M(s)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{V}_f &= \frac{U_{f0}[\cosh(\beta) + (\text{Bi} - 1 - \phi_1 - \phi_2 s)\frac{\sinh(\beta)}{\beta}]}{M(s)} \\
&+ \frac{\alpha\psi_p U_{p0}[(\text{Bi} - \phi_1 - \phi_2 s)\frac{\sinh(\beta)}{\beta} + \cosh(\beta) + (\text{Bi} - 1 - \phi_1 - \phi_2 s)\frac{\sinh(\beta)}{\beta}]}{\beta^2 M(s)} \\
&- \frac{\psi_p U_{p0}\phi_2\frac{\sinh(\beta)}{\beta}}{M(s)} \\
\bar{V}_f &= \frac{U_{f0} \left[\cosh(\beta) + (\text{Bi} - 1 - \phi_1 - \phi_2 s)\frac{\sinh(\beta)}{\beta} \right]}{M(s)} \\
&+ \frac{\alpha\psi_p U_{p0} \left[\cosh(\beta)\frac{\sinh(\beta)}{\beta} \right]}{\beta^2 M(s)} - \frac{\psi_p U_{p0}\phi_2\frac{\sinh(\beta)}{\beta}}{M(s)} \tag{C.66}
\end{aligned}$$

La ecuación anterior es una presentación muy importante, pues debe notarse que en el polo cuando $\beta = 0$ la expresión es cero y por lo tanto solo es necesario preocuparse de los polos resultantes cuando $M(s) = 0$, es decir:

$$(s + \psi_{in} + \psi_p) \left[\cosh(\beta) + (\text{Bi} - 1 - \phi_1 - \phi_2 s)\frac{\sinh(\beta)}{\beta} \right] - \psi_p \text{Bi} \frac{\sinh(\beta)}{\beta} = 0 \tag{C.67}$$

La Ecuación (C.67) se puede expresar de la siguiente forma:

$$\left[\cosh(\beta) + (\text{Bi} - 1 - \phi_1 - \phi_2 s)\frac{\sinh(\beta)}{\beta} \right] = \frac{\psi_p \text{Bi} \frac{\sinh(\beta)}{\beta}}{(s + \psi_{in} + \psi_p)} \tag{C.68}$$

También se puede representar cómo:

$$\cosh(\beta) - \frac{\sinh(\beta)}{\beta} = \frac{\psi_p \text{Bi} - (s + \psi_{in} + \psi_p)(\text{Bi} - \phi_1 - \phi_2 s)\frac{\sinh(\beta)}{\beta}}{(s + \psi_{in} + \psi_p)} \tag{C.69}$$

Utilizando la Ecuación (E.23) en la Ecuación (C.66), se obtiene:

$$\begin{aligned}\bar{V}_f &= \frac{U_{f0}\psi_p \text{Bi} \frac{\sinh(\beta)}{\beta}}{(s + \psi_{in} + \psi_p)M(s)} \\ &+ \frac{\alpha\psi_p U_{p0}[\psi_p \text{Bi} - (s + \psi_{in} + \psi_p)(\text{Bi} - \phi_1 - \phi_2 s)] \frac{\sinh(\beta)}{\beta}}{(s + \psi_{in} + \psi_p)\beta^2 M(s)} \\ &- \frac{\psi_p U_{p0\phi_2} \frac{\sinh(\beta)}{\beta}}{M(s)}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{V}_f &= \frac{U_{f0}\psi_p \text{Bi} \frac{\sinh(\beta)}{\beta}}{(s + \psi_{in} + \psi_p)M(s)} \\ &+ \frac{\alpha\psi_p U_{p0}[\psi_p \text{Bi} - \text{Bi}(s + \psi_{in} + \psi_p + (s + \psi_{in} + \psi_p)(\phi_1 + \phi_2 s))] \frac{\sinh(\beta)}{\beta}}{(s + \psi_{in} + \psi_p)\beta^2 M(s)} \\ &- \frac{\psi_p U_{p0\phi_2} \frac{\sinh(\beta)}{\beta}}{M(s)}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{V}_f &= \frac{U_{f0}\psi_p \text{Bi} \frac{\sinh(\beta)}{\beta}}{(s + \psi_{in} + \psi_p)M(s)} \\ &+ \frac{\alpha\psi_p U_{p0}[\psi_p \text{Bi} - \text{Bi}(s + \psi_{in} + \psi_p)] \frac{\sinh(\beta)}{\beta}}{(s + \psi_{in} + \psi_p)\beta^2 M(s)} \\ &+ \frac{\alpha\psi_p U_{p0}[(s + \psi_{in} + \psi_p)(\phi_1 + \phi_2 s)] \frac{\sinh(\beta)}{\beta}}{(s + \psi_{in} + \psi_p)\beta^2 M(s)} - \frac{\psi_p U_{p0\phi_2} \frac{\sinh(\beta)}{\beta}}{M(s)}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{V}_f = & \psi_p \text{Bi} \frac{U_{f0} \beta^2 - \alpha U_{p0} (s + \psi_{in}) \sinh(\beta)}{(s + \psi_{in} + \psi_p) \beta^2 M(s)} \frac{\sinh(\beta)}{\beta} \\
& + \frac{\alpha \psi_p U_{p0} [(s + \psi_{in} + \psi_p) (\phi_1 + \phi_2 s)] \frac{\sinh(\beta)}{\beta}}{(s + \psi_{in} + \psi_p) \beta^2 M(s)} \\
& - \frac{\psi_p U_{p0} \phi_2 \frac{\sinh(\beta)}{\beta}}{M(s)}
\end{aligned} \tag{C.70}$$

Al conocer la derivada de $M(s)$, donde su obtención se muestra a detalle más adelante, en el presente apéndice:

$$\frac{dM}{ds} = \frac{D}{2\lambda^2(\psi - A)} \frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda} \tag{C.71}$$

Utilizando las siguientes igualdades:

$$A_n = \left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha} \right) - \psi_{in} \tag{C.72}$$

$$S_n = \phi_1 - \phi_2 \left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha} \right) \tag{C.73}$$

Donde conocemos que: $\beta^2 = -\lambda^2$ y por lo tanto:

$$s = -\frac{\lambda^2 + \Phi^2}{\alpha} \tag{C.74}$$

Se obtiene la inversa de la Ecuación (C.70) es:

$$\begin{aligned}
Vf(\tau) = & 2\psi_p \text{Bi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[U_{f0}\lambda_n^2 - \alpha U_{p0}A_n]}{D_n} \exp\left[-\left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha}\right)\tau\right] \\
& - 2\psi_p U_{p0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[\psi_p - A_n][\alpha\phi_1 - \phi_2\Phi^2]}{D_n} \exp\left[-\left(\frac{\Phi^2 + \lambda_n^2}{\alpha}\right)\tau\right] \quad (\text{C.75})
\end{aligned}$$

En donde se utilizaron las siguientes igualdades:

$$(s + \psi_{in} + \psi_p)\beta^2 \frac{dM}{ds} = -(\psi_p - A_n)\lambda^2 \frac{D_n}{2\lambda^2(\psi_p - A_n)} \frac{\text{sen}(\beta)}{\beta} = -\frac{D}{2} \frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda}$$

$$s_n + \psi_{in} = -A_n$$

Con lo anterior, queda demostrado que la Ecuación (C.75) es idéntica a la Ecuación (5.42) que describe la solución para $U_f(\tau)$ encontrada por el Método de expansión en series de Fourier si la alimentación $U_{in} = 0$.

Obtención de los polos y la derivada de $M(s)$.

Para encontrar las raíces de $M(s)$, expresada en la Ecuación (C.67), es conveniente escribirla utilizando la siguiente igualdad:

$$\beta = \sqrt{\alpha s + \Phi^2}$$

Y considerando que: $\beta = i\lambda \Rightarrow -\lambda^2 = \alpha s + \Phi^2 \Rightarrow s = -\frac{\Phi^2 + \lambda^2}{\alpha}$

Sustituyendo s para la Ecuación (C.67), se obtiene el siguiente resultado:

$$\begin{aligned}
0 = & \left(-\frac{\Phi^2 + \lambda^2}{\alpha} + \psi_{in} + \psi_p\right) \cos(\lambda) \\
& + \left[\text{Bi}\left(\frac{\Phi^2 + \lambda^2}{\alpha} + \psi_{in}\right) - \left(1 + \phi_1 - \phi_2 \frac{\Phi^2 + \lambda^2}{\alpha}\right) \left(-\frac{\Phi^2 + \lambda^2}{\alpha} + \psi_{in} + \psi_p\right)\right] \frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda}
\end{aligned}$$

La ecuación anterior puede representarse en términos de la $\tan(\lambda)$, obteniendo:

$$\frac{\tan(\lambda)}{\lambda} = \frac{-(\psi_{in} + \psi_p - \frac{\Phi^2 + \lambda^2}{\alpha})}{\text{Bi}(\psi_{in} - \frac{\Phi^2 + \lambda^2}{\alpha}) - (\psi_{in} + \psi_p - \frac{\Phi^2 + \lambda^2}{\alpha})(1 + \phi_1 - \phi_2 \frac{\Phi^2 + \lambda^2}{\alpha})} \quad (\text{C.76})$$

Para obtener la inversa de la Ecuación (C.70), que corresponde a la expresión para $\bar{V}_f(\xi s)$, es necesario obtener la derivada del denominador dado por la Ec. (C.65) :

$$M(s) = (s + \psi_{in} + \psi_p) \left[\cosh(\beta) + (\text{Bi} - 1 - \phi_1 - \phi_2 s) \frac{\sinh(\beta)}{\beta} \right] - \psi_p \text{Bi} \frac{\sinh(\beta)}{\beta}$$

La derivada en detalle es:

$$\begin{aligned} \frac{dM}{ds} &= \cosh(\beta) + (s + \psi_{in} + \psi_p) \sinh(\beta) \frac{d\beta}{ds} \\ &+ [\text{Bi} - \phi_2(s + \psi_{in} + \psi_p) - (1 + \phi_1 + \phi_2 s)] \frac{\sinh(\beta)}{\beta} \\ &+ [\text{Bi}(s + \psi_{in}) - (1 + \phi_1 + \phi_2 s)(s + \psi_{in} + \psi_p)] \frac{\mu \cosh(\beta) - \sinh(\beta)}{\beta^2} \frac{d\beta}{ds} \end{aligned}$$

Donde:

$$\frac{d\beta}{ds} = \frac{d}{ds} \sqrt{\alpha s + \Phi^2} = \frac{1}{2} \frac{\alpha}{\sqrt{\alpha s + \Phi^2}} = \frac{1}{2} \frac{\alpha}{\mu}$$

$$\beta = \sqrt{\alpha s + \Phi^2} \Rightarrow \beta = i\lambda \Rightarrow -\lambda^2 = \alpha s + \Phi^2 \Rightarrow s = -\frac{\Phi^2 + \lambda^2}{\alpha}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dM}{ds} &= \cosh(\beta) + \frac{1}{2}\alpha(s + \psi_{in} + \psi_p) \frac{\text{senh}(\beta)}{\beta} \\
&+ \left[\text{Bi} - \phi_2(s + \psi_{in} + \psi_p) - (1 + \phi_1 + \phi_2 s) \right] \frac{\text{senh}(\beta)}{\beta} \\
&+ \frac{1}{2}\alpha \left[\text{Bi}(s + \psi_{in}) - (1 + \phi_1 + \phi_2 s)(s + \psi_{in} + \psi_p) \right] \frac{\cosh(\beta) - \frac{\text{senh}(\beta)}{\beta}}{\beta^2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dM}{ds} &= \cosh(\lambda) + \frac{1}{2}\alpha(s + \psi_{in} + \psi_p) \frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda} \\
&+ \left[\text{Bi} - \phi_2 \left(\psi_{in} + \psi_p - \frac{\Phi^2 + \lambda^2}{\alpha} \right) - \left(1 + \phi_1 - \phi_2 \frac{\Phi^2 + \lambda^2}{\alpha} \right) \right] \frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda} \\
&+ \frac{1}{2}\alpha \left[\text{Bi} \left(\psi_{in} - \frac{\Phi^2 + \lambda^2}{\alpha} \right) - \left(1 + \phi_1 - \phi_2 \frac{\Phi^2 + \lambda^2}{\alpha} \right) \left(\psi_{in} + \psi_p - \frac{\Phi^2 + \lambda^2}{\alpha} \right) \right] \frac{\frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda} - \cos(\lambda)}{\lambda^2}
\end{aligned}$$

Rearreglando con el uso de: $A_n = \frac{\Phi^2 + \lambda^2}{\alpha} - \psi_{in}$, es posible obtener para la derivada:

$$\begin{aligned}
\frac{dM}{ds} &= \cos(\lambda) + \frac{1}{2}\alpha(\psi_p - A) \frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda} \\
&+ \left[\text{Bi} - \phi_2(\psi_p - A) - \left(1 + \phi_1 - \phi_2 \frac{\Phi^2 + \lambda^2}{\alpha} \right) \right] \frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda} \\
&+ \frac{1}{2}\alpha \left[-A \text{Bi} - \left(1 + \phi_1 + \phi_2 \frac{\Phi^2 + \lambda^2}{\alpha} \right) (\psi_p - A) \right] \frac{\frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda} - \cos(\lambda)}{\lambda^2}
\end{aligned}$$

Desarrollando:

$$\begin{aligned} \frac{dM}{ds} = & \cos(\lambda) \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\alpha}{\lambda^2} \left[-ABi - \left(1 + \phi_1 - \phi_2 \frac{\phi^2 + \lambda^2}{\alpha} \right) (\psi_p - A) \right] \right) \\ & + \left(\left[\frac{1}{2} \alpha (\psi_p - A) + Bi - \phi_2 (\psi_p - A) - \left(1 + \phi_1 + \phi_2 \frac{\phi^2 + \lambda^2}{\alpha} \right) \right] \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \frac{\alpha}{\lambda^2} \left[ABi - \left(1 + \phi_1 - \phi_2 \frac{\phi^2 + \lambda^2}{\alpha} \right) (\psi_p - A) \right] \right) \frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda} \end{aligned}$$

Considerando:

$$S = \phi_1 - \phi_2 \frac{(\Phi^2 + \lambda^2)}{\alpha}$$

$$\begin{aligned} \frac{dM}{ds} = & \cos(\lambda) \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\alpha}{\lambda^2} \left[-ABi - (1 + S)(\psi_p - A) \right] \right) \\ & + \left(\left[\frac{1}{2} \alpha (\psi_p - A) + Bi - \phi_2 (\psi_p - A) - (1 + S) \right] \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \frac{\alpha}{\lambda^2} \left[ABi - (1 + S)(\psi_p - A) \right] \right) \frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda} \end{aligned}$$

Usando:

$$(\psi_p - A) \cos(\lambda) + \left[-BiA - \left(1 + \phi_1 - \phi_2 \frac{\Phi^2 + \lambda^2}{\alpha} \right) (\psi_p - A) \right] \frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda} = 0$$

De donde:

$$\cos(\lambda) = - \frac{\left[-BiA - (1 + S)(\psi_p - A) \right] \frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda}}{(\psi_p - A)}$$

$$\begin{aligned} \frac{(\psi_p - A)}{\frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda}} \frac{dM}{ds} &= -[\text{Bi}(-A) - (1 + S)(\psi_p - A)] \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\alpha}{\lambda^2} [-\text{ABi} - (1 + S)(\psi_p - A)] \right) \\ &+ \left((\psi_p - A) \left(\frac{1}{2} \alpha (\psi_p - A) + \text{Bi} - \phi_s(\psi_p - A) - (1 + S) \right) \right. \\ &\left. + \frac{1}{2} \frac{\alpha}{\lambda^2} [-\text{ABi} - (1 + S)(\psi_p - A)] \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{(\psi_p - A)}{\frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda}} \frac{dM}{ds} &= -[\text{Bi}(-A) - (1 + S)(\psi_p - A)] \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\alpha}{\lambda^2} [-\text{ABi} - (1 + S)(\psi_p - A)] \right) \\ &+ \left((\psi_p - A) \left(\frac{1}{2} \alpha (\psi_p - A) + \text{Bi} - \phi_s(\psi_p - A) - S \right) \right. \\ &\left. - 1 + \frac{1}{2} \frac{\alpha}{\lambda^2} [-\text{ABi} - (1 + S)(\psi_p - A)] \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{(\psi_p - A)}{\frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda}} \frac{dM}{ds} &= [\text{Bi}A - (1 + S)(\psi_p - A)] \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\alpha}{\lambda^2} [-\text{ABi} - (1 + S)(\psi_p - A)] \right) \\ &+ (\psi_p - A) \left(\frac{1}{2} \alpha (\psi_p - A) + \text{Bi} - \phi_s(\psi_p - A) - S \right) \\ &- (\psi_p - A) \left(\frac{1}{2} \frac{\alpha}{\lambda^2} [-\text{ABi} - (1 + S)(\psi_p - A)] \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{(\psi_p - A)}{\frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda}} \frac{dM}{ds} &= [\text{Bi}A + S(\psi_p - A)] \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\alpha}{\lambda^2} [-\text{ABi} - (1 + S)(\psi_p - A)] \right) \\ &+ (\psi_p - A) \left(\frac{1}{2} \alpha (\psi_p - A) + \text{Bi} - \phi_s(\psi_p - A) - S \right) \end{aligned}$$

$$2\lambda^2 \frac{(\psi_p - A)}{\frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda}} \frac{dM}{ds} = [\text{Bi}A + S(\psi_p - A)] \left(2\lambda^2 - \alpha [-\text{ABi} - (1 + S)(\psi_p - A)] \right) + (\psi_p - A) (\lambda^2 \alpha (\psi_p - A) + \text{Bi} - \phi_s (\psi_p - A) - S) \quad (\text{C.77})$$

La Ec. (C.77) puede escribirse cómo:

$$\frac{dM}{ds} = \frac{D}{2\lambda^2(\psi_p - A)} \frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda} \quad (\text{C.78})$$

Donde D es:

$$D = [\text{Bi}A + S(\psi_p - A)] \left(2\lambda^2 - \alpha [-\text{ABi} - (1 + S)(\psi_p - A)] \right) + (\psi_p - A) (\lambda^2 \alpha (\psi_p - A) + \text{Bi} - \phi_s (\psi_p - A) - S) \quad (\text{C.79})$$

Otra forma de escribir a D es la siguiente:

$$D = \alpha [\text{Bi}A(2\lambda^2 + (\psi_p - A) + \text{ABi}) + \lambda^2 [(\psi_p - A)](\psi_p - A) + 2\text{Bi}] \alpha \left(+ S(1 + S)(\psi_p - A)^2 + 2\text{ABi}S(\psi_p - A) \right) + 2\lambda^2 \text{Bi}\psi_p(1 - \alpha) - 2\lambda^2 \phi_2 (\psi_p - A)^2 \quad (\text{C.80})$$

Para el caso donde $\alpha = 1$ y $\phi_1 = \phi_2 = 0 \Rightarrow S = 0$, la ecuación anterior se reduce a:

$$2\lambda^2 \frac{(\psi_p - A)}{\frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda}} \frac{dM}{ds} = [A(\text{Bi} - 1) + \psi_p] (2\lambda^2 + \text{ABi}) + \lambda^2 (\psi_p - A) (A - \psi_p - 2(\text{Bi} - 1)) \quad (\text{C.81})$$

La ecuación anterior corresponde a la publicada en el artículo de Marroquín et al (2002); en dicho artículo existe un pequeño error debido a que en esta última expresión aparece $2[\lambda^2 + ABi]$ en lugar de $[2\lambda^2 + ABi]$.

Notas de la reducción de la Ecuación (C.77):

Si $\alpha = 1$ y $\phi_1 = \phi_2 = 0 \Rightarrow S = 0$, la Ecuación (C.77) se reduce a:

$$2\lambda^2 \frac{(\psi_p - A)}{\frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda}} \frac{dM}{ds} = ABi \left[2\lambda^2 - [-ABi - (\psi_p - A)] \right] + (\psi_p - A) \left[\lambda^2(\psi_p - A) + 2\lambda^2 Bi \right]$$

$$2\lambda^2 \frac{(\psi_p - A)}{\frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda}} \frac{dM}{ds} = ABi \left[2\lambda^2 + ABi - (\psi_p - A) \right] + \lambda^2(\psi_p - A) \left[\psi_p - A + 2Bi \right]$$

$$2\lambda^2 \frac{(\psi_p - A)}{\frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda}} \frac{dM}{ds} = ABi \left[2\lambda^2 + ABi - (A - \psi_p) \right] - 2\lambda^2(A - \psi_p) + \lambda^2(A - \psi_p) \left[A - \psi_p - 2(Bi - 1) \right]$$

$$2\lambda^2 \frac{(\psi_p - A)}{\frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda}} \frac{dM}{ds} = 2\lambda^2 ABi + (ABi)^2 - ABi(A - \psi_p) - 2\lambda^2(A - \psi_p) + \lambda^2(A - \psi_p) \left[A - \psi_p - 2(Bi - 1) \right]$$

$$2\lambda^2 \frac{(\psi_p - A)}{\frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda}} \frac{dM}{ds} = 2\lambda^2 [ABi - (A - \psi_p)] + ABi [ABi - (A - \psi_p)] + \lambda^2(A - \psi_p) \left[A - \psi_p - 2(Bi - 1) \right]$$

$$2\lambda^2 \frac{(\psi_p - A)}{\frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda}} \frac{dM}{ds} = 2\lambda^2 [A(Bi - 1) + \psi_p] + ABi [A(Bi - 1) + \psi_p] + \lambda^2(A - \psi_p) \left[A - \psi_p - 2(Bi - 1) \right]$$

$$2\lambda^2 \frac{(\psi_p - A)}{\frac{\text{sen}(\lambda)}{\lambda}} \frac{dM}{ds} = [A(\text{Bi} - 1) + \psi_p][2\lambda^2 + A\text{Bi}] + \lambda^2(A - \psi_p)[A - \psi_p - 2(\text{Bi} - 1)]$$

Si $\phi_1 = \phi_2 = 0$, se obtiene:

$$D(s) = (s + \psi_{in} + \psi_p) \cosh(\mu) + [\text{Bi}(s + \psi_{in}) - (s + \psi_{in} + \psi_p)] \frac{\text{senh}(\mu)}{\mu}$$

$$D(s) = (s + \psi_{in} + \psi_p) \cosh(\mu) + [(s + \psi_{in})(\text{Bi} - 1) - \psi_p] \frac{\text{senh}(\mu)}{\mu}$$

La expresión obtenida para $D(s)$ es el mismo denominador de la ecuación $M(s)$ en la Ecuación (19) del artículo de Marroquín y y col., 2002.

Apéndice D

DEMOSTRACIÓN DE LA IGUALDAD DE SOLUCIONES

El siguiente desarrollo demuestra la igualdad de las soluciones obtenidas por el Método de Expansión en Series de Fourier y por el Método de la Transformada de Laplace.

$$C_n = \frac{U_{p0} \int_0^1 \xi^2 f_m(\xi) d\xi + U_{f0} \frac{\text{Bi}}{\psi_p} h_m - U_{p0} \phi_2 f_m(1)}{\int_0^1 \xi^2 f_n^2(\xi) d\xi + \frac{\text{Bi}}{\psi_p} h_n^2 - \phi_2 f_n^2(1)}$$

Evalutando el segundo término del numerador:

$$U_{f0} \frac{\text{Bi}}{\psi_p} h_n = U_{f0} \frac{\text{Bisen}(\lambda_n)}{\psi_p - A_n}$$

Por la expresión de h_n encontrada:

$$h_n = \frac{\psi_p \text{sen}(\lambda_n)}{\psi_p - A_n}$$

Donde: $A_n = \Phi^2 + \lambda_n^2 - \psi_{in}$

Parte del primer término del numerador es:

$$\int_0^1 \xi \operatorname{sen}(\lambda_n \xi) d\xi = \left[\frac{\operatorname{sen}(\lambda_n \xi)}{\lambda_n^2} - \frac{\xi \cos(\lambda_n \xi)}{\lambda_n} \right]_0^1 = \frac{\operatorname{sen}(\lambda_n)}{\lambda_n^2} - \frac{\cos(\lambda_n)}{\lambda_n}$$

Tomando la ecuación encontrada para los valores propios:

$$\frac{\tan(\lambda_n)}{\lambda_n} = \frac{\psi_p - A_n}{A_n \operatorname{Bi} + (\psi_p - A_n)(1 + S_n)} \quad (\text{D.1})$$

Puede ser escrita de la siguiente forma:

$$\frac{\tan(\lambda_n)}{\lambda_n} = \frac{\psi_p - A_n}{A_n \operatorname{Bi} + (\psi_p - A_n)(1 + S_n)}$$

Con su equivalente:

$$\cos(\lambda_n) = \frac{\operatorname{sen}(\lambda_n)}{\lambda_n} \frac{A_n \operatorname{Bi} + (\psi_p - A_n)(1 + S_n)}{\psi_p - A_n}$$

Donde: $S_n = \phi_1 - \phi_2(\Phi^2 + \lambda_n^2)$

Por lo tanto, al sustituir $\cos(\lambda_n)$ se obtiene:

$$\begin{aligned} \int_0^1 \xi \operatorname{sen}(\lambda_n \xi) d\xi &= \frac{\operatorname{sen}(\lambda_n)}{\lambda_n^2} - \frac{\cos(\lambda_n)}{\lambda_n} = \frac{\operatorname{sen}(\lambda_n)}{\lambda_n^2} \left[1 - \frac{A_n \operatorname{Bi} + (\psi_p - A_n)(1 + S_n)}{\psi_p - A_n} \right] \\ &= \frac{\operatorname{sen}(\lambda_n)}{\lambda_n^2} \left[\frac{\psi_p - A_n - A_n \operatorname{Bi} - (\psi_p - A_n)(1 + S_n)}{\psi_p - A_n} \right] \\ &= -\frac{\operatorname{sen}(\lambda_n)}{\lambda_n^2} \left[\frac{A_n \operatorname{Bi} + S_n(\psi_p - A_n)}{\psi_p - A_n} \right] \end{aligned}$$

Trabajando con el tercer término del numerador es de la expresión para C_n :

$$-U_{p0} \phi_2 f_n(1) = -U_{p0} \phi_2 \operatorname{sen}(\lambda_n)$$

Es decir, el numerador puede expresarse:

$$U_{p0} \int_0^1 \xi^2 f_n(\xi) d\xi + U_{f0} \frac{\text{Bi}}{\psi_p} h_n - U_{p0} \phi_2 f_n(1) = -U_{p0} \frac{\text{sen}(\lambda_n)}{\lambda_n^2} \left[\frac{A_n \text{Bi} + S_n(\psi_p - A_n)}{\psi_p - A_n} \right] + U_{f0} \frac{\text{Bi sen}(\lambda_n)}{\psi_p - A_n} - U_{p0} \phi_2 \text{sen}(\lambda_n)$$

De tal forma que el numerador de los coeficientes C_n expresados en la Ec. (D):

$$\begin{aligned} & -U_{p0} \int_0^1 \xi^2 f_n(\xi) d\xi + U_{f0} \frac{\text{Bi}}{\psi_p} h_n - U_{p0} \phi_2 f_n(1) \\ &= \frac{\text{sen}(\lambda_n)}{\lambda_n^2} \frac{[U_{f0} \text{Bi} \lambda_n^2 - U_{p0} [A_n \text{Bi} + S_n(\psi_p - A_n)] - U_{f0} (\psi_p - A_n) \phi_2 \lambda_n^2]}{(\psi_p - A_n)} \end{aligned}$$

Al trabajar con parte del denominador:

$$\int_0^1 \xi^2 f_n^2(\xi) d\xi + \frac{\text{Bi}}{\psi_p} h_n^2 = \int_0^1 \text{sen}^2(\lambda_n \xi) d\xi + \frac{\text{Bi} \psi_p \text{sen}^2(\lambda_n)}{(\psi_p - A_n)^2}$$

Se desarrolla por fórmula la expresión para $\int_0^1 \text{sen}^2(\lambda_n \xi) d\xi$, obteniendo:

$$\int_0^1 \text{sen}^2(\lambda_n \xi) d\xi = \left[\frac{\xi}{2} - \frac{\text{sen}(2\lambda_n \xi)}{4\lambda_n} \right]_0^1 = \frac{1}{2} - \frac{\text{sen}(2\lambda_n)}{4\lambda_n} = \frac{1}{2} \left[\text{sen}^2(\lambda_n) + \cos^2(\lambda_n) - \frac{\text{sen}(\lambda_n) \cos(\lambda_n)}{\lambda_n} \right]$$

Al utilizar nuevamente la expresión obtenida de los valores propios, la ecuación puede escribirse de la siguiente forma:

$$\int_0^1 \text{sen}^2(\lambda_n \xi) d\xi = \frac{\text{sen}^2(\lambda_n)}{2\lambda_n} \left[\lambda_n^2 + \frac{[A_n \text{Bi} + (\psi_p - A_n)(1 + S_n)]^2}{(\psi_p - A_n)^2} - \frac{A_n \text{Bi} + (\psi_p - A_n)(1 + S_n)}{\psi_p - A_n} \right]$$

Como consecuencia es posible obtener:

$$\int_0^1 \xi^2 f_n^2(\xi) d\xi + \frac{\text{Bi}}{\psi_p} h_n^2 = \frac{\text{sen}^2(\lambda_n)}{2\lambda_n^2} \left[\lambda_n^2 + \frac{[A_n \text{Bi} + (\psi_p - A_n)(1 + S_n)]^2}{(\psi_p - A_n)^2} \right. \\ \left. - \frac{A_n \text{Bi} + (\psi_p - A_n)(1 + S_n)}{\psi_p - A_n} + \frac{2\text{Bi}\psi_p \lambda_n^2}{(\psi_p - A_n)^2} h_n^2 \right]$$

Es decir:

$$\int_0^1 \xi^2 f_n^2(\xi) d\xi + \frac{\text{Bi}}{\psi_p} h_n^2 = \frac{\text{sen}^2(\lambda_n)}{2\lambda_n^2 (\psi_p - A_n)^2} T$$

Para simplificar la expresión, se utiliza una nueva definición:

$$T = \lambda_n^2 (\psi_p - A_n)^2 + [A_n \text{Bi} + (\psi_p - A_n)(1 + S_n)]^2 - (\psi_p - A_n)[A_n \text{Bi} + (\psi_p - A_n)(1 + S_n)] + \text{Bi}\psi_p 2\lambda_n^2 n$$

$$T = \lambda_n^2 (\psi_p - A_n)^2 + [A_n \text{Bi} + (\psi_p - A_n)(1 + S_n)][A_n \text{Bi} + (\psi_p - A_n)(1 + S_n) - (\psi_p - A_n)] + \text{Bi}\psi_p 2\lambda_n^2 n$$

$$T = \lambda_n^2 (\psi_p - A_n)^2 + [A_n \text{Bi} + (\psi_p - A_n)(1 + S_n)][A_n \text{Bi} + S_n(\psi_p - A_n)] + \text{Bi}\psi_p 2\lambda_n^2 n$$

Por tal motivo el denominador de la Ec.(D) puede escribirse:

$$\int_0^1 \xi^2 f_n^2 d\xi + \frac{\text{Bi}}{\psi_p} h_n^2 - \phi_2 f_n^2(1) = \frac{\text{sen}^2(\lambda_n)}{2\lambda_n^2 (\psi_p - A_n)^2} T - \phi_2 \text{sen}^2(\lambda_n)$$

Desarrollando la expresión:

$$\int_0^1 \xi^2 f_n^2 d\xi + \frac{\text{Bi}}{\psi_p} h_n^2 - \phi_2 f_n^2(1) = \frac{\text{sen}^2(\lambda_n)}{2\lambda_n^2(\psi_p - A_n)^2} [T - 2\phi_2 \lambda_n^2 (\psi_p - A_n)^2]$$

$$\int_0^1 \xi^2 f_n^2 d\xi + \frac{\text{Bi}}{\psi_p} h_n^2 - \phi_2 f_n^2(1) = \frac{\text{sen}^2(\lambda_n)}{2\lambda_n^2(\psi_p - A_n)^2} D_n$$

Utilizando otra simplificación:

$$D_n = T - 2\phi_2 \lambda_n^2 (\psi_p - A_n)^2$$

Por lo tanto, se puede escribir para C_n :

$$C_n = \frac{\frac{\text{sen}(\lambda_n)}{\lambda_n^2(\psi_p - A_n)} [U_{f0} \text{Bi} \lambda_n^2 - U_{p0} [A_n \text{Bi} + S_n(\psi_p - A_n)] - U_{p0}(\psi_p - A_n) \phi_2 \lambda_n^2]}{\frac{\text{sen}^2(\lambda_n)}{2\lambda_n^2(\psi_p - A_n)^2} D_n}$$

$$C_n h_n = \frac{\frac{\psi_p \text{sen}(\lambda_n)}{(\psi_p - A_n)} \frac{\text{sen} \lambda_n}{\lambda_n^2(\psi_p - A_n)} [U_{f0} \text{Bi} \lambda_n^2 - U_{p0} [A_n \text{Bi} + S_n(\psi_p - A_n)] - U_{p0}(\psi_p - A_n) \phi_2 \lambda_n^2]}{\frac{\text{sen}^2(\lambda_n)}{2\lambda_n^2(\psi_p - A_n)^2} D_n}$$

$$C_n h_n = \frac{2\psi_p [U_{f0} \text{Bi} \lambda_n^2 - U_{p0} [A_n \text{Bi} + S_n(\psi_p - A_n)] - U_{p0}(\psi_p - A_n) \phi_2 \lambda_n^2]}{D_n}$$

Al trabajar con D_n y T , se obtiene:

$$D_n = \lambda_n^2 (\psi_p - A_n)^2 + [A_n \text{Bi} + (\psi_p - A_n)(1 + S_n)] [A_n \text{Bi} + S_n(\psi_p - A_n)] + \text{Bi} \psi_p 2\lambda_n^2 - 2\phi_2 \lambda_n^2 (\psi_p - A_n)^2$$

$$T = \lambda_n^2 (\psi_p - A_n)^2 + [A_n \text{Bi} + (\psi_p - A_n)(1 + S_n)] [A_n \text{Bi} + S_n(\psi_p - A_n)] + \text{Bi} \psi_p 2\lambda_n^2$$

$$T = \lambda_n^2(\psi_p - A_n)^2 + (\psi_p - A_n)[A_n\text{Bi} + S_n(\psi_p - A_n)] + [A_n\text{Bi} + S_n(\psi_p - A_n)]^2 + \text{Bi}\psi_p 2\lambda_n^2$$

Simplificando el producto:

$$\begin{aligned} 0 &= (\psi_p - A_n)[A_n\text{Bi} + S_n(\psi_p - A_n)] + [A_n\text{Bi} + S_n(\psi_p - A_n)]^2 \\ &= A_n\text{Bi}(\psi_p - A_n) + S_n(\psi_p - A_n)^2 + (\psi_p - A_n)^2 + S_n(\psi_p - A_n)^2 + 2A_n\text{Bi}S_n(\psi_p - A_n) \end{aligned}$$

Eliminando términos:

$$\begin{aligned} 0 &= (\psi_p - A_n)[A_n\text{Bi} + S_n(\psi_p - A_n)] + [A_n\text{Bi} + S_n(\psi_p - A_n)]^2 \\ &= A_n\text{Bi}(\psi_p - A_n) + S_n(1 + S_n)(\psi_p - A_n)^2 + (A_n\text{Bi})^2 + 2A_n\text{Bi}S_n(\psi_p - A_n) \end{aligned}$$

Por lo tanto, el desarrollo para T es el siguiente:

$$T = \lambda_n^2(\psi_p - A_n)^2 + A_n\text{Bi}(\psi_p - A_n) + S_n(1 + S_n)(\psi_p - A_n)^2 + (A_n\text{Bi})^2 + 2A_n\text{Bi}S_n(\psi_p - A_n) + \text{Bi}\psi_p 2\lambda_n^2$$

$$\begin{aligned} T &= \lambda_n^2(\psi_p - A_n)^2 + A_n\text{Bi}(\psi_p - A_n) + (A_n\text{Bi})^2 + \text{Bi}\psi_p 2\lambda_n^2 + S_n(1 + S_n)(\psi_p - A_n)^2 \\ &\quad + 2A_n\text{Bi}S_n(\psi_p - A_n) \\ &= A_n\text{Bi}[A_n\text{Bi} + (\psi_p - A_n)] + \lambda_n^2(\psi_p - A_n)[(\psi_p - A_n) + 2\text{Bi}] \\ &\quad + 2\text{Bi}\lambda_n^2 A_n + S_n(1 + S_n)(\psi_p - A_n)^2 + 2A_n\text{Bi}S_n(\psi_p - A_n) \end{aligned}$$

$$T = A_n \text{Bi} [2\lambda_n^2 + A_n \text{Bi} + (\psi_p - A_n)] + \lambda_n^2 (\psi_p - A_n) [(\psi_p - A_n) + 2\text{Bi}] + S_n (1 + S_n) (\psi_p - A_n)^2 + 2A_n \text{Bi} S_n (\psi_p - A_n)$$

Se obtiene para D_n :

$$D_n = A_n \text{Bi} [2\lambda_n^2 + A_n \text{Bi} + (\psi_p - A_n)] + \lambda_n^2 (\psi_p - A_n) [(\psi_p - A_n) + 2\text{Bi}] + S_n (1 + S_n) (\psi_p - A_n)^2 + 2A_n \text{Bi} S_n (\psi_p - A_n) - 2\phi_2 \lambda_n^2 (\psi_p - A_n)^2$$

Si los coeficientes de salto no son considerados, es decir, su valor es igual a cero, el resultado obtenido es el mismo al reportado por Marroquín y col., 2002 para el problema de tanque agitado.

Apéndice E

SOLUCIÓN PARA LA CONCENTRACIÓN APROXIMADA

El desarrollo para encontrar la concentración aproximada se realiza utilizando la Transformada de Laplace, el desarrollo considera que la mayor parte de la adsorción y la reacción de primer orden se llevan a cabo en la superficie de la partícula, por tal motivo, la ecuación en la partícula considera dichos efectos sólo en $\xi = 1$.

La ecuación que describe el transporte en todo el radio de la partícula:

$$\alpha \frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 U_p \quad (\text{E.1})$$

Ecuación en el fluido:

$$\frac{\partial U_f}{\partial \tau} = \psi_{in}(U_{in}(\tau) - U_f) + \psi_p(U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (\text{E.2})$$

Condición interfacial considerando el salto del flux en la superficie de la partícula, es decir en: $\xi = 1$

$$-\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = Bi(U_p|_{\xi=1} - U_f) - \phi_1 U_p - \phi_2 \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \quad (\text{E.3})$$

Condiciones iniciales

$$U_f = U_{f0} \quad (\text{E.4})$$

$$U_p = U_{p0} \quad \text{para } 0 \leq \xi \leq 1 \quad (\text{E.5})$$

Utilizando la siguiente igualdad:

$$U_{pa}(\tau) = 3 \int_0^1 U_p(\xi, \tau) \xi^2 d\xi \quad (\text{E.6})$$

Utilizando la condición de frontera expresada en la Ecuación (E.3) y haciendo uso de la aproximación: $U_p|_{\xi=1} = U_{pa}$, la Ecuación (E.6) toma la siguiente forma:

$$\alpha \frac{\partial U_{pa}}{\partial \tau} = -3Bi(\{U\}_p - U - f) + 3\phi_1 \{U\}_p + 3\phi_2 \frac{\partial \{U\}_p}{\partial \tau} - \Phi^2 \{U\}_p \quad (\text{E.7})$$

Las Ecuaciones (E.7) y (E.2) deben ser resueltas sujetas a las condiciones iniciales, resolviendo las ecuaciones para la partícula y el fluido respectivamente utilizando \bar{w}_p para indicar que es la transformada de Laplace de U_p , se obtiene:

Desarrollando para la ecuación en la Partícula:

$$(\alpha - 3\phi_2)(s\bar{w}_p - U_{p0}) = -(3Bi + \Phi^2 - 3\phi_1)\bar{w}_p + 3Bi\bar{U}_f \quad (\text{E.8})$$

Ecuación en el fluido:

$$(s + \psi_{in} + \psi_p)\bar{U}_f - U_{f0} = \psi_p\bar{w}_p + \psi_{in}\bar{U}_{in}(s) \quad (\text{E.9})$$

La ecuación en la partícula se puede escribir:

$$(s + \beta)\bar{w}_p = U_{p0} + \frac{3Bi\bar{U}_f}{\alpha_J} \quad (\text{E.10})$$

Donde se han utilizado las igualdades:

$$\alpha_J = \alpha - 3\phi_2 \quad (\text{E.11})$$

y

$$\beta = \frac{(3Bi + \Phi^2 - 3\phi_1)}{\alpha_J} \quad (\text{E.12})$$

Despejando de la Ec. (E.10), se obtiene para \bar{w}_p :

$$\bar{w}_p = \frac{U_{p0}}{s + \beta} + \frac{3Bi}{(s + \beta)\alpha_J}\bar{U}_f \quad (\text{E.13})$$

Utilizando la ecuación anterior para sustituirla en la ecuación del fluido se obtiene:

$$\left[(s + \psi_{in} + \psi_p)(s + \beta) - \frac{3Bi\psi_p}{\alpha_J} \right] \bar{U}_f = U_{f0}(s + \beta) + \psi_p U_{p0} + \psi_{in} \bar{U}_{in}(s)(s + \beta)$$

Obteniendo para \overline{U}_f :

$$\overline{U}_f = \frac{(s + \beta)}{(s - \mu_1)(s - \mu_2)} U_{f0} + \frac{\psi_p}{(s - \mu_1)(s - \mu_2)} U_{p0} + \frac{\psi_{in}(s + \beta)}{(s - \mu_1)(s - \mu_2)} \overline{U}_{in}(s)$$

Donde μ_1 y μ_2 son las dos raíces de la función cuadrática:

$$s^2 + s(\psi_{in} + \psi_p + \beta) + \beta(\psi_{in} + \psi_p) - \frac{3Bi}{(s + \beta)\alpha_J} = 0$$

$$\mu_{1,2} = \frac{-(\psi_{in} + \psi_p + \beta) \pm \sqrt{(\psi_{in} + \psi_p + \beta)^2 - 4\left[\beta(\psi_{in} + \psi_p) - \frac{3Bi\psi_p}{\alpha_J}\right]}}{2}$$

$$\mu_{1,2} = \frac{-(\psi_{in} + \psi_p + \beta) \pm \sqrt{(\psi_{in} + \psi_p + \beta)^2 - 4\beta(\psi_{in} + \psi_p) + \frac{12Bi\psi_p}{\alpha_J}}}{2}$$

$$\mu_{1,2} = \frac{-(\psi_{in} + \psi_p + \beta) \pm \sqrt{\psi_{in}^2 + \psi_p^2 + \beta^2 + 2\psi_{in}\psi_p + 2\beta(\psi_{in} + \psi_p) - 4\beta(\psi_{in} + \psi_p) - \frac{12Bi\psi_p}{\alpha_J}}}{2}$$

$$\mu_{1,2} = \frac{-(\psi_{in} + \psi_p + \beta) \pm \sqrt{\psi_{in}^2 + \psi_p^2 + \beta^2 + 2\psi_{in}\psi_p - 2\beta(\psi_{in} + \psi_p) - \frac{12Bi\psi_p}{\alpha_J}}}{2}$$

$$\mu_{1,2} = \frac{-(\psi_{in} + \psi_p + \beta) \pm \sqrt{(\psi_{in} + \psi_p - \beta)^2 + \frac{12Bi\psi_p}{\alpha_J}}}{2} \quad (\text{E.14})$$

Las raíces $\mu_{1,2}$ a obtener son reales, una de ellas siempre será negativa y la segunda raíz será negativa si se cumple la siguiente condición:

$$\beta(\psi_{in} + \psi_p) \geq \frac{3Bi\psi_p}{\alpha_J} \quad (\text{E.15})$$

La condición mencionada en la ecuación anterior, se obtiene de desarrollar la siguiente expresión:

$$(\psi_{in} + \psi_p + \beta) > \sqrt{(\psi_{in} + \psi_p + \beta)^2 + \frac{12Bi\psi_p}{\alpha_J}}$$

$$(\psi_{in} + \psi_p + \beta)^2 > (\psi_{in} + \psi_p + \beta)^2 - 4\beta\left[\beta(\psi_{in} + \psi_p) - \frac{3Bi\psi_p}{\alpha_J}\right]$$

$$0 > -4\left[\beta(\psi_{in} + \psi_p) - \frac{3Bi\psi_p}{\alpha_J}\right]$$

$$\beta(\psi_{in} + \psi_p) \geq \frac{3Bi\psi_p}{\alpha_J}$$

Por lo tanto, la expresión para \bar{w}_p y para \bar{U}_f respectivamente:

$$\bar{w}_p = U_{p0} \frac{(s - \mu_1)(s - \mu_2) + \frac{3Bi\psi_p}{\alpha_J}}{(s + \beta)(s - \mu_1)(s - \mu_2)} + 3 \frac{Bi}{\alpha_J} \left[\frac{U_{f0}}{(s - \mu_1)(s - \mu_2)} + \frac{\psi_{in} U_{in}}{(s - \mu_1)(s - \mu_2)} \right]$$

$$\bar{U}_f = \frac{(s + \beta)}{(s - \mu_1)(s - \mu_2)} U_{f0} + \frac{\psi_p}{(s - \mu_1)(s - \mu_2)} U_{p0} - \frac{\psi_{in}(s + \beta)}{(s - \mu_1)(s - \mu_2)} \bar{U}_{in}(s)$$

Por lo tanto, se requiere de la obtención de la transformada inversa de Laplace, desarrollando para \bar{w}_p :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{(s - \mu_1)(s - \mu_2) + \frac{3Bi\psi_p}{\alpha_J}}{(s + \beta)(s - \mu_1)(s - \mu_2)} \right\} &= \frac{(\beta + \mu_1)(\beta + \mu_2) + \frac{3Bi\psi_p}{\alpha_J}}{(\beta + \mu_1)(\beta + \mu_2)} \exp[-\beta\tau] \\ &+ \frac{\frac{3Bi\psi_p}{\alpha_J}}{(\mu_1 + \beta)(\mu_1 - \mu_2)} \exp[\mu_1\tau] \\ &+ \frac{\frac{3Bi\psi_p}{\alpha_J}}{(\mu_2 + \beta)(\mu_2 - \mu_1)} \exp[\mu_2\tau] \end{aligned}$$

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{(s - \mu_1)(s - \mu_2)} \right\} = \frac{1}{(\mu_1 - \mu_2)} \{ \exp[\mu_1\tau] - \exp[\mu_2\tau] \}$$

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\bar{U}_{in}(s)}{(s - \mu_1)(s - \mu_2)} \right\} = \frac{1}{(\mu_1 - \mu_2)} \int_0^\tau [\{ \exp[\mu_1(\tau - \zeta)] - \exp[\mu_2(\tau - \zeta)] \} U_{in}(\zeta)] d\zeta$$

Desarrollando para \bar{U}_f :

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{s + \beta}{(s - \mu_1)(s - \mu_2)} \right\} = \frac{1}{(\mu_1 - \mu_2)} \{ (\mu_1 + \beta) \exp[\mu_1\tau] - (\mu_2 + \beta) \exp[\mu_2\tau] \}$$

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{(s+\beta)\overline{U}_{in}(s)}{(s-\mu_1)(s-\mu_2)}\right\} = \frac{1}{(\mu_1-\mu_2)} \int_0^\tau \left[\{(\mu_1+\beta)\exp[\mu_1(\tau-\zeta)] - (\mu_2+\beta)\exp[\mu_2(\tau-\zeta)]\}U_{in}(\zeta)\right]d\zeta$$

Para los casos en los cuales $U_{in} = U_{i0}$ es una constante, se obtiene:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{\overline{U}_{in}(s)}{(s-\mu_1)(s-\mu_2)}\right\} &= \frac{1}{(\mu_1-\mu_2)} \int_0^\tau \left[\{\exp[\mu_1(\tau-\zeta)] - \exp[\mu_2(\tau-\zeta)]\}U_{in}(\zeta)\right]d\zeta \\ &= U_{i0}\left[\frac{1}{\mu_1\mu_2} + \frac{\mu_2\exp[\mu_1\tau] - \mu_1\exp[\mu_2\tau]}{\mu_1\mu_2(\mu_1-\mu_2)}\right]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{(s+\beta)\overline{U}_{in}(s)}{(s-\mu_1)(s-\mu_2)}\right\} &= \frac{U_{i0}}{(\mu_1-\mu_2)} \int_0^\tau \left[\{(\mu_1+\beta)\exp[\mu_1(\tau-\zeta)] - (\mu_2+\beta)\exp[\mu_2(\tau-\zeta)]\}U_{in}(\zeta)\right]d\zeta \\ &= U_{i0}\left[\frac{\beta}{\mu_1\mu_2} + \frac{1}{(\mu_1-\mu_2)\mu_1\mu_2}\left\{\mu_2(\mu_1+\beta)\exp[\mu_1\tau] - \mu_1(\mu_2+\beta)\exp[\mu_2\tau]\right\}\right]\end{aligned}$$

Para obtener la ecuación anterior, se realizó el siguiente desarrollo:

$$\begin{aligned}\int_0^\tau \{(\mu_1+\beta)\exp[\mu_1(\tau-\zeta)]\}d\zeta &= \frac{\mu_1+\beta}{-\mu_1}\exp[\mu_1\tau]\left[\exp[-\mu_1\zeta]\right]_0^\tau \\ &= \frac{(\mu_1+\beta)}{-\mu_1}\left[1 - \exp(\mu_1\tau)\right]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{(s+\beta)\overline{U}_{in}(s)}{(s-\mu_1)(s-\mu_2)}\right\} &= \frac{U_{i0}}{(\mu_1-\mu_2)}\left\{\frac{(\mu_1+\beta)}{-\mu_1}\left[1 - \exp[\mu_1\tau]\right] - \frac{(\mu_2+\beta)}{-\mu_2}\left[1 - \exp[\mu_2\tau]\right]\right\} \\ &= \frac{U_{i0}}{(\mu_1-\mu_2)}\left\{\frac{(\mu_1+\beta)}{\mu_1}\left[\exp[\mu_1\tau] - 1\right] + \frac{(\mu_2+\beta)}{\mu_2}\left[1 - \exp[\mu_2\tau]\right]\right\} \\ &= \frac{U_{i0}}{(\mu_1-\mu_2)}\left\{\frac{(\mu_2+\beta)}{\mu_2} - \frac{(\mu_1+\beta)}{\mu_1} + \left[\frac{(\mu_1+\beta)}{\mu_1}\exp[\mu_1\tau] - \frac{(\mu_2+\beta)}{\mu_2}\exp[\mu_2\tau]\right]\right\}\end{aligned}$$

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{(s+\beta)\bar{U}_{in}(s)}{(s-\mu_1)(s-\mu_2)}\right\} = \frac{U_{i0}}{(\mu_1-\mu_2)} \int_0^\tau \left[\{(\mu_1+\beta) \exp[\mu_1(\tau-\zeta)] - (\mu_2+\beta) \exp[\mu_2(\tau-\zeta)]\} \right]$$

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{\bar{U}_{in}(s)}{(s-\mu_1)(s-\mu_2)}\right\} = \frac{U_{i0}}{(\mu_1-\mu_2)} \left[\frac{1}{-\mu_1} [1 - \exp[\mu_1(\tau)]] - \frac{1}{-\mu_2} [1 - \exp[\mu_2(\tau)]] \right]$$

Por lo tanto se obtiene la siguiente expresión para $U_{fa}(\tau)$:

$$\begin{aligned} U_{fa}(\tau) &= \frac{U_{f0}}{(\mu_1-\mu_2)} \{(\mu_1+\beta) \exp[\mu_1\tau] - (\mu_2+\beta) \exp[\mu_2\tau]\} \\ &+ \frac{\psi_p U_{p0}}{(\mu_1-\mu_2)} \{\exp[\mu_1\tau] - \exp[\mu_2\tau]\} \\ &+ \psi_{in} U_{i0} \left[\frac{\beta}{\mu_1\mu_2} + \frac{1}{(\mu_1-\mu_2)\mu_2\mu_1} \{ \mu_2(\mu_1+\beta) \exp[\mu_1\tau] - \mu_1(\mu_2+\beta) \exp[\mu_2\tau] \} \right] \end{aligned} \quad (\text{E.16})$$

Para la concentración promediada se obtiene:

$$\begin{aligned} \{U\}_p(\tau) &= U_{p0} \frac{(\beta+\mu_1)(\beta+\mu_2) \frac{3Bi\psi_p}{\alpha_J}}{(\beta+\mu_1)(\beta+\mu_2)} \exp[\beta\tau] \\ &+ U_{p0} \frac{\frac{3Bi\psi_p}{\alpha_J}}{(\mu_1-\mu_2)} \left\{ \frac{1}{(\mu_1+\beta)} \exp[\mu_1\tau] - \frac{1}{(\mu_2+\beta)} \exp[\mu_2\tau] \right\} \\ &+ U_{f0} \frac{\frac{3Bi}{\alpha_J}}{(\mu_1-\mu_2)} \{ \exp[\mu_1\tau] - \exp[\mu_2\tau] \} \\ &+ U_{i0} \frac{3Bi\psi_{in}}{\alpha_J} \left\{ \frac{1}{\mu_1\mu_2} + \frac{\mu_2 \exp[\mu_1\tau] - \mu_1 \exp[\mu_2\tau]}{\mu_1\mu_2(\mu_1-\mu_2)} \right\} \end{aligned} \quad (\text{E.17})$$

Donde la obtención de μ_1 y μ_2 se utiliza la Ec. (E.14) previamente desarrollada.

Estado Estacionario

El sistema de ecuaciones que describe el estado estacionario donde no existe acumulación es el siguiente:

La ecuación en la partícula es:

$$\psi_{in}(U_{i0} - U_f) + \psi_p(\{U\}_p - U_f) = 0 \quad (\text{E.18})$$

Ecuación en el fluido:

$$-3Bi(\{U\}_p - U_f) + 3\phi_1\{U\}_p - \Phi^2\{U\}_p = 0 \quad (\text{E.19})$$

De las dos ecuaciones anteriores es posible obtener:

$$U_f = \frac{\psi_{in}U_{i0} + \psi_p\{U\}_p}{\psi_{in} + \psi_p} \quad (\text{E.20})$$

$$U_{pa} = \frac{3BiU_f}{3Bi + \Phi^2 - 3\phi_1} \quad (\text{E.21})$$

Utilizando la ecuación obtenida para U_{pa} en U_f

$$U_f = \frac{\psi_{in}U_{i0}}{\psi_{in} + \psi_p} + \frac{\psi_p}{\psi_{in} + \psi_p} \left(\frac{3BiU_f}{3Bi + \Phi^2 - 3\phi_1} \right)$$

$$U_f[(\psi_{in} + \psi_p)(3Bi + \Phi^2 - 3\phi_1)] = \psi_{in}U_{i0}(3Bi + \Phi^2 - 3\phi_1) + 3BiU_f\psi_p$$

$$U_f = \frac{\psi_{in} U_{i0} (3Bi + \Phi^2 - 3\phi_1)}{(\psi_{in} + \psi_p)(3Bi + \Phi^2 - 3\phi_1) - 3Bi\psi_p} \quad (\text{E.22})$$

Finalmente para obtener la expresión para U_{pa} , se introduce la Ec. (E.22) en (E.21):

$$U_{pa} = \frac{3Bi\psi_{in} U_{i0}}{(\psi_{in} + \psi_p)(3Bi + \Phi^2 - 3\phi_1) - 3Bi\psi_p}$$

De la Ec. (E.17) se obtiene :

$$U_f(>> 1) = \psi_{in} U_{i0} \frac{\beta}{\mu_2 \mu_1} \quad (\text{E.23})$$

Donde la definición de β se encuentra en la Ec. (E.12), y para la obtención de raíces $\mu_{1,2}$, se utiliza la Ec. (E.14), al desarrollar dicha ecuación:

$$\mu_{1,2} = \frac{-(\psi_{in} + \psi_p + \beta) \pm \sqrt{(\psi_{in} + \psi_p + \beta)^2 - 4\left[\beta(\psi_{in} + \psi_p) - \frac{3Bi\psi_p}{\alpha_J}\right]}}{2}$$

$$\begin{aligned} 4\mu_{1,2} &= \left[(\psi_{in} + \psi_p + \beta)^2 - \left\{ (\psi_{in} + \psi_p - \beta)^2 + 12 \frac{3Bi\psi_p}{\alpha_J} \right\} \right] \\ &= \left[(\psi_{in} + \psi_p + \beta)^2 - \left\{ (\psi_{in} + \psi_p + \beta)^2 + 4\left[\beta(\psi_{in} + \psi_p) - \frac{3Bi\psi_p}{\alpha_J}\right] \right\} \right] \end{aligned}$$

$$\mu_{1,2} = \beta(\psi_{in} + \psi_p) - \frac{3Bi\psi_p}{\alpha_J}$$

Por lo tanto, para la expresión de U_f , de la Ec. (E.23) se obtiene:

$$U_f(\gg 1) = \psi_{in} U_{i0} \frac{\beta}{\mu_2 \mu_1} = \psi_{in} U_{i0} \frac{(3Bi + \Phi^2 - 3\phi_1)}{(3Bi + \Phi^2 - 3\phi_1)(\psi_{in} + \psi_p) - 3Bi\psi_p} \quad (\text{E.24})$$

Para la expresión de U_{pa} de acuerdo a la Ec. (E.18) se obtiene:

$$U_{pa}(\gg 1) = \frac{3Bi\psi_{in}U_{i0}}{\alpha_J} \left[\frac{1}{\mu_2\mu_1} \right] = \frac{3Bi\psi_{in}U_{i0}}{(3Bi + \Phi^2 - 3\phi_1)(\psi_{in} + \psi_p) - 3Bi\psi_p}$$

Finalmente para U_p se obtiene:

$$U_{pa} = \frac{3Bi\psi_{in}U_{i0}}{(\psi_{in} + \psi_p)(3Bi + \Phi^2 - 3\phi_1) - 3Bi\psi_p} \quad (\text{E.25})$$

Diferencia relativa con la condición de salto en la concentración del fluido. Donde se ha utilizado la siguiente abreviación: $E = Error$ y $NJ = NoJump$

$$3Bi + \Phi^2 - 3\phi_1 \geq E\{U_f\}_{NJ}^{ss} \frac{1}{\psi_{in}U_{i0}} [(3Bi + \Phi^2)(\psi_{in} + \psi_p) - 3Bi\psi_p] + E\{U_f\}_{NJ}^{ss} \frac{3\phi_1(\psi_{in} + \psi_p)}{\psi_{in}U_{i0}}$$

$$3\phi_1 > E(3Bi + \Phi^2) + E\{U_f\}_{NJ}^{ss} \frac{3\phi_1(\psi_{in} + \psi_p)}{\psi_{in}U_{i0}} - (3Bi + \Phi^2)$$

$$3\phi_1 \left\{ 1 - E\{U_f\}_{NJ}^{ss} \frac{(\psi_{in} + \psi_p)}{\psi_{in}U_{i0}} \right\} > E(3Bi + \Phi^2) - (3Bi + \Phi^2)$$

$$3\phi_1 > \frac{(3Bi + \Phi^2)(E - 1)}{1 - E\{U_f\}_{NJ}^{ss} \frac{(\psi_{in} + \psi_p)}{\psi_{in} U_{i0}}}$$

Apéndice F

FUNCIONALIDAD DE TIEMPO DE LA CONCENTRACIÓN DE ENTRADA

A continuación se presentan las tablas de las funciones de entrada para μ y λ_n . Cada una de las expresiones de las condiciones de entrada en las tablas fue obtenida del desarrollo de $I_{in}(\tau)$ al sustituir U_{in} para μ y λ_n :

$$I_{in}(\tau) = \exp \left[- \left(\Phi^2 + \lambda_n^2 \right) \tau \right] \int_0^\tau U_{in}(\varsigma) \exp \left[\left(\Phi^2 + \lambda_n^2 \right) (\varsigma) \right] d\varsigma$$

Donde U_{in} puede ser la función escalón, pulso u oscilatorio, por lo tanto, cada función permite sustituir directamente las expresiones de la función de entrada $I_{in}(\tau)$, en la solución para la concentración de salida del tanque U_f .

Tabla F.1: Factor de alimentación dependiente $I_{in}(\tau)$ para diferentes funciones de entrada $U_{in}(\tau)$.

k	Función de Entrada	$U_{in}(\tau)$	$I_n^k(\tau)$	Restricciones
1	Escalón	$H(\tau - \tau_0)$	$\alpha_1 \frac{1 - \exp \left[- \left(\frac{\lambda_n^2 + \Phi^2}{\alpha} \right) (\tau - \tau_0) \right]}{\left(\frac{\lambda_n^2 + \Phi^2}{\alpha} \right)}$	$\alpha_1 = 0$, para $\tau \leq \tau_0$ $\alpha_1 = 1$, para $\tau > \tau_0$
2	Pulso	$1 + \delta(\tau - \tau_0)$	$\alpha \frac{1 - \exp \left[- \left(\frac{\lambda_n^2 + \Phi^2}{\alpha} \right) \tau \right]}{\left(\frac{\lambda_n^2 + \Phi^2}{\alpha} \right)} + \alpha_1 \exp \left[- \left(\frac{\lambda_n^2 + \Phi^2}{\alpha} \right) (\tau - \tau_0) \right]$	$\alpha_1 = 0$, para $\tau \leq \tau_0$ $\alpha_1 = 1$, para $\tau > \tau_0$
3	Oscilatorio	$1 + \beta H(\tau - \tau_0) \text{sen}(\omega\tau)$	$\alpha \frac{1 - \exp \left[- \left(\frac{\lambda_n^2 + \Phi^2}{\alpha} \right) \tau \right]}{\left(\frac{\lambda_n^2 + \Phi^2}{\alpha} \right)} + \alpha_1 \frac{\left(\frac{\lambda_n^2 + \Phi^2}{\alpha} \right) \text{sen}(\omega\tau) - \omega \cos(\omega\tau)}{\omega^2 + \left(\frac{\lambda_n^2 + \Phi^2}{\alpha} \right)^2}$ $- \exp \left[- \left(\frac{\lambda_n^2 + \Phi^2}{\alpha} \right) (\tau - \tau_0) \right] \frac{\left(\frac{\lambda_n^2 + \Phi^2}{\alpha} \right) \text{sen}(\omega\tau_0) - \omega \cos(\omega\tau_0)}{\omega^2 + \left(\frac{\lambda_n^2 + \Phi^2}{\alpha} \right)^2}$	$\alpha_1 = 0$, para $\tau \leq \tau_0$ $\alpha_1 = \beta$, para $\tau > \tau_0$

k	Función de Entrada	$U_{in}(\tau)$	$I_n^k(\tau)$	Restricciones
1	Escalón	$H(\tau - \tau_0)$	$\alpha_1 \frac{1 - \exp \left[\left(\frac{\mu^2 + \Phi^2}{\alpha} \right) (\tau - \tau_0) \right]}{- \left(\frac{\mu^2 + \Phi^2}{\alpha} \right)}$	$\alpha_1 = 0$, para $\tau \leq \tau_0$ $\alpha_1 = 1$, para $\tau > \tau_0$
2	Pulso	$1 + \delta(\tau - \tau_0)$	$\alpha \frac{1 - \exp \left[\left(\frac{\mu^2 + \Phi^2}{\alpha} \right) \tau \right]}{- \left(\frac{\mu^2 + \Phi^2}{\alpha} \right)} + \alpha_1 \exp \left[\left(\frac{\mu^2 + \Phi^2}{\alpha} \right) (\tau - \tau_0) \right]$	$\alpha_1 = 0$, para $\tau \leq \tau_0$ $\alpha_1 = 1$, para $\tau > \tau_0$
3	Oscilatorio	$1 + \beta H(\tau - \tau_0) \text{sen}(\omega \tau)$	$\alpha \frac{1 - \exp \left[\left(\frac{\mu^2 + \Phi^2}{\alpha} \right) \tau \right]}{- \left(\frac{\mu^2 + \Phi^2}{\alpha} \right)} - \alpha_1 \frac{\left(\frac{\mu^2 + \Phi^2}{\alpha} \right) \text{sen}(\omega \tau) - \omega \cos(\omega \tau)}{\omega^2 - \left(\frac{\mu^2 + \Phi^2}{\alpha} \right)^2}$ $+ \exp \left[\left(\frac{\mu^2 + \Phi^2}{\alpha} \right) (\tau - \tau_0) \right] \frac{\left(\frac{\mu^2 + \Phi^2}{\alpha} \right) \text{sen}(\omega \tau_0) - \omega \cos(\omega \tau_0)}{\omega^2 - \left(\frac{\mu^2 + \Phi^2}{\alpha} \right)^2}$	$\alpha_1 = 0$, para $\tau \leq \tau_0$ $\alpha_1 = \beta$, para $\tau > \tau_0$

Tabla F.2: Factor de alimentación dependiente $I_n(\tau)$ para diferentes funciones de entrada $U_{in}(\tau)$.

Apéndice G

SOLUCIÓN EN ESTADO ESTACIONARIO

Para el análisis de la concentración de la partícula y la concentración del fluido en el tiempo se utilizó también la solución del estado estacionario que se presenta a continuación.

Sistema de Ecuaciones utilizando la condición de frontera no tradicional

Ecuación que describe el comportamiento de la concentración en la partícula:

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{dU_p}{d\xi} \right) - \Phi^2 U_p = 0 \quad (\text{G.1})$$

Ecuación que describe el comportamiento de la concentración del fluido en el tanque:

$$\psi_{in}(U_{in}(\tau) - U_f) + \psi_p(U_p|_{\xi=1} - U_f) = 0 \quad (\text{G.2})$$

Condición de frontera en $\xi = 0$:

$$\frac{dU_p}{d\xi} = 0 \quad (\text{G.3})$$

Condición de frontera en $\xi = 1$:

$$-\frac{dU_p}{d\xi} = Bi(U_p|_{\xi=1} - U_f) - \phi_1 U_p \quad (\text{G.4})$$

Solución para la Ecuación (G.1):

Por superposición de variables, se propone:

$$U_p(\xi) = \frac{V_p(\xi)}{\xi} \quad (\text{G.5})$$

Sustituyendo la Ecuación (G.5) en (G.1) y desarrollando se obtiene:

$$\frac{d^2 V_p}{d\xi^2} - \Phi^2 V_p = 0 \quad (\text{G.6})$$

La solución para V_p de la Ecuación (G.6) es:

$$V_p(\xi) = A \sinh(\Phi\xi) + B \cosh(\Phi\xi) \quad (\text{G.7})$$

Sustituyendo la Ecuación (G.7) en (G.5):

$$U_p(\xi) = A \frac{\sinh(\Phi\xi)}{\xi} + B \frac{\cosh(\Phi\xi)}{\xi} \quad (\text{G.8})$$

Utilizando la Ecuación de frontera (G.3), se concluye que $B = 0$, por lo tanto:

$$U_p(\xi) = A \frac{\sinh(\Phi\xi)}{\xi} \quad (\text{G.9})$$

Para encontrar el valor de la constante A , se utiliza la Ecuación de frontera (G.4), desarrollando la derivada de la Ecuación (G.9):

$$\frac{dU_p(\xi)}{d\xi} = \frac{A\xi\Phi \cosh(\Phi\xi)}{\xi^2} - \frac{A\frac{d\xi}{d\xi}\sinh(\Phi\xi)}{\xi^2} = \frac{A\Phi \cosh(\Phi\xi)}{\xi} - \frac{A\sinh(\Phi\xi)}{\xi^2} \quad (\text{G.10})$$

Haciendo uso de la Ecuación (G.10) y de la Ecuación (G.9) en $\xi = 1$ para sustituirlas en la Ecuación (G.4):

$$-\frac{dU_p}{d\xi} = Bi(U_p|_{\xi=1} - U_f)$$

$$-\left[\frac{A\sinh(\Phi\xi)}{\xi^2} - \frac{A\Phi \cosh(\Phi)}{\xi} \right] = Bi[A\sinh(\Phi\xi)] - BiU_f - \phi_1[A\sinh(\Phi\xi)] \quad (\text{G.11})$$

Desarrollando la ecuación anterior y agrupando términos, se obtiene para la constante A la siguiente expresión:

$$A = \frac{BiU_f}{\Phi \cosh(\Phi) + \sinh(\Phi)(Bi - 1 - \phi_1)} \quad (\text{G.12})$$

Sustituyendo la expresión de A en la Ecuación (G.9), se obtiene:

$$\begin{aligned} U_p(\xi) &= \left[\frac{BiU_f}{\Phi \cosh(\Phi) + \sinh(\Phi)(Bi - 1 - \phi_1)} \right] \frac{\sinh(\Phi\xi)}{\xi} \\ &= U_f \frac{Bi \frac{\sinh(\Phi\xi)}{\xi}}{\Phi \cosh(\Phi) + \sinh(\Phi)(Bi - 1 - \phi_1)} \end{aligned} \quad (\text{G.13})$$

Para encontrar el valor de U_f se utiliza la ecuación en el fluido expresada en la Ecuación (G.2), utilizando para $U_{in}(\tau) \rightarrow 1$ que es para tiempos grandes su tendencia.

$$\psi_{in}(U_{in}(\tau) - U_f) + \psi_p(U_p|_{\xi=1} - U_f) = 0$$

$$\psi_{in} - \psi_{in}U_f + \psi_p U_p|_{\xi=1} - \psi_p U_f = 0$$

Sustituyendo la expresión para U_p en $\xi = 1$, se obtiene:

$$\psi_{in} - \psi_{in}U_f + \psi_p \left[U_f \frac{\text{Bisinh}(\Phi)}{\Phi \cosh(\Phi) + \sinh(\Phi)(\text{Bi} - 1 - \phi_1)} \right] - \psi_p U_f = 0$$

Desarrollando la ecuación anterior y agrupando términos, se obtiene para la concentración en el fluido:

$$U_f^{ss} = \frac{\psi_{in}[\Phi \cosh(\Phi) + \sinh(\Phi)(\text{Bi} - 1 - \phi_1)]}{\psi_{in}[\Phi \cosh(\Phi) + \sinh(\Phi)(\text{Bi} - 1 - \phi)] + \psi_p[\Phi \cosh(\Phi) - \sinh(\Phi)(1 + \phi_1)]} \quad (\text{G.14})$$

Sustituyendo la Ecuación (G.13), se obtiene para la concentración en la partícula en estado estacionario, U_p^{ss} :

$$U_p^{ss} = \frac{\psi_{in} \text{Bi} \frac{\sinh(\Phi \xi)}{\xi}}{\psi_{in}[\Phi \cosh(\Phi) + \sinh(\Phi)(\text{Bi} - 1 - \phi_1)] + \psi_p[\Phi \cosh(\Phi) - \sinh(\Phi)(1 + \phi_1)]} \quad (\text{G.15})$$

Esta misma solución para las expresiones de la concentración del fluido y la partícula en estado estacionario pueden aplicarse al sistema de ecuaciones utilizando la condición de frontera tradicional, donde $\phi = 0.0$, es decir, las expresiones que se obtienen son:

Para la concentración del fluido:

$$U_f^{ss} = \frac{\psi_{in}[\Phi \cosh(\Phi) + \sinh(\Phi)(\text{Bi} - 1)]}{\psi_{in}[\Phi \cosh(\Phi) + \sinh(\Phi)(\text{Bi} - 1)] + \psi_p[\Phi \cosh(\Phi) - \sinh(\Phi)]} \quad (\text{G.16})$$

Sustituyendo la Ecuación (G.13), se obtiene para la concentración en la partícula en estado estacionario, U_p^{ss} :

$$U_p^{ss} = \frac{\psi_{in} \text{Bi} \frac{\sinh(\Phi \xi)}{\xi}}{\psi_{in}[\Phi \cosh(\Phi) + \sinh(\Phi)(\text{Bi} - 1)] + \psi_p[\Phi \cosh(\Phi) - \sinh(\Phi)]} \quad (\text{G.17})$$

Apéndice H

PROGRAMA COMPUTACIONAL CODIFICADO EN “Fortran 90”

El programa usado para calcular los datos reportados en el capítulo de resultados fue escrito en el lenguaje Fortran 90, usando el compilador gfortran 4.3 en una distribución GNU/Linux SuSE 11.4. El objetivo de este apéndice es explicar brevemente cada uno de los módulos y listar los archivos fuentes que se usaron.

H.1 Estructura del Programa

Con el objetivo de escribir un programa eficiente, escalable, fácil de entender y depurar; la codificación se dividió en cinco partes las cuales se listan a continuación:

- Programa Principal
- Constantes
- Funciones
- Numéricos
- Rutinas

Cuya dependencia puede visualizarse en la siguiente figura.

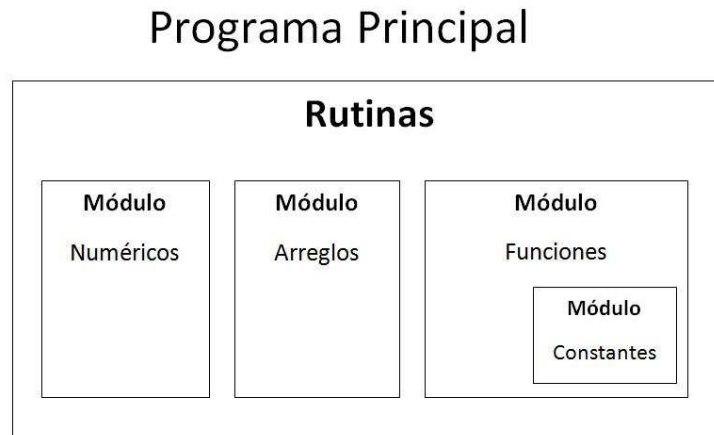


Figura H.1: Programa

La idea principal es usar un par de funciones para producir todas las gráficas

Programa Principal

Hace un llamado a los módulos y las funciones de forma organizada para que el programa tenga la secuencia requerida para la obtención del resultado final que es una tabla que presenta el valor de la concentración del fluido y la concentración en la superficie en el tiempo para cada una de las funciones de entrada.

```

1 !
  ! File:   lucyV40.f90
3 ! Author: shikary&tunbolom
  !
5 ! Created on 5 de Enero de 2011, 19:15 Hrs
  !
7
PROGRAM Principal
9
  USE Constantes
11  USE Arreglos
  USE Funciones
13  USE Rutinas
  
```

```

15  IMPLICIT NONE

17  INTEGER NoRaices, Imagina

19  CALL Grafica(g, "g.d", am, bm, 1000, Imagina)
    CALL Grafica(f, "f.d", a, b, No, NoRaices)

21

23  PRINT *, 'Total de raices encontradas = ', Imagina + NoRaices
    ALLOCATE ( lambda(0:NoRaices), AA(0:NoRaices), BB(0:NoRaices), DD(0:
        NoRaices), DDA(0:NoRaices) )
    ALLOCATE ( pppmaa(0:NoRaices), sen(0:NoRaices), L(0:NoRaices), S(0:
        NoRaices) )
25  ALLOCATE ( T(0:NoRaices), R(0:NoRaices) )
    PRINT *, 'arreglos creados'

27

29  CALL CalCoef("comparativa.d", f, g, NoRaices)

31  CALL gexp(NoRaices)           ! Funcion usada para observar las
    ! dado que rapidamente tiende a cero las contribuciones de alpha se
    ! hacen no significativas

33  CALL U_F( "StepUF.d", stepR, stepI, NoRaices )
    CALL U_F( "PulseUF.d", pulseR, pulseI, NoRaices )
35  CALL U_F( "OscilaUF.d", oscilaR, oscilaI, NoRaices )
    CALL U_P( "StepUP.d", stepR, stepI, NoRaices )
37  CALL U_P( "PulseUP.d", pulseR, pulseI, NoRaices )
    CALL U_P( "OscilaUP.d", oscilaR, oscilaI, NoRaices )
39  CALL U_fa( "StepAP.d" )
    CALL U_fo( "StepOP.d" )
41  CALL U_po( "StepUPO.d" )
END PROGRAM Principal

```

looV50SuSE/lucyV50.F90

Módulo constantes

- Module constantes
- Module arreglos

El módulo constantes contiene a todas las constantes que se usan a lo largo del programa, facilitando la manipulación del valor de las constantes en este único módulo.

El módulo arreglos debe su nombre a los arreglos que requiere el programa para funcionar, los arreglos son aquellas variables que cambian de valor en función de λ , es decir, aquellas variables que toman n número de valores como valores propios existan incluyendo λ . Los arreglos se inicializan desde cero por el Programa Principal, y suponiendo que existe una raíz imaginaria, ésta toma la posición cero del arreglo, todos los arreglos son del tipo dinámico y el tamaño del arreglo se realiza en función de los cambios de signo.

```

!
2 ! File:    constantes.f90
! Author:  shikary&tunbolom
4 !
! Created on 26 de julio de 2009, 00:41 Hrs
6 ! Revised on 7 de Enero de 2011, 21:57 Hrs
!
8
!
10 !      Definicion de las constates que se usaran durante todo el programa.
!      Basta modificar sus valores desde este modulo para establer las
condiciones de
12 !      cada uno de los experimentos para trabajar con las tres funciones de
entrada.
!
14 MODULE Constantes

16     IMPLICIT NONE

18     REAL (KIND=8), PARAMETER :: Biot      =      1.0    ! Numero de Biot.
REAL (KIND=8), PARAMETER :: fi           =      2.0    ! Phi, Numero de Thiele
.
20     REAL (KIND=8), PARAMETER :: alpha    =      1.0    ! Coeficiente de
Adsorcion.
REAL (KIND=8), PARAMETER :: bet          =      0.0    ! Constante para la
oscilatoria
22     REAL (KIND=8), PARAMETER :: pp      =      0.1    ! Psi_p, Parametro de
intercambio fluido-particula.
REAL (KIND=8), PARAMETER :: pin         =     10.00    ! Psi_{in}, Parametro
de intercambio del fluido.

```

```

24  REAL (KIND=8), PARAMETER :: fimenor1 = 0.0 ! phi_1, Coeficiente de
      salto para la reaccion.
      REAL (KIND=8), PARAMETER :: fimenor2 = 0.0 ! phi_2, Coeficiente de
      salto para la adsorcion.
26  REAL (KIND=8), PARAMETER :: tao0 = 0.0 ! Tiempo cero
      adimensional
      REAL (KIND=8), PARAMETER :: Uf0 = 0.0 ! Concentracion
      adimensional en tiempo cero para el fluido.
28  REAL (KIND=8) :: Ui0 = 0.997 ! Constante de la
      solucion promedio
      REAL (KIND=8), PARAMETER :: Up0 = 0.0 ! Concentracion Inicial
      en la Particula
30  REAL (KIND=8), PARAMETER :: w = 31.4 ! Coeficiente para la
      funcion oscilatoria.
      REAL (KIND=8), PARAMETER :: a = 0.0 ! Intervalo inicial en
      la funcion f(x) para el calculo de lambda_n.
32  REAL (KIND=8), PARAMETER :: b = 300.0 ! Intervalo final en la
      funcion f(x) para el calculo de lambda_n.
      REAL (KIND=8), PARAMETER :: am = 0.0 ! Intervalo inicial en
      la funcion g(x) para el calculo de lambda imaginaria.
34  REAL (KIND=8), PARAMETER :: bm = 5.0 ! Intervalo final en la
      funcion g(x) para el calculo de lambda imaginaria.
      REAL (KIND=8) :: xi = 1.0 ! Posicion en la
      particula
36
      INTEGER, PARAMETER :: No = 3000 ! Discretizacion en la
      distancia para crear intervalos a evaluar.
38  INTEGER, PARAMETER :: Ntao = 640 ! Discretizacion en el
      tiempo

40 END MODULE Constantes

42
! Creando los arreglos auxiliares que se usaran para el calculo de Uf
44 ! todos los arreglos son de tipo dinamico y se asigna su tamaño despues
! de
! la deteccion de los cambios de signo en los subintervalos
46 !
MODULE Arreglos
48
      IMPLICIT NONE

```

```

50      ! En el programa principal los arreglos se inicializan desde cero; en el
        cado de que exista
52      ! una raiz imaginaria, se almacenara en la localidad cero del arreglo.

54      REAL (KIND=8), DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: lambda    ! Raices de la
        funcion
        REAL (KIND=8), DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: AA      ! coeficiente a_n
        necesario para d_n
56      REAL (KIND=8), DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: BB      ! coeficiente b_n
        necesario para d_n
        REAL (KIND=8), DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: DD      ! coeficiente d_n
        necesario para Wf en la sumatoria
58      REAL (KIND=8), DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: DDA     ! usado en una
        comparativa algebraica
        REAL (KIND=8), DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: L       ! arreglo auxiliar
        para W_f y U_f lambda cuadrada
60      REAL (KIND=8), DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: S       ! arreglo auxiliar
        para W_f y U_f
        REAL (KIND=8), DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: T       ! arreglo auxiliar
        para W_f y U_f
62      REAL (KIND=8), DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: R       ! arreglo auxiliar
        para V_f y U_f
        ! Se agrega V_f en la nueva solucion
64      REAL (KIND=8), DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: sen     ! arreglos auxiliar
        para U_p
        REAL (KIND=8), DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: ppmAA   ! vease la rutina
        correspondiente
66      ! Los dos ultimos arreglos ayudan a simplificar los calculos de W_f y U_f
        ya que L y S
        ! se calculan para cada una de las iteraciones del tiempo con cada uno de
        los valores propios.

68      END MODULE Arreglos

```

looV50SuSE/constantes.F90

Módulo funciones

El módulo esta integrado de la siguiente forma:

- Function $f(x)$
- Function $g(x)$
- Function stepR
- Function stepI
- Function pulseR
- Function pulseI
- Function oscilaR
- Function oscilaI

En este módulo están incluidas las ecuaciones para calcular los valores propios tanto reales ($f(x)$) como imaginarios ($g(x)$), la función está escrita en términos de senos y cosenos. Los cambios de signo de la función se detectan con la función Grafica, (incluido en el módulo subrutina) y el valor preciso de la raíz se calcula con el Método Regula falsi (incluido en el módulo numéricos).

El módulo incluye cada una de las funciones de entrada, escalón, pulso y oscilatoria en cada función, la real y la imaginaria.

```
!  
2 ! File:   funciones.f90  
  ! Author: shikary&tunbolom  
4 !  
  ! Created on 26 de julio de 2009, 01:08 Hrs  
6 ! Revised on 7 de Enero de 2011, 21:59 Hrs  
  !  
8  
MODULE funciones  
10  
CONTAINS  
12  
  !  
14 ! F: Funcion con la que se calculan las raices REALES del problema, los  
    cambios de signo se
```



```

!      detectan con la funcion GRAFICA, esta idea ayuda a detectar el numero
de raices que se
16 !      presentan en el intervalo [a,b] en funcion del valor de las constantes
.
!      Posteriormente, la precision de los calculos para encontrar las raices
se incrementa
18 !      con el uso del metodo numerico: REGULA_FALSI (un hibrido de biseccion
con regula falsi).
!
20 REAL (KIND=8) FUNCTION f(x)

22     USE constantes

24     IMPLICIT NONE

26     REAL (KIND=8), INTENT(IN) :: x
REAL (KIND=8) s

28
s = ( x**2 + fi**2 )/alpha
30     f = (Sin(x)/x)* (Biot*(-s + pin) - (1 + fimenor1 - fimenor2 * s) * (-s +
pin + pp)) + (Cos(x)*(-s + pin + pp))

32     RETURN

34 END FUNCTION f

36 !
!      G: Funcion con la que se calculan las raices IMAGINARIAS del problema, de
igual manera,
38 !      los cambios de signo se detectan con la funcion GRAFICAG, esta idea
ayuda a detectar
!      el numero de raices que se presentan en el intervalo [am,bm] en
funcion del valor de
40 !      las constantes, posteriormente, la precision de los calculos para
encontrar la raíz
!      imaginaria, se incrementa con el uso del metodo numerico: REGULA_FALSI
(un hibrido
42 !      de biseccion con regula falsi).
!
44 REAL (KIND=8) FUNCTION g(x)

```



```

82 END FUNCTION stepR

84 REAL (KIND=8) FUNCTION stepI( tiempo , si )

86     USE constantes

88     IMPLICIT NONE

90     REAL (KIND=8), INTENT(IN) :: tiempo           ! "tao" en el contexto del
        reporte de Tesis
92     REAL (KIND=8), INTENT(IN) :: si             ! Este valor es calculado
        por anticipado dado que es usado
94     ! con frecuencia en las funciones a evaluar
        REAL (KIND=8) a1                          ! alfa_1 de acuerdo a
        la Tabla de Funciones

96     IF ( tiempo .le. tao0 ) THEN
98         a1 = 0.0
        ELSE
98         a1 = 1.0
        END IF

100     stepI = -a1 * (1 - exp( si * ( tiempo - tao0 ))) / si

102     END FUNCTION stepI

104     !
106     ! Funcion pulso en sus variantes real y compleja. Son invocadas por U_f al
        evaluar un discriminante
        !

108 REAL (KIND=8) FUNCTION pulseR( tiempo , si )

110     USE constantes

112     IMPLICIT NONE

114     REAL (KIND=8), INTENT(IN) :: tiempo           ! "tao" en el contexto del
        reporte de Tesis
116     REAL (KIND=8), INTENT(IN) :: si             ! Este valor es calculado
        por anticipado dado que es usado
        ! con frecuencia en las funciones a evaluar

```

```

REAL (KIND=8) a1                                ! alfa_1 de acuerdo a
    la Tabla de Funciones
118
    IF ( tiempo .le. tao0 ) THEN
120        a1 = 0.0
    ELSE
122        a1 = 1.0
    END IF
124
pulseR = ((1 - exp(-si*tiempo)) / si) + a1 * exp( -si * ( tiempo - tao0 ))
126
END FUNCTION pulseR
128
REAL (KIND=8) FUNCTION pulseI( tiempo, si )
130
    USE constantes
132
    IMPLICIT NONE
134
    REAL (KIND=8), INTENT(IN) :: tiempo          ! "tao" en el contexto del
    reporte de Tesis
136    REAL (KIND=8), INTENT(IN) :: si            ! Este valor es calculado
    por anticipado dado que es usado
    ! con frecuencia en las funciones a evaluar
138    REAL (KIND=8) a1                            ! alfa_1 de acuerdo a
    la Tabla de Funciones

140    IF ( tiempo .le. tao0 ) THEN
        a1 = 0.0
142    ELSE
        a1 = 1.0
144    END IF

146    pulseI = ((1 - exp(si*tiempo)) / (-si)) + a1 * exp( si * ( tiempo - tao0 ))
    ! -(1 - exp(si * tiempo)) / si + exp( si * ( tiempo - tao0 ) )
148        ! forma original en la primera version del programa
END FUNCTION pulseI
150
!
152 ! Funcion oscilatoria en sus variantes real y compleja. Son invocadas por U_f
    al evaluar un discriminante

```

```

!
154 REAL (KIND=8) FUNCTION oscilaR( tiempo, si )

156     USE constantes

158     IMPLICIT NONE

160     REAL (KIND=8), INTENT(IN) :: tiempo           ! "tao" en el contexto del
        reporte de Tesis
160     REAL (KIND=8), INTENT(IN) :: si               ! Este valor es calculado
        por anticipado dado que es usado
162         ! con frecuencia en las funciones a evaluar
        REAL (KIND=8) a1                             ! alfa_1 de acuerdo a
        la Tabla de Funciones

164
        IF ( tiempo .le. tao0 ) THEN
166             a1 = 0.0
        ELSE
168             a1 = bet
        END IF

170
        oscilaR = ((1 - exp(-si*tiempo))/si) + a1 * ((si*sin(w*tiempo) - w*cos(w*
        tiempo))/(w**2 + si**2)) &
172 & - a1 * exp(-si*(tiempo-tao0))*((si*sin(w*tao0) - w*cos(w*tao0))/(w**2 +
        si**2))

174 END FUNCTION oscilaR

176 REAL (KIND=8) FUNCTION oscilaI( tiempo, si )

178     USE constantes

180     IMPLICIT NONE

182     REAL (KIND=8), INTENT(IN) :: tiempo           ! "tao" en el contexto del
        reporte de Tesis
182     REAL (KIND=8), INTENT(IN) :: si               ! Este valor es calculado
        por anticipado dado que es usado
184         ! con frecuencia en las funciones a evaluar
        REAL (KIND=8) a1                             ! alfa_1 de acuerdo a
        la Tabla de Funciones

```

```

186         IF ( tiempo .le. tao0 ) THEN
188             a1 = 0.0
189         ELSE
190             a1 = bet
191         END IF
192
193     oscilaI = ((1 - exp(si*tiempo))/(-si)) - a1 * ((si*sin(w*tiempo) + w*cos(w*
194     & + a1 * exp(si*(tiempo-tao0))*((si*sin(w*tao0) - w*cos(w*tao0))/(w**2 - si
195     **2))
196 END FUNCTION oscilaI
197
198 END MODULE funciones

```

looV50SuSE/funciones.F90

Módulo Numéricos

- Function Regula falsi.
- Function Muller.

El módulo numéricos contiene al método regla falsi, básicamente es un híbrido entre el método de la bisección y el regla falsi, se utiliza para calcular el valor de las raíces de μ y λ_n . El módulo incluye el método de Muller, se agregó en el programa como una medida de comprobación de los resultados obtenidos por el regla falsi, pero debido a la naturaleza del programa y de las funciones $g(x)$ y $f(x)$, no pudo ser utilizado, sin embargo se decidió incluirlo en el programa con la finalidad de reutilizar del código.

```

!
2 ! File:   numericos.f90
! Author: shikary&tunbolom
4 !
! Created on 26 de julio de 2009, 01:16 Hrs
6 !
!
8 ! Escencialmente el modulo contiene la funcion REGULA_FALSI que calcula la
! raiz de una funcion.

```

```

!       Se propone un segundo metodo para la verificacion de la raiz , MULLER.
!       Sin embargo ,
10 !       el metodo presento problemas por el calculo con numeros complejos.
!
12 ! La idea del modulo es completar una biblioteca de funciones para calcular
!       las racices de
!       una funcion por diversos metodos. Habra que revizar las caracteristicas
!       de cada metodo
14 !       en un libro especializado en el tema.
!
16 ! Revised on 7 de Enero de 2011, 21:26 Hrs (Sin cambios)

18 MODULE numericos

20 CONTAINS

22 !
!   FUNCION regula_falsi.
24 !       Esta funcion trabaja con el metodo de la posicion falsa estandar para
!       detectar las raices
!       de f(x) de forma local. Recibe de hibridof rp0 y rp1 que es donde se
!       detecta un cambio de
26 !       signo, el valor de la raiz se almacena en el arreglo lambda en la
!       posicion correspondiente.
!
28 REAL (KIND=8) FUNCTION regula_falsi(funcion , rp0, rp1)

30   IMPLICIT NONE

32   REAL (KIND=8), EXTERNAL :: funcion           ! Apuntador a la funcion que se
!       utiliza .
!
!   REAL (KIND=8), INTENT(IN) :: rp0, rp1       ! Inicio y final del intervalo a
!       evaluar .
!
34   REAL (KIND=8) p0, p1                       ! Para modificar los valores de
!       rp0 y rp1 .
!
!   REAL (KIND=8) q0, q1                       ! Evaluacion de la funcion en
!       los extremos .
!
36   REAL (KIND=8) p, q                         ! RAIZ y su evaluacion .
!
!   REAL (KIND=8), PARAMETER :: tol = 10E-9    ! Tolerancia .
!
38   INTEGER, PARAMETER :: No = 1000           ! Numero de particiones .
!
!   INTEGER i

```

```

40      p0 = rp0
42      p1 = rp1

44      q0 = funcion(p0)           ! Calculo de la funcion en el
      punto inicial del intervalo.
46      q1 = funcion(p1)           ! Calculo de la funcion en el
      punto final del intervalo.

48      DO i=2, No
49          p = p1 - q1 * ( ( p1 - p0 ) / ( q1 - q0 ) )
50          IF(ABS( p - p1 ).le.tol) EXIT
51          q = funcion(p)
52          IF(q1 * q.lt.0) THEN
53              p0 = p1
54              q0 = q1
55          END IF
56          p1 = p
57          q1 = q
58      END DO

59      regula_falsi = p
60      RETURN

61  END FUNCTION regula_falsi

62  !
63  ! Metodo de Muller.

64  REAL (KIND=8) FUNCTION muller(funcion , rp0 ,rp1 ,rp2)
65
66      IMPLICIT NONE

67
68
69      REAL (KIND=8), EXTERNAL :: funcion           ! Puntero a la funcion a
      analizar.
70
71      REAL (KIND=8), INTENT(IN) :: rp0, rp1, rp2   ! Tres puntos consecutivos.
72      REAL (KIND=8) p0, p1, p2                     ! Copia los valores de los
      puntos iniciales
73
74      REAL (KIND=8) delta1 , delta2 , d, h
75      REAL (KIND=8) b, De, E
76      REAL (KIND=8) p                               ! RAIZ

```



```
REAL (KIND=8), PARAMETER :: tol = 10E-9           ! Tolerancia
78  INTEGER, PARAMETER :: No = 1000
    INTEGER i
80
    p0 = rp0
82    p1 = rp1
    p2 = rp2
84
    delta1 = (funcion(p1) - funcion(p0)) / (p0 - p1)
86    delta2 = (funcion(p2) - funcion(p1)) / (p2 - p1)
    d      = (delta1 - delta2) / (p2 - p0)
88
    DO i = 3, No
90
        b = delta2 + (p2 - p1)*d
92        De = b**2 - 4*d*funcion(p2)
    PRINT *, De
94        De = SQRT(De)

96        IF (ABS( b - De ) .lt. ABS( b + De )) THEN
            E = b + De
98        ELSE
            E = b - De
100       END IF

102       h = -2 * funcion(p2) / E
        p = p2 + h
104
        IF (ABS(h) .lt. tol) EXIT
106
        p0 = p1
108       p1 = p2
        p2 = p

110
        delta1 = (funcion(p1) - funcion(p0)) / (p1 - p0)
112       delta2 = (funcion(p2) - funcion(p1)) / (p2 - p1)
        d      = (delta1 - delta2) / (p2 - p1)
114
    END DO
116
    muller = p
```

```
118 END FUNCTION muller
120 END MODULE numericos
```

looV50SuSE/numericos.F90

Módulo Rutinas

En el presente módulo están contenidos las rutinas y funciones con las que trabaja el programa principal.

- Subroutine `grafica`. La función `grafica` calcula los cambios de signo en la función para el cálculo de valores propios.
- Subroutine `hibrido`. Subrutina `hibrido`, sirve para hacer una aproximación de la raíz, manda el intervalo donde se encuentra el cambio de signo a Regula Falsi.
- Subroutine `CalCoef`. Subrutina `Calcoef`, calcula los coeficientes que se utilizan en la sumatoria para el cálculo de la concentración en la partícula y la concentración en el fluido.

```
1 ! File:   rutinas.f90
  ! Author: shikary&tunbolom
3 !
  ! Created on 26 de julio de 2009, 00:01 Hrs
5 ! Revised on 7 de Enero de 2011, 22:11 Hrs
  ! Revised on 25 de Enero de 2011, 22:09 Hrs
7 !
  ! El presente modulo contiene las funciones y subrutinas con las que trabaja
    el programa principal.
9 ! El funcionamiento de cada una de ellas se describe brevemente en el
    comentario superior a la de-
  ! claracion de las funciones y procedimientos.
11 !
  MODULE rutinas
13
  CONTAINS
15
```

```

!
17 ! GRAFICA: Subrutina para graficar la funcion f(x) o g(x). El intervalo [a,b
    ] es discretizado por
!         medio del Numero de Particiones NO. Se evalua la funcion en cada
    uno de los puntos lo
19 !         que permite detectar los cambios de signo y por tanto la
    existencia de raices. El nume-
!         ro de raices queda almacenado en la variable NORAICES, de forma
    similar, los puntos (X,
21 !         funcion(X)) quedan almacenados por parejas en el archivo NOMBRE
    para su posterior grafi-
!         cacion con otro programa.
23 !
SUBROUTINE Grafica(funcion , nombre , a , b , No , NoRaices)
25
    IMPLICIT NONE
27
    REAL (KIND=8), EXTERNAL :: funcion      ! Funcion a graficar.
29    CHARACTER(len=*) , INTENT(IN) :: nombre ! Nombre del archivo a crear.
    REAL (KIND=8), INTENT(IN)  :: a , b     ! Inicio y final del intervalo a
        evaluar.
31    INTEGER, INTENT(IN)  :: No             ! Numero de particiones.
    INTEGER, INTENT(OUT) :: NoRaices       ! Deteccion de los cambios de
        signo (raices).
33    REAL (KIND=8) p0 , p1                 ! Pivotes de la discretizacion.
    REAL (KIND=8) q0 , q1                 ! f(p0) y f(p1) respectivamente.
35    REAL (KIND=8) dx                       ! Tamano del subintervalo.

37    INTEGER i , ierror

39    dx = ( b - a ) / No
    p0 = a + dx
41    NoRaices = 0

43    OPEN(UNIT = 15, FILE=nombre, STATUS = 'REPLACE', ACTION = 'WRITE',
        POSITION = 'REWIND', IOSTAT = ierror)

45    DO i=1, No

47        p1 = p0 + dx

```

```
49      q0 = funcion(p0)
      q1 = funcion(p1)
51
      ! Deteccion de las raices por cambio de signo.
53
      IF( ( q0.eq.0.0 ).OR.( (q0 * q1).lt.0 ) ) NoRaices = NoRaices + 1
55
      WRITE(15, *) p0, q0
57      p0 = p1

59      END DO

61      CLOSE(15, IOSTAT = ierror)

63      PRINT *, 'Numero de raices detectadas en la grafica =)', NoRaices, nombre

65      RETURN

67 END SUBROUTINE Grafica

69 !
      ! HIBRIDO: Subrutina para la aproximacion de las raices de una funcion. El
      ! intervalo [a, b]
71 !           es discretizado en No subintervalos por medio de dos puntos que
      ! se desplazan en
      !           dx para detectar la raiz. La deteccion de la raiz se realiza en
      ! el intervalo [p0,
73 !           p1] y se aproxima por el metodo regula_falsi contenido en el
      ! MODULO NUMERICOS.
      !           Las raices son almacenadas en el archivo NOMBRE que pasa a modo
      ! de parametro.

75 !
      SUBROUTINE Hibrido(funcion , nombre, a, b, No, NoRaiz )

77
      USE numericos
79      USE arreglos

81      REAL (KIND=8), EXTERNAL :: funcion      ! Funcion a evaluar.
      CHARACTER(len=*), INTENT(IN) :: nombre ! Nombre del archivo a crear.
83      REAL (KIND=8), INTENT(IN) :: a, b      ! Valores inicial y final del
      intervalo.
```

```

      INTEGER, INTENT(IN) :: No                ! Numero de particiones.
85    INTEGER, INTENT(INOUT) :: NoRaiz        ! Deteccion de las raices.
      REAL (KIND=8) p0, p1                    ! Pivotes de evaluacion.
87    REAL (KIND=8) q0, q1                    ! Evaluaciones.
      REAL (KIND=8) dx

89

      INTEGER i

91
10   FORMAT(I4, F12.4)                        ! Formato de despliegue.
93
      dx = ( b - a ) / No
95    p0 = a + dx

97    OPEN(UNIT = 17, FILE=nombre, STATUS = 'REPLACE', ACTION = 'WRITE',
          POSITION = 'REWIND', IOSTAT = ierror)

99    DO i=4, No

101      p1 = p0 + dx
          q0 = funcion(p0)
103      q1 = funcion(p1)

105      ! Se detectan los cambios de signo y se llama a REGULA_FALSI para
          encontrar la raiz.

107      IF( (q0 * q1).lt.0 ) THEN
          lambda( NoRaiz ) = regula_falsi( funcion, p0, p1 )
109          WRITE(17, 10) NoRaiz, lambda( NoRaiz )
          NoRaiz = NoRaiz + 1
111      END IF

113      p0 = p1

115    END DO

117    CLOSE(17, IOSTAT = ierror)

119    PRINT *, 'Raices almacenadas en: ', nombre

121 END SUBROUTINE Hibrido

```

```

123 !
! CALCOEF: Subrutina que calcula los coeficientes utilizados en las sumatorias
! y W.f. Se recibe
125 !     NOMBRE que sera un archivo en donde se almacenaron algunos datos
!     del comportamiento
!     de los coeficientes asi como de las raices. Tambien el numero de
!     raices , NORAIRES
127 !     que ayuda a la asignacion de memoria para los arreglos dinamicos
!     RE e IM son las fun-
!     ciones para calcular las raices reales e imaginarias
!     respectivamente.
129 !
SUBROUTINE CalCoef(nombre, re, im, NoRaices)
131
!     USE constantes
133     USE arreglos
135
!     IMPLICIT NONE
137 20  FORMAT(F8.4, " ", E12.4)
139     CHARACTER(len=*) , INTENT(IN) :: nombre ! Nombre del archivo a crear.
!     REAL (KIND=8), EXTERNAL :: re ! Para raices reales.
141     REAL (KIND=8), EXTERNAL :: im ! Para raices imaginarias.
!     INTEGER, INTENT(IN) :: NoRaices
143     INTEGER :: i, NoRaiz ,ierror
!     REAL (KIND=8) :: l2 , AAmp
145
!     OPEN(UNIT = 19, FILE=nombre, STATUS = 'REPLACE', ACTION = 'WRITE',
!     POSITION = 'REWIND', IOSTAT = ierror)
147     !OPEN(UNIT = 50, FILE="test.txt", STATUS = 'REPLACE', ACTION = 'WRITE',
!     POSITION = 'REWIND', IOSTAT = ierror)
149
!     NoRaiz = 0
151
!     IF((pin - (fi**2/ alpha)).le.0.0) THEN
153
!     CALL hibrido(im, "raicesg.d", am, bm, 1000, NoRaiz )
155
!     l2 = lambda(0)**2
!     S(0) = ( l2 - fi**2 ) / alpha

```

```

157         !WRITE (50, *) lambda(0), ' ', S(0)
AA(0) = - (S(0) + pin)
159         BB(0) = fimenor1 + fimenor2 * S(0)

161     AAmp = AA(0) - pp
ppmAA(0) = pp - AA(0)
163     sen(0) = sinh(lambda(0)*xi)/(xi*sinh(lambda(0)))

165     DDA(0) = (AA(0)*(Biot -1) +pp) * ( 2*l2 + AA(0)*Biot ) + l2*AAmp*(
        AAmp - 2*(Biot-1))
DD(0) = (AA(0)*Biot + BB(0)*ppmAA(0)) * ( 2*l2 - alpha * ( -AA(0) *
        Biot - (1 + BB(0))*ppmAA(0)) ) &
167         + ppmAA(0) * (l2* alpha*ppmAA(0) + 2* l2*(Biot-fimenor2 * ppmAA
        (0) - BB(0)) )
L(0) = 2*l2/DD(0)
169     T(0) = 2*alpha*Up0*AA(0)/DD(0)
R(0) = ppmAA(0) * ( alpha * fimenor1 - fimenor2 * fi**2 ) / DD(0)
171     WRITE (19, *) lambda(0), (Biot*pp*pin*2*lambda(0)**2)/(DD(0)* (-S(0)))
        !19 => comparativa

173     END IF

175     NoRaiz = 1
CALL hibrido(re, "raicesf.d", a, b, No, NoRaiz )
177
DO i=1, NoRaices
179
        l2 = lambda(i)**2
181     S(i) = (fi**2 + l2) / alpha
        !WRITE (50, *) lambda(i), ' ', S(i)
183     AA(i) = S(i) - pin
        BB(i) = fimenor1 - fimenor2 * S(i)

185
AAmp = AA(i) - pp
187     ppmAA(i) = pp - AA(i)
        sen(i) = sin(lambda(i)*xi)/(xi*sin(lambda(i)))

189
DDA(i) = (AA(i)*(Biot -1) +pp) * ( 2*l2 + AA(i)*Biot ) + l2*AAmp*(
        AAmp - 2*(Biot-1))
191     DD(i) = (AA(i)*Biot + BB(i)*ppmAA(i)) * ( 2*l2 - alpha * ( -AA(i) *
        Biot - (1 + BB(i))*ppmAA(i)) ) &

```

```

                + ppmAA(i) * (12* alpha*ppmAA(i) + 2* 12*(Biot-fimenor2 * ppmAA
                (i) - BB(i)) )
193  L(i)   = 2*12/DD(i)
        T(i)   = 2*alpha*Up0*AA(i)/DD(i)
195  R(i)   = ppmAA(i) * ( alpha * fimenor1 - fimenor2 * fi**2 ) / DD(i)

197
        WRITE (19, 20) lambda(i), DD(i)      ! => Comparativa
199
        ! Las siguientes lineas de codigo fueron agregadas para depuracion
        ! del programa
201        ! pueden llegar a ser de utilidad
        !IF(i.lt. 10) THEN
203            !WRITE (*,*) lambda(i), (Biot*pp*pin*2*lambda(i)**2)/DDA(i)
        !END IF
205
        END DO
207
        CLOSE(19, IOSTAT = ierror)
209
    END SUBROUTINE CalCoef
211
    ! Calculo de U_f de acuerdo a la solucion analitica encontrada en el Capitulo
    ! de Metodos Teoricos
213 ! de la tesis.

215 SUBROUTINE U_f(graph, re, im, NoRaices)

217     USE constantes
        USE arreglos
219
        IMPLICIT NONE
221
    10 FORMAT(5F14.7)
223
        CHARACTER(len=*), INTENT(IN) :: graph      ! Almacena los puntos de Uf.
225     REAL (KIND=8), EXTERNAL :: re                ! Funcion de entrada para raices
        reales.
        REAL (KIND=8), EXTERNAL :: im              ! Funcion de entrada para raices
        imaginarias.
227     INTEGER, INTENT(IN) :: NoRaices

```



```

INTEGER ierror , i , j
229 REAL (KIND=8) ex , I_in
REAL (KIND=8) Wf, dtao , Uf, tiempo , Vf, lim
231 REAL (KIND=8) Suma, Suma1, Suma2, Suma3, SumaLi
REAL (KIND=8) Uss, ficos , bim1cos , numera , bim1s
233
OPEN(UNIT = 21, FILE=graph, STATUS = 'REPLACE', ACTION = 'WRITE',
    POSITION = 'REWIND', IOSTAT = ierror)
235
    dtao = 0.00001                                ! Intervalo de evaluacion , Ntao esta
    definida en el modulo CONSTANTES
237    lim = dtao * 100
    tiempo = dtao                                ! Evitamos la evaluacion en cero
239
    DO j = 1, Ntao                                ! Desplazando en el tiempo
241
        Suma = 0                                  ! Inicializando las variables
243    Suma1 = 0
        Suma2 = 0
245    Suma3 = 0
        SumaLi = 0
247
    IF((pin - (fi**2/alpha)).le.0.0) THEN ! detecta la existencia de las
        raices complejas y suma su comtribucion
249
            ex = exp(S(0) * tiempo)
251            I_in = im( tiempo , S(0))
            Suma = Suma + ( Uf0 * L(0) - T(0) ) * ex
253            Suma1 = Suma1 + R(0) * ex
            Suma2 = Suma2 + (L(0) * I_in)
255            Suma3 = Suma3 - L(0)/S(0)
            SumaLi = SumaLi + L(0)
257
    END IF
259
    DO i = 1, NoRaices                            ! Evaluacion de la funcion en las demas
        raices
261
            ex = exp(-S(i) * tiempo)
263            I_in = re( tiempo , S(i) )
            Suma = Suma + ( Uf0 * L(i) - T(i) ) * ex

```

```

265      Suma1 = Suma1 + R(i) * ex
        Suma2 = Suma2 + L(i) * I_in
267      Suma3 = Suma3 + L(i)/S(i)
        SumaLi = SumaLi + L(i)
269
        END DO
271
        IF (j .EQ. Ntao) THEN
273          WRITE (*, *) 'Datos de ', graph
          WRITE (*, *) 'Criterios de Evaluacion de U_f en el tiempo '
275          WRITE (*, *) '          tao <<< 1:' , Biot*pp*SumaLi
          WRITE (*, *) '          tao >>> 1:' , Biot*pp*pin*Suma2
277          WRITE (*, *) '(Step) tao >>> 1:' , Biot*pp*pin*Suma3

279          ficos = fi*(Cosh(fi))
          bim1s = (Biot-1)*Sinh(fi)
281          numera = ficos + bim1s
          Uss = (pin*numera)/ (pin*(ficos+ bim1s) + pp*(ficos - Sinh(fi))
                )
283          PRINT *, 'Para Uss el valor es:', Uss !20
        END IF
285
        Wf = Biot * pp * Suma
287        Vf = 2 * pp * Up0 * Suma1
        Uf = Wf - Vf + (pin * pp * Biot * Suma2)
289

        ! Dado que al evaluar tao en funcion de tao0 puede producir valores no
          definidos es importante
291        ! detectar estos valores antes de enviarlos al archico de graficacion
        ! Se agrega el siguiente condicional para evitar errores al invocar el
          archivo desde GNUPlot
293        IF (.NOT.(ISNAN(UF))) THEN
          WRITE (21,10) tiempo, Uf ! Aqui se esta tabulando cada una
            de las graficas de la funcion U_f para cada una de las
              funciones de entrada
295        ENDIF

297        IF( tiempo .EQ. lim ) THEN
          lim = lim * 10
299          dtao = dtao * 10
          tiempo = tiempo + dtao

```



```
335 IF((pin - (fi**2/alpha)).le.0.0) THEN ! detecta la existencia de las
      raices complejas y suma su contribucion
337 WRITE (21, *) S(0), exp(S(0) * tiempo), exp(S(0) * tiempo * 100),
      exp(S(0) * tiempo * 200), &
      & exp(S(0) * tiempo * 300), exp(S(0) * tiempo * 400 ), exp(S(0) *
      tiempo * 500 ), exp(S(0) * tiempo * 600 ), &
339 & exp(S(0) * tiempo * 700 ), exp(S(0) * tiempo * 800), exp(S(0) *
      tiempo * 9000), exp(S(0) * tiempo * 1000 )
      ! Se almacenan en el archivo EXPONENCIAL.D los valores calculados
      del termino exponencial para diferentes valores
341 ! de tao (tiempo)
      END IF
343 DO i = 1, NoRaices ! Evaluacion de la funcion en las demas
      raices
345 WRITE (21, *) S(i), exp(-S(i) * tiempo), exp(-S(i) * tiempo * 100)
      , exp(-S(i) * tiempo * 200), &
      & exp(-S(i) * tiempo * 300 ), exp(-S(i) * tiempo * 400 ), exp(-S(i)
      ) * tiempo * 500 ), exp(-S(i) * tiempo * 600 ), &
347 & exp(-S(i) * tiempo * 700 ), exp(-S(i) * tiempo * 800 ), exp(-S(i)
      ) * tiempo * 9000), exp(-S(i) * tiempo * 1000 )
      ! Se almacenan en el archivo EXPONENCIAL.D los valores calculados
      del termino exponencial para diferentes valores
349 ! de tao (tiempo)
      END DO
351 CLOSE(21, IOSTAT = ierror)
353 END SUBROUTINE gexp
355 ! Calculo de U_p de acuerdo a la solucion analitica encontrada en el Capitulo
      de Metodos Teoricos
357 ! de la tesis.
      ! Se agrego el arreglo ppmAA para facilitar la extension de este modulo. Se
      modifican las sumatorias.
359 SUBROUTINE U_p(graph, re, im, NoRaices)
361 USE constantes
363 USE arreglos
```

```

365     IMPLICIT NONE

367 10 FORMAT(5F14.7)

369     CHARACTER(len=*), INTENT(IN) :: graph    ! Almacena los puntos de Uf.
     REAL (KIND=8), EXTERNAL :: re            ! Funcion de entrada para raices
     reales.
371     REAL (KIND=8), EXTERNAL :: im          ! Funcion de entrada para raices
     imaginarias.
     INTEGER, INTENT(IN) :: NoRaices
373     INTEGER ierror, i, j
     REAL (KIND=8) ex, I_in
375     REAL (KIND=8) Wp, dtao, Up, tiempo, Vp, lim
     REAL (KIND=8) Suma, Suma1, Suma2

377     OPEN(UNIT = 21, FILE=graph, STATUS = 'REPLACE', ACTION = 'WRITE',
           POSITION = 'REWIND', IOSTAT = ierror)

379     dtao = 0.00001                ! Intervalo de evaluacion, Ntao
     esta definida en el modulo CONSTANTES
381     lim = dtao * 100
     tiempo = dtao                  ! Evitamos la evaluacion en cero

383     DO j = 1, Ntao                ! Desplazando en el tiempo

385         Suma = 0                  ! Inicializando las variables
387         Suma1 = 0
         Suma2 = 0

389     IF((pin - (fi**2/alpha)).le.0.0) THEN ! detecta la existencia de las
     raices complejas y suma su contribucion

391         ex = exp(S(0) * tiempo)
393         I_in = im( tiempo, S(0))
         Suma = Suma + ( Uf0 * L(0) - T(0) ) * ppmAA(0) * sen(0) * ex
395         Suma1 = Suma1 + R(0) * ppmAA(0) * sen(0) * ex
         Suma2 = Suma2 + (L(0) * ppmAA(0) * sen(0) * I_in )

397     END IF

399

```

```

DO i = 1, NoRaices           ! Evaluacion de la funcion en las demas
  raices
401
      ex      = exp(-S(i) * tiempo)
403      I_lin  = re( tiempo, S(i) )
      Suma    = Suma  + ( Uf0 * L(i) - T(i) ) * ppmAA(i) * sen(i) * ex
405      Suma1  = Suma1 + R(i) * ppmAA(i) * sen(i) * ex
      Suma2   = Suma2 + (L(i) * ppmAA(i) * sen(i) * I_lin)
407
  END DO
409
  Wp      = Biot * Suma
411  Vp      = 2 * Up0 * Suma1
  Up      = Wp + Vp + (pin * Biot * Suma2)
413
      ! Dado que al evaluar tao en funcion de tao0 puede producir valores no
      ! definidos es importante
415      ! detectar estos valores antes de enviarlos al archico de graficacion
      ! Se agrega el siguiente condicional para evitar errores al invocar el
      ! archivo desde GNUPlot
417      ! Aunque se puede decir explicitamente a este que las ignore
  IF (.NOT.(ISNAN(Up))) THEN
419      WRITE (21,10) tiempo, Up           ! Aqui se esta tabulando cada una
      de las graficas de la funcion U_f para cada una de las
      funciones de entrada
  ENDIF
421
  IF( tiempo .EQ. lim ) THEN
423      lim = lim * 10
      dtao = dtao * 10
425      tiempo = tiempo + dtao
  ELSE
427      tiempo = tiempo + dtao
  END IF
429
  END DO           ! termina el desplazamiento en el
  tiempo
431
  CLOSE(21, IOSTAT = ierror)
433
END SUBROUTINE U_p

```

435

437 ! Calculo de U_f aproximada. En la tercera version del problema de sugiere el
 uso de una solucion promedio

! esta funcion calcula tal solucion con la de la propuesta original

439 !

! Created on 25 de Enero de 2011, 22:09 Hrs

441 !

SUBROUTINE U_fo(graph)

443

USE constantes

445

USE arreglos

447

IMPLICIT NONE

449 10 FORMAT(F10.5, E15.5E4)

451 CHARACTER(len=*), INTENT(IN) :: graph ! Almacena los puntos de Uf.

INTEGER ierror, j

453

REAL (KIND=8) dtao, tiempo, lim ! desplazamiento en el
 tiempo

REAL (KIND=8) alphaj, beta, mu1, mu2 ! constantes del problems

455

REAL (KIND=8) ca, cb, c1, c2, Ufa, mmm, mpm ! constantes auxiliares

REAL (KIND=8) piUi ! mas constantes auxiliares

457

OPEN(UNIT = 21, FILE=graph, STATUS = 'REPLACE', ACTION = 'WRITE',
 POSITION = 'REWIND', IOSTAT = ierror)

459

dtao = 0.00001 ! Intervalo de evaluacion, Ntao
 esta definida en el modulo CONSTANTES

lim = dtao * 100

461

tiempo = dtao ! Evitamos la evaluacion en cero

463

alphaj = alpha - 3 * fimenor2

beta = (3 * (Biot - fimenor1) + fi**2) / alphaj

465

ca = -(pin + pp + beta)

cb = (pin + pp - beta) ** 2

467

alphaj = 12 * Biot * pp / alphaj ! el valor de alphaj original no
 vuelve a usarse

! entonces se usa para expresar el factor completo

469

mul = (ca + sqrt(cb + alphaj)) / 2 ! en el calculo de las dos
 raices mul y mu2

```

mu2      = ( ca - sqrt( cb + alphaj ) ) / 2 !
471
PRINT *, beta, " ", mu1, " ", mu2
473
DO j = 0, Ntao                                ! Desplazando en el tiempo
475
    ca    = exp( mu1 * tiempo )
477    cb    = exp( mu2 * tiempo )
479    c1    = ( mu1 + beta ) * ca
    c2    = ( mu2 + beta ) * cb
    mpm    = mu1 * mu2
481    mmm    = mu1 - mu2
    piUi   = pin * Ui0
483
    Ufa = ( c1 * mu2 * ( Uf0 * mu1 + piUi ) - c2 * mu1 * ( Uf0 * mu2 +
        piUi ) &
485        + pp * Up0 * mpm * ( ca - cb ) + piUi * beta * mmm ) / ( mpm * mmm
        )
487
    ! Dado que al evaluar tao en funcion de tao0 puede producir valores no
        definidos es importante
489    ! detectar estos valores antes de enviarlos al archico de graficacion
    ! Se agrega el siguiente condicional para evitar errores al invocar el
        archivo desde GNUPlot
491    IF (.NOT.(ISNAN(Ufa))) THEN
        WRITE (21,10) tiempo, Ufa          ! Aqui se esta tabulando cada una
            de las graficas de la funcion U_f para cada una de las
            funciones de entrada
493    ENDIF

495    IF( tiempo .EQ. lim ) THEN
        lim = lim * 10
497        dtao = dtao * 10
        tiempo = tiempo + dtao
499    ELSE
        tiempo = tiempo + dtao
501    END IF

503    END DO                                ! termina el desplazamiento en el
        tiempo

```



```

505     CLOSE(21, IOSTAT = ierror)

507 END SUBROUTINE U_fo

509 SUBROUTINE U_po( graph )

511     USE constantes
512     USE arreglos

513
514     IMPLICIT NONE

515
516     10 FORMAT(F10.5, E15.5E4)

517     CHARACTER(len=*), INTENT(IN) :: graph    ! Almacena los puntos de Uf.
518     INTEGER ierror, j
519     REAL (KIND=8) dtao, tiempo, lim          ! desplazamiento en el
520         tiempo
521     REAL (KIND=8) alphaj, beta, mu1, mu2    ! constantes del problems
522     REAL (KIND=8) ca, cb, c1, c2, Upo, mmm, mpm ! constantes auxiliares
523     REAL (KIND=8) piUi, tres, c3, c4, cuatro ! mas constantes auxiliares
524     OPEN(UNIT = 21, FILE=graph, STATUS = 'REPLACE', ACTION = 'WRITE',
525         POSITION = 'REWIND', IOSTAT = ierror)

526     dtao = 0.00001                          ! Intervalo de evaluacion, Ntao
527         esta definida en el modulo CONSTANTES
528     lim = dtao * 100
529     tiempo = dtao                            ! Evitamos la evaluacion en cero

530
531     alphaj = alpha - 3 * fimenor2
532     beta   = ( 3 * ( Biot - fimenor1 ) + fi**2 ) / alphaj
533     tres   = (3 * Biot * pp ) / alphaj
534     cuatro = (3 * Biot ) / alphaj
535     ca     = -( pin + pp + beta )
536     cb     = ( pin + pp - beta ) ** 2
537     alphaj = 12 * Biot * pp / alphaj          ! el valor de alphaj original no
538         vuelve a usarse
539     ! entonces se usa para expresar el factor completo
540     mu1    = ( ca + sqrt( cb + alphaj ) ) / 2 ! en el calculo de las dos
541         raices mu1 y mu2
542     mu2    = ( ca - sqrt( cb + alphaj ) ) / 2 !

```

```

541 PRINT *, beta, " ", mu1, " ", mu2

543 DO j = 0, Ntao                                ! Desplazando en el tiempo

545     ca  = exp( mu1 * tiempo )
546     cb  = exp( mu2 * tiempo )
547     c1  = ( mu1 + beta )
548     c2  = ( mu2 + beta )
549     mpm = mu1 * mu2
550     mmm = mu1 - mu2
551     piUi = pin * Ui0

553     Upo = Up0 * ((c1 * c2 + tres)/(c1 * c2))* exp(-beta*tiempo) + Up0 *
           tres/mmm)*(ca/c1 - cb/c2 ) &
           + (Uf0 * cuatro / mmm) * (ca - cb) + Ui0 * cuatro*pin * ( (1/
           mpm) + ((mu2*ca -mu1*cb)/(mpm*mmm) ) )

555     ! Dado que al evaluar tao en funcion de tao0 puede producir valores no
           definidos es importante
557     ! detectar estos valores antes de enviarlos al archivo de graficacion
           ! Se agrega el siguiente condicional para evitar errores al invocar el
           archivo desde GNUPlot
559     IF (.NOT.(ISNAN(Upo))) THEN
           WRITE (21,10) tiempo, Upo           ! Aqui se esta tabulando cada una
           de las graficas de la funcion U_f para cada una de las
           funciones de entrada
561     ENDIF

563     IF( tiempo .EQ. lim ) THEN
           lim = lim * 10
565     dtao = dtao * 10
           tiempo = tiempo + dtao
567     ELSE
           tiempo = tiempo + dtao
569     END IF

571 END DO                                        ! termina el desplazamiento en el
           tiempo

573 CLOSE(21, IOSTAT = ierror)

```

575 END SUBROUTINE U_po

577 END MODULE rutinas

looV50SuSE/rutinas.f90