

**Dinámica de reactores de dos
fases con cinética aproximada**

Francisco José Valdés Parada



Universidad Autónoma Metropolitana
Unidad Iztapalapa

**Dinámica de reactores de dos fases
con cinética aproximada**

TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN CIENCIAS (INGENIERÍA QUÍMICA)

Presenta:

I.Q. Francisco José Valdés Parada

Asesor:

Dr. Jesús Alberto Ochoa Tapia

Agradecimientos

A todas las personas que han creído en mí.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por la beca no. 171436.

Resumen

Los sistemas de transporte y reacción en más de una fase han ido adquiriendo un interés creciente en la comunidad científica y tecnológica debido a que la gran mayoría de los procesos industriales se llevan a cabo en sistemas no homogéneos. De la misma forma, es notable el interés que se ha dado en las últimas décadas por los sistemas catalizados por enzimas.

Las enzimas como catalizadores son utilizadas actualmente en una gran variedad de procesos, como son la fabricación de etanol, insulina, ácido láctico, cerveza, vacunas, entre muchos otros; de hecho varias procesos clásicos han sido reemplazados por procesos enzimáticos debido a que en ocasiones ofrecen condiciones de reacción más fáciles de lograr y un menor daño al ambiente.

Comprendiendo la importancia de las investigaciones dedicadas a sistemas biológicos, en este trabajo se aborda el problema de desarrollar soluciones de modelos de un reactor de tipo tanque agitado de dos fases donde se lleva a cabo una reacción enzimática con cinética de tipo Michaelis-Menten. Debido a la no linealidad del modelo exacto, se aproximará la expresión cinética de manera tal que no se pierda la física del problema.

El modelado de sistemas biológicos no es un tema nuevo, en la literatura se han reportado soluciones analíticas en estado estacionario para sistemas homogéneos y heterogéneos simplificando la cinética a ordenes cero o uno dependiendo de la cantidad de sustrato presente y los estudios dedicados a sistemas en estado no estacionario han sido primordialmente de tipo numérico; por lo anterior, es claro que hasta el momento no se han reportado soluciones analíticas del modelo en estado transitorio y que linealicen la

expresión cinética sin perder la física del problema original. Para mejorar la aproximación se incorpora la existencia de un frente de agotamiento del sustrato.

Con el fin de comprobar los resultados obtenidos en forma aproximada, se compararon con los que se obtienen en forma numérica al resolver el problema de transporte y reacción en su forma exacta, es decir, sin aproximar, obteniendo en general un porcentaje de error menor al 10% entre las concentraciones en la fase fluida predichas por las dos soluciones en estado estacionario. Además, se resolvió el problema usando la idea de la Capa Límite, obteniendo resultados similares, en la fase fluida, a los obtenidos usando el método aproximado.

Índice

	<i>Página</i>
Nomenclatura	I
Lista de figuras	V
Lista de tablas	XVI
Introducción	1
<u>Capítulo I: Planteamiento del problema</u>	2
<i>1.1.- Motivación y Justificación</i>	2
<i>1.2.- Objetivos</i>	3
<i>1.2.1.- Objetivo General</i>	3
<i>1.2.2.- Objetivos Particulares</i>	3
<i>1.3.- El problema</i>	4
<i>1.4.- El problema adimensional</i>	6
<i>1.5.- Aproximación de la cinética de reacción</i>	7
<i>1.6.- Etapas de la solución</i>	9
<u>Capítulo II: Estado actual del conocimiento</u>	11
<i>2.1.- Catálisis y cinética enzimática</i>	11
<i>2.2.- Ecuación de Michaelis- Menten</i>	12
<i>2.3.- Tanque agitado de dos fases</i>	17
<i>2.4.- Unicidad de las soluciones y estabilidad de un CSTR isotérmico</i>	19
<i>2.5.- Método aproximado para resolver problemas de transporte y reacción con cinética no lineal.</i>	21
<i>2.6.- El frente de agotamiento</i>	23

2.7.- <i>La idea de Capa Límite.</i>	28
<u>Capítulo III: Solución en estado estacionario</u>	31
3.1.- <i>Planteamiento del problema</i>	31
3.2.- <i>Solución sin frente de agotamiento</i>	31
3.3.- <i>Agotamiento del reactivo</i>	33
3.4.- <i>Evaluación</i>	36
3.5.- <i>Funcionalidad del radio crítico</i>	42
3.6.- <i>Análisis de estabilidad del sistema</i>	45
<u>Capítulo IV: Solución en estado cuasiestacionario</u>	48
4.1.- <i>Planteamiento del problema</i>	48
4.2.- <i>Solución sin frente de agotamiento</i>	49
4.3.- <i>Función de entrada</i>	50
4.4.- <i>Solución con frente de agotamiento</i>	52
4.5.- <i>Evaluación</i>	53
4.6.- <i>Evaluación II: Concentraciones en el fluido, promedio en la partícula e interfase</i>	60
<u>Capítulo V: Solución en estado transitorio</u>	62
5.1.- <i>Planteamiento del problema</i>	62
5.2.- <i>Solución sin frente de agotamiento</i>	63
5.3.- <i>Evaluación I: Sin frente de agotamiento</i>	65
5.4.- <i>Solución con frente de agotamiento</i>	67
5.5.- <i>Evaluación II: Con frente de agotamiento</i>	70
5.6.- <i>Evaluación III: Comparación de las soluciones aproximadas y exacta en la partícula</i>	72

5.7.- <i>Evaluación IV: Soluciones en el fluido, en la interfase y promedio en la partícula</i>	78
5.7.1.- <i>Función escalón</i>	80
5.7.2.- <i>Función oscilatoria</i>	81
5.7.3.- <i>Pulso finito de duración $\Delta\tau = .5$</i>	82
5.7.4.- <i>Pulso finito de duración $\Delta\tau = .01$</i>	83
<u>Capítulo VI: Comparación con la idea de Capa Límite</u>	84
6.1.- <i>Planteamiento del problema</i>	84
6.2.- <i>Solución aproximada</i>	85
6.3.- <i>Evaluación</i>	87
<u>Capítulo VII: Análisis de error</u>	94
7.1.- <i>Perfiles en la partícula</i>	96
7.2.- <i>Soluciones en el fluido, en la interfase y promedio en la partícula</i>	97
7.2.1.- <i>Función escalón</i>	97
7.2.2.- <i>Función oscilatoria</i>	99
7.2.3.- <i>Pulso finito de duración $\Delta\tau = .5$</i>	101
7.2.4.- <i>Pulso finito de duración $\Delta\tau = .01$</i>	103
7.3.- <i>Derivada en la superficie</i>	107
Conclusiones	109
Bibliografía	110
<u>Apéndice A-0: Deducción de la ecuación de la partícula</u>	A-0.1
A-0.1.- <i>Ecuaciones puntuales</i>	A-0.2
A-0.2.- <i>Promediado</i>	A-0.3
A-0.3.- <i>Expansión en series de Taylor</i>	A-0.5

<i>A-0.4.- Término de reacción</i>	A-0.7
<i>A-0.5.- Problema de cerradura</i>	A-0.9
<u>Apéndice A-1: Balances macroscópicos</u>	A-1.1
<i>A-1.1.- Planteamiento del problema</i>	A-1.1
<i>A-1.2.- Promediado</i>	A-1.2
<u>Apéndice A-2: Adimensionalización</u>	A-2.1
<i>A-2.1.- Problema dimensional</i>	A-2.1
<i>A-2.2.- Problema adimensional</i>	A-2.1
<i>A-2.3.- Cinética de Michaelis Menten</i>	A-2.4
<u>Apéndice A-3: Solución del sistema en estado estacionario</u>	A-3.1
<i>A.3.1.- Planteamiento del problema</i>	A-3.1
<i>A-3.2.- Solución sin frente de agotamiento</i>	A-3.1
<i>A-3.3.- Solución con frente de agotamiento</i>	A-3.4
<u>Apéndice A-4: Solución del sistema en estado cuasiestacionario</u>	A-4.1
<i>A-4.1.- Planteamiento del problema</i>	A-4.1
<i>A-4.2.- Solución sin frente de agotamiento</i>	A-4.1
<i>A-4.3.- Solución con frente de agotamiento</i>	A-4.4
<i>A-4.4.- Demostración de equivalencia de las soluciones</i>	A-4.7
<u>Apéndice A-5: Solución en estado transitorio</u>	A-5.1
<i>A-5.1.- Planteamiento del problema</i>	A-5.1
<i>A-5.2.- Solución sin frente de agotamiento</i>	A-5.2
<i>A-5.3.- Transformadas inversas</i>	A-5.4
<i>A-5.4.- Solución con frente de agotamiento</i>	A-5.19

<i>A-5.5.- Transformadas inversas</i>	A-5.23
<i>A-5.6.- Concentraciones promedio en la partícula</i>	A-5.61
<i>A-5.6.1.- Sin frente de agotamiento</i>	A-5.61
<i>A-5.6.2.- Con frente de agotamiento</i>	A-5.61
<i>A-5.7.- Demostración de la equivalencia de las soluciones</i>	A-5.62

Apéndice A-6: Solución aproximada en estado transitorio usando la idea de Capa

<u>Límite</u>	A-6.1
<i>A-6.1.- Planteamiento del problema</i>	A-6.1
<i>A-6.2.- Solución propuesta</i>	A-6.2
<i>A-6.3.- Ecuación de cambio de la capa límite con el tiempo</i>	A-6.3
<i>A-6.4.- Ecuación del fluido</i>	A-6.4
<i>A-6.5.- Concentración superficial y promedio en la partícula</i>	A-6.6
<i>A-6.6.- Solución del modelo exacto en estado transitorio usando la idea de capa límite</i>	A-6.7

Apéndice B-1: Solución numérica en estado estacionario

<i>B-1.1.- Diagrama de flujo del programa</i>	B-1.4
---	-------

Apéndice B-2: Solución numérica en estado transitorio

<i>B-2.1.- Fase sólida</i>	B-2.1
<i>B-2.2.- Condición de frontera en la interfase</i>	B-2.6
<i>B-2.3.- Condición de frontera en el centro de la partícula</i>	B-2.8
<i>B-2.4.- Fase fluida</i>	B-2.9
<i>B-2.5.- Diagrama de flujo del programa</i>	B-2.13

Apéndice C-1: Figuras en estado cuasiestacionario

C-1.1

<i>C-1.1.- Función escalón</i>	C-1.1
<i>C-1.2.- Función oscilatoria</i>	C-1.5
<i>C-1.3.- Pulso finito de duración $\Delta\tau = .5$</i>	C-1.9
<i>C-1.4.- Pulso finito de duración $\Delta\tau = .01$</i>	C-1.13
<u>Apéndice C-2: Figuras en estado transitorio</u>	C-2.1
<i>C-2.1.- Función escalón</i>	C-2.1
<i>C-2.2.- Función oscilatoria</i>	C-2.5
<i>C-2.3.- Pulso finito de duración $\Delta\tau = .5$</i>	C-2.9
<i>C-2.4.- Pulso finito de duración $\Delta\tau = .01$</i>	C-2.13

Nomenclatura

a_v	Relación entre el área interfacial y el volumen de la muestra, m^{-1}
Bi	Número de Biot
C_A	Concentración puntual del sustrato, mol / m^3
$\langle C_A \rangle$	Concentración promediada superficialmente del sustrato, mol / m^3
$\langle C_{A\beta} \rangle^\beta$	Concentración promediada intrínsecamente del sustrato, mol / m^3
$\tilde{C}_{A\beta}$	Desviaciones espaciales de la concentración puntual del sustrato, mol / m^3
\mathcal{D}_β	Difusividad de mezclado, m^2 / s
D_{ef}	Difusividad efectiva, m^2 / s
E	Enzima
E_f	Enzima libre
E_{tot}	Enzima total
ES	Complejo enzima-sustrato
k	Constante definida en la ecuación (A-0.5a), m / s
k_1	Constante definida en la ecuación (A-2.29)
k_2	Constante definida en la ecuación (A-2.30)
K	Constante definida en la ecuación (A-0.5b), $(mol / m^3)^{-1}$
K_m	Constante de Michaelis Menten, mol / m^3
L	Longitud característica, m
\underline{n}	Vector unitario normal

nc	Número de componentes
\underline{N}_A	Flux de A , $mol / m^2 s$
P	Producto
Q	Flujo volumétrico, m^3 / s
r_0	Radio del volumen promediante, m
\underline{r}_β	Vector que localiza cualquier punto en la fase β
R	Velocidad de reacción adimensional
$R_{A\omega}$	Velocidad de reacción definida en la ecuación (A-0.76), $mol / m^2 s$
R_1, R_2	Velocidades de reacción definidas en (II-24) y (II-25), mol / s .
S	Sustrato
t	Tiempo, s
U	Concentración adimensional
\underline{u}_A	Vector de velocidad difusiva, m/s
\underline{v}	vector de velocidad másica promedio, m/s
v	Velocidad de reacción definida en la ecuación (II-1), $mol / m^2 s$
V_{\max}	Velocidad máxima de reacción, $mol / m^2 s$
\underline{w}	Velocidad de desplazamiento del observador, m/s
\underline{x}	Vector que localiza el centroide del volumen promediante
Y	Concentración adimensional
\underline{y}_β	Vector que localiza puntos en la fase β relativos al centroide

Letras Griegas

ε_β	Fracción volumétrica de la fase β
ε	Porosidad
Φ^2	Módulo de Thiele
Λ_1, Λ_2	Constantes definidas en las ecuaciones (A-2.15) y (A-2.16)
ξ	Coordenada radial adimensional
ψ_{in}	Parámetro de intercambio adimensional en el fluido.
ψ_p	Parámetro de intercambio adimensional fluido-partícula.
τ	Tiempo adimensional
τ_R	Tiempo de residencia, s
∇	Operador nabra, m^{-1}

Subíndices

β	Fase fluida
σ	Fase sólida
λ, f	Fase fluida
ω	Fase dispersa
c	Crítico
in	Entrada
s	Superficial
p	Partícula
0	Inicial

Superíndices

* Referencia

m Geometría

Lista de Figuras

<i>Figura</i>	<i>Página</i>
Figura I-1: Tanque agitado con una fase fluida y otra dispersa donde se encuentran enzimas inmovilizadas.	5
Figura II-1: Gráfica directa de Michaelis-Menten para la reacción de formación de <i>p</i> -nitrofenol a partir de fosfato de <i>p</i> -nitrofenilo, catalizada por fosfatasa ácida.	16
Figura II-2: Multiplicidad isotérmica en un CSTR para $k = 70$, $K = 20 \text{ (mol/l)}^{-1}$, $\tau_R = 1.3s$.	20
Figura II-3: Factor de efectividad no isotérmico obtenido en forma analítica (línea continua) y numérica (línea discontinua) contra el módulo de Thiele (Cordero Sánchez M.A., 2002).	25
Figura II-4: Identificación de la zona muerta (región σ)	25
Figura II-5: Comparación de las soluciones exacta y aproximadas a partir de la derivada Superficial como función del módulo de Thiele	30
Figura III-1: Perfiles de concentración en la partícula como función del número de Biot, en todos los casos $\Phi^2 = 5$, $\psi_{in} = 5$, $\psi_p = 0.1$, $U_{in} = 1$.	37
Figura III-2: Perfiles de concentración en la partícula como función del módulo de Thiele, en todos los casos $Bi = 50$, $\psi_{in} = 5$, $\psi_p = 0.1$, $U_{in} = 1$.	39
Figura III-3: Concentraciones en el fluido, la interfase y promedio en la partícula como función de l número de Biot, para $\Phi^2 = 3$, $\psi_{in} = 5$ y $\psi_p = 0.1$	40
Figura III-4: Concentraciones en el fluido, la interfase y promedio en la partícula como función del módulo de Thiele, para $Bi = 50$, $\psi_{in} = 5$ y $\psi_p = 0.1$.	41

- Figura III-5: Comportamiento del radio crítico (ξ_c) como función del número de Biot a distintos módulos de Thiele, en estado estacionario 43
- Figura III-6: Comportamiento del radio crítico (ξ_c) como función del módulo de Thiele a distintos números de Biot, en estado estacionario. 44
- Figura III-7: Evaluación de estabilidad del sistema para, $Bi = 50$, $\psi_{in} = \psi_p = 0.1$, a) $\Phi^2 = 10$
 b) $\Phi^2 = 3$. 47
- Figura IV-1: Perfiles de concentración en la partícula como función del tiempo y su comparación con la solución numérica para $Bi = 50$, $\Phi^2 = 5$, $\psi_{in} = 5$ y $\psi_p = 0.1$. 54
- Figura IV-2: Perfiles de concentración en la partícula como función del módulo de Thiele y su comparación con la solución numérica para $Bi = 50$, $\tau = 0.5$, $\psi_{in} = 5$ y $\psi_p = 0.1$ 56
- Figura IV-3: Perfiles de concentración en la partícula como función del número de Biot y su comparación con la solución numérica para $\Phi^2 = 5$, $\tau = 0.5$, $\psi_{in} = 5$ y $\psi_p = 0.1$. 57
- Figura IV-4: Comportamiento dinámico de ξ_c , de la solución con la suposición de estado cuasiestacionario en la partícula, para diferentes valores de Φ^2 , manteniendo fijos $Bi = 10$, $\psi_{in} = 1$ y $\psi_p = 0.1$. 58
- Figura IV-5: Comportamiento dinámico de ξ_c , de la solución con la suposición de estado cuasiestacionario en la partícula, para diferentes valores de Bi , manteniendo

fijos $\Phi^2 = 5$, $\psi_{in} = 2$ y $\psi_p = 0.1$. 59

Figura V-1: Perfil de concertación de la partícula como función del tiempo para los

parámetros $\Phi^2 = 1.5$, $Bi = 1$, $\psi_{in} = 1$, $\psi_p = 0.1$, $U_{f_0} = U_{p_0} = \tau_0 = 0$. 66

Figura V-2: Comportamiento dinámico del radio crítico, ξ_c a distintos módulos de Thiele y

su comparación con el caso cuasiestacionario, para $Bi = 10$, $\psi_{in} = 1$ 71

Figura V-3: Comportamiento dinámico del radio crítico, ξ_c a distintos números de Biot y

su comparación con el caso cuasiestacionario, para $\Phi^2 = 8$, $\psi_{in} = 1$. 71

Figura V-4: Perfiles de concentración en la partícula como función del tiempo para

$\psi_{in} = 15$, $\Phi^2 = 5$ y $Bi = 10$. 73

Figura V-5: Perfiles de concentración en la partícula como función del módulo de Thiele

para, $\tau = 0.5$ y $Bi = 10$. 74

Figura V-6: Perfiles de concentración en la partícula como función del número de Biot

para $\tau = 0.5$ y $\Phi^2 = 5$. 75

Figura V-7: Perfiles de concentración como función del tiempo, obtenidos con la

solución exacta y las soluciones aproximadas, sin tomar en cuenta el frente

de agotamiento, en estados cuasiestacionario y transitorio, para $Bi = 20$,

$\Phi^2 = 3$, $\psi_{in} = 15$ y $\psi_p = 0.1$. 76

Figura V-8: Perfiles de concentración como función del tiempo, obtenidos con la

solución exacta y las soluciones aproximadas, tomando en cuenta el frente

de agotamiento, en estados cuasiestacionario y transitorio, para $Bi = 20$,

$\Phi^2 = 3$, $\psi_{in} = 15$ y $\psi_p = 0.1$. 77

Figura V-9: Comparación de las concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de entrada tipo escalón unitario y $\psi_{in} = 15$, $Bi = 10$ y $\Phi^2 = 3$. 80

Figura V-10: Comparación de las concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de entrada tipo oscilatoria y $\psi_{in} = 5$, $Bi = 10$ y $\Phi^2 = 8$. 81

Figura V-11: Comparación de las concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de entrada tipo pulso finito de duración $\Delta\tau = 0.5$ y $\psi_{in} = 1$, $Bi = 25$ y $\Phi^2 = 3$. 82

Figura V-12: Comparación de las concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de entrada tipo pulso finito de duración $\Delta\tau = 0.01$ y $\psi_{in} = 1$, $Bi = 20$ y $\Phi^2 = 8$. 83

Figura VI-1: Perfiles de concentración como función del tiempo calculados con la solución exacta, la solución aproximada con la idea de Capa Límite y las soluciones aproximadas en estados cuasiestacionario y transitorio, tomando en cuenta el frente de agotamiento, para $Bi = 20$, $\Phi^2 = 3$, $\psi_{in} = 15$ y $\psi_p = 0.1$. 87

Figura VI-2: Comparación de las concentraciones aproximadas y exactas para, a) $Bi = 10$, $\Phi^2 = 3$, $\psi_{in} = 15$, b) $Bi = 10$, $\Phi^2 = 8$, $\psi_{in} = 5$, c) $Bi = 25$, $\Phi^2 = 3$, $\psi_{in} = 1$, d) $Bi = 20$, $\Phi^2 = 8$, $\psi_{in} = 1$. 89

Figura VI-3: Derivada en la superficie como función del tiempo obtenida con las

soluciones aproximadas y exacta para $Bi = 50$, $\Phi^2 = 10$, $\psi_p = 0.1$

y $\psi_{in} = 15$. 90

Figura VI-4: Derivada en la superficie en estado estacionario, como función de a) Φ^2 y

b) del número de Biot, para $Bi = 50$, $\Phi^2 = 10$, $\psi_p = 0.1$ y $\psi_{in} = 1$. 91

Figura VI-5: Algoritmo de uso de las soluciones desarrolladas. 93

Figura VII-1: Perfiles de error dentro de la partícula en estado transitorio para

$\psi_{in} = 15$, $\Phi^2 = 5$ y $Bi = 10$. 96

Figura VII-2: Evaluación dinámica del porcentaje de error en las concentraciones del

fluido, interfase y promedio en la partícula $\psi_{in} = 15$, $\psi_p = 0.1$, $\Phi^2 = 3$ y

$Bi = 10$. 97

Figura VII-3: Evaluación dinámica del porcentaje de error en las concentraciones del

fluido, interfase y promedio en la partícula $\psi_{in} = 15$, $\psi_p = 0.1$, $\Phi^2 = 8$ y

$Bi = 10$. 98

Figura VII-4: Evaluación dinámica del porcentaje de error en las concentraciones del

fluido, interfase y promedio en la partícula $\psi_{in} = 5$, $\psi_p = 0.1$, $\Phi^2 = 3$ y

$Bi = 100$. 99

Figura VII-5: Evaluación dinámica del porcentaje de error en las concentraciones del

fluido, interfase y promedio en la partícula $\psi_{in} = 5$, $\psi_p = 0.1$, $\Phi^2 = 8$ y

$Bi = 100$. 100

Figura VII-6: Evaluación dinámica del porcentaje de error en las concentraciones del

fluido, interfase y promedio en la partícula $\psi_{in} = 1$, $\psi_p = 0.1$, $\Phi^2 = 3$ y

$Bi = 25$. 101

Figura VII-7: Evaluación dinámica del porcentaje de error en las concentraciones del fluido, interfase y promedio en la partícula $\psi_{in} = 1, \psi_p = 0.1, \Phi^2 = 8$ y

$Bi = 25$. 102

Figura VII-8: Evaluación dinámica del porcentaje de error en las concentraciones del fluido, interfase y promedio en la partícula $\psi_{in} = 1, \psi_p = 0.1, \Phi^2 = 3$ y

$Bi = 10$. 103

Figura VII-9: Evaluación dinámica del porcentaje de error en las concentraciones del fluido, interfase y promedio en la partícula $\psi_{in} = 1, \psi_p = 0.1, \Phi^2 = 8$ y

$Bi = 10$. 104

Figura VII-10: Evaluación dinámica del porcentaje de error en las concentraciones del fluido, interfase y promedio en la partícula $\psi_{in} = 1, \psi_p = 0.1, \Phi^2 = 3$ y

$Bi = 100$. 105

Figura VII-11: Evaluación dinámica del porcentaje de error en las concentraciones del fluido, interfase y promedio en la partícula $\psi_{in} = 1, \psi_p = 0.1, \Phi^2 = 8$ y

$Bi = 100$. 106

Figura VII-12: Porcentaje de error de la derivada en la superficie en estado estacionario obtenido mediante las soluciones aproximadas con y sin la idea del frente

de agotamiento y con la idea de Capa Límite, para $\psi_{in} = 1, \psi_p = 0.1$ a)

$Bi = 50$, b) $\Phi^2 = 10$. 107

Figura VII-13: Evaluación dinámica del porcentaje de error de la derivada en la superficie obtenido mediante las soluciones aproximadas en estados

cuasiestacionario y transitorio, a) sin y b) con la idea del frente de agotamiento, y con la idea de Capa Límite, para $Bi = 50$, $\Phi^2 = 10$,

$$\psi_{in} = 15, \psi_p = 0.1. \quad 108$$

Figura A-0.1: Diferentes escalas y volúmenes promediantes para el reactor A-0.1

Figura A-0.2: Vectores relacionados con el volumen promediante A-0.5

Figura A-0.3: Región representativa A-0.11

Figura A-1.1: Esquema del sistema a analizar A-1.1

Figura A-5.1: $M(s)$ contra s para $\psi_{in} = \psi_p = 0.1$ y $\Lambda_1 = 0.5$. A-5.6

Figura A-5.2: $Q(s_n)$ como función de μ_n para $\psi_{in} = \psi_p = 10$, $\Lambda_1 = 0.1$ y $Bi = 0.1$. A-5.6

Figura A-6.1.- Ubicación de la capa límite en la partícula A-6.1

Figura C-1.1: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo escalón unitario y

$$Bi = 10, \psi_{in} = 15 \text{ y } \Phi^2 = 3. \quad C-1.1$$

Figura C-1.-2: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo escalón unitario y

$$Bi = 10, \psi_{in} = 15 \text{ y } \Phi^2 = 8. \quad C-1.2$$

Figura C-1.3: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo escalón unitario y

$$Bi = 100, \psi_{in} = 15 \text{ y } \Phi^2 = 3. \quad C-1.3$$

Figura C-1.4: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo escalón unitario y

$$Bi = 100, \psi_{in} = 15 \text{ y } \Phi^2 = 8. \quad C-1.4$$

Figura C-1.5: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación oscilatoria y $Bi = 10$,

$$\psi_{in} = 5 \text{ y } \Phi^2 = 3. \quad \text{C-1.5}$$

Figura C-1.6: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación oscilatoria y $Bi = 10$,

$$\psi_{in} = 5 \text{ y } \Phi^2 = 8. \quad \text{C-1.6}$$

Figura C-1.7: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación oscilatoria y $Bi = 100$,

$$\psi_{in} = 5 \text{ y } \Phi^2 = 3. \quad \text{C-1.7}$$

Figura C-1.8: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación oscilatoria y $Bi = 100$,

$$\psi_{in} = 5 \text{ y } \Phi^2 = 8. \quad \text{C-1.8}$$

Figura C-1.9: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación de tipo pulso finito

$$\text{y } Bi = 25, \psi_{in} = 1 \text{ y } \Phi^2 = 3. \quad \text{C-1.9}$$

Figura C-1.10: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación de tipo pulso finito

$$\text{y } Bi = 25, \psi_{in} = 1 \text{ y } \Phi^2 = 8. \quad \text{C-1.10}$$

Figura C-1.11: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación de tipo pulso finito

$$\text{y } Bi = 100, \psi_{in} = 1 \text{ y } \Phi^2 = 3. \quad \text{C-1.11}$$

Figura C-1.12: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del

radio crítico para una función de alimentación de tipo pulso finito y
 $Bi = 100$, $\psi_{in} = 1$ y $\Phi^2 = 8$. C-1.12

Figura C-1.13: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del
radio crítico para una función de alimentación de tipo pulso finito

y $Bi = 20$, $\psi_{in} = 1$ y $\Phi^2 = 3$. C-1.13

Figura C-1.14: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del
radio crítico para una función de alimentación de tipo pulso finito

y $Bi = 20$, $\psi_{in} = 1$ y $\Phi^2 = 8$. C-1.14

Figura C-1.15: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del
radio crítico para una función de alimentación de tipo pulso finito

y $Bi = 40$, $\psi_{in} = 1$ y $\Phi^2 = 3$. C-1.15

Figura C-1.16: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del
radio crítico para una función de alimentación de tipo pulso finito

y $Bi = 40$, $\psi_{in} = 1$ y $\Phi^2 = 8$. C-1.16

Figura C-2.1 Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento
dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo escalón

unitario y $\psi_{in} = 15$, $Bi = 10$ y $\Phi^2 = 3$. C-2.1

Figura C-2.2: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento
dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo escalón

unitario y $\psi_{in} = 15$, $Bi = 10$ y $\Phi^2 = 8$. C-2.2

Figura C-2.3: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento
dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo escalón

unitario y $\psi_{in} = 15$, $Bi = 100$ y $\Phi^2 = 3$. C-2.3

Figura C-2.4: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo escalón

unitario y $\psi_{in} = 15$, $Bi = 100$ y $\Phi^2 = 8$. C-2.4

Figura C-2.5: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo

oscilatoria y $\psi_{in} = 5$, $Bi = 10$ y $\Phi^2 = 3$. C-2.5

Figura C-2.6: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo

oscilatoria y $\psi_{in} = 5$, $Bi = 10$ y $\Phi^2 = 8$. C-2.6

Figura C-2.7: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo oscilatoria

y $\psi_{in} = 5$, $Bi = 100$ y $\Phi^2 = 3$. C-2.7

Figura C-2.8: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo oscilatoria

y $\psi_{in} = 5$, $Bi = 100$ y $\Phi^2 = 8$. C-2.8

Figura C-2.9: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo pulso

finito y $\psi_{in} = 1$, $Bi = 25$ y $\Phi^2 = 3$. C-2.9

Figura C-2.10: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo pulso

finito y $\psi_{in} = 1$, $Bi = 25$ y $\Phi^2 = 8$. C-2.10

Figura C-2.11: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo pulso finito y $\psi_{in} = 1$, $Bi = 100$ y $\Phi^2 = 3$. C-2.11

Figura C-2.12: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo pulso finito y $\psi_{in} = 1$, $Bi = 100$ y $\Phi^2 = 8$. C-2.12

Figura C-2.13: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo pulso finito y $\psi_{in} = 1$, $Bi = 20$ y $\Phi^2 = 3$. C-2.13

Figura C-2.14: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo pulso finito y $\psi_{in} = 1$, $Bi = 20$ y $\Phi^2 = 8$. C-2.14

Figura C-2.15: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo pulso finito y $\psi_{in} = 1$, $Bi = 40$ y $\Phi^2 = 3$. C-2.15

Figura C-2.16: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo pulso finito y $\psi_{in} = 1$, $Bi = 40$ y $\Phi^2 = 8$. C-2.16

Figura C-2.17: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo pulso finito y $\psi_{in} = 15$, $Bi = 20$ y $\Phi^2 = 50$. C-2.17

Figura C-2.18: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento

dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo pulso

finito y $\psi_{in} = 15$, $Bi = 20$ y $\Phi^2 = 100$.

C-2.18

Lista de tablas

<i>Tabla</i>	<i>Página</i>
Tabla A-1.1: Contribuciones a los vectores de velocidad y desplazamiento de la superficie $V_{\lambda}(t)$.	A-1.3

Introducción

El diseño de reactores de tipo tanque agitado ha llamado la atención de los ingenieros químicos desde hace mucho tiempo. Sin embargo, el aspecto de la cinética de la reacción ha sido siempre un factor limitante en el tipo de problemas a resolver en forma analítica; es por ello que en este trabajo se desarrollan soluciones aproximadas que permitan predecir el comportamiento de un reactor de este tipo de dos fases donde se lleva a cabo una reacción enzimática que sigue una cinética de tipo Michaelis-Menten, en donde además se incorpora la idea de un frente móvil de reacción.

La tesis está organizada de la siguiente manera: en el Capítulo I se hace el planteamiento general del problema y de las tres etapas del trabajo para posteriormente, en el Capítulo II, exponer el estado actual del conocimiento. En el Capítulo III se reportan los resultados obtenidos con la solución en estado estacionario, dejando la solución en estado cuasiestacionario para el Capítulo IV; en el Capítulo V se presenta la solución del problema en estado transitorio; posteriormente en el Capítulo VI se presenta la comparación de los resultados obtenidos en este trabajo con los de la idea de Capa Límite. Por último, en el Capítulo VII, se presentan las gráficas de porcentaje de error de la solución en estado transitorio con respecto a la solución numérica y se discuten críticamente. Los detalles de las soluciones analítica y numérica se exponen en los apéndices. En otros apéndices se describe la aplicación del método del promedio volumétrico para obtener la ecuación de la partícula; el uso de balances macroscópicos para obtener las ecuaciones a resolver y su adimensionalización; los detalles de la solución de Capa Límite y por último dos apéndices de gráficas que complementan a los capítulos IV y V.

Capítulo I:

Planteamiento del problema

1.1.- Motivación y Justificación.

Recientemente Marroquín y col. (1998) desarrollaron una metodología para obtener en forma aproximada el factor de efectividad de sistemas de transporte y reacción con cinética no lineal; esta metodología permite el desarrollo de soluciones analíticas y se ha aplicado al transporte aumentado en membranas, problemas de desactivación, sistemas no isotérmicos, entre otros. Sin embargo, las contribuciones mencionadas se han llevado a cabo suponiendo que el sistema se encuentra en estado estacionario, lo que sugiere estudiar la aplicación de este método a problemas dinámicos.

Algunas de las ventajas que se encuentran en este tipo de soluciones son:

- Ofrecen una buena aproximación de ciertas variables que se obtendrían con la correspondiente solución numérica.
- Muestran explícitamente la influencia de los parámetros involucrados en un modelo, de tal forma que se puede obtener información *a priori* del comportamiento del sistema en los casos límite con examinar el resultado analítico.
- Para el caso de soluciones de problemas dinámicos de dos fases, la solución numérica requiere cálculos desde las condiciones iniciales hasta el tiempo deseado y de resolver el problema en ambas fases, mientras que la solución analítica puede obtener el resultado deseado en la fase e instante requeridos sin necesidad de

conocer la historia de la variable a determinar ni el resultado en la otra fase. Esto es conveniente cuando se necesitan realizar varios cálculos a tiempos específicos.

En los últimos años, el creciente desarrollo de computadoras digitales de alta velocidad, ha favorecido el uso de métodos numéricos, (elemento finito, colocación ortogonal, etc.), respecto a las soluciones analíticas, para resolver una gran variedad de problemas de interés científico y tecnológico. Sin embargo, aun si las soluciones numéricas fueran la herramienta de trabajo, las soluciones analíticas, exactas y aproximadas, pueden ser una base de referencia para comprobar la capacidad de los programas de cómputo.

1.2.- Objetivos

1.2.1-Objetivo General

Evaluar el uso del método aproximado en un problema dinámico, incorporando la idea de un frente de agotamiento para obtener predicciones aceptables en la concentración del efluente de un reactor tipo tanque agitado de dos fases donde se lleva a cabo una reacción con cinética de tipo Michaelis Menten.

1.2.2.-Objetivos Particulares

- a) Desarrollar soluciones analíticas aproximadas en estados: estacionario, cuasi-estacionario y transitorio, con y sin la idea del frente de agotamiento
- b) Comparar las soluciones aproximadas.
- c) Comparar los resultados anteriores con los de la solución numérica del problema exacto y la solución aproximada usando la idea de Capa Límite.

1.3.- El problema

El sistema a tratar se muestra en la Figura I-1, donde se pueden distinguir dos regiones: una donde se encuentra una fase dispersa (I) y otra con una fase fluida (II); para las cuales los balances puntuales de materia, para el componente clave, son:

Región I:

$$\varepsilon \frac{\partial C_{A\omega}}{\partial t} = \varepsilon \frac{D_{ef}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial C_{A\omega}}{\partial r} \right) - a_v R_{A\omega} \quad (\text{I-1})$$

Región II:

$$\frac{\partial C_{A\lambda}}{\partial t} + \nabla \cdot \tilde{N}_{A\lambda} = 0 \quad (\text{I-2})$$

Los detalles de la deducción de la Ecuación (I-1) se encuentran en el Apéndice A-0 y en concreto en coordenadas esféricas en el Apéndice A-1. En dicha ecuación ε es la fracción hueca de las partículas, D_{ef} es la difusividad efectiva y a_v es la razón entre el área interfacial y el volumen de la partícula. Se supone que el sistema es isotérmico, por lo que en este trabajo solamente se discute la solución de los balances de materia. Definiendo la concentración promedio en la fase fluida como:

$$\langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda = \frac{1}{V_\lambda} \int_{V_\lambda(t)} C_{A\lambda} dV \quad (\text{I-3})$$

se obtiene, al aplicar este operador a (I-2):

$$\varepsilon_\lambda \frac{d \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda}{dt} = \frac{1}{\tau_R} \left(C_{in}(t) - \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda \right) + \frac{A_{\lambda\omega} k_\lambda^{\lambda\omega}}{V} \left(C_{A\lambda i}^{\lambda\omega} - \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda \right). \quad (\text{I-4})$$

Donde ε_λ es la fracción del volumen del tanque (V) ocupada por el fluido, τ_R es el tiempo de residencia en el tanque, $C_{in}(t)$ es la concentración en la entrada del tanque, $A_{\lambda\omega}$ es el área interfacial fluido-sólido, $k_\lambda^{\lambda\omega}$ es el coeficiente de transferencia de masa y $C_{A\lambda i}^{\lambda\omega}$ es la concentración en la interfase. Los detalles de esta deducción se encuentran en el Apéndice A-1.

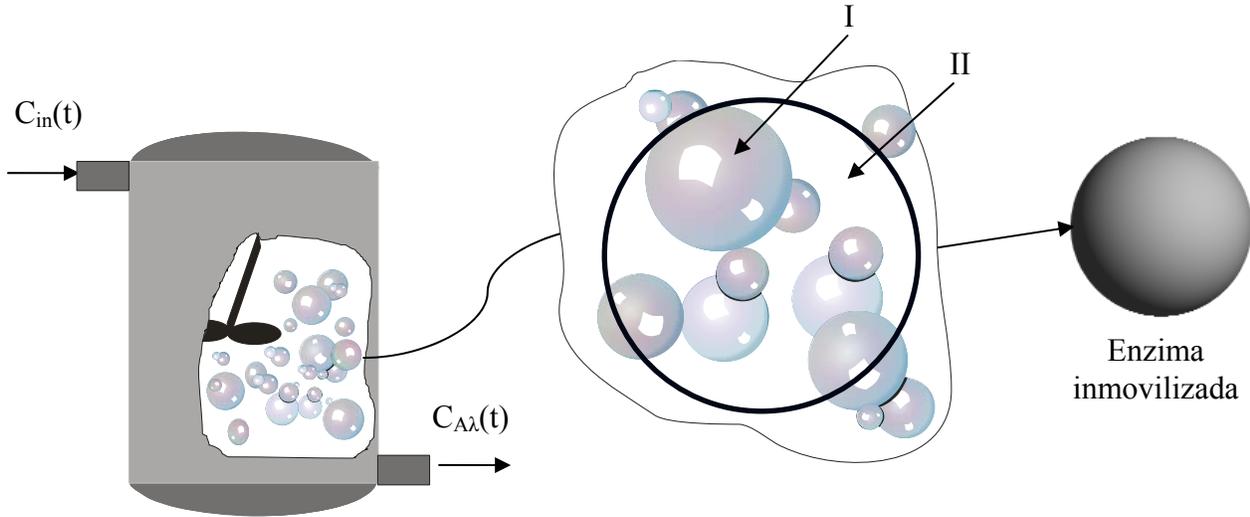


Figura I-1: Tanque agitado con una fase fluida y otra dispersa donde se encuentran enzimas inmovilizadas.

Las condiciones de frontera e iniciales para el problema descrito por las ecuaciones (I-1) y (I-4) son:

Condiciones de frontera:

$$\text{En } r = r_p : \quad \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda = C_{A\omega} \quad (\text{I-5})$$

$$\text{En } r = r_p : \quad k_\lambda^{\lambda\omega} (C_{A\lambda i}^{\lambda\omega} - \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda) = -\varepsilon D_{ef} \frac{\partial C_{A\omega}}{\partial r} \quad (\text{I-6})$$

Condiciones iniciales:

$$\text{Cuando } t = 0: \quad \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda = C_{A\lambda 0}; \quad C_{A\omega} = C_{A\omega 0} \quad (\text{I-7}) \text{ y } (\text{I-8})$$

1.4.-El problema adimensional

Definiendo las siguientes variables adimensionales:

$$U_f = \frac{\langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda}{C_{A\omega}^*}, \quad U_p = \frac{C_{A\omega}}{C_{A\omega}^*}, \quad \tau = \frac{tD_{ef}}{r_p^2}, \quad \xi = \frac{r}{r_p} \quad (\text{I-9})$$

sustituyendo las definiciones de (I-9) en (I-1) y (I-4) se obtienen (los detalles están en el Apéndice A-2):

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 R \quad (\text{I-10})$$

$$\frac{dU_f}{d\tau} = \psi_{in} (U_{in}(\tau) - U_f) + \psi_p (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (\text{I-11})$$

donde:

$$\Phi^2 = \frac{a_v R_{A\omega}^* r_p^2}{\varepsilon D_{ef} C_{A\omega}^*} \quad (\text{I-12})$$

$$R = \frac{R_{A\omega}}{R_{A\omega}^*} \quad (\text{I-13})$$

$$\psi_{in} = \frac{r_p^2}{\tau_R D_{ef} \varepsilon_\lambda} \quad (\text{I-14})$$

$$\psi_p = \frac{A_{\lambda\omega} k_\lambda^{\lambda\omega} r_p^2}{VD_{ef} \varepsilon_\lambda} \quad (\text{I-15})$$

Hasta este punto se ha manejado una forma general de la expresión de la cinética de reacción, de aquí en adelante manejaremos la cinética de Michaelis-Menten, por lo que la Ecuación (I-10) se puede escribir como:

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 \frac{k_2 U_p}{1 + k_1 U_p} \quad (\text{I-16})$$

donde:

$$k_1 = \frac{C_{A\omega}^*}{K_m} \quad (\text{I-17})$$

$$k_2 = 1 + k_1 \quad (\text{I-18})$$

Cabe mencionar que en todas las gráficas que se presentan en este trabajo se usa un valor de K_m de .025, el cual corresponde a la reacción de síntesis de la urea.

Los conceptos como la cinética de Michaelis-Menten, el método aproximado para resolver problemas con cinética no lineal y el frente de agotamiento, se discutirán hasta el siguiente capítulo dedicado al estado actual del conocimiento.

1.5.- Aproximación de la cinética de reacción.

Para poder resolver analíticamente el problema es necesario aproximar la expresión de velocidad de reacción; para ello se sigue la metodología de Marroquín y col. (1998), de manera que,

$$R \approx R|_{\xi=1} + \sum_{i=1}^{i=nc} \frac{\partial R}{\partial U_{pi}} \bigg|_{\xi=1} \left(U_{pi} - U_{pi}|_{\xi=1} \right) \quad (\text{I-19})$$

Por lo que la ecuación para la fase sólida queda finalmente:

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Lambda_1 U_p - \Lambda_2 \quad (\text{I-20})$$

Donde:

$$\Lambda_1 = \frac{\Phi^2 k_2}{\left(1 + k_1 U_p \Big|_{\xi=1}\right)^2} \quad (\text{I-21})$$

$$\Lambda_2 = k_1 \Lambda_1 \left(U_p \Big|_{\xi=1} \right)^2 \quad (\text{I-22})$$

En resumen, el problema a resolver, está descrito por:

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Lambda_1 U_p - \Lambda_2 \quad (\text{I-20})$$

$$\frac{dU_f}{d\tau} = \psi_{in} (U_{in}(\tau) - U_f) + \psi_p (U_p \Big|_{\xi=1} - U_f) \quad (\text{I-11})$$

Con condiciones de frontera e iniciales:

Condiciones de frontera:

$$\text{En } \xi = 1 \quad -\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = Bi \left(U_p \Big|_{\xi=1} - U_f \right) \quad (\text{I-23})$$

$$\text{En } 0 \leq \xi \leq 1 \quad U_p \text{ está definida} \quad (\text{I-24})$$

Condiciones iniciales:

$$\text{Cuando } \tau = 0 \quad U_f = U_{f_0}, \quad U_p = U_{p_0} \quad (\text{I-25}), (\text{I-26})$$

$$\text{Donde:} \quad Bi = \frac{k_\lambda^{\lambda \omega} r_p}{\varepsilon D_{ef}} \quad (\text{I-27})$$

Cuando se considera el frente de agotamiento, la condición (I-24) se modifica por:

$$\text{En } \xi = \xi_c \quad \frac{\partial U_p}{\partial \xi} = 0 \quad (\text{I-27})$$

Donde ξ_c es el radio crítico, definido como la posición en la partícula donde el flux y la concentración del reactivo son cero; por lo que para encontrar su valor se usa:

$$\text{En } \xi = \xi_c \quad U_p = 0 \quad (\text{I-28})$$

Como se puede notar, en la Ecuación (I-21), para poder evaluar las soluciones analíticas desarrolladas se necesita conocer la concentración en la superficie, por lo que se tendrán que elaborar rutinas de cómputo de tipo iterativas; debido a esto el problema a resolver consiste en ecuaciones lineales y una no lineal, por lo que el sistema debe considerarse como no lineal.

1.6.- Etapas de la solución.

Para lograr un mejor entendimiento, el problema se resolverá en tres etapas; para cada una de ellas los modelos son:

Etapa I: Estado Estacionario:

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{dU_p}{d\xi} \right) = \Lambda_1 U_p + \Lambda_2 \quad (\text{I-29})$$

$$\psi_{in} (U_{in}(\tau) - U_f) = \psi_p (U_f - U_p|_{\xi=1}) \quad (\text{I-30})$$

Etapa II: Estado cuasiestacionario en la partícula:

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{dU_p}{d\xi} \right) = \Lambda_1 U_p + \Lambda_2 \quad (\text{I-31})$$

$$\frac{dU_f}{d\tau} = \psi_{in} (U_{in}(\tau) - U_f) + \psi_p (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (\text{I-32})$$

Etapa III: Estado transitorio:

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Lambda_1 U_p - \Lambda_2 \quad (\text{I-20})$$

$$\frac{dU_f}{d\tau} = \psi_{in} (U_{in}(\tau) - U_f) + \psi_p (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (\text{I-11})$$

Capítulo II:

Estado actual del conocimiento

En este capítulo se presenta el panorama general en el cual se ubica el trabajo, para ello se distinguen tres partes: La primera consiste en el estudio de la cinética enzimática que lleva a la deducción de la ecuación de Michaelis-Menten. La segunda parte consiste en presentar lo más relevante sobre los reactores continuos de tipo tanque agitado ya que es en ese tipo de reactor donde se propone llevar a cabo la reacción enzimática a modelar. Por último se presenta el método aproximado para resolver analíticamente problemas con cinética no lineal y la idea del frente de agotamiento que son los temas que le dan el carácter de aproximado a las soluciones desarrolladas. Debido a la analogía que presenta el problema al de capa límite, se incluye una sección con los aspectos más relevantes de esta idea.

2.1.- Catálisis y Cinética Enzimática

Las reacciones químicas de la vida están facilitadas por enzimas, las cuales son proteínas con propiedades catalíticas; un sustrato es la sustancia que se transforma químicamente a velocidad acelerada gracias a la acción de dichas proteínas. La propiedad más importante de estos catalizadores es que son individualmente muy específicos de reacciones determinadas y a la vez son muy versátiles desde el punto de vista colectivo, ya que

millones de ellas llevan a cabo reacciones tan diversas como la hidrólisis, la polimerización, la transferencia de grupos funcionales, entre muchas otras.

Las enzimas tienen, además de la propiedad de reducir la energía de activación, la capacidad de fijar y orientar en el espacio las moléculas reactivas de tal forma que se incrementa al máximo la frecuencia de reacción productiva. Estas actividades de fijación y reacción ocurren en un sitio activo de la superficie de la enzima.

Las enzimas se pueden encontrar dentro o fuera de los microorganismos; cuando lo último sucede, es posible “inmovilizarlas” con un medio adecuado (como los geles) y así formar unidades individuales porosas que se pueden tratar (matemáticamente) como si fuesen catalizadores porosos, es justamente éste tipo de sistemas los que se analizan en este trabajo.

2.2.- Ecuación de Michaelis-Menten

El estudio de la cinética enzimática se inició cuando Brown (1902) describió la velocidad de hidrólisis de la sacarosa catalizada por la enzima de levadura invertasa (actualmente β -fructofuranosidasa) demostrando que, cuando la concentración de sacarosa es mucho mayor que la de la enzima, la velocidad de reacción tiende a ser independiente (o de orden cero) de la concentración de sacarosa. Tal autor propuso que la reacción global está constituida por dos reacciones elementales en las que el sustrato $[S]$ forma (de manera reversible) un complejo $[ES]$ con la enzima $[E]$, que a su vez se descompone en productos $[P]$ y enzima libre en su forma original,



Se recopilaron datos experimentales sobre los cambios en la velocidad inicial (v_0) obteniendo la siguiente forma general de la velocidad de reacción:

$$v_0 = \frac{d[P]}{dt} = k_3 [ES] \quad (\text{II-1})$$

Michaelis y Menten (1913) basándose en los trabajos de Henri (1903) supusieron que $k_2 \gg k_3$, de modo que en el primer paso de la reacción se alcanza el equilibrio. Aunque este supuesto es frecuentemente incorrecto, la relevancia de éste primer intento por analizar el mecanismo original y proponer un modelo matemático es innegable. A su trabajo se le puede llamar el “supuesto del equilibrio” y a pesar de su simplicidad, se ha encontrado que una gran variedad de procesos biológicos se ajustan a este tipo de modelo cinético.

El otro supuesto es el de “estado estacionario” el cual se debe a Briggs y Haldane (1925), el cual se basa en la premisa de que, con excepción de la fase inicial de la reacción (la transitoria), la cual termina normalmente dentro de los primeros milisegundos después de la mezcla de la enzima y el sustrato, la concentración del complejo permanece aproximadamente constante hasta que el sustrato está prácticamente agotado. En otras palabras, no hay cambio en la concentración de ES con el tiempo.

De esta forma expresando las velocidades de formación y descomposición como:

$$\text{Velocidad de formación de } ES = k_1 [E][S] \quad (\text{II-2})$$

$$\text{Velocidad de desaparición de } ES = (k_2 + k_3)[ES]. \quad (\text{II-3})$$

En el equilibrio,

$$k_1[E][S] = (k_2 + k_3)[ES] \quad (\text{II-4})$$

Por otro lado, la concentración de enzima total $[E_{tot}]$ se define como la suma de la concentración del complejo $[ES]$ y la enzima libre $[E_f]$, que no forma parte del complejo:

$$[E_{tot}] = [ES] + [E_f]. \quad (\text{II-5})$$

La velocidad inicial de la reacción v_0 , en términos de la velocidad de formación del producto, está dada por:

$$v_0 = k_3[ES] \quad (\text{II-6})$$

Cuando la concentración de ES alcance un valor máximo se habrá llegado a la velocidad inicial máxima (V_{max}); dicha concentración máxima se alcanza cuando toda la enzima disponible forma parte del complejo. De (II-5) obtenemos entonces que, $[ES]_{max} = [E_{tot}]$, por lo que, aplicando estos conceptos en (II-6) se obtiene:

$$V_{max} = k_3[ES]_{max} = k_3[E_{tot}]. \quad (\text{II-7})$$

Rearreglando (II-4):

$$[ES] = \frac{k_1[E_f][S]}{k_2 + k_3} \quad (\text{II-8})$$

Definiendo:

$$K_m = \frac{k_2 + k_3}{k_1} \quad (\text{II-9})$$

donde K_m se denomina constante de Michaelis-Menten, por lo que,

$$v_0 = \frac{k_3 [E_f][S]}{K_m} \quad (\text{II-10})$$

y despejando $[E_f]$ de (II-5) y sustituyéndolo en (II-10) junto con las definiciones de (II-6) y (II-7) se obtiene:

$$v_0 = \frac{V_{\max} [S]}{K_m + [S]} \quad (\text{II-11})$$

Esta última es la forma clásica de la ecuación de Michaelis-Menten y constituye la base de la cinética enzimática. Dicha ecuación describe una curva como la de la Figura II-1.

De (II-11) se puede notar que cuando $[S] \ll K_m$:

$$v_0 \approx \frac{V_{\max} [S]}{K_m} \quad (\text{II-12})$$

La cual es una cinética de primer orden, que se puede apreciar en la parte creciente de la Figura II-1. Por otro lado, si $[S] \gg K_m$

$$v_0 \approx V_{\max} \quad (\text{II-13})$$

En éste caso la cinética es de orden cero y se identifica con la parte aproximadamente horizontal de la Figura II-1.

Como se puede notar, ésta expresión tiene dos extremos, sin embargo, en éste trabajo se considerará la forma completa, es decir, la ecuación (II-11) la cual es no lineal.

Los valores de K_m y V_{\max} reflejan la acción de una enzima. La constante V_{\max} es una medida de la eficiencia de operación, es el límite superior de rendimiento de cierta cantidad de enzima, por lo que suele usarse para comparar enzimas diferentes. Mientras

que la constante de Michaelis-Menten representa la cantidad de sustrato necesaria para fijarse a la mitad de enzima disponible y producir la mitad de la velocidad máxima.

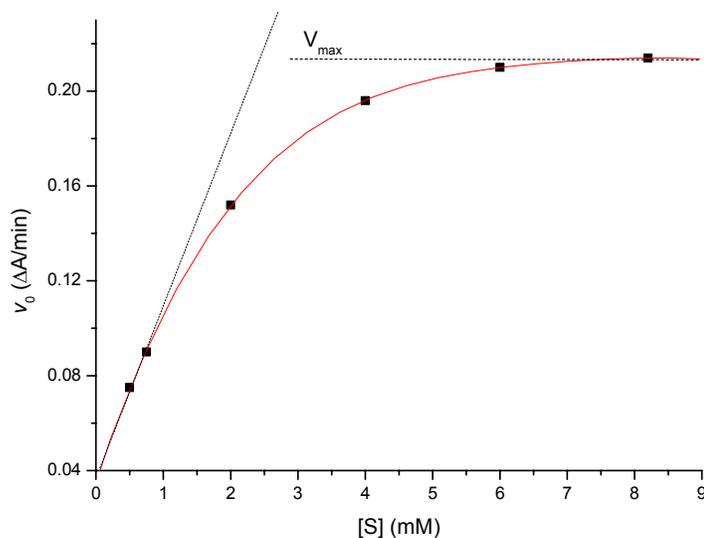


Figura II-1: Gráfica directa de Michaelis-Menten para la reacción de formación de *p*-nitrofenol a partir de fosfato de *p*-nitrofenilo, catalizada por fosfatasa ácida.

Lo anterior puede demostrarse si en (II-11) se sustituye

$$v_0 = V_{\max} / 2 \quad (\text{II-14})$$

y se despeja K_m se obtiene:

$$K_m = [S] \quad (\text{II-15})$$

Por otro lado, los valores de K_m pueden usarse para evaluar la especificidad de acción de una determinada enzima hacia los sustratos similares. La regla general que se sigue es: en cuanto más bajo sea el valor de K_m mejor será el sustrato. Lo cual se puede demostrar de (II-9) para el caso en que k_2 sea mucho mayor que k_3 :

$$K_m \approx \frac{k_2}{k_1} \quad (\text{II-16})$$

Por ello, un valor bajo de K_m indica que se tiene una baja tendencia a descomponer el complejo ES en E y S , o lo que es lo mismo, una gran afinidad de E por S . La magnitud de K_m es una función del tipo de enzima, la naturaleza del sustrato, la temperatura y el pH.

2.3.- Tanque Agitado de dos Fases

Este tipo de sistema de reacción ha sido un tópico de interés para los ingenieros químicos debido a que es el sistema preferido para llevar a cabo la determinación de datos cinéticos. Bajo la suposición de buen mezclado, se asume que la concentración del efluente es igual al valor promedio dentro del recipiente.

Recientemente Marroquín y col. (2002) presentaron la solución de las ecuaciones que gobiernan el transporte de reactivos en un sistema de tanque agitado donde se encuentran dos fases, una continua y otra dispersa, esta última contiene partículas suspendidas de radio r_p , donde se lleva a cabo un proceso de difusión-reacción con cinética de primer orden. La ecuación de conservación del reactivo en la partícula es:

$$\varepsilon \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} = \varepsilon D_{ef} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial r} \right) - a_v k \langle C_\gamma \rangle^\gamma . \quad (\text{II-17})$$

Donde ε es la fracción hueca de la partícula, $\langle C_\gamma \rangle^\gamma$ es la concentración promedio intrínseca en la partícula catalítica. La ecuación para el fluido es:

$$\varepsilon_\mu \frac{d\langle C_\mu \rangle^\mu}{dt} = \frac{1}{\tau_R} \left(C_{in}(t) - \langle C_\mu \rangle^\mu \right) + \frac{A_{fp}}{V} k_f \left(\langle C_\mu \rangle^\mu \Big|_{r=r_p} - \langle C_\mu \rangle^\mu \right). \quad (\text{II-18})$$

En este caso, ε_μ es la fracción de V (el volumen de suspensión en el reactor) ocupada por el fluido, $\langle C_\mu \rangle^\mu$ es la concentración promedio intrínseca en el fluido bien mezclado, A_{fp} es el área de la interfase fluido-partícula y k_f es el coeficiente de transferencia de masa del fluido alrededor de las partículas; la concentración de entrada de reactivos es $C_{in}(t)$ y la concentración promedio intrínseca del fluido en la superficie de las partículas es $\langle C_\mu \rangle^\mu \Big|_{r=r_p}$. Las dos ecuaciones anteriores están acopladas por medio de las condiciones de frontera:

$$\text{En } r = r_p, \quad -\varepsilon D_{ef} \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial r} = k_f \left(\langle C_\mu \rangle^\mu \Big|_{r=r_p} - \langle C_\mu \rangle^\mu \right) \quad (\text{II-19})$$

$$\text{En } r = r_p, \quad \langle C_\mu \rangle^\mu = \langle C_\gamma \rangle^\gamma. \quad (\text{II-20})$$

Las condiciones iniciales son:

$$\text{Cuando } t = 0 \quad \langle C_\mu \rangle^\mu = C_{\mu 0} \quad (\text{II-21})$$

$$\text{Cuando } t = 0 \quad \langle C_\gamma \rangle^\gamma = C_{\gamma 0} \quad (\text{en toda la partícula}). \quad (\text{II-22})$$

Las ecuaciones (II-17) y (II-18) se resolvieron por el método de transformada de Laplace para distintas funciones de concentración de entrada (escalón, pulso infinito y oscilatorias), obteniendo soluciones que incluyen la evaluación de resistencias internas y

externas a la transferencia de masa y pueden ser usadas para determinar los efectos de dichas resistencias en experimentos en situaciones dinámicas.

Recientemente González Rugerio (2003), resolvió analíticamente un problema similar al planteado, con la diferencia de que la cinética fue de tipo Michaelis Menten aproximada a orden cero, por lo que la Ecuación (II-17) se vuelve no homogénea y es necesario usar la idea de un frente de agotamiento, de la cual se hablará más adelante.

2.4.- Unicidad de las soluciones y estabilidad de un CSTR isotérmico.

Al formular los modelos matemáticos que describen el funcionamiento de los reactores químicos, se supone implícitamente que los resultados que se obtienen son únicos, por lo que es necesario hacer un análisis que compruebe esta suposición inicial.

En su texto, Carberry (1976) expone una metodología para la determinación de la unicidad de las soluciones en el caso isotérmico; se tiene especial interés en éste ya que el sistema a modelar se supone en condiciones isotérmicas.

Partiendo de la ecuación de diseño en estado estacionario para un reactor homogéneo, donde se está llevando a cabo la reacción de oxidación del CO ,

$$\frac{CO_0 - CO}{\tau_R} = \frac{kCO}{(1 + KCO)^2} \quad (\text{II-23})$$

como se puede notar, la ecuación tiene tres raíces, para localizarlas gráficamente es conveniente definir,

$$R_1 = \frac{CO_0 - CO}{\tau_R} \quad (\text{II-24})$$

$$R_2 = \frac{kCO}{(1+KCO)^2} \quad (\text{II-25})$$

mismas que se grafican en la Figura (II-2), como se puede notar, la curva que describe la Ecuación (II-25) se encuentra con la recta de (II-24) en tres posiciones, de las cuales la intermedia representa un punto inestable.

Es posible hacer un análisis de estabilidad en estado transitorio para determinar si el reactor regresará a un estado estacionario dado tras ser sometido a una perturbación; para ello se resuelven en forma acoplada los balances en estado estacionario transitorio linealizando la expresión de reacción alrededor de las condiciones en estado estacionario; sin embargo no se emplea esta metodología en este trabajo, sino que se limita al análisis de unicidad de las soluciones y estabilidad del reactor en estado estacionario.

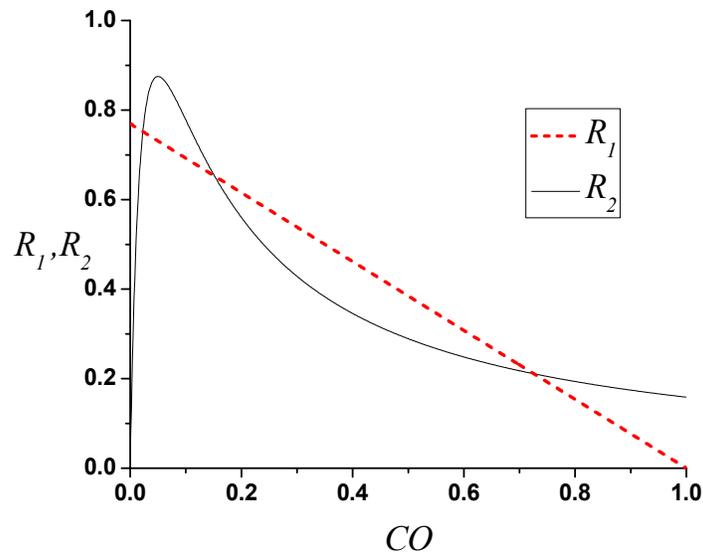


Figura II-2: Multiplicidad isotérmica en un CSTR para $k=70$, $K = 20 \text{ (mol/l)}^{-1}$,

$$\tau_R = 1.3 \text{ s.}$$

2.5.- Método aproximado para resolver problemas de transporte y reacción con cinética no lineal.

Con el objeto de obtener expresiones analíticas para el factor de efectividad, se han tomado algunas consideraciones, como la forma algebraica del modelo cinético, la forma de la ecuación de balance y el comportamiento asintótico que la solución debe cumplir. La primera consideración, está relacionada con asumir pseudo primer orden para algunas cinéticas, entre ellas la de Michaelis Menten (Buong y Bailey, 1981; Lobo y cols., 1999); dicha aproximación es aplicable en cinéticas normales cuando existe una relación casi lineal entre el reactivo limitante y la velocidad de reacción. En la última consideración (carácter asintótico de la solución) se han usado métodos de aproximación numérica, como el de colocación ortogonal; sin embargo éste método no reproduce el límite asintótico para valores grandes del módulo de Thiele.

En 1998 Marroquín y col. desarrollaron un método aproximado para la estimación del factor de efectividad que consiste en expandir en series de Taylor la ecuación cinética alrededor de las condiciones en la superficie externa del catalizador:

$$\begin{aligned}
 R = R|_{X=1} + \sum_{j=1}^{j=n_c} \frac{\partial R}{\partial Y_j} \Big|_{X=1} (Y_j - Y_{js}) \\
 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{i=n_c} \sum_{j=1}^{j=n_c} \frac{\partial^2 R}{\partial Y_i \partial Y_j} \Big|_{X=1} (Y_i - Y_{is})(Y_j - Y_{js}) + \dots
 \end{aligned}
 \tag{II-26}$$

Donde Y se refiere a las concentraciones adimensionales de los componentes de la reacción y $X=1$ se refiere a las condiciones en la superficie. La Ecuación (II-26) es truncada

$$R \cong R|_{X=1} + Y_{ks} \sum_{j=1}^{j=n_c} \frac{\partial R}{\partial Y_j} \Big|_{X=1} \frac{v_j}{\Delta_j} - Y_k \sum_{j=1}^{j=n_c} \frac{\partial R}{\partial Y_j} \Big|_{X=1} \frac{v_j}{\Delta_j} \quad (\text{II-27})$$

de tal manera que se obtenga un problema lineal en la ecuación de la partícula:

$$\frac{1}{X^m} \frac{d}{dX} \left(X^m \frac{dY_k}{dX} \right) - Y_k \varphi_f^2 = R|_{X=1} (m+1) \Phi_f^2 - Y_{ks} \varphi_f^2 \quad (\text{II-28})$$

donde se incluyó el Módulo de Thiele Modificado

$$\varphi_f = \Phi_f \sqrt{-(m+1) \sum_{j=1}^{j=n_c} \frac{\partial R}{\partial Y_j} \Big|_{X=1} \frac{v_j}{\Delta_j}} \quad (\text{II-29})$$

donde,

$$\Phi_f = \sqrt{\frac{L^2 \rho_p r_s}{D_{ef(k)} C_{ks}}} \quad (\text{II-30})$$

en esta última ecuación r_s se refiere a la velocidad de la reacción intrínseca evaluada en la superficie y L es la longitud característica de la partícula. De esta forma se obtuvieron expresiones análogas a las obtenidas con una cinética de primer orden según la geometría.

La ventaja que presenta este método es que no se está modificando el problema original (excepto por la expresión de la velocidad de reacción). En otras palabras, no se hacen tantas suposiciones que impliquen la pérdida de la física del problema original. Además el error entre la solución que propusieron Marroquín y col. con la correspondiente solución numérica no tuvo un valor mayor de 5%, por lo que se considera aceptable.

Cabe mencionar que la idea de linealizar la ecuación de velocidad de reacción ya había sido usada antes (Haynes, 1986), sin embargo el método reportado involucra un módulo de Thiele modificado donde se tiene que resolver una integral de la velocidad de

reacción; así cuando se tengan expresiones demasiado complicadas como para obtener dicha integral analíticamente, se tendrá que recurrir a un método numérico, a diferencia del método de Marroquín donde no se involucra ninguna técnica de integración para la obtención del módulo de Thiele modificado.

El método aproximado también lo han empleado otros autores como Szukiewicz (2002) para obtener soluciones en una partícula catalítica donde se lleva a cabo una reacción con cinética no lineal de tipo ley de potencia o bien Langmuir-Hinshelwood, limitando su análisis a casos en que no existe multiplicidad de estados estacionarios, obteniendo resultados bastante satisfactorios. Sin embargo, el no considerar que el reactivo se agota limita significativamente el uso de sus resultados.

2.6.- El frente de agotamiento

La metodología presentada se ha aplicado a varios problemas, en estado estacionario, como es el transporte facilitado en membranas líquidas (Morales-Cabrera y col., 2002), donde la expansión en series de Taylor de la velocidad de reacción (la cual es reversible y no lineal) se hace alrededor de las dos superficies limitantes de la membrana líquida; otro ejemplo es el de sistemas donde hay varias reacciones, como la desactivación isotérmica en serie y en paralelo del coque. Cuando se realizó el estudio de la predicción aproximada del factor de efectividad no isotérmico (Cordero-Sánchez, 2002), se encontró que el término de orden cero genera resultados carentes de sentido físico en la concentración y el factor de efectividad. Dicha dificultad llevó a un replanteamiento del problema, donde se toma en cuenta el concepto de frente de agotamiento. Dicha consideración permite

encontrar predicciones aproximadas del factor de efectividad no muy diferentes a los valores exactos; es decir, los del problema no linealizado resuelto por métodos numéricos. La comparación de ambas soluciones se muestra en la Figura II-3.

Para la deducción de la condición de frontera que se usará en este caso resulta útil analizar el sistema mostrado en la Figura II-4 donde se distingue la zona β que es donde se está llevando a cabo la reacción y la zona σ que es la que se denomina zona muerta y tiene la propiedad que dentro de dicha zona no existe reactivo.

La condición de salto de masa que es aplicable a la superficie divisora de las dos zonas es:

$$\underbrace{\frac{dC_{As}}{dt} \Big|_{n_{\beta\sigma}(\underline{w} \cdot \underline{n}_{\beta\sigma})}}_{\text{acumulacion superficial}} + \underbrace{\underline{\nu}_s \cdot (C_{As} \underline{\nu}_{As})}_{\text{transporte superficial}} + \underbrace{C_{As} (\underline{\nu}_s \cdot \underline{n}_{\beta\sigma}) (\underline{w} \cdot \underline{n}_{\beta\sigma})}_{\text{efecto de cambio de area}} = \underbrace{\left[C_{A\beta} (\underline{\nu}_{A\beta} - \underline{w}) \cdot \underline{n}_{\beta\sigma} + C_{A\sigma} (\underline{\nu}_{A\sigma} - \underline{w}) \cdot \underline{n}_{\sigma\beta} \right]}_{\text{flux interfacial de los senos de las fases a la interfase}} + \underbrace{R_{As}}_{\text{reaccion heterogenea}} \quad (\text{II-31})$$

donde C_{As} es la concentración del componente A en el frente de agotamiento que está en $\xi = \xi_c$. Sin embargo, se define la zona muerta como aquella en la que se cumple la condición:

$$\text{en } \xi = \xi_c, \quad C_{As} = 0 \quad (\text{II-32})$$

esto hace que los términos de acumulación, transporte superficial y efecto del cambio de área se eliminen, por lo que la Ecuación (II-31) se reduce a:

$$\left[C_{A\beta} (\underline{\nu}_{A\beta} - \underline{w}) \cdot \underline{n}_{\beta\sigma} + C_{A\sigma} (\underline{\nu}_{A\sigma} - \underline{w}) \cdot \underline{n}_{\sigma\beta} \right] + R_{As} = 0 \quad (\text{II-33})$$

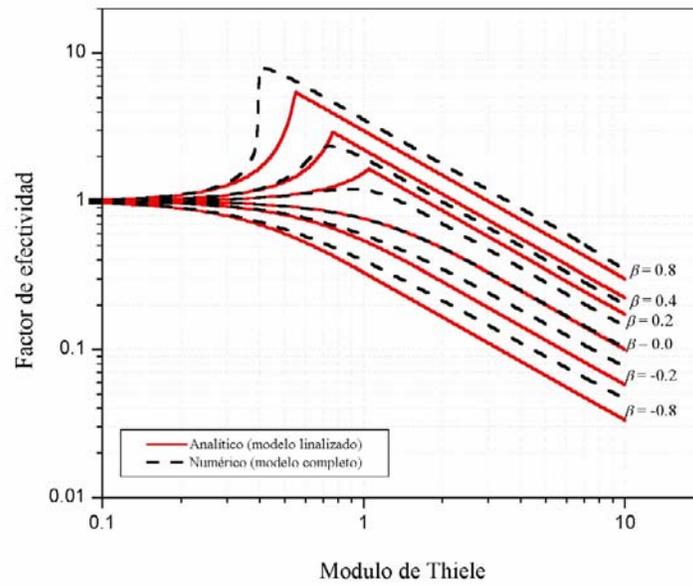


Figura II-3: Factor de efectividad no isotérmico obtenido en forma analítica (línea continua) y numérica (línea discontinua) contra el módulo de Thiele (Cordero-Sánchez M.A., 2002).

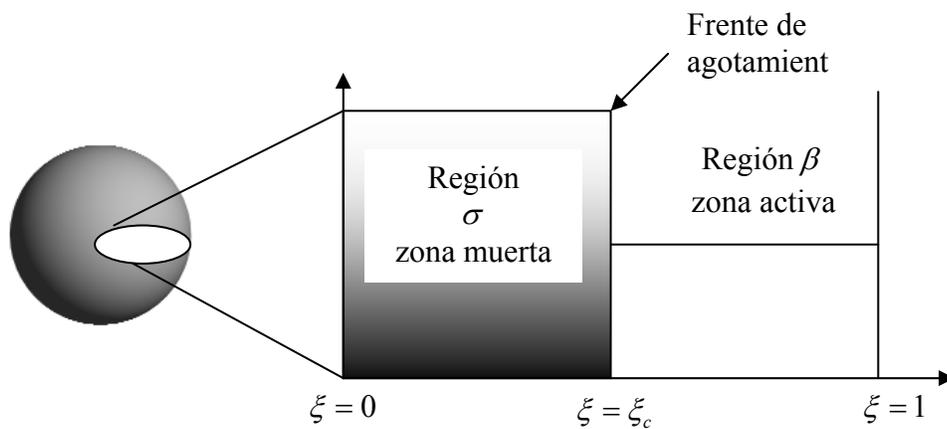


Figura II-4: Identificación de la zona muerta (región σ)

Por otro lado, la expresión de velocidad de reacción heterogénea R_{As} , sea cual fuere su forma estará en función de la concentración superficial, la cual ya se aclaró que es nula, por lo que la ecuación anterior se reduce a:

$$C_{A\beta} (\underline{v}_{A\beta} - \underline{w}) \cdot \underline{n}_{\beta\sigma} + C_{A\sigma} (\underline{v}_{A\sigma} - \underline{w}) \cdot \underline{n}_{\sigma\beta} = 0 \quad (\text{II-34})$$

el segundo término se elimina dado que para $\xi < \xi_c$ la concentración vale cero, es decir, $C_{A\sigma} = 0$; otra forma de decir esto es que no hay flux de la región σ a la β . Entonces:

$$C_{A\beta} (\underline{v}_{A\beta} - \underline{w}) \cdot \underline{n}_{\beta\sigma} = 0 \quad (\text{II-35})$$

En la ecuación anterior podemos distinguir dos términos, uno de ellos es el flux en la fase β en las proximidades de la zona muerta:

$$\underline{N}_{A\beta} = C_{A\beta} \underline{v}_{A\beta} \quad (\text{II-36})$$

y el otro es la componente normal de la velocidad de desplazamiento de la interfase, la cual la podemos expresar como:

$$\underline{w} \cdot \underline{n}_{\beta\sigma} = \frac{d\xi_c}{dt} \quad (\text{II-37})$$

Sustituyendo (II-36) y (II-37) en (II-35):

$$\frac{\underline{N}_{A\beta} \cdot \underline{n}_{\beta\sigma}}{C_{A\beta}} = \frac{d\xi_c}{dt} \quad (\text{II-38})$$

Suponiendo que la velocidad de desplazamiento del frente de agotamiento es despreciable, es decir:

$$\text{en } \xi \rightarrow \xi_c, \quad \underline{N}_{A\beta} \rightarrow 0 \quad (\text{II-39})$$

$$\frac{d\xi_c}{dt} \approx 0 \quad (\text{II-40})$$

lo cual quiere decir que

$$\xi_c \approx cte. \quad (\text{II-41})$$

Estas dos ecuaciones representan la suposición de que el radio crítico se encuentra en estado cuasiestacionario, esto último debido a que en realidad sí cambia con el tiempo el radio crítico. Sin embargo, para los propósitos de este trabajo el radio crítico se manejará como constante, aunque se admite que en un desarrollo más formal se debe usar (II-38) en lugar de (II-40).

En resumen, las condiciones que derivan de la idea del frente de agotamiento son:

$$\text{En } \xi = \xi_c, \quad \frac{\partial U_p}{\partial \xi} = 0 \quad (\text{II-42})$$

$$\text{En } \xi = \xi_c, \quad U_p = 0 \quad (\text{II-43})$$

En la Ecuación (II-42) se supuso aplicable la ley de Fick.

Para llegar a este resultado se pudo partir de la ecuación de conservación del componente clave y suponer que en la región cercana a la zona muerta las contribuciones difusivas y reactivas son despreciables respecto al término de acumulación, esta metodología la detalla Levenspiel (1990).

Si bien la idea de un frente de agotamiento no es novedosa, los trabajos en la literatura (Aris, 1975; Temkin, 1982; García-Ochoa y cols., 1988) no discuten la suposición que se encuentra detrás de considerar al radio crítico como cuasiestacionario y su análisis ha sido enfocado básicamente al estudio de reacciones con ordenes fraccionales de reacción.

En este trabajo al usar la metodología de Marroquín y col. es forzoso que se tome en cuenta el frente de agotamiento ya que al simplificar la expresión cinética se introducen términos de ordenes uno y cero en la ecuación de conservación del reactivo. Debido al

término de orden cero es posible, bajo determinadas condiciones, que se obtengan valores negativos de la concentración del reactivo, para evitar esto, es necesario que en el planteamiento del problema se especifique en dónde la concentración debe ser nula.

Se enfatiza que cuando el radio crítico es nulo se deben obtener las soluciones que se tenían cuando no se consideraba el frente de agotamiento, y cuando $\xi_c = 1$ se tiene tal rapidez en los términos de reacción que la reacción es equivalente a una superficial.

2.7.- La idea de capa límite

Recientemente Ochoa Tapia (2003) resolvió en forma aproximada el problema de difusión y reacción en estado estacionario de una partícula catalítica esférica con cinética de primer orden, mostrando la importancia de tomar en cuenta el fenómeno de agotamiento. La aproximación consistió en proponer una solución de tipo polinomial y determinar las incógnitas de la misma por medio de las condiciones de frontera; esta metodología es análoga a la usada en la solución aproximada de problemas de Capa Límite.

El problema que resolvió está definido por:

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{dU_p}{d\xi} \right) - \Phi^2 U_p = 0, \quad \text{para } 0 < \xi < 1 \quad (\text{II-44})$$

Con las condiciones de frontera,

$$\text{en } \xi = 1, \quad U_p \Big|_{\xi=1} = U_f \quad (\text{II-45})$$

$$\text{Sin } \xi_c \quad \text{en } \xi = 0, \quad \frac{dU_p}{d\xi} = 0 \quad (\text{II-46})$$

$$\text{Con } \xi_c \quad \text{en } \xi = \xi_c, \quad \frac{dU_p}{d\xi} = 0; \quad U_p = 0 \quad (\text{II-47})$$

De esta forma, propuso una solución de tipo,

$$U_p(\xi) = a_0 + a_1 \xi + a_2 \xi^2 \quad (\text{II-48})$$

Usando las condiciones de frontera en la ecuación anterior, resultan:

Sin frente de agotamiento:

$$\frac{U_p^{(1)}(\xi)}{U_f} = \xi^2 + [1 - \xi^2] \left(\frac{10 - \Phi^2}{10 + 2\Phi^2/3} \right) \quad (\text{II-49})$$

Con frente de agotamiento:

$$\frac{U_p^{(2)}(\xi)}{U_f} = \frac{1}{1 - 2\xi_c} [\xi^2 - 2\xi\xi_c] + \frac{H}{1 - 2\xi_c} [1 - \xi^2 + 2\xi\xi_c - 2\xi_c] \quad (\text{II-50})$$

donde los superíndices 1 y 2 denotan que se trata de la solución sin y con la idea del frente de agotamiento, respectivamente. En la Ecuación (II-50) H es función del radio crítico, la cual cumple con la condición de,

$$\lim_{\xi_c \rightarrow 0} H(\xi_c) = \frac{10 - \Phi^2}{10 + 2\Phi^2/3} \quad (\text{II-51})$$

al evaluar estas soluciones se obtuvieron los resultados mostrados en la Figura II-5. Donde se puede notar la mejora que se logra al tomar en cuenta la idea de un frente de agotamiento en la solución aproximada.

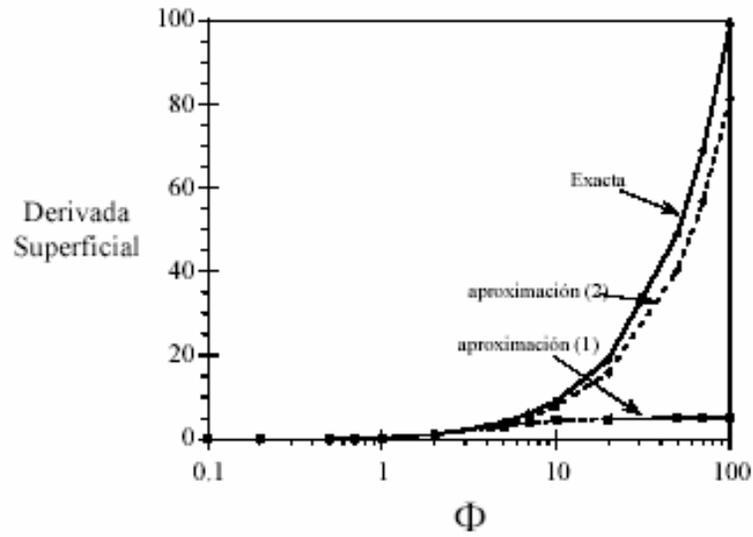


Figura II-5: Comparación de las soluciones exacta y aproximadas a partir de la derivada superficial como función del módulo de Thiele.

Capítulo III:

Solución en estado estacionario

3.1.- Planteamiento del problema

Como se mencionó anteriormente, el problema está descrito en este caso por las ecuaciones:

Para el sólido:

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{dU_p}{d\xi} \right) = \Lambda_1 U_p + \Lambda_2 \quad (\text{III-1})$$

Para el fluido:

$$\psi_{in} (U_{in}(\tau) - U_f) + \psi_p (U_p|_{\xi=1} - U_f) = 0 \quad (\text{III-2})$$

Con condiciones de frontera:

$$\text{En } \xi = 1 \quad -\frac{dU_p}{d\xi} = Bi (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (\text{III-3})$$

$$\text{En } 0 \leq \xi \leq 1 \quad U_p \text{ está definida} \quad (\text{III-4})$$

3.2.- Solución sin frente de agotamiento

La solución de la Ecuación (III-2) es (los detalles están en el Apéndice A-3):

$$U_f = \frac{\psi_{in} U_{in}(\tau) + \psi_p U_p|_{\xi=1}}{\psi_{in} + \psi_p} \quad (\text{III-5})$$

mientras que la solución de la Ecuación (III-1) es:

$$U_p = C_1 \frac{\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}\xi}{\xi} + C_2 \frac{\text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1}\xi}{\xi} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{III-6})$$

ya que en $\xi = 0$ U_p está definida, C_2 debe ser cero, por lo que:

$$U_p = C_1 \frac{\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}\xi}{\xi} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{III-7})$$

Aplicando la condición de la Ecuación (III-3) se obtiene:

$$C_1 = \frac{\text{Bi} \left(\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} + U_f \right)}{(\text{Bi} - 1) \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1} + \sqrt{\Lambda_1} \text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1}} \quad (\text{III-8})$$

Evalutando en $\xi = 1$ la Ecuación (III-7):

$$U_p|_{\xi=1} = C_1 \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{III-9})$$

Sustituyendo esta última en la Ecuación (III-5):

$$U_f = \frac{\psi_{in} U_{in}(\tau) + \psi_p C_1 \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \psi_p}{\psi_{in} + \psi_p} \quad (\text{III-10})$$

por lo que la Ecuación (III-8) se reduce a:

$$C_1 = \frac{\text{Bi} \psi_{in} A}{\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}} \quad (\text{III-11})$$

donde:

$$A = \frac{U_{in}(\tau) + \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1}}{\psi_{in} Bi + (\psi_{in} + \psi_p) (\sqrt{\Lambda_1} \text{Coth} \sqrt{\Lambda_1} - 1)} \quad (\text{III-12})$$

Para la evaluación de las soluciones obtenidas, se le asignará a U_{in} el valor de la unidad, lo que equivale a haber usado una función de entrada de tipo escalón unitario.

Entonces, la Ecuación (III-10) se puede escribir como:

$$U_f = U_{in}(\tau) - \psi_p (\sqrt{\Lambda_1} \text{Coth} \sqrt{\Lambda_1} - 1) A \quad (\text{III-13})$$

Sustituyendo la Ecuación (III-11) en la (III-7):

$$U_p = \frac{Bi \psi_{in} A}{\text{Senh} \sqrt{\Lambda_1}} \frac{\text{Senh} \sqrt{\Lambda_1} \xi}{\xi} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{III-14})$$

Si se define una concentración promedio para la partícula, de la forma:

$$\langle U_p \rangle = \frac{\int_0^1 U_p \xi^2 d\xi}{\int_0^1 \xi^2 d\xi} = 3 \int_0^1 U_p \xi^2 d\xi \quad (\text{III-15})$$

se obtiene entonces, al aplicar el operador de (III-15) a la Ecuación (III-14):

$$\langle U_p \rangle = \frac{3 Bi \psi_{in} A}{\Lambda_1} (\sqrt{\Lambda_1} \text{Coth} \sqrt{\Lambda_1} - 1) - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{III-16})$$

3.3.- Agotamiento del reactivo:

En este caso, la condición dada por la Ecuación (III-4) se reemplaza por:

$$\text{En } \xi = \xi_c, \quad \frac{dU_p}{d\xi} = 0 \quad (\text{III-17})$$

Como sólo se está involucrando un cambio en la condición de frontera, la solución general (III-6) sigue siendo válida, por lo que derivándola respecto a ξ y aplicando la condición de la Ecuación (III-17) se obtiene:

$$C_2 = B_2 C_1 \quad (\text{III-18})$$

donde:

$$B_2 = \frac{\sqrt{\Lambda_1} \xi_c - \text{Tanh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi_c)}{1 - \sqrt{\Lambda_1} \xi_c \text{Tanh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi_c)} \quad (\text{III-19})$$

Dado que sólo se cambió la condición de (III-4), la condición de (III-3) sigue siendo válida, por lo que:

$$C_1 = \frac{Bi\psi_{in} A}{\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}} - B_1 C_2 \quad (\text{III-20})$$

donde:

$$B_1 = \frac{\left[(\sqrt{\Lambda_1} \text{Tanh}\sqrt{\Lambda_1} - 1)(\psi_{in} + \psi_p) + Bi\psi_{in} \right] \text{Coth}\sqrt{\Lambda_1}}{\psi_{in} Bi + (\psi_{in} + \psi_p)(\sqrt{\Lambda_1} \text{Coth}\sqrt{\Lambda_1} - 1)} \quad (\text{III-21})$$

Igualando las ecuaciones (III-18) y (III-20):

$$C_1 = \frac{Bi\psi_{in} A}{(1 + B_1 B_2) \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}} \quad (\text{III-22})$$

Por lo que las soluciones para la partícula y el fluido son, respectivamente:

$$U_p = \left(\frac{Bi\psi_{in} A}{(1 + B_1 B_2) \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}} \right) \left(\frac{\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1} \xi}{\xi} + B_2 \frac{\text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1} \xi}{\xi} \right) - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{III-23})$$

$$U_f = U_{in}(\tau) - A\psi_p \left(\sqrt{\Lambda_1} \text{Coth}\sqrt{\Lambda_1} - 1 - \frac{Bi\psi_{in} B_2 \text{Coth}\sqrt{\Lambda_1}}{\psi_{in} + \psi_p} \right) \quad (\text{III-24})$$

Por último, se debe redefinir el promedio de la partícula; se propone:

$$\langle U_p \rangle = \frac{\int_{\xi_c}^1 U_p \xi^2 d\xi}{\int_0^1 \xi^2 d\xi} = 3 \int_{\xi_c}^1 U_p \xi^2 d\xi \quad (\text{III-25})$$

ya que U_p no está definida para $0 \leq \xi \leq \xi_c$. Esta ecuación considera el caso en que $\xi_c = 0$ y así se recupera la ecuación (III-15).

Aplicando el operador de (III-25) a la Ecuación (III-23):

$$\begin{aligned} \langle U_p \rangle = & \frac{3Bi\psi_{in}A}{(1+B_1B_2) \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}} \left\{ \frac{1}{\sqrt{\Lambda_1}} \left(\text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1} - \xi_c \text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1}\xi_c \right) - \frac{1}{\Lambda_1} \left(\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1} - \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}\xi_c \right) \right. \\ & \left. + B_2 \left[\frac{1}{\sqrt{\Lambda_1}} \left(\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1} - \xi_c \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}\xi_c \right) - \frac{1}{\Lambda_1} \left(\text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1} - \text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1}\xi_c \right) \right] \right\} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} (1 - \xi_c^3) \end{aligned} \quad (\text{III-26})$$

Para encontrar el valor del radio crítico, es necesario usar la condición adicional:

$$\text{En } \xi = \xi_c \quad U_p = 0 \quad (\text{III-27})$$

Que al aplicarla a la Ecuación (III-23) se obtiene:

$$\left(\frac{Bi\psi_{in}A}{(1+B_1B_2) \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}} \right) \left(\frac{\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}\xi_c}{\xi_c} + B_2 \frac{\text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1}\xi_c}{\xi_c} \right) - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} = 0 \quad (\text{III-28})$$

Las raíces de esta ecuación son el radio crítico.

3.4.- Evaluación

Inicialmente se comparan los perfiles de concentración en la partícula obtenidos con las soluciones analíticas aproximadas y con la solución numérica del problema exacto. Con $[U_{aprox}^{(1)}]$ se denotan los resultados obtenidos con la solución que considera el frente de agotamiento y con $[U_{aprox}^{(2)}]$ los obtenidos sin usar esta idea. El propósito es notar la influencia del número de Biot y del módulo de Thiele sobre los perfiles que se obtienen de las soluciones aproximadas.

En la Figura III-1 se muestra la funcionalidad de las soluciones desarrolladas con el número de Biot manteniendo fijo el módulo de Thiele; como se muestra, conforme disminuye el valor del número de Biot, las concentraciones en la partícula también lo hacen, ya que llega menos reactivo a la superficie de la partícula, lo que implica que tiene menor oportunidad de reaccionar.

Como se esperaba, únicamente cuando es necesario considerar el radio crítico las soluciones aproximadas difieren entre sí. Se puede observar que los resultados obtenidos por la solución aproximada que no incluye la idea del frente de agotamiento $[U_{aprox}^{(2)}]$, disminuyen hasta alcanzar valores negativos; mientras que la solución que sí toma en cuenta el frente de reacción, se mantiene siempre en la región positiva de las gráficas, logrando una mayor proximidad con la solución numérica del problema exacto.

En todas las gráficas de este trabajo la zona por debajo del eje de las abscisas denota la región donde los resultados carecen de sentido físico, misma que nunca es tocada por la solución numérica ni por la solución que sí toma en cuenta el frente de agotamiento.

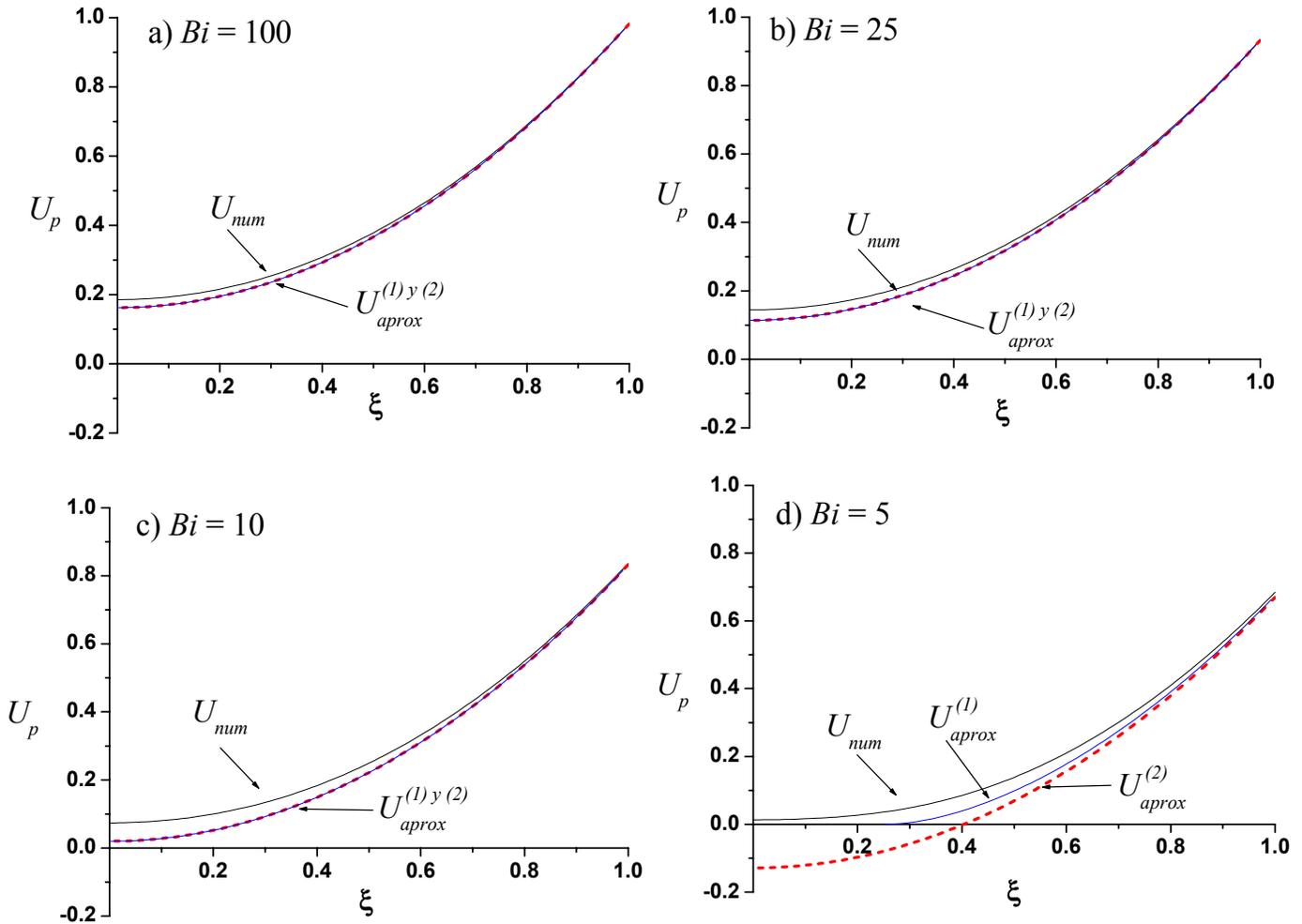


Figura III-1: Perfiles de concentración en la partícula como función del número de Biot,

en todos los casos $\Phi^2 = 5$, $\psi_{in} = 5$, $\psi_p = 0.1$, $U_{in} = 1$.

En la Figura III-2 se muestra una comparación similar a la anterior, solo que el parámetro variable en cada figura es el módulo de Thiele y se mantiene constante el número de Biot; se puede apreciar que al hacer un cambio del mismo orden de magnitud que en el caso anterior los perfiles se ven más afectados.

Se observa que al disminuir el módulo de Thiele los perfiles tienden cada vez más a las regiones positivas pues el efecto de la reacción intrapartícula se vuelve menos importante respecto al de la difusión. Mientras que al aumentar el módulo de Thiele, la solución aproximada que toma en cuenta el frente de agotamiento no sólo se acerca más a la solución numérica del problema exacto, sino que se mantiene en la región positiva, mientras que la solución aproximada que no involucra dicha idea predice valores cada vez más negativos en posiciones radiales inferiores al radio crítico.

Por otro lado, las concentraciones del fluido, la interfase y promedio en la partícula fueron evaluadas a distintos valores del número de Biot (Figura III-3) y del módulo de Thiele (Figura III-4).

En el primer caso se puede apreciar que, la concentración del fluido, predicha por las soluciones aproximadas y la exacta, es prácticamente la misma; mientras que la concentración en la superficie difiere en mayor proporción de la predicha por la solución aproximada que no contempla el frente de agotamiento, mientras que los resultados obtenidos con la otra solución se acercan mucho más a los obtenidos con la solución exacta. Por último en el caso de la concentración promedio se aprecia la formación de una campana en la zona negativa, predicha por la solución aproximada que no contempla el frente de reacción. Esto se debe a que cuando el número de Biot es bajo, la concentración promedio es prácticamente cero; posteriormente, al incrementar dicho parámetro, llega más reactivo a

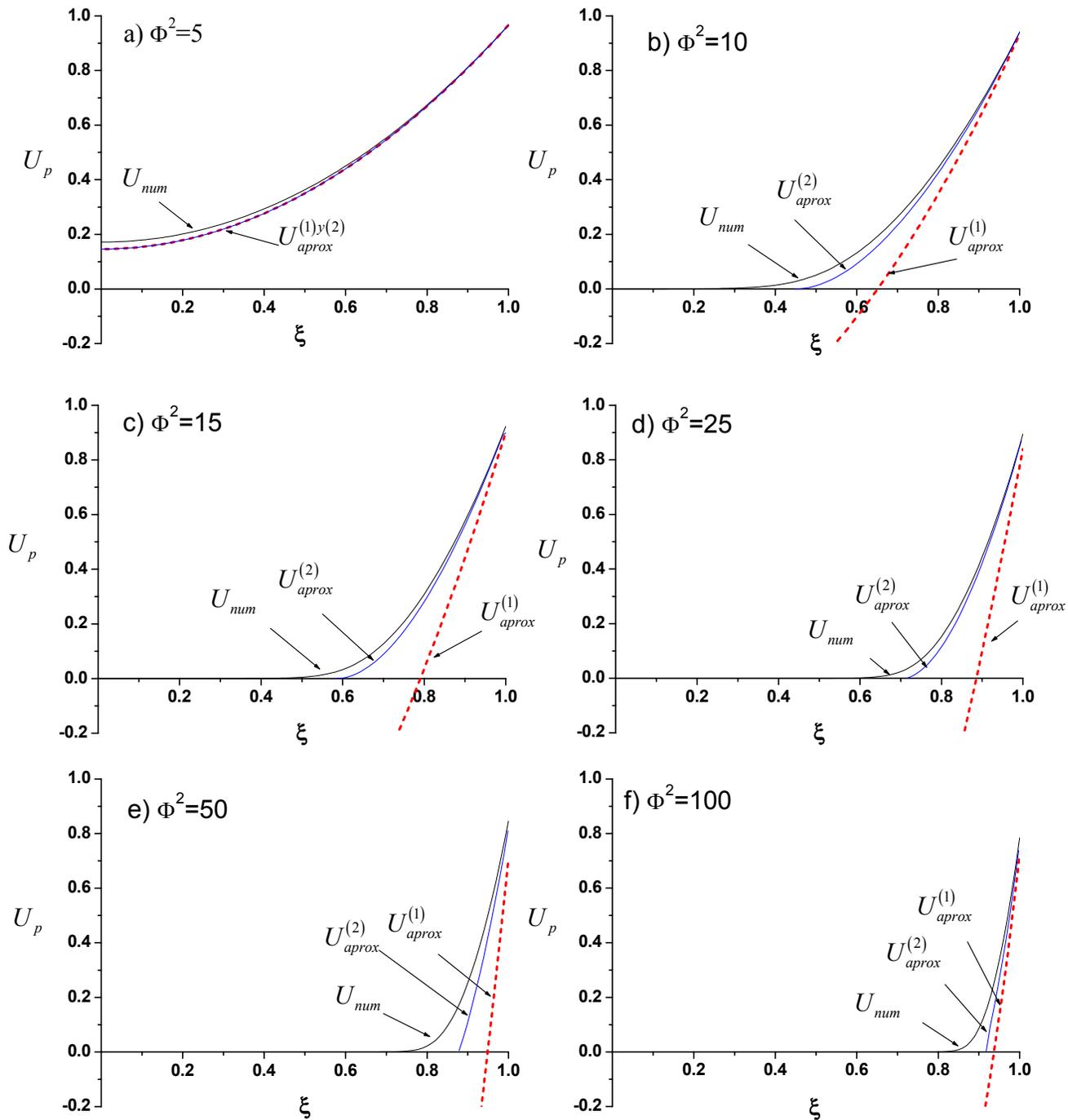


Figura III-2: Perfiles de concentración en la partícula como función del módulo de Thiele,

en todos los casos $Bi = 50$, $\psi_{in} = 5$, $\psi_p = 0.1$, $U_{in} = 1$.

la superficie, pero el efecto de la reacción, reflejado en el valor módulo de Thiele, es mayor que el de la difusión externa. Cabe mencionar que en el intervalo de valores del número de Biot que se manejaron, el radio crítico fue siempre mayor que cero.

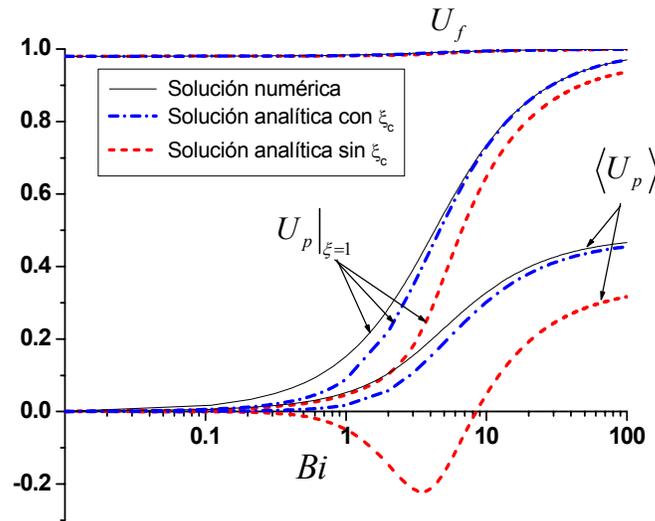


Figura III-3: Concentraciones en el fluido, la interfase y promedio en la partícula como función del número de Biot, para $\Phi^2 = 10$, $\psi_{in} = 5$ y $\psi_p = 0.1$.

En la Figura III-4 se muestra la funcionalidad de las soluciones aproximadas con el módulo de Thiele; es claro que a valores muy bajos de dicho parámetro la velocidad de reacción es tan lenta que las concentraciones tanto en el fluido, como en la interfase y en la partícula son prácticamente de la unidad.

Sin embargo, al incrementarse este parámetro, la reacción se vuelve cada vez más importante que la difusión dentro de la partícula, lo que se refleja en una disminución de las concentraciones.

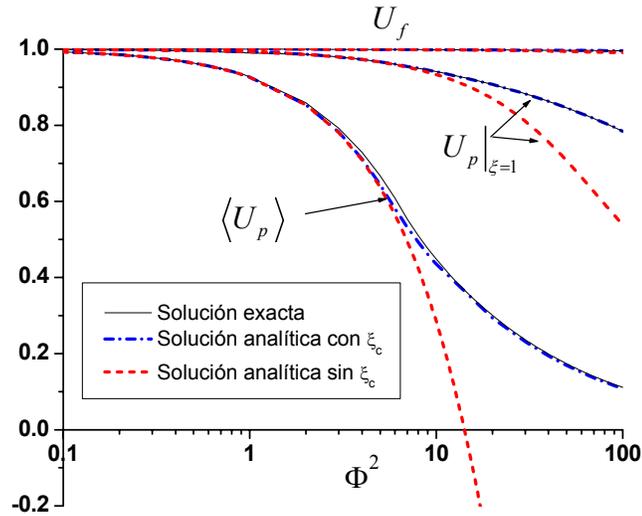


Figura III-4: Concentraciones en el fluido, la interfase y promedio en la partícula como función del módulo de Thiele, para $Bi = 50$, $\psi_{in} = 5$ y $\psi_p = 0.1$.

En este caso, al igual que en el anterior, las concentraciones predichas para el fluido, por las soluciones aproximadas y la exacta, son prácticamente las mismas; las concentraciones en la superficie predichas por las soluciones aproximadas difieren más conforme se incrementa el módulo de Thiele, ya que se hace necesario incorporar la idea del frente de agotamiento. Si bien la diferencia no es grande, lo es en el caso de la concentración promedio, donde la solución que no involucra al frente de reacción predice resultados negativos para valores del módulo de Thiele al cuadrado superiores a 11.

En todos los casos, la desviación que presenta la solución aproximada que contempla el frente de agotamiento respecto a la solución numérica exacta es bastante baja. Esto sugiere

que el método aproximado puede ser utilizado para casos dinámicos sin que se genere un error demasiado grande en $U_{f \text{ aprox}}$.

3.5.- Funcionalidad del radio crítico

En el Capítulo II se definió al radio crítico como la posición en la partícula donde se agota el reactivo; de la Ecuación (III-28) se puede observar que el radio crítico es función de varios parámetros, como son el número de Biot, el módulo de Thiele, ψ_{in} y ψ_p . Sin embargo, los parámetros en los que se tiene especial interés, debido a su significado físico, son el módulo de Thiele y el número de Biot, por lo que a continuación se muestran las gráficas de la dependencia del radio crítico con dichos parámetros (en las dos gráficas $\psi_{in} = 5$, $\psi_p = 0.1$). En la Figura III-5 se varía el número de Biot y se mantiene fijo el módulo de Thiele, mientras que en la Figura III-6 se varía el módulo de Thiele manteniendo constante el número de Biot.

En la Figura III-5 se confirma lo observado en la Figura III-3, ya que se observa que al aumentar el número de Biot disminuye el radio crítico, lo que se traduce en mayores concentraciones en la partícula, ya que llega más reactivo a la superficie de la misma.

En dicha figura se puede apreciar que en todos los casos el valor del radio crítico es la unidad cuando el número de Biot es pequeño, ya que llega muy poco reactivo a la partícula, mientras que al aumentar su valor alcanza un valor constante dependiendo del módulo de Thiele.

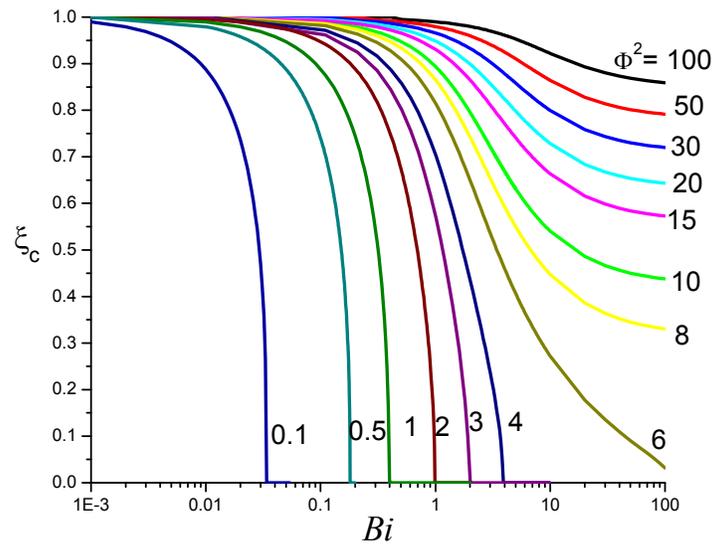


Figura III-5: Comportamiento del radio crítico (ξ_c) como función del número de Biot a distintos módulos de Thiele, en estado estacionario.

Lo anterior nos indica que, cuando el módulo de Thiele es suficientemente elevado, las soluciones aproximadas no coincidirán en sus resultados, al menos en la concentración promedio en la partícula, aún si el número de Biot es grande.

Por otro lado en la Figura III-6 se comprueban los resultados de la Figura III-4, ya que al aumentar en módulo de Thiele también lo hace el radio crítico, alcanzando el valor de la unidad cuando el efecto de este parámetro vence por completo el del número de Biot.

En este caso, se aprecia con mucha claridad que los cambios drásticos en el número de Biot, no afectan en la misma proporción a los resultados que se obtendrían si se modificara el módulo de Thiele. En los casos presentados se observa que los cambios más importantes se dan para módulos de Thiele al cuadrado entre 10 y 100, lo cual concuerda con la

tendencia negativa de la concentración promedio, predicha por la solución que no toma en cuenta al frente de agotamiento, mostrada en la Figura III-4.

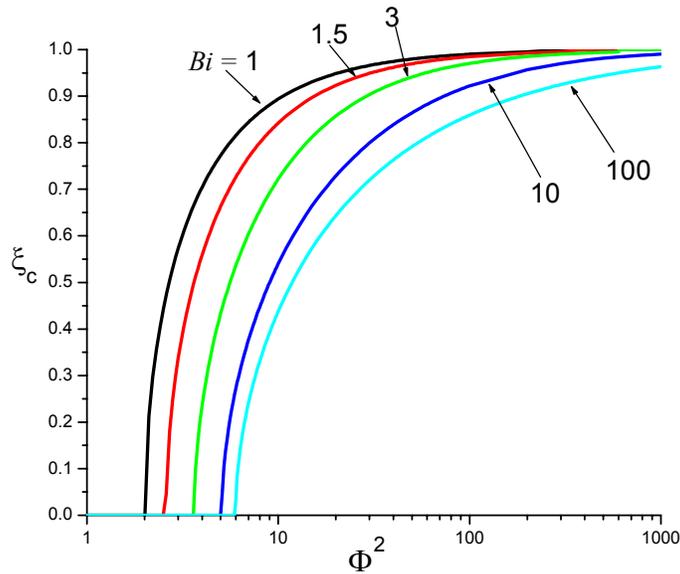


Figura III-6: Comportamiento del radio crítico (ξ_c) como función del módulo de Thiele a distintos números de Biot, en estado estacionario.

En general se puede decir que los resultados son muy similares, lo cual indica que el efecto que tiene el módulo de Thiele sobre el radio crítico es mayor que el del número de Biot.

Con los resultados obtenidos hasta el momento se tiene una mejor idea del tipo de perfiles a obtener en el caso dinámico, sin embargo aún no se abordará el modelo totalmente transitorio, sino que se resolverá el modelo en estado cuasiestacionario por la mayor simplicidad matemática que implica resolverlo.

La relevancia de los resultados reportados en este capítulo radica en que los resultados de los dos capítulos siguientes deben lograr reproducir, a tiempos elevados, los obtenidos

hasta el momento. Por lo que este capítulo sirve de guía sobre la forma en cómo afectan parámetros como el número de Biot y el módulo de Thiele a los resultados obtenidos con las soluciones aproximadas.

3.6.- Análisis de estabilidad del sistema.

Con las soluciones desarrolladas hasta este momento es posible realizar un análisis de estabilidad del sistema que se está analizando. Dado que el sistema se considera isotérmico, no es posible determinar la estabilidad a partir de balances acoplados de materia y energía, por lo que se sigue la metodología expuesta por Carberry (1976).

Partiendo de la Ecuación (III-2) y definiendo,

$$y_1 = \psi_{in}(U_{in}(\tau) - x) \quad (\text{III-29})$$

$$y_2 = \psi_p(x - U_p|_{\xi=1}) \quad (\text{III-30})$$

$$x = U_f \quad (\text{III-31})$$

es claro que la Ecuación (III-29) es una recta, mientras que la Ecuación (III-30) no necesariamente lo es, ya que depende de la concentración del sustrato en la superficie; para el caso de la solución aproximada que no toma en cuenta el frente de agotamiento, se tiene,

$$U_p|_{\xi=1} = \frac{Bi \left(\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} + x \right) \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}}{(Bi-1) \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1} + \sqrt{\Lambda_1} \text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1}} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{III-32})$$

por otro lado, la concentración superficial obtenida con la solución que si toma en cuenta el frente de agotamiento es,

$$U_p|_{\xi=1} = C_1 \left\{ \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1} + B_2 \text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \right\} \quad (\text{III-33})$$

donde,

$$C_1 = \frac{Bi \left(\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} + x \right)}{\left[\sqrt{\Lambda_1} + B_2 (Bi - 1) \right] \text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1} + \left[B_2 \sqrt{\Lambda_1} + (Bi - 1) \right] \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}} \quad (\text{III-34})$$

$$B_2 = \frac{\xi_c \sqrt{\Lambda_1} - \text{Tanh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi_c)}{1 - \sqrt{\Lambda_1} \xi_c \text{Tanh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi_c)}. \quad (\text{III-35})$$

De esta forma, se obtuvieron los resultados mostrados en la Figura III-7, donde se grafican y_1 y y_2 ; ésta última obtenida a partir de la solución aproximada sin usar la idea del radio crítico ($y_{2,1}$), usando esta idea ($y_{2,2}$) y con la solución numérica del problema exacto ($y_{2,3}$); como función de x ; se aprecia que en los dos casos analizados existe sólo una solución y que al disminuir el módulo de Thiele, las soluciones tienden al mismo valor, ya que el radio crítico tiende a cero.

La forma de las curvas de y_2 está en concordancia con los resultados mostrados en la Figura III-3.

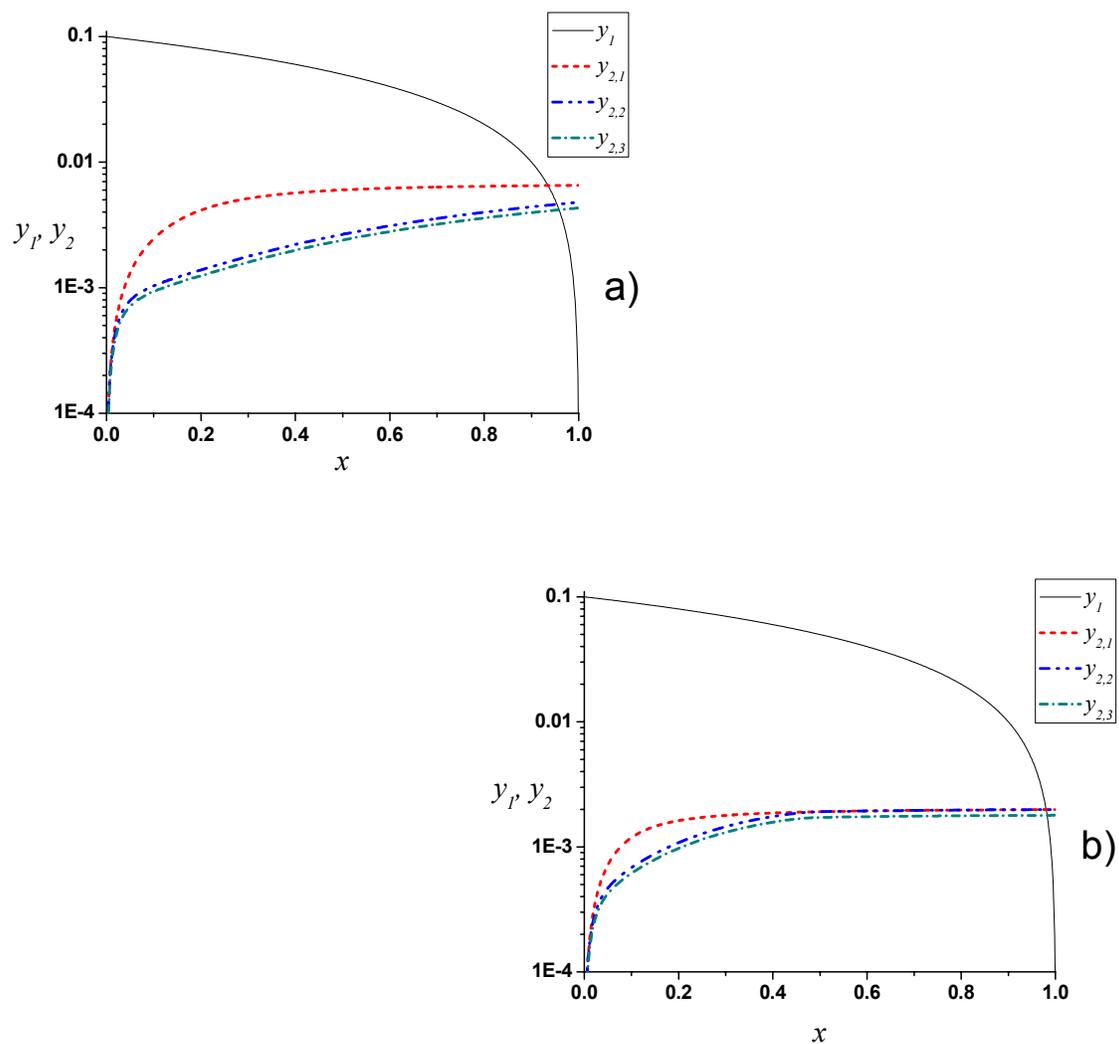


Figura III-7: Evaluación de estabilidad del sistema para, $Bi = 50$, $\psi_{in} = \psi_p = 0.1$, a) $\Phi^2 = 10$

b) $\Phi^2 = 3$.

Capítulo IV:

Solución en estado cuasiestacionario

4.1.- Planteamiento del problema

En este caso el problema está definido por:

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{dU_p}{d\xi} \right) = \Lambda_1 U_p + \Lambda_2 \quad (\text{IV-1})$$

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

Es importante recalcar que la Ecuación (IV-1) es válida siempre y cuando el tiempo necesario para alcanzar el estado estacionario sea corto, por lo que el tiempo característico en la ecuación de conservación en la partícula es grande, de tal forma que su contribución es despreciable comparada con la difusión y reacción intrapartícula.

Condiciones de frontera,

$$\text{En } \xi=1, \quad -\frac{dU_p}{d\xi} = Bi (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (\text{IV-3})$$

$$\text{En } 0 \leq \xi \leq 1, \quad U_p \text{ está definida} \quad (\text{IV-4})$$

Condición inicial:

$$\text{Cuando } \tau = 0 \quad U_f = U_{f_0} \quad (\text{IV-5})$$

4.2.- Solución sin frente de agotamiento

La solución de (IV-1), después de aplicar la condición dada por (IV-3), es:

$$U_p = \frac{Bi}{\left(Bi + \sqrt{\Lambda_1} \text{Coth} \sqrt{\Lambda_1} - 1\right)} \frac{\text{Senh} \sqrt{\Lambda_1} \xi \left(\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} + U_f \right)}{\xi \text{Senh} \sqrt{\Lambda_1}} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1}. \quad (\text{IV-6})$$

Como se puede notar la solución está en función de la solución en el fluido (U_f). Para obtener dicha solución se aplicó transformada de Laplace a (IV-2) obteniéndose:

$$\bar{U}_f(s) = \frac{U_{f_0}}{(s + \psi_{in} + \psi_p a_1)} + \frac{\psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{(s + \psi_{in} + \psi_p a_1)} - \left(\frac{\psi_p \Lambda_2 a_1}{\Lambda_1} \right) \frac{1}{s(s + \psi_{in} + \psi_p a_1)}. \quad (\text{IV-7})$$

Los detalles de ésta solución se encuentran en el Apéndice A-4. En la Ecuación (IV-7) se usó la definición:

$$a_1 = \frac{\sqrt{\Lambda_1} \text{Coth} \sqrt{\Lambda_1} - 1}{Bi + \sqrt{\Lambda_1} \text{Coth} \sqrt{\Lambda_1} - 1}. \quad (\text{IV-8})$$

La transformada inversa de (IV-7) es:

$$U_f(\tau) = e^{-(\psi_{in} + \psi_p a_1)\tau} \left(U_{f_0} + \psi_{in} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta + \psi_p a_1 a_3 \right) - \psi_p a_1 a_3. \quad (\text{IV-9})$$

Donde:

$$a_3 = \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1 (\psi_{in} + \psi_p a_1)} \quad (\text{IV-10})$$

Sustituyendo (IV-9) en (IV-6) se obtiene:

$$U_p(\xi, \tau) = \frac{a_2 \text{Senh} \sqrt{\Lambda_1} \xi}{\xi} \left[\psi_{in} a_3 + e^{-(\psi_{in} + \psi_p a_1)\tau} \left(U_{f_0} + \psi_{in} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta + \psi_p a_1 a_3 \right) \right] - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{IV-11})$$

donde:

$$a_2 = \frac{Bi}{\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1} (Bi + \sqrt{\Lambda_1} \text{Coth}\sqrt{\Lambda_1} - 1)} \quad (\text{IV-12})$$

Por último se calculará la concentración promedio en la partícula usando el operador definido en la Ecuación (III-15), obteniendo:

$$\begin{aligned} \langle U_p \rangle = & 3a_2 \frac{\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}}{\Lambda_1} (\sqrt{\Lambda_1} \text{Coth}\sqrt{\Lambda_1} - 1) [\psi_{in} a_3 \\ & + e^{-(\psi_{in} + \psi_p a_1)\tau} (U_{f_0} + \psi_{in} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta + \psi_p a_1 a_3)] - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \end{aligned} \quad (\text{IV-13})$$

4.3.- Función de entrada

Para poder realizar la evaluación de las soluciones obtenidas son necesarias las concentraciones de entrada $U_{in}(\tau)$, en éste trabajo se proponen 3 formas:

i) Función escalón:

$$U_{in}(\tau) = U(\tau - \tau_0) = \begin{cases} 1 & \tau \geq \tau_0 \\ 0 & \tau < \tau_0 \end{cases} \quad (\text{IV-14})$$

ii) Pulso Finito

$$U_{in}(\tau) = \begin{cases} 0 & \tau > \tau_2 \\ 1 & \tau_1 \leq \tau \leq \tau_2 \\ 0 & \tau < \tau_1 \end{cases} \quad (\text{IV-15})$$

iii) Función Oscilatoria

$$U_{in}(\tau) = \begin{cases} 1 + 0.5 \text{Sen}(10\pi\tau) & \tau \geq \tau_0 \\ 1 & \tau < \tau_0 \end{cases} \quad (\text{IV-16})$$

Entonces es necesario sustituir cada uno de estos casos en las soluciones anteriores, particularmente en:

$$\int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \quad (\text{IV-17})$$

Sustituyendo (IV-14) en (IV-17):

$$\int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta = \begin{cases} \int_{\tau_0}^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\beta} d\beta = \frac{e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\tau} - e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\tau_0}}{\psi_{in} + \psi_p a_1} & \tau \geq \tau_0 \\ 0 & \tau < \tau_0 \end{cases} \quad (\text{IV-18})$$

Sustituyendo (IV-15) en (IV-17)

$$\int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta = \begin{cases} 0 & \tau > \tau_2 \\ \int_{\tau_1}^{\tau_2} e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\beta} d\beta = \frac{e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\tau_2} - e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\tau_1}}{\psi_{in} + \psi_p a_1} & \tau_1 \leq \tau \leq \tau_2 \\ 0 & \tau < \tau_1 \end{cases} \quad (\text{IV-19})$$

Por último, sustituyendo (IV-16) en (IV-17):

$$\int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta = \frac{e^{f_1 \tau} - 1}{f_1} + \frac{0.5 f_2}{f_1^2 + f_2^2} \left[e^{f_1 \tau} \left(\frac{f_1}{f_2} \text{Sen}(f_2 \tau) - \text{Cos}(f_2 \tau) \right) - e^{f_1 \tau_0} \left(\frac{f_1}{f_2} \text{Sen}(f_2 \tau_0) - \text{Cos}(f_2 \tau_0) \right) \right] \quad (\text{II-20})$$

Donde:

$$f_1 = \psi_{in} + \psi_p a_1, \quad f_2 = 10\pi \quad (\text{II-21 a,b})$$

4.4.- Solución con frente de agotamiento

En este caso, se debe cambiar la condición de frontera de (IV-4) por:

$$\text{En } \xi = \xi_c \quad \frac{dU_p}{d\xi} = 0 \quad (\text{IV-22})$$

La solución de (IV-1) es ahora:

$$U_p = \frac{1}{B_1} \left(\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} + U_f \right) \left[\frac{\text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi)}{\xi} + B_2 \frac{\text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi)}{\xi} \right] - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{IV-23})$$

Donde:

$$B_1 = \frac{(\sqrt{\Lambda_1} + B_2 (Bi - 1)) \text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1}) + (B_2 \sqrt{\Lambda_1} + Bi - 1) \text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1})}{Bi} \quad (\text{IV-24})$$

$$B_2 = \frac{\sqrt{\Lambda_1} \xi_c - \text{Tanh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi_c)}{1 - \sqrt{\Lambda_1} \xi_c \text{Tanh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi_c)} \quad (\text{IV-25})$$

Mientras que la solución para el fluido es:

$$U_f = e^{-B_4 \tau} \left(U_{f0} + \psi_{in} \int_0^\tau e^{B_4 \beta} U_{in}(\beta) d\beta - \psi_p \frac{(B_3 - 1) \Lambda_2}{B_4 \Lambda_1} \right) + \psi_p \frac{(B_3 - 1) \Lambda_2}{B_4 \Lambda_1} \quad (\text{IV-26})$$

Donde:

$$B_3 = \frac{[\text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1}) + B_2 \text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1})]}{B_1} \quad (\text{IV-27})$$

$$B_4 = \psi_{in} + \psi_p (1 - B_3) \quad (\text{IV-28})$$

y por último, la concentración promedio es:

$$\begin{aligned}
\langle U_p \rangle = & 3 \frac{1}{B_1} \left(\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} + U_f \right) \left\{ \frac{1}{\sqrt{\Lambda_1}} \left(\text{Cosh} \sqrt{\Lambda_1} - \xi_c \text{Cosh} \sqrt{\Lambda_1} \xi_c \right) - \frac{1}{\Lambda_1} \left(\text{Senh} \sqrt{\Lambda_1} - \text{Senh} \sqrt{\Lambda_1} \xi_c \right) \right. \\
& \left. + B_2 \left[\frac{1}{\sqrt{\Lambda_1}} \left(\text{Senh} \sqrt{\Lambda_1} - \xi_c \text{Senh} \sqrt{\Lambda_1} \xi_c \right) - \frac{1}{\Lambda_1} \left(\text{Cosh} \sqrt{\Lambda_1} - \text{Cosh} \sqrt{\Lambda_1} \xi_c \right) \right] \right\} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} (1 - \xi_c^3)
\end{aligned}
\tag{IV-29}$$

En el Apéndice A-4 se demuestra la equivalencia de las dos soluciones cuando $\xi_c = 0$.

4.5.- Evaluación

Primeramente se muestran en la Figura IV-1 las gráficas del avance, de los perfiles de concentración, en el tiempo a valores fijos del módulo de Thiele y el número de Biot; en ellas se hace una comparación de los valores que da la solución numérica del problema exacto y las dos soluciones aproximadas. La función de entrada que se usó fue de tipo escalón unitario. Es importante notar cómo durante las cuatro primeras gráficas la solución aproximada que no toma en cuenta el frente de agotamiento comienza dando valores negativos, carentes de sentido físico; debido a que la cantidad de reactivo que ha llegado a la partícula es tan baja que ocupa sólo una fracción del área disponible para reaccionar, lo cual hace necesario tomar en cuenta el frente de agotamiento, por ello los perfiles de $U_{aprox}^{(2)}$ se encuentran más cercanos a los predichos por la solución numérica exacta. Cuando el tiempo es lo suficientemente grande para que se ocupe toda el área disponible, entonces las dos soluciones aproximadas coinciden, ya que, como se demuestra en el Apéndice A-4,

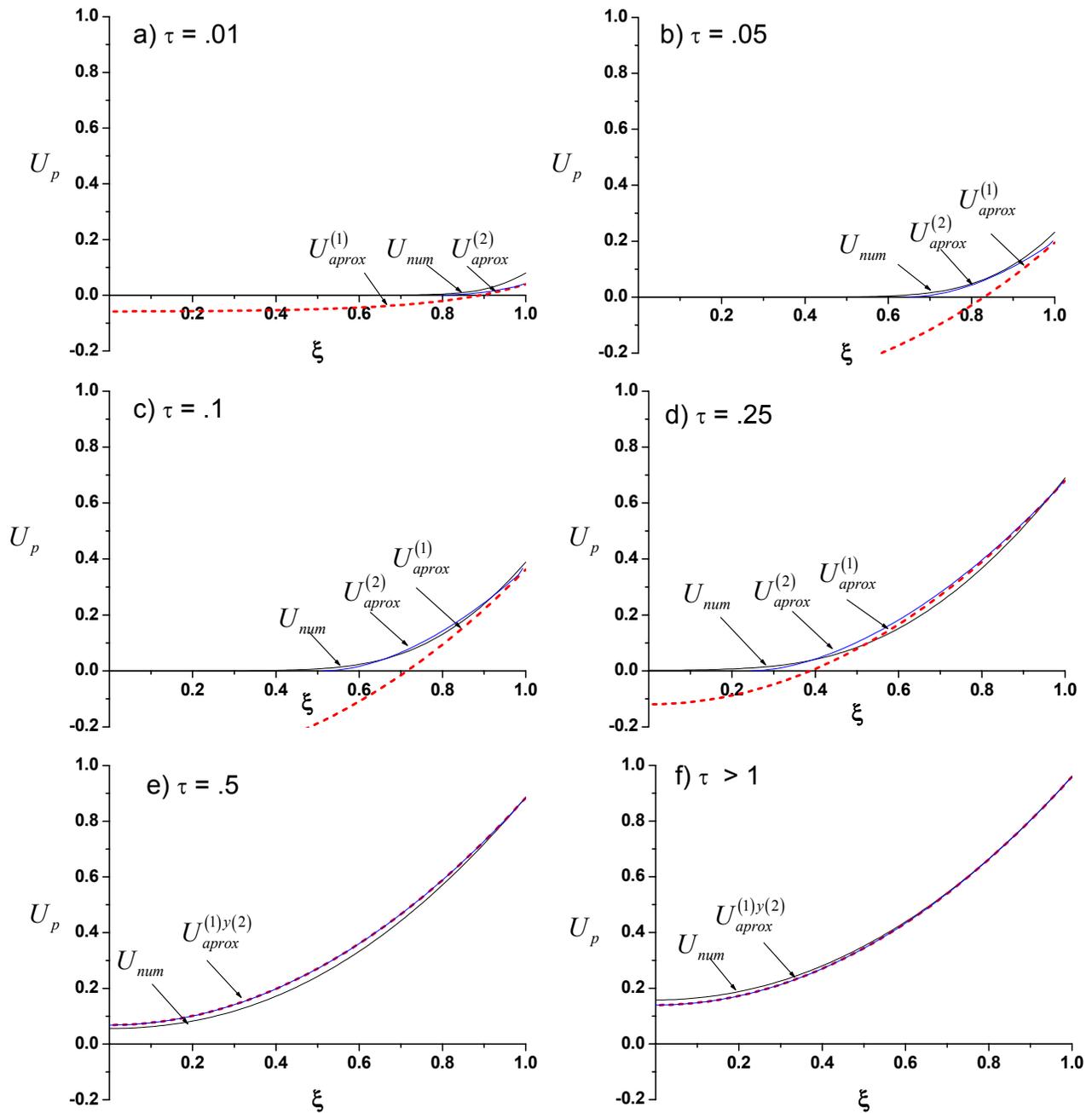


Figura IV-1: Perfiles de concentración en la partícula como función del tiempo y su

comparación con la solución numérica para $Bi = 50$, $\Phi^2 = 5$, $\psi_{in} = 5$ y

$$\psi_p = 0.1.$$

cuando $\xi_c = 0$, se recupera la solución aproximada que no considera el frente de agotamiento, a partir de la que sí lo hace.

La Figura IV-2, es similar a la anterior, sólo que se muestra ahora la funcionalidad con el módulo de Thiele para un número de Biot y tiempo fijos, se eligió un tiempo que no fuera el correspondiente al estado estacionario. En dicha figura se puede apreciar cómo al ir disminuyendo el módulo de Thiele el perfil de concentración de la solución aproximada, que no incluye el radio crítico, pasa de valores negativos a positivos coincidiendo con la solución que sí toma en cuenta el frente de agotamiento sólo cuando el módulo de Thiele es bajo. Esta figura corrobora los perfiles mostrados en la Figura III-2, donde se muestran los perfiles en estado estacionario.

Por último en la Figura IV-3 se muestra la funcionalidad con el número de Biot, al igual que en el caso anterior se eligió un tiempo que no fuera el del estado estacionario. La funcionalidad de los perfiles con este parámetro con el tiempo es similar a la observada en la Figura IV-1. Es decir, conforme aumenta este parámetro las concentraciones se incrementan ya que llega más reactivo a la partícula. Sin embargo, se necesitan cambios más drásticos en el número de Biot, que en el tiempo, para que se ocupe toda el área disponible para la reacción.

De lo anterior, se puede afirmar que los perfiles de concentración dentro de la partícula, son más sensibles a cambios en el tiempo y en el módulo de Thiele que en el número de Biot. Ya que este último parámetro influye más la relación entre la concentración en la superficie de la partícula y la del fluido.

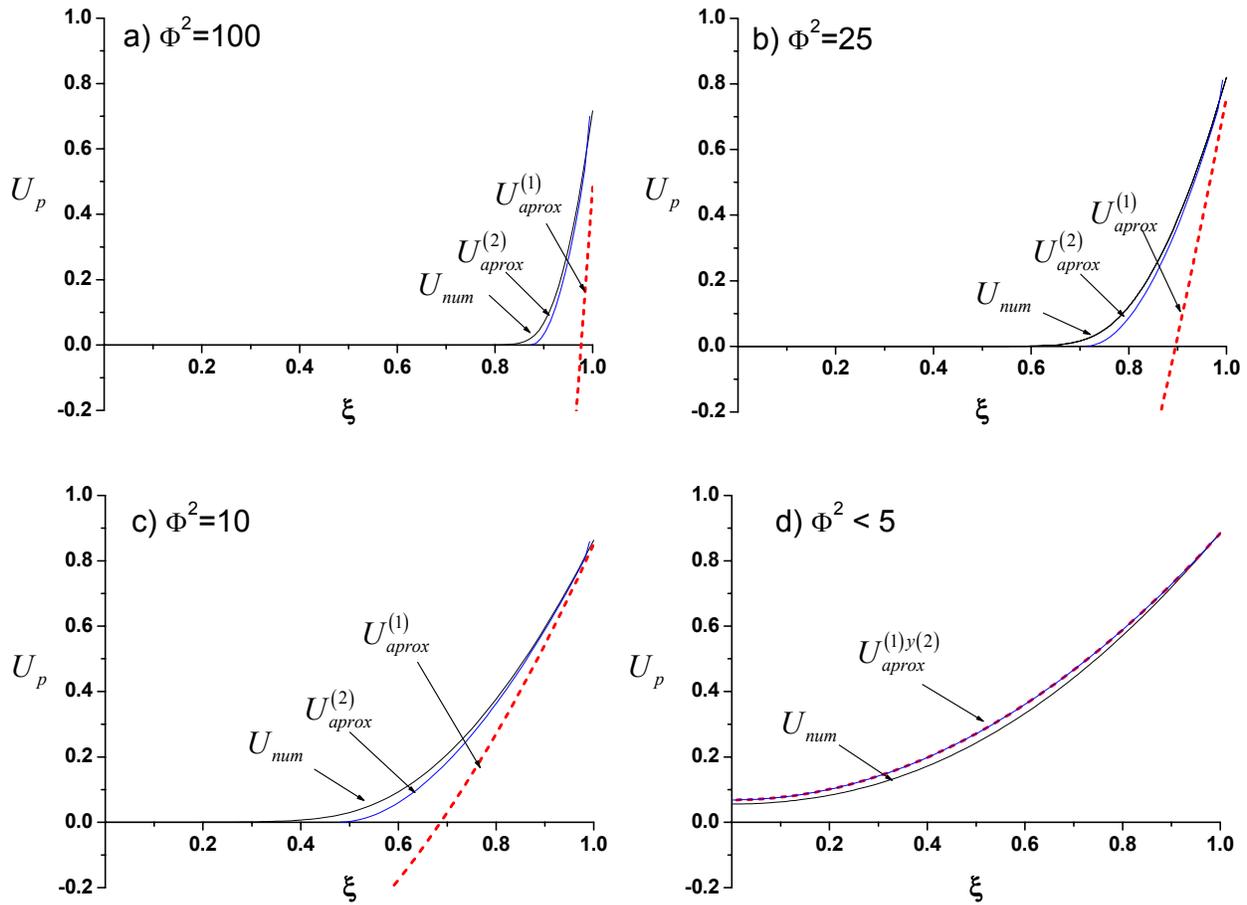


Figura IV-2: Perfiles de concentración en la partícula como función del módulo de Thiele y su comparación con la solución numérica para $Bi = 50$, $\tau = 0.5$, $\psi_m = 5$ y $\psi_p = 0.1$.

Con el fin de observar el comportamiento dinámico del radio crítico con el módulo de Thiele, se hicieron varias pruebas que se resumen en la Figura IV-4. Esta figura es análoga a la Figura III-5 que se hizo en estado estacionario, ya que la funcionalidad del radio crítico con el número de Biot es similar a la dependencia con el tiempo.

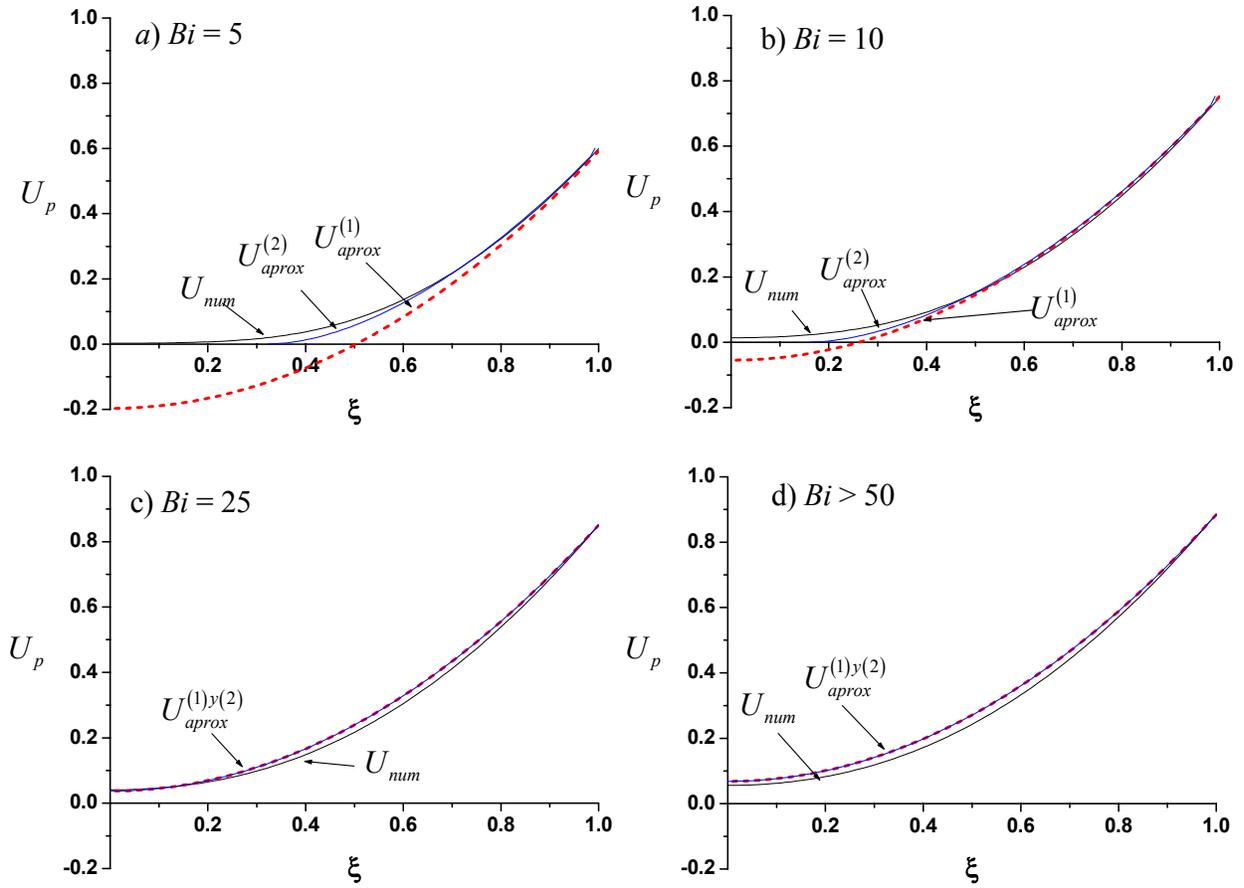


Figura IV-3: Perfiles de concentración en la partícula como función del número de Biot y su comparación con la solución numérica para $\Phi^2 = 5$, $\tau = 0.5$, $\psi_{in} = 5$ y $\psi_p = 0.1$.

Como se puede notar a valores bajos del módulo de Thiele el radio crítico alcanza (en el estado estacionario) un valor de cero; mientras que, al aumentar este parámetro, se alcanzan valores constantes, lo cual concuerda con los resultados obtenidos en el capítulo anterior. Al inicio de todas las pruebas el radio crítico tiene el valor de la unidad debido a que no se ha iniciado la reacción.

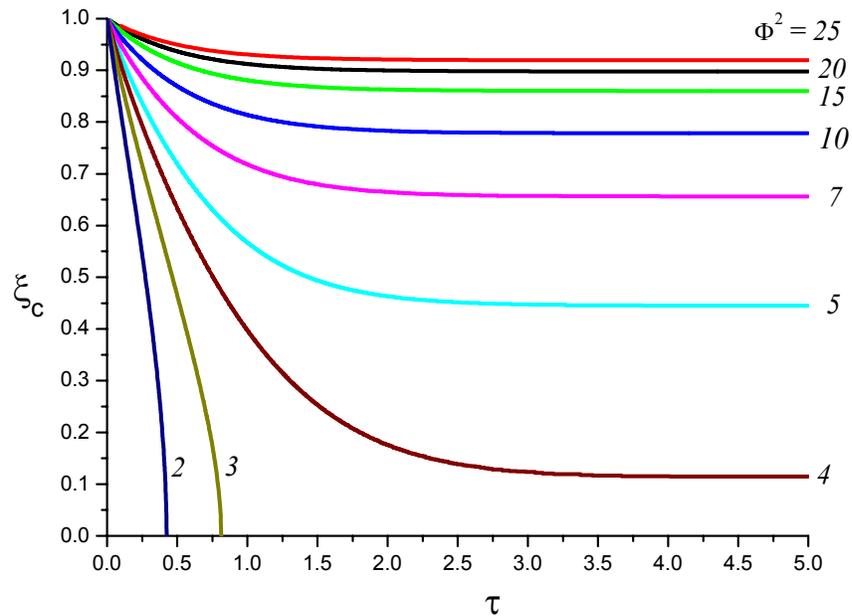


Figura IV-4: Comportamiento dinámico de ξ_c , de la solución con la suposición de estado cuasiestacionario en la partícula, para diferentes valores de Φ^2 , manteniendo fijos $Bi = 10$, $\psi_{in} = 1$ y $\psi_p = 0.1$.

Un aspecto que no se debe perder de vista es el hecho de que a pesar que aquí se presenta el comportamiento dinámico del radio crítico, cuando se resolvió el modelo se consideró

como una constante en el tiempo, lo cual le confiere un carácter de aproximado a las soluciones desarrolladas, además de la expansión en series y truncamiento del término de reacción.

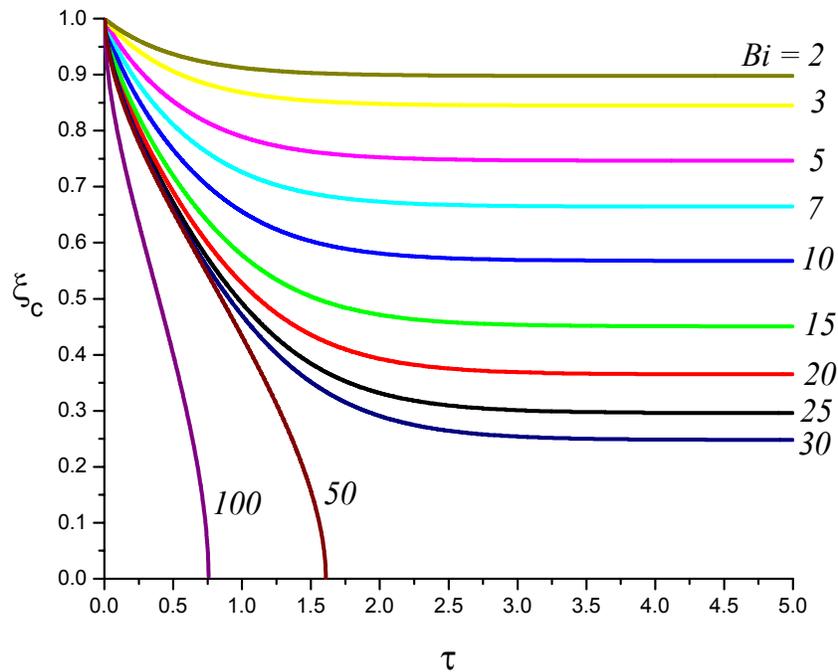


Figura IV-5: Comportamiento dinámico de ξ_c , de la solución con la suposición de estado cuasiestacionario en la partícula, para diferentes valores de Bi , manteniendo fijos $\Phi^2 = 5$, $\psi_{in} = 2$ y $\psi_p = 0.1$.

En la Figura IV-5, se muestra la funcionalidad del radio crítico con el tiempo y el número de Biot. Se puede observar una tendencia inversa al caso anterior; es decir, al aumentar este parámetro disminuye el radio crítico, lo cual se debe a que llega más reactivo a la superficie de la partícula.

Al igual que en el caso anterior, el radio crítico adquiere, en el estado estacionario, valores constantes los cuales están entre cero y uno dependiendo del valor del número de Biot.

4.6.- Evaluación II: Concentraciones en el fluido, promedio en la partícula e interfase

En el Apéndice C-1 se presentan las evaluaciones de las concentraciones en el fluido, en la interfase sólido-fluido y promedio en la partícula; se utilizaron las tres funciones de entrada de las que se habló anteriormente. En el caso de la función pulso finito se examinaron dos casos, en el primero $\tau_1 = 0.8$ y $\tau_2 = 1.3$, mientras que en el segundo $\tau_1 = 0.8$ y $\tau_2 = 0.81$.

Todas las evaluaciones se hicieron de la misma forma; es decir, primeramente se usó un número de Biot bajo y se ensayaron dos módulos de Thiele y se repitió el procedimiento para un número de Biot elevado; en cada caso se incluyen gráficas del comportamiento dinámico del radio crítico para tener una mejor idea de la respuesta del frente de agotamiento respecto a las distintas funciones de entrada.

Los comentarios referentes a las soluciones que se obtienen con los tres tipos de funciones de entrada son similares: al incrementar el módulo de Thiele los perfiles en el promedio en la partícula y la concentración interfacial se vuelven más distintos de la solución numérica en general, siendo la desviación menor en el caso de la solución que contempla el frente de agotamiento; por otro lado al incrementar el número de Biot, las soluciones en el fluido y en la interfase se vuelven muy similares, lo cual es de esperarse pues elevar el número de Biot equivale a disminuir las resistencias externas a la transferencia de masa. En este caso

la mejora que introduce el tomar en cuenta el frente de agotamiento sólo es visible a tiempos bajos, si el módulo de Thiele es alto.

En todos los casos, salvo a tiempos cortos, la desviación predicha, por las soluciones aproximadas y la exacta, para la concentración del fluido, es la menor de las tres.

Por medio de las gráficas del comportamiento dinámico del frente de agotamiento se puede apreciar que, en general, al inicio en todos los casos el radio crítico es la unidad, pues no ha ingresado el reactivo al sistema, lo cual concuerda con lo observado en las figuras IV-4 y IV-5. Por otro lado, cuando el módulo de Thiele es bajo, el radio crítico logra alcanzar el valor de cero en el estado estacionario, mientras que cuando se incrementa dicho parámetro alcanza un determinado valor constante, lo cual corrobora lo presentado en la Figura III-5 del capítulo anterior. Además se encontró que al incrementar el número de Biot disminuye el radio crítico aunque no en una forma tan drástica como lo hace el cambiar el módulo de Thiele, lo cual no contradice lo presentado en la Figura III-6.

Por último, es importante mencionar el por qué de usar dos duraciones para las funciones pulso finito. Como se puede notar en las últimas figuras al usar un pulso de duración más pequeña las soluciones aproximada y exacta se parecen grandemente, ya que no hay suficiente tiempo para que se desvíen los valores, como en el caso de una duración más grande.

Capítulo V:

Solución en estado transitorio

5.1.- Planteamiento del problema

En este capítulo se aborda el problema completo, es decir, en estado transitorio, el contenido es similar al del capítulo anterior excepto que ahora se incluyen comparaciones con el caso cuasiestacionario. Del Capítulo I retomamos la definición del problema:

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Lambda_1 U_p - \Lambda_2 \quad (\text{V-1})$$

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

Condiciones de frontera:

$$\text{En } \xi = 1, \quad -\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = Bi (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (\text{V-3})$$

$$\text{En } 0 \leq \xi \leq 1, \quad U_p \text{ está definida} \quad (\text{V-4})$$

Condiciones iniciales:

$$\text{Cuando } \tau = 0, \quad U_f = U_{f_0} \quad (\text{V-5})$$

$$U_p = U_{p_0} \quad (\text{V-6})$$

5.2.- Solución sin frente de agotamiento

Las soluciones de (V-1) y (V-2) en el dominio de Laplace son (los detalles detrás de estas ecuaciones están en el Apéndice A-5):

$$\bar{U}_p = \frac{U_{p0}}{\alpha^2} - \frac{\Lambda_2}{s\alpha^2} + Bi \frac{\text{Senh}(\alpha\xi)}{\alpha M(s)\xi} \left[\psi_{in} \bar{U}_{in}(s) + \frac{\alpha^2 U_{f0} - U_{p0}(s + \psi_{in})}{\alpha^2} + \frac{\Lambda_2(s + \psi_{in})}{\alpha^2 s} \right] \quad (\text{V-7})$$

$$\begin{aligned} \bar{U}_f &= \frac{U_{f0} + \psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{\beta} + \frac{\psi_p}{\alpha^2 \beta} \left(U_{p0} - \frac{\Lambda_2}{s} \right) \\ &+ Bi \frac{\psi_p}{\beta} \frac{\text{Senh}(\alpha)}{M(s)\alpha} \left(\psi_{in} \bar{U}_{in}(s) + \frac{\alpha^2 U_{f0} - U_{p0}(s + \psi_{in})}{\alpha^2} + \frac{\Lambda_2(s + \psi_{in})}{\alpha^2 s} \right) \end{aligned} \quad (\text{V-8})$$

donde:

$$\alpha^2 = \Lambda_1 + s \quad (\text{V-9})$$

$$\beta = s + \psi_{in} + \psi_p \quad (\text{V-10})$$

Aplicando transformada inversa a las ecuaciones (V-7) y (V-8):

$$U_p = \frac{Bi}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Sen}(\mu_n \xi) e^{-(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{D_n \text{Sen}(\mu_n)} \left\{ U_{f0} + \psi_{in} I_{in}(\tau) + \frac{(\mu_n^2 + \Lambda_1 - \psi_{in})}{\mu_n^2} \left[\frac{\Lambda_2 (e^{(\Lambda_1 + \mu_n^2)\tau} - 1)}{\Lambda_1 + \mu_n^2} - U_{p0} \right] \right\} \quad (\text{V-11})$$

$$U_f = Bi \psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{A_n D_n} \left\{ U_{f0} + \psi_{in} I_{in}(\tau) + \frac{(\mu_n^2 + \Lambda_1 - \psi_{in})}{\mu_n^2} \left[\frac{\Lambda_2 (e^{(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau} - 1)}{(\mu_n^2 + \Lambda_1)} - U_{p0} \right] \right\} \quad (\text{V-12})$$

donde:

$$I_{in}(\tau) = \int_0^\tau e^{(\mu_n^2 + \Lambda_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \quad (\text{V-13})$$

$$A_n = \psi_{in} + \psi_p - \mu_n^2 - \Lambda_1 \quad (\text{V-14})$$

$$B_n = (\psi_{in} - \mu_n^2 - \Lambda_1)(Bi - 1) - \psi_p \quad (\text{V-15})$$

$$D_n = Bi - 1 - \frac{B_n}{A_n} + \frac{B_n}{2\mu_n^2} \left(1 + \frac{B_n}{A_n} \right) + \frac{A_n}{2} \quad (\text{V-16})$$

y μ_n son las raíces de:

$$A_n \text{Cos}(\mu_n) + B_n \frac{\text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} = 0 \quad (\text{V-17})$$

por último se calculó la concentración promedio en la partícula con la definición (IV-15):

$$\langle U_p \rangle = 3Bi \sum_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{B_n}{A_n} \right) \frac{e^{-(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{\mu_n^2 D_n} \left\{ U_{f0} + \psi_{in} I_{in}(\tau) + \frac{(\mu_n^2 + \Lambda_1 - \psi_{in})}{\mu_n^2} \left[\frac{\Lambda_2 (e^{(\Lambda_1 + \mu_n^2)\tau} - 1)}{\Lambda_1 + \mu_n^2} - U_{p0} \right] \right\} \quad (\text{V-18})$$

Las funciones de entrada a sustituir en la integral de (V-13) fueron definidas en las ecuaciones (IV-14), (IV-15) y (IV-16), por lo que:

i) *Función escalón:*

$$I_{in}(\tau) = \begin{cases} \frac{e^{(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau} - e^{(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau_0}}{(\mu_n^2 + \Lambda_1)} & \tau \geq \tau_0 \\ 0 & \tau < \tau_0 \end{cases} \quad (\text{V-19})$$

ii) *Pulso finito:*

$$I_{in}(\tau) = \begin{cases} 0 & \tau > \tau_2 \\ \frac{e^{(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau_2} - e^{(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau_1}}{(\mu_n^2 + \Lambda_1)} & \tau_1 \leq \tau \leq \tau_2 \\ 0 & \tau < \tau_1 \end{cases} \quad (\text{V-20})$$

iii) *Función Oscilatoria:*

$$I_{in}(\tau) = \frac{e^{g_1\tau} - 1}{g_1} + \frac{0.5g_2}{g_1^2 + g_2^2} \begin{bmatrix} e^{g_1\tau} \left(\frac{g_1}{g_2} \text{Sen}(g_2\tau) - \text{Cos}(g_2\tau) \right) \\ -e^{g_1\tau_0} \left(\frac{g_1}{g_2} \text{Sen}(g_2\tau_0) - \text{Cos}(g_2\tau_0) \right) \end{bmatrix} \quad (\text{V-21})$$

donde:

$$g_1 = \mu_n^2 + \Lambda_1 \quad (\text{V-22})$$

$$g_2 = 10\pi \quad (\text{V-23})$$

Ahora pasaremos a la evaluación de esta solución, para posteriormente desarrollar la solución con frente de agotamiento.

5.3.- Evaluación I: Sin frente de agotamiento.

La primera evaluación corresponde a los perfiles concentración de la partícula como función del tiempo. En la Figura V-1 se muestra la comparación de esta solución con la correspondiente solución numérica en estado estacionario (U_{num}) y con la solución analítica en estado estacionario ($U_{aprox}^{(1)}$). Como se espera, al aumentar el tiempo las soluciones convergen; la desviación media relativa entre la solución analítica y la numérica es de 3.75%.

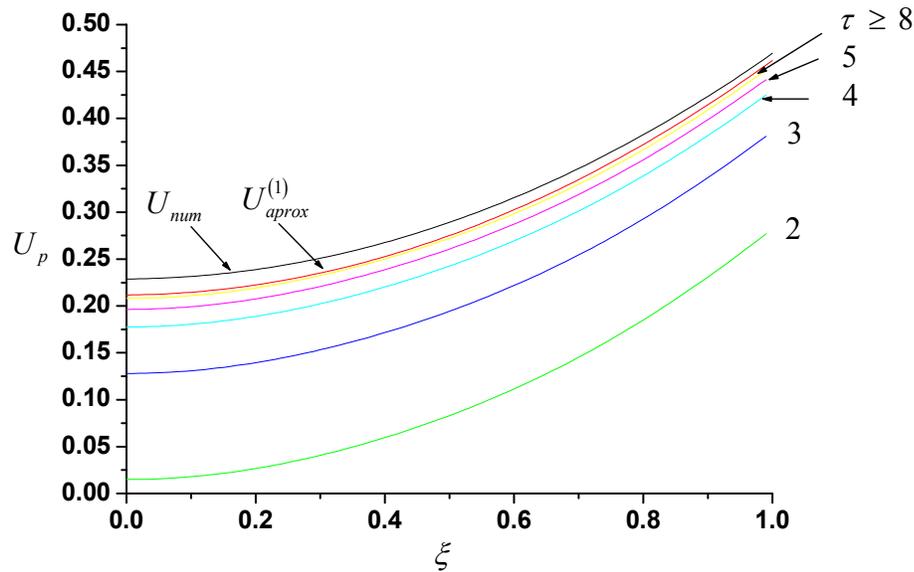


Figura V-1: Perfil de concertación de la partícula como función del tiempo para los

parámetros $\Phi^2 = 1.5$, $Bi = 1$, $\psi_{in} = 1$, $\psi_p = 0.1$, $U_{f_0} = U_{p_0} = \tau_0 = 0$.

Más adelante se presenta, en las figuras V-4 a V-6, gráficas más detalladas sobre la funcionalidad con el tiempo, el módulo de Thiele y el número de Biot, incluyendo la comparación con la solución numérica en estado transitorio y con la solución aproximada que toma en cuenta el frente de agotamiento. Mientras que en la Figura V-7, se muestra la comparación con el caso cuasiestacionario.

Por el momento, se presentará el desarrollo de la solución con frente de agotamiento, para posteriormente presentar las figuras mencionadas.

5.4.- Solución con frente de agotamiento

En este caso la condición dada por (V-4) se reemplaza por,

$$\text{En } \xi = \xi_c, \quad \frac{\partial U_p}{\partial \xi} = 0 \quad (\text{V-24})$$

Por lo que las soluciones para la concentración en la partícula y en el fluido son ahora en el dominio de Laplace:

$$\begin{aligned} \bar{U}_p = & -\frac{\Lambda_2}{s\alpha^2} + \frac{U_{p0}}{\alpha^2} \\ & + \frac{Bi}{N(s)} \left[(1 - \alpha\xi_c \text{Tanh}(\alpha\xi_c)) \frac{\text{Senh}(\alpha\xi)}{\alpha\xi} + \left(\xi_c - \frac{\text{Tanh}(\alpha\xi_c)}{\alpha} \right) \frac{\text{Cosh}(\alpha\xi)}{\xi} \right] \\ & \left[\frac{U_{f0}\alpha^2 - (s + \psi_{in})U_{p0}}{\alpha^2} + \psi_{in}\bar{U}_{in}(s) + (s + \psi_{in})\frac{\Lambda_2}{s\alpha^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{V-25})$$

$$\begin{aligned} \bar{U}_f = & \frac{U_{f0}}{\beta} + \frac{\psi_{in}\bar{U}_{in}(s)}{\beta} - \frac{\Lambda_2\psi_p}{s\alpha^2\beta} + \frac{U_{p0}\psi_p}{\alpha^2\beta} \\ & + \frac{Bi\psi_p}{\beta N(s)} \left((1 - \alpha\xi_c \text{Tanh}(\alpha\xi_c)) \frac{\psi_p \text{Senh}(\alpha)}{\alpha} + \left(\xi_c - \frac{\text{Tanh}(\alpha\xi_c)}{\alpha} \right) \text{Cosh}(\alpha) \right) \\ & \left(\frac{U_{f0}\alpha^2 - (s + \psi_{in})U_{p0}}{\alpha^2} + \psi_{in}\bar{U}_{in}(s) + \frac{\Lambda_2(s + \psi_{in})}{s\alpha^2} \right) \end{aligned} \quad (\text{V-26})$$

Es muy importante notar que para obtener la solución se consideró a ξ_c como constante en el tiempo, sin embargo, como se mostrará más adelante, esto no es del todo cierto, por lo que ésta simplificación le da, además del uso de la metodología de Marroquín y col., un carácter de aproximado a la solución. Pasando las dos ecuaciones del dominio de Laplace al dominio del tiempo, se obtienen:

$$U_p = Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{\chi_n H_n \xi \text{Sen}(\chi_n)} \left[(1 + \chi_n \xi_c \text{Tan}(\chi_n \xi_c)) \frac{\text{Sen}(\chi_n \xi)}{\chi_n} + \left(\xi_c - \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c)}{\chi_n} \right) \text{Cos}(\chi_n \xi) \right] \\ \left(\chi_n^2 \left[U_{f0} + \psi_{in} \int_0^{\tau} U_{in}(\beta) e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\beta} d\beta \right] + (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) \left[U_{p0} - \Lambda_2 \left(\frac{e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} - 1}{\chi_n^2 + \Lambda_1} \right) \right] \right) \quad (\text{V-27})$$

$$U_f = Bi \psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{(\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) \chi_n^2 H_n} \left[1 + \chi_n \xi_c \text{Tan}(\chi_n \xi_c) + \left(\xi_c - \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c)}{\chi_n} \right) \chi_n \text{Cot}(\chi_n) \right] \\ \left\{ \chi_n^2 \left(U_{f0} + \psi_{in} \int_0^{\tau} e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \right) + (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) \left[U_{p0} - \Lambda_2 \left(\frac{e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} - 1}{\chi_n^2 + \Lambda_1} \right) \right] \right\} \quad (\text{V-28})$$

Como se puede notar cuando $\xi_c = 0$ estas dos ecuaciones se transforman en (V-11) y (V-12); una demostración más detallada se encuentra al final del Apéndice A-5.

En las dos ecuaciones anteriores se usaron:

$$H_n = \left(F'_n(\chi_n) + \frac{F_n(\chi_n)}{2\chi_n^2} + \frac{G_n(\chi_n)}{2} \right) - \frac{F_n(\chi_n)}{G_n(\chi_n)} \left(G'_n(\chi_n) - \frac{F_n(\chi_n)}{2\chi_n^2} \right) \quad (\text{V-29})$$

$$F'_n(\mu_n) = \left[\psi_p - (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)(Bi - 1) \right] \left(\frac{\xi_c^2}{2} \text{Sec}^2(\chi_n \xi_c) + \frac{\xi_c \text{Tan}(\chi_n \xi_c)}{2\chi_n} \right) \\ + (Bi - 1) \left(1 + \chi_n \xi_c \text{Tan}(\chi_n \xi_c) \right) \\ + \xi_c \left(\frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c)}{2\chi_n \xi_c} - \frac{\text{Sec}^2(\chi_n \xi_c)}{2} \right) (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) \\ + \xi_c \left(1 - \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c)}{\chi_n \xi_c} \right) (-2\chi_n^2 - \Lambda_1 + \psi_{in} + \psi_p) \quad (\text{V-30})$$

$$\begin{aligned}
G_n'(\chi_n) &= (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) \left(-\frac{\xi_c^2}{2} \text{Sec}^2(\chi_n \xi_c) - \frac{\xi_c \text{Tan}(\chi_n \xi_c)}{2\chi_n} \right) \\
&+ 1 + \chi_n \xi_c \text{Tan}(\chi_n \xi_c) + \left(\xi_c - \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c)}{\chi_n} \right) (Bi - 1) \\
&+ \left(\frac{\xi_c \text{Sec}^2(\chi_n \xi_c)}{2\chi_n^2} - \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c)}{2\chi_n^3} \right) \left[(\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)(Bi - 1) - \psi_p \right]
\end{aligned} \tag{V-31}$$

$$\begin{aligned}
F_n(\chi_n) &= \left[(\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)(Bi - 1) - \psi_p \right] (1 + \chi_n \xi_c \text{Tan}(\chi_n \xi_c)) \\
&- \xi_c \left(1 - \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c)}{\chi_n \xi_c} \right) \chi_n^2 (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1)
\end{aligned} \tag{V-32}$$

$$\begin{aligned}
G_n(\chi_n) &= (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) (1 + \chi_n \xi_c \text{Tan}(\chi_n \xi_c)) \\
&+ \xi_c \left(1 - \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c)}{\chi_n \xi_c} \right) \left[(\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)(Bi - 1) - \psi_p \right]
\end{aligned} \tag{V-33}$$

donde χ_n son las raíces de:

$$F_n \frac{\text{Senh}(\sqrt{s + \Lambda_1})}{\sqrt{s + \Lambda_1}} + G_n \text{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1}) = 0 \tag{V-34}$$

Por último, la ecuación promedio de la partícula, calculada con las ecuaciones (III-25) y

(V-27) es:

$$\begin{aligned}
\langle U_p \rangle &= 3Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{\chi_n^2 H_n} \left\{ \frac{(1 + \chi_n \xi_c \text{Tan}(\chi_n \xi_c)) \left(\frac{F_n}{G_n} + 1 \right)}{\chi_n^2} \right. \\
&\quad \left. + \left(\xi_c - \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c)}{\chi_n} \right) \left[1 - \frac{1}{\chi_n^2} \frac{F_n}{G_n} \right] \right\} \\
&\quad \left(\chi_n^2 \left[\psi_{in} \int_0^\tau U_{in}(\beta) e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\beta} d\beta + U_{f0} \right] + (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) \left[U_{p0} - \Lambda_2 \left(\frac{e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} - 1}{\chi_n^2 + \Lambda_1} \right) \right] \right)
\end{aligned} \tag{V-35}$$

5.5.- Evaluación II: Con frente de agotamiento

En primer lugar se presenta la evaluación del radio crítico contra el tiempo como función del módulo de Thiele y el número de Biot. Para saber qué tan cercanos son los resultados a los presentados en las figuras IV-4 y IV-5 del capítulo anterior, se incluyen en cada gráfica los resultados obtenidos con la solución en estado cuasiestacionario. En estas gráficas se usó una función de entrada de tipo escalón unitario.

En la Figura V-2, se muestra la funcionalidad con el módulo de Thiele; como se esperaba, al aumentar dicho parámetro también lo hace el radio crítico, pues se incrementa la resistencia por reacción intrapartícula, alcanzando en el estado estacionario valores constantes que están en el intervalo entre cero y la unidad. En relación con el caso cuasiestacionario, se puede observar que cuando el tiempo es bajo las soluciones difieren, alcanzando el mismo valor en el estado estacionario; por ello cuando el módulo de Thiele es pequeño, se alcanza rápidamente el estado estacionario teniendo las dos soluciones una diferencia visible.

De la misma forma, en la Figura V-3, se confirma lo presentado en la Figura IV-5; es decir, al aumentar el número de Biot el radio crítico disminuye pues llega más reactivo a la superficie de la partícula, teniendo mayor oportunidad de reaccionar. Cuando el número de Biot es suficientemente elevado, se alcanza en el estado estacionario un valor de cero a tiempos cortos, por lo que los resultados presentarán en cada instante una diferencia visible, similar al caso de módulos de Thiele pequeños de la Figura V-2.

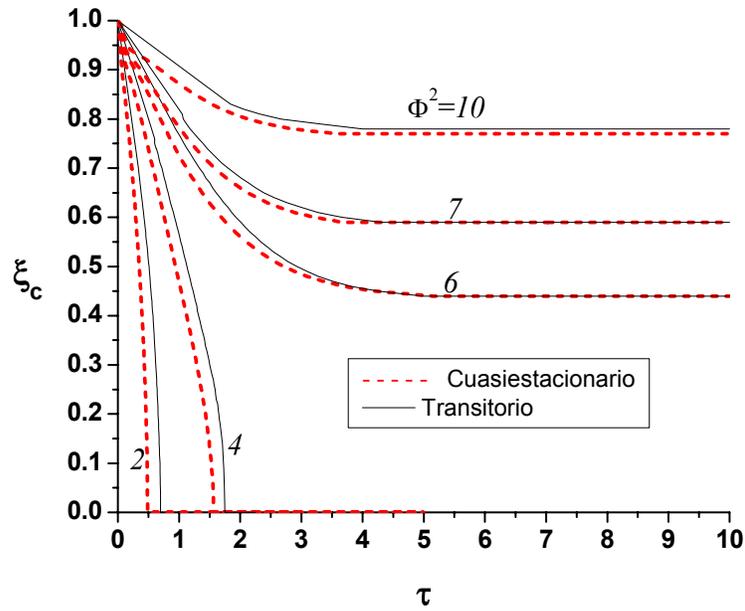


Figura V-2: Comportamiento dinámico del radio crítico ξ_c , a distintos módulos de

Thiele y su comparación con el caso cuasiestacionario, para $Bi = 10, \psi_{in} = 1$.

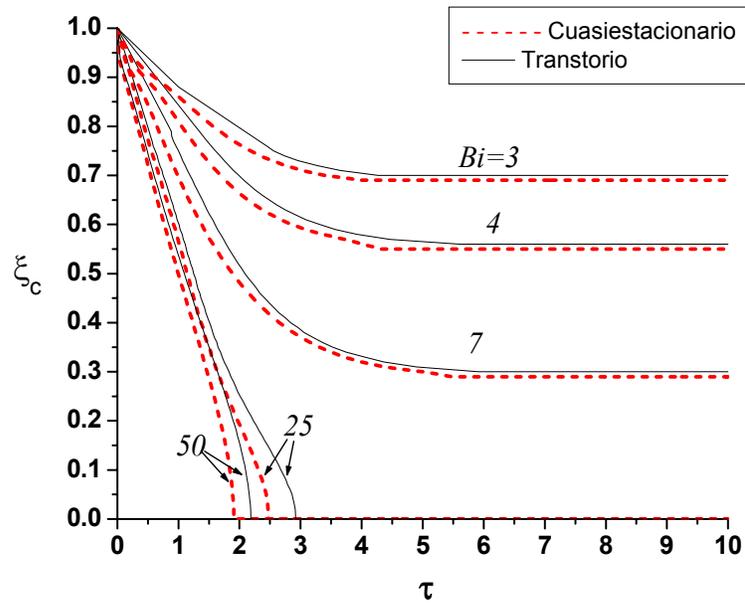


Figura V-3: Comportamiento dinámico del radio crítico ξ_c , a distintos números de Biot

y su comparación con el caso cuasiestacionario, para $\Phi^2 = 8, \psi_{in} = 1$.

5.6.- Evaluación III: Comparación de las soluciones en la partícula.

En las figuras V-4, V-5 y V-6 se presentan ejemplos de la funcionalidad de la solución con $(U_{aprox}^{(1)})$ y sin $(U_{aprox}^{(2)})$ considerar el frente de agotamiento, como función del tiempo, del módulo de Thiele y del número de Biot, respectivamente. Posteriormente, en las figuras V-7 y V-8 se presenta la comparación de las soluciones con y sin radio crítico con las soluciones obtenidas en estado cuasiestacionario (U_{cuasi}) , como función del tiempo.

En todas las gráficas se usó una función de entrada de tipo escalón unitario.

De nuevo, los perfiles no son muy distintos a los presentados en la figuras IV-1 a IV-3; es decir, al aumentar el tiempo la solución que no contempla el frente de agotamiento pasa de valores negativos a positivos en el centro de la partícula, el mismo comportamiento lo presenta al disminuir el módulo de Thiele y/o aumentar el número de Biot para un tiempo fijo como se muestra en las figuras V-5 y V-6. Es importante reconocer que este paso de negativo a positivo en el estado estacionario no siempre se da, es decir, existen condiciones tales que en el estado estacionario la solución que no contempla el radio crítico permanece con ciertos valores negativos.

De la comparación con el caso cuasiestacionario, mostrado en las figuras V-7 (sin considerar el frente de agotamiento) y V-8 (considerando el frente de agotamiento), se puede notar que si bien los perfiles obtenidos en estado transitorio tardan más en pasar de positivo a negativo, la desviación respecto a la solución numérica es menor que en el caso cuasiestacionario. Obteniendo, como se esperaba, en el estado estacionario los mismos resultados.

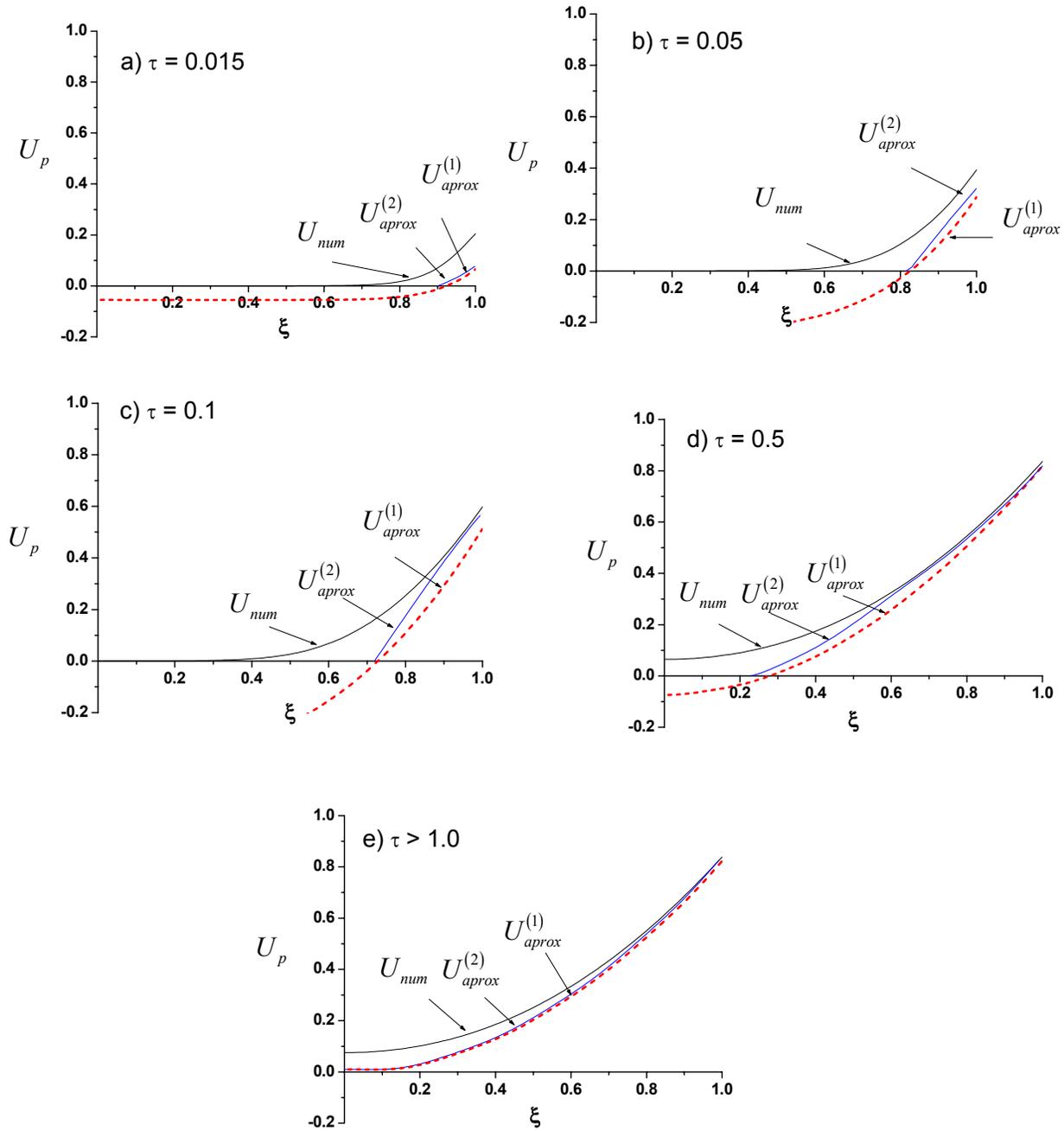


Figura V-4: Perfiles de concentración en la partícula como función del tiempo para

$$\psi_{in} = 15, \Phi^2 = 5 \text{ y } Bi = 10.$$

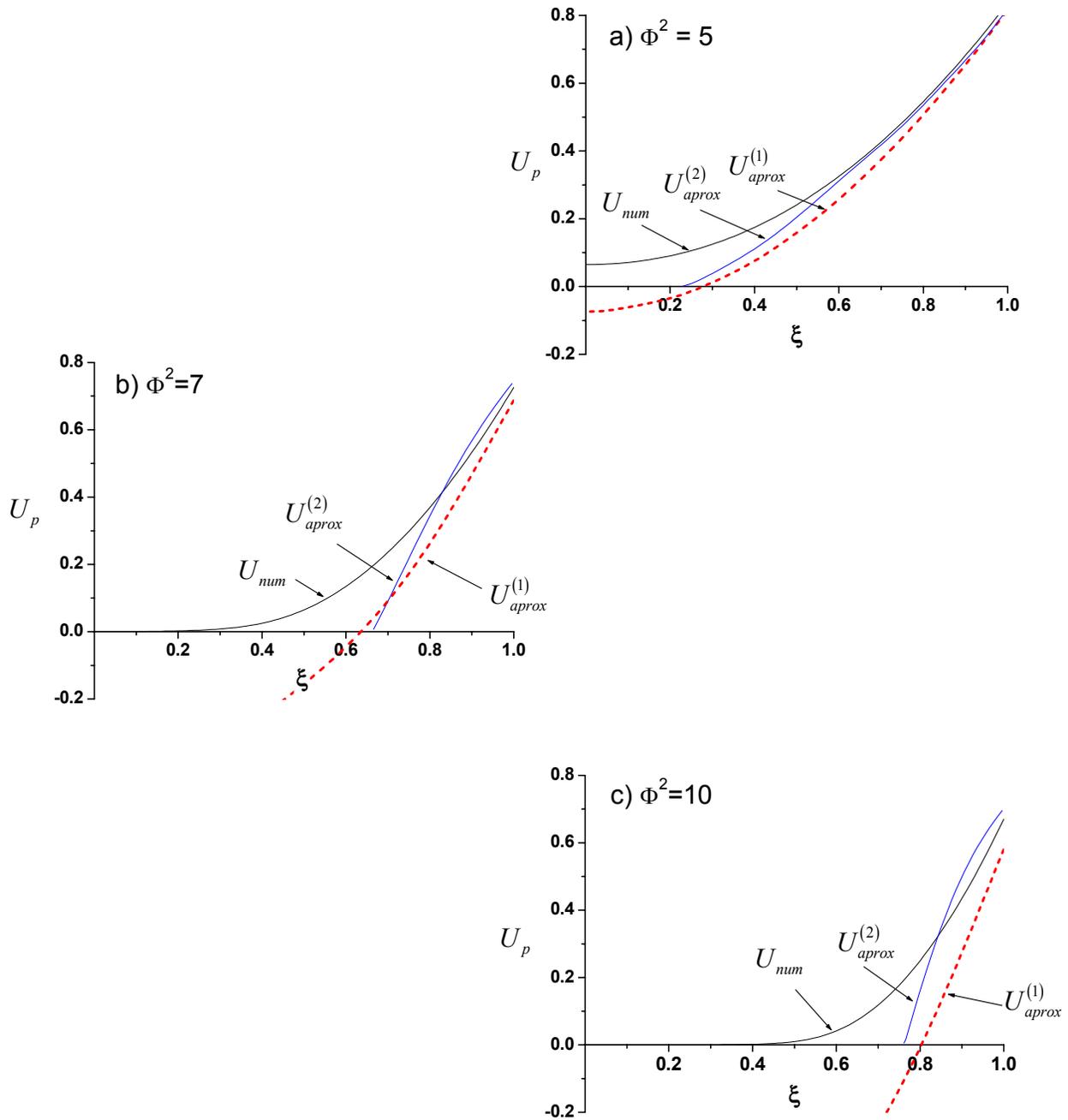


Figura V-5: Perfiles de concentración en la partícula como función del módulo de Thiele para, $\tau = 0.5$ y $Bi = 10$.

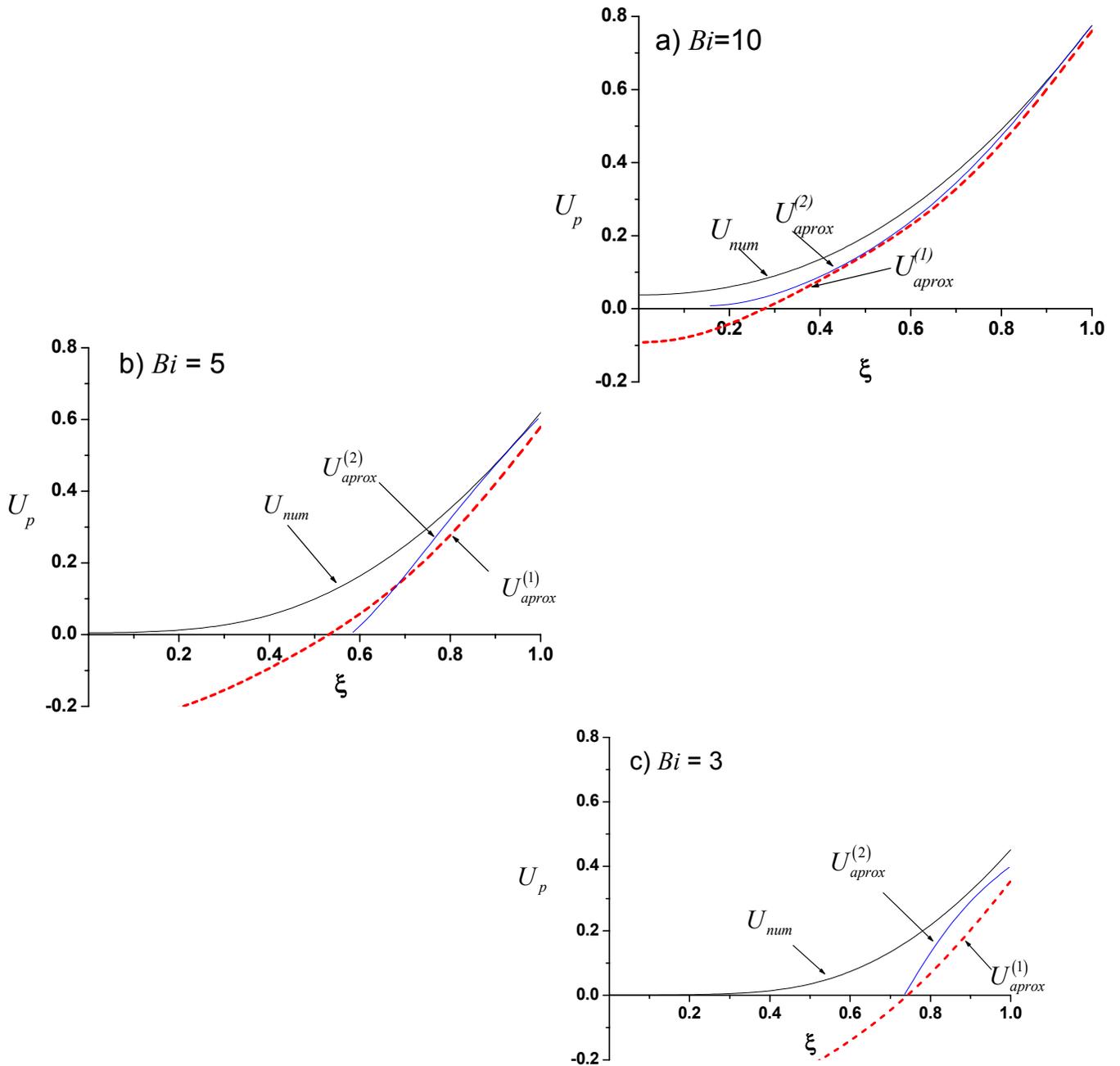


Figura V-6: Perfiles de concentración en la partícula como función del número de Biot

para $\tau = 0.5$ y $\Phi^2 = 5$.

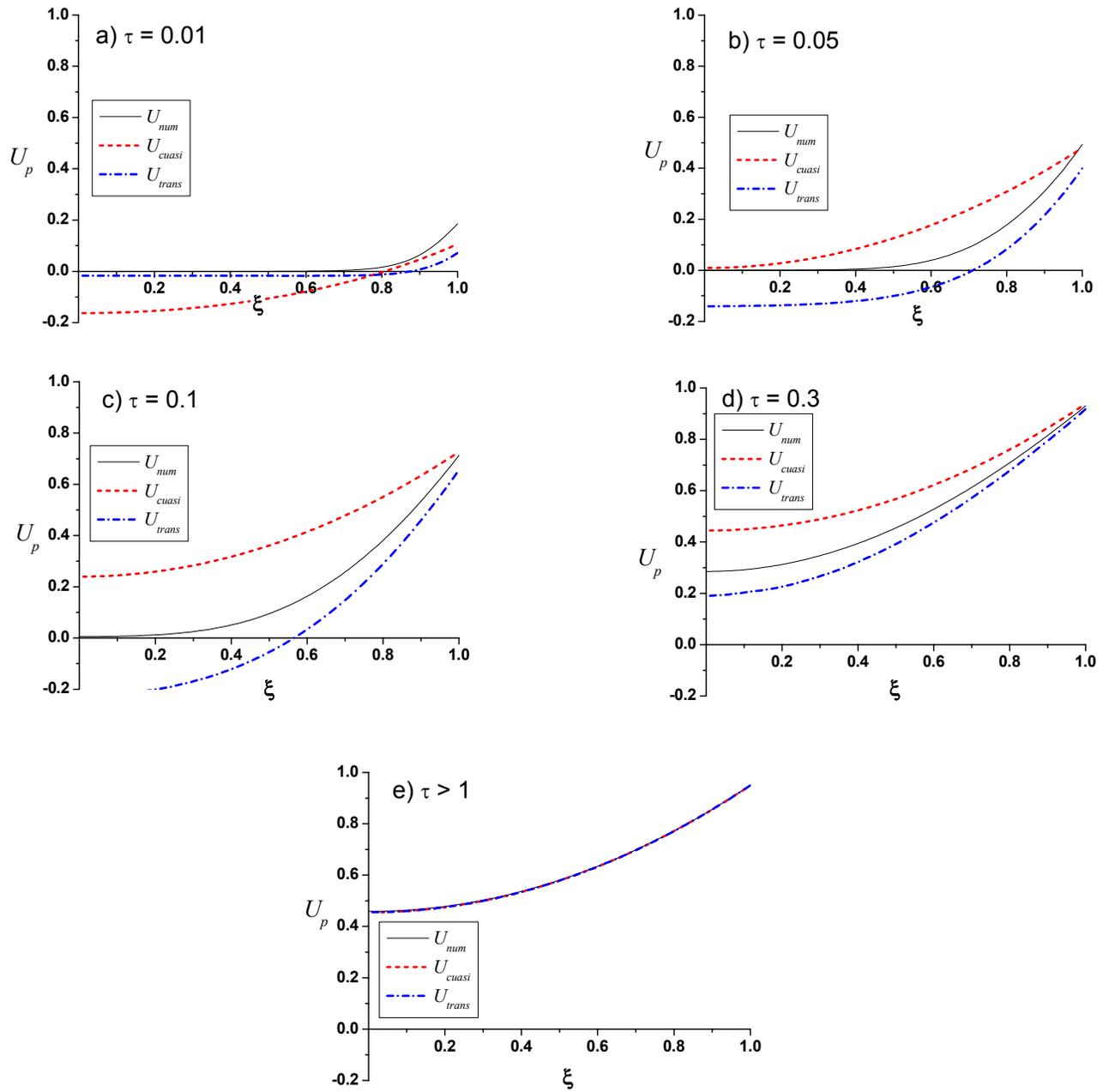


Figura V-7: Perfiles de concentración como función del tiempo, obtenidos con la solución exacta y las soluciones aproximadas, sin tomar en cuenta el frente de agotamiento, en estados cuasiestacionario y transitorio, para $Bi = 20$, $\Phi^2 = 3$, $\psi_{in} = 15$ y $\psi_p = 0.1$.

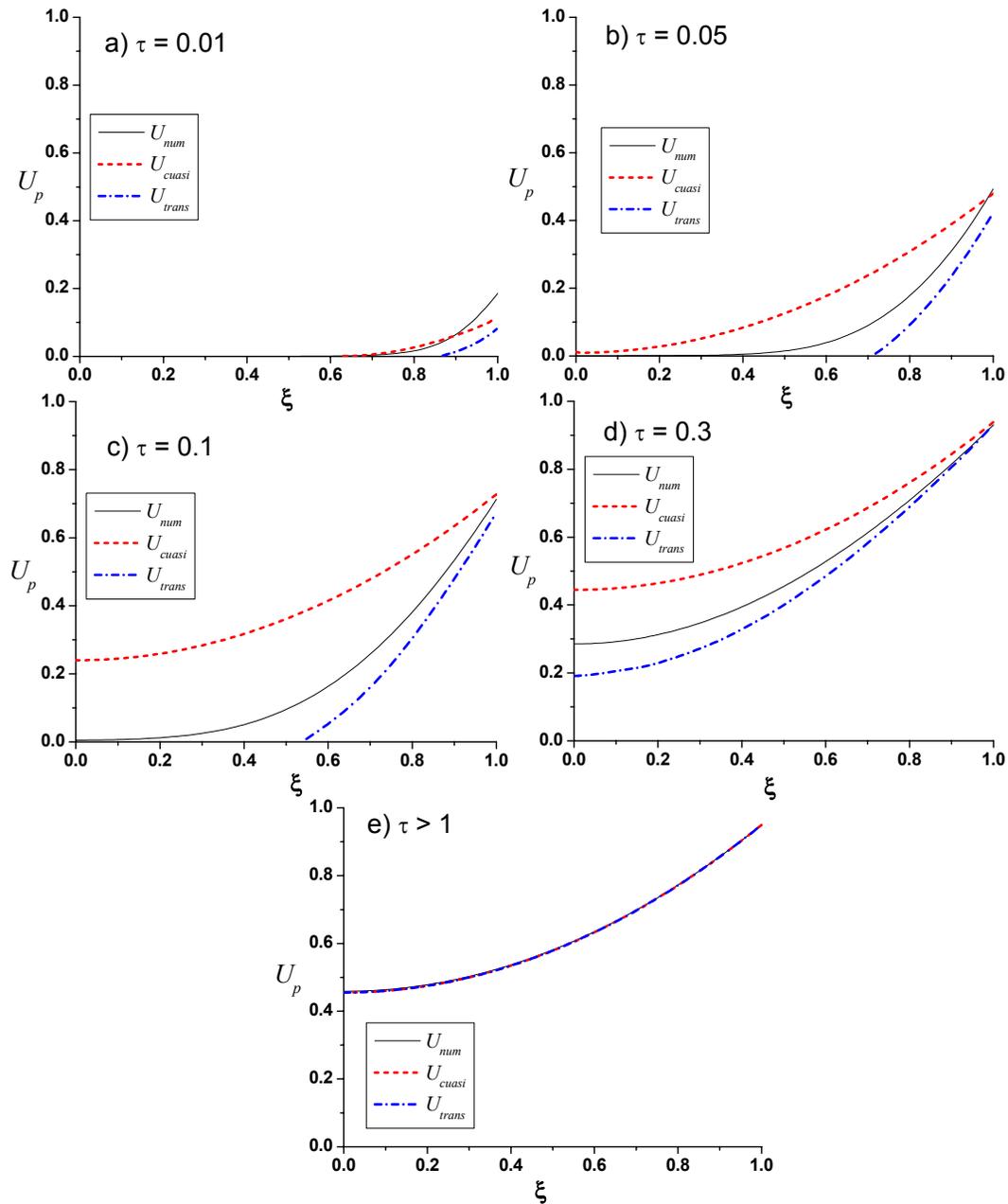


Figura V-8: Perfiles de concentración como función del tiempo, obtenidos con la solución exacta y las soluciones aproximadas, tomando en cuenta el frente de agotamiento, en estados cuasiestacionario y transitorio, para $Bi = 20$, $\Phi^2 = 3$, $\psi_{in} = 15$ y $\psi_p = 0.1$.

5.7.- Evaluación IV: Soluciones en el fluido, en la interfase y promedio en la partícula

Al igual que en el capítulo anterior, finaliza este capítulo con la evaluación de las tres funciones de entrada: escalón, oscilatoria y pulso finito de dos duraciones de tiempo, junto con las evaluaciones del comportamiento dinámico del radio crítico.

Las gráficas de la evaluación en estado transitorio se encuentran en el Apéndice C-2; donde se observa que a módulos de Thiele altos y números de Biot bajos la solución que no toma en cuenta el frente de agotamiento presenta, a tiempos pequeños, perfiles que no tienen sentido físico, lo cual se refleja en los altos valores del radio crítico, mismos que son mejorados por la solución que sí contempla la idea del radio crítico. Además cuando el número de Biot se incrementa, las soluciones en el fluido y en la interfase se vuelven más parecidas, mientras que al aumentar el módulo de Thiele el promedio en la partícula se aleja de estas dos últimas; lo primero se explica dado que un aumento en el número de Biot implica una disminución en las resistencias externas a la transferencia de masa y lo segundo se explica debido a que un incremento en el módulo de Thiele significa una velocidad de reacción superior a la velocidad de difusión intrapartícula, por lo que es lógico que el promedio en la partícula se aleje de los perfiles de la concentración interfacial y del fluido.

Es importante mencionar que en este capítulo se incluyó una evaluación más en el pulso finito de espesor más pequeño, se presentan ahora dos casos con módulos de Thiele elevados (50 y 100), los cuales son valores a los que se sabe que las soluciones

aproximadas con los otros tipos de funciones de entrada darán una desviación significativa respecto a las solución exacta. Sin embargo, se puede apreciar que a pesar de los altos valores las soluciones siguen siendo muy similares.

En las figuras V-9 a V-12 se muestra una comparación con el caso cuasiestacionario, con la idea de Capa Límite y la solución exacta. Donde solo se presentan las comparaciones de las soluciones para el fluido y promedio en la partícula, esto con el objeto de no generar gráficas demasiado difíciles de leer. Dado que no se incluye la evaluación para la concentración en la superficie de la partícula y que ésta es la que se ve más afectada con cambios en el número de Biot, sólo se presentan cambios en el módulo de Thiele.

Como se esperaba, a tiempos bajos las concentraciones predichas difieren más de las obtenidas con la solución exacta. En el caso de la concentración del fluido, las soluciones obtenidas en estado cuasiestacionario y transitorio dan prácticamente los mismos resultados en todos los casos, incluso a tiempos bajos donde las concentraciones promedio en la partícula predichas difieren; dicha desviación llega a mantenerse en estado estacionario cuando el módulo de Thiele es elevado. Lo anterior se demuestra con los resultados más elevados de radio crítico obtenidos con la solución en estado cuasiestacionario, que se incluyen en las figuras V-9 a V-12.

Para concluir, es oportuno mencionar que los tiempos de cómputo de las soluciones numérica, aproximada en estado cuasiestacionario y con la idea de Capa Límite, fueron del orden de, un minuto, 15 y 2 segundos, respectivamente, lo cual demuestra la ventaja computacional de las soluciones aproximadas, respecto a la numérica del problema exacto. No se incluyó el resultado de la solución aproximada en estado transitorio ya que es necesario cambiar el límite superior de las sumatorias cada determinado tiempo.

5.7.1.- Función escalón

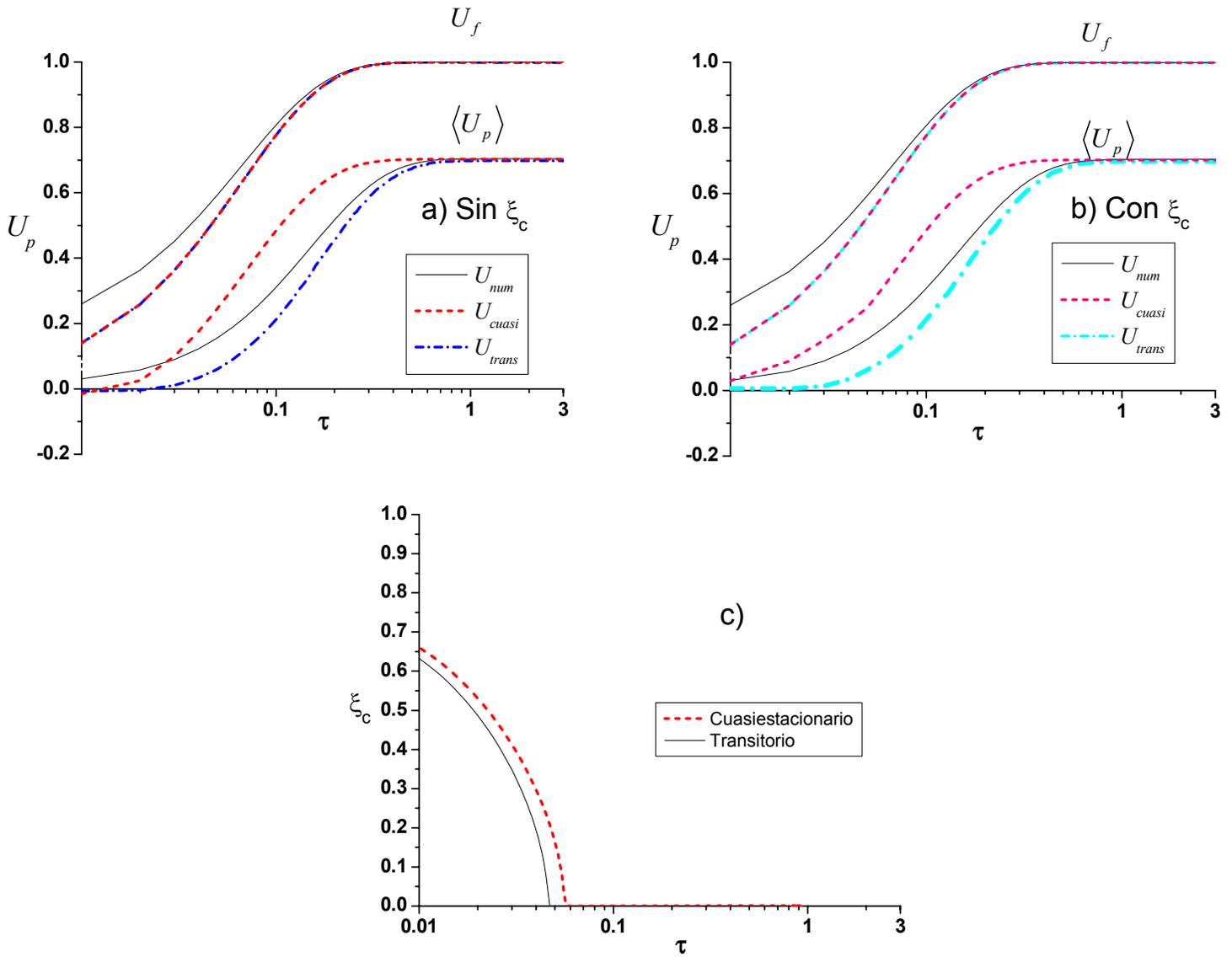


Figura V-9: Comparación de las concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de entrada tipo escalón unitario y $\psi_{in} = 15$, $Bi = 10$ y $\Phi^2 = 3$.

5.7.2.- Función oscilatoria

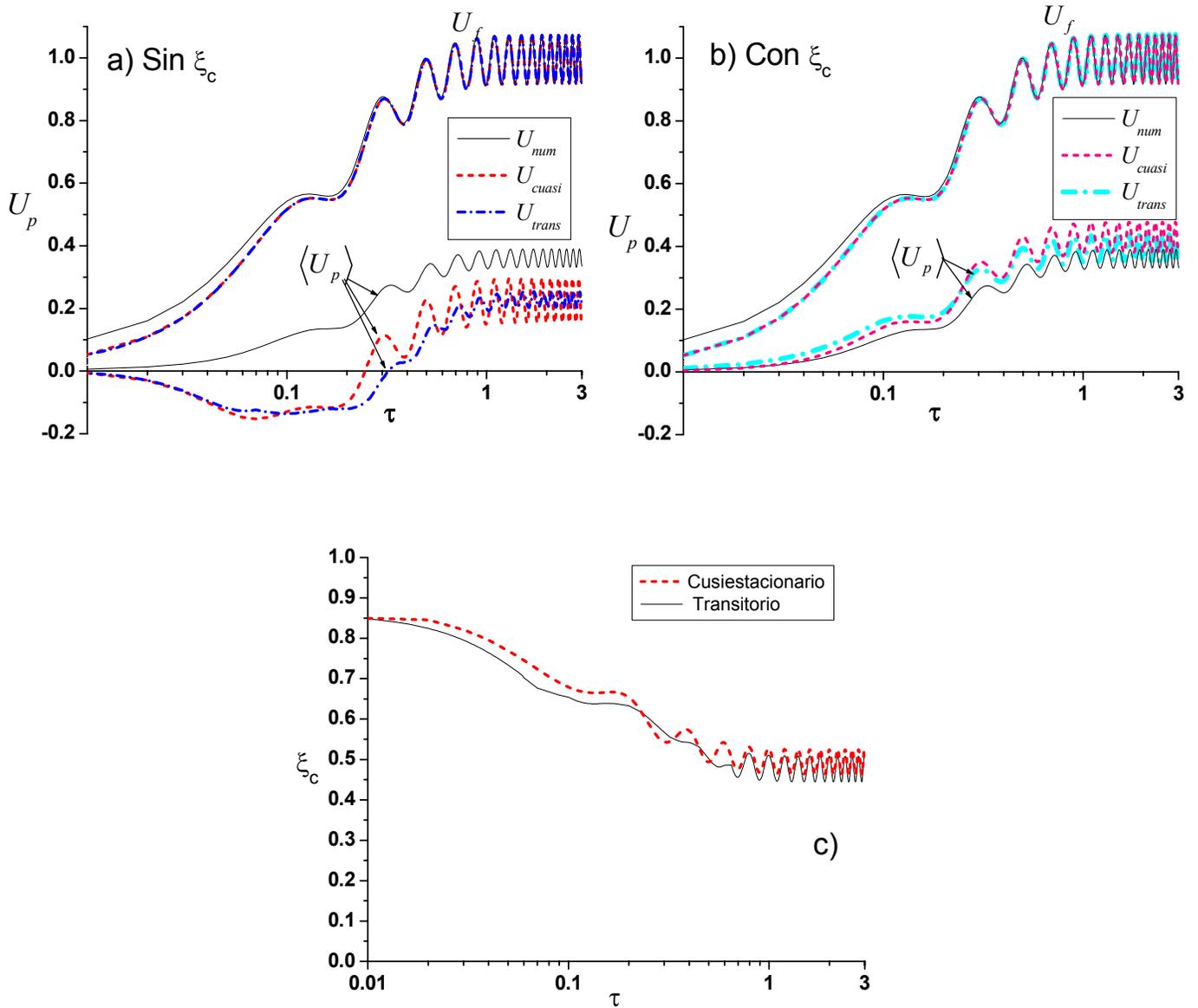


Figura V-10: Comparación de las concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de entrada tipo oscilatoria y $\psi_{in} = 5$, $Bi = 10$ y $\Phi^2 = 8$.

5.7.3.- Pulso finito de duración $\Delta\tau = 0.5$

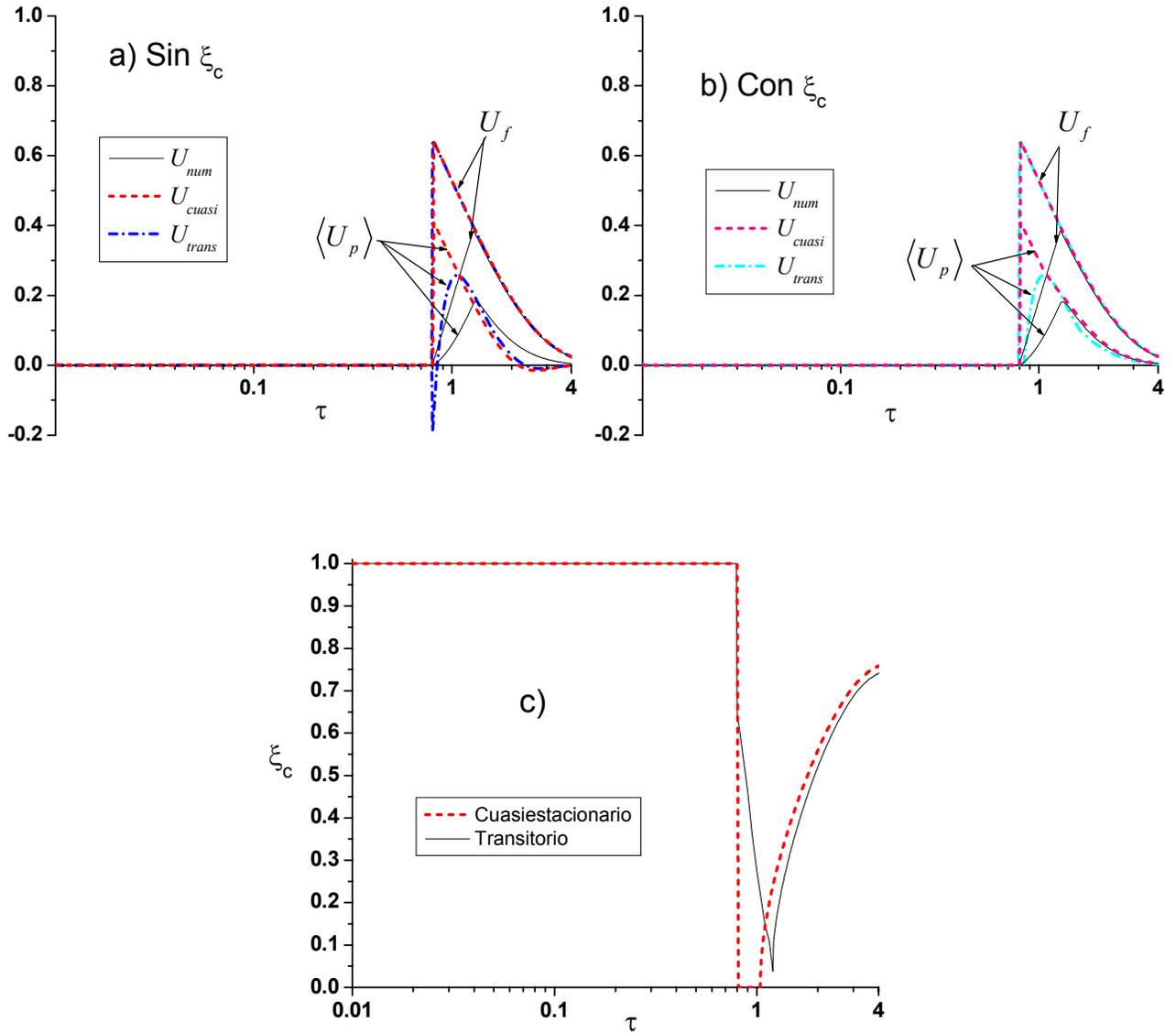


Figura V-11: Comparación de las concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de entrada tipo pulso finito de duración $\Delta\tau = 0.5$ y $\psi_{in} = 1$, $Bi = 25$ y $\Phi^2 = 3$.

5.7.4.- Pulso finito de duración $\Delta\tau = 0.01$

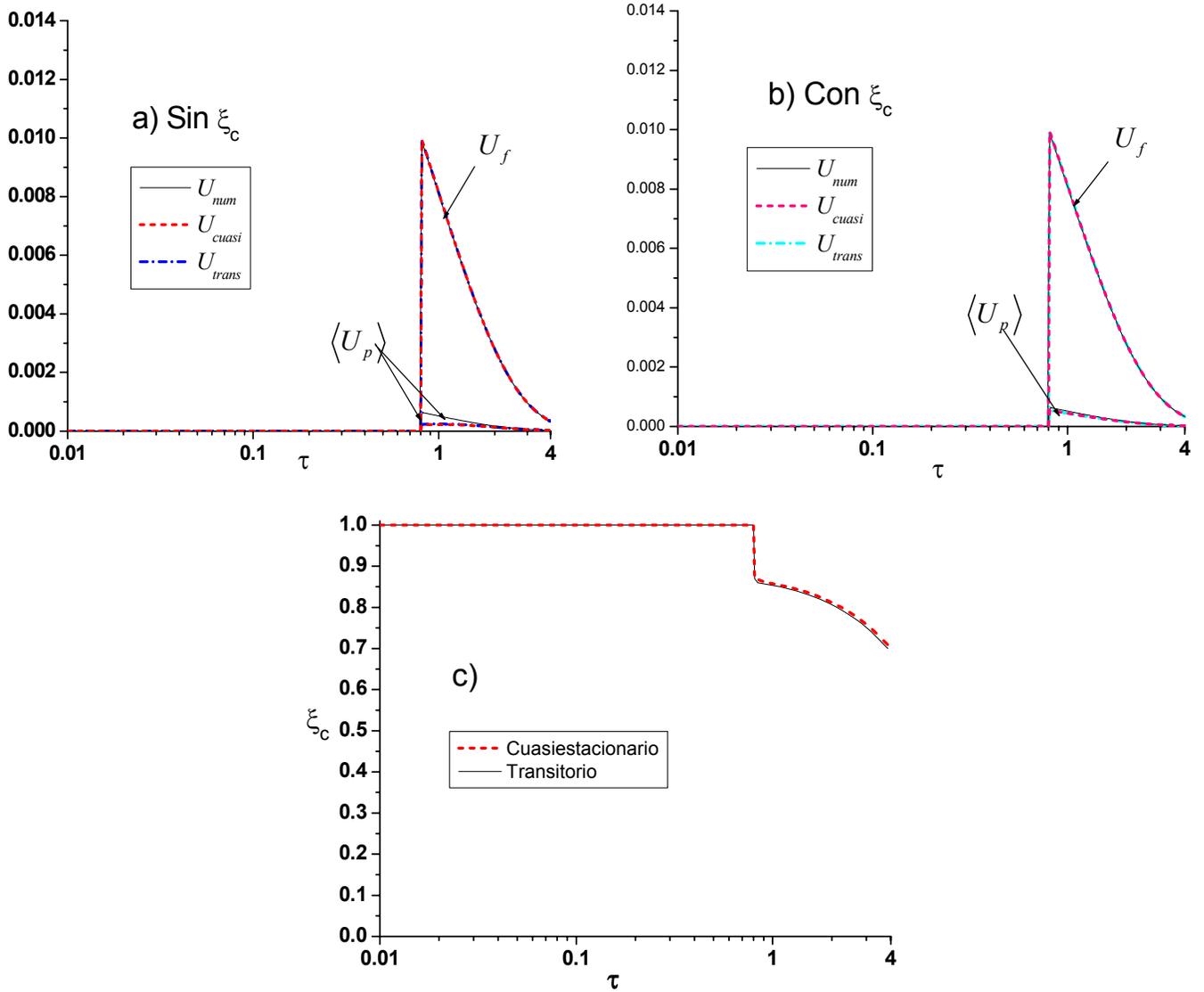


Figura V-12: Comparación de las concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de entrada tipo pulso finito de duración $\Delta\tau = 0.01$ y $\psi_{in} = 1$, $Bi = 20$ y $\Phi^2 = 8$.

Capítulo VI:

Comparación con la idea de Capa Límite

En este capítulo se presenta la solución usando la idea de Capa Límite; el método consiste en resolver en forma aproximada el problema proponiendo una solución para la concentración en la partícula en forma de polinomio cuya variable independiente depende tanto de la posición como del tiempo, de tal forma que el problema se reduce a una ecuación diferencial ordinaria, cuya variable dependiente es el espesor de la capa límite. A pesar de que se presenta la solución del problema en su forma aproximada, también se realizó la solución del problema exacto sin obtener cambios significativos en los resultados.

6.1.- Planteamiento del problema

Para resolver el problema es conveniente proponer el siguiente cambio de variable:

$$\xi^* = 1 - \xi \quad (\text{VI-1})$$

por lo que,

$$\Delta = 1 - \xi_c \quad (\text{VI-2})$$

donde Δ es el espesor adimensional de la Capa Límite ($\Delta = \delta / r_p$). De esta forma el problema a resolver es:

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{(1 - \xi^*)^2} \frac{\partial}{\partial \xi^*} \left((1 - \xi^*)^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi^*} \right) - \Lambda_1 U_p - \Lambda_2 \quad (\text{VI-3})$$

$$\frac{dU_f}{d\tau} = \psi_{in} (U_{in}(\tau) - U_f) + \psi_p (U_p|_{\xi=0} - U_f) \quad (\text{VI-4})$$

Condiciones de frontera

$$\text{En } \xi^* = 0 \quad \left. \frac{\partial U_p}{\partial \xi^*} \right|_{\xi^*=0} = Bi (U_p|_{\xi^*=0} - U_f) \quad (\text{VI-5})$$

$$\text{En } 0 \leq \xi^* \leq \Delta \quad U_p \text{ está definida} \quad (\text{VI-6})$$

$$\text{En } \xi^* = \Delta, \quad \frac{\partial U_p}{\partial \xi^*} = 0, \quad U_p = 0 \quad (\text{VI-7})$$

Condiciones iniciales

$$\text{Cuando } \tau = 0, \quad U_f = U_{f0}, \quad U_p = U_{p0} \quad (\text{VI-8})$$

Es importante mencionar que aunque en la Ecuación (IV-3) aparece la forma aproximada de la velocidad de reacción, también se desarrolló la solución del problema exacto, como se puede revisar al final del Apéndice A-6, sin embargo los resultados no se vieron modificados considerablemente, bajo las condiciones analizadas.

6.2.- Solución aproximada

Para resolver el problema en la partícula, en forma aproximada, se propone el siguiente polinomio (el desarrollo detallado se encuentra en el Apéndice A-6):

$$U_p = a_0 + a_1\eta + a_2\eta^2 \quad (\text{VI-9})$$

donde,

$$\eta = \frac{r^*}{\delta} = \frac{\xi^*}{\Delta} \quad (\text{VI-10})$$

Por medio de las condiciones de frontera (VI-5) y (VI-7) se determinan los valores de las constantes a_0 , a_1 , y a_2 , por lo que:

$$U_p = \frac{BiU_f\Delta(1-\eta)^2}{2+\Delta Bi} \quad (\text{VI-11})$$

Aplicando esta última ecuación a (VI-3) e integrando en η de 0 a 1:

$$\frac{d\Delta}{d\tau} = \frac{6}{(2-\Delta)} \left(1 + \frac{2}{\Delta}\right) - \Lambda_1 \Delta \frac{(4-\Delta)}{(4-2\Delta)} - 3\Lambda_2 \frac{(2+\Delta Bi)}{BiU_f} \quad (\text{VI-12})$$

como se puede notar, esta ecuación depende de la solución de (VI-4), la cual es,

$$U_f = e^{-(\psi_{in} + \psi_p a_3)\tau} \left[U_{f0} + \psi_{in} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p a_3)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \right] \quad (\text{VI-13})$$

donde,

$$a_3 = 1 - \frac{\Delta Bi}{2 + \Delta Bi} \quad (\text{VI-14})$$

Sustituyendo (VI-13) en (VI-12):

$$\frac{d\Delta}{d\tau} = \frac{6}{(2-\Delta)} \left(1 + \frac{2}{\Delta}\right) - \Lambda_1 \Delta \frac{(4-\Delta)}{(4-2\Delta)} - 3\Lambda_2 \frac{(2+\Delta Bi) e^{(\psi_{in} + \psi_p a_3)\tau}}{Bi \left[U_{f0} + \psi_{in} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p a_3)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \right]} \quad (\text{VI-15})$$

esta última ecuación deberá resolverse numéricamente para obtener Δ , y con éste calcular los perfiles en la partícula y en el fluido. Es importante mencionar que a pesar de que aquí se muestra la solución del problema aproximado, también se desarrolló la solución del problema exacto, sin embargo los resultados no resultaron ser muy diferentes.

6.3.- Evaluación.

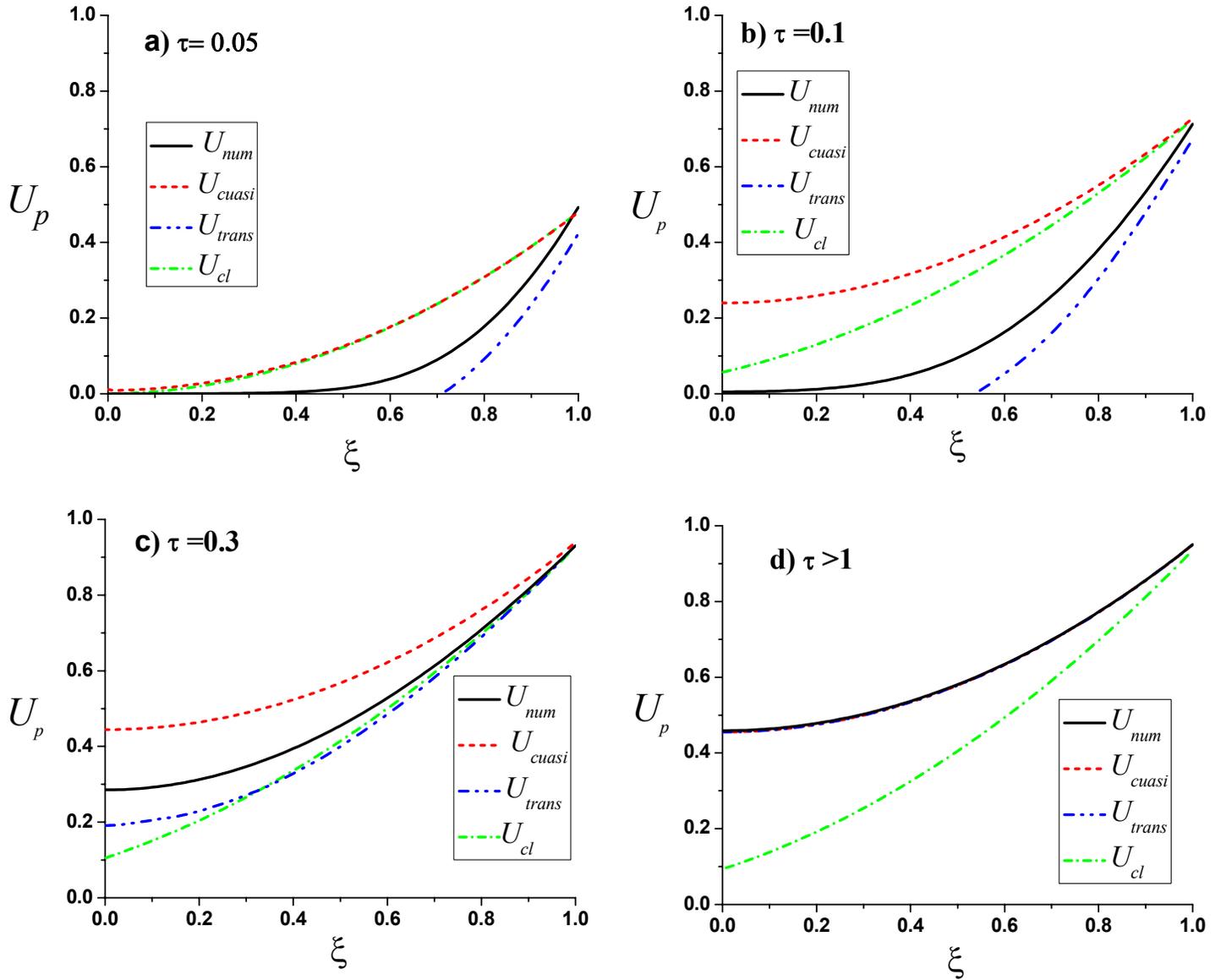


Figura VI-1: Perfiles de concentración como función del tiempo calculados con la solución exacta, la solución aproximada con la idea de Capa Límite y las soluciones aproximadas en estados cuasiestacionario y transitorio, tomando en cuenta el frente de agotamiento, para $Bi = 20$, $\Phi^2 = 3$, $\psi_{in} = 15$ y $\psi_p = 0.1$.

Para evaluar las soluciones obtenidas con esta metodología, se aprovecharán las comparaciones hechas previamente entre las soluciones en estado cuasiestacionario y transitorio; en concreto se comparan en la Figura VI-1, los perfiles de concentración, como función del tiempo, obtenidos con las soluciones anteriores y ésta, junto con la solución numérica del problema exacto; como se puede notar, cuando el tiempo es lo suficientemente bajo, la solución obtenida con la idea de Capa Límite (U_{cl}), se aproxima bastante a la obtenida en estado cuasiestacionario; mientras que al aumentar el tiempo se asemeja más a la obtenida en estado transitorio; sin embargo, no llega a reproducir los perfiles en estado estacionario, ya que el modelo deja de ser una representación adecuada de la situación física.

Por otro lado, en la Figura VI-2, se muestran las concentraciones del fluido y promedio en la partícula con las cuatro funciones de entrada usadas en los dos capítulos anteriores; como era de esperarse los resultados del promedio en la partícula obtenidos con la idea de Capa Límite son los que más se alejan del resultado exacto; sin embargo es de notarse el que los resultados predichos para la concentración del fluido son prácticamente los mismos que los obtenidos con las otras aproximaciones, por lo que este método adquiere especial importancia, ya que las soluciones desarrolladas son mucho más fáciles de desarrollar y programar que las de los dos capítulos anteriores. Las últimas dos figuras se refieren a la derivada en la superficie, la cual ofrece una idea del flux superficial, en la Figura VI-3, se presenta la influencia de tomar en cuenta el frente de agotamiento al evaluar dicha derivada como función del tiempo; al igual que en los casos discutidos en los capítulos anteriores, al incluir el radio crítico, los resultados son mucho más similares a los predichos por la solución exacta, de la misma forma, los resultado predichos con la

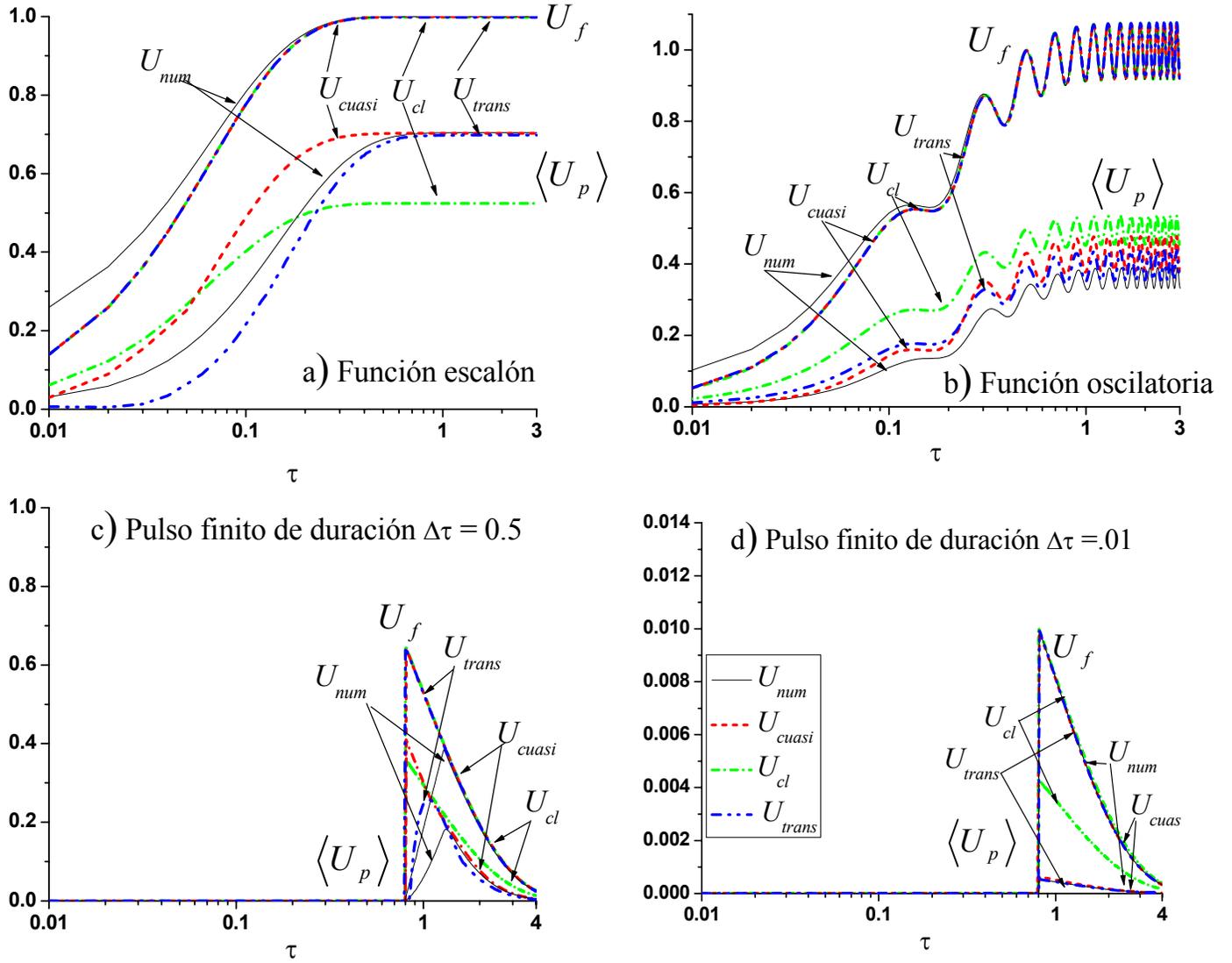


Figura VI-2: Comparación de las concentraciones aproximadas y exactas para, a)

$Bi = 10, \Phi^2 = 3, \psi_{in} = 15$, b) $Bi = 10, \Phi^2 = 8, \psi_{in} = 5$, c) $Bi = 25, \Phi^2 = 3$,

$\psi_{in} = 1$, d) $Bi = 20, \Phi^2 = 8, \psi_{in} = 1$.

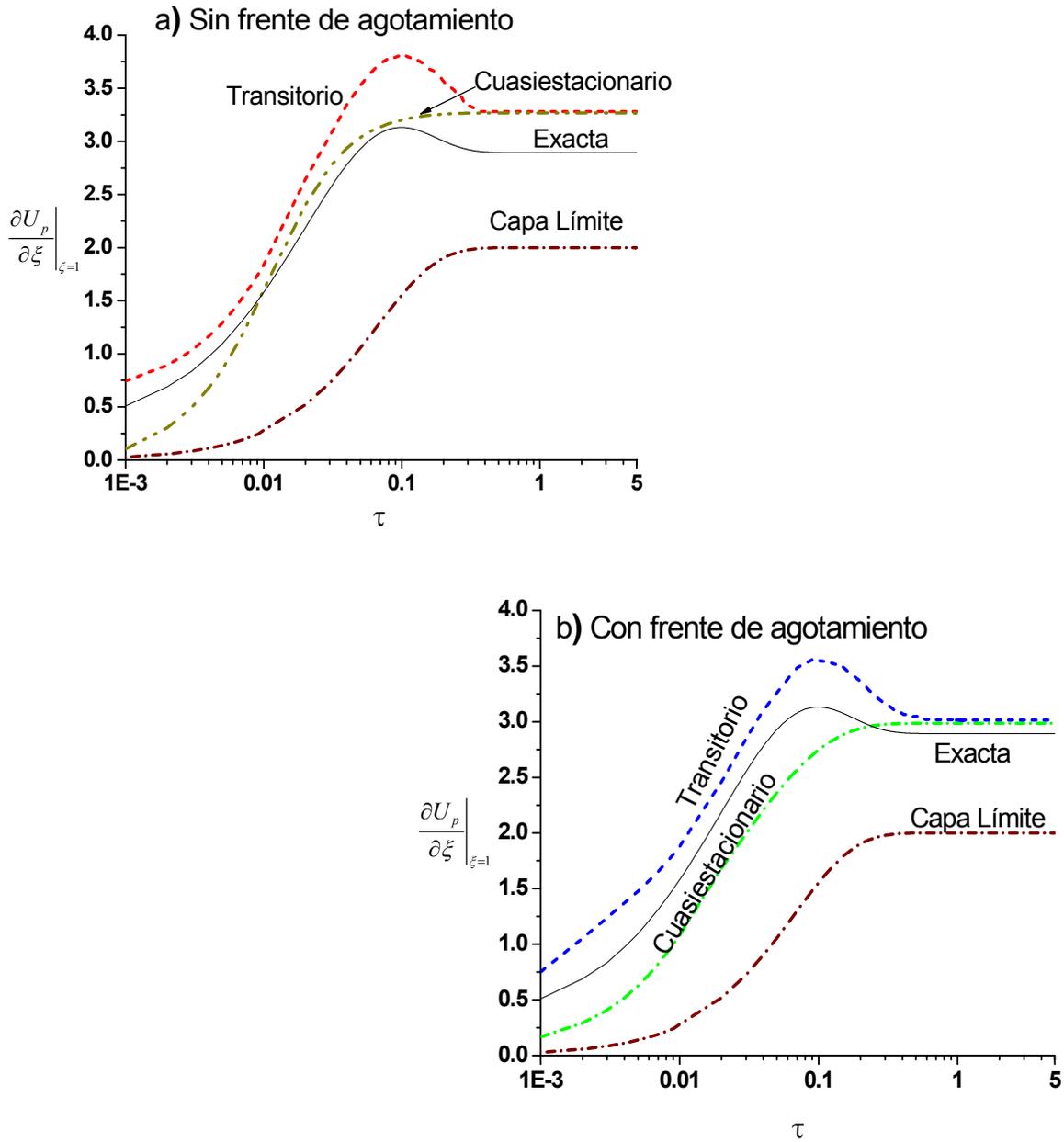


Figura VI-3: Derivada en la superficie como función del tiempo obtenida con las soluciones aproximadas y exacta para $Bi = 50$, $\Phi^2 = 10$, $\psi_p = 0.1$ y $\psi_{in} = 15$.

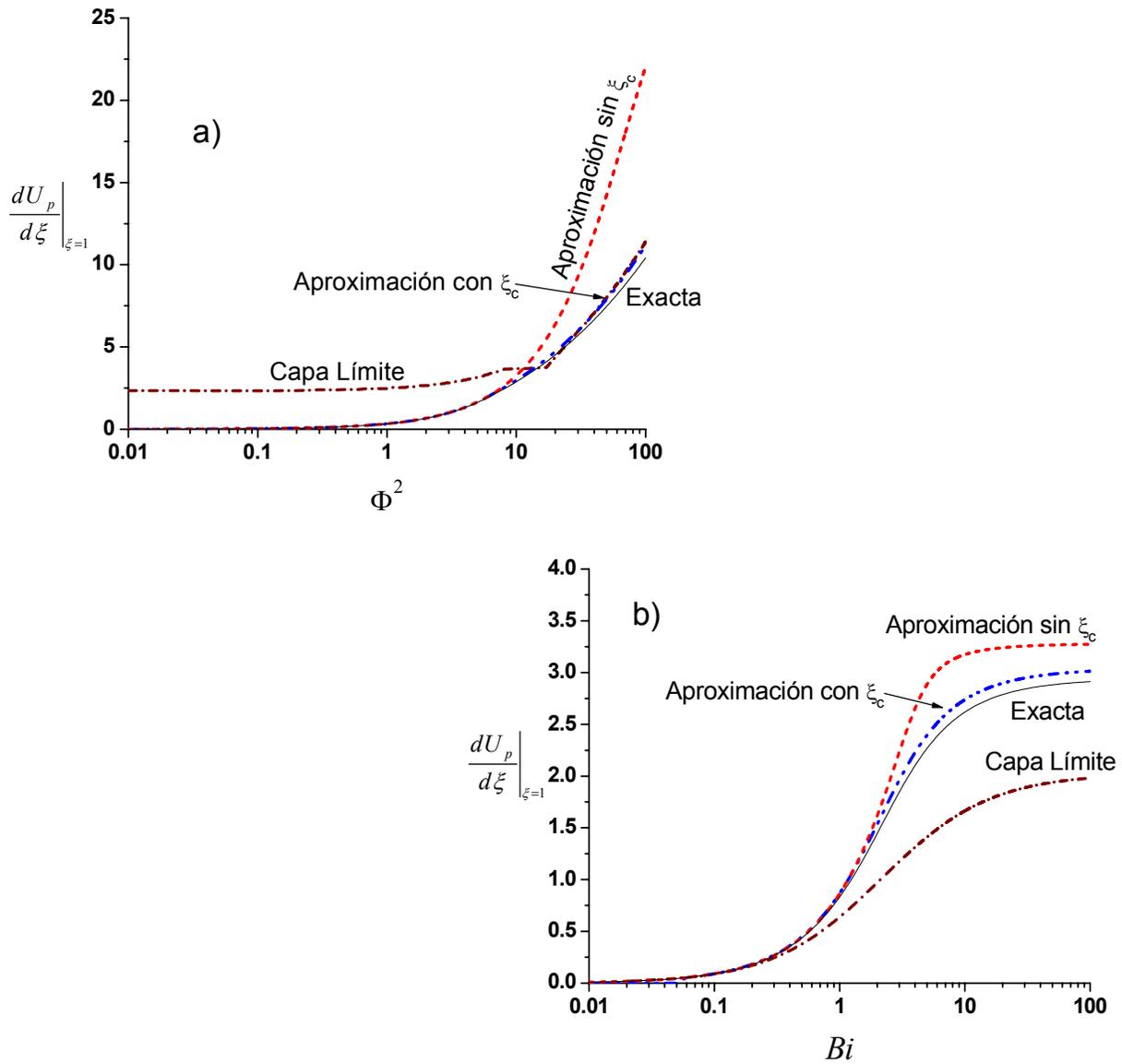


Figura VI-4: Derivada en la superficie en estado estacionario, como función de a) Φ^2 y b) del número de Biot, para $Bi = 50$, $\Phi^2 = 10$, $\psi_p = 0.1$ y $\psi_{in} = 1$.

idea de Capa Límite presentan la mayor desviación; comentarios similares son aplicables a la Figura VI-4, donde se grafica la derivada en la superficie en estado estacionario contra el módulo de Thiele y el número de Biot, se observa que cuando el primero es elevado y el segundo es bajo los resultados se asemejan a los predichos por la solución aproximada en estado transitorio, ya que bajo estas condiciones es seguro que exista radio crítico y por lo tanto la idea de Capa Límite resulta una descripción adecuada de la situación física, no siendo el caso cuando las condiciones son tales que se ocupa toda la partícula.

Es importante mencionar que gracias a que el tiempo adimensional requerido para alcanzar el estado estacionario, en los casos analizados, fue en general bajo, no hubo complicaciones en la evaluación de las soluciones obtenidas con la idea de Capa Límite, sin embargo, si el tiempo es lo suficientemente grande se presentan problemas en la evaluación, lo anterior se debe a que, en general, en la teoría de Capa Límite hay una discontinuidad en el espesor de dicha capa cuando el tiempo tiende a infinito.

Con los resultados mostrados hasta el momento es posible elaborar el algoritmo que se muestra en la Figura IV-5, donde se aprecia una ruta clara a seguir: si el tiempo o las condiciones del sistema son tales que la diferencia entre la solución calculada con el modelo aproximado completo y en estado cuasiestacionario, es considerable, entonces se debe usar el modelo completo, cuando esta afirmación sea falsa es necesario saber si se desean conocer detalles referentes a la partícula, de no serlo, con la solución de Capa Límite es suficiente, en caso contrario se debe usar la solución en estado cuasiestacionario.

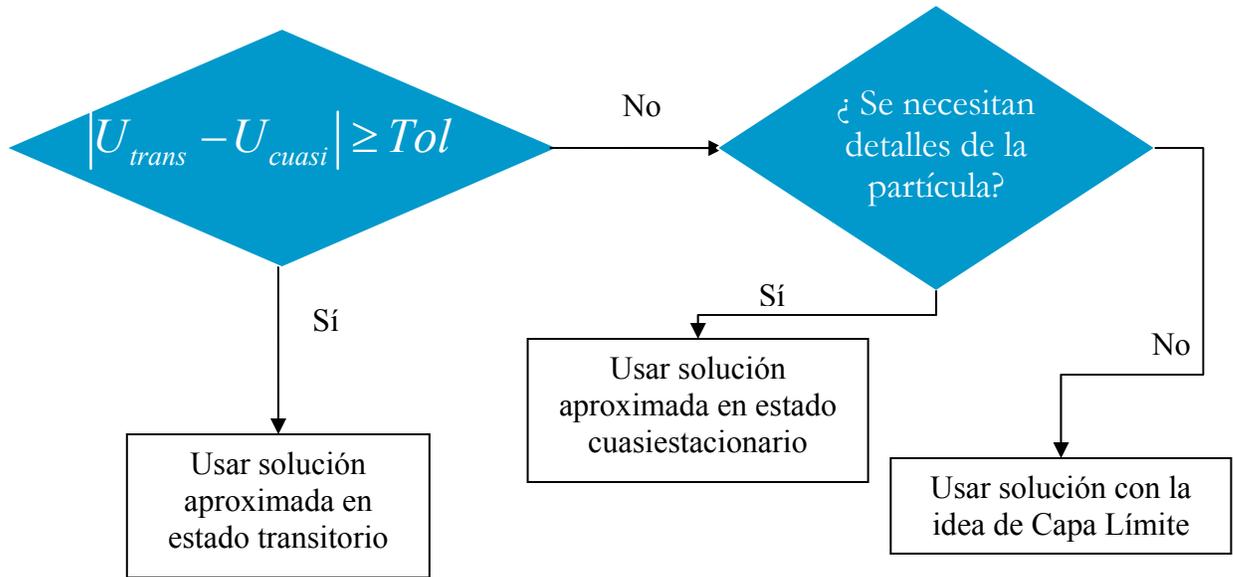


Figura VI-5: Algoritmo de uso de las soluciones desarrolladas.

Capítulo VII:

Análisis de error

En este capítulo se evaluará y discutirá el error que genera la solución aproximada con respecto a la numérica. El error se define como:

$$\%Error = \frac{|Sol. num. - Sol. anal. |}{Sol. num.} 100\%$$

Se usaron para el análisis las funciones de entrada del capítulo anterior para diferentes valores del módulo de Thiele y del número de Biot.

Debido a la relevancia que tiene el porcentaje de error de la concentración en el fluido, en cada figura se incluye una gráfica de este tipo. En general, cuando el módulo de Thiele es bajo las gráficas con y sin radio crítico del porcentaje de error de la concentración del fluido no son muy distintas; sin embargo, cuando éste parámetro crece se hace más evidente la mejora que proporciona la idea del frente de agotamiento.

En la Figura VII-1 se presentan perfiles del porcentaje de error dentro de la partícula para distintos tiempos sin y con la idea del frente de agotamiento. Como se puede notar, la influencia del radio crítico es evidente a tiempos bajos, mientras que en el estado estacionario los porcentajes de error tienden a empatarse.

Posteriormente en las figuras VII-2 a VII-7 se presentan las gráficas de porcentaje de error contra el tiempo para las funciones de entrada de tipo escalón unitario, oscilatoria y pulso finito de espesor $\Delta\tau = .5$. En estas Figuras se aprecia claramente cómo el aumento

en el módulo de Thiele provoca un aumento en el error, sobretodo en el promedio en la partícula, lo cual es consistente con la Figura VII-1.

En las Figuras VII-8 a VII-11, se presenta el caso del pulso finito de espesor $\Delta\tau = .01$ donde, además de apreciar la influencia del módulo de Thiele, se puede notar cómo el error de la concentración promedio en la partícula sube y luego baja para después volver a subir. Esto se debe a que pasa por el origen y luego sigue en concentraciones negativas; este comportamiento se ve más claramente cuando el número de Biot es de cien ya que en ese caso al ser mayor la concentración en la superficie la aproximación presenta más error.

Por último se presentan gráficas del porcentaje de error que se obtiene al evaluar la derivada superficial obtenida con las soluciones aproximadas (incluida la obtenida en el capítulo anterior) y la exacta. En la Figura VII-12, se muestra el porcentaje de error obtenido de dicha derivada en estado estacionario; como se esperaba, la solución que contempla el frente de agotamiento tiene los menores porcentajes de error, mientras que la solución que no lo hace aumenta su error al aumentar el módulo de Thiele; mientras que la solución que se obtiene con la idea de Capa Límite presenta bajos porcentajes de error cuando el módulo de Thiele es alto y el Biot es bajo, lo cual concuerda con lo mostrado en la Figura VI-4. En la Figura VII-13, se presenta la evaluación dinámica del error de la derivada en la superficie, como se esperaba, los resultados en estado cuasiestacionario reproducen los obtenidos en estado transitorio cuando el tiempo es suficientemente alto y en los casos con y sin frente de agotamiento, el porcentaje de error en estado estacionario es menor que el de la solución con la idea de Capa Límite, como se puede corroborar en la Figura VI-3.

7.1.- Perfiles en la partícula

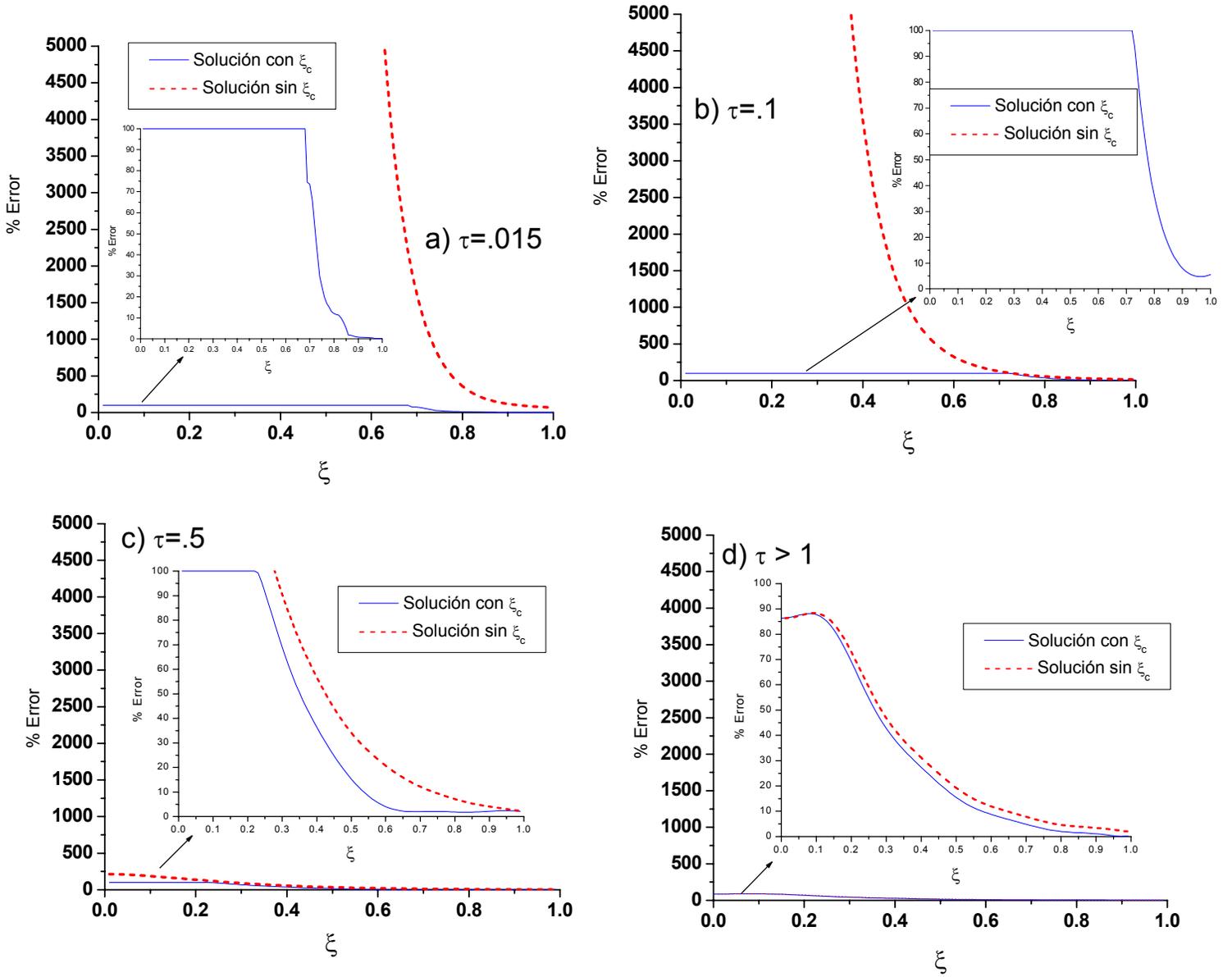


Figura VII-1: Perfiles de error dentro de la partícula en estado transitorio para

$$\psi_{in} = 15, \Phi^2 = 5 \text{ y } Bi = 10.$$

7.2.- Soluciones en el fluido, en la interfase y promedio en la partícula

7.2.1.- Función escalón

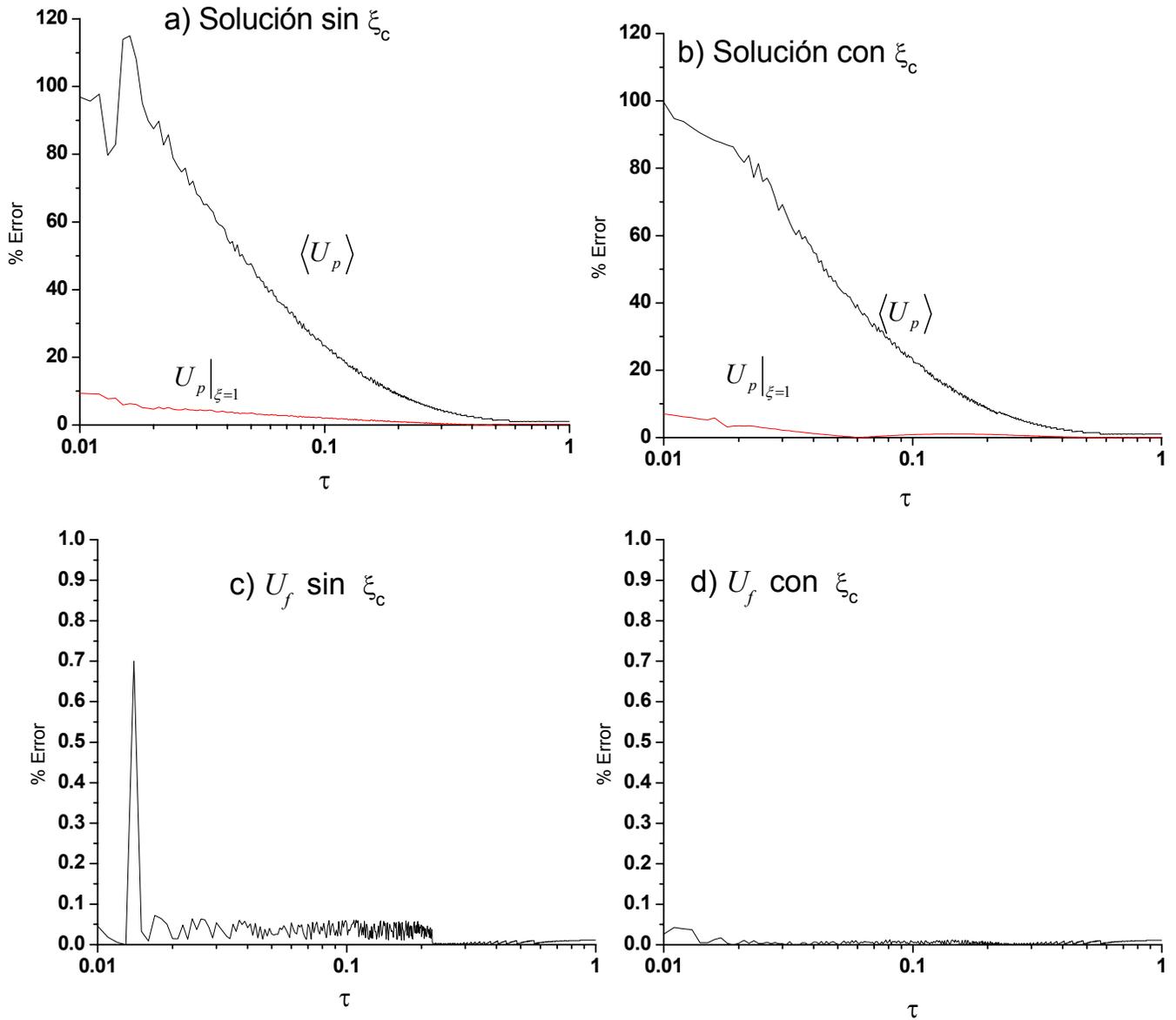


Figura VII-2: Evaluación dinámica del porcentaje de error en las concentraciones del fluido, interfase y promedio en la partícula $\psi_{in} = 15$, $\psi_p = 0.1$, $\Phi^2 = 3$ y

$$Bi = 10.$$

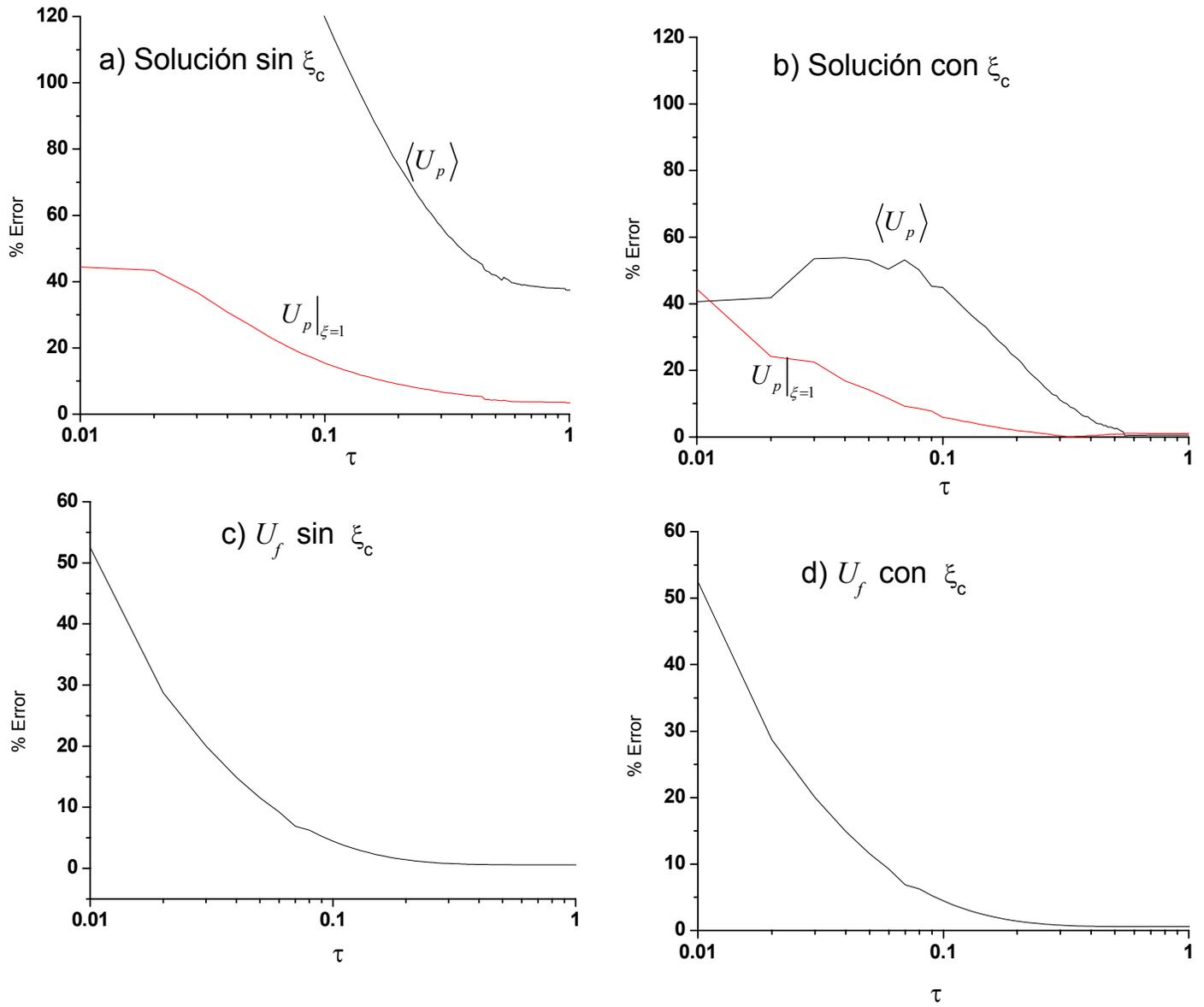


Figura VII-3: Evaluación dinámica del porcentaje de error en las concentraciones del

fluido, interfase y promedio en la partícula $\psi_{in} = 15$, $\psi_p = 0.1$, $\Phi^2 = 8$ y

$Bi = 10$.

7.2.2.- Función Oscilatoria

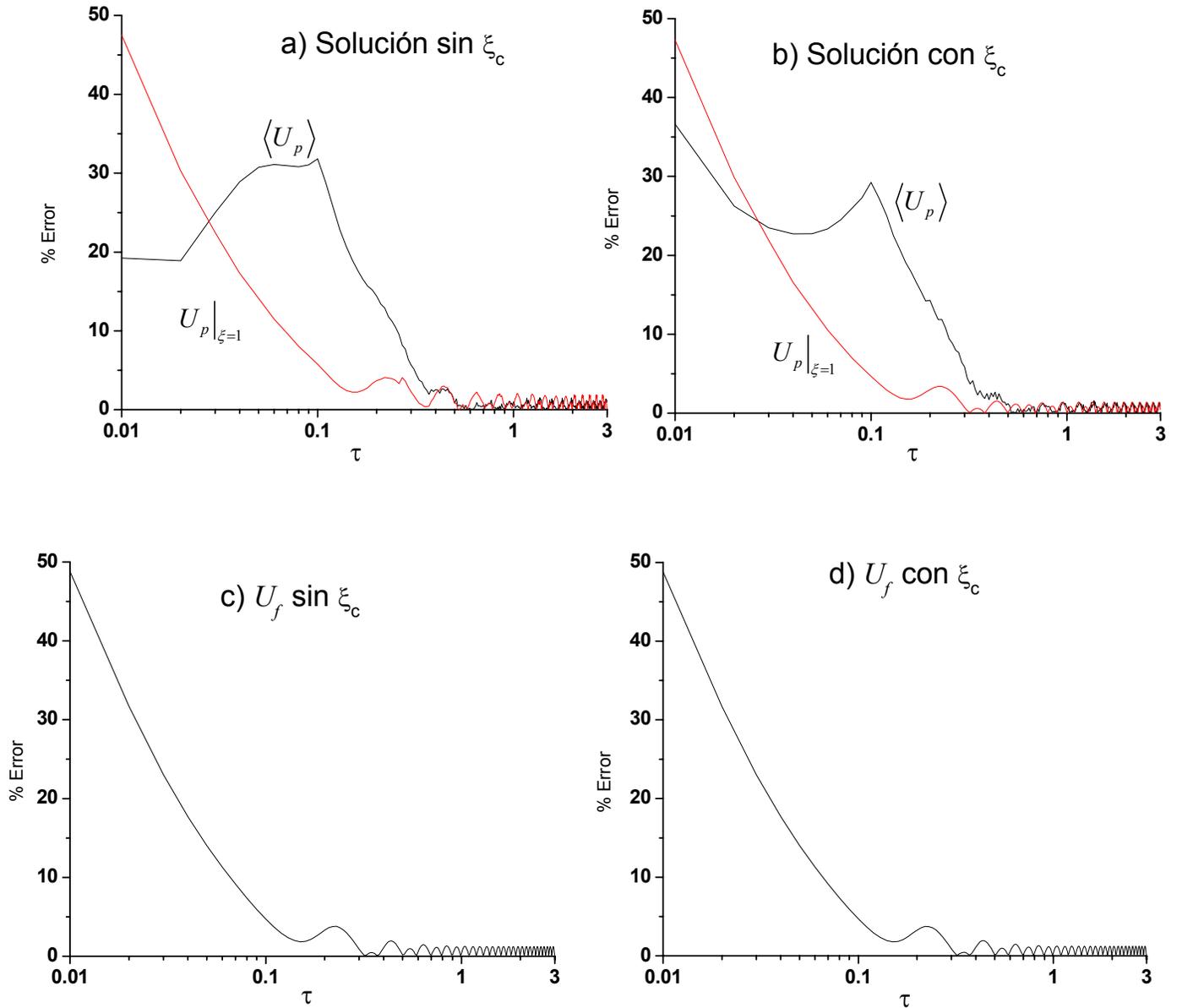


Figura VII-4: Evaluación dinámica del porcentaje de error en las concentraciones del fluido, interfase y promedio en la partícula $\psi_{in} = 5$, $\psi_p = 0.1$, $\Phi^2 = 3$ y $Bi = 100$.

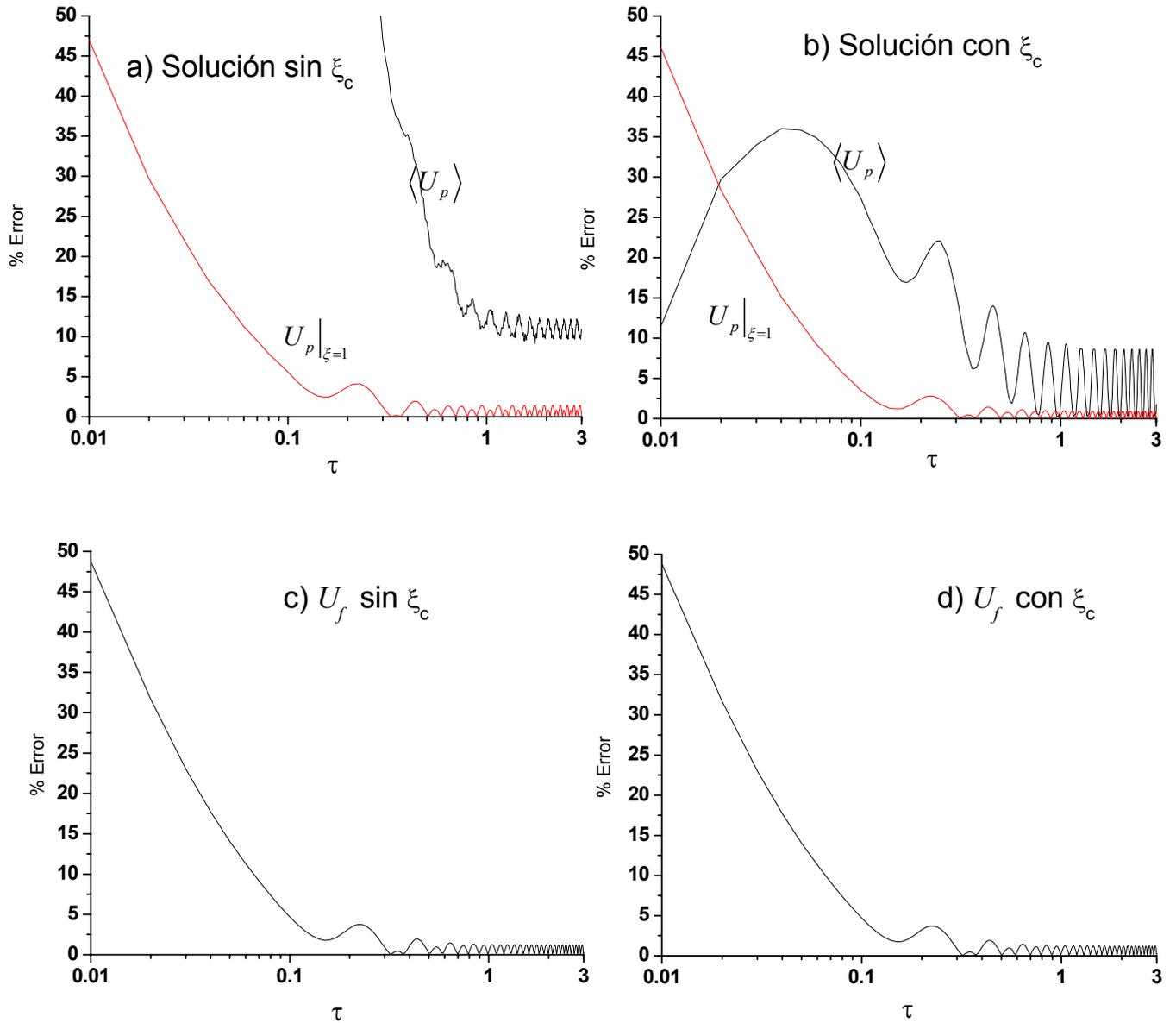


Figura VII-5: Evaluación dinámica del porcentaje de error en las concentraciones del

fluido, interfase y promedio en la partícula $\psi_{in} = 5$, $\psi_p = 0.1$, $\Phi^2 = 8$ y

$Bi = 100$.

7.2.3.- Pulso Finito de duración $\Delta\tau = 0.5$

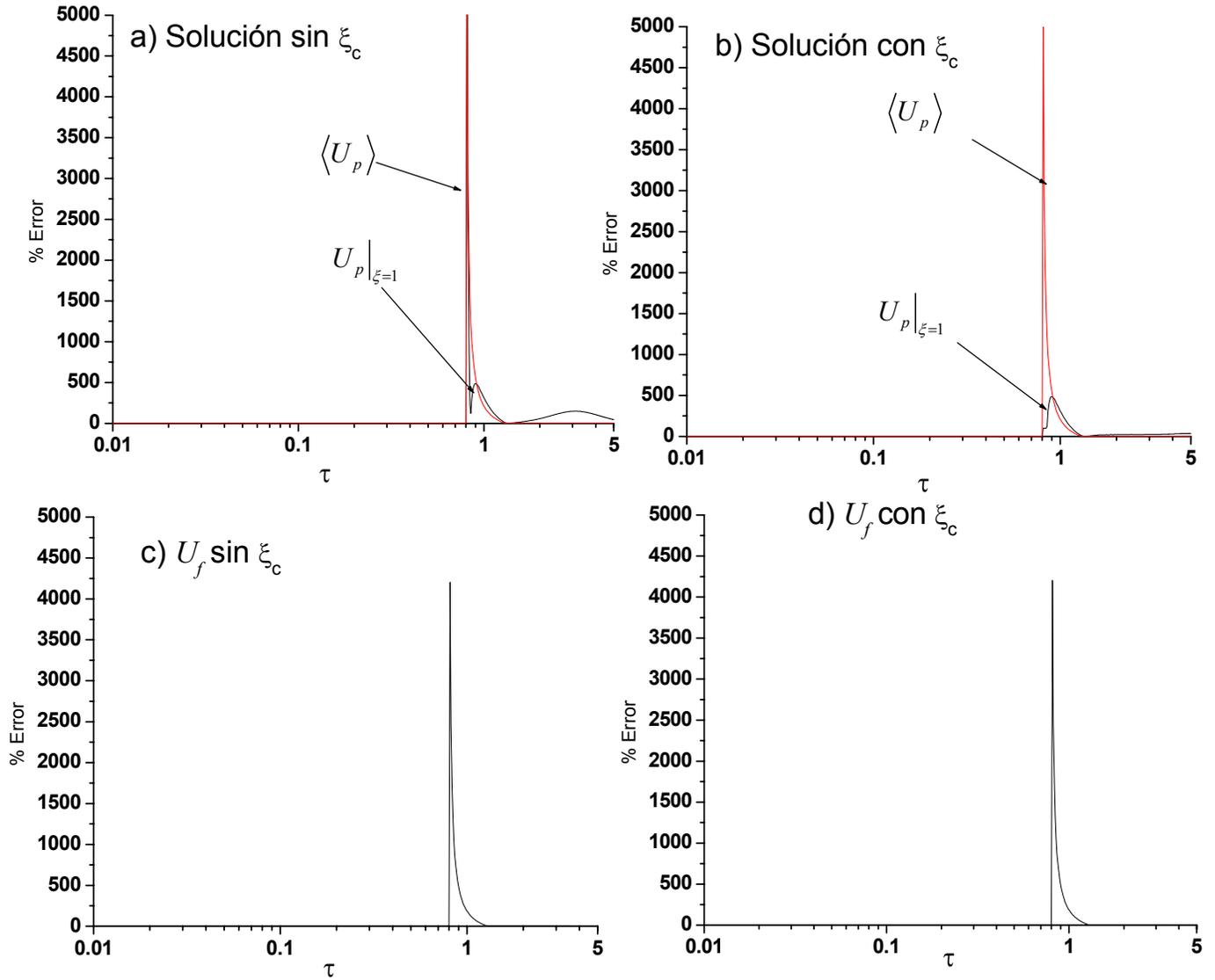


Figura VII-6: Evaluación dinámica del porcentaje de error en las concentraciones del

fluido, interfase y promedio en la partícula $\psi_{in} = 1, \psi_p = 0.1, \Phi^2 = 3$ y

$Bi = 25$.

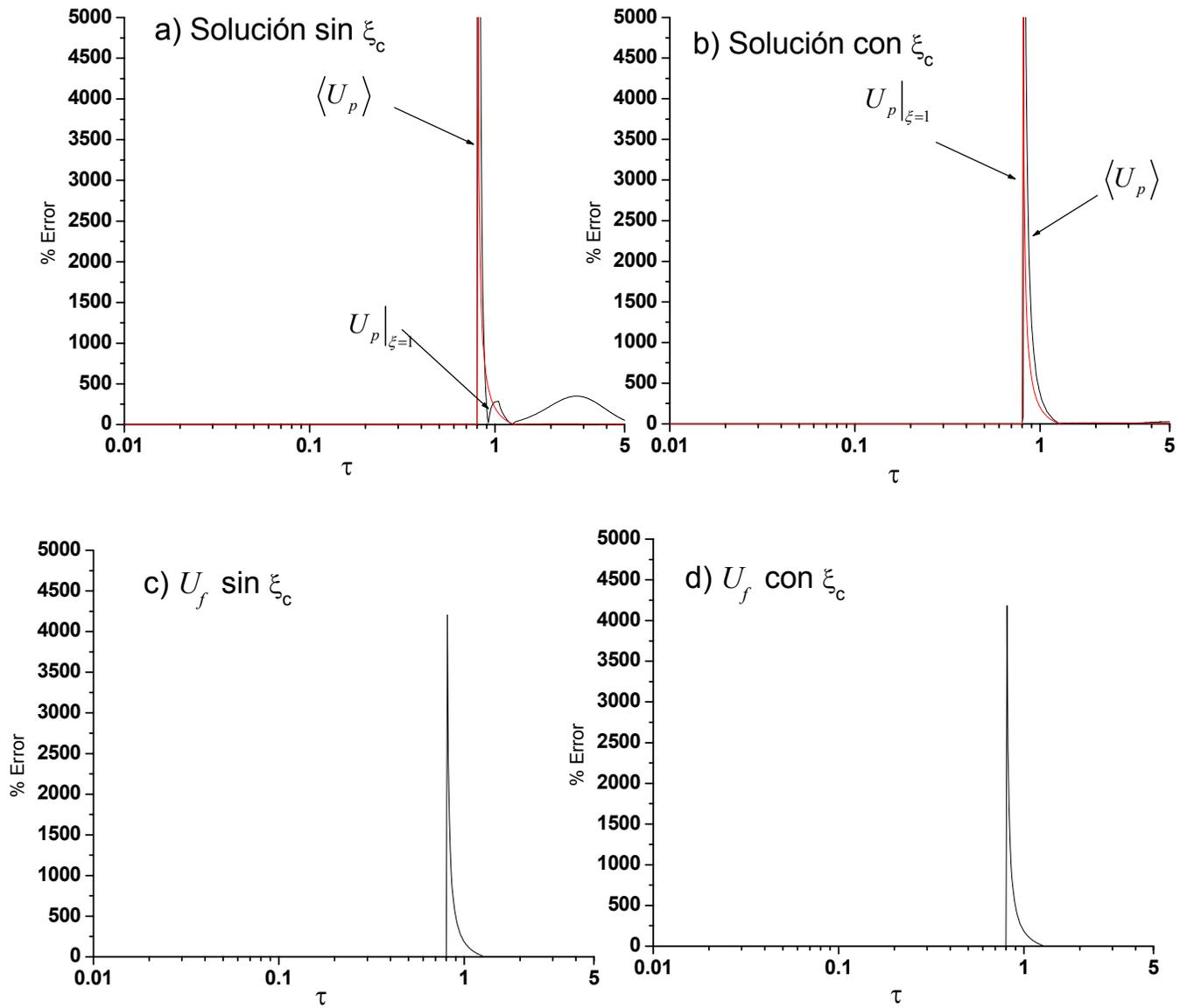


Figura VII-7: Evaluación dinámica del porcentaje de error en las concentraciones del

fluido, interfase y promedio en la partícula $\psi_{in} = 1$, $\psi_p = 0.1$, $\Phi^2 = 8$ y

$Bi = 25$.

7.2.4.- Pulso finito de duración $\Delta\tau = .01$

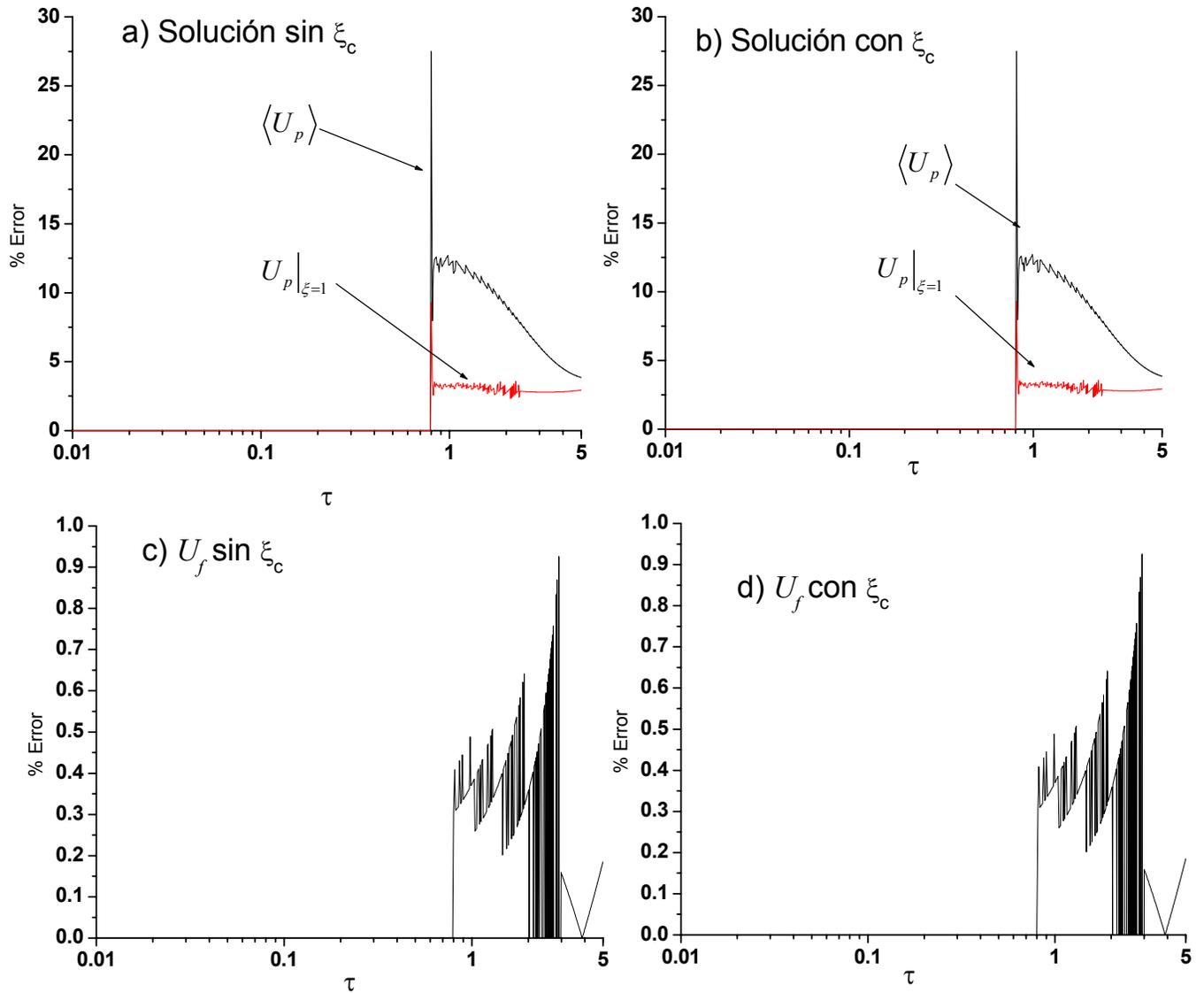


Figura VII-8: Evaluación dinámica del porcentaje de error en las concentraciones del

fluido, interfase y promedio en la partícula $\psi_{in} = 1, \psi_p = 0.1, \Phi^2 = 3$ y

$Bi = 10$.

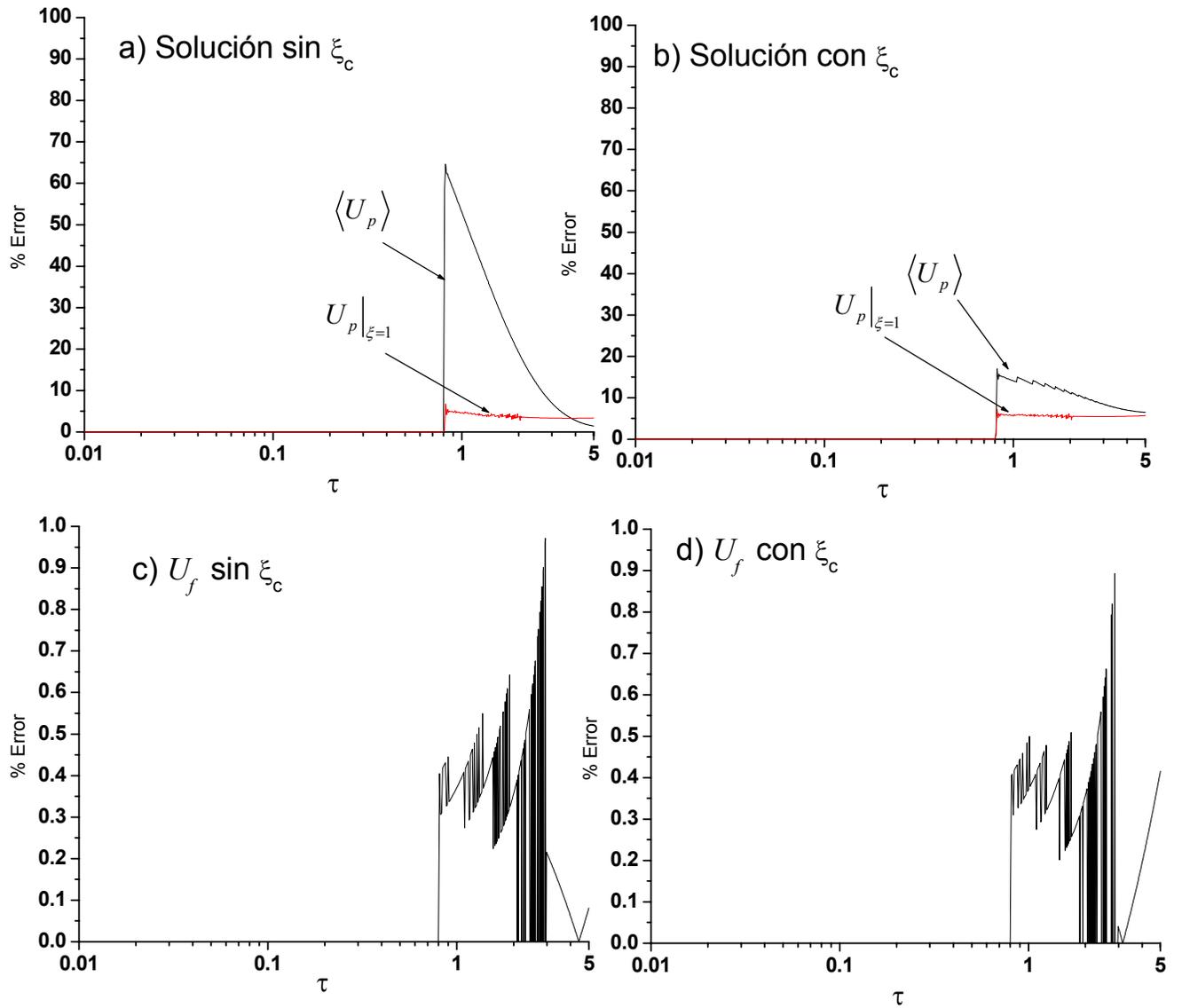


Figura VII-9: Evaluación dinámica del porcentaje de error en las concentraciones del

fluido, interfase y promedio en la partícula $\psi_{in} = 1, \psi_p = 0.1, \Phi^2 = 8$ y

$Bi = 10$.

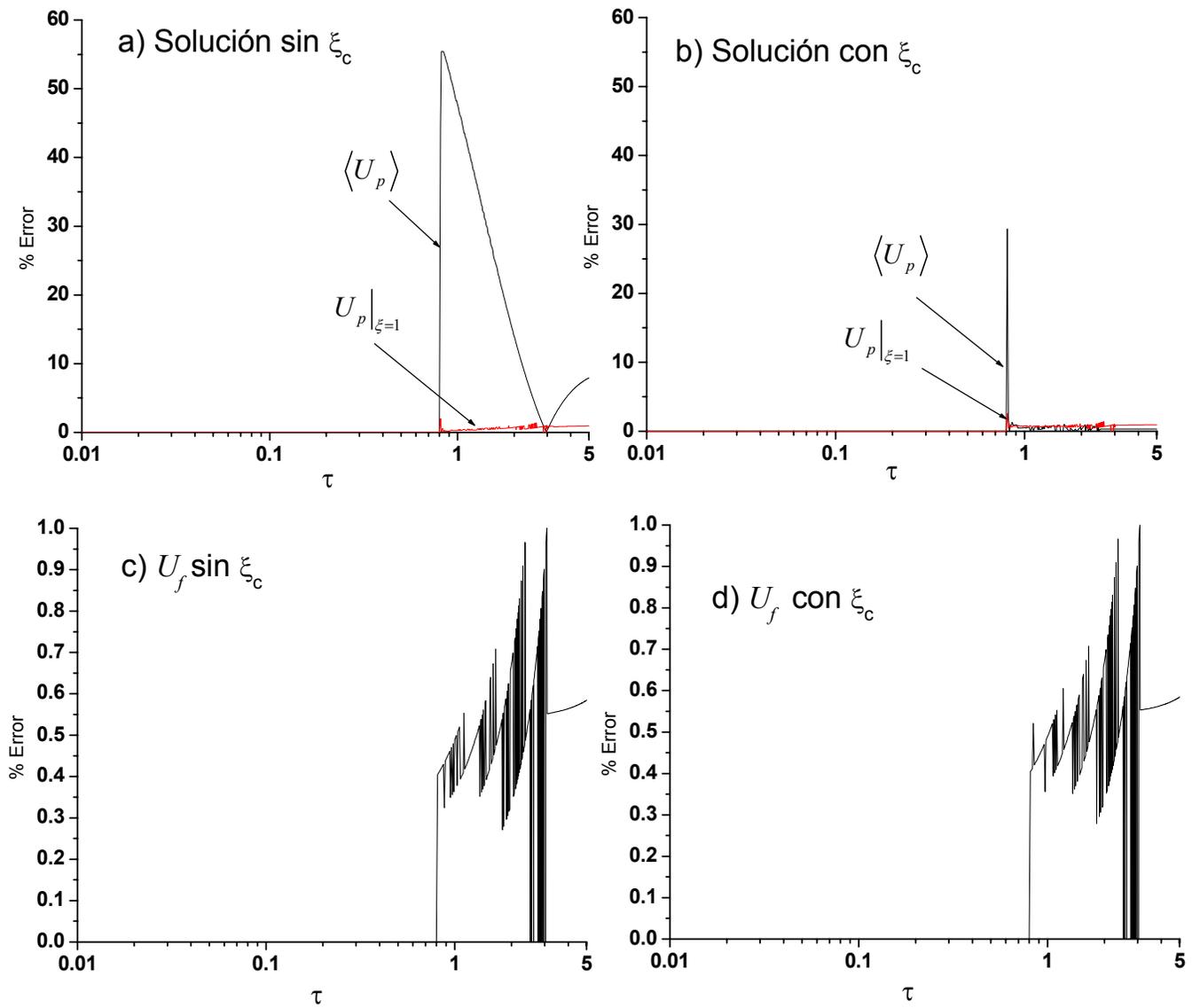


Figura VII-10: Evaluación dinámica del porcentaje de error en las concentraciones del

fluido, interfase y promedio en la partícula $\psi_{in} = 1, \psi_p = 0.1, \Phi^2 = 3$ y

$Bi = 100$.

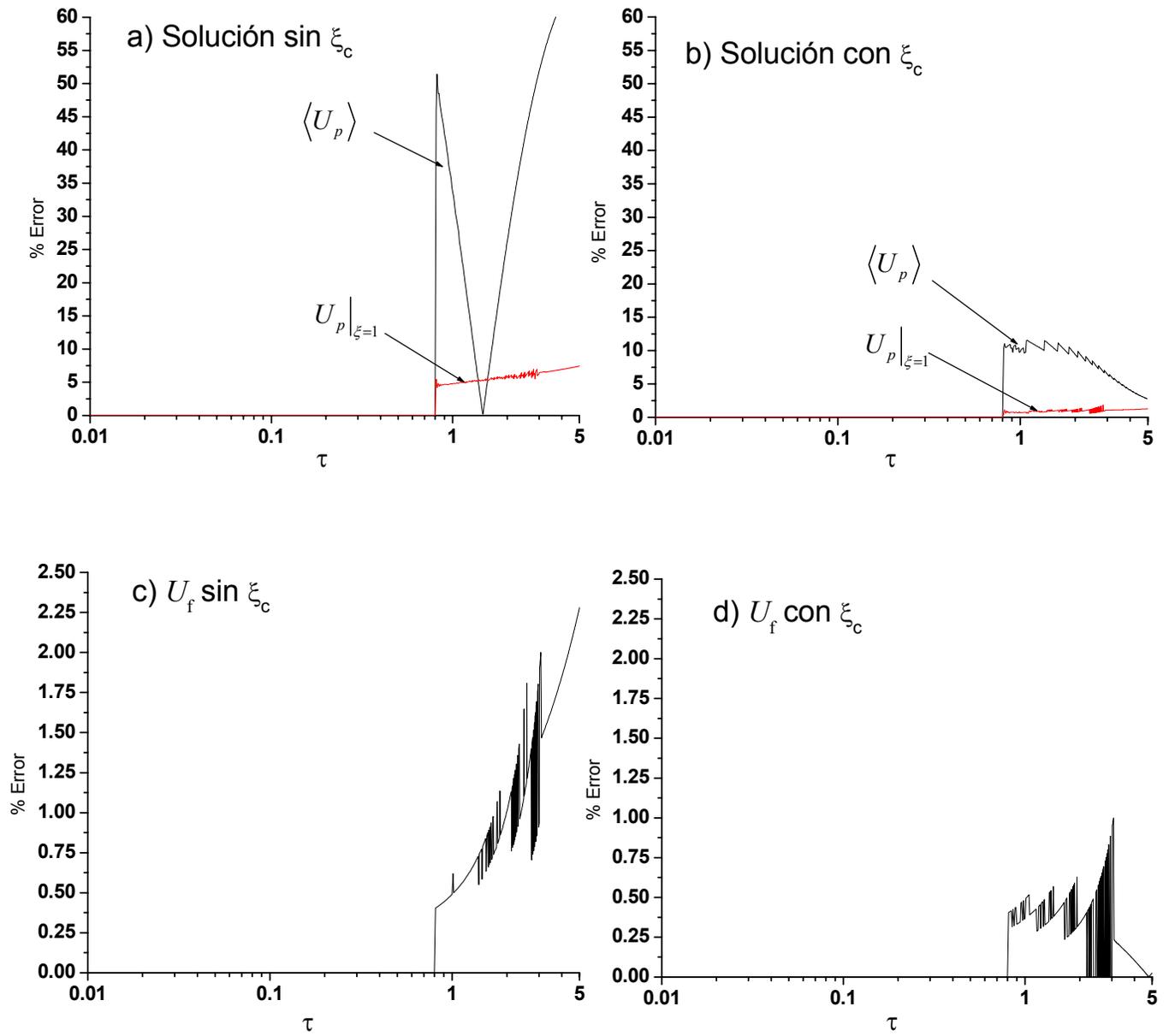


Figura VII-11: Evaluación dinámica del porcentaje de error en las concentraciones del

fluido, interfase y promedio en la partícula $\psi_{in} = 1$, $\psi_p = 0.1$, $\Phi^2 = 8$ y

$Bi = 100$.

7.3.- Derivada en la superficie.

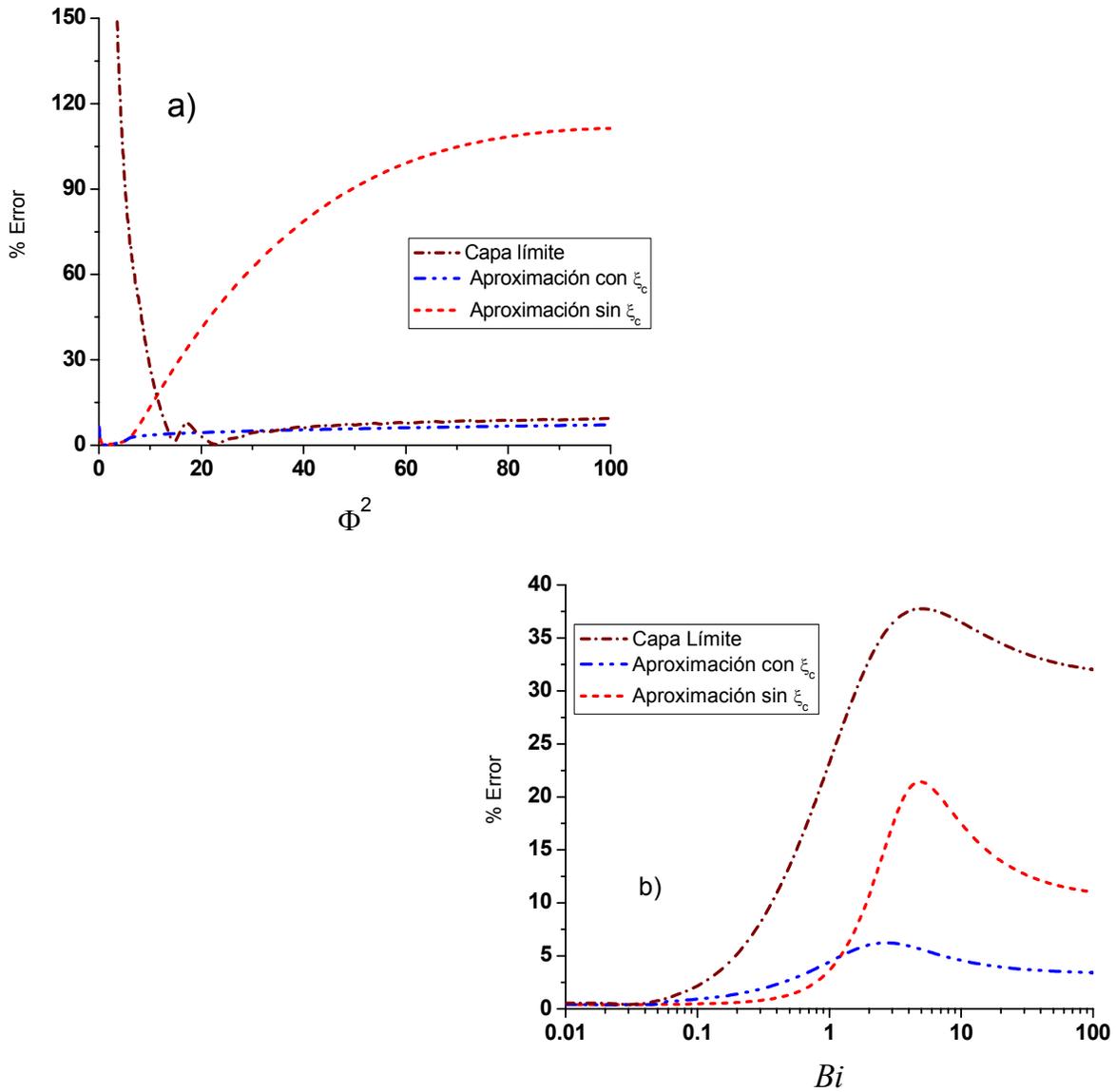


Figura VII-12: Porcentaje de error de la derivada en la superficie en estado estacionario obtenido mediante las soluciones aproximadas con y sin la idea del frente de agotamiento y con la idea de Capa Límite, para $\psi_{in} = 1, \psi_p = 0.1$ a) $Bi = 50$, b) $\Phi^2 = 10$.

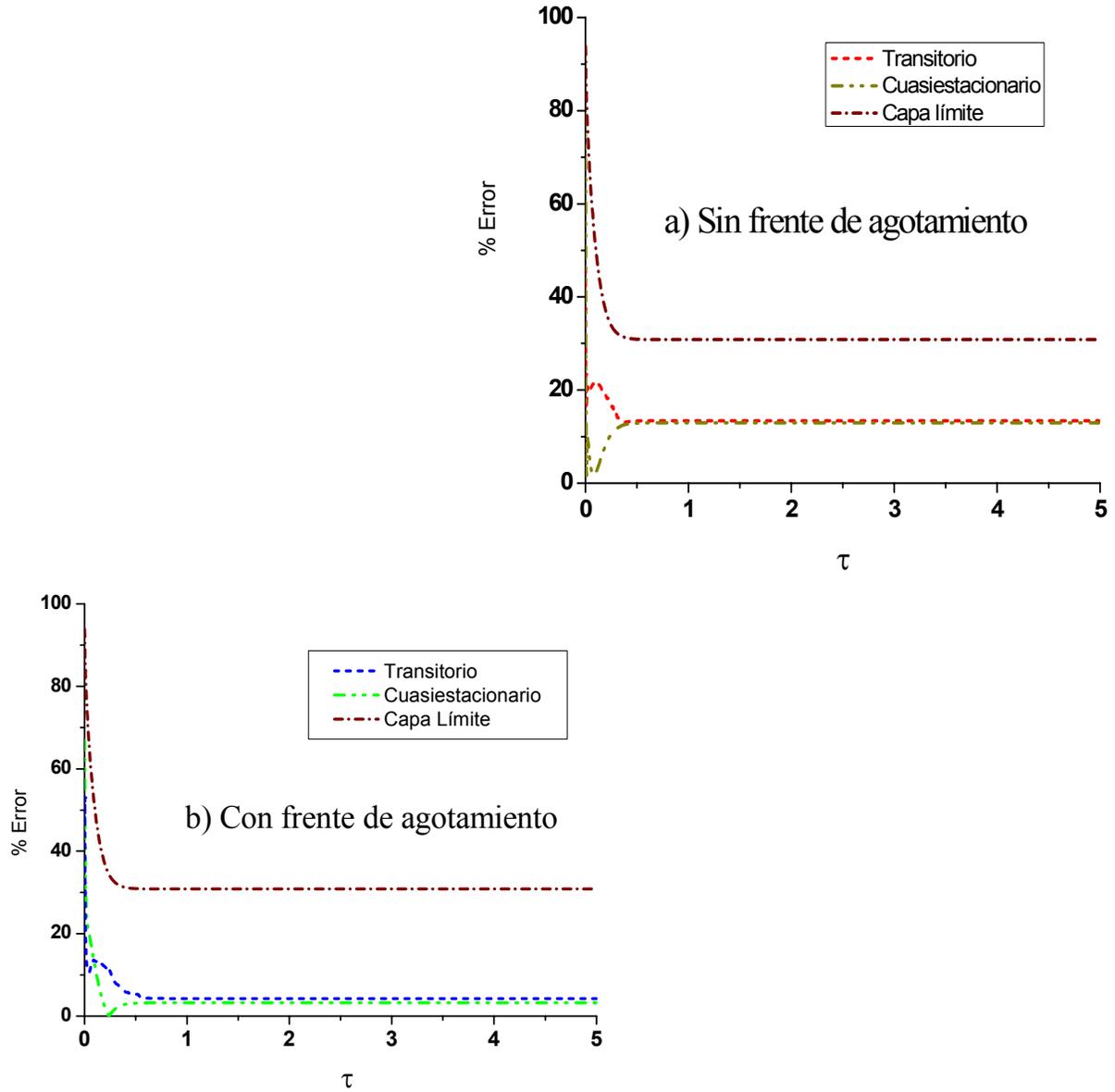


Figura VII-13: Evaluación dinámica del porcentaje de error de la derivada en la superficie obtenido mediante las soluciones aproximadas en estados cuasiestacionario y transitorio, a) sin y b) con la idea del frente de agotamiento, y con la idea de Capa Límite, para $Bi = 50$, $\Phi^2 = 10$, $\psi_{in} = 15$, $\psi_p = 0.1$.

Conclusiones

- El porcentaje de error de las soluciones aproximadas que consideran el frente de agotamiento, en estado estacionario, para la concentración del efluente del reactor es menor al 10%, respecto a la solución numérica del problema exacto.
- Los resultados de la solución aproximada en estado cuasiestacionario y con la idea de Capa Límite, no se alejan significativamente de los resultados, en la fase fluida, obtenidos con la solución aproximada en estado transitorio. Así el análisis de Capa Límite ofrece una alternativa respecto a la solución aproximada, debido a sus bajos tiempos de cómputo y al poco esfuerzo algebraico que implica.
- El método aproximado para resolver problemas de transporte y reacción, con cinética no lineal, bajo las condiciones analizadas en este trabajo, ofrece resultados aceptables en el cálculo de la concentración del efluente de un reactor de tipo tanque agitado de dos fases en estado no estacionario.

Bibliografía

Aris R., 1975, The mathematical theory of diffusion and reaction in permeable catalysts,

Vol 1: the theory of steady state, *Clarendon press-Oxford*, Great Britain.

Bailey J. E., Ollis D.F., 1986, Biochemical Engineering Fundamentals, second edition,

McGraw-Hill, USA.

Bohinski R. C., 1998, Bioquímica, quinta edición, Addison-Wesley, México.

Carberry J., 1976, Chemical and catalytic reaction engineering, *Mc-Graw Hill*, USA.

Cordero Sánchez M.A., 2002, Tesis de maestría, UAM-Iztapalapa, México.

Crank J., 1984, Free and moving boundary problems, *Oxford Science Publications*, USA.

Fogler H. S., 2001, Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas, tercera edición,

Pearson educación, México.

García Ochoa F., Romero A., 1988, The dead zone in a catalyst particle for fractional-

order reactions, *AIChE J.*, **34**, 11, 1916-1918.

García Ochoa F., Romero A., Navarro J.M., 1989, Análisis de reacciones catalíticas de

orden fraccionario, *AFINIDAD XLVI*, **424**, 497-501.

González Rugerío C.A., 2003, Tesis de maestría, UAM-Iztapalapa, México.

Haynes, H. W., 1986, An explicit approximation for the effectiveness factor in poros

heterogeneous catalysts, *Chemical Engineering Science*, **41**, 2, 412-415.

Levenspiel O., 1998, Ingeniería de las reacciones químicas, segunda edición, séptima

reimpresión, *Reverté, S.A.*, México.

Li P., Xiu G., Rodríguez A., 2003, Modeling separation of proteins by inert core

adsorbent in a batch adsorber, *Chemical Engineering Science*, **58**, 3361-3371.

-
- Marrazzo, W.N. Y Merson, R.L., 1975, Enzyme immobilized in a packed-bed reactors kinetic parameters and mass transfer effects, *Biotech. and Bioeng.*, **17**, 1515-1528.
- Marroquín de la Rosa, J. O., Viveros García T., Ochoa Tapia, J. A, 1998, Evaluation of Isothermal Effectiveness Factors for Nonlinear Kinetics Using an Aproximate Method, *Ind. Eng. Chem. Res.* **37** (9) 3780-3781.
- Marroquín de la Rosa, J. O., Viveros García T., Ochoa Tapia, J. A, 1998, Método de estimación aproximada del factor de efectividad isotérmico aplicable a cualquier cinética, *Avances en Ingeniería Química*, **8** (1), 37-43.
- Marroquín de la Rosa, J. O., Morones Escobar, R., Viveros García, T., Ochoa Tapia, J.A., 2002, An analytic solution to the transient difusión-reaction problem in particles dispersed in a slurry reactor, *Chemical Engineering Science.*, **57**, 1409-1417.
- Mikhailov M.D., Özisik M.N., 1984, UNIFIED ANALYSIS OF HEAT AND MASS DIFFUSION, *Dover*, USA.
- Morales Cabrera, M.A., Pérez Cisneros, E.S., Ochoa Tapia, J.A., 2002, Approximate method for the solution of facilitated transport problems in membranes, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **41**, 4626-4631.
- Nakamura S., 1992, Métodos Numéricos Aplicados con Software, *Pertince-Hall Hispanoamericana, S. A.*, México.
- Nielsen J., Villadsen J., Liden G., 2003, Bioreaction engineering Principles second edition, *Kluwer Academic/Plenum publishers*, USA.
- Ochoa Tapia J.A, 2003, Solución aproximada del problema de difusión y reacción en una partícula catalítica esférica, *Memorias del XXIV Encuentro Nacional de la AMIDIQ*, 309-314.
-

-
- Perry R. H., Green D.W., 1998, Perry's Chemical Engineers' Handbook, seventh edition, *Mc-Graw Hill*, USA.
- Sales Cruz M.A., Pérez-Cisneros E.S., Ochoa Tapia J.A., 2002, An analytic solution for the transient diffusion and reaction problem in a multi-layer system, *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, Vol. 1, 57-72.
- Schlichting H., 1987, Boundary Layer Theory, seventh edition, *Mc-Graw Hill*, USA.
- Smith J. M., 1999, Ingeniería de la Cinética Química, décimo segunda reimpresión, *CECSA*, México.
- Spiegel M.R., 1966, Mathematical Handbook of formulas and tables, *McGraw.Hill*, U.S.A.
- Szukiewicz M., 2000, New approximate model for diffusion and reaction in a porous catalyst, *AIChE J.*, **46**, No.3, 661-665.
- Szukiewicz, M., 2001, Approximate model for diffusion and reaction in a porous catalyst with mass-transfer resistances, *AIChE J.*, **47**, No. 9, 2131-2135.
- Szukiewicz, M., 2002, An approximate model for difusión and reaction in a porous pellet, *Chemical Engineering Science*, **57**, 1451-1457.
- Szukiewicz, M., Petrus R., 2004, Approximate model for diffusion and reaction in a porous pellet and an effectiveness factor, *Chem. Eng. Sci.*, **59**, 479-483.
- Temkin, M.I., 1982, Fractional-order reaction in a spherical porous catalyst particle, *Kinet. Cat.*, **22**, 844-845
- Towler B.F., Rice R.G., 1974, A note on the response of a CSTR to a spherical catalyst pellet, *Chemical Engineering Science*, **29**, 1828-1832.
- Voet D., Voet J.G., 1992, Bioquímica, *Omega*, S. A., España.

- Wood B., Whitaker S., 2000, Multi-species diffusion and reaction in cellular media, *Chemical Engineering Science*, **55**, 3397-3418.
- Wood B., Quintard M., Whitaker S., 2002, Calculation of effective diffusivities for biofilms and tissues, *Biotechnology and bioengineering*, **77**, 495-516.
- Whitaker S., 1983, Fundamental principles of heat transfer, *Krieger Publishing Company*, USA.
- Whitaker S., 1999, The Method of Volume Averaging, *Kluwer Academic Publishers*, USA.
- Westerterp K. R., Van Swaaij W. P. M., Beenackers, 1990, Chemical Reactor Design and Operation, John Wiley, Great Britain.

Apéndice A-0:

Dedución de la ecuación de la partícula

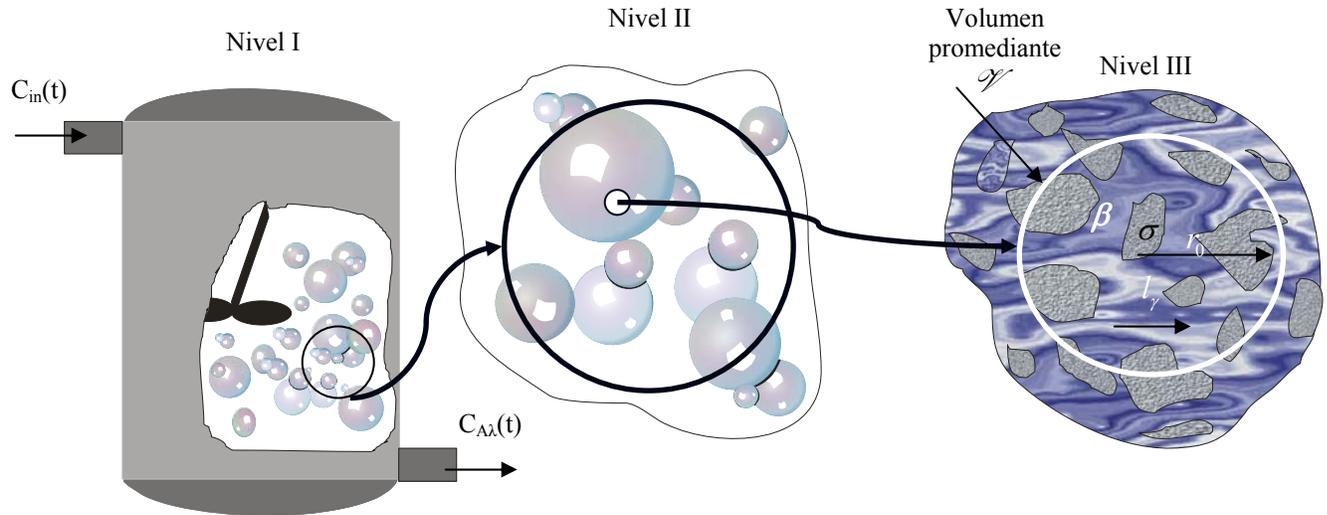


Figura A-0.1: Diferentes escalas y volúmenes promediantes para el reactor

Para la deducción de la ecuación de la partícula es necesario reconocer que existen distintos niveles de escalamiento en el análisis del tanque agitado; el propósito de esta sección es pasar de ecuaciones puntuales válidas en el Nivel III de la Figura A-0.1, a ecuaciones promediadas aplicables en el Nivel II que se usarán posteriormente para desarrollar, junto con las ecuaciones del fluido, las ecuaciones de transporte que se resolverán en este trabajo.

A-0.1.- Ecuaciones puntuales

Suponiendo que sólo hay transporte de la fase β a la σ y que la reacción sólo se lleva a cabo en la interfase, así como que se trata de una solución diluida, el problema se define por:

$$\frac{\partial C_{A\beta}}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{D}_B \nabla C_{A\beta}), \text{ en la fase } \beta \quad (\text{A-0.1})$$

$$\text{C.F.1} \quad -\underline{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathcal{D}_B \nabla C_{A\beta} = \frac{kC_{A\beta}}{1 + KC_{A\beta}}, \text{ en } \mathcal{A}_{\beta\sigma} \quad (\text{A-0.2})$$

$$\text{C.F.2} \quad C_{A\beta} = \mathcal{F}(r, t), \text{ en } \mathcal{A}_{\beta e} \quad (\text{A-0.3})$$

$$\text{C.I.} \quad C_{A\beta} = \mathcal{G}(r), \text{ cuando } t = 0 \quad (\text{A-0.4})$$

En (A-0.1) \mathcal{D}_B representa la difusividad de mezclado y $C_{A\beta}$ la concentración del sustrato; en (A-0.2) $\underline{n}_{\beta\sigma}$ representa el vector unitario normal dirigido de la fase β a la σ , las constantes k y K se definen como:

$$k = V_{max} / K_m \text{ y } K = 1 / K_m \quad (\text{A-0.5a,b})$$

y $\mathcal{A}_{\beta\sigma}$ denota el área interfacial; las condiciones de (A-0.3) y (A-0.4) son las condiciones de entradas y salidas e inicial respectivamente, las cuales raras veces se conocen a esta escala, así que se pueden tomar más como un recordatorio de lo que no se conoce del sistema.

A-0.2.- Promediado

Definimos el promedio superficial de C_{AB} como:

$$\langle C_{AB} \rangle = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{V_\beta} C_{AB} dV \quad (\text{A-0.6})$$

y el promedio intrínseco como:

$$\langle C_{AB} \rangle^\beta = \frac{1}{V_\beta} \int_{V_\beta} C_{AB} dV \quad (\text{A-0.7})$$

dividiendo las dos ecuaciones anteriores se obtiene :

$$\langle C_{AB} \rangle = \varepsilon_\beta \langle C_{AB} \rangle^\beta \quad (\text{A-0.8})$$

donde ε_β representa la fracción volumétrica de la fase β , definida como:

$$\varepsilon_\beta = \frac{V_\beta}{\mathcal{V}} \quad (\text{A-0.9})$$

Aplicando el operador de (A-0.6) a (A-0.1):

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{V_\beta} \frac{\partial C_{AB}}{\partial t} dV = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{V_\beta} \nabla \cdot (\mathcal{D}_B \nabla C_{AB}) dV \quad (\text{A-0.10})$$

suponemos que el medio es rígido, por lo que se puede intercambiar diferenciación e integración en el miembro izquierdo de la ecuación anterior:

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{V_\beta} \frac{\partial C_{AB}}{\partial t} dV = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{V_\beta} C_{AB} dV \right) = \frac{\partial \langle C_{AB} \rangle}{\partial t} = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{V_\beta} \nabla \cdot (\mathcal{D}_B \nabla C_{AB}) dV \quad (\text{A-0.11})$$

Por otro lado se tiene el teorema del promediado espacial para un escalar y un vector:

$$\langle \nabla \psi_\beta \rangle = \nabla \langle \psi_\beta \rangle + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} n_{\beta\sigma} \psi_\beta dA \quad (\text{A-0.12})$$

$$\langle \tilde{\nabla} \cdot \underline{a}_\beta \rangle = \tilde{\nabla} \cdot \langle \underline{a}_\beta \rangle + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot \underline{a}_\beta dA \quad (\text{A-0.13})$$

donde ψ_β representa cualquier función escalar y \underline{a}_β cualquier función vectorial.

Aplicando (A-0.13) a (A-0.11):

$$\frac{\partial \langle C_{A\beta} \rangle}{\partial t} = \tilde{\nabla} \cdot \langle \mathcal{D}_B \tilde{\nabla} C_{A\beta} \rangle + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot (\mathcal{D}_B \tilde{\nabla} C_{A\beta}) dA \quad (\text{A-0.14})$$

Descpreciando las variaciones de \mathcal{D}_B en el volumen promediante, se obtiene, tras aplicar

(A-0.12) a la ecuación anterior:

$$\frac{\partial \langle C_{A\beta} \rangle}{\partial t} = \tilde{\nabla} \cdot \left[\mathcal{D}_B \left(\tilde{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} C_{A\beta} dA \right) \right] + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot (\mathcal{D}_B \tilde{\nabla} C_{A\beta}) dA \quad (\text{A-0.15})$$

Ahora proponemos una descomposición espacial de la forma:

$$C_{A\beta} = \langle C_{A\beta} \rangle^\beta + \tilde{C}_{A\beta} \quad (\text{A-0.16})$$

donde $\tilde{C}_{A\beta}$ representa las desviaciones espaciales de la concentración. Sustituyendo (A-

0.16) a (A-0.15):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle C_{A\beta} \rangle}{\partial t} = \tilde{\nabla} \cdot \left[\mathcal{D}_B \left(\tilde{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta dA + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \tilde{C}_{A\beta} dA \right) \right] \\ + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot (\mathcal{D}_B \tilde{\nabla} C_{A\beta}) dA \end{aligned} \quad (\text{A-0.17})$$

Sustituyendo (A-0.8):

$$\varepsilon_\beta \frac{\partial \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\mathcal{D}_B \left(\varepsilon_\beta \nabla \langle C_{A\beta} \rangle^\beta + \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \nabla \varepsilon_\beta + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} n_{\beta\sigma} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta dA + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} n_{\beta\sigma} \tilde{C}_{A\beta} dA \right) + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} n_{\beta\sigma} \cdot (\mathcal{D}_B \nabla C_{A\beta}) dA \right] \quad (\text{A-0.18})$$

A-0.3.- Expansión en series de Taylor

De la Figura A-0.2 se tiene que:

$$r_\beta = x + y_\beta \quad (\text{A-0.19})$$

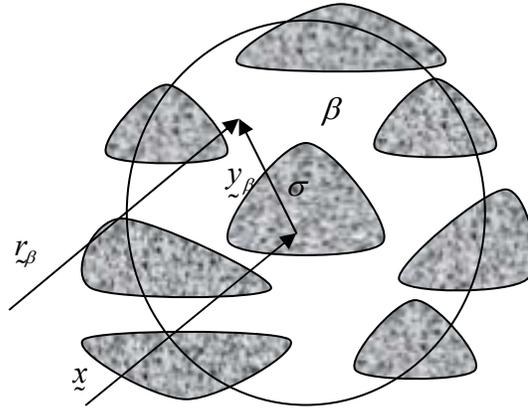


Figura A-0.2: Vectores relacionados con el volumen promediante

donde r_β localiza cualquier punto en la fase β , x localiza el centroide del volumen promediante y y_β localiza puntos en la fase β relativos al centroide.

Expandiendo en series de Taylor, alrededor del centroide del volumen promediante, la primera integral en el lado derecho de (A-0.18) se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}+\underline{y}_\beta} dA = & \left\{ \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} dA \right\} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}} + \left\{ \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \underline{y}_\beta dA \right\} \cdot \underline{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}} \\ & + \left\{ \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \frac{1}{2} \underline{y}_\beta \underline{y}_\beta dA \right\} : \underline{\nabla} \underline{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}} + \dots \end{aligned} \quad (\text{A-0.20})$$

donde los términos entre llaves son:

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} dA = -\underline{\nabla} \varepsilon_\beta \quad (\text{A-0.21})$$

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \underline{y}_\beta dA = -\underline{\nabla} \langle \underline{y}_\beta \rangle \quad (\text{A-0.22})$$

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \frac{1}{2} \underline{y}_\beta \underline{y}_\beta dA = -\frac{1}{2} \underline{\nabla} \langle \underline{y}_\beta \underline{y}_\beta \rangle \quad (\text{A-0.23})$$

por lo que (A-0.20) se puede escribir como:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}+\underline{y}_\beta} dA = & -\underline{\nabla} \varepsilon_\beta \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}} - \underline{\nabla} \langle \underline{y}_\beta \rangle \cdot \underline{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}} \\ & - \frac{1}{2} \underline{\nabla} \langle \underline{y}_\beta \underline{y}_\beta \rangle : \underline{\nabla} \underline{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}} - \dots \end{aligned} \quad (\text{A-0.24})$$

Haciendo estimados de orden de magnitud se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}+\underline{y}_\beta} dA = & \mathcal{O} \left(\frac{\varepsilon_\beta}{L_\varepsilon} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \right) + \mathcal{O} \left(\frac{r_0}{L_\varepsilon} \underline{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \right) \\ & \mathcal{O} \left(\frac{r_0^2}{L_\varepsilon L_{C_1}} \underline{\nabla} \underline{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \right) - \dots \end{aligned} \quad (\text{A-0.25})$$

Aquí se fijó a r_0 como la distancia característica asociada con \underline{y}_β ; además L_ε y L_{C_1}

están definidos como:

$$\underline{\nabla} \varepsilon_\beta = \mathcal{O}(\varepsilon_\beta / L_\varepsilon), \quad \underline{\nabla} \underline{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta = \mathcal{O}(\underline{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta / L_{C_1}) \quad (\text{A-0.26a,b})$$

entonces, si se cumple que

$$r_0 \ll L_\varepsilon \quad (\text{A-0.27})$$

$$r_0^2 \ll L_\varepsilon L_{C_1} \quad (\text{A-0.28})$$

entonces (A-0.24) puede escribirse como:

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \langle C_{AB} \rangle^\beta dA = -\underline{\nabla} \varepsilon_\beta \langle C_{AB} \rangle^\beta \quad (\text{A-0.29})$$

sustituyendo (A-0.29) en (A-0.18):

$$\varepsilon_\beta \frac{\partial \langle C_{AB} \rangle^\beta}{\partial t} = \underline{\nabla} \cdot \left[\mathcal{D}_B \left(\varepsilon_\beta \underline{\nabla} \langle C_{AB} \rangle^\beta + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \tilde{C}_{AB} dA \right) \right] + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot (\mathcal{D}_B \underline{\nabla} C_{AB}) dA \quad (\text{A-0.30})$$

A-0.4.- Término de reacción

Se trabajará ahora con la última integral del lado derecho de (A-0.30). Aplicando la condición de (A-0.2), se tiene:

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot (\mathcal{D}_B \underline{\nabla} C_{AB}) dA = -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \frac{k C_{AB}}{1 + K C_{AB}} dA \quad (\text{A-0.31})$$

usando la descomposición espacial de (A-0.16):

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot (\mathcal{D}_B \underline{\nabla} C_{AB}) dA = -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \frac{k \left(\langle C_{AB} \rangle^\beta + \tilde{C}_{AB} \right)}{1 + K \left(\langle C_{AB} \rangle^\beta + \tilde{C}_{AB} \right)} dA \quad (\text{A-0.32})$$

Se demostrará más adelante que $\langle C_{AB} \rangle^\beta \gg \tilde{C}_{AB}$, por lo que:

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot (\mathcal{D}_B \underline{\nabla} C_{A\beta}) dA = - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \frac{k \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}+\underline{y}_\beta}}{1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}+\underline{y}_\beta}} dA \quad (\text{A-0.33})$$

expandiendo el promedio superficial en series de Taylor alrededor del centroide:

$$\langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}+\underline{y}_\beta} = \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}} + \underline{y}_\beta \cdot \underline{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}} + \frac{1}{2} \underline{y}_\beta \underline{y}_\beta : \underline{\nabla} \underline{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}+\underline{y}_\beta} + \dots \quad (\text{A-0.34})$$

en términos de estimados de orden de magnitud:

$$\langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}+\underline{y}_\beta} = Q \left(1 + \frac{r_0}{L_C} + \frac{r_0^2}{L_{C_1} L_C} + \dots \right) \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}} \quad (\text{A-0.35})$$

por lo que si se cumple que:

$$r_0 \ll L_C \quad (\text{A-0.36})$$

$$r_0^2 \ll L_{C_1} L_C \quad (\text{A-0.37})$$

entonces:

$$\langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}+\underline{y}_\beta} = \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}}. \quad (\text{A-0.38})$$

Así, (A-0.33) se puede escribir como:

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot (\mathcal{D}_B \underline{\nabla} C_{A\beta}) dA = - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \frac{k \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}+\underline{y}_\beta}}{1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}+\underline{y}_\beta}} dA = - \frac{ka_v \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}}}{1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}}} \quad (\text{A-0.39})$$

donde:

$$a_v = \frac{A_{\beta\sigma}}{\mathcal{V}} \quad (\text{A-0.40})$$

por lo que (A-0.30) se puede escribir como:

$$\varepsilon_\beta \frac{\partial \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\mathcal{D}_B \left(\varepsilon_\beta \nabla \langle C_{A\beta} \rangle^\beta + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underbrace{n_{\beta\sigma} \tilde{C}_{A\beta}}_{\text{filtro}} dA \right) \right] - \frac{a_v k \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta} \quad (\text{A-0.41})$$

A-0.5.- Problema de cerradura

Es necesario expresar las desviaciones como función del promedio, para ello en primer lugar se debe reescribir (A-0.41) como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} &= \nabla \cdot \left(\mathcal{D}_B \nabla \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \right) + \varepsilon_\beta^{-1} \nabla \varepsilon_\beta \cdot \left(\mathcal{D}_B \nabla \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \right) \\ &+ \varepsilon_\beta^{-1} \nabla \cdot \left(\frac{\mathcal{D}_B}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} n_{\beta\sigma} \tilde{C}_{A\beta} dA \right) - \frac{\varepsilon_\beta^{-1} a_v k \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta} \end{aligned} \quad (\text{A-0.42})$$

restando (A-0.1) y (A-0.42), tomando en cuenta la descomposición espacial:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{C}_{A\beta}}{\partial t} &= \nabla \cdot \left(\mathcal{D}_B \nabla \tilde{C}_{A\beta} \right) - \underbrace{\varepsilon_\beta^{-1} \nabla \varepsilon_\beta \cdot \left(\mathcal{D}_B \nabla \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \right)}_{\text{fuente difusiva volumetrica}} \\ &- \varepsilon_\beta^{-1} \nabla \cdot \left(\frac{\mathcal{D}_B}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} n_{\beta\sigma} \tilde{C}_{A\beta} dA \right) + \underbrace{\frac{\varepsilon_\beta^{-1} a_v k \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}}_{\text{fuente reactiva volumetrica}} \end{aligned} \quad (\text{A-0.43})$$

aplicando la descomposición espacial a (A-0.2) hasta (A-0.4):

$$\text{C.F.1} \quad \underbrace{-n_{\beta\sigma} \cdot \mathcal{D}_B \nabla \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}_{\text{fuente difusiva superficial}} - n_{\beta\sigma} \cdot \mathcal{D}_B \nabla \tilde{C}_{A\beta} = \frac{k \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{\underbrace{1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}_{\text{fuente reactiva superficial}}}, \text{ en } \mathcal{A}_{\beta\sigma} \quad (\text{A-0.44})$$

$$\text{C.F.2} \quad \tilde{C}_{A\beta} = \mathcal{H}(r, t), \text{ en } \mathcal{A}_{\beta e} \quad (\text{A-0.45})$$

$$\text{C.I.} \quad \tilde{C}_{AB} = \mathcal{S}(r), \text{ cuando } t = 0 \quad (\text{A-0.46})$$

Los estimados de orden de magnitud de las dos fuentes difusivas son:

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{V_\beta} \varepsilon_\beta^{-1} \nabla \varepsilon_\beta \cdot \left(\mathcal{D}_B \nabla \langle C_{AB} \rangle^\beta \right) dV = \mathcal{Q} \left(\frac{\mathcal{D}_B \nabla \langle C_{AB} \rangle^\beta}{L_\varepsilon} \right) \quad (\text{A-0.47})$$

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} n_{\beta\sigma} \cdot \mathcal{D}_B \nabla \langle C_{AB} \rangle^\beta dV = \mathcal{Q} \left(\frac{\mathcal{D}_B \nabla \langle C_{AB} \rangle^\beta}{l_\beta} \right) \quad (\text{A-0.48})$$

y como $l_\beta \ll L_\varepsilon$, entonces la fuente difusiva volumétrica es despreciable respecto a la superficial, por lo que (A-0.43) se puede escribir como:

$$\frac{\partial \tilde{C}_{AB}}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\mathcal{D}_B \nabla \tilde{C}_{AB} \right) - \varepsilon_\beta^{-1} \nabla \cdot \left(\frac{\mathcal{D}_B}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} n_{\beta\sigma} \tilde{C}_{AB} dA \right) + \frac{\varepsilon_\beta^{-1} a_v k \langle C_{AB} \rangle^\beta}{1 + K \langle C_{AB} \rangle^\beta} \quad (\text{A-0.49})$$

y en términos de estimados de orden de magnitud,

$$\mathcal{Q} \left(\frac{\tilde{C}_{AB}}{t^*} \right) = \mathcal{Q} \left(\frac{\mathcal{D}_B \tilde{C}_{AB}}{l_\beta^2} \right) - \mathcal{Q} \left(\frac{\mathcal{D}_B}{l_\beta L_C} \tilde{C}_{AB} \right) + \mathcal{Q} \left(\frac{\varepsilon_\beta^{-1} a_v k \langle C_{AB} \rangle^\beta}{1 + K \langle C_{AB} \rangle^\beta} \right) \quad (\text{A-0.50})$$

por lo que sí

$$\frac{\mathcal{D}_B t^*}{l_\beta^2} \gg 1, \quad L_C \gg l_\beta \quad (\text{A-0.51a,b})$$

entonces:

$$\nabla^2 \tilde{C}_{AB} = - \left(\frac{a_v k}{\varepsilon_\beta \mathcal{D}_B} \right) \frac{\langle C_{AB} \rangle^\beta}{1 + K \langle C_{AB} \rangle^\beta} \quad (\text{A-0.52})$$

Haciendo ahora el estimado de (A-0.44):

$$\tilde{\mathcal{Q}}\left(\frac{\mathcal{D}_\beta}{l_\beta} \tilde{C}_{A\beta}\right) = \tilde{\mathcal{Q}}\left(\frac{\mathcal{D}_\beta}{L_C} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta\right) + \tilde{\mathcal{Q}}\left(\frac{k \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}\right) \quad (\text{A-0.53})$$

o bien,

$$\tilde{C}_{A\beta} = \tilde{\mathcal{Q}}\left(\frac{l_\beta}{L_C} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta, \frac{l_\beta k}{\mathcal{D}_\beta} \frac{\langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}\right) \quad (\text{A-0.54})$$

Aquí se puede demostrar que si $l_\beta \ll L_C$, entonces $\tilde{C}_{A\beta} \ll \langle C_{A\beta} \rangle^\beta$.

Sin embargo, el problema descrito por las ecuaciones (A-0.52), (A-0.44), (A-0.45) y (A-0.46) no se planea resolver en toda la región macroscópica, sino en una región representativa como lo es una celda unitaria como la ilustrada en la Figura A-0.3.

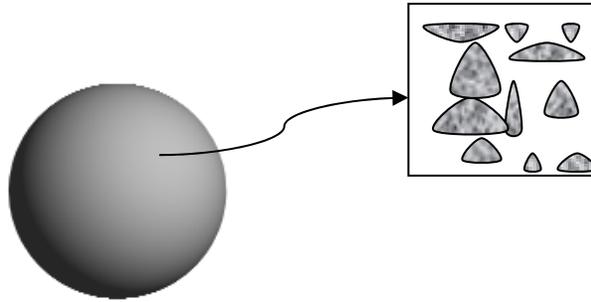


Figura A-0.3: Región representativa

En el problema de las desviaciones las concentraciones promedio son funciones de \underline{x} y \underline{y}_β (en este caso \underline{x} localiza el centroide de la celda unitaria), por lo que es conveniente (para poder manejarlas como constantes) expandirlas en series de Taylor alrededor del centroide de la celda.

$$\langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x} + \underline{y}_\beta} = \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}} + \underline{y}_\beta \cdot \underline{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x}} + \frac{1}{2} \underline{y}_\beta \underline{y}_\beta : \underline{\nabla} \underline{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\underline{x} + \underline{y}_\beta} + \dots \quad (\text{A-0.55})$$

$$\tilde{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{x+y_\beta} = \tilde{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_x + y_\beta : \tilde{\nabla} \tilde{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_x + \dots \quad (\text{A-0.56})$$

Sin embargo, sí $r_0 \ll L_C$, $r_0^2 \ll L_{C_1} L_C$ y $r_0 \ll L_{C_1}$, entonces:

$$\langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{x+y_\beta} = \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_x \quad (\text{A-0.57})$$

$$\tilde{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{x+y_\beta} = \tilde{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_x \quad (\text{A-0.58})$$

En la celda se debe cumplir la condición de periodicidad, por lo que el problema de las desviaciones puede escribirse como:

$$\nabla^2 \tilde{C}_{A\beta} = - \left(\frac{a_v k}{\varepsilon_\beta \mathcal{D}_B} \right) \frac{\langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_x}{1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_x}, \text{ en la fase } \beta \quad (\text{A-0.59})$$

$$\text{C.F.1} \quad \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathcal{D}_\beta \tilde{\nabla} \tilde{C}_{A\beta} = - \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathcal{D}_\beta \tilde{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_x - \frac{k \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_x}{1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_x}, \text{ en } A_{\beta\sigma} \quad (\text{A-0.60})$$

$$\text{C.F.2} \quad \tilde{C}_{A\beta}(\underline{r}) = \tilde{C}_{A\beta}(\underline{r} + \underline{l}_i), \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{A-0.61})$$

Se propone a continuación una solución de la forma:

$$\tilde{C}_{A\beta} = \underline{b}_\beta \cdot \tilde{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle^\beta + s_\beta \frac{\langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta} + \psi_\beta. \quad (\text{A-0.62})$$

Sustituyendo (A-0.62) en (A-0.59) a (A-0.61), se obtienen

$$\nabla^2 \underline{b}_\beta = 0, \quad \nabla^2 s_\beta = - \frac{a_v k}{\varepsilon_\beta \mathcal{D}_B}, \quad \nabla^2 \psi_\beta = 0, \text{ en la fase } \beta \quad (\text{A-0.63 a,b,c})$$

$$\underline{n}_{\beta\sigma} \cdot \tilde{\nabla} \underline{b}_\beta = - \underline{n}_{\beta\sigma}, \quad \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot \tilde{\nabla} s_\beta = -k / \mathcal{D}_\beta, \quad \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot \tilde{\nabla} \psi_\beta = 0, \text{ en } A_{\beta\sigma} \quad (\text{A-0.64 a,b,c})$$

$$\underline{b}_\beta(\underline{r}) = \underline{b}_\beta(\underline{r} + \underline{l}_i), \quad s_\beta(\underline{r}) = s_\beta(\underline{r} + \underline{l}_i), \quad \psi_\beta(\underline{r}) = \psi_\beta(\underline{r} + \underline{l}_i) \quad (\text{A-0.65 a,b,c})$$

Puede demostrarse que del problema para ψ_β se obtiene que $\psi_\beta = cte.$, por lo que no pasará el filtro de (A-0.41). Tomando esto en cuenta y sustituyendo (A-0.62) en (A-0.41):

$$\begin{aligned} \varepsilon_\beta \frac{\partial \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} = & \nabla \cdot \left[\varepsilon_\beta \mathcal{D}_B \left(I + \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} n_{\beta\sigma} \underline{z}_\beta dA \right) \cdot \nabla \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \right] \\ & + \nabla \cdot \left[\frac{\mathcal{D}_B}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} s_\beta \frac{\langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta} dA \right] - \frac{a_v k \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta} \end{aligned} \quad (\text{A-0.66})$$

los estimados de orden de magnitud de los últimos dos términos son:

$$\nabla \cdot \left[\frac{\mathcal{D}_B}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} s_\beta \frac{\langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta} dA \right] - \frac{a_v k \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta} = \mathcal{O} \left(\frac{\mathcal{D}_B s_\beta \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{L_c l_\beta (1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta)} \right) - \mathcal{O} \left(\frac{k \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{l_\beta (1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta)} \right) \quad (\text{A-0.67})$$

De (A-0.64 b)

$$s_\beta = \mathcal{O}(l_\beta k / \mathcal{D}_\beta) \quad (\text{A-0.68})$$

por lo que,

$$\nabla \cdot \left[\frac{\mathcal{D}_B}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} s_\beta \frac{\langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta} dA \right] - \frac{a_v k \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta} = \mathcal{O} \left(\frac{k \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{L_c (1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta)} \right) - \mathcal{O} \left(\frac{k \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{l_\beta (1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta)} \right) \quad (\text{A-0.69})$$

como $l_\beta \ll L_c$, entonces, (A-0.66) se escribe finalmente como:

$$\boxed{\varepsilon_\beta \frac{\partial \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\varepsilon_\beta \underline{D}_{\beta ef} \cdot \nabla \langle C_{A\beta} \rangle^\beta \right) - \frac{a_v k \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}{1 + K \langle C_{A\beta} \rangle^\beta}} \quad (\text{A-0.70})$$

donde:

$$\underline{D}_{ef} = \mathcal{D}_B \left(\underline{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} n_{\beta\sigma} \underline{b}_{\beta} dA \right) \quad (\text{A-0.71})$$

Para facilitar la nomenclatura, se proponen los siguientes cambios:

$$\langle C_{A\beta} \rangle^{\beta} = C_{A\omega} \quad (\text{A-0.72})$$

$$\underline{D}_{ef} \cdot \underline{\nabla} \langle C_{A\beta} \rangle^{\beta} = D_{ef} \underline{\nabla} C_{A\omega} \quad (\text{A-0.73})$$

$$\varepsilon_{\beta} = \varepsilon \quad (\text{A-0.74})$$

por lo que (A-0.70) se puede escribir como:

$$\boxed{\varepsilon \frac{\partial C_{A\omega}}{\partial t} = \underline{\nabla} \cdot (\varepsilon D_{ef} \underline{\nabla} C_{A\omega}) - a_v R_{A\omega}} \quad (\text{A-0.75})$$

donde

$$R_{A\omega} = \frac{kC_{A\omega}}{1 + KC_{A\omega}} \quad (\text{A-0.76})$$

Apéndice A-1: Balances Macroscópicos

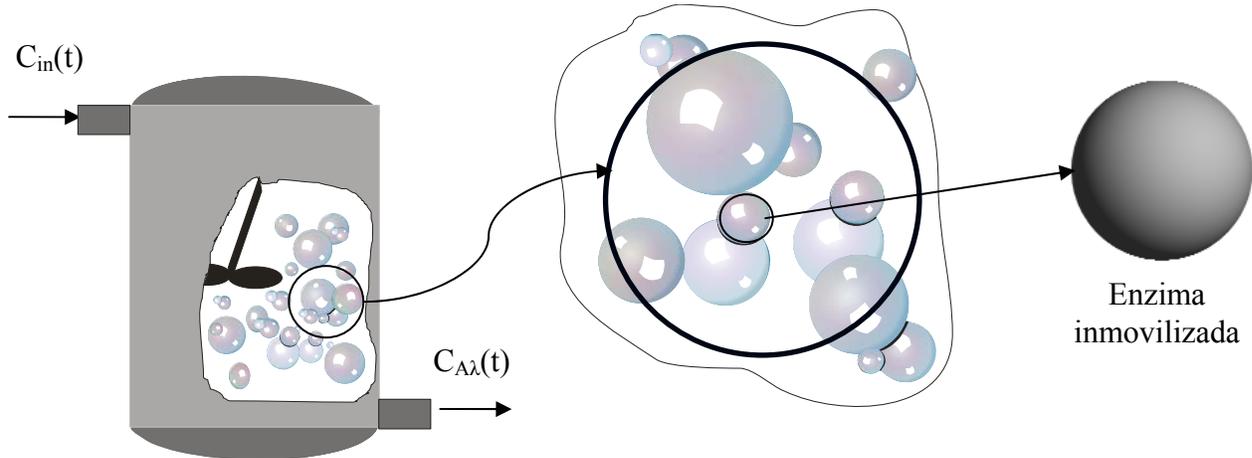


Figura A-1.1: Esquema del sistema a analizar

A-1.1.- Planteamiento del problema

El balance de materia del componente clave en el sólido (ω) es:

$$\varepsilon \frac{\partial C_{A\omega}}{\partial t} = \nabla \cdot (\varepsilon D_{ef} \nabla C_{A\omega}) - a_v R_{A\omega} \quad (\text{A-1.1})$$

Donde D_{ef} es la difusividad efectiva de la partícula. Mientras que en el fluido (λ) es:

$$\frac{\partial C_{A\lambda}}{\partial t} + \nabla \cdot \tilde{N}_{A\lambda} = 0 \quad (\text{A-1.2})$$

Donde:

$$a_v = \frac{A_{\lambda\omega}}{V_\omega} \quad (\text{A-1.3})$$

Es decir, a_v es la razón entre el área interfacial y el volumen de la partícula; ε es la fracción de huecos en la partícula.

En la partícula se puede suponer que los cambios importantes ocurren sólo en la dirección radial, por lo que

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \quad (\text{A-1.4})$$

Sustituyendo (A-1.4) en (A-1.1) y suponiendo constante en la dirección radial a la difusividad efectiva:

$$\boxed{\varepsilon \frac{\partial C_{A\omega}}{\partial t} = \varepsilon \frac{D_{ef}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial C_{A\omega}}{\partial r} \right) - a_v R_{A\omega}} \quad (\text{A-1.5})$$

A-1.2.- Promediado

Por otro lado, si se define:

$$\langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda = \frac{1}{V_\lambda} \int_{V_\lambda(t)} C_{A\lambda} dV \quad (\text{A-1.6})$$

Integrando (A-1.2) y empleando el teorema de la divergencia:

$$\frac{1}{V_\lambda} \int_{V_\lambda(t)} \frac{\partial C_{A\lambda}}{\partial t} dV + \frac{1}{V_\lambda} \int_{a_\lambda(t)} \tilde{n} \cdot \tilde{N}_{A\lambda} dA = 0 \quad (\text{A-1.7})$$

Aplicando ahora el teorema general del transporte y la definición del flux:

$$\frac{d\langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda}{dt} + \frac{1}{V_\lambda} \int_{a_\lambda(t)} \tilde{n} \cdot C_A (\underline{v}_{A\lambda} - \underline{w}_\lambda) dA = 0 \quad (\text{A-1.8})$$

donde \underline{w}_λ es la velocidad con que se desplaza la superficie de $V_\lambda(t)$. Por otro lado, tomando en cuenta la Tabla A-1.1, se tiene que,

$$\frac{1}{V_\lambda} \int_{a_\lambda(t)} \tilde{n}_\lambda \cdot C_{A\lambda} (\underline{v}_{A\lambda} - \underline{w}_\lambda) dA = \frac{1}{V_\lambda} \int_{a_{\lambda e}} \tilde{n}_\lambda \cdot C_{A\lambda} \underline{v}_{A\lambda} dA + \frac{1}{V_\lambda} \int_{a_{\lambda\omega}(t)} \tilde{n}_\lambda \cdot C_{A\lambda} (\underline{v}_{A\lambda} - \underline{w}_\lambda) dA \quad (\text{A-1.9})$$

Tabla A-1.1: Contribuciones a los vectores de velocidad y desplazamiento de la superficie $V_\lambda(t)$.

$a_\lambda(t)$	$a_{\lambda\omega}(t)$ (interfase sólido-fluido)	$a_{\lambda e}$ (entradas y salidas)	$a_{\lambda W}$ (paredes)	$a_{\lambda S}(t)$ (agitador)
\underline{w}_λ	$\underline{w}_{\lambda\omega}$	0	0	\underline{v}_λ
$\underline{v}_{A\lambda}$	$\underline{v}_{A\lambda}$	$\underline{v}_{A\lambda}$	0	\underline{v}_λ

El primer sumando puede descomponerse en dos términos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V_\lambda} \int_{a_{\lambda e}} \tilde{n}_\lambda \cdot C_{A\lambda} \underline{v}_{A\lambda} dA &= -\frac{1}{V_\lambda} \int_{a_{\lambda e}^s} \tilde{n}_{\lambda e} \cdot C_{A\lambda} \underline{v}_{A\lambda} dA + \frac{1}{V_\lambda} \int_{a_{\lambda e}^e} \tilde{n}_{\lambda s} \cdot C_{A\lambda} \underline{v}_{A\lambda} dA \\ &= \frac{A_{\lambda e}}{V_\lambda} \left(\langle C_{A\lambda} \underline{v}_{A\lambda x} \rangle_s^\lambda - \langle C_{A\lambda} \underline{v}_{A\lambda x} \rangle_e^\lambda \right) \end{aligned} \quad (\text{A-1.10})$$

Aquí se supuso que el área de entrada es la misma que la de salida. Debemos notar que si despreciamos los términos de dispersión total, se tiene que:

$$\langle C_{A\lambda} \underline{v}_{A\lambda x} \rangle^\lambda \approx \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda \langle \underline{v}_{A\lambda x} \rangle^\lambda \quad (\text{A-1.11})$$

Suponiendo que las velocidades de entrada y salida son iguales, se obtiene:

$$\frac{1}{V_\lambda} \int_{a_{\lambda e}} \underline{n}_\lambda \cdot C_{A\lambda} \underline{v}_{A\lambda} dA = \frac{Q_\lambda}{V_\lambda} \left(\langle C_{A\lambda} \rangle_s^\lambda - \langle C_{A\lambda} \rangle_e^\lambda \right) \quad (\text{A-1.12})$$

Donde Q_λ es el flujo volumétrico definido como el producto del área por la velocidad. Para el otro sumando de (A-1.9) se debe tomar en cuenta la condición de frontera interfacial:

$$\text{En } a_{\lambda\omega}(t) : \quad \underline{n}_{\lambda\omega} \cdot C_{A\lambda} (\underline{v}_{A\lambda} - \underline{w}_{\lambda\omega}) = \underline{n}_{\lambda\omega} \cdot C_{A\omega} (\underline{v}_{A\omega} - \underline{w}_{\lambda\omega}) \quad (\text{A-1.13})$$

O bien:

$$\underline{n}_{\lambda\omega} \cdot C_{A\lambda} (\underline{v}_{A\lambda} - \underline{w}_{\lambda\omega}) = -k_\lambda^{\lambda\omega} \left(C_{A\lambda i}^{\lambda\omega} - \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda \right) = -\varepsilon D_{ef} \underline{n}_{\lambda\omega} \cdot \underline{\nabla} C_{A\omega} = \varepsilon D_{ef} \frac{\partial C_{A\omega}}{\partial r} \quad (\text{A-1.14})$$

Por lo que:

$$\frac{1}{V_\lambda} \int_{a_{\lambda\omega}(t)} \underline{n}_\lambda \cdot C_{A\lambda} (\underline{v}_{A\lambda} - \underline{w}_\lambda) dA = -\frac{A_{\lambda\omega} k_\lambda^{\lambda\omega}}{V_\lambda} \left(C_{A\omega i}^{\lambda\omega} - \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda \right) \quad (\text{A-1.15})$$

Sustituyendo (A-1.12) y (A-1.15) en (A-1.9):

$$\frac{1}{V_\lambda} \int_{a_\lambda(t)} \underline{n}_\lambda \cdot C_{A\lambda} (\underline{v}_{A\lambda} - \underline{w}_\lambda) dA = -\frac{Q_\lambda}{V_\lambda} \left(C_{in}(t) - \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda \right) - \frac{A_{\lambda\omega} k_\lambda^{\lambda\omega}}{V_\lambda} \left(C_{A\lambda i}^{\lambda\omega} - \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda \right) \quad (\text{A-1.16})$$

Aquí se sustituyó la concentración a la entrada por $C_{in}(t)$ para diferenciarla claramente de la de salida, la cual se supone es igual a la que está dentro del tanque; además debe notarse que:

$$V_\lambda = \varepsilon_\lambda V \quad (\text{A-1.17})$$

donde ε_λ es la fracción del volumen del tanque (V) ocupado por el líquido. Tomando esto en cuenta y sustituyendo (A-1.16) en (A-1.8)

$$\boxed{\varepsilon_\lambda \frac{d \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda}{dt} = \frac{1}{\tau_R} \left(C_{in}(t) - \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda \right) + \frac{A_{\lambda\omega} k_\lambda^{\lambda\omega}}{V} \left(C_{A\lambda i}^{\lambda\omega} - \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda \right)} \quad (\text{A-1.18})$$

donde τ_R es el tiempo de residencia en el tanque.

Las condiciones de frontera e inicial son,

$$\text{En } r = r_p : \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda = \varepsilon C_{A\omega} \quad (\text{A-1.19})$$

$$k_\lambda^{\lambda\omega} \left(C_{A\lambda i}^{\lambda\omega} - \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda \right) = -\varepsilon D_{ef} \frac{\partial C_{A\omega}}{\partial r} \quad (\text{A-1.20})$$

$$\text{Cuando } t = 0 : \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda = C_{A\lambda 0} \quad (\text{A-1.21})$$

$$C_{A\omega} = C_{A\omega 0} \quad (\text{A-1.22})$$

Apéndice A-2

Adimensionalización

A-2.1.- Problema dimensional

Recordando las ecuaciones promediadas del Apéndice A-1:

$$\varepsilon \frac{\partial C_{A\omega}}{\partial t} = \varepsilon \frac{D_{ef}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial C_{A\omega}}{\partial r} \right) - a_v R_{A\omega} \quad (\text{A-2.1})$$

$$\varepsilon_\lambda \frac{d \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda}{dt} = \frac{1}{\tau_R} \left(C_{in}(t) - \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda \right) + \frac{A_{\lambda\omega} k_\lambda^{\lambda\omega}}{V} \left(C_{A\lambda i}^{\lambda\omega} - \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda \right) \quad (\text{A-2.2})$$

Las condiciones de frontera e inicial son,

$$\text{En } r = r_p : \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda = \varepsilon C_{A\omega} \quad (\text{A-2.3})$$

$$k_\lambda^{\lambda\omega} \left(C_{A\lambda i}^{\lambda\omega} - \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda \right) = -\varepsilon D_{ef} \frac{\partial C_{A\omega}}{\partial r} \quad (\text{A-2.4})$$

$$\text{Cuando } t = 0 : \langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda = C_{A\lambda 0} \quad (\text{A-2.5})$$

$$C_{A\omega} = C_{A\omega 0} \quad (\text{A-2.6})$$

A-2.2.- Problema adimensional

Definiendo las siguientes variables adimensionales:

$$U_f = \frac{\langle C_{A\lambda} \rangle^\lambda}{\varepsilon C_{A\omega}^*}, \quad U_p = \frac{C_{A\omega}}{C_{A\omega}^*}, \quad \tau = \frac{t D_{ef}}{r_p^2}, \quad \xi = \frac{r}{r_p} \quad (\text{A-2.7})$$

donde $C_{A\omega}^*$ es una concentración arbitraria característica de referencia. Sustituyendo las definiciones de (A-2.7) en (A-2.1):

$$\frac{\varepsilon C_{A\omega}^* D_{ef}}{r_p^2} \frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{\varepsilon D_{ef} C_{A\omega}^*}{r_p^2 \xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - a_v R_{A\omega} \quad (\text{A-2.8})$$

O bien,

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 R \quad (\text{A-2.9})$$

donde:

$$\Phi^2 = \frac{a_v R_{A\omega}^* r_p^2}{\varepsilon D_{ef} C_{A\omega}^*} \quad (\text{A-2.10})$$

$$R = \frac{R_{A\omega}}{R_{A\omega}^*} \quad (\text{A-2.11})$$

Aquí R es la expresión adimensional de la velocidad de reacción, la cual se define, para una cinética no-lineal como:

$$R \approx \frac{R_{A\omega} |_{\xi=1}}{R_{A\omega}^*} + \sum_{i=1}^{i=nc} \frac{\partial R}{\partial U_{pi}} \Big|_{\xi=1} \left(U_{pi} - U_{pi} |_{\xi=1} \right) \quad (\text{A-2.12})$$

Donde nc es el número de componentes clave, suponiendo uno solo:

$$R = \frac{R_{A\omega} |_{\xi=1}}{R_{A\omega}^*} - \frac{\partial R}{\partial U_p} \Big|_{\xi=1} U_p |_{\xi=1} + \frac{\partial R}{\partial U_p} \Big|_{\xi=1} U_p \quad (\text{A-2.13})$$

Sustituyendo (A-2.13) en (A-2.9):

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 \left(\frac{R_{A\omega} |_{\xi=1}}{R_{A\omega}^*} - \frac{\partial R}{\partial U_p} \Big|_{\xi=1} U_p |_{\xi=1} \right) - \Phi^2 \frac{\partial R}{\partial U_p} \Big|_{\xi=1} U_p \quad (\text{A-2.14})$$

Definiendo:

$$\Lambda_1 = \Phi^2 \frac{\partial R}{\partial U_p} \Big|_{\xi=1} \quad (\text{A-2.15})$$

$$\Lambda_2 = \Phi^2 \left(\frac{R_{A\omega}|_{\xi=1}}{R_{A\omega}^*} - \frac{\partial R}{\partial U_p} \Big|_{\xi=1} U_p \Big|_{\xi=1} \right) \quad (\text{A-2.16})$$

Al sustituir (A-2.15) y (A-2.16) en (A-2.14):

$$\boxed{\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Lambda_1 U_p - \Lambda_2} \quad (\text{A-2.17})$$

Aplicando (A-2.7) a (A-2.2):

$$\frac{\varepsilon_\lambda \varepsilon C_{A\omega}^* D_{ef}}{r_p^2} \frac{dU_f}{d\tau} = \frac{\varepsilon C_{A\omega}^*}{\tau_R} (U_{in}(\tau) - U_f) + \frac{A_{\lambda\omega} k_\lambda^{\lambda\omega} \varepsilon C_{A\omega}^*}{V} (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (\text{A-2.18})$$

Aquí se utilizó la condición de (A-2.3). Definiendo:

$$\psi_{in} = \frac{r_p^2}{\tau_R D_{ef} \varepsilon_\lambda}; \quad \psi_p = \frac{A_{\lambda\omega} k_\lambda^{\lambda\omega} r_p^2}{V D_{ef} \varepsilon_\lambda} \quad (\text{A-2.19})$$

Sustituyendo (A-2.19) en (A-2.18):

$$\boxed{\frac{dU_f}{d\tau} = \psi_{in} (U_{in}(\tau) - U_f) + \psi_p (U_p|_{\xi=1} - U_f)} \quad (\text{A-2.20})$$

Resumiendo, el modelo está descrito por las ecuaciones (A-2.17) y (A-2.20), con condiciones de frontera e iniciales:

$$\text{En } \xi = 1 \quad -\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = Bi (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (\text{A-2.21})$$

$$\text{En } 0 \leq \xi \leq 1 \quad U_p \text{ está definida} \quad (\text{A-2.22})$$

$$\text{Cuando } \tau = 0 \quad U_f = U_{f_0} \quad (\text{A-2.23})$$

$$U_p = U_{p_0} \quad (\text{A-2.24})$$

donde:

$$Bi = \frac{k_{\lambda}^{\lambda\omega} r_p}{D_{ef}} \quad (\text{A-2.25})$$

Más adelante se describirá como cambian las condiciones de frontera cuando se considera un frente de agotamiento.

A-2.3.- Cinética de Michaelis-Menten

Del Apéndice A-0, la Ecuación (A-0.76) representa la cinética deseada. Para propósitos de éste trabajo, se considerará como componente clave el sustrato, por lo que al escribir dicha ecuación en términos de U_p se obtiene:

$$R_{A\omega} = \frac{kC_{A\omega}^* U_p}{1 + KC_{A\omega}^* U_p} \quad (\text{A-2.26})$$

La cual en las condiciones con las que se adimensionalizó es:

$$R_{A\omega}^* = \frac{kC_{A\omega}^*}{1 + KC_{A\omega}^*} \quad (\text{A-2.27})$$

Dividiendo (A-2.26) entre (A-2.27) y recordando la definición de (A-2.11):

$$R = \frac{U_p (1 + KC_{A\omega}^*)}{1 + KC_{A\omega}^* U_p} \quad (\text{A-2.28})$$

Definiendo:

$$k_1 = KC_{A\omega}^* = \frac{C_{A\omega}^*}{K_m} \quad (\text{A-2.29})$$

$$k_2 = 1 + k_1 \quad (\text{A-2.30})$$

Sustituyendo (A-2.29) y (A-2.30) en (A-2.28):

$$R = \frac{k_2 U_p}{1 + k_1 U_p} \quad (\text{A-2.31})$$

Sustituyendo (A-2.31) en (A-2.9):

$$\boxed{\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 \frac{k_2 U_p}{1 + k_1 U_p}} \quad (\text{A-2.32})$$

Ésta ecuación describe al problema exacto y es la que se resolverá numéricamente para compararla con la solución analítica aproximada. A continuación se obtendrán las expresiones para Λ_1 y Λ_2 .

La derivada de (A-2.31) respecto a U_p evaluada en la superficie es:

$$\left. \frac{dR}{dU_p} \right|_{\xi=1} = \frac{k_2}{\left(1 + k_1 U_p \Big|_{\xi=1}\right)^2} \quad (\text{A-2.33})$$

Sustituyendo (A-2.33) en (A-2.15) y (A-2.16):

$$\Lambda_1 = \frac{\Phi^2 k_2}{\left(1 + k_1 U_p \Big|_{\xi=1}\right)^2} \quad (\text{A-2.34})$$

$$\Lambda_2 = k_1 \Lambda_1 \left(U_p \Big|_{\xi=1} \right)^2 \quad (\text{A-2.35})$$

Apéndice A-3:

Solución del sistema en estado estacionario

A-3.1.- Planteamiento del problema

En este caso las ecuaciones a resolver son:

Para la partícula:

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{dU_p}{d\xi} \right) = \Lambda_1 U_p + \Lambda_2 \quad (\text{A-3.1})$$

Para el fluido:

$$\psi_{in} (U_{in}(\tau) - U_f) + \psi_p (U_p|_{\xi=1} - U_f) = 0 \quad (\text{A-3.2})$$

Con condiciones de frontera:

$$\text{En } \xi = 1 \quad -\frac{dU_p}{d\xi} = Bi (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (\text{A-3.3})$$

$$\text{En } 0 \leq \xi \leq 1 \quad U_p \text{ está definida} \quad (\text{A-3.4})$$

A-3.2.- Solución sin frente de agotamiento

Proponiendo:

$$U_p = \frac{U}{\xi} \quad (\text{A-3.5})$$

Sustituyendo (A-3.5) en (A-3.1):

$$\frac{d^2U}{d\xi^2} - \Lambda_1 U = \Lambda_2 \xi \quad (\text{A-3.6})$$

cuya solución es:

$$U = C_1 \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}\xi + C_2 \text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1}\xi - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \xi \quad (\text{A-3.7})$$

Sustituyendo (A-3.5):

$$U_p = C_1 \frac{\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}\xi}{\xi} + C_2 \frac{\text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1}\xi}{\xi} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{A-3.8})$$

Debido a la condición de (A-3.4), C_2 debe ser cero, por lo que:

$$U_p = C_1 \frac{\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}\xi}{\xi} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{A-3.9})$$

Cuya derivada es:

$$\frac{dU_p}{d\xi} = C_1 \left(\sqrt{\Lambda_1} \frac{\text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1}\xi}{\xi} - \frac{1}{\xi^2} \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}\xi \right) \quad (\text{A-3.10})$$

Que en la interfase son:

$$U_p|_{\xi=1} = C_1 \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{A-3.11})$$

$$\left. \frac{dU_p}{d\xi} \right|_{\xi=1} = C_1 \left(\sqrt{\Lambda_1} \text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1} - \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1} \right) \quad (\text{A-3.12})$$

De la condición de (A-3.3):

$$C_1 \left(-\sqrt{\Lambda_1} \text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1} + \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1} \right) = Bi \left(C_1 \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} - U_f \right)$$

O bien:

$$C_1 = \frac{Bi \left(\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} + U_f \right)}{(Bi - 1) \text{Senh} \sqrt{\Lambda_1} + \sqrt{\Lambda_1} \text{Cosh} \sqrt{\Lambda_1}} \quad (\text{A-3.13})$$

A partir de (A-3.2):

$$U_f = \frac{\psi_{in} U_{in}(\tau) + \psi_p U_p \Big|_{\xi=1}}{\psi_{in} + \psi_p} \quad (\text{A-3.14})$$

Sustituyendo (A-3.11) en (A-3.14):

$$U_f = \frac{\psi_{in} U_{in}(\tau) + \psi_p C_1 \text{Senh} \sqrt{\Lambda_1} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \psi_p}{\psi_{in} + \psi_p} \quad (\text{A-3.15})$$

Sustituyendo (A-3.15) en (A-3.13):

$$C_1 = \frac{Bi \psi_{in} \left(U_{in}(\tau) + \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \right)}{\psi_{in} Bi \text{Senh} \sqrt{\Lambda_1} + (\psi_{in} + \psi_p) (\sqrt{\Lambda_1} \text{Cosh} \sqrt{\Lambda_1} - \text{Senh} \sqrt{\Lambda_1})} \quad (\text{A-3.16})$$

Sustituyendo (A-3.16) en (A-3.15):

$$U_f = \frac{\psi_{in} U_{in}(\tau) Bi + (\sqrt{\Lambda_1} \text{Coth} \sqrt{\Lambda_1} - 1) \left(\psi_{in} U_{in}(\tau) - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \psi_p \right)}{\psi_{in} Bi + (\psi_{in} + \psi_p) (\sqrt{\Lambda_1} \text{Coth} \sqrt{\Lambda_1} - 1)}$$

O bien:

$$U_f = U_{in}(\tau) - \frac{\psi_p (\sqrt{\Lambda_1} \text{Coth} \sqrt{\Lambda_1} - 1) \left(U_{in}(\tau) + \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \right)}{\psi_{in} Bi + (\psi_{in} + \psi_p) (\sqrt{\Lambda_1} \text{Coth} \sqrt{\Lambda_1} - 1)} \quad (\text{A-3.17})$$

Definiendo:

$$A = \frac{U_{in}(\tau) + \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1}}{\psi_{in} Bi + (\psi_{in} + \psi_p) (\sqrt{\Lambda_1} \text{Coth} \sqrt{\Lambda_1} - 1)} \quad (\text{A-3.18})$$

Por lo que, (A-3.17) se puede escribir como:

$$U_f = U_{in}(\tau) - \psi_p (\sqrt{\Lambda_1} \text{Coth} \sqrt{\Lambda_1} - 1) A \quad (\text{A-3.19})$$

Sustituyendo (A-3.16) en (A-3.9):

$$U_p = \frac{Bi \psi_{in} A}{\text{Senh} \sqrt{\Lambda_1}} \frac{\text{Senh} \sqrt{\Lambda_1} \xi}{\xi} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{A-3.20})$$

Por último, si se define una concentración promedio para la partícula de la forma:

$$\langle U_p \rangle = \frac{\int_0^1 U_p \xi^2 d\xi}{\int_0^1 \xi^2 d\xi} = 3 \int_0^1 U_p \xi^2 d\xi \quad (\text{A-3.21})$$

Sustituyendo (A-3.20) en (A-3.21)

$$\langle U_p \rangle = \frac{3 Bi \psi_{in} A}{\Lambda_1} (\sqrt{\Lambda_1} \text{Coth} \sqrt{\Lambda_1} - 1) - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{A-3.22})$$

A-3.3.- Solución con frente de agotamiento.

Para tomar en cuenta éste fenómeno, es necesario cambiar la condición de (A-3.4) por:

$$\text{En } \xi = \xi_c, \quad \frac{dU_p}{d\xi} = 0 \quad (\text{A-3.23})$$

Donde ξ_c es el radio crítico. Debemos notar que la solución general de (A-3.1) sigue siendo válida, cuya derivada respecto a ξ es:

$$\frac{dU_p}{d\xi} = C_1 \left(\frac{\sqrt{\Lambda_1} \text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi)}{\xi} - \frac{\text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi)}{\xi^2} \right) + C_2 \left(\frac{\sqrt{\Lambda_1} \text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi)}{\xi} - \frac{\text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi)}{\xi^2} \right) \quad (\text{A-3.24})$$

Aplicando la condición de (A-3.23):

$$C_2 = C_1 \left[\frac{\xi_c \sqrt{\Lambda_1} - \text{Tanh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi_c)}{1 - \sqrt{\Lambda_1} \xi_c \text{Tanh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi_c)} \right] \quad (\text{A-3.25})$$

De (A-3.8), se tienen:

$$U_p \Big|_{\xi=1} = C_1 \text{Senh} \sqrt{\Lambda_1} + C_2 \text{Cosh} \sqrt{\Lambda_1} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{A-3.26})$$

$$\frac{dU_p}{d\xi} \Big|_{\xi=1} = C_1 (\sqrt{\Lambda_1} \text{Cosh} \sqrt{\Lambda_1} - \text{Senh} \sqrt{\Lambda_1}) + C_2 (\sqrt{\Lambda_1} \text{Senh} \sqrt{\Lambda_1} - \text{Cosh} \sqrt{\Lambda_1}) \quad (\text{A-3.27})$$

Sustituyendo (A-3.26) y (A-3.27) en la condición de (A-3.3):

$$C_1 (\sqrt{\Lambda_1} \text{Cosh} \sqrt{\Lambda_1} + \text{Senh} \sqrt{\Lambda_1} (Bi - 1)) + C_2 (\sqrt{\Lambda_1} \text{Senh} \sqrt{\Lambda_1} + \text{Cosh} \sqrt{\Lambda_1} (Bi - 1)) = Bi \left(\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} + U_f \right) \quad (\text{A-3.28})$$

La Ecuación (A-3.14) sigue siendo válida, por lo que:

$$U_f = \frac{\psi_{in} U_{in}(\tau) + \psi_p \left(C_1 \text{Senh} \sqrt{\Lambda_1} + C_2 \text{Cosh} \sqrt{\Lambda_1} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \right)}{\psi_{in} + \psi_p} \quad (\text{A-3.29})$$

Sustituyendo (A-3.29) en (A-3.28) y tomando en cuenta (A-3.18):

$$C_1 = \frac{Bi \psi_{in} A}{\text{Senh} \sqrt{\Lambda_1}} - Bi C_2 \quad (\text{A-3.30})$$

donde:

$$B_1 = \frac{\left[\left(\sqrt{\Lambda_1} \operatorname{Tanh} \sqrt{\Lambda_1} - 1 \right) (\psi_{in} + \psi_p) + \operatorname{Bi} \psi_{in} \right] \operatorname{Coth} \sqrt{\Lambda_1}}{\psi_{in} \operatorname{Bi} + (\psi_{in} + \psi_p) \left(\sqrt{\Lambda_1} \operatorname{Coth} \sqrt{\Lambda_1} - 1 \right)} \quad (\text{A-3.31})$$

Con el fin de simplificar a (A-3.25) se define:

$$B_2 = \frac{\sqrt{\Lambda_1} \xi_c - \operatorname{Tanh} \left(\sqrt{\Lambda_1} \xi_c \right)}{1 - \sqrt{\Lambda_1} \xi_c \operatorname{Tanh} \left(\sqrt{\Lambda_1} \xi_c \right)} \quad (\text{A-3.32})$$

por lo que:

$$C_2 = B_2 C_1 \quad (\text{A-3.33})$$

Igualando (A-3.30) y (A-3.33):

$$C_1 = \frac{\operatorname{Bi} \psi_{in} A}{(1 + B_1 B_2) \operatorname{Senh} \sqrt{\Lambda_1}} \quad (\text{A-3.34})$$

Sustituyendo (A-3.33) y (A-3.34) en (A-3.8) y (A-3.29):

$$U_p = \left(\frac{\operatorname{Bi} \psi_{in} A}{(1 + B_1 B_2) \operatorname{Senh} \sqrt{\Lambda_1}} \right) \left(\frac{\operatorname{Senh} \sqrt{\Lambda_1} \xi}{\xi} + B_2 \frac{\operatorname{Cosh} \sqrt{\Lambda_1} \xi}{\xi} \right) - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{A-3.35})$$

$$U_f = U_{in}(\tau) - A \psi_p \left(\sqrt{\Lambda_1} \operatorname{Coth} \sqrt{\Lambda_1} - 1 - \frac{\operatorname{Bi} \psi_{in} B_2 \operatorname{Coth} \sqrt{\Lambda_1}}{\psi_{in} + \psi_p} \right) \quad (\text{A-3.36})$$

Ahora se redefinirá el promedio:

$$\langle U_p \rangle = \frac{\int_{\xi_c}^1 U_p \xi^2 d\xi}{\int_0^1 \xi^2 d\xi} = 3 \int_{\xi_c}^1 U_p \xi^2 d\xi \quad (\text{A-3.37})$$

Sustituyendo (A-3.8) en (A-3.37):

$$\begin{aligned}
\langle U_p \rangle = & 3C_1 \left[\frac{1}{\sqrt{\Lambda_1}} \left(\text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1} - \xi_c \text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1}\xi_c \right) - \frac{1}{\Lambda_1} \left(\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1} - \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}\xi_c \right) \right] \\
& + 3C_2 \left[\frac{1}{\sqrt{\Lambda_1}} \left(\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1} - \xi_c \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}\xi_c \right) - \frac{1}{\Lambda_1} \left(\text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1} - \text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1}\xi_c \right) \right] \quad (\text{A-3.38}) \\
& - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} (1 - \xi_c^3)
\end{aligned}$$

O bien:

$$\begin{aligned}
\langle U_p \rangle = & \frac{3Bi\psi_{in}A}{(1 + B_1B_2)\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}} \left\{ \frac{1}{\sqrt{\Lambda_1}} \left(\text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1} - \xi_c \text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1}\xi_c \right) - \frac{1}{\Lambda_1} \left(\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1} - \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}\xi_c \right) \right. \\
& \left. + B_2 \left[\frac{1}{\sqrt{\Lambda_1}} \left(\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1} - \xi_c \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}\xi_c \right) - \frac{1}{\Lambda_1} \left(\text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1} - \text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1}\xi_c \right) \right] \right\} \\
& - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} (1 - \xi_c^3)
\end{aligned}$$

Para encontrar el valor del radio crítico, hace falta una condición adicional, la cual es:

$$\text{En } \xi = \xi_c \quad U_p = 0 \quad (\text{A-3.39})$$

Por lo que se deben obtener las raíces de la siguiente ecuación:

$$\left(\frac{Bi\psi_{in}A}{(1 + B_1B_2)\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}} \right) \left(\frac{\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}\xi_c}{\xi_c} + B_2 \frac{\text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1}\xi_c}{\xi_c} \right) - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} = 0 \quad (\text{A-3.40})$$

De las ecuaciones anteriores, es claro que cuando $\xi_c = 0$, $B_2 = 0$, por lo que se recupera la solución radio crítico.

Apéndice A-4:

Solución del sistema en estado cuasiestacionario

A-4.1.- Planteamiento del problema

En este caso las ecuaciones (A-2.17) y (A-2.20) son:

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{dU_p}{d\xi} \right) = \Lambda_1 U_p + \Lambda_2 \quad (\text{A-4.1})$$

$$\frac{dU_f}{d\tau} = \psi_{in} (U_{in}(t) - U_f) + \psi_p (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (\text{A-4.2})$$

Con condiciones de frontera e inicial:

$$\text{En } \xi = 1 \quad -\frac{dU_p}{d\xi} = Bi (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (\text{A-4.3})$$

$$\text{En } 0 \leq \xi \leq 1 \quad U_p \text{ está definida} \quad (\text{A-4.4})$$

$$\text{Cuando } \tau = 0, \quad U_f = U_{f0} \quad (\text{A-4.5})$$

A-4.2.- Solución sin frente de agotamiento

Siguiendo el procedimiento del apéndice anterior, se tiene que la solución de (A-4.1) es:

$$U_p = C_1 \frac{\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}\xi}{\xi} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{A-4.6})$$

donde:

$$C_1 = \frac{\text{Bi} \left(\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} + U_f \right)}{(Bi-1)\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1} + \sqrt{\Lambda_1}\text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1}} \quad (\text{A-4.7})$$

Sustituyendo (A-4.7) en (A-4.6):

$$U_p = \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \left[\frac{\text{Bi}}{(Bi + \sqrt{\Lambda_1}\text{Coth}\sqrt{\Lambda_1} - 1)} \frac{\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}\xi}{\xi\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}} - 1 \right] + \frac{\text{Bi}U_f}{(Bi + \sqrt{\Lambda_1}\text{Coth}\sqrt{\Lambda_1} - 1)} \frac{\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}\xi}{\xi\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}} \quad (\text{A-4.8})$$

Por lo que:

$$U_p|_{\xi=1} = \frac{\text{Bi}U_f}{Bi + \sqrt{\Lambda_1}\text{Coth}\sqrt{\Lambda_1} - 1} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \left(\frac{\sqrt{\Lambda_1}\text{Coth}\sqrt{\Lambda_1} - 1}{Bi + \sqrt{\Lambda_1}\text{Coth}\sqrt{\Lambda_1} - 1} \right) \quad (\text{A-4.9})$$

aplicando Transformada de Laplace a (A-4.2):

$$s\bar{U}_f - U_{f0} = \psi_{in} (\bar{U}_{in}(s) - \bar{U}_f) + \psi_p (\bar{U}_p|_{\xi=1} - \bar{U}_f) \quad (\text{A-4.10})$$

Definiendo:

$$a_1 = \frac{\sqrt{\Lambda_1}\text{Coth}\sqrt{\Lambda_1} - 1}{Bi + \sqrt{\Lambda_1}\text{Coth}\sqrt{\Lambda_1} - 1} \quad (\text{A-4.11})$$

Sustituyendo (A-4.11) en (A-4.9) y aplicándole transformada de Laplace:

$$\bar{U}_p|_{\xi=1} = \left(\frac{\text{Bi}}{Bi + \sqrt{\Lambda_1}\text{Coth}\sqrt{\Lambda_1} - 1} \right) \bar{U}_f - \left(\frac{\Lambda_2 a_1}{\Lambda_1} \right) \frac{1}{s} \quad (\text{A-4.12})$$

Sustituyendo (A-4.12) en (A-4.10):

$$\bar{U}_f = \frac{U_{f0}}{(s + \psi_{in} + \psi_p a_1)} + \frac{\psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{(s + \psi_{in} + \psi_p a_1)} - \left(\frac{\psi_p \Lambda_2 a_1}{\Lambda_1} \right) \frac{1}{s(s + \psi_{in} + \psi_p a_1)} \quad (\text{A-4.13})$$

Aplicando transformada inversa:

$$U_f = U_{f0} e^{-(\psi_{in} + \psi_p a_1)\tau} + \psi_{in} e^{-(\psi_{in} + \psi_p a_1)\tau} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta + \left[\frac{\psi_p \Lambda_2 a_1}{\Lambda_1 (\psi_{in} + \psi_p a_1)} \right] \left(e^{-(\psi_{in} + \psi_p a_1)\tau} - 1 \right)$$

o bien,

$$U_f = e^{-(\psi_{in} + \psi_p a_1)\tau} \left(U_{f0} + \psi_{in} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta + \frac{\psi_p \Lambda_2 a_1}{\Lambda_1 (\psi_{in} + \psi_p a_1)} \right) - \frac{\psi_p \Lambda_2 a_1}{\Lambda_1 (\psi_{in} + \psi_p a_1)} \quad (\text{A-4.14})$$

Definiendo:

$$a_2 = \frac{Bi}{\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1} (Bi + \sqrt{\Lambda_1} \text{Coth}\sqrt{\Lambda_1} - 1)} \quad (\text{A-4.15})$$

$$a_3 = \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1 (\psi_{in} + \psi_p a_1)} \quad (\text{A-4.16})$$

Sustituyendo (A-4.14), (A-4.15) y (A-4.16) en (A-4.8):

$$U_p = \frac{a_2 \text{Senh}\sqrt{\Lambda_1} \xi}{\xi} \left(\psi_{in} a_3 + e^{-(\psi_{in} + \psi_p a_1)\tau} \left(U_{f0} + \psi_{in} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta + \psi_p a_1 a_3 \right) \right) - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{A-4.17})$$

Sustituyendo (A-4.16) en (A-4.14):

$$U_f = e^{-(\psi_{in} + \psi_p a_1)\tau} \left(U_{f0} + \psi_{in} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta + \psi_p a_1 a_3 \right) - \psi_p a_1 a_3 \quad (\text{A-4.18})$$

Sustituyendo (A-4.17) en (A-3.21) se obtiene la concentración promedio en la partícula:

$$\begin{aligned} \langle U_p \rangle = & 3a_2 \frac{\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}}{\Lambda_1} \left(\sqrt{\Lambda_1} \text{Coth}\sqrt{\Lambda_1} - 1 \right) \\ & \left[\psi_{in} a_3 + e^{-(\psi_{in} + \psi_p a_1)\tau} \left(U_{f0} + \psi_{in} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta + \psi_p a_1 a_3 \right) \right] - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \end{aligned} \quad (\text{A-4.19})$$

A-4.3.- Solución con frente de agotamiento

En este caso, se usa la condición de (A-4.20) en lugar de (A-4.4),

$$\text{En } \xi = \xi_c \quad \frac{dU_p}{d\xi} = 0 \quad (\text{A-4.20})$$

La solución general de (A-4.1) sigue siendo válida, por lo que,

$$U_p = C_1 \frac{\text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi)}{\xi} + C_2 \frac{\text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi)}{\xi} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{A-4.21})$$

cuya derivada respecto a ξ es:

$$\frac{dU_p}{d\xi} = C_1 \left[\frac{\sqrt{\Lambda_1} \text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi)}{\xi} - \frac{\text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi)}{\xi^2} \right] + C_2 \left[\frac{\sqrt{\Lambda_1} \text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi)}{\xi} - \frac{\text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi)}{\xi^2} \right] \quad (\text{A-4.22})$$

Aplicando la condición de (A-4.20):

$$C_2 = C_1 \left[\frac{\sqrt{\Lambda_1} \xi_c - \text{Tanh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi_c)}{1 - \sqrt{\Lambda_1} \xi_c \text{Tanh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi_c)} \right] \quad (\text{A-4.23})$$

Para simplificar, se define:

$$B_2 = \frac{\sqrt{\Lambda_1} \xi_c - \text{Tanh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi_c)}{1 - \sqrt{\Lambda_1} \xi_c \text{Tanh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi_c)} \quad (\text{A-4.24})$$

Por lo que (A-4.23) se reduce a:

$$C_2 = B_2 C_1 \quad (\text{A-4.25})$$

La condición de (A-4.3) sigue siendo válida, por lo que, sustituyendo (A-4.21) y (A-4.22) evaluadas en $\xi = 1$ y sustituyéndolas en dicha condición se obtiene:

$$C_1 \left\{ \left(\sqrt{\Lambda_1} + B_2 (Bi - 1) \right) \text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1}) + \left(B_2 \sqrt{\Lambda_1} + Bi - 1 \right) \text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1}) \right\} = Bi \left(\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} + U_f \right) \quad (\text{A-4.26})$$

Para simplificar se define:

$$B_1 = \frac{\left(\sqrt{\Lambda_1} + B_2 (Bi - 1) \right) \text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1}) + \left(B_2 \sqrt{\Lambda_1} + Bi - 1 \right) \text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1})}{Bi} \quad (\text{A-4.27})$$

Entonces:

$$C_1 = \frac{1}{B_1} \left(\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} + U_f \right) \quad (\text{A-4.28})$$

Sustituyendo (A-4.28) y (A-4.25) en (A-4.21):

$$\boxed{U_p = \frac{1}{B_1} \left(\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} + U_f \right) \left[\frac{\text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi)}{\xi} + B_2 \frac{\text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi)}{\xi} \right] - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1}} \quad (\text{A-4.29})$$

Pasando ésta última ecuación al dominio de Laplace y evaluandola en $\xi = 1$ se obtiene:

$$\bar{U}_p \Big|_{\xi=1} = \frac{\left[\text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1}) + B_2 \text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1}) \right]}{B_1} \left(\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \frac{1}{s} + \bar{U}_f \right) - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \frac{1}{s} \quad (\text{A-4.30})$$

Definiendo:

$$B_3 = \frac{\left[\text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1}) + B_2 \text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1}) \right]}{B_1} \quad (\text{A-4.31})$$

se obtiene entonces:

$$\bar{U}_p \Big|_{\xi=1} = (B_3 - 1) \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \frac{1}{s} + B_3 \bar{U}_f \quad (\text{A-4.32})$$

La Ecuación (A-4.2) en el dominio de Laplace sigue siendo válida,

$$s\bar{U}_f - U_{f0} = \psi_{in} (\bar{U}_{in}(s) - \bar{U}_f) + \psi_p (\bar{U}_p \Big|_{\xi=1} - \bar{U}_f) \quad (\text{A-4.10})$$

Sustituyendo (A-4.32) en (A-4.10):

$$\bar{U}_f = \frac{U_{f0}}{s + \psi_{in} + \psi_p (1 - B_3)} + \frac{\psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{s + \psi_{in} + \psi_p (1 - B_3)} + \frac{\psi_p (B_3 - 1) \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1}}{s (s + \psi_{in} + \psi_p (1 - B_3))} \quad (\text{A-4.33})$$

Aplicando transformada inversa:

$$U_f = e^{-B_4 \tau} U_{f0} + \psi_{in} e^{-B_4 \tau} \int_0^\tau e^{B_4 \beta} U_{in}(\beta) d\beta + \psi_p \frac{(B_3 - 1) \Lambda_2}{B_4 \Lambda_1} (1 - e^{-B_4 \tau})$$

o bien,

$$U_f = e^{-B_4 \tau} \left(U_{f0} + \psi_{in} \int_0^\tau e^{B_4 \beta} U_{in}(\beta) d\beta - \psi_p \frac{(B_3 - 1) \Lambda_2}{B_4 \Lambda_1} \right) + \psi_p \frac{(B_3 - 1) \Lambda_2}{B_4 \Lambda_1} \quad (\text{A-4.34})$$

donde:

$$B_4 = \psi_{in} + \psi_p (1 - B_3) \quad (\text{A-4.35})$$

Por último, se calculará la concentración promedio en la partícula con la expresión (A-3.37), obteniéndose:

$$\begin{aligned} \langle U_p \rangle = & 3 \frac{1}{B_1} \left(\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} + U_f \right) \left\{ \frac{1}{\sqrt{\Lambda_1}} \left(\text{Cosh} \sqrt{\Lambda_1} - \xi_c \text{Cosh} \sqrt{\Lambda_1} \xi_c \right) - \frac{1}{\Lambda_1} \left(\text{Senh} \sqrt{\Lambda_1} - \text{Senh} \sqrt{\Lambda_1} \xi_c \right) \right. \\ & \left. + B_2 \left[\frac{1}{\sqrt{\Lambda_1}} \left(\text{Senh} \sqrt{\Lambda_1} - \xi_c \text{Senh} \sqrt{\Lambda_1} \xi_c \right) - \frac{1}{\Lambda_1} \left(\text{Cosh} \sqrt{\Lambda_1} - \text{Cosh} \sqrt{\Lambda_1} \xi_c \right) \right] \right\} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} (1 - \xi_c^3) \end{aligned} \quad (\text{A-4.36})$$

A-4.4.- Demostración de equivalencia de las soluciones

Por último se demostrará que al fijar $\xi_c = 0$ las dos soluciones son idénticas. Se comenzará por las constantes B_1 a B_4 :

$$\text{En } \xi_c = 0 : \quad B_2 = 0 \quad (\text{A-4.37})$$

$$B_1 = \frac{\sqrt{\Lambda_1} \text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1}) + (Bi - 1) \text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1})}{Bi} = \frac{1}{a_2} \quad (\text{A-4.38})$$

$$B_3 = \frac{\text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1})}{B_1} = \frac{Bi}{\sqrt{\Lambda_1} \text{Coth}(\sqrt{\Lambda_1}) + Bi - 1} \quad (\text{A-4.39})$$

$$B_4 = \psi_{in} + \psi_p (1 - B_3) \quad (\text{A-4.40})$$

De (A-4.39) se tiene que:

$$1 - B_3 = \frac{\sqrt{\Lambda_1} \text{Coth}(\sqrt{\Lambda_1}) - 1}{\sqrt{\Lambda_1} \text{Coth}(\sqrt{\Lambda_1}) + Bi - 1} = a_1 \quad (\text{A-4.41})$$

por lo que,

$$B_4 = \psi_{in} + \psi_p a_1 \quad (\text{A-4.42})$$

$$U_f = e^{-(\psi_{in} + \psi_p a_1)\tau} \left(U_{f0} + \psi_{in} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta + \psi_p \frac{a_1}{(\psi_{in} + \psi_p a_1)} \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \right) - \psi_p \frac{a_1}{(\psi_{in} + \psi_p a_1)} \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{A-4.43})$$

Usando (A-4.16):

$$U_f = e^{-(\psi_{in} + \psi_p a_1)\tau} \left(U_{f0} + \psi_{in} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta + \psi_p a_1 a_3 \right) - \psi_p a_1 a_3 \quad (\text{A-4.44})$$

la cual es idéntica a (A-4.18). De esta forma el promedio en la partícula es:

$$\langle U_p \rangle = 3a_2 \left(\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} + U_f \right) \left[\frac{\text{Cosh}\sqrt{\Lambda_1}}{\sqrt{\Lambda_1}} - \frac{\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}}{\Lambda_1} \right] - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{A-4.45})$$

la cual es equivalente a (A-4.19) ya que

$$\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} + U_f = \psi_{in} a_3 + e^{-(\psi_{in} + \psi_p a_1)\tau} \left(U_{f0} + \psi_{in} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p a_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta + \psi_p a_1 a_3 \right) \quad (\text{A-4.46})$$

Por último, (A-4.29) es:

$$U_p = a_2 \left(\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} + U_f \right) \frac{\text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1} \xi)}{\xi} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{A-4.48})$$

la cual es equivalente a (A-4.17).

Apéndice A-5

Solución en estado transitorio

A-5.1.- Planteamiento del problema

Las ecuaciones que describen esta situación son:

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Lambda_1 U_p - \Lambda_2 \quad (\text{A-5.1})$$

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

con condiciones de frontera e iniciales:

$$\text{En } \xi = 1 \quad -\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = Bi (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (\text{A-5.3})$$

$$\text{En } 0 \leq \xi \leq 1 \quad U_p \text{ está definida} \quad (\text{A-5.4})$$

$$\text{Cuando } \tau = 0 \quad U_f = U_{f_0} \quad (\text{A-5.5})$$

$$U_p = U_{p_0} \quad (\text{A-5.6})$$

Aplicando transformada de Laplace a (A-5.1) y (A-5.2):

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{d\bar{U}_p}{d\xi} \right) - (\Lambda_1 + s) \bar{U}_p = \frac{\Lambda_2}{s} - U_{p_0} \quad (\text{A-5.7})$$

$$s\bar{U}_f - U_{f_0} = \psi_{in} (\bar{U}_{in}(s) - \bar{U}_f) + \psi_p (\bar{U}_p|_{\xi=1} - \bar{U}_f) \quad (\text{A-5.8})$$

la solución de (A-5.7) es:

$$\bar{U}_p = C_1 \frac{\text{Senh}(\alpha\xi)}{\xi} + C_2 \frac{\text{Cosh}(\alpha\xi)}{\xi} - \left(\frac{\Lambda_2}{s} - U_{p0} \right) \frac{1}{\alpha^2} \quad (\text{A-5.9})$$

donde

$$\alpha^2 = \Lambda_1 + s \quad (\text{A-5.10})$$

A-5.2.- Solución sin frente de agotamiento

Aplicando la condición de (A-5.4) (la cual es también válida en el dominio de Laplace) a

(A-5.9) se obtiene que

$$C_2 = 0 \quad (\text{A-5.11})$$

por lo que (A-5.9) se reduce a:

$$\bar{U}_p = C_1 \frac{\text{Senh}(\alpha\xi)}{\xi} - \left(\frac{\Lambda_2}{s} - U_{p0} \right) \frac{1}{\alpha^2} \quad (\text{A-5.12})$$

Cuya derivada respecto a ξ es:

$$\frac{d\bar{U}_p}{d\xi} = C_1 \left(\frac{\alpha \text{Cosh}(\alpha\xi)}{\xi} - \frac{\text{Senh}(\alpha\xi)}{\xi^2} \right) \quad (\text{A-5.13})$$

y evaluada en las condiciones de la superficie es

$$\left. \frac{d\bar{U}_p}{d\xi} \right|_{\xi=1} = C_1 (\alpha \text{Cosh}(\alpha) - \text{Senh}(\alpha)) \quad (\text{A-5.14})$$

Rearreglando (A-5.8) se tiene que

$$\bar{U}_f = \frac{U_{f0}}{\beta} + \frac{\psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{\beta} + \frac{\psi_p \bar{U}_p|_{\xi=1}}{\beta} \quad (\text{A-5.15})$$

donde

$$\beta = s + \psi_{in} + \psi_p \quad (A-5.16)$$

Aplicando la condición de (A-5.3) en el dominio de Laplace, se obtiene,

$$C_1 = Bi \left(\frac{\alpha^2 U_{f0} - U_{p0} (s + \psi_{in})}{M(s) \alpha^3} + \frac{\psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{M(s) \alpha} \right) + \frac{Bi \Lambda_2 (s + \psi_{in})}{M(s) s \alpha^3} \quad (A-5.17)$$

donde

$$M(s) = \beta \text{Cosh}(\alpha) + \frac{\text{Senh}(\alpha)}{\alpha} ((s + \psi_{in})(Bi - 1) - \psi_p) \quad (A-5.18)$$

Sustituyendo (A-5.17) en (A-5.12):

$$\begin{aligned} \bar{U}_p = & \underbrace{\frac{U_{p0}}{\alpha^2}}_{T_1} - \underbrace{\frac{\Lambda_2}{s \alpha^2}}_{T_2} + \underbrace{\frac{Bi \psi_{in}}{M(s)}}_{T_3} \underbrace{\frac{\text{Senh}(\alpha \xi)}{\alpha \xi}}_{T_3} \bar{U}_{in}(s) + \underbrace{Bi \left(\frac{\alpha^2 U_{f0} - U_{p0} (s + \psi_{in})}{M(s) \alpha^2} \right)}_{T_4} \underbrace{\frac{\text{Senh}(\alpha \xi)}{\alpha \xi}}_{T_4} \\ & + \underbrace{\frac{Bi \Lambda_2 (s + \psi_{in})}{\alpha^2 s M(s)}}_{T_5} \underbrace{\frac{\text{Senh}(\alpha \xi)}{\alpha \xi}}_{T_5} \end{aligned} \quad (A-5.19)$$

donde T_i se refiere al término a invertir, lo cual se hará en breve.

Aplicando $\xi = 1$ en (A-5.19) y sustituyendo en (A-5.15):

$$\begin{aligned} \bar{U}_f = & \underbrace{\frac{U_{f0}}{\beta}}_{T_6} + \underbrace{\frac{\psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{\beta}}_{T_7} + \underbrace{\frac{\psi_p U_{p0}}{\alpha^2 \beta}}_{T_8} - \underbrace{\frac{\psi_p \Lambda_2}{s \alpha^2 \beta}}_{T_9} + \underbrace{Bi \frac{\psi_p}{\beta} \left(\frac{\alpha^2 U_{f0} - U_{p0} (s + \psi_{in})}{M(s) \alpha^2} \right)}_{T_{10}} \underbrace{\frac{\text{Senh}(\alpha)}{\alpha}}_{T_{10}} \\ & + \underbrace{\frac{\psi_p}{\beta} \frac{Bi \psi_{in}}{M(s)} \frac{\text{Senh}(\alpha)}{\alpha} \bar{U}_{in}(s)}_{T_{11}} + \underbrace{\frac{\psi_p}{\beta} \frac{Bi \Lambda_2 (s + \psi_{in})}{\alpha^2 s M(s)} \frac{\text{Senh}(\alpha)}{\alpha}}_{T_{12}} \end{aligned} \quad (A-5.20)$$

A-5.3.- Transformadas Inversas.

Primer Término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_1\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{U_{p0}}{s + \Lambda_1}\right\} = U_{p0}e^{-\Lambda_1\tau} \quad (\text{A-5.21})$$

Segundo Término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_2\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{-\frac{\Lambda_2}{s(s + \Lambda_1)}\right\} = -\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1}(1 - e^{-\Lambda_1\tau}) \quad (\text{A-5.22})$$

Tercer Término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_3\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{Bi\psi_{in}}{M(s)} \frac{\text{Senh}(\alpha\xi)}{\alpha\xi} \bar{U}_{in}(s)\right\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{Bi\psi_{in}}{M(s)} \frac{\text{Senh}\left[\sqrt{s + \Lambda_1}\xi\right]}{\sqrt{s + \Lambda_1}\xi} \bar{U}_{in}(s)\right\} \quad (\text{A-5.23})$$

Primeramente se usará el teorema de la convolución, para obtener:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_3\} = Bi\psi_{in} \int_0^\tau \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{1}{M(s)} \frac{\text{Senh}\left[\sqrt{s + \Lambda_1}\xi\right]}{\sqrt{s + \Lambda_1}\xi}\right\} U_{in}(\beta) d\beta \quad (\text{A-5.24})$$

Ahora bien, se debe invertir un producto por lo que se usará:

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{P(s)}{Q(s)}\right\} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{P(s_n)}{Q'(s_n)} e^{s_n\tau} \quad (\text{A-5.25})$$

donde s_n son las raíces de $Q(s)$. Para este caso se seleccionan:

$$P(s) = \frac{\text{Senh}\left[\sqrt{s + \Lambda_1}\xi\right]}{\sqrt{s + \Lambda_1}\xi} \quad (\text{A-5.26})$$

$$Q(s) = M(s) = (s + \psi_{in} + \psi_p) \text{Cosh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1}\right) + \frac{\text{Senh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1}\right)}{\sqrt{s + \Lambda_1}} \left((s + \psi_{in})(Bi - 1) - \psi_p\right) \quad (\text{A-5.27})$$

Cuya derivada respecto a s es:

$$\begin{aligned} \frac{dQ(s)}{ds} = & \text{Cosh}\left(\sqrt{s+\Lambda_1}\right) \frac{\left(2(s+\Lambda_1)+(s+\psi_{in})(Bi-1)-\psi_p\right)}{2(s+\Lambda_1)} \\ & + \frac{\text{Senh}\left(\sqrt{s+\Lambda_1}\right)}{\sqrt{s+\Lambda_1}} \frac{(Bi-1)[s+2\Lambda_1-\psi_{in}]+\psi_p+(s+\psi_{in}+\psi_p)(s+\Lambda_1)}{2(s+\Lambda_1)} \end{aligned} \quad (\text{A-5.28})$$

Como se mencionó, es necesario obtener las raíces de $Q(s)$; sin embargo, al graficar la función de (A-5.27) se puede ver, como lo ilustra la Figura A-5.1, que $M(s)$ sólo tiende a valores cercanos a cero pero no lo alcanza. En otras palabras, $M(s)$ sólo tiene raíces imaginarias, por ello se propone el siguiente cambio de variable:

$$\sqrt{s+\Lambda_1} = i\mu_n \quad (\text{A-5.29})$$

y por ello

$$s = -\mu_n^2 - \Lambda_1 \quad (\text{A-5.30})$$

Sustituyendo (A-5.29) y (A-5.30) en (A-5.27) y (A-5.28),

$$Q(s_n) = A_n \text{Cos}(\mu_n) + B_n \frac{\text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \quad (\text{A-5.31})$$

$$\frac{dQ(s_n)}{ds} = \text{Cos}(\mu_n) \frac{(2\mu_n^2 - B_n)}{2\mu_n^2} + \frac{\text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \frac{2\mu_n^2(Bi-1) + B_n + A_n\mu_n^2}{2\mu_n^2} \quad (\text{A-5.32})$$

Como se puede notar en la Figura A-5.2, este cambio de variable provoca un número infinito de raíces de $Q(s_n)$.

En (A-5.31) y (A-5.32) se usaron las definiciones:

$$A_n = \psi_{in} + \psi_p - \mu_n^2 - \Lambda_1 \quad (\text{A-5.33})$$

$$B_n = (\psi_{in} - \mu_n^2 - \Lambda_1)(Bi-1) - \psi_p \quad (\text{A-5.34})$$

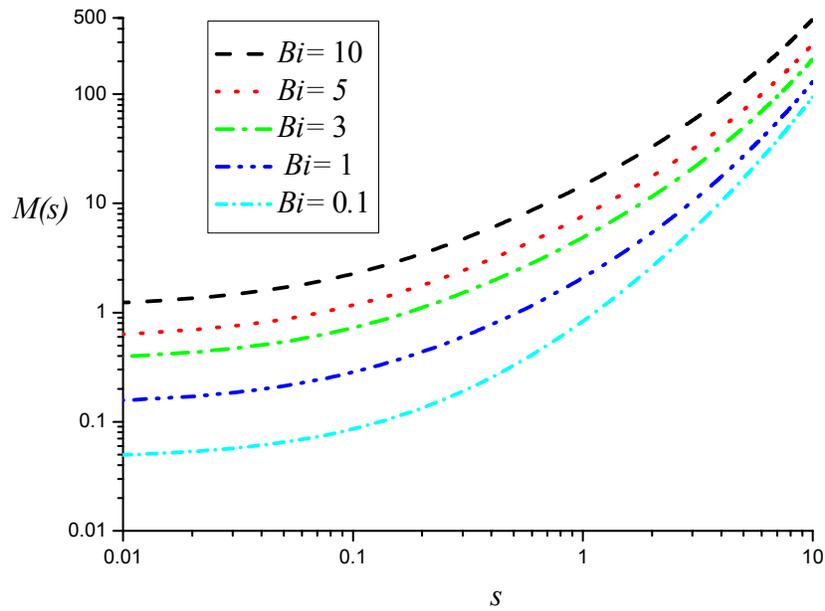


Figura A-5.1: $M(s)$ contra s para $\psi_{in} = \psi_p = 0.1$ y $\Lambda_1 = 0.5$.

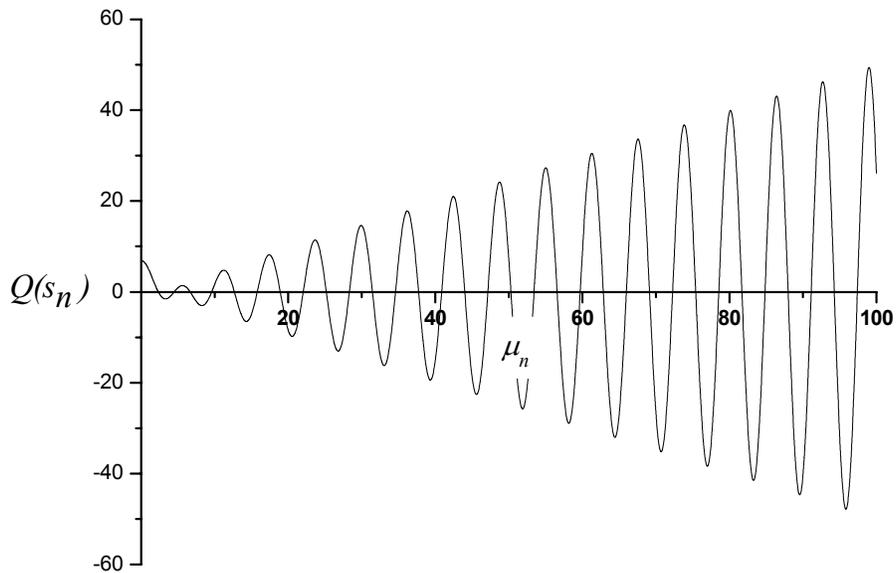


Figura A-5.2: $Q(s_n)$ como función de μ_n para $\psi_{in} = \psi_p = 10$, $\Lambda_1 = 0.1$ y $Bi = 0.1$.

Aplicando estas definiciones a (A-5.31) e igualándola a cero, se tiene que

$$\text{Cos}(\mu_n) = -\frac{B_n}{A_n} \frac{\text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \quad (\text{A-5.35})$$

Sustituyendo (A-5.35) en (A-5.32):

$$\frac{dQ(s_n)}{ds} = \frac{\text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \left[Bi - 1 - \frac{B_n}{A_n} + \frac{B_n}{2\mu_n^2} \left(1 + \frac{B_n}{A_n} \right) + \frac{A_n}{2} \right] \quad (\text{A-5.36})$$

O bien, si se define:

$$D_n = Bi - 1 - \frac{B_n}{A_n} + \frac{B_n}{2\mu_n^2} \left(1 + \frac{B_n}{A_n} \right) + \frac{A_n}{2} \quad (\text{A-5.37})$$

se reduce (A-5.36) a:

$$\frac{dQ(s_n)}{ds} = \frac{D_n \text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \quad (\text{A-5.38})$$

Sustituyendo (A-5.29) en (A-5.26)

$$P(s_n) = \frac{\text{Sen}(\mu_n \xi)}{\mu_n \xi} \quad (\text{A-5.39})$$

Sustituyendo (A-5.38) y (A-5.39) en (A-5.25):

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s)}{Q(s)} \right\} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Sen}(\mu_n \xi)}{D_n \xi \text{Sen}(\mu_n)} e^{-(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau} \quad (\text{A-5.40})$$

Introduciendo (A-5.40) en (A-5.24):

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_3\} = Bi \psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Sen}(\mu_n \xi) e^{-(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{D_n \xi \text{Sen}(\mu_n)} \int_0^{\tau} e^{(\mu_n^2 + \Lambda_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \quad (\text{A-5.41})$$

Cuarto Término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_4\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{Bi\left(\frac{(\Lambda_1 + s)U_{f0} - U_{p0}(s + \psi_{in})}{(\Lambda_1 + s)M(s)}\right)\frac{\text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1 + s}\xi)}{\sqrt{\Lambda_1 + s}\xi}\right\} \quad (\text{A-5.42})$$

al igual que en el caso anterior es necesario aplicar el método de residuos, se selecciona:

$$P(s) = Bi\left[(\Lambda_1 + s)U_{f0} - U_{p0}(s + \psi_{in})\right]\frac{\text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1 + s}\xi)}{(\sqrt{\Lambda_1 + s})\xi} \quad (\text{A-5.43})$$

$$Q(s) = (\Lambda_1 + s)M(s) \quad (\text{A-5.44})$$

de la ecuación anterior se puede ver que existen dos polos:

$$1) s = -\Lambda_1 \quad (\text{A-5.45})$$

$$2) M(s) = 0 \quad (\text{A-5.46})$$

Derivando (A-5.44) respecto a s :

$$Q'(s) = (\Lambda_1 + s)M'(s) + M(s) \quad (\text{A-5.47})$$

Evaluando la ecuación anterior en el polo de (A-5.45):

$$Q'(s) = (\psi_{in} - \Lambda_1)Bi \quad (\text{A-5.48})$$

Aplicando el polo de (A-5.45) a (A-5.43):

$$P(s) = BiU_{p0}(\Lambda_1 - \psi_{in}) \quad (\text{A-5.49})$$

por lo que para el primer polo,

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{P(s_a)}{Q(s_a)}\right\} = -U_{p0}e^{-\Lambda_1\tau} \quad (\text{A-5.50})$$

para el segundo polo, la ecuación (A-5.47) se reduce a:

$$Q'(s) = -\mu_n^2 \frac{D_n \text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \quad (\text{A-5.51})$$

Donde μ_n se definió en (A-5.29) y D_n en (A-5.37). Por otro lado, la ecuación (A-5.43)

se modifica a,

$$P(s) = Bi \left[-\mu_n^2 U_{f0} + U_{p0} (\Lambda_1 + \mu_n^2 - \psi_{in}) \right] \frac{Sen(\mu_n \xi)}{\mu_n \xi} \quad (A-5.52)$$

por lo que,

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_b)}{Q(s_b)} \right\} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Bi \left[\mu_n^2 U_{f0} - U_{p0} (\Lambda_1 + \mu_n^2 - \psi_{in}) \right] Sen(\mu_n \xi)}{\mu_n^2 D_n Sen(\mu_n)} \frac{1}{\xi} e^{-(\Lambda_1 + \mu_n^2)\tau} \quad (A-5.53)$$

Sumando (A-5.50) y (A-5.53) se obtiene:

$$\boxed{\mathcal{L}^{-1} \{T_4\} = -U_{p0} e^{-\Lambda_1 \tau} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Bi \left[\mu_n^2 U_{f0} - U_{p0} (\Lambda_1 + \mu_n^2 - \psi_{in}) \right] Sen(\mu_n \xi)}{\mu_n^2 D_n Sen(\mu_n)} \frac{1}{\xi} e^{-(\Lambda_1 + \mu_n^2)\tau}}$$

(A-5.54)

Quinto Término:

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_5\} = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{Bi \Lambda_2 (s + \psi_{in}) Senh(\sqrt{\Lambda_1 + s \xi})}{(\Lambda_1 + s) s M(s) \sqrt{\Lambda_1 + s \xi}} \right\} \quad (A-5.55)$$

con el fin de eliminar un polo se aplicará el teorema de la convolución:

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_5\} = Bi \Lambda_2 \int_0^\tau \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{(s + \psi_{in}) Senh(\sqrt{\Lambda_1 + s \xi})}{(\Lambda_1 + s) M(s) \sqrt{\Lambda_1 + s \xi}} \right\} d\beta \quad (A-5.56)$$

ahora se aplicará el método de residuos, donde se selecciona,

$$P(s) = \frac{(s + \psi_{in}) Senh(\sqrt{\Lambda_1 + s \xi})}{\sqrt{\Lambda_1 + s \xi}} \quad (A-5.57)$$

$$Q(s) = (\Lambda_1 + s) M(s) \quad (A-5.58)$$

Como se puede notar la expresión (A-5.58) es idéntica a (A-5.44), por lo que es de esperarse que se tengan los mismos dos polos. Para el primero, dado por la ecuación (A-5.45) se obtienen:

$$Q'(s_1) = (\psi_{in} - \Lambda_1) Bi \quad (A-5.59)$$

$$P(s_1) = \psi_{in} - \Lambda_1 \quad (A-5.60)$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_1)}{Q(s_1)} \right\} = \frac{e^{-\Lambda_1 \tau}}{Bi} \quad (A-5.61)$$

Para el segundo polo, dado por la ecuación (A-5.45) se tiene:

$$Q'(s) = -\mu_n^2 \frac{D_n \text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \quad (A-5.62)$$

$$P(s) = \frac{(\psi_{in} - \mu_n^2 - \Lambda_1) \text{Sen}(\mu_n \xi)}{\mu_n \xi} \quad (A-5.63)$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_2)}{Q(s_2)} \right\} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mu_n^2 + \Lambda_1 - \psi_{in}) \text{Sen}(\mu_n \xi)}{\mu_n^2 D_n \text{Sen}(\mu_n)} \frac{e^{-(\Lambda_1 + \mu_n^2) \tau}}{\xi} \quad (A-5.64)$$

Sustituyendo (A-5.61) y (A-5.64) en (A-5.56):

$$\boxed{\mathcal{L}^{-1} \{T_5\} = \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} (1 - e^{-\Lambda_1 \tau}) + Bi \Lambda_2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mu_n^2 + \Lambda_1 - \psi_{in}) \text{Sen}(\mu_n \xi)}{\mu_n^2 D_n \xi \text{Sen}(\mu_n)} \left(\frac{1 - e^{-(\Lambda_1 + \mu_n^2) \tau}}{\Lambda_1 + \mu_n^2} \right)} \quad (A-5.65)$$

Con este término se obtiene la solución para la partícula sumando (A-5.21), (A-5.22), (A-5.41), (A-5.54) y (A-5.65):

$$\begin{aligned}
 U_p = & Bi\psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Sen(\mu_n \xi) e^{-(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{D_n \xi Sen(\mu_n)} \int_0^{\tau} e^{(\mu_n^2 + \Lambda_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \\
 & + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Bi \left[\mu_n^2 U_{f0} - U_{p0} (\Lambda_1 + \mu_n^2 - \psi_{in}) \right]}{\mu_n^2 D_n Sen(\mu_n)} \frac{Sen(\mu_n \xi)}{\xi} e^{-(\Lambda_1 + \mu_n^2)\tau} \\
 & + Bi\Lambda_2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mu_n^2 + \Lambda_1 - \psi_{in})}{\mu_n^2 D_n} \frac{Sen(\mu_n \xi)}{\xi Sen(\mu_n)} \left(\frac{1 - e^{-(\Lambda_1 + \mu_n^2)\tau}}{\Lambda_1 + \mu_n^2} \right)
 \end{aligned}$$

O bien,

$$U_p = \frac{Bi}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Sen(\mu_n \xi) e^{-(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{D_n Sen(\mu_n)} \left\{ U_{f0} + \psi_{in} I_{in}(\tau) + \frac{(\mu_n^2 + \Lambda_1 - \psi_{in})}{\mu_n^2} \left[\Lambda_2 \left(\frac{e^{(\Lambda_1 + \mu_n^2)\tau} - 1}{\Lambda_1 + \mu_n^2} \right) - U_{p0} \right] \right\} \tag{A-5.66}$$

donde:

$$I_{in}(\tau) = \int_0^{\tau} e^{(\mu_n^2 + \Lambda_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \tag{A-5.67}$$

Ahora se continuarán las transformadas inversas, para obtener la solución del fluido.

Sexto Término:

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_6\} = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{U_{f0}}{s + \psi_{in} + \psi_p} \right\} = U_{f0} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \tag{A-5.68}$$

Séptimo Término:

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_7\} = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{s + \psi_{in} + \psi_p} \right\} \tag{A-5.69}$$

Aplicando el teorema de la convolución

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_7\} = \psi_{in} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \quad (\text{A-5.70})$$

Octavo Término

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_8\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{\psi_p U_{p0}}{(\Lambda_1 + s)(s + \psi_{in} + \psi_p)}\right\} = \frac{\psi_p U_{p0}}{\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1} \left(e^{-\Lambda_1 \tau} - e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau}\right) \quad (\text{A-5.71})$$

Noveno Término

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_9\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{-\frac{\psi_p \Lambda_2}{s(\Lambda_1 + s)(s + \psi_{in} + \psi_p)}\right\} \quad (\text{A-5.72})$$

por medio de fracciones parciales:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_9\} = -\frac{\psi_p \Lambda_2}{\Lambda_1(\psi_{in} + \psi_p)} + \frac{\psi_p \Lambda_2 e^{-\Lambda_1 \tau}}{\Lambda_1(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)} + \frac{\psi_p \Lambda_2 e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau}}{(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)(\psi_{in} + \psi_p)} \quad (\text{A-5.73})$$

Décimo Término

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{10}\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{Bi \frac{\psi_p}{s + \psi_{in} + \psi_p} \left(\frac{(\Lambda_1 + s)U_{f0} - U_{p0}(s + \psi_{in})}{M(s)(\Lambda_1 + s)}\right) \frac{\text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1 + s})}{\sqrt{\Lambda_1 + s}}\right\} \quad (\text{A-5.74})$$

se aplicará el método de residuos, por lo que se distinguen;

$$P(s) = Bi\psi_p \left((\Lambda_1 + s)U_{f0} - U_{p0}(s + \psi_{in})\right) \frac{\text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1 + s})}{\sqrt{\Lambda_1 + s}} \quad (\text{A-5.75})$$

$$Q(s) = (s + \psi_{in} + \psi_p)M(s)(\Lambda_1 + s) \quad (\text{A-5.76})$$

la derivada de (A-5.76) es:

$$Q'(s) = M(s)(\Lambda_1 + s) + (s + \psi_{in} + \psi_p)M'(s)(\Lambda_1 + s) + (s + \psi_{in} + \psi_p)M(s) \quad (\text{A-5.77})$$

los polos de (A-5.76) son:

$$1) s = -(\psi_{in} + \psi_p) \quad (A-5.78)$$

$$2) s = -\Lambda_1 \quad (A-5.79)$$

$$3) M(s) = 0 \quad (A-5.80)$$

Para el primer polo se tiene:

$$Q'(s) = \sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \operatorname{Senh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right) (-\psi_p Bi) \quad (A-5.81)$$

$$P(s) = Bi\psi_p \left((\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p) U_{f0} + U_{p0}\psi_p \right) \frac{\operatorname{Senh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right)}{\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}} \quad (A-5.82)$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_1)}{Q(s_1)} \right\} = -\frac{(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p) U_{f0} + U_{p0}\psi_p}{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} = -U_{f0} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} - \frac{U_{p0}\psi_p}{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \quad (A-5.83)$$

Para el segundo polo,

$$Q'(s) = (\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)(\psi_{in} - \Lambda_1) Bi \quad (A-5.84)$$

$$P(s) = Bi\psi_p U_{p0} (\Lambda_1 - \psi_{in}) \quad (A-5.85)$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_2)}{Q(s_2)} \right\} = -\frac{\psi_p U_{p0}}{\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1} e^{-\Lambda_1 \tau} \quad (A-5.86)$$

Para el tercer polo,

$$Q'(s) = (\psi_{in} + \psi_p - \mu_n^2 - \Lambda_1) (-\mu_n^2) D_n \frac{\operatorname{Sen}\mu_n}{\mu_n} \quad (A-5.87)$$

$$P(s) = Bi\psi_p \left(-\mu_n^2 U_{f0} - U_{p0} (-\mu_n^2 - \Lambda_1 + \psi_{in}) \right) \frac{\operatorname{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \quad (A-5.88)$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_3)}{Q(s_3)} \right\} = Bi\psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mu_n^2 U_{f0} - U_{p0} (\mu_n^2 + \Lambda_1 - \psi_{in}))}{(\psi_{in} + \psi_p - \mu_n^2 - \Lambda_1)(\mu_n^2) D_n} e^{-(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau} \quad (A-5.89)$$

De esta forma, se obtiene la transformada de (A-5.74) sumando (A-5.83), (A-5.86) y (A-5.89):

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_{10}\} = -U_{f0} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} - \frac{U_{p0} \psi_p}{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} - \frac{\psi_p U_{p0}}{\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1} e^{-\Lambda_1 \tau} + Bi\psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mu_n^2 U_{f0} - U_{p0} (\mu_n^2 + \Lambda_1 + \psi_{in}))}{(\psi_{in} + \psi_p - \mu_n^2 - \Lambda_1)(\mu_n^2) D_n} e^{-(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau} \quad (A-5.90)$$

Onceavo Término:

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_{11}\} = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\psi_p}{s + \psi_{in} + \psi_p} \frac{Bi\psi_{in}}{M(s)} \frac{Senh(\sqrt{\Lambda_1 + s})}{\sqrt{\Lambda_1 + s}} \bar{U}_{in}(s) \right\} \quad (A-5.91)$$

Primeramente se usará el teorema de la convolución,

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_{11}\} = \psi_p Bi\psi_{in} \int_0^\tau U_{in}(\beta) \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{(s + \psi_{in} + \psi_p) M(s)} \frac{Senh(\sqrt{\Lambda_1 + s})}{\sqrt{\Lambda_1 + s}} \right\} d\beta \quad (A-5.92)$$

Para hacer la transformada inversa de la integral se usará el método de residuos, donde

$$P(s) = \frac{Senh(\sqrt{\Lambda_1 + s})}{\sqrt{\Lambda_1 + s}} \quad (A-5.93)$$

$$Q(s) = (s + \psi_{in} + \psi_p) M(s) \quad (A-5.94)$$

como se puede notar se tienen dos polos,

$$1) s_1 = -(\psi_{in} + \psi_p) \quad (A-5.95)$$

$$2) M(s) = 0 \quad (A-5.96)$$

La derivada de (A-5.94) respecto a s es

$$Q'(s) = (s + \psi_{in} + \psi_p)M'(s) + M(s) \quad (A-5.97)$$

Para el primer polo se tiene,

$$Q'(s) = \frac{\text{Senh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right)}{\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}} (-\psi_p) Bi \quad (A-5.98)$$

$$P(s) = \frac{\text{Senh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right)}{\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}} \quad (A-5.99)$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{P(s_1)}{Q(s_1)}\right\} = -\frac{e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau}}{\psi_p Bi} \quad (A-5.100)$$

Para el segundo polo

$$Q'(s) = (\psi_{in} + \psi_p - \mu_n^2 - \Lambda_1) D_n \frac{\text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \quad (A-5.101)$$

$$P(s) = \frac{\text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \quad (A-5.102)$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{P(s_2)}{Q(s_2)}\right\} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{(\psi_{in} + \psi_p - \mu_n^2 - \Lambda_1) D_n} \quad (A-5.103)$$

D esta forma, la transformada inversa que se debe sustituir en la integral de (A-5.92) es:

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{P(s)}{Q(s)}\right\} = -\frac{e^{-(\psi_{in} + \psi_p)(\tau - \beta)}}{\psi_p Bi} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-(\mu_n^2 + \Lambda_1)(\tau - \beta)}}{(\psi_{in} + \psi_p - \mu_n^2 - \Lambda_1) D_n} \quad (A-5.104)$$

por lo que,

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{11}\} = -\psi_{in} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \int_0^\tau U_{in}(\beta) e^{(\psi_{in} + \psi_p)\beta} d\beta + Bi\psi_p \psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{(\psi_{in} + \psi_p - \mu_n^2 - \Lambda_1) D_n} \int_0^\tau U_{in}(\beta) e^{(\mu_n^2 + \Lambda_1)\beta} d\beta \quad (\text{A-5.105})$$

Doceavo Término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{12}\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{ \frac{\psi_p}{(s + \psi_{in} + \psi_p)} \frac{Bi\Lambda_2(s + \psi_{in})}{(\Lambda_1 + s)sM(s)} \frac{\text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1 + s})}{\sqrt{\Lambda_1 + s}} \right\} \quad (\text{A-5.106})$$

Para eliminar un polo, se usará el teorema de la convolución,

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{12}\} = Bi\Lambda_2\psi_p \int_0^\tau \mathcal{L}^{-1}\left\{ \frac{(s + \psi_{in})}{(s + \psi_{in} + \psi_p)(\Lambda_1 + s)M(s)} \frac{\text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1 + s})}{\sqrt{\Lambda_1 + s}} \right\} d\beta \quad (\text{A-5.107})$$

de nuevo se usará el método de residuos, por lo que se seleccionan,

$$P(s) = (s + \psi_{in}) \frac{\text{Senh}(\sqrt{\Lambda_1 + s})}{\sqrt{\Lambda_1 + s}} \quad (\text{A-5.108})$$

$$Q(s) = (s + \psi_{in} + \psi_p)(\Lambda_1 + s)M(s) \quad (\text{A-5.109})$$

Se distinguen tres polos

$$1) s = -(\psi_{in} + \psi_p) \quad (\text{A-5.110})$$

$$2) s = -\Lambda_1 \quad (\text{A-5.111})$$

$$3) M(s) = 0 \quad (\text{A-5.112})$$

La derivada de (A-5.109) respecto a s es

$$Q'(s) = (\Lambda_1 + s)M(s) + (s + \psi_{in} + \psi_p)M(s) + (s + \psi_{in} + \psi_p)(\Lambda_1 + s)M'(s) \quad (\text{A-5.113})$$

Para el primer polo,

$$Q'(s) = \sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \operatorname{Senh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right) (-\psi_p) Bi \quad (\text{A-5.114})$$

$$P(s) = -\psi_p \frac{\operatorname{Senh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right)}{\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}} \quad (\text{A-5.115})$$

por lo que,

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_1)}{Q(s_1)} \right\} = \frac{e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau}}{Bi(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)} \quad (\text{A-5.116})$$

Para el segundo polo,

$$Q'(s) = (\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)(\psi_{in} - \Lambda_1) Bi \quad (\text{A-5.117})$$

$$P(s) = \psi_{in} - \Lambda_1 \quad (\text{A-5.118})$$

por lo que,

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_2)}{Q(s_2)} \right\} = \frac{e^{-\Lambda_1 \tau}}{Bi(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)} \quad (\text{A-5.119})$$

Para el tercer polo,

$$Q'(s) = (\psi_{in} + \psi_p - \mu_n^2 - \Lambda_1)(-\mu_n^2) D_n \frac{\operatorname{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \quad (\text{A-5.120})$$

$$P(s) = (\psi_{in} - \mu_n^2 - \Lambda_1) \frac{\operatorname{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \quad (\text{A-5.121})$$

por lo que,

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_3)}{Q(s_3)} \right\} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mu_n^2 + \Lambda_1 - \psi_{in}) e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau}}{(\psi_{in} + \psi_p - \mu_n^2 - \Lambda_1)(\mu_n^2) D_n} \quad (\text{A-5.122})$$

Por lo que la transformada inversa que se sustituirá en la integral de (A-5.107) es,

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s)}{Q(s)} \right\} = \frac{e^{-(\psi_{in} + \psi_p)(\tau - \beta)}}{Bi(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)} + \frac{e^{-\Lambda_1(\tau - \beta)}}{Bi(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mu_n^2 + \Lambda_1 - \psi_{in}) e^{-(\psi_{in} + \psi_p)(\tau - \beta)}}{(\psi_{in} + \psi_p - \mu_n^2 - \Lambda_1)(\mu_n^2) D_n} \quad (\text{A-5.123})$$

Sustituyendo (A-5.123) en (A-5.107) e integrando,

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_{12}\} = \frac{\Lambda_2 \psi_p}{(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)(\psi_{in} + \psi_p)} - \frac{\Lambda_2 \psi_p e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau}}{(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)(\psi_{in} + \psi_p)} + \frac{\Lambda_2 \psi_p}{\Lambda_1(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)} - \frac{\Lambda_2 \psi_p e^{-\Lambda_1 \tau}}{\Lambda_1(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)} + Bi \Lambda_2 \psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mu_n^2 + \Lambda_1 - \psi_{in})(1 - e^{-(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau})}{(\psi_{in} + \psi_p - \mu_n^2 - \Lambda_1)(\mu_n^2)(\mu_n^2 + \Lambda_1) D_n} \quad (\text{A-5.124})$$

Para obtener la transformada inversa de (A-5.20) es necesario sumar las ecuaciones (A-5.68), (A-5.70), (A-5.71), (A-5.73), (A-5.90), (A-5.105) y (A-5.124)

$$U_f = Bi \psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mu_n^2 U_{f0} - U_{p0}(\mu_n^2 + \Lambda_1 - \psi_{in}))}{(\psi_{in} + \psi_p - \mu_n^2 - \Lambda_1)(\mu_n^2) D_n} e^{-(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau} + Bi \psi_p \psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{(\psi_{in} + \psi_p - \mu_n^2 - \Lambda_1) D_n} \int_0^{\tau} U_{in}(\beta) e^{(\mu_n^2 + \Lambda_1)\beta} d\beta + Bi \Lambda_2 \psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mu_n^2 + \Lambda_1 - \psi_{in})(1 - e^{-(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau})}{(\psi_{in} + \psi_p - \mu_n^2 - \Lambda_1)(\mu_n^2)(\mu_n^2 + \Lambda_1) D_n}$$

o bien

$$U_f = Bi \psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{A_n D_n} \left\{ U_{f0} + \psi_{in} I_{in}(\tau) + \frac{(\mu_n^2 + \Lambda_1 - \psi_{in})}{\mu_n^2} \left[\Lambda_2 \frac{(e^{(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau} - 1)}{(\mu_n^2 + \Lambda_1)} - U_{p0} \right] \right\} \quad (\text{A-5.125})$$

con esto se termina la solución sin tomar en cuenta el frente de agotamiento.

A-5.4.-Solución con frente de agotamiento

Como en los dos casos anteriores se modificará la condición de frontera, que en este caso es la ecuación (A-5.4), de tal forma que

$$\text{En } \xi = \xi_c, \quad \frac{\partial U_p}{\partial \xi} = 0 \quad (\text{A-5.126})$$

La solución general de la partícula en el dominio de Laplace dada por la ecuación (A-5.9) sigue siendo válida:

$$\bar{U}_p = C_1 \frac{\text{Senh}(\alpha\xi)}{\xi} + C_2 \frac{\text{Cosh}(\alpha\xi)}{\xi} - \left(\frac{\Lambda_2}{s} - U_{p0} \right) \frac{1}{\alpha^2} \quad (\text{A-5.9})$$

donde α se definió en (A-5.10); la derivada de la ecuación anterior respecto a ξ es,

$$\frac{d\bar{U}_p}{d\xi} = C_1 \left(\frac{\alpha \text{Cosh}(\alpha\xi)}{\xi} - \frac{\text{Senh}(\alpha\xi)}{\xi^2} \right) + C_2 \left(\frac{\alpha \text{Senh}(\alpha\xi)}{\xi} - \frac{\text{Cosh}(\alpha\xi)}{\xi^2} \right) \quad (\text{A-5.127})$$

La condición (A-5.3) sigue siendo válida, por lo que,

$$C_1 (\alpha \text{Cosh}(\alpha) - \text{Senh}(\alpha)) + C_2 (\alpha \text{Senh}(\alpha) - \text{Cosh}(\alpha)) = \text{Bi} \left[\bar{U}_f - \bar{U}_p \Big|_{\xi=1} \right] \quad (\text{A-5.128})$$

La solución para el fluido en el dominio de Laplace se encuentra en la ecuación (A-5.15), sustituyéndola en (A-5.128) se obtiene,

$$C_1 (\alpha \text{Cosh}(\alpha) - \text{Senh}(\alpha)) + C_2 (\alpha \text{Senh}(\alpha) - \text{Cosh}(\alpha)) = \frac{\text{Bi}}{\beta} \left[U_{f0} + \psi_{in} \bar{U}_{in}(s) - (s + \psi_{in}) \bar{U}_p \Big|_{\xi=1} \right] \quad (\text{A-5.129})$$

donde β se definió en (A-5.16). La ecuación anterior puede rearrregarse para obtener:

$$\begin{aligned}
& C_1 \left(\beta \text{Cosh}(\alpha) + \frac{\text{Senh}(\alpha)}{\alpha} \left[(s + \psi_{in})(Bi - 1) - \psi_p \right] \right) \\
& + \frac{C_2}{\alpha} \left(\alpha \beta \text{Senh}(\alpha) + \text{Cosh}(\alpha) \left[(s + \psi_{in})(Bi - 1) - \psi_p \right] \right) = \quad (\text{A-5.130}) \\
& Bi \left[\frac{U_{f0}}{\alpha} + \frac{\psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{\alpha} + (s + \psi_{in}) \left(\frac{\Lambda_2}{s} - U_{p0} \right) \frac{1}{\alpha^3} \right]
\end{aligned}$$

Aplicando la condición de (A-5.126) a (A-5.127),

$$C_2 = C_1 \left(\frac{\alpha \xi_c - \text{Tanh}(\alpha \xi_c)}{1 - \alpha \xi_c \text{Tanh}(\alpha \xi_c)} \right) \quad (\text{A-5.131})$$

Sustituyendo (A-5.131) en (A-5.130)

$$\begin{aligned}
& C_1 \left\{ \beta \text{Cosh}(\alpha) + \frac{\text{Senh}(\alpha)}{\alpha} \left[(s + \psi_{in})(Bi - 1) - \psi_p \right] \right. \\
& \left. + \frac{1}{\alpha} \left(\frac{\alpha \xi_c - \text{Tanh}(\alpha \xi_c)}{1 - \alpha \xi_c \text{Tanh}(\alpha \xi_c)} \right) \left(\alpha \beta \text{Senh}(\alpha) + \text{Cosh}(\alpha) \left[(s + \psi_{in})(Bi - 1) - \psi_p \right] \right) \right\} = \quad (\text{A-5.132}) \\
& Bi \left[\frac{U_{f0}}{\alpha} + \frac{\psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{\alpha} + (s + \psi_{in}) \left(\frac{\Lambda_2}{s} - U_{p0} \right) \frac{1}{\alpha^3} \right]
\end{aligned}$$

Sustituyendo en la ecuación anterior la definición de $M(s)$ dada en (A-5.18) y

rearrreglando se obtiene

$$\begin{aligned}
& C_1 \left\{ M(s) (1 - \alpha \xi_c \text{Tanh}(\alpha \xi_c)) \right. \\
& \left. + \left(\xi_c - \frac{\text{Tanh}(\alpha \xi_c)}{\alpha} \right) \left(\alpha \beta \text{Senh}(\alpha) + \text{Cosh}(\alpha) \left[(s + \psi_{in})(Bi - 1) - \psi_p \right] \right) \right\} = \quad (\text{A-5.133}) \\
& Bi (1 - \alpha \xi_c \text{Tanh}(\alpha \xi_c)) \left[\frac{U_{f0} \alpha^2 - (s + \psi_{in}) U_{p0}}{\alpha^3} + \frac{\psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{\alpha} + (s + \psi_{in}) \frac{\Lambda_2}{s \alpha^3} \right]
\end{aligned}$$

Para simplificar se define

$$N(s) = \left(\beta \text{Cosh}(\alpha) + \frac{\text{Senh}(\alpha)}{\alpha} \left[(s + \psi_{in})(Bi - 1) - \psi_p \right] \right) (1 - \alpha \xi_c \text{Tanh}(\alpha \xi_c)) \\ + \left(\xi_c - \frac{\text{Tanh}(\alpha \xi_c)}{\alpha} \right) (\alpha \beta \text{Senh}(\alpha) + \text{Cosh}(\alpha) \left[(s + \psi_{in})(Bi - 1) - \psi_p \right]) \quad (\text{A-5.134})$$

de manera que

$$C_1 = Bi \frac{(1 - \alpha \xi_c \text{Tanh}(\alpha \xi_c))}{N(s)} \left[\frac{U_{f0} \alpha^2 - (s + \psi_{in}) U_{p0}}{\alpha^3} + \frac{\psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{\alpha} + (s + \psi_{in}) \frac{\Lambda_2}{s \alpha^3} \right] \quad (\text{A-5.135})$$

Sustituyendo (A-5.135) en (A-5.131),

$$C_2 = Bi \frac{(\alpha \xi_c - \text{Tanh}(\alpha \xi_c))}{N(s)} \left[\frac{U_{f0} \alpha^2 - (s + \psi_{in}) U_{p0}}{\alpha^3} + \frac{\psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{\alpha} + (s + \psi_{in}) \frac{\Lambda_2}{s \alpha^3} \right] \quad (\text{A-5.136})$$

Sustituyendo (A-5.135) y (A-5.136) en (A-5.9)

$$\bar{U}_p = -\frac{\Lambda_2}{s \alpha^2} + \frac{U_{p0}}{\alpha^2} \\ + Bi \frac{(1 - \alpha \xi_c \text{Tanh}(\alpha \xi_c)) \text{Senh}(\alpha \xi)}{N(s) \xi} \left[\frac{U_{f0} \alpha^2 - (s + \psi_{in}) U_{p0}}{\alpha^3} + \frac{\psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{\alpha} + (s + \psi_{in}) \frac{\Lambda_2}{s \alpha^3} \right] \\ + Bi \frac{(\alpha \xi_c - \text{Tanh}(\alpha \xi_c)) \text{Cosh}(\alpha \xi)}{N(s) \xi} \left[\frac{U_{f0} \alpha^2 - (s + \psi_{in}) U_{p0}}{\alpha^3} + \frac{\psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{\alpha} + (s + \psi_{in}) \frac{\Lambda_2}{s \alpha^3} \right] \quad (\text{A-5.137})$$

o bien,

$$\begin{aligned}
 \bar{U}_p = & -\underbrace{\frac{\Lambda_2}{s\alpha^2}}_{T_1} + \underbrace{\frac{U_{p0}}{\alpha^2}}_{T_2} + \underbrace{Bi \frac{(1-\alpha\xi_c \text{Tanh}(\alpha\xi_c)) \text{Senh}(\alpha\xi)}{N(s)} \alpha\xi}_{T_3} \psi_{in} \bar{U}_{in}(s) \\
 & + \underbrace{Bi \frac{(1-\alpha\xi_c \text{Tanh}(\alpha\xi_c)) \text{Senh}(\alpha\xi)}{N(s)} \alpha\xi}_{T_4} \frac{[U_{f0}\alpha^2 - (s+\psi_{in})U_{p0}]}{\alpha^2} \\
 & + \underbrace{Bi \frac{(1-\alpha\xi_c \text{Tanh}(\alpha\xi_c)) \text{Senh}(\alpha\xi)}{N(s)} \alpha\xi}_{T_5} \frac{(s+\psi_{in})\Lambda_2}{s\alpha^2} + \underbrace{Bi \frac{\xi_c}{\xi} \frac{[U_{f0}\alpha^2 - (s+\psi_{in})U_{p0}]}{\alpha^2 N(s)}}_{T_6} \text{Cosh}(\alpha\xi) \\
 & - \underbrace{Bi \frac{\text{Tanh}(\alpha\xi_c) \text{Cosh}(\alpha\xi)}{\alpha \xi} \frac{[U_{f0}\alpha^2 - (s+\psi_{in})U_{p0}]}{\alpha^2 N(s)}}_{T_7} \\
 & + \underbrace{Bi \frac{\xi_c}{\xi} \text{Cosh}(\alpha\xi) \frac{\psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{N(s)}}_{T_8} - \underbrace{Bi \frac{\text{Tanh}(\alpha\xi_c) \text{Cosh}(\alpha\xi)}{\alpha \xi} \frac{\psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{N(s)}}_{T_9} \\
 & + \underbrace{Bi \frac{\xi_c}{\xi} \text{Cosh}(\alpha\xi) \frac{(s+\psi_{in})\Lambda_2}{s\alpha^2 N(s)}}_{T_{10}} - \underbrace{Bi \frac{\text{Tanh}(\alpha\xi_c) \text{Cosh}(\alpha\xi)}{\alpha \xi} \frac{(s+\psi_{in})\Lambda_2}{s\alpha^2 N(s)}}_{T_{11}}
 \end{aligned}
 \tag{A-5.138}$$

Sustituyendo (A-5.138) en (A-5.15)

$$\begin{aligned}
 \bar{U}_f = & \underbrace{\frac{U_{f0}}{\beta}}_{T_{12}} + \underbrace{\frac{\psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{\beta}}_{T_{13}} - \underbrace{\frac{\Lambda_2 \psi_p}{s\alpha^2 \beta}}_{T_{14}} + \underbrace{\frac{U_{p0} \psi_p}{\alpha^2 \beta}}_{T_{15}} \\
 & + \underbrace{Bi \frac{(1-\alpha\xi_c \text{Tanh}(\alpha\xi_c)) \psi_p \text{Senh}(\alpha)}{N(s)} \alpha\beta}_{T_{16}} \frac{[U_{f0}\alpha^2 - (s+\psi_{in})U_{p0}]}{\alpha^2} \\
 & + \underbrace{Bi \frac{(1-\alpha\xi_c \text{Tanh}(\alpha\xi_c)) \text{Senh}(\alpha) \psi_p \psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{N(s)} \alpha}_{T_{17}} + \underbrace{Bi \frac{(1-\alpha\xi_c \text{Tanh}(\alpha\xi_c)) \psi_p \Lambda_2 (s+\psi_{in}) \text{Senh}(\alpha)}{\beta s\alpha^2 N(s)} \alpha}_{T_{18}} \\
 & + \underbrace{Bi \xi_c \text{Cosh}(\alpha) \frac{\psi_p [U_{f0}\alpha^2 - (s+\psi_{in})U_{p0}]}{\alpha^2 \beta N(s)}}_{T_{19}} - \underbrace{Bi \frac{\text{Tanh}(\alpha\xi_c) \text{Cosh}(\alpha) \psi_p [U_{f0}\alpha^2 - (s+\psi_{in})U_{p0}]}{\alpha \alpha^2 \beta N(s)}}_{T_{20}}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \underbrace{Bi\xi_c \text{Cosh}(\alpha) \frac{\psi_p \psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{\beta N(s)}}_{T_{21}} - \underbrace{Bi \frac{\text{Tanh}(\alpha \xi_c)}{\alpha} \text{Cosh}(\alpha) \frac{\psi_{in} \psi_p \bar{U}_{in}(s)}{\beta N(s)}}_{T_{22}} \\
 & + \underbrace{Bi\xi_c \text{Cosh}(\alpha) \frac{(s + \psi_{in}) \psi_p \Lambda_2}{s \beta \alpha^2 N(s)}}_{T_{23}} - \underbrace{Bi \frac{\text{Tanh}(\alpha \xi_c)}{\alpha} \text{Cosh}(\alpha) \frac{(s + \psi_{in}) \psi_p \Lambda_2}{s \alpha^2 \beta N(s)}}_{T_{24}}
 \end{aligned} \tag{A-5.139}$$

A-5.5.- Transformadas Inversas

Primer Término:

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_1\} = \mathcal{L}^{-1} \left\{ -\frac{\Lambda_2}{s(s + \Lambda_1)} \right\} = -\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} (1 - e^{-\Lambda_1 \tau}) \tag{A-5.140}$$

Segundo Término

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_2\} = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{U_{p0}}{s + \Lambda_1} \right\} = U_{p0} e^{-\Lambda_1 \tau} \tag{A-5.141}$$

Tercer Término:

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_3\} = \mathcal{L}^{-1} \left\{ Bi \frac{\left(1 - \sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c \text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)\right) \text{Senh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi)}{N(s) \sqrt{s + \Lambda_1} \xi} \psi_{in} \bar{U}_{in}(s) \right\} \tag{A-5.142}$$

Primero es necesario aplicar el teorema de la convolución,

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_3\} = \int_0^\tau \mathcal{L}^{-1} \left\{ Bi \frac{\left(1 - \sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c \text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)\right) \text{Senh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi)}{N(s) \sqrt{s + \Lambda_1} \xi} \right\} \psi_{in} U_{in}(\beta) d\beta \tag{A-5.143}$$

Para invertir la transformada de la integral se usará el método de residuos, por lo que es necesario distinguir

$$P(s) = Bi \left(1 - \sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c \operatorname{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c) \right) \frac{\operatorname{Senh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi)}{\sqrt{s + \Lambda_1} \xi} \quad (\text{A-5.144})$$

$$Q(s) = N(s) \quad (\text{A-5.145})$$

Esta última ecuación se puede escribir en forma abreviada como,

$$N(s) = F_n \frac{\operatorname{Senh}(\sqrt{s + \Lambda_1})}{\sqrt{s + \Lambda_1}} + G_n \operatorname{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1}) \quad (\text{A-5.146})$$

donde

$$F_n(s) = \left[(s + \psi_{in})(Bi - 1) - \psi_p \right] \left(1 - \sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c \operatorname{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c) \right) + \left(\xi_c - \frac{\operatorname{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)}{\sqrt{s + \Lambda_1}} \right) (s + \Lambda_1)(s + \psi_{in} + \psi_p) \quad (\text{A-5.147})$$

$$G_n(s) = (s + \psi_{in} + \psi_p) \left(1 - \sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c \operatorname{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c) \right) + \left(\xi_c - \frac{\operatorname{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)}{\sqrt{s + \Lambda_1}} \right) \left[(s + \psi_{in})(Bi - 1) - \psi_p \right] \quad (\text{A-5.148})$$

La derivada de (A-5.146) respecto a s es

$$N'(s) = \frac{\operatorname{Senh}(\sqrt{s + \Lambda_1})}{\sqrt{s + \Lambda_1}} \left(F'_n - \frac{F_n}{2(s + \Lambda_1)} + \frac{G_n}{2} \right) + \operatorname{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1}) \left[\frac{F_n}{2(s + \Lambda_1)} + G'_n \right] \quad (\text{A-5.149})$$

donde

$$\begin{aligned}
 G_n'(s) = & (s + \psi_{in} + \psi_p) \left(-\frac{\xi_c^2}{2} \text{Sech}^2(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c) - \frac{\xi_c \text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)}{2\sqrt{s + \Lambda_1}} \right) \\
 & + 1 - \sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c \text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c) + \left(\xi_c - \frac{\text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)}{\sqrt{s + \Lambda_1}} \right) (Bi - 1) \\
 & + \left(-\frac{\xi_c \text{Sech}^2(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)}{2(s + \Lambda_1)} + \frac{\text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)}{2\sqrt{s + \Lambda_1}(s + \Lambda_1)} \right) [(s + \psi_{in})(Bi - 1) - \psi_p]
 \end{aligned} \tag{A-5.150}$$

$$\begin{aligned}
 F_n'(s) = & [\psi_p - (s + \psi_{in})(Bi - 1)] \left(\frac{\xi_c^2}{2} \text{Sech}^2(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c) + \frac{\xi_c \text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)}{2\sqrt{s + \Lambda_1}} \right) \\
 & + (Bi - 1) \left(1 - \sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c \text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c) \right) \\
 & + \left(\frac{\text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)}{2\sqrt{s + \Lambda_1}} - \frac{\xi_c \text{Sech}^2(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)}{2} \right) (s + \psi_{in} + \psi_p) \\
 & + \left(\xi_c - \frac{\text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)}{\sqrt{s + \Lambda_1}} \right) (s + \Lambda_1 + s + \psi_{in} + \psi_p)
 \end{aligned} \tag{A-5.151}$$

Sin embargo, (A-5.149) no tiene raíces reales, por lo que, al igual que en el caso anterior, se propone

$$s = -\chi_n^2 - \Lambda_1 \tag{A-5.152}$$

Por lo que

$$N(\chi_n) = F_n(\chi_n) \frac{\text{Sen}(\chi_n)}{\chi_n} + G_n(\chi_n) \text{Cos}(\chi_n) \tag{A-5.153}$$

donde

$$\begin{aligned}
 F_n(\chi_n) = & \left[(\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)(Bi - 1) - \psi_p \right] (1 + \chi_n \xi_c \text{Tan}(\chi_n \xi_c)) \\
 & - \xi_c \left(1 - \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c)}{\chi_n \xi_c} \right) \chi_n^2 (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1)
 \end{aligned} \tag{A-5.154}$$

$$G_n(\chi_n) = (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) \left(1 + \chi_n \xi_c \tan(\chi_n \xi_c)\right) + \xi_c \left(1 - \frac{\tan(\chi_n \xi_c)}{\chi_n \xi_c}\right) \left[(\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)(Bi - 1) - \psi_p\right] \quad (\text{A-5.155})$$

Sustituyendo (A-5.152) en (A-5.149)

$$N'(\chi_n) = \frac{\text{Sen}(\chi_n)}{\chi_n} \left(F'_n(\chi_n) + \frac{F_n(\chi_n)}{2\chi_n^2} + \frac{G_n(\chi_n)}{2}\right) + \text{Cos}(\chi_n) \left[G'_n(\chi_n) - \frac{F_n(\chi_n)}{2\chi_n^2}\right] \quad (\text{A-5.156})$$

donde

$$F'_n(\mu_n) = \left[\psi_p - (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)(Bi - 1)\right] \left[\frac{\xi_c^2}{2} \text{Sec}^2(\chi_n \xi_c) + \frac{\xi_c \tan(\chi_n \xi_c)}{2\chi_n}\right] + (Bi - 1) \left(1 + \chi_n \xi_c \tan(\chi_n \xi_c)\right) + \xi_c \left(\frac{\tan(\chi_n \xi_c)}{2\chi_n \xi_c} - \frac{\text{Sec}^2(\chi_n \xi_c)}{2}\right) (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) + \xi_c \left(1 - \frac{\tan(\chi_n \xi_c)}{\chi_n \xi_c}\right) (-2\chi_n^2 - \Lambda_1 + \psi_{in} + \psi_p) \quad (\text{A-5.157})$$

$$G'_n(\chi_n) = (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) \left(-\frac{\xi_c^2}{2} \text{Sec}^2(\chi_n \xi_c) - \frac{\xi_c \tan(\chi_n \xi_c)}{2\chi_n}\right) + 1 + \chi_n \xi_c \tan(\chi_n \xi_c) + \left(\xi_c - \frac{\tan(\chi_n \xi_c)}{\chi_n}\right) (Bi - 1) + \left(\frac{\xi_c \text{Sec}^2(\chi_n \xi_c)}{2\chi_n^2} - \frac{\tan(\chi_n \xi_c)}{2\chi_n^3}\right) \left[(\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)(Bi - 1) - \psi_p\right] \quad (\text{A-5.158})$$

Igualando (A-5.153) a cero:

$$\text{Cos}(\chi_n) = -\frac{F_n(\chi_n)}{G_n(\chi_n)} \frac{\text{Sen}(\chi_n)}{\chi_n} \quad (\text{A-5.159})$$

Sustituyendo (A-5.159) en (A-5.156)

$$N'(\chi_n) = \frac{H_n \text{Sen}(\chi_n)}{\chi_n} \quad (\text{A-5.160})$$

donde

$$H_n = \left(F'_n(\chi_n) + \frac{F_n(\chi_n)}{2\chi_n^2} + \frac{G_n(\chi_n)}{2} \right) - \frac{F_n(\chi_n)}{G_n(\chi_n)} \left(G'_n(\chi_n) - \frac{F_n(\chi_n)}{2\chi_n^2} \right) \quad (\text{A-5.161})$$

Sustituyendo (A-5.152) en (A-5.144)

$$P(\chi_n) = Bi(1 + \chi_n \xi_c \text{Tan}(\chi_n \xi_c)) \frac{\text{Sen}(\chi_n \xi)}{\chi_n \xi} \quad (\text{A-5.162})$$

por lo que la transformada inversa de (A-5.143) es:

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s)}{Q(s)} \right\} = Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 + \chi_n \xi_c \text{Tan}(\chi_n \xi_c)) \text{Sen}(\chi_n \xi)}{H_n \xi \text{Sen}(\chi_n)} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)(\tau - \beta)} \quad (\text{A-5.163})$$

Sustituyendo (A-5.163) en (A-5.143):

$$\boxed{\mathcal{L}^{-1} \{T_3\} = Bi \psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \frac{(1 + \chi_n \xi_c \text{Tan}(\chi_n \xi_c)) \text{Sen}(\chi_n \xi)}{H_n \xi \text{Sen}(\chi_n)} \int_0^{\tau} U_{in}(\beta) e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\beta} d\beta} \quad (\text{A-5.164})$$

Cuarto Término:

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_4\} = \mathcal{L}^{-1} \left\{ Bi \frac{(1 - \sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c \text{Tanh}(\xi_c \sqrt{s + \Lambda_1})) \text{Senh}(\xi \sqrt{s + \Lambda_1})}{(s + \Lambda_1) N(s) \xi \sqrt{s + \Lambda_1}} [U_{f0}(s + \Lambda_1) - (s + \psi_{in}) U_{p0}] \right\} \quad (\text{A-5.165})$$

Para aplicar el método de residuos, es necesario distinguir

$$P(s) = Bi \left[1 - \sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c \text{Tanh}(\xi_c \sqrt{s + \Lambda_1}) \right] [U_{f0}(s + \Lambda_1) - (s + \psi_{in}) U_{p0}] \frac{\text{Senh}(\xi \sqrt{s + \Lambda_1})}{\xi \sqrt{s + \Lambda_1}}$$

$$(A-5.166)$$

$$Q(s) = (s + \Lambda_1)N(s) \quad (A-5.167)$$

Como se puede ver existen dos polos,

$$1) s = -\Lambda_1 \quad (A-5.168)$$

$$2) N(s) = 0 \quad (A-5.169)$$

la derivada de (A-5.167) respecto a s es:

$$Q'(s) = (s + \Lambda_1)N'(s) + N(s) \quad (A-5.170)$$

Para el primer polo, evaluando (A-5.166) y (A-5.170), se obtienen

$$P(s) = Bi(\Lambda_1 - \psi_{in})U_{p0} \quad (A-5.171)$$

$$Q'(s) = (\psi_{in} - \Lambda_1)Bi \quad (A-5.172)$$

por lo que,

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_a)}{Q(s_a)} \right\} = -U_{p0} e^{-\Lambda_1 \tau} \quad (A-5.173)$$

Para el segundo polo

$$P(s) = Bi \left[1 + \chi_n \xi_c \tan(\chi_n \xi_c) \right] \left[U_{f0} \chi_n^2 + (\psi_{in} - \Lambda_1 - \chi_n^2) U_{p0} \right] \frac{-\text{Sen}(\chi_n \xi)}{\chi_n \xi} \quad (A-5.174)$$

$$Q'(s) = -\chi_n H_n \text{Sen}(\chi_n) \quad (A-5.175)$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_b)}{Q(s_b)} \right\} = \sum_{n=1}^{\infty} Bi \frac{\left[1 + \chi_n \xi_c \tan(\chi_n \xi_c) \right] \left[U_{f0} \chi_n^2 + (\psi_{in} - \Lambda_1 - \chi_n^2) U_{p0} \right] \text{Sen}(\chi_n \xi)}{H_n \text{Sen}(\chi_n) \chi_n^2 \xi} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1) \tau} \quad (A-5.176)$$

Sumando (A-5.173) y (A-5.176)

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_4\} = -U_{p0}e^{-\Lambda_1\tau} + \sum_{n=1}^{\infty} Bi \frac{[1 + \chi_n \xi_c \text{Tan}(\chi_n \xi_c)]}{H_n} [U_{f0} \chi_n^2 + (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) U_{p0}] \frac{\text{Sen}(\chi_n \xi)}{\xi \chi_n^2 \text{Sen}(\chi_n)} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau}$$

(A-5.177)

Quinto Término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_5\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{ Bi \frac{\left(1 - \sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c \text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)\right) \text{Senh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi) (s + \psi_{in}) \Lambda_2}{N(s) \sqrt{s + \Lambda_1} \xi s (s + \Lambda_1)} \right\}$$

(A-5.178)

Para eliminar uno de los polos, se usará el teorema de la convolución:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_5\} = Bi \Lambda_2 \int_0^\tau \mathcal{L}^{-1}\left\{ \frac{\left(1 - \sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c \text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)\right) \text{Senh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi) (s + \psi_{in})}{N(s) \sqrt{s + \Lambda_1} \xi (s + \Lambda_1)} \right\} d\beta$$

(A-5.179)

Para invertir la transformada que se encuentra en la integral de (A-5.179) es necesario distinguir:

$$P(s) = \left(1 - \sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c \text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)\right) (s + \psi_{in}) \frac{\text{Senh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi)}{\sqrt{s + \Lambda_1} \xi}$$

(A-5.180)

$$Q(s) = (s + \Lambda_1) N(s)$$

(A-5.181)

Se tienen dos polos:

$$1) s = -\Lambda_1$$

(A-5.182)

$$2) N(s) = 0$$

(A-5.183)

La derivada de (A-5.181) respecto a s es:

$$Q'(s) = (s + \Lambda_1) N'(s) + N(s)$$

(A-5.184)

Para el primer polo se tiene que:

$$P(s) = \psi_{in} - \Lambda_1 \quad (\text{A-5.185})$$

$$Q'(s) = (\psi_{in} - \Lambda_1) Bi \quad (\text{A-5.186})$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_1)}{Q(s_1)} \right\} = \frac{e^{-\Lambda_1 \tau}}{Bi} \quad (\text{A-5.187})$$

Para el segundo polo:

$$P(s) = (1 + \chi_n \xi_c \tan(\chi_n \xi_c)) (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) \frac{\text{Sen}(\chi_n \xi)}{\chi_n \xi} \quad (\text{A-5.188})$$

$$Q'(s) = -\chi_n^2 H_n \frac{\text{Sen}(\chi_n)}{\chi_n} \quad (\text{A-5.189})$$

por lo que,

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_2)}{Q(s_2)} \right\} = \sum_{n=1}^{\infty} (1 + \chi_n \xi_c \tan(\chi_n \xi_c)) \frac{(\chi_n^2 + \Lambda_1 - \psi_{in})}{\chi_n^2 H_n} \frac{\text{Sen}(\chi_n \xi)}{\text{Sen}(\chi_n) \xi} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1) \tau} \quad (\text{A-5.190})$$

Entonces la transformada inversa que se debe sustituir en la integral de (A-5.179) es:

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s)}{Q(s)} \right\} = \frac{e^{-\Lambda_1(\tau-\beta)}}{Bi} + \sum_{n=1}^{\infty} (1 + \chi_n \xi_c \tan(\chi_n \xi_c)) \frac{(\chi_n^2 + \Lambda_1 - \psi_{in})}{\chi_n^2 H_n} \frac{\text{Sen}(\chi_n \xi)}{\text{Sen}(\chi_n) \xi} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)(\tau-\beta)} \quad (\text{A-5.191})$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_5\} = \frac{\Lambda_2 (1 - e^{-\Lambda_1 \tau})}{\Lambda_1} + Bi \Lambda_2 \sum_{n=1}^{\infty} (1 + \chi_n \xi_c \tan(\chi_n \xi_c)) \frac{(\chi_n^2 + \Lambda_1 - \psi_{in})}{\chi_n^2 H_n} \frac{\text{Sen}(\chi_n \xi)}{\xi \text{Sen}(\chi_n)} \left(\frac{1 - e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1) \tau}}{\chi_n^2 + \Lambda_1} \right) \quad (\text{A-5.192})$$

Sexto término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_6\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{Bi \frac{\frac{\xi}{\xi_c} [U_{f0}(s + \Lambda_1) - (s + \psi_{in})U_{p0}]}{\xi (s + \Lambda_1)N(s)} \text{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1}\xi)\right\} \quad (\text{A-5.193})$$

Aplicando el método de residuos, se distinguen:

$$P(s) = Bi \frac{\xi}{\xi_c} [U_{f0}(s + \Lambda_1) - (s + \psi_{in})U_{p0}] \text{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1}\xi) \quad (\text{A-5.194})$$

$$Q(s) = (s + \Lambda_1)N(s) \quad (\text{A-5.195})$$

de nuevo existen dos polos:

$$a) s = -\Lambda_1 \quad (\text{A-5.196})$$

$$b) N(s) = 0 \quad (\text{A-5.197})$$

La derivada de (A-5.195) respecto a s es:

$$Q'(s) = (s + \Lambda_1)N'(s) + N(s) \quad (\text{A-5.198})$$

Para el primer polo

$$P(s) = -Bi \frac{\xi}{\xi_c} (\psi_{in} - \Lambda_1)U_{p0} \quad (\text{A-5.199})$$

$$Q'(s) = (\psi_{in} - \Lambda_1)Bi \quad (\text{A-5.200})$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{P(s_a)}{Q(s_a)}\right\} = -U_{p0} \frac{\xi}{\xi_c} e^{-\Lambda_1\tau} \quad (\text{A-5.201})$$

Para el segundo polo

$$P(s) = -Bi \frac{\xi}{\xi_c} [\chi_n^2 U_{f0} + (\psi_{in} - \Lambda_1 - \chi_n^2)U_{p0}] \text{Cos}(\chi_n\xi) \quad (\text{A-5.202})$$

$$Q'(s) = -\chi_n H_n \text{Sen}(\chi_n) \quad (\text{A-5.203})$$

por lo que,

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_b)}{Q(s_b)} \right\} = \sum_{n=1}^{\infty} Bi \frac{\xi_c}{\xi} \frac{[\chi_n^2 U_{f0} + (\psi_{in} - \Lambda_1 - \chi_n^2) U_{p0}]}{\chi_n H_n \text{Sen}(\chi_n)} \text{Cos}(\chi_n \xi) e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \quad (\text{A-5.204})$$

De esta manera, sumando (A-5.201) y (A-5.204):

$$\boxed{\mathcal{L}^{-1} \{T_6\} = -U_{p0} \frac{\xi_c}{\xi} e^{-\Lambda_1 \tau} + \frac{Bi \xi_c}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[\chi_n^2 U_{f0} + (\psi_{in} - \Lambda_1 - \chi_n^2) U_{p0}]}{\chi_n H_n \text{Sen}(\chi_n)} \text{Cos}(\chi_n \xi) e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau}}$$

(A-5.205)

Séptimo término:

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_7\} = \mathcal{L}^{-1} \left\{ -Bi \frac{\text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c) \text{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi)}{\sqrt{s + \Lambda_1} \xi} \frac{[U_{f0}(s + \Lambda_1) - (s + \psi_{in}) U_{p0}]}{(s + \Lambda_1) N(s)} \right\}$$

(A-5.206)

Para usar el método de residuos es necesario distinguir:

$$P(s) = -Bi \frac{\text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c) \text{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi)}{\sqrt{s + \Lambda_1} \xi} [U_{f0}(s + \Lambda_1) - (s + \psi_{in}) U_{p0}] \quad (\text{A-5.207})$$

$$Q(s) = (s + \Lambda_1) N(s) \quad (\text{A-5.208})$$

Los polos son los mismos que se manejan en los último términos, por lo que, para el primer polo:

$$P(s) = Bi \frac{\xi_c}{\xi} (\psi_{in} - \Lambda_1) U_{p0} \quad (\text{A-5.209})$$

$$Q'(s) = (\psi_{in} - \Lambda_1) Bi \quad (\text{A-5.210})$$

por lo que,

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_a)}{Q(s_a)} \right\} = \frac{\xi_c}{\xi} U_{p0} e^{-\Lambda_1 \tau} \quad (\text{A-5.211})$$

Para el segundo polo

$$P(s) = -Bi \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c)}{\chi_n} \frac{\text{Cos}(\chi_n \xi)}{\xi} \left[(\Lambda_1 + \chi_n^2 - \psi_{in}) U_{p0} - \chi_n^2 U_{f0} \right] \quad (\text{A-5.212})$$

$$Q'(s) = -\chi_n H_n \text{Sen}(\chi_n) \quad (\text{A-5.213})$$

por lo que,

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_b)}{Q(s_b)} \right\} = Bi \sum_{n=1}^{\infty} \text{Tan}(\chi_n \xi_c) \frac{\text{Cos}(\chi_n \xi)}{\xi} \frac{\left[(\Lambda_1 + \chi_n^2 - \psi_{in}) U_{p0} - \chi_n^2 U_{f0} \right]}{\chi_n^2 H_n \text{Sen}(\chi_n)} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1) \tau} \quad (\text{A-5.214})$$

De esta forma, la transformada inversa de (A-5.206) es la suma de (A-5.211) con (A-5.214):

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_7\} = \frac{\xi_c}{\xi} U_{p0} e^{-\Lambda_1 \tau} + Bi \sum_{n=1}^{\infty} \text{Tan}(\chi_n \xi_c) \frac{\text{Cos}(\chi_n \xi)}{\xi} \frac{\left[(\Lambda_1 + \chi_n^2 - \psi_{in}) U_{p0} - \chi_n^2 U_{f0} \right]}{\chi_n^2 H_n \text{Sen}(\chi_n)} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1) \tau} \quad (\text{A-5.215})$$

Octavo Término:

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_8\} = \mathcal{L}^{-1} \left\{ Bi \frac{\xi_c}{\xi} \frac{\psi_{in} \text{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi)}{N(s)} \bar{U}_{in}(s) \right\} \quad (\text{A-5.216})$$

Aplicando el teorema de la convolución:

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_8\} = \int_0^{\tau} \mathcal{L}^{-1} \left\{ Bi \frac{\xi_c}{\xi} \frac{\psi_{in} \text{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi)}{N(s)} \right\} U_{in}(\beta) d\beta \quad (\text{A-5.217})$$

Para obtener la transformada inversa que se encuentra en la integral, se usará el método de residuos, por lo que es necesario distinguir;

$$P(s) = Bi \frac{\xi_c}{\xi} \psi_{in} \text{Cosh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi\right) \quad (\text{A-5.218})$$

$$Q(s) = N(s) \quad (\text{A-5.219})$$

La derivada de (A-5.219) respecto a s es:

$$Q'(s) = N'(s) = \frac{H_n \text{Sen}(\chi_n)}{\chi_n} \quad (\text{A-5.220})$$

por lo que

$$P(s) = Bi \frac{\xi_c}{\xi} \psi_{in} \text{Cos}(\chi_n \xi) \quad (\text{A-5.221})$$

De esta forma

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s)}{Q(s)} \right\} = \sum_{n=1}^{\infty} Bi \frac{\xi_c}{\xi} \psi_{in} \chi_n \frac{\text{Cos}(\chi_n \xi)}{H_n \text{Sen}(\chi_n)} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)(\tau - \beta)} \quad (\text{A-5.222})$$

Sustituyendo (A-5.222) en (A-5.217):

$$\boxed{\mathcal{L}^{-1} \{T_8\} = \sum_{n=1}^{\infty} Bi \frac{\xi_c}{\xi} \psi_{in} \chi_n \frac{\text{Cos}(\chi_n \xi)}{H_n \text{Sen}(\chi_n)} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \int_0^{\tau} e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta} \quad (\text{A-5.223})$$

Noveno Término:

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_9\} = \mathcal{L}^{-1} \left\{ -Bi \frac{\text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)}{\sqrt{s + \Lambda_1}} \frac{\text{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi)}{\xi} \frac{\psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{N(s)} \right\} \quad (\text{A-5.224})$$

Usando el teorema de la convolución:

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_9\} = \int_0^{\tau} \mathcal{L}^{-1} \left\{ -Bi \frac{\text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)}{\sqrt{s + \Lambda_1}} \frac{\text{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi)}{\xi} \frac{\psi_{in}}{N(s)} \right\} U_{in}(\beta) d\beta \quad (\text{A-5.225})$$

Para invertir la transformada de la integral es necesario distinguir:

$$P(s) = -Bi\psi_{in} \frac{\text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c) \text{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi)}{\sqrt{s + \Lambda_1} \xi} \quad (\text{A-5.226})$$

$$Q(s) = N(s) \quad (\text{A-5.227})$$

por lo que

$$Q'(s) = H_n \frac{\text{Sen}(\chi_n)}{\chi_n} \quad (\text{A-5.228})$$

$$P(s) = -Bi\psi_{in} \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c) \text{Cos}(\chi_n \xi)}{\chi_n \xi} \quad (\text{A-5.229})$$

Entonces la transformada inversa de la integral de (A-5.225) es:

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s)}{Q(s)} \right\} = -Bi\psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c) \text{Cos}(\chi_n \xi)}{H_n \xi \text{Sen}(\chi_n)} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)(\tau - \beta)} \quad (\text{A-5.230})$$

y

$$\boxed{\mathcal{L}^{-1} \{T_9\} = -Bi\psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c) \text{Cos}(\chi_n \xi)}{H_n \xi \text{Sen}(\chi_n)} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \int_0^{\tau} e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta} \quad (\text{A-5.231})$$

Décimo Término:

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_{10}\} = \mathcal{L}^{-1} \left\{ Bi \frac{\xi_c}{\xi} \text{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi) \frac{(s + \psi_{in}) \Lambda_2}{s(s + \Lambda_1) N(s)} \right\} \quad (\text{A-5.232})$$

Para eliminar un polo se usará el teorema de la convolución:

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_{10}\} = \int_0^{\tau} \mathcal{L}^{-1} \left\{ Bi \frac{\xi_c}{\xi} \text{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi) \frac{(s + \psi_{in}) \Lambda_2}{(s + \Lambda_1) N(s)} \right\} d\beta \quad (\text{A-5.233})$$

Para invertir la transformada de la integral se usará el método de residuos, entonces

$$P(s) = Bi \frac{\xi_c}{\xi} (s + \psi_{in}) \Lambda_2 \text{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi) \quad (\text{A-5.234})$$

$$Q(s) = (s + \Lambda_1)N(s) \quad (\text{A-5.235})$$

Se pueden distinguir dos polos:

$$1) s = -\Lambda_1; \quad 2) N(s) = 0 \quad (\text{A-5.236-7})$$

La derivada de (A-5.235) respecto a s es:

$$Q'(s) = (s + \Lambda_1)N'(s) + N(s) \quad (\text{A-5.238})$$

Para el primer polo,

$$P(s) = Bi \frac{\xi_c}{\xi} (\psi_{in} - \Lambda_1) \Lambda_2 \quad (\text{A-5.239})$$

$$Q'(s) = (\psi_{in} - \Lambda_1) Bi \quad (\text{A-5.240})$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_a)}{Q(s_a)} \right\} = \frac{\xi_c}{\xi} \Lambda_2 e^{-\Lambda_1 \tau} \quad (\text{A-5.241})$$

Para el segundo polo,

$$P(s) = Bi \frac{\xi_c}{\xi} (\psi_{in} - \Lambda_1 - \chi_n^2) \Lambda_2 \text{Cos}(\chi_n \xi) \quad (\text{A-5.242})$$

$$Q'(s) = -\chi_n H_n \text{Sen}(\chi_n) \quad (\text{A-5.243})$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_b)}{Q(s_b)} \right\} = Bi \Lambda_2 \frac{\xi_c}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} (\Lambda_1 + \chi_n^2 - \psi_{in}) \frac{\text{Cos}(\chi_n \xi)}{\chi_n H_n \text{Sen}(\chi_n)} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1) \tau} \quad (\text{A-5.244})$$

Entonces la transformada de la integral de (A-5.233) es:

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s)}{Q(s)} \right\} = \frac{\xi_c}{\xi} \Lambda_2 e^{-\Lambda_1(\tau - \beta)} + Bi \Lambda_2 \frac{\xi_c}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} (\Lambda_1 + \chi_n^2 - \psi_{in}) \frac{\text{Cos}(\chi_n \xi)}{\chi_n H_n \text{Sen}(\chi_n)} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)(\tau - \beta)} \quad (\text{A-5.245})$$

De esta forma, sustituyendo (A-5.245) en (A-5.233)

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{10}\} = \frac{\xi_c \Lambda_2}{\xi \Lambda_1} (1 - e^{-\Lambda_1 \tau}) + Bi \Lambda_2 \frac{\xi_c}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} (\Lambda_1 + \chi_n^2 - \psi_{in}) \frac{\text{Cos}(\chi_n \xi)}{\chi_n H_n \text{Sen}(\chi_n)} \frac{1 - e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1) \tau}}{(\chi_n^2 + \Lambda_1)}$$

(A-5.246)

Onceavo Término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{11}\} = \mathcal{L}^{-1} \left\{ -Bi \frac{\text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)}{\sqrt{s + \Lambda_1}} \frac{\text{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi)}{\xi} \frac{(s + \psi_{in}) \Lambda_2}{s(s + \Lambda_1) N(s)} \right\} \quad (\text{A-5.247})$$

Por medio del teorema de la convolución:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{11}\} = \int_0^\tau \mathcal{L}^{-1} \left\{ -Bi \frac{\text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)}{\sqrt{s + \Lambda_1}} \frac{\text{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi)}{\xi} \frac{(s + \psi_{in}) \Lambda_2}{(s + \Lambda_1) N(s)} \right\} d\beta$$

(A-5.248)

Usando el método de residuos:

$$P(s) = -Bi(s + \psi_{in}) \Lambda_2 \frac{\text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)}{\sqrt{s + \Lambda_1}} \frac{\text{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi)}{\xi} \quad (\text{A-5.249})$$

$$Q(s) = (s + \Lambda_1) N(s) \quad (\text{A-5.250})$$

Como se puede notar se tienen los mismos dos polos que en el término anterior, por lo que, para el primer término:

$$P(s) = -Bi(\psi_{in} - \Lambda_1) \Lambda_2 \frac{\xi_c}{\xi} \quad (\text{A-5.251})$$

$$Q'(s) = (\psi_{in} - \Lambda_1) Bi \quad (\text{A-5.252})$$

Entonces

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_a)}{Q(s_a)} \right\} = -\Lambda_2 \frac{\xi_c}{\xi} e^{-\Lambda_1 \tau} \quad (\text{A-5.253})$$

Para el segundo polo,

$$P(s) = -Bi(\psi_{in} - \Lambda_1 - \chi_n^2) \Lambda_2 \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c) \text{Cos}(\chi_n \xi)}{\chi_n \xi} \quad (\text{A-5.254})$$

$$Q'(s) = -\chi_n H_n \text{Sen}(\chi_n) \quad (\text{A-5.255})$$

entonces

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_b)}{Q(s_b)} \right\} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Bi(\psi_{in} - \Lambda_1 - \chi_n^2) \Lambda_2 \text{Tan}(\chi_n \xi_c) \text{Cos}(\chi_n \xi)}{H_n \text{Sen}(\chi_n) \chi_n^2 \xi} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1) \tau} \quad (\text{A-5.256})$$

De esta forma, la transformada inversa a sustituir en la integral de (A-5.248) es:

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s)}{Q(s)} \right\} = -\Lambda_2 \frac{\xi_c}{\xi} e^{-\Lambda_1(\tau-\beta)} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Bi(\psi_{in} - \Lambda_1 - \chi_n^2) \Lambda_2 \text{Tan}(\chi_n \xi_c) \text{Cos}(\chi_n \xi)}{H_n \text{Sen}(\chi_n) \chi_n^2 \xi} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)(\tau-\beta)} \quad (\text{A-5.257})$$

Sustituyendo (A-5.257) en (A-5.248):

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_{11}\} = -\frac{\xi_c \Lambda_2}{\xi \Lambda_1} (1 - e^{-\Lambda_1 \tau}) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Bi(\psi_{in} - \Lambda_1 - \chi_n^2) \Lambda_2 \text{Tan}(\chi_n \xi_c) \text{Cos}(\chi_n \xi)}{H_n \text{Sen}(\chi_n) \chi_n^2 \xi} \left(\frac{1 - e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1) \tau}}{\chi_n^2 + \Lambda_1} \right) \quad (\text{A-5.258})$$

Sumando las ecuaciones (A-5.140), (A-5.141), (A-5.164), (A-5.177), (A-5.192), (A-5.205), (A-5.215), (A-5.223), (A-5.231), (A-5.246) y (A-5.258)

$$\begin{aligned}
 U_p = & Bi\psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \frac{(1 + \chi_n \xi_c \tan(\chi_n \xi_c))}{H_n} \frac{\text{Sen}(\chi_n \xi)}{\xi \text{Sen}(\chi_n)} \int_0^{\tau} U_{in}(\beta) e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\beta} d\beta \\
 & + \sum_{n=1}^{\infty} Bi \frac{[1 + \chi_n \xi_c \tan(\chi_n \xi_c)]}{H_n} \left[U_{f0} \chi_n^2 + (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) U_{p0} \right] \frac{\text{Sen}(\chi_n \xi)}{\xi \chi_n^2 \text{Sen}(\chi_n)} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \\
 & + Bi \Lambda_2 \sum_{n=1}^{\infty} (1 + \chi_n \xi_c \tan(\chi_n \xi_c)) \frac{(\chi_n^2 + \Lambda_1 - \psi_{in})}{\chi_n^2 H_n} \frac{\text{Sen}(\chi_n \xi)}{\xi \text{Sen}(\chi_n)} \left(\frac{1 - e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{\chi_n^2 + \Lambda_1} \right) \\
 & + \frac{Bi \xi_c}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[\chi_n^2 U_{f0} + (\psi_{in} - \Lambda_1 - \chi_n^2) U_{p0}]}{\chi_n H_n \text{Sen}(\chi_n)} \text{Cos}(\chi_n \xi) e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \\
 & + Bi \sum_{n=1}^{\infty} \tan(\chi_n \xi_c) \frac{\text{Cos}(\chi_n \xi)}{\xi} \frac{[(\Lambda_1 + \chi_n^2 - \psi_{in}) U_{p0} - \chi_n^2 U_{f0}]}{\chi_n^2 H_n \text{Sen}(\chi_n)} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \\
 & + Bi \frac{\xi_c}{\xi} \psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \chi_n \frac{\text{Cos}(\chi_n \xi)}{H_n \text{Sen}(\chi_n)} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \int_0^{\tau} e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \\
 & - Bi \psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\tan(\chi_n \xi_c)}{H_n} \frac{\text{Cos}(\chi_n \xi)}{\xi \text{Sen}(\chi_n)} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \int_0^{\tau} e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \\
 & + Bi \Lambda_2 \frac{\xi_c}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} (\Lambda_1 + \chi_n^2 - \psi_{in}) \frac{\text{Cos}(\chi_n \xi)}{\chi_n H_n \text{Sen}(\chi_n)} \frac{1 - e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{(\chi_n^2 + \Lambda_1)} \\
 & + Bi \Lambda_2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\psi_{in} - \Lambda_1 - \chi_n^2)}{H_n \text{Sen}(\chi_n)} \frac{\tan(\chi_n \xi_c)}{\chi_n^2} \frac{\text{Cos}(\chi_n \xi)}{\xi} \left(\frac{1 - e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{\chi_n^2 + \Lambda_1} \right)
 \end{aligned}$$

O bien, haciendo el álgebra correspondiente:

$$U_p = Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{\chi_n H_n \text{Sen}(\chi_n)} \left[(1 + \chi_n \xi_c \tan(\chi_n \xi_c)) \frac{\text{Sen}(\chi_n \xi)}{\chi_n \xi} + \left(\xi_c - \frac{\tan(\chi_n \xi_c)}{\chi_n} \right) \frac{\text{Cos}(\chi_n \xi)}{\xi} \right] \left(\chi_n^2 \left[\psi_{in} \int_0^{\tau} U_{in}(\beta) e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\beta} d\beta + U_{f0} \right] + (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) \left[U_{p0} - \Lambda_2 \left(\frac{e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} - 1}{\chi_n^2 + \Lambda_1} \right) \right] \right)$$

(A-5.259)

Ahora se continuará con la inversión de términos para obtener la solución en el fluido.

Doceavo Término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{12}\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{U_{f0}}{s + \psi_{in} + \psi_p}\right\} = U_{f0}e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \quad (\text{A-5.260})$$

Décimo tercer Término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{13}\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{\psi_{in}\bar{U}_{in}(s)}{s + \psi_{in} + \psi_p}\right\} \quad (\text{A-5.261})$$

Usando el teorema de la convolución:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{13}\} = \psi_{in}e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \quad (\text{A-5.262})$$

Décimo cuarto Término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{14}\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{-\frac{\Lambda_2\psi_p}{s(s + \Lambda_1)(s + \psi_{in} + \psi_p)}\right\} \quad (\text{A-5.263})$$

Usando fracciones parciales:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{14}\} = -\frac{\Lambda_2\psi_p}{\Lambda_1(\psi_{in} + \psi_p)} + \frac{\Lambda_2\psi_p e^{-\Lambda_1\tau}}{\Lambda_1(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)} + \frac{\Lambda_2\psi_p e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau}}{(\psi_{in} + \psi_p)(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)} \quad (\text{A-5.264})$$

Décimo quinto Término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{15}\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{U_{p0}\psi_p}{(s + \Lambda_1)(s + \psi_{in} + \psi_p)}\right\} \quad (\text{A-5.265})$$

Usando fracciones parciales:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{15}\} = \frac{U_{p0}\psi_p}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)} \left(e^{-\Lambda_1\tau} - e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau}\right) \quad (\text{A-5.266})$$

Décimo sexto Término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{16}\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{Bi\psi_p \frac{\left(1 - \sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c \operatorname{Tanh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c\right)\right) \left[U_{f0}(s + \Lambda_1) - (s + \psi_{in})U_{p0}\right] \operatorname{Senh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1}\right)}{(s + \psi_{in} + \psi_p)(s + \Lambda_1)N(s) \sqrt{s + \Lambda_1}}\right\} \quad (\text{A-5.267})$$

Para invertir este término se usará el método de residuos, por lo que es necesario distinguir:

$$P(s) = Bi\psi_p \left(1 - \sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c \operatorname{Tanh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c\right)\right) \left[U_{f0}(s + \Lambda_1) - (s + \psi_{in})U_{p0}\right] \frac{\operatorname{Senh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1}\right)}{\sqrt{s + \Lambda_1}} \quad (\text{A-5.268})$$

$$Q(s) = (s + \psi_{in} + \psi_p)(s + \Lambda_1)N(s) \quad (\text{A-5.269})$$

Como se puede notar se tienen tres polos:

$$1) s = -\Lambda_1 \quad (\text{A-5.270})$$

$$2) s = -(\psi_{in} + \psi_p) \quad (\text{A-5.271})$$

$$3) N(s) = 0 \quad (\text{A-5.272})$$

La derivada de (A.5.269) respecto a s es:

$$Q'(s) = (s + \psi_{in} + \psi_p)(s + \Lambda_1)N'(s) + (s + \psi_{in} + \psi_p)N(s) + (s + \Lambda_1)N(s) \quad (\text{A-5.273})$$

Para el primer polo:

$$P(s) = Bi\psi_p (\Lambda_1 - \psi_{in})U_{p0} \quad (\text{A-5.274})$$

$$Q'(s) = (\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)(\psi_{in} - \Lambda_1)Bi \quad (\text{A-5.275})$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{P(s_1)}{Q(s_1)}\right\} = \frac{-\psi_p U_{p0}}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)} e^{-\Lambda_1 \tau} \quad (\text{A-5.276})$$

para el segundo polo

$$P(s) = Bi\psi_p \left(1 - \sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c \operatorname{Tanh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c\right)\right) \left[U_{f0} (\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p) + \psi_p U_{p0}\right] \frac{\operatorname{Senh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right)}{\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}} \quad (\text{A-5.277})$$

$$Q'(s) = (\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p) N(-\psi_{in} - \psi_p) \quad (\text{A-5.278})$$

donde

$$N(-\psi_{in} - \psi_p) = -\psi_p Bi \left\{ \left(1 - \sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c \operatorname{Tanh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c\right)\right) \frac{\operatorname{Senh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right)}{\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}} \right. \\ \left. + \left(\xi_c - \frac{\operatorname{Tanh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c\right)}{\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}} \right) \operatorname{Cosh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right) \right\} \quad (\text{A-5.279})$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_2)}{Q(s_2)} \right\} = \frac{Bi\psi_p \left(1 - \sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c \operatorname{Tanh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c\right)\right)}{(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)^{3/2} N(-\psi_{in} - \psi_p)} \quad (\text{A-5.280}) \\ \left[U_{f0} (\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p) + \psi_p U_{p0} \right] \operatorname{Senh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right) e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau}$$

Para el tercer polo

$$P(s) = -Bi\psi_p \left(1 + \chi_n \xi_c \operatorname{Tan}(\chi_n \xi_c)\right) \left[U_{f0} \chi_n^2 + (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) U_{p0}\right] \frac{\operatorname{Sen}(\chi_n)}{\chi_n} \quad (\text{A-5.281})$$

$$Q'(s) = (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) (-\chi_n) H_n \operatorname{Sen}(\chi_n) \quad (\text{A-5.282})$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_3)}{Q(s_3)} \right\} = \sum_{n=1}^{\infty} Bi\psi_p \left(1 + \chi_n \xi_c \operatorname{Tan}(\chi_n \xi_c)\right) \frac{\left[U_{f0} \chi_n^2 + (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) U_{p0}\right]}{(\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n \chi_n^2} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \quad (\text{A-5.283})$$

La transformada inversa de (A-5.267) es entonces:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}^{-1}\{T_{16}\} = & \frac{-\psi_p U_{p0}}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)} e^{-\Lambda_1 \tau} \\
 & + \frac{Bi\psi_p \left(1 - \sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c \operatorname{Tanh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c\right)\right)}{(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)^{3/2} N(-\psi_{in} - \psi_p)} \\
 & \left[U_{f0} (\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p) + \psi_p U_{p0} \right] \operatorname{Senh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right) e^{-(\psi_{in} + \psi_p) \tau} \\
 & + \sum_{n=1}^{\infty} Bi\psi_p \left(1 + \chi_n \xi_c \operatorname{Tan}(\chi_n \xi_c)\right) \frac{\left[U_{f0} \chi_n^2 + (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) U_{p0} \right]}{(\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n \chi_n^2} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1) \tau}
 \end{aligned} \tag{A-5.284}$$

Décimo Séptimo Término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{17}\} = \mathcal{L}^{-1} \left\{ Bi\psi_p \psi_{in} \frac{\left(1 - \sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c \operatorname{Tanh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c\right)\right)}{(s + \psi_{in} + \psi_p) N(s)} \frac{\operatorname{Senh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1}\right)}{\sqrt{s + \Lambda_1}} \bar{U}_{in}(s) \right\} \tag{A-5.285}$$

Aplicando el teorema de la convolución:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{17}\} = \int_0^\tau \mathcal{L}^{-1} \left\{ Bi\psi_p \psi_{in} \frac{\left(1 - \sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c \operatorname{Tanh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c\right)\right)}{(s + \psi_{in} + \psi_p) N(s)} \frac{\operatorname{Senh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1}\right)}{\sqrt{s + \Lambda_1}} \right\} U_{in}(\beta) d\beta \tag{A-5.286}$$

para invertir la transformada de la integral es necesario usar el método de residuos, por lo que,

$$P(s) = Bi\psi_p \psi_{in} \left(1 - \sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c \operatorname{Tanh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c\right)\right) \frac{\operatorname{Senh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1}\right)}{\sqrt{s + \Lambda_1}} \tag{A-5.287}$$

$$Q(s) = (s + \psi_{in} + \psi_p) N(s) \tag{A-5.288}$$

Como se puede notar se tienen dos polos:

$$1) s = -(\psi_{in} + \psi_p) \quad (\text{A-5.289})$$

$$2) N(s) = 0 \quad (\text{A-5.290})$$

La derivada de (A-5.288) respecto a s es:

$$Q'(s) = (s + \psi_{in} + \psi_p)N'(s) + N(s) \quad (\text{A-5.291})$$

Para el primer polo,

$$P(s) = Bi\psi_p\psi_{in} \left(1 - \sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c \text{Tanh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c\right)\right) \frac{\text{Senh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right)}{\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}} \quad (\text{A-5.292})$$

$$Q'(s) = N(-\psi_{in} - \psi_p) \quad (\text{A-5.293})$$

donde $N(-\psi_{in} - \psi_p)$ se definió en (A-5.279), por lo que:

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_1)}{Q(s_1)} \right\} = Bi\psi_p\psi_{in} \frac{\left(1 - \sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c \text{Tanh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c\right)\right) \text{Senh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right)}{N(-\psi_{in} - \psi_p) \sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \quad (\text{A-5.294})$$

Para el segundo polo

$$P(s) = Bi\psi_p\psi_{in} \left(1 + \chi_n \xi_c \text{Tan}(\chi_n \xi_c)\right) \frac{\text{Sen}(\chi_n)}{\chi_n} \quad (\text{A-5.296})$$

$$Q'(s) = (\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1 - \chi_n^2) H_n \frac{\text{Sen}(\chi_n)}{\chi_n} \quad (\text{A-5.297})$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_2)}{Q(s_2)} \right\} = Bi\psi_p \psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 + \chi_n \xi_c \text{Tan}(\chi_n \xi_c))}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1 - \chi_n^2) H_n} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \quad (\text{A-5.298})$$

Entonces el término a sustituir en la integral es:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s)}{Q(s)} \right\} = & Bi\psi_p \psi_{in} \frac{\left(1 - \sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c \text{Tanh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c\right)\right) \text{Senh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right)}{N(-\psi_{in} - \psi_p) \sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)(\tau - \beta)} \\ & + Bi\psi_p \psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 + \chi_n \xi_c \text{Tan}(\chi_n \xi_c))}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1 - \chi_n^2) H_n} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)(\tau - \beta)} \end{aligned} \quad (\text{A-5.299})$$

Sustituyendo (A-5.299) en (A-5.286)

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1} \{T_{17}\} = & Bi\psi_p \psi_{in} \frac{\left(1 - \sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c \text{Tanh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c\right)\right)}{N(-\psi_{in} - \psi_p)} \\ & \frac{\text{Senh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right) e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \int_0^{\tau} e^{(\psi_{in} + \psi_p)\beta} U_{in}(\beta) d\beta}{\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}} \\ & + Bi\psi_p \psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 + \chi_n \xi_c \text{Tan}(\chi_n \xi_c))}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1 - \chi_n^2) H_n} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \int_0^{\tau} e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \end{aligned} \quad (\text{A-5.300})$$

Décimo octavo Término:

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_{18}\} = \mathcal{L}^{-1} \left\{ Bi\psi_p \Lambda_2 \frac{\left(1 - \sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c \text{Tanh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c\right)\right) (s + \psi_{in}) \text{Senh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1}\right)}{s(s + \Lambda_1)(s + \psi_{in} + \psi_p) N(s) \sqrt{s + \Lambda_1}} \right\} \quad (\text{A-5.301})$$

Para eliminar un polo se usará el teorema de la convolución.

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_{18}\} = \int_0^{\tau} \mathcal{L}^{-1} \left\{ Bi\psi_p \Lambda_2 \frac{\left(1 - \sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c \text{Tanh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c\right)\right) (s + \psi_{in}) \text{Senh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1}\right)}{(s + \Lambda_1)(s + \psi_{in} + \psi_p) N(s) \sqrt{s + \Lambda_1}} \right\} d\beta \quad (\text{A-5.302})$$

Para invertir el término en la integral se usará el método de residuos, por lo que,

$$P(s) = Bi\psi_p\Lambda_2 \left(1 - \sqrt{s + \Lambda_1}\xi_c \operatorname{Tanh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1}\xi_c\right)\right) (s + \psi_{in}) \frac{\operatorname{Senh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1}\right)}{\sqrt{s + \Lambda_1}} \quad (\text{A-5.303})$$

$$Q(s) = (s + \Lambda_1)(s + \psi_{in} + \psi_p)N(s) \quad (\text{A-5.304})$$

En este caso hay tres polos:

$$1) s = -\Lambda_1 \quad (\text{A-5.305})$$

$$2) s = -\psi_{in} - \psi_p \quad (\text{A-5.306})$$

$$3) N(s) = 0 \quad (\text{A-5.307})$$

La derivada de (A-5.304) es:

$$Q'(s) = (s + \Lambda_1)(s + \psi_{in} + \psi_p)N'(s) + (s + \Lambda_1)N(s) + (s + \psi_{in} + \psi_p)N(s) \quad (\text{A-5.308})$$

Para el primer polo

$$P(s) = Bi\psi_p\Lambda_2(\psi_{in} - \Lambda_1) \quad (\text{A-5.309})$$

$$Q'(s) = (\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)(\psi_{in} - \Lambda_1)Bi \quad (\text{A-5.310})$$

entonces

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{P(s_1)}{Q(s_1)}\right\} = \frac{\psi_p\Lambda_2e^{-\Lambda_1\tau}}{\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1} \quad (\text{A-5.311})$$

Para el segundo polo

$$P(s) = Bi\psi_p\Lambda_2 \left(1 - \sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\xi_c \operatorname{Tanh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\xi_c\right)\right) (-\psi_p) \frac{\operatorname{Senh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right)}{\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}} \quad (\text{A-5.312})$$

$$Q'(s) = (\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)N(-\psi_{in} - \psi_p) \quad (\text{A-5.313})$$

entonces

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_2)}{Q(s_2)} \right\} = -Bi\psi_p^2 \Lambda_2 \frac{\left(1 - \sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c \operatorname{Tanh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c\right)\right)}{(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)^{3/2} N(-\psi_{in} - \psi_p)} \operatorname{Senh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right) e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \quad (\text{A-5.314})$$

Para el tercer polo

$$P(s) = Bi\psi_p \Lambda_2 (1 + \chi_n \xi_c \operatorname{Tan}(\chi_n \xi_c)) (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) \frac{\operatorname{Sen}(\chi_n)}{\chi_n} \quad (\text{A-5.315})$$

$$Q(s) = -\chi_n^2 (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n \frac{\operatorname{Sen}(\chi_n)}{\chi_n} \quad (\text{A-5.316})$$

entonces

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_3)}{Q(s_3)} \right\} = -Bi\psi_p \Lambda_2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 + \chi_n \xi_c \operatorname{Tan}(\chi_n \xi_c)) (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)}{\chi_n^2 (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \quad (\text{A-5.317})$$

Así al sumar (A-5.311), (A-5.314) y (A-5.317), se obtiene el término a sustituir en la integral:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s)}{Q(s)} \right\} &= \frac{\psi_p \Lambda_2 e^{-\Lambda_1(\tau-\beta)}}{\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1} - Bi\psi_p \Lambda_2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 + \chi_n \xi_c \operatorname{Tan}(\chi_n \xi_c)) (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)}{\chi_n^2 (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)(\tau-\beta)} \\ &- Bi\psi_p^2 \Lambda_2 \frac{\left(1 - \sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c \operatorname{Tanh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c\right)\right)}{(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)^{3/2} N(-\psi_{in} - \psi_p)} \operatorname{Senh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right) e^{-(\psi_{in} + \psi_p)(\tau-\beta)} \end{aligned} \quad (\text{A-5.318})$$

Sustituyendo (A-5.318) en (A-5.302):

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1} \{T_{18}\} &= \frac{\psi_p \Lambda_2 (1 - e^{-\Lambda_1 \tau})}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1) \Lambda_1} - Bi\psi_p \Lambda_2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 + \chi_n \xi_c \operatorname{Tan}(\chi_n \xi_c)) (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)}{\chi_n^2 (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n} \left(\frac{1 - e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{\chi_n^2 + \Lambda_1} \right) \\ &- Bi\psi_p^2 \Lambda_2 \frac{\left(1 - \sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c \operatorname{Tanh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c\right)\right)}{(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)^{3/2} N(-\psi_{in} - \psi_p)} \operatorname{Senh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right) \left(\frac{1 - e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau}}{\psi_{in} + \psi_p} \right) \end{aligned} \quad (\text{A-5.319})$$

Décimo noveno Término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{19}\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{Bi\xi_c \text{Cosh}\left(\sqrt{s+\Lambda_1}\right) \frac{\psi_p [U_{f0}(s+\Lambda_1) - (s+\psi_{in})U_{p0}]}{(s+\Lambda_1)(s+\psi_{in}+\psi_p)N(s)}\right\} \quad (\text{A-5.320})$$

Se usará el método de residuos, por lo que es necesario distinguir:

$$P(s) = Bi\psi_p \xi_c \text{Cosh}\left(\sqrt{s+\Lambda_1}\right) [U_{f0}(s+\Lambda_1) - (s+\psi_{in})U_{p0}] \quad (\text{A-5.321})$$

$$Q(s) = (s+\Lambda_1)(s+\psi_{in}+\psi_p)N(s) \quad (\text{A-5.322})$$

Se tienen los mismos tres polos que en el término anterior, por lo que, para el primer polo

$$P(s) = Bi\psi_p \xi_c (\Lambda_1 - \psi_{in})U_{p0} \quad (\text{A-5.323})$$

$$Q'(s) = (\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)(\psi_{in} - \Lambda_1)Bi \quad (\text{A-5.324})$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{P(s_1)}{Q(s_1)}\right\} = -\frac{\psi_p \xi_c U_{p0}}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)} e^{-\Lambda_1 \tau} \quad (\text{A-5.325})$$

Para el segundo polo:

$$P(s) = Bi\psi_p \xi_c \text{Cosh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right) [U_{f0}(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p) + \psi_p U_{p0}] \quad (\text{A-5.326})$$

$$Q'(s) = (\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)N(-\psi_{in} - \psi_p) \quad (\text{A-5.327})$$

entonces,

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{P(s_2)}{Q(s_2)}\right\} = Bi\psi_p \xi_c \text{Cosh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right) \frac{[U_{f0}(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p) + \psi_p U_{p0}]}{(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)N(-\psi_{in} - \psi_p)} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \quad (\text{A-5.328})$$

Para el tercer polo:

$$P(s) = -Bi\psi_p \xi_c \text{Cos}(\chi_n) [U_{f0}\chi_n^2 + (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)U_{p0}] \quad (\text{A-5.329})$$

$$Q(s) = -\chi_n^2 (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n \frac{\text{Sen}(\chi_n)}{\chi_n} \quad (\text{A-5.330})$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_3)}{Q(s_3)} \right\} = Bi \psi_p \xi_c \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Cot}(\chi_n) [U_{f0} \chi_n^2 + (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) U_{p0}]}{\chi_n (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \quad (\text{A-5.331})$$

Entonces, sumando (A-5.325), (A-5.328) y (A-5.331)

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_{19}\} = -\frac{\psi_p \xi_c U_{p0}}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)} e^{-\Lambda_1 \tau} + Bi \psi_p \xi_c \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Cot}(\chi_n) [U_{f0} \chi_n^2 + (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) U_{p0}]}{\chi_n (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} + Bi \psi_p \xi_c \text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}) \frac{[U_{f0} (\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p) + \psi_p U_{p0}]}{(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p) N(-\psi_{in} - \psi_p)} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \quad (\text{A-5.332})$$

Vigésimo Término:

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_{20}\} = \mathcal{L}^{-1} \left\{ -Bi \frac{\text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)}{\sqrt{s + \Lambda_1}} \text{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1}) \frac{\psi_p [U_{f0} (s + \Lambda_1) - (s + \psi_{in}) U_{p0}]}{(s + \Lambda_1)(s + \psi_{in} + \psi_p) N(s)} \right\} \quad (\text{A-5.333})$$

De nuevo se usará el método de residuos

$$P(s) = -Bi \psi_p \frac{\text{Tanh}(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c)}{\sqrt{s + \Lambda_1}} \text{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1}) [U_{f0} (s + \Lambda_1) - (s + \psi_{in}) U_{p0}] \quad (\text{A-5.334})$$

$$Q(s) = (s + \Lambda_1)(s + \psi_{in} + \psi_p) N(s) \quad (\text{A-5.335})$$

Se tienen los mismos tres polos, entonces para el primero

$$P(s) = Bi \psi_p \xi_c (\psi_{in} - \Lambda_1) U_{p0} \quad (\text{A-5.336})$$

$$Q'(s) = (\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)(\psi_{in} - \Lambda_1) Bi \quad (\text{A-5.337})$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_1)}{Q(s_1)} \right\} = \frac{\psi_p \xi_c U_{p0} e^{-\Lambda_1 \tau}}{\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1} \quad (\text{A-5.338})$$

para el segundo polo:

$$P(s) = -Bi\psi_p \frac{\text{Tanh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c\right)}{\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}} \text{Cosh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right) \left[U_{f0} (\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p) + \psi_p U_{p0} \right] \quad (\text{A-5.339})$$

$$Q'(s) = (\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p) N(-\psi_{in} - \psi_p) \quad (\text{A-5.340})$$

entonces

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_2)}{Q(s_2)} \right\} = -Bi\psi_p \frac{\text{Tanh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c\right) \text{Cosh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right)}{(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)^{3/2} N(-\psi_{in} - \psi_p)} \left[U_{f0} (\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p) + \psi_p U_{p0} \right] e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \quad (\text{A-5.341})$$

Para el tercer polo:

$$P(s) = Bi\psi_p \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c)}{\chi_n} \text{Cos}(\chi_n) \left[U_{f0} \chi_n^2 + (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) U_{p0} \right] \quad (\text{A-5.342})$$

$$Q'(s) = -\chi_n (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n \text{Sen}(\chi_n) \quad (\text{A-5.343})$$

entonces

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_3)}{Q(s_3)} \right\} = -Bi\psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c) \text{Cot}(\chi_n)}{\chi_n^2 (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n} \left[U_{f0} \chi_n^2 + (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) U_{p0} \right] e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \quad (\text{A-5.344})$$

Por lo tanto:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1}\{T_{20}\} = & \frac{\psi_p \xi_c U_{p0} e^{-\Lambda_1 \tau}}{\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1} \\ & - Bi \psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\tan(\chi_n \xi_c) \cot(\chi_n)}{\chi_n^2 (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n} \left[U_{f0} \chi_n^2 + (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) U_{p0} \right] e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1) \tau} \\ & - Bi \psi_p \frac{\tanh\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c\right) \cosh\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right)}{(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)^{3/2} N(-\psi_{in} - \psi_p)} \\ & \left[U_{f0} (\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p) + \psi_p U_{p0} \right] e^{-(\psi_{in} + \psi_p) \tau} \end{aligned}$$

(A-5.345)

Vigésimo primer Término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{21}\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{ Bi \xi_c \psi_p \psi_{in} \frac{\cosh\left(\sqrt{s + \Lambda_1}\right)}{(s + \psi_{in} + \psi_p) N(s)} \bar{U}_{in}(s) \right\} \quad (A-5.346)$$

Usando el teorema de la convolución:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{21}\} = \int_0^\tau \mathcal{L}^{-1}\left\{ Bi \xi_c \psi_p \psi_{in} \frac{\cosh\left(\sqrt{s + \Lambda_1}\right)}{(s + \psi_{in} + \psi_p) N(s)} \right\} U_{in}(\beta) d\beta \quad (A-5.347)$$

Ahora, por el método de residuos:

$$P(s) = Bi \xi_c \psi_p \psi_{in} \cosh\left(\sqrt{s + \Lambda_1}\right) \quad (A-5.348)$$

$$Q(s) = (s + \psi_{in} + \psi_p) N(s) \quad (A-5.349)$$

Se tienen dos polos

$$1) s = -\psi_{in} - \psi_p \quad (A-5.350)$$

$$2) N(s) = 0 \quad (A-5.351)$$

La derivada de (A-5.349) respecto s es:

$$Q'(s) = (s + \psi_{in} + \psi_p) N'(s) + N(s) \quad (A-5.352)$$

Para el primer polo

$$P(s) = Bi\xi_c \psi_p \psi_{in} \text{Cosh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right) \quad (\text{A-5.353})$$

$$Q'(s) = N(-\psi_{in} - \psi_p) \quad (\text{A-5.354})$$

por lo que

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{P(s_1)}{Q(s_1)}\right\} = Bi\xi_c \psi_p \psi_{in} \frac{\text{Cosh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right)}{N(-\psi_{in} - \psi_p)} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \quad (\text{A-5.355})$$

Para el segundo polo:

$$P(s) = Bi\xi_c \psi_p \psi_{in} \text{Cos}(\chi_n) \quad (\text{A-5.356})$$

$$Q'(s) = (\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1 - \chi_n^2) H_n \frac{\text{Sen}(\chi_n)}{\chi_n} \quad (\text{A-5.357})$$

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{P(s_2)}{Q(s_2)}\right\} = Bi\xi_c \psi_p \psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\chi_n \text{Cot}(\chi_n)}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1 - \chi_n^2) H_n} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \quad (\text{A-5.358})$$

Entonces, la transformada inversa a sustituir es:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{P(s)}{Q(s)}\right\} &= Bi\xi_c \psi_p \psi_{in} \frac{\text{Cosh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right)}{N(-\psi_{in} - \psi_p)} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)(\tau - \beta)} \\ &+ Bi\xi_c \psi_p \psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\chi_n \text{Cot}(\chi_n)}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1 - \chi_n^2) H_n} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)(\tau - \beta)} \end{aligned} \quad (\text{A-5.359})$$

sustituyendo (A-5.359) en (A-5.347):

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1}\{T_{21}\} &= Bi\xi_c \psi_p \psi_{in} \frac{\text{Cosh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right)}{N(-\psi_{in} - \psi_p)} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \\ &+ Bi\xi_c \psi_p \psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\chi_n \text{Cot}(\chi_n)}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1 - \chi_n^2) H_n} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \int_0^\tau e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \end{aligned}$$

$$(\text{A-5.360})$$

Vigésimo segundo término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{22}\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{-Bi \frac{\text{Tanh}(\sqrt{s+\Lambda_1}\xi_c)}{\sqrt{s+\Lambda_1}} \text{Cosh}(\sqrt{s+\Lambda_1}) \frac{\psi_{in}\psi_p \bar{U}_{in}(s)}{(s+\psi_{in}+\psi_p)N(s)}\right\} \quad (\text{A-5.361})$$

Usando el teorema de la convolución:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{22}\} = \int_0^\tau \mathcal{L}^{-1}\left\{-Bi\psi_{in}\psi_p \frac{\text{Tanh}(\sqrt{s+\Lambda_1}\xi_c)}{\sqrt{s+\Lambda_1}} \frac{\text{Cosh}(\sqrt{s+\Lambda_1})}{(s+\psi_{in}+\psi_p)N(s)}\right\} U_{in}(\beta) d\beta \quad (\text{A-5.362})$$

Ahora por el método de residuos

$$P(s) = -Bi\psi_{in}\psi_p \frac{\text{Tanh}(\sqrt{s+\Lambda_1}\xi_c)}{\sqrt{s+\Lambda_1}} \text{Cosh}(\sqrt{s+\Lambda_1}) \quad (\text{A-5.363})$$

$$Q(s) = (s+\psi_{in}+\psi_p)N(s) \quad (\text{A-5.364})$$

Se puede notar que se obtendrán los mismos polos que en le término anterior, entonces, para el primero

$$P(s) = -Bi\psi_{in}\psi_p \frac{\text{Tanh}(\sqrt{\Lambda_1-\psi_{in}-\psi_p}\xi_c)}{\sqrt{\Lambda_1-\psi_{in}-\psi_p}} \text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1-\psi_{in}-\psi_p}) \quad (\text{A-5.365})$$

$$Q'(s) = N(-\psi_{in}-\psi_p) \quad (\text{A-5.366})$$

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{P(s_1)}{Q(s_1)}\right\} = -Bi\psi_{in}\psi_p \frac{\text{Tanh}(\sqrt{\Lambda_1-\psi_{in}-\psi_p}\xi_c)}{\sqrt{\Lambda_1-\psi_{in}-\psi_p}} \frac{\text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1-\psi_{in}-\psi_p})}{N(-\psi_{in}-\psi_p)} e^{-(\psi_{in}+\psi_p)\tau} \quad (\text{A-5.367})$$

Para el segundo polo

$$P(s) = -Bi\psi_{in}\psi_p \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c)}{\chi_n} \text{Cos}(\chi_n) \quad (\text{A-5.368})$$

$$Q(s) = (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n \frac{\text{Sen}(\chi_n)}{\chi_n} \quad (\text{A-5.369})$$

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_2)}{Q(s_2)} \right\} = -Bi\psi_{in}\psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c) \text{Cot}(\chi_n)}{(\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \quad (\text{A-5.370})$$

Entonces la transformada inversa a sustituir en la integral es:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s)}{Q(s)} \right\} &= -Bi\psi_{in}\psi_p \frac{\text{Tanh}(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c) \text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p})}{\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} N(-\psi_{in} - \psi_p)} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)(\tau - \beta)} \\ &\quad - Bi\psi_{in}\psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c) \text{Cot}(\chi_n)}{(\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)(\tau - \beta)} \end{aligned} \quad (\text{A-5.371})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1} \{T_{22}\} &= -Bi\psi_{in}\psi_p \frac{\text{Tanh}(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c) \text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p})}{\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} N(-\psi_{in} - \psi_p)} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \\ &\quad - Bi\psi_{in}\psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c) \text{Cot}(\chi_n)}{(\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \int_0^\tau e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \end{aligned} \quad (\text{A-5.372})$$

Vigésimo Tercer Término:

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_{23}\} = \mathcal{L}^{-1} \left\{ Bi\xi_c \text{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1}) \frac{(s + \psi_{in})\psi_p \Lambda_2}{s(s + \Lambda_1)(s + \psi_{in} + \psi_p)N(s)} \right\} \quad (\text{A-5.373})$$

Se usará el teorema de la convolución para eliminar un polo:

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_{23}\} = \int_0^\tau \mathcal{L}^{-1} \left\{ Bi\xi_c \text{Cosh}(\sqrt{s + \Lambda_1}) \frac{(s + \psi_{in})\psi_p \Lambda_2}{(s + \Lambda_1)(s + \psi_{in} + \psi_p)N(s)} \right\} d\beta \quad (\text{A-5.374})$$

Ahora por el método de residuos:

$$P(s) = Bi\xi_c\psi_p\Lambda_2(s+\psi_{in})\text{Cosh}\left(\sqrt{s+\Lambda_1}\right) \quad (\text{A-5.375})$$

$$Q(s) = (s+\Lambda_1)(s+\psi_{in}+\psi_p)N(s) \quad (\text{A-5.376})$$

Como se puede notar se tienen tres polos:

$$1) s = -\Lambda_1 \quad (\text{A-5.377})$$

$$2) s = -\psi_{in} - \psi_p \quad (\text{A-5.378})$$

$$3) N(s) = 0 \quad (\text{A-5.379})$$

La derivada de (A-5.377) es:

$$Q'(s) = (s+\Lambda_1)(s+\psi_{in}+\psi_p)N'(s) + (s+\Lambda_1)N(s) + (s+\psi_{in}+\psi_p)N(s) \quad (\text{A-5.380})$$

Para el primer polo

$$P(s) = Bi\xi_c\psi_p\Lambda_2(\psi_{in} - \Lambda_1) \quad (\text{A-5.381})$$

$$Q'(s) = (\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)(\psi_{in} - \Lambda_1)Bi \quad (\text{A-5.382})$$

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{P(s_1)}{Q(s_1)}\right\} = \frac{\xi_c\psi_p\Lambda_2e^{-\Lambda_1\tau}}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)} \quad (\text{A-5.383})$$

Para el segundo polo:

$$P(s) = -Bi\xi_c\psi_p^2\Lambda_2\text{Cosh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right) \quad (\text{A-5.384})$$

$$Q'(s) = (\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)N(-\psi_{in} - \psi_p) \quad (\text{A-5.385})$$

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{P(s_2)}{Q(s_2)}\right\} = \frac{-Bi\xi_c\psi_p^2\Lambda_2\text{Cosh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right)}{(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)N(-\psi_{in} - \psi_p)}e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \quad (\text{A-5.386})$$

Para el tercer polo:

$$P(s) = Bi\xi_c\psi_p\Lambda_2(\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)Cos(\chi_n) \quad (A-5.387)$$

$$Q'(s) = -\chi_n(\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1)H_nSen(\chi_n) \quad (A-5.388)$$

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{P(s_3)}{Q(s_3)}\right\} = -Bi\xi_c\psi_p\Lambda_2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)Cot(\chi_n)}{\chi_n(\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1)H_n}e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \quad (A-5.389)$$

Entonces la transformada a sustituir en la integral es:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{P(s)}{Q(s)}\right\} &= \frac{\xi_c\psi_p\Lambda_2e^{-\Lambda_1(\tau-\beta)}}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)} - \frac{Bi\xi_c\psi_p^2\Lambda_2Cosh(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p})}{(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)N(-\psi_{in} - \psi_p)}e^{-(\psi_{in} + \psi_p)(\tau-\beta)} \\ &\quad - Bi\xi_c\psi_p\Lambda_2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)Cot(\chi_n)}{\chi_n(\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1)H_n}e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)(\tau-\beta)} \end{aligned} \quad (A-5.390)$$

Sustituyendo (A-5.390) en (A-5.374)

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{23}\} = \frac{\xi_c\psi_p\Lambda_2(1 - e^{-\Lambda_1\tau})}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)\Lambda_1} - \frac{Bi\xi_c\psi_p^2\Lambda_2Cosh(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p})}{(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)N(-\psi_{in} - \psi_p)}\left(\frac{1 - e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau}}{\psi_{in} + \psi_p}\right) - Bi\xi_c\psi_p\Lambda_2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)Cot(\chi_n)}{\chi_n(\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1)H_n}\left(\frac{1 - e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{\chi_n^2 + \Lambda_1}\right)$$

(A-5.391)

Vigésimo cuarto Término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{24}\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{-Bi\frac{Tanh(\sqrt{s + \Lambda_1}\xi_c)}{\sqrt{s + \Lambda_1}}Cosh(\sqrt{s + \Lambda_1})\frac{(s + \psi_{in})\psi_p\Lambda_2}{s(s + \Lambda_1)(s + \psi_{in} + \psi_p)N(s)}\right\}$$

(A-5.392)

Usando el teorema de la convolución:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{24}\} = \int_0^\tau \mathcal{L}^{-1}\left\{-Bi\frac{Tanh(\sqrt{s + \Lambda_1}\xi_c)}{\sqrt{s + \Lambda_1}}Cosh(\sqrt{s + \Lambda_1})\frac{(s + \psi_{in})\psi_p\Lambda_2}{(s + \Lambda_1)(s + \psi_{in} + \psi_p)N(s)}\right\}d\beta$$

(A-5.393)

Aplicando el método de residuos,

$$P(s) = -Bi \frac{\text{Tanh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1} \xi_c\right)}{\sqrt{s + \Lambda_1}} \text{Cosh}\left(\sqrt{s + \Lambda_1}\right) (s + \psi_{in}) \psi_p \Lambda_2 \quad (\text{A-5.394})$$

$$Q(s) = (s + \Lambda_1)(s + \psi_{in} + \psi_p) N(s) \quad (\text{A-5.395})$$

Se tienen los mismos tres polos que en el término anterior, para el primero,

$$P(s) = -Bi \xi_c (\psi_{in} - \Lambda_1) \psi_p \Lambda_2 \quad (\text{A-5.396})$$

$$Q'(s) = (\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)(\psi_{in} - \Lambda_1) Bi \quad (\text{A-5.397})$$

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_1)}{Q(s_1)} \right\} = \frac{-\xi_c \psi_p \Lambda_2 e^{-\Lambda_1 \tau}}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)} \quad (\text{A-5.398})$$

Para el segundo polo:

$$P(s) = Bi \psi_p^2 \Lambda_2 \frac{\text{Tanh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c\right)}{\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}} \text{Cosh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right) \quad (\text{A-5.399})$$

$$Q'(s) = (\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p) N(-\psi_{in} - \psi_p) \quad (\text{A-5.400})$$

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_2)}{Q(s_2)} \right\} = Bi \psi_p^2 \Lambda_2 \frac{\text{Tanh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c\right) \text{Cosh}\left(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p}\right)}{(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)^{3/2} N(-\psi_{in} - \psi_p)} e^{-(\psi_{in} + \psi_p) \tau} \quad (\text{A-5.401})$$

Para el tercer polo:

$$P(s) = -Bi \frac{\text{Tan}\left(\chi_n \xi_c\right)}{\chi_n} \text{Cos}\left(\chi_n\right) (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) \psi_p \Lambda_2 \quad (\text{A-5.402})$$

$$Q'(s) = -\chi_n (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n \text{Sen}\left(\chi_n\right) \quad (\text{A-5.403})$$

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s_3)}{Q(s_3)} \right\} = Bi\psi_p \Lambda_2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c) \text{Cot}(\chi_n) (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)}{\chi_n^2 (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \quad (\text{A-5.404})$$

Entonces

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{P(s)}{Q(s)} \right\} &= \frac{-\xi_c \psi_p \Lambda_2 e^{-\Lambda_1(\tau-\beta)}}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)} + Bi\psi_p^2 \Lambda_2 \frac{\text{Tanh}(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c) \text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p})}{(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)^{3/2} N(-\psi_{in} - \psi_p)} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)(\tau-\beta)} \\ &+ Bi\psi_p \Lambda_2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c) \text{Cot}(\chi_n) (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)}{\chi_n^2 (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)(\tau-\beta)} \end{aligned} \quad (\text{A-5.405})$$

Sustituyendo (A-5.405) en (A-5.393):

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1} \{T_{24}\} &= \frac{-\xi_c \psi_p \Lambda_2 (1 - e^{-\Lambda_1 \tau})}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1) \Lambda_1} + Bi\psi_p^2 \Lambda_2 \frac{\text{Tanh}(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p} \xi_c) \text{Cosh}(\sqrt{\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p})}{(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)^{3/2} N(-\psi_{in} - \psi_p)} \left(\frac{1 - e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau}}{\psi_{in} + \psi_p} \right) \\ &+ Bi\psi_p \Lambda_2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c) \text{Cot}(\chi_n) (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)}{\chi_n^2 (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n} \left(\frac{1 - e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{\chi_n^2 + \Lambda_1} \right) \end{aligned} \quad (\text{A-5.406})$$

Sumando las ecuaciones (A-5.260), (A-5.262), (A-5.264), (A-5.266), (A-5.284), (A-5.300), (A-5.319), (A-5.332), (A-5.345), (A-5.360), (A-5.372), (A-5.391) y (A-5.406)

$$\begin{aligned}
 U_f = & U_{f0} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} + \psi_{in} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p)\beta} U_{in}(\beta) d\beta - \frac{U_{p0} \psi_p e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau}}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1)} + \frac{\Lambda_2 \psi_p (e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} - 1)}{(\psi_{in} + \psi_p)(\Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p)} \\
 & + \frac{Bi \psi_p (1 - \sqrt{\omega} \xi_c \operatorname{Tanh}(\sqrt{\omega} \xi_c))}{\omega^{3/2} N(-\psi_{in} - \psi_p)} [\omega U_{f0} + \psi_p U_{p0}] \operatorname{Senh}(\sqrt{\omega}) e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \\
 & + Bi \psi_p \sum_{n=1}^{\infty} (1 + \chi_n \xi_c \operatorname{Tan}(\chi_n \xi_c)) \frac{[U_{f0} \chi_n^2 + (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) U_{p0}]}{(\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n \chi_n^2} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \\
 & + Bi \psi_p \psi_{in} \frac{(1 - \sqrt{\omega} \xi_c \operatorname{Tanh}(\sqrt{\omega} \xi_c)) \operatorname{Senh}(\sqrt{\omega})}{N(-\psi_{in} - \psi_p) \sqrt{\omega}} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \\
 & + Bi \psi_p \psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 + \chi_n \xi_c \operatorname{Tan}(\chi_n \xi_c))}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1 - \chi_n^2) H_n} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \int_0^\tau e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \\
 & - Bi \psi_p \Lambda_2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 + \chi_n \xi_c \operatorname{Tan}(\chi_n \xi_c)) (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)}{\chi_n^2 (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n} \left(\frac{1 - e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{\chi_n^2 + \Lambda_1} \right) \\
 & - Bi \psi_p^2 \Lambda_2 \frac{(1 - \sqrt{\omega} \xi_c \operatorname{Tanh}(\sqrt{\omega} \xi_c)) \operatorname{Senh}(\sqrt{\omega})}{(\omega)^{3/2} N(-\psi_{in} - \psi_p)} \left(\frac{1 - e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau}}{\psi_{in} + \psi_p} \right) \\
 & + Bi \psi_p \xi_c \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\operatorname{Cot}(\chi_n) [U_{f0} \chi_n^2 + (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) U_{p0}]}{\chi_n (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n} e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \\
 & + Bi \psi_p \xi_c \operatorname{Cosh}(\sqrt{\omega}) \frac{[U_{f0}(\omega) + \psi_p U_{p0}]}{\omega N(-\psi_{in} - \psi_p)} e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \\
 & - Bi \psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\operatorname{Tan}(\chi_n \xi_c) \operatorname{Cot}(\chi_n)}{\chi_n^2 (\psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1) H_n} [U_{f0} \chi_n^2 + (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) U_{p0}] e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \\
 & - Bi \psi_p \frac{\operatorname{Tanh}(\sqrt{\omega} \xi_c) \operatorname{Cosh}(\sqrt{\omega})}{(\omega)^{3/2} N(-\psi_{in} - \psi_p)} [\omega U_{f0} + \psi_p U_{p0}] e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau} \\
 & + Bi \xi_c \psi_p \psi_{in} \frac{\operatorname{Cosh}(\sqrt{\omega}) e^{-(\psi_{in} + \psi_p)\tau}}{N(-\psi_{in} - \psi_p)} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \\
 & + Bi \xi_c \psi_p \psi_{in} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\chi_n \operatorname{Cot}(\chi_n) e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} \int_0^\tau e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta}{(\psi_{in} + \psi_p - \Lambda_1 - \chi_n^2) H_n}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -Bi\psi_{in}\psi_p \frac{Tanh(\sqrt{\omega}\xi_c)}{\sqrt{\omega}} \frac{Cosh(\sqrt{\omega})}{N(-\psi_{in}-\psi_p)} e^{-(\psi_{in}+\psi_p)\tau} \int_0^\tau e^{(\psi_{in}+\psi_p)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \\
 & -Bi\psi_{in}\psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Tan(\chi_n \xi_c) Cot(\chi_n)}{(\psi_{in}+\psi_p-\chi_n^2-\Lambda_1)H_n} e^{-(\chi_n^2+\Lambda_1)\tau} \int_0^\tau e^{(\chi_n^2+\Lambda_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \\
 & -\frac{Bi\xi_c\psi_p^2\Lambda_2 Cosh(\sqrt{\omega})}{\omega N(-\psi_{in}-\psi_p)} \left(\frac{1-e^{-(\psi_{in}+\psi_p)\tau}}{\psi_{in}+\psi_p} \right) \\
 & -Bi\xi_c\psi_p\Lambda_2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\psi_{in}-\chi_n^2-\Lambda_1)Cot(\chi_n)}{\chi_n(\psi_{in}+\psi_p-\chi_n^2-\Lambda_1)H_n} \left(\frac{1-e^{-(\chi_n^2+\Lambda_1)\tau}}{\chi_n^2+\Lambda_1} \right) \\
 & +Bi\psi_p^2\Lambda_2 \frac{Tanh(\sqrt{\omega}\xi_c)Cosh(\sqrt{\omega})}{\omega\sqrt{\omega}N(-\psi_{in}-\psi_p)} \left(\frac{1-e^{-(\psi_{in}+\psi_p)\tau}}{\psi_{in}+\psi_p} \right) \\
 & +Bi\psi_p\Lambda_2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Tan(\chi_n \xi_c) Cot(\chi_n)(\psi_{in}-\chi_n^2-\Lambda_1)}{\chi_n^2(\psi_{in}+\psi_p-\chi_n^2-\Lambda_1)H_n} \left(\frac{1-e^{-(\chi_n^2+\Lambda_1)\tau}}{\chi_n^2+\Lambda_1} \right)
 \end{aligned} \tag{A-5.407}$$

Donde

$$\omega = \Lambda_1 - \psi_{in} - \psi_p \tag{A-5.408}$$

O bien, haciendo el álgebra correspondiente y usando la ecuación (A-5.279) se obtiene:

$$\boxed{
 \begin{aligned}
 U_f = Bi\psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-(\chi_n^2+\Lambda_1)\tau}}{(\psi_{in}+\psi_p-\chi_n^2-\Lambda_1)\chi_n^2 H_n} & \left[1 + \chi_n \xi_c Tan(\chi_n \xi_c) + \left(\xi_c - \frac{Tan(\chi_n \xi_c)}{\chi_n} \right) \chi_n Cot(\chi_n) \right] \\
 & \left\{ \chi_n^2 \left(U_{f0} + \psi_{in} \int_0^\tau e^{(\chi_n^2+\Lambda_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \right) + (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) \left[U_{p0} - \Lambda_2 \left(\frac{e^{(\chi_n^2+\Lambda_1)\tau} - 1}{\chi_n^2 + \Lambda_1} \right) \right] \right\}
 \end{aligned}
 }$$

$$\tag{A-5.409}$$

A-5.6.- Concentraciones promedio en la partícula

A-5.6.1.- Sin frente de agotamiento:

En este caso la concentración promedio está definida por:

$$\langle U_p \rangle = 3 \int_0^1 U_p \xi^2 d\xi \quad (\text{A-5.410})$$

Aplicando el operador anterior a (A-5.66) :

$$\langle U_p \rangle = 3Bi \sum_{n=1}^{\infty} \left[1 - \mu_n \text{Cot}(\mu_n) \right] \frac{e^{-(\mu_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{\mu_n^2 D_n} \left\{ U_{f0} + \psi_{in} I_{in}(\tau) + \frac{(\mu_n^2 + \Lambda_1 - \psi_{in})}{\mu_n^2} \left[\Lambda_2 \left(\frac{e^{(\Lambda_1 + \mu_n^2)\tau} - 1}{\Lambda_1 + \mu_n^2} \right) - U_{p0} \right] \right\} \quad (\text{A-5.411})$$

A-5.6.2.- Con frente de agotamiento:

En este caso la concentración promedio se define como:

$$\langle U_p \rangle = 3 \int_{\xi_c}^1 U_p \xi^2 d\xi \quad (\text{A-5.412})$$

Aplicando este operador a (A-5.259):

$$\langle U_p \rangle = 3Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{\chi_n H_n \text{Sen}(\chi_n)} \left[\frac{(1 + \chi_n \xi_c \text{Tan}(\chi_n \xi_c)) \left(-\frac{\text{Cos}(\chi_n)}{\chi_n} + \frac{\text{Sen}(\chi_n)}{\chi_n^2} \right)}{\left(\xi_c - \frac{\text{Tan}(\chi_n \xi_c)}{\chi_n} \right) \left(\frac{\text{Sen}(\chi_n)}{\chi_n} + \frac{\text{Cos}(\chi_n)}{\chi_n^2} \right)} \right] \left(\chi_n^2 \left[\psi_{in} \int_0^\tau U_{in}(\beta) e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\beta} d\beta + U_{f0} \right] + (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1) \left[U_{p0} - \Lambda_2 \left(\frac{e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} - 1}{\chi_n^2 + \Lambda_1} \right) \right] \right) \quad (\text{A-5.413})$$

A-5.7.- Demostración de la equivalencia de las soluciones.

Cuando $\xi_c = 0$, las constantes de la solución adquieren los siguientes valores:

$$F_n = (\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)(Bi - 1) - \psi_p = B_n \quad (A-5.414)$$

$$G_n = \psi_{in} + \psi_p - \chi_n^2 - \Lambda_1 = A_n \quad (A-5.415)$$

$$F_n' = Bi - 1 \quad (A-5.416)$$

$$G_n' = 1 \quad (A-5.417)$$

$$H_n = Bi - 1 - \frac{F_n}{G_n} + \frac{F_n}{2\chi_n^2} \left(1 + \frac{F_n}{G_n} \right) + \frac{G_n}{2} = D_n \quad (A-5.418)$$

Por lo que las raíces que se obtienen son las mismas, pues es la misma ecuación; bajo estas condiciones la ecuación (A-5.259) se transforma en:

$$U_p = Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{H_n \text{Sen}(\chi_n)} \frac{\text{Sen}(\chi_n \xi)}{\xi} \left(U_{f0} + \psi_{in} \int_0^{\tau} U_{in}(\beta) e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\beta} d\beta + \frac{(\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)}{\chi_n^2} \left[U_{p0} - \Lambda_2 \left(\frac{e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} - 1}{\chi_n^2 + \Lambda_1} \right) \right] \right) \quad (A-5.419)$$

La cual es equivalente a (A-5.66). De la misma forma, (A-5.409) se reduce a:

$$U_f = Bi \psi_p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{G_n H_n} \left\{ U_{f0} + \psi_{in} \int_0^{\tau} e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\beta} U_{in}(\beta) d\beta + \frac{(\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)}{\chi_n^2} \left[U_{p0} - \Lambda_2 \left(\frac{e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} - 1}{\chi_n^2 + \Lambda_1} \right) \right] \right\} \quad (A-5.420)$$

La cual es equivalente a (A-5.125). Por último (A-5.413) se reduce a:

$$\langle U_p \rangle = 3Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau}}{\chi_n^2 H_n} (1 - \chi_n \text{Cot}(\chi_n)) \left(U_{f0} + \psi_{in} \int_0^{\tau} U_{in}(\beta) e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\beta} d\beta + \frac{(\psi_{in} - \chi_n^2 - \Lambda_1)}{\chi_n^2} \left[U_{p0} - \Lambda_2 \left(\frac{e^{(\chi_n^2 + \Lambda_1)\tau} - 1}{\chi_n^2 + \Lambda_1} \right) \right] \right) \quad (A-5.421)$$

La cual es equivalente a (A-5.411).

Apéndice A-6:

Solución aproximada en estado transitorio usando la idea de Capa Límite

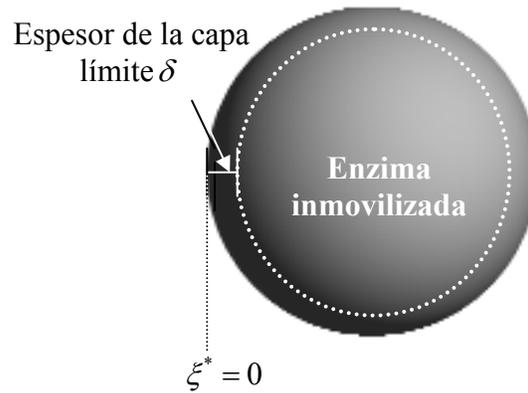


Figura A-6.1.- Ubicación de la capa límite en la partícula.

A-6.1.- Planteamiento del problema

El problema está definido por las siguientes ecuaciones:

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{(1-\xi^*)^2} \frac{\partial}{\partial \xi^*} \left((1-\xi^*)^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi^*} \right) - \Lambda_1 U_p - \Lambda_2 \quad (\text{A-6.1})$$

$$\frac{dU_f}{d\tau} = \psi_{in} (U_{in}(\tau) - U_f) + \psi_p (U_p|_{\xi=0} - U_f) \quad (\text{A-6.2})$$

Con condiciones de frontera e inicial:

$$\text{En } \xi^* = 0 \quad \left. \frac{\partial U_p}{\partial \xi^*} \right|_{\xi^*=0} = Bi \left(U_p \Big|_{\xi^*=0} - U_f \right) \quad (\text{A-6.3})$$

$$\text{En } 0 \leq \xi^* \leq \Delta \quad U_p \text{ está definida} \quad (\text{A-6.4})$$

$$\text{Cuando } \tau = 0, \quad U_f = U_{f0}, \quad U_p = U_{p0} \quad (\text{A-6.5})$$

En estas ecuaciones se usó, $\xi^* = 1 - \xi$, siendo ξ la coordenada radial adimensional medida desde el centro de la partícula; de esta forma $\xi^* = 0$ ubica la superficie de la partícula y Δ es el espesor adimensional de la capa límite ($\Delta = \delta / r_p$).

A-6.2.- Solución propuesta

Para resolver el problema en la partícula, en forma aproximada, se propone el siguiente polinomio:

$$U_p = a_0 + a_1 \eta + a_2 \eta^2 \quad (\text{A-6.6})$$

donde,

$$\eta = \frac{r^*}{\delta} = \frac{\xi^*}{\Delta} \quad (\text{A-6.7})$$

por lo que las condiciones de frontera pueden escribirse como,

$$\text{En } \eta = 0, \quad \frac{a_1}{\Delta} = Bi (a_0 - U_f) \quad (\text{A-6.8})$$

$$\text{En } \eta = 1, \quad a_0 + a_1 + a_2 = 0 \quad (\text{A-6.9})$$

$$\text{En } \eta = 1, \quad a_1 + 2a_2 = 0 \quad (\text{A-6.10})$$

Las condiciones (A-6.9) y (A-6.10) vienen de suponer que la concentración y el flux son nulos en la capa límite, de manera similar al caso del radio crítico; esta manera de plantear la solución del problema en la partícula es similar a la expuesta por Ochoa Tapia (2003).

De estas tres ecuaciones se obtienen,

$$a_0 = \frac{\Delta Bi U_f}{2 + \Delta Bi}, a_1 = -\frac{2 Bi U_f \Delta}{2 + \Delta Bi}, a_2 = \frac{Bi U_f \Delta}{2 + \Delta Bi} \quad (\text{A-6.11})$$

por lo que,

$$\boxed{U_p = \frac{Bi U_f \Delta (1 - \eta)^2}{2 + \Delta Bi}} \quad (\text{A-6.12})$$

A-6.3.- Ecuación de cambio de la capa límite con el tiempo.

Las derivadas de esta última ecuación son:

$$\frac{dU_p}{d\eta} = -\frac{2 Bi U_f \Delta (1 - \eta)}{2 + \Delta Bi} \quad (\text{A-6.13})$$

$$\frac{d^2 U_p}{d\eta^2} = \frac{2 Bi U_f \Delta}{2 + \Delta Bi} \quad (\text{A-6.14})$$

además,

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = -\frac{\xi}{\Delta^2} \frac{d\Delta}{d\tau} \frac{dU_p}{d\eta} = -\frac{\eta}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\tau} \frac{dU_p}{d\eta} \quad (\text{A-6.15})$$

$$\frac{1}{(1 - \xi^*)^2} \frac{\partial}{\partial \xi^*} \left((1 - \xi^*)^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi^*} \right) = \frac{1}{\Delta^2} \frac{d^2 U_p}{d\eta^2} - \frac{2}{(1 - \eta \Delta) \Delta} \frac{dU_p}{d\eta} \quad (\text{A-6.16})$$

Sustituyendo (A-6.15) y (A-6.16) en (A-6.1) :

$$-\frac{\eta}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\tau} \frac{dU_p}{d\eta} = \frac{1}{\Delta^2} \frac{d^2U_p}{d\eta^2} - \frac{2}{(1-\eta\Delta)\Delta} \frac{dU_p}{d\eta} - \Lambda_1 U_p - \Lambda_2 \quad (\text{A-6.17})$$

sustituyendo (A-6.12), (A-6.13) y (A-6.14) en la ecuación anterior,

$$2\eta(1-\eta)(1-\eta\Delta) \frac{d\Delta}{d\tau} = \frac{2}{\Delta} - 6\eta + 4 - \Lambda_1 \Delta (1-\eta\Delta)(1-\eta)^2 - \Lambda_2 \frac{(2+\Delta Bi)}{BiU_f} (1-\eta\Delta) \quad (\text{A-6.18})$$

integrando esta última ecuación,

$$\begin{aligned} \frac{d\Delta}{d\tau} \int_0^1 (2\eta - 2\eta^2(\Delta+1) + 2\eta^3\Delta) d\eta &= \int_0^1 \left(4 + \frac{2}{\Delta} - 6\eta \right) d\eta \\ -\Lambda_1 \Delta \int_0^1 (1-\eta(2+\Delta) + \eta^2(1+2\Delta) - \eta^3\Delta) d\eta &- \Lambda_2 \frac{(2+\Delta Bi)}{BiU_f} \int_0^1 (1-\eta\Delta) d\eta \\ \frac{d\Delta}{d\tau} (4-2\Delta) &= 12 \left(1 + \frac{2}{\Delta} \right) - \Lambda_1 \Delta (4-\Delta) - 6\Lambda_2 \frac{(2+\Delta Bi)}{BiU_f} (2-\Delta) \end{aligned}$$

o bien,

$$\frac{d\Delta}{d\tau} = \frac{6}{(2-\Delta)} \left(1 + \frac{2}{\Delta} \right) - \Lambda_1 \Delta \frac{(4-\Delta)}{(4-2\Delta)} - 3\Lambda_2 \frac{(2+\Delta Bi)}{BiU_f} \quad (\text{A-6.19})$$

para resolverla es necesario conocer la solución en la fase fluida. Es importante mencionar que esta ecuación se puede manejar en estado cuasiestacionario, obteniendo valores similares a los que se obtienen al resolver esta última ecuación cuando el tiempo es suficientemente grande.

A-6.4.- Ecuación del fluido.

Siguiendo la metodología desarrollada en el Apéndice A-4; el primer paso consiste en aplicar Transformada de Laplace a la Ecuación (A-6.2),

$$s\bar{U}_f - U_{f0} = \psi_{in} (\bar{U}_{in}(s) - \bar{U}_f) + \psi_p (\bar{U}_p|_{\xi=0} - \bar{U}_f) \quad (\text{A-6.20})$$

a partir de (A-6.12) se tiene que,

$$\bar{U}_p|_{\xi=0} = \frac{\Delta Bi \bar{U}_f}{2 + \Delta Bi} \quad (\text{A-6.21})$$

Sustituyendo (A-6.21) en (A-6.20):

$$\bar{U}_f = \frac{U_{f0}}{s + \psi_{in} + \psi_p \left(1 - \frac{\Delta Bi}{2 + \Delta Bi}\right)} + \frac{\psi_{in} \bar{U}_{in}(s)}{s + \psi_{in} + \psi_p \left(1 - \frac{\Delta Bi}{2 + \Delta Bi}\right)} \quad (\text{A-6.22})$$

Aplicando transformada inversa:

$$\boxed{U_f = e^{-(\psi_{in} + \psi_p a_3)\tau} \left[U_{f0} + \psi_{in} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p a_3)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \right]} \quad (\text{A-6.23})$$

donde,

$$a_3 = 1 - \frac{\Delta Bi}{2 + \Delta Bi} \quad (\text{A-6.24})$$

Sustituyendo (A-6.23) en (A-6.19):

$$\boxed{\frac{d\Delta}{d\tau} = \frac{6}{(2-\Delta)} \left(1 + \frac{2}{\Delta}\right) - \Lambda_1 \Delta \frac{(4-\Delta)}{(4-2\Delta)} - 3\Lambda_2 \frac{(2+\Delta Bi) e^{(\psi_{in} + \psi_p a_3)\tau}}{Bi \left[U_{f0} + \psi_{in} \int_0^\tau e^{(\psi_{in} + \psi_p a_3)\beta} U_{in}(\beta) d\beta \right]}} \quad (\text{A-6.25})$$

esta última ecuación deberá resolverse numéricamente para obtener Δ , y con éste calcular los perfiles en la partícula y en el fluido.

A-6.5.- Concentración superficial y promedio en la partícula.

Para expresar los resultados obtenidos en el sistema coordenado en que se hicieron las soluciones aproximadas del trabajo de tesis, es necesario hacer un cambio de variables, por lo que,

$$U_p = \frac{BiU_f (\xi - \xi_c)^2}{[2 + (1 - \xi_c)Bi](1 - \xi_c)} \quad (A-6.26)$$

donde $\xi = 1$ ubica la superficie de la partícula,

$$U_p \Big|_{\xi=1} = \frac{BiU_f (1 - \xi_c)^2}{[2 + (1 - \xi_c)Bi](1 - \xi_c)} \quad (A-6.27)$$

y $\xi_c = 1 - \Delta$ el radio crítico. De esta forma,

$$\frac{\partial U_p}{\partial \xi} \Big|_{\xi=1} = \frac{2BiU_f}{2 + (1 - \xi_c)Bi} \quad (A-6.28)$$

A partir de la Ecuación (A-3.37), se tiene,

$$\langle U_p \rangle = \frac{\int_{\xi_c}^1 U_p \xi^2 d\xi}{\int_0^1 \xi^2 d\xi} = \frac{3BiU_f}{[2 + (1 - \xi_c)Bi](1 - \xi_c)} \int_{\xi_c}^1 (\xi - \xi_c)^2 \xi^2 d\xi$$

resolviendo la integral,

$$\langle U_p \rangle = \frac{BiU_f (6 - 15\xi_c + 10\xi_c^2 - \xi_c^5)}{10[2 + (1 - \xi_c)Bi](1 - \xi_c)} \quad (A-6.29)$$

A-6.6.-Solución del modelo exacto en estado transitorio usando la idea de capa límite.

En este caso, se reemplaza la Ecuación (A-6.1) por:

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{(1-\xi^*)^2} \frac{\partial}{\partial \xi^*} \left((1-\xi^*)^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi^*} \right) - \Phi^2 \frac{k_2 U_p}{1+k_1 U_p} \quad (\text{A-6.30})$$

siguiendo el procedimiento anterior,

$$-\frac{\eta}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\tau} \frac{dU_p}{d\eta} = \frac{1}{\Delta^2} \frac{d^2 U_p}{d\eta^2} - \frac{2}{(1-\eta\Delta)\Delta} \frac{dU_p}{d\eta} - \Phi^2 \frac{k_2 U_p}{1+k_1 U_p} \quad (\text{A-6.31})$$

sustituyendo en (A-6.31) las ecuaciones (A-6.12), (A-6.13) y (A-6.14):

$$2\eta(1-\eta)(1-\eta\Delta) \frac{d\Delta}{d\tau} = \frac{2}{\Delta} - 6\eta + 4 - \frac{\Phi^2 k_2 \Delta (1-\eta)^2 (1-\eta\Delta)}{1 + \frac{k_1 Bi U_f \Delta (1-\eta)^2}{2 + \Delta Bi}} \quad (\text{A-6.32})$$

para simplificar se definen,

$$a = \Phi^2 k_2 \Delta, \quad b = \frac{k_1 Bi U_f \Delta}{2 + \Delta Bi} \quad (\text{A-6.33})$$

integrando (A-6.32) desde $\eta = 0$ hasta 1:

$$\frac{d\Delta}{d\tau} = \frac{6}{(2-\Delta)} \left\{ \frac{2}{\Delta} + 1 - \frac{a}{b} \left[1 - \frac{\Delta}{2} - \frac{\Delta}{2b} \ln|b+1| + \frac{(\Delta-1)}{\sqrt{b}} \text{Tan}^{-1}(\sqrt{b}) \right] \right\} \quad (\text{A-6.34})$$

la solución para el fluido no cambia, por lo que el único cambio radica en la ecuación a resolver numéricamente. Sin embargo, al incorporar esta modificación los resultados no se vieron afectados significativamente.

Apéndice B-1:

Solución numérica en estado estacionario

El sistema de ecuaciones que se desean resolver son:

Para la partícula:

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{dU_p}{d\xi} \right) = \frac{\Phi^2 k_2 U_p}{1 + k_1 U_p} \quad (\text{B-1.1})$$

Para el fluido:

$$\psi_{in} (U_{in}(\tau) - U_f) + \psi_p (U_p|_{\xi=1} - U_f) = 0 \quad (\text{B-1.2})$$

Con condiciones de frontera:

$$\text{En } \xi=1 \quad -\frac{dU_p}{d\xi} = Bi (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (\text{B-1.3})$$

$$\text{En } 0 \leq \xi \leq 1 \quad U_p \text{ está definida} \quad (\text{B-1.4})$$

Primeramente se desarrollará la derivada de (B-1.1):

$$\frac{d^2 U_p}{d\xi^2} + \frac{2}{\xi} \frac{dU_p}{d\xi} = \frac{\Phi^2 k_2 U_p}{1 + k_1 U_p} \quad (\text{B-1.5})$$

Definiendo:

$$\frac{dU_p}{d\xi} = P \quad (\text{B-1.6})$$

Sustituyendo (B-1.6) en (B-1.5):

$$\frac{dP}{d\xi} = \frac{\Phi^2 k_2 U_p}{1 + k_1 U_p} - \frac{2}{\xi} P \quad (\text{B-1.7})$$

Tomando en cuenta la condición de (B-1.4), se puede decir que,

$$\text{En } \xi=0 \quad P=0 \quad (\text{B-1.8})$$

Ya que U_p tiene un valor constante, físicamente esto equivale a decir que el flux es cero en el centro de la partícula.

Sin embargo no se conoce el valor de U_p en el $\xi=0$, por lo que el algoritmo de solución debe ser de tipo iterativo de tal forma que se cumpla (B-1.3). Escrita en términos de P (B-1.3) es:

$$\text{En } \xi=1 \quad P + Bi \left(U_p \Big|_{\xi=1} - U_f \right) = 0 \quad (\text{B-1.9})$$

Sin embargo aún está en función de U_f , por lo que se necesita su solución, la cual se obtiene de (B-1.2):

$$U_f = \frac{\psi_{in} U_{in}(\tau) + \psi_p U_p \Big|_{\xi=1}}{\psi_{in} + \psi_p} \quad (\text{B-1.10})$$

Sustituyendo (B-1.10) en (B-1.9):

$$\text{En } \xi=1 \quad P + Bi \psi_{in} \left(\frac{U_p \Big|_{\xi=1} - U_{in}(\tau)}{\psi_{in} + \psi_p} \right) = 0 \quad (\text{B-1.11})$$

Dentro del proceso iterativo del algoritmo, va a ser necesario corregir los valores propuestos para U_p en $\xi=0$, por lo que se usará el método de Newton para obtener la nueva alternativa de solución. Para ello se definirá:

$$f(\xi) = P + Bi\psi_{in} \left(\frac{U_p|_{\xi=1} - U_{in}(\tau)}{\psi_{in} + \psi_p} \right) \quad (\text{B-1.12})$$

Cuya derivada es:

$$\frac{df(\xi)}{d\xi} = \frac{dP}{d\xi} = \frac{\Phi^2 k_2 U_p|_{\xi=1}}{1 + k_1 U_p|_{\xi=1}} - 2P|_{\xi=1} \quad (\text{B-1.13})$$

De ésta forma la ecuación que se usará es:

$$U_p \text{ nueva}|_{\xi=0} = U_p \text{ anterior}|_{\xi=0} - \frac{f(\xi)}{f'(\xi)} \quad (\text{B-1.14})$$

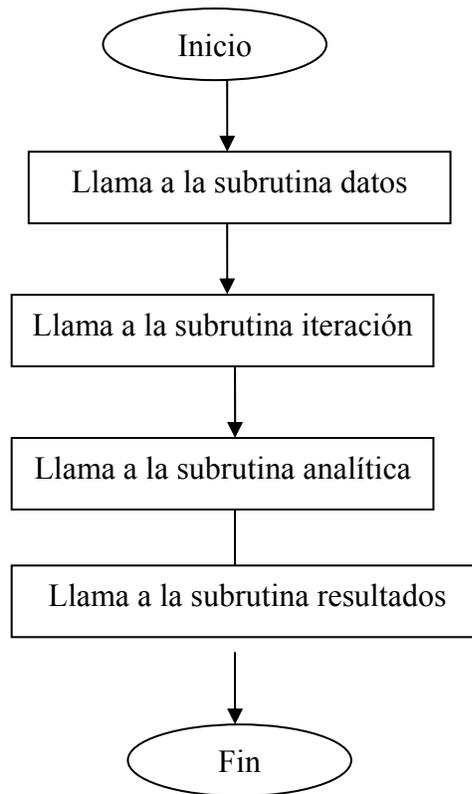
Para resolver (B-1.6) y (B-1.7) se empleará el método de Runge-Kutta de cuarto orden.

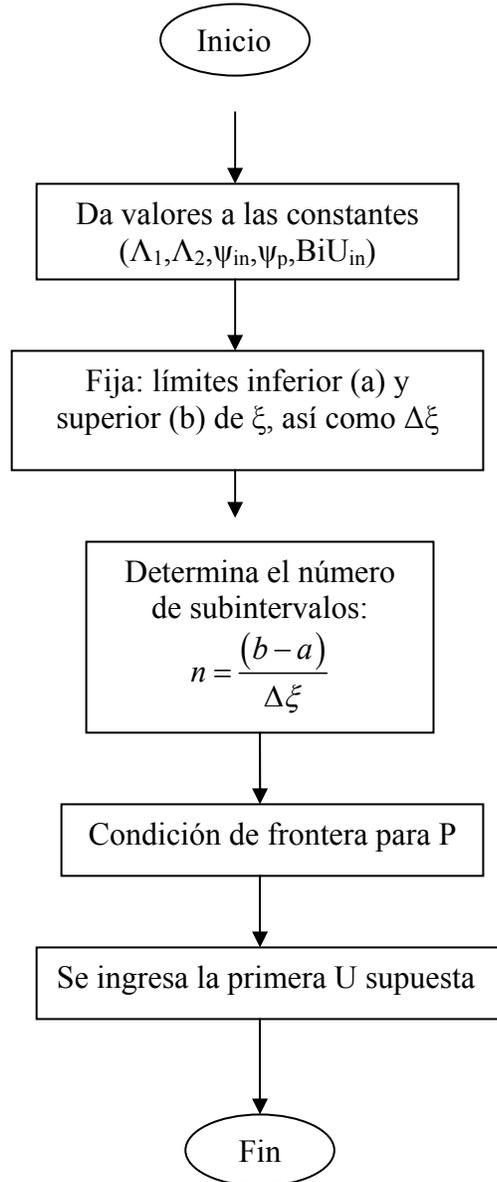
A continuación se mostrará por medio de diagramas de flujo el funcionamiento del programa que compara la solución numérica con:

$$U_p = \frac{Bi\psi_{in}A}{\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}} \frac{\text{Senh}\sqrt{\Lambda_1}\xi}{\xi} - \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1} \quad (\text{B-1.15})$$

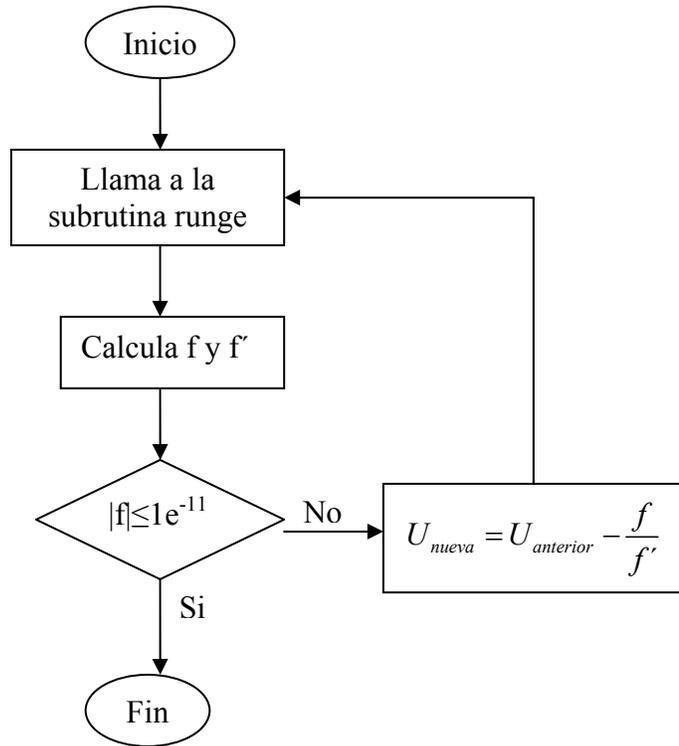
Donde:

$$A = \frac{U_{in}(\tau) + \frac{\Lambda_2}{\Lambda_1}}{\psi_{in}Bi + (\psi_{in} + \psi_p)(\sqrt{\Lambda_1} \text{Coth}\sqrt{\Lambda_1} - 1)} \quad (\text{B-1.16})$$

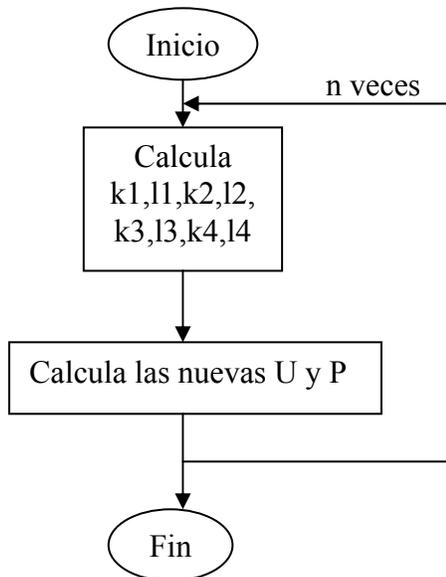
B-1.1.- Diagrama de flujo del programa

Subrutina datos

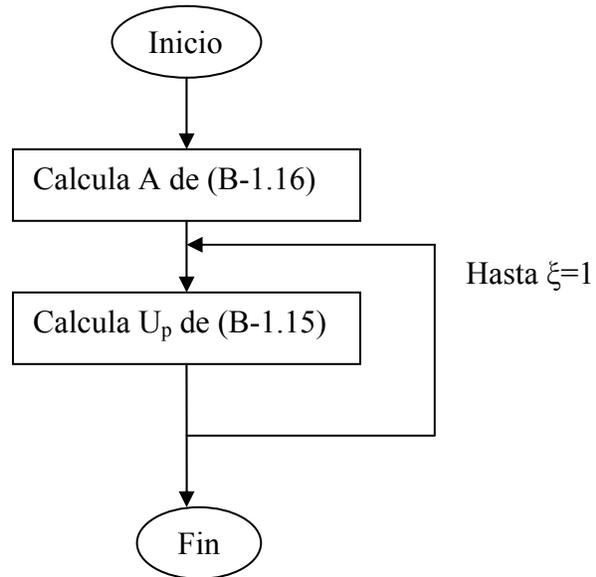
Subrutina iteración:



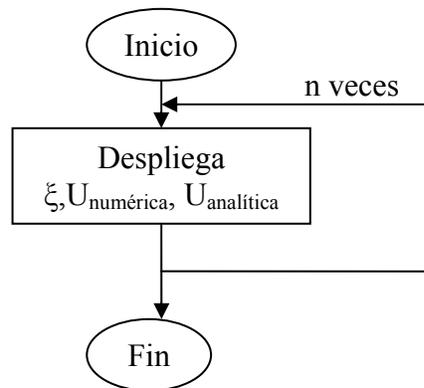
Subrutina runge



Subrutina analítica



Subrutina resultados



Apéndice B-2

Solución numérica en estado transitorio

El sistema que se desea resolver es:

Fase sólida:

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 \frac{k_2 U_p}{1 + k_1 U_p} \quad (\text{B-2.1})$$

Fase fluida:

$$\frac{dU_f}{d\tau} = \psi_{in} (U_{in}(\tau) - U_f) + \psi_p (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (\text{B-2.2})$$

con condiciones de frontera e iniciales:

$$\text{En } \xi = 1 \quad -\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = Bi (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad (\text{B-2.3})$$

$$\text{En } \xi = 0 \quad \frac{\partial U_p}{\partial \xi} = 0 \quad (\text{B-2.4})$$

$$\text{Cuando } \tau = 0 \quad U_f = U_{f_0} \quad (\text{B-2.5})$$

$$U_p = U_{p_0} \quad (\text{B-2.6})$$

B-2.1.- Fase sólida

Consideremos la siguiente expansión en series de Taylor:

$$U_p \left(\tau + \frac{\Delta \tau}{2} \right) = U_p(\tau) + \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \frac{\Delta \tau}{2} + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 U_p}{\partial \tau^2} \left(\frac{\Delta \tau}{2} \right)^2 + \dots \quad (\text{B-2.7})$$

$$U_p \left(\tau - \frac{\Delta \tau}{2} \right) = U_p(\tau) - \frac{\partial U_p}{\partial \tau} \frac{\Delta \tau}{2} + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 U_p}{\partial \tau^2} \left(\frac{\Delta \tau}{2} \right)^2 - \dots \quad (\text{B-2.8})$$

restando (B-2.7) y (B-2.8):

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{U_p\left(\tau + \frac{\Delta\tau}{2}\right) - U_p\left(\tau - \frac{\Delta\tau}{2}\right)}{\Delta\tau} + \mathcal{O}(\Delta\tau)^2 \quad (\text{B-2.9})$$

o bien,

$$\left(\frac{\partial U_p}{\partial \tau}\right)_i^k = \frac{U_{pi}^{k+1/2} - U_{pi}^{k-1/2}}{\Delta\tau} + \mathcal{O}(\Delta\tau)^2 \quad (\text{B-2.10})$$

entonces,

$$\left(\frac{\partial U_p}{\partial \tau}\right)_i^{k+1/2} = \frac{U_{pi}^{k+1} - U_{pi}^k}{\Delta\tau} + \mathcal{O}(\Delta\tau)^2 \approx \frac{\Delta U_{pi}^{k+1}}{\Delta\tau} \quad (\text{B-2.11})$$

entonces, la ecuación (B-2.1) se puede escribir como

$$\left(\frac{\partial U_p}{\partial \tau}\right)_i^{k+1/2} = \left[\frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 \frac{k_2 U_p}{1 + k_1 U_p} \right]_i^{k+1/2} \quad (\text{B-2.12})$$

el lado derecho de la anterior puede aproximarse como

$$\left(\frac{\partial U_p}{\partial \tau}\right)_i^{k+1/2} = \frac{1}{2} \left\{ \begin{aligned} & \left[\frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 \frac{k_2 U_p}{1 + k_1 U_p} \right]_i^k \\ & + \left[\frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 \frac{k_2 U_p}{1 + k_1 U_p} \right]_i^{k+1} \end{aligned} \right\} \quad (\text{B-2.13})$$

o bien,

$$\left(\frac{\partial U_p}{\partial \tau}\right)_i^{k+1/2} = (1-\lambda) \left[\frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 \frac{k_2 U_p}{1 + k_1 U_p} \right]_i^k + \lambda \left[\frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 k_2 \frac{U_p}{1 + k_1 U_p} \right]_i^{k+1} \quad (\text{B-2.14a})$$

donde si,

$\lambda = 0$, el método es el explícito

$\lambda = 1$, el método es completamente implícito

$\lambda = 1/2$, el método es de Cranck Nicholson

Ahora se linealizarán los términos no lineales de (B-2.14) por el método de linealización de Ritchmeyer el cual usa series de Taylor. Comenzaremos con el término

$$\left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi}\right)_i^{k+1} \approx \left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi}\right)_i^k + \Delta\tau \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi}\right)_i^k\right] = \left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi}\right)_i^k + \Delta\tau \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial U_p}{\partial \tau}\right)_i^k\right] \quad (\text{B-2.14b})$$

Por otro lado, la derivada hacia adelante respecto al tiempo de U_p se puede escribir como,

$$\left(\frac{\partial U_p}{\partial \tau}\right)_i^k = \frac{U_{pi}^{k+1} - U_{pi}^k}{\Delta\tau} = \frac{\Delta U_{pi}^{k+1}}{\Delta\tau} \quad (\text{B-2.15})$$

sustituyendo (B-2.15) en (B-2.14b):

$$\left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi}\right)_i^{k+1} = \left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi}\right)_i^k + \frac{\partial \Delta U_{pi}^{k+1}}{\partial \xi} \quad (\text{B-2.16})$$

Sustituyendo (B-2.16) en (B-2.14a):

$$\left(\frac{\partial U_p}{\partial \tau}\right)_i^{k+1/2} = (1-\lambda)T_1 - \Phi^2(1-\lambda) \left[\frac{k_2 U_p}{1+k_1 U_p}\right]_i^k + \lambda T_1 + \lambda T_2 - \Phi^2 \lambda \left[\frac{k_2 U_p}{1+k_1 U_p}\right]_i^{k+1}$$

o bien

$$\left(\frac{\partial U_p}{\partial \tau}\right)_i^{k+1/2} = T_1 - \Phi^2(1-\lambda) \left[\frac{k_2 U_p}{1+k_1 U_p}\right]_i^k + \lambda T_2 - \Phi^2 \lambda \left[\frac{k_2 U_p}{1+k_1 U_p}\right]_i^{k+1} \quad (\text{B-2.17})$$

Donde:

$$T_1 = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right)_i^k \quad (\text{B-2.18})$$

$$T_2 = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial \Delta U_{pi}^{k+1}}{\partial \xi} \right) \quad (\text{B-2.19})$$

Ahora se trabajará con cada término,

$$T_1 = \frac{1}{\xi^2} \frac{\left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right)_{i+1/2}^k - \left(\xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right)_{i-1/2}^k}{\Delta \xi} \quad (\text{B-2.20})$$

$$= \frac{1}{\xi^2} \frac{\left(\xi^2 \right)_{i+1/2}^k \left(U_{p_{i+1}}^k - U_{p_i}^k \right) - \left(\xi^2 \right)_{i-1/2}^k \left(U_{p_i}^k - U_{p_{i-1}}^k \right)}{(\Delta \xi)^2}$$

de la misma forma,

$$T_2 = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi^2 \frac{\partial \Delta U_{pi}^{k+1}}{\partial \xi} \right) = \frac{1}{\xi^2} \frac{\left(\xi^2 \right)_{i+1/2}^k \left(\Delta U_{p_{i+1}}^{k+1} - \Delta U_{p_i}^{k+1} \right) - \left(\xi^2 \right)_{i-1/2}^k \left(\Delta U_{p_i}^{k+1} - \Delta U_{p_{i-1}}^{k+1} \right)}{(\Delta \xi)^2} \quad (\text{B-2.21})$$

El término de reacción no es lineal, por lo que es necesario linealizarlo, para ello definimos,

$$g = \frac{k_2 U_p}{1 + k_1 U_p} \quad (\text{B-2.22})$$

por lo que,

$$g_i^{k+1} = g_i^k + \Delta \tau \left(\frac{\partial g}{\partial \tau} \right)_i^k = g_i^k + \Delta \tau \left(\frac{\partial g}{\partial U_p} \right)_i^k \left(\frac{\partial U_p}{\partial \tau} \right)_i^k \quad (\text{B-2.23})$$

Sustituyendo (B-2.15):

$$g_i^{k+1} = g_i^k + \left(\frac{\partial g}{\partial U_p} \right)_i^k \Delta U_{pi}^{k+1} \quad (\text{B-2.24})$$

sustituyendo (B-2.24) y (B-2.11) en (B-2.17):

$$\frac{\Delta U_{pi}^{k+1}}{\Delta \tau} = T_1 - \Phi^2 g_i^k + \lambda T_2 - \Phi^2 \lambda \left(\frac{\partial g}{\partial U_p} \right)_i^k \Delta U_{pi}^{k+1} \quad (\text{B-2.25})$$

Sustituyendo (B-2.20) y (B-2.21) en (B-2.25):

$$\begin{aligned} \frac{\Delta U_{pi}^{k+1}}{\Delta \tau} &= \frac{1}{\xi^2} \frac{(\xi^2)_{i+1/2}^k (U_{pi+1}^k - U_{pi}^k) - (\xi^2)_{i-1/2}^k (U_{pi}^k - U_{pi-1}^k)}{(\Delta \xi)^2} - \Phi^2 g_i^k \\ &+ \lambda \frac{1}{\xi^2} \frac{(\xi^2)_{i+1/2}^k (\Delta U_{pi+1}^{k+1} - \Delta U_{pi}^{k+1}) - (\xi^2)_{i-1/2}^k (\Delta U_{pi}^{k+1} - \Delta U_{pi-1}^{k+1})}{(\Delta \xi)^2} - \Phi^2 \lambda \left(\frac{\partial g}{\partial U_p} \right)_i^k \Delta U_{pi}^{k+1} \end{aligned} \quad (\text{B-2.26})$$

Multiplicando por $\Delta \tau$:

$$\begin{aligned} \Delta U_{pi}^{k+1} &= \frac{r}{\xi^2} \left[(\xi^2)_{i+1/2}^k (U_{pi+1}^k - U_{pi}^k) - (\xi^2)_{i-1/2}^k (U_{pi}^k - U_{pi-1}^k) \right] - \Phi^2 \Delta \tau g_i^k \\ &+ \lambda \frac{r}{\xi^2} \left[(\xi^2)_{i+1/2}^k (\Delta U_{pi+1}^{k+1} - \Delta U_{pi}^{k+1}) - (\xi^2)_{i-1/2}^k (\Delta U_{pi}^{k+1} - \Delta U_{pi-1}^{k+1}) \right] - \Phi^2 \lambda \Delta \tau \left(\frac{\partial g}{\partial U_p} \right)_i^k \Delta U_{pi}^{k+1} \end{aligned} \quad (\text{B-2.27})$$

donde

$$r = \frac{\Delta \tau}{(\Delta \xi)^2} \quad (\text{B-2.28})$$

Rearreglando (B-2.27):

$$\begin{aligned} -\lambda \frac{r}{\xi^2} (\xi^2)_{i-1/2}^k \Delta U_{pi-1}^{k+1} + \Delta U_{pi}^{k+1} \left[1 + \Phi^2 \lambda \Delta \tau \left(\frac{\partial g}{\partial U_p} \right)_i^k + \lambda \frac{r}{\xi^2} \left((\xi^2)_{i+1/2}^k + (\xi^2)_{i-1/2}^k \right) \right] - \lambda \frac{r}{\xi^2} (\xi^2)_{i+1/2}^k \Delta U_{pi+1}^{k+1} = \\ \frac{r}{\xi^2} \left[(\xi^2)_{i+1/2}^k (U_{pi+1}^k - U_{pi}^k) - (\xi^2)_{i-1/2}^k (U_{pi}^k - U_{pi-1}^k) \right] - \Phi^2 \Delta \tau g_i^k \end{aligned} \quad (\text{B-2.29})$$

Para simplificar la ecuación anterior se definen:

$$A_i^k = -\lambda \frac{r}{\xi^2} (\xi^2)_{i-1/2}^k \quad (\text{B-2.30})$$

$$B_i^k = 1 + \Phi^2 \lambda \Delta \tau \left(\frac{\partial g}{\partial U_p} \right)_i^k + \lambda \frac{r}{\xi^2} \left((\xi^2)_{i+1/2}^k + (\xi^2)_{i-1/2}^k \right) \quad (\text{B-2.31})$$

$$C_i^k = -\lambda \frac{r}{\xi^2} (\xi^2)_{i+1/2}^k \quad (\text{B-2.32})$$

$$D_i^k = \frac{r}{\xi^2} \left[\left(\xi^2 \right)_{i+1/2}^k \left(U_{p_{i+1}}^k - U_{p_i}^k \right) - \left(\xi^2 \right)_{i-1/2}^k \left(U_{p_i}^k - U_{p_{i-1}}^k \right) \right] - \Phi^2 \Delta \tau g_i^k \quad (\text{B-2.33})$$

de esta forma,

$$\boxed{A_i^k \Delta U_{p_{i-1}}^{k+1} + B_i^k \Delta U_{p_i}^{k+1} + C_i^k \Delta U_{p_{i+1}}^{k+1} = D_i^k} \quad (\text{B-2.34})$$

Estas ecuaciones son válidas para $2 \leq i \leq NP - 1$, donde NP es el número de puntos en la dirección ξ . Lo que sigue ahora es tratar con las condiciones de frontera.

B-2.2.- Condición de frontera en la interfase

Comenzaremos por escribir (B-2.3) como:

$$-\left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right)_{NP}^{k+1} = (BiU_p)_{NP}^{k+1} - (BiU_f)_{NP}^{k+1} \quad (\text{B-2.35})$$

linealizando el término del lado izquierdo:

$$\left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right)_{NP}^{k+1} = \left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right)_{NP}^k + \Delta \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \left[\left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right)_{NP}^k \right] = \left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right)_{NP}^k + \Delta \tau \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial U_p}{\partial \tau} \right)_{NP}^k \quad (\text{B-2.36})$$

Sustituyendo (B-2.15) para $i=NP$,

$$\left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right)_{NP}^{k+1} = \left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right)_{NP}^k + \frac{\partial (\Delta U_p)_{NP}^{k+1}}{\partial \xi} \quad (\text{B-2.37})$$

linealizando los otros dos términos de (B-2.35):

$$(BiU_p)_{NP}^{k+1} = Bi(U_p)_{NP}^k + Bi(\Delta U_p)_{NP}^{k+1} \quad (\text{B-2.38})$$

$$(BiU_f)_{NP}^{k+1} = Bi(U_f)_{NP}^k + Bi(\Delta U_f)_{NP}^{k+1} \quad (\text{B-2.39})$$

Sustituyendo (B-2.37), (B-2.38) y (B-2.39) en (B-2.35):

$$-\left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi}\right)_{NP}^k - \frac{\partial (\Delta U_p)_{NP}^{k+1}}{\partial \xi} = Bi(U_p)_{NP}^k + Bi(\Delta U_p)_{NP}^{k+1} - Bi(U_f)_{NP}^k - Bi(\Delta U_f)_{NP}^{k+1} \quad (\text{B-2.40})$$

y dado que (B-2.35) es válida tanto para k como para $k+1$, se tiene entonces:

$$-\frac{\partial (\Delta U_p)_{NP}^{k+1}}{\partial \xi} = Bi(\Delta U_p)_{NP}^{k+1} - Bi(\Delta U_f)_{NP}^{k+1} \quad (\text{B-2.41})$$

Sin embargo,

$$\frac{\partial (\Delta U_p)_{NP}^{k+1}}{\partial \xi} \approx \frac{(\Delta U_p)_{NP}^{k+1} - (\Delta U_p)_{NP-1}^{k+1}}{\Delta \xi} \quad (\text{B-2.42})$$

por lo que

$$-(\Delta U_p)_{NP-1}^{k+1} + (Bi\Delta\xi + 1)(\Delta U_p)_{NP}^{k+1} - Bi\Delta\xi(\Delta U_p)_{NP+1}^{k+1} = 0 \quad (\text{B-2.43})$$

Aquí se usó $(U_f)_{NP} = (U_p)_{NP+1}$.

Para simplificar se definen:

$$A_{NP}^k = -1 \quad (\text{B-2.44})$$

$$B_{NP}^k = Bi\Delta\xi + 1 \quad (\text{B-2.45})$$

$$C_{NP}^k = -Bi\Delta\xi \quad (\text{B-2.46})$$

$$D_{NP}^k = 0 \quad (\text{B-2.47})$$

por lo que,

$$\boxed{A_{NP}^k (\Delta U_p)_{NP-1}^{k+1} + B_{NP}^k (\Delta U_p)_{NP}^{k+1} + C_{NP}^k (\Delta U_p)_{NP+1}^{k+1} = D_{NP}^k} \quad (\text{B-2.48})$$

ahora se trabajará la otra condición de frontera,

B-2.3.- Condición de frontera en el centro de la partícula

La ecuación (B-2.4) se puede escribir como:

$$\left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi}\right)_i^{k+1} = 0 \quad (\text{B-2.49})$$

expandiendo en series de Taylor:

$$\left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi}\right)_i^{k+1} = \left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi}\right)_i^k + \Delta \tau \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial U_p}{\partial \tau}\right)_i^k = \left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi}\right)_i^k + \frac{\partial}{\partial \xi} (\Delta U_p)_i^{k+1} \quad (\text{B-2.50})$$

sustituyendo (B-2.50) en (B-2.49):

$$\left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi}\right)_i^k + \frac{\partial}{\partial \xi} (\Delta U_p)_i^{k+1} = 0 \quad (\text{B-2.51})$$

de la misma forma que en el caso anterior, la ecuación (B-2.49) es válida tanto en k como en $k+1$, por lo que:

$$\frac{\partial}{\partial \xi} (\Delta U_p)_i^{k+1} = 0 \quad (\text{B-2.52})$$

sin embargo,

$$\frac{\partial (\Delta U_p)_i^{k+1}}{\partial \xi} \approx \frac{(\Delta U_p)_{i+1}^{k+1} - (\Delta U_p)_i^{k+1}}{\Delta \xi} \quad (\text{B-2.53})$$

por lo que,

$$-(\Delta U_p)_1^{k+1} + (\Delta U_p)_2^{k+1} = 0 \quad (\text{B-2.54})$$

lo anterior se debe a que esta condición corresponde al punto $i=1$. Al igual que en los dos casos anteriores, se puede escribir como:

$$\boxed{B_1^k (\Delta U_p)_1^{k+1} + C_1^k (\Delta U_p)_2^{k+1} = D_1^k} \quad (\text{B-2.55})$$

donde

$$B_1^k = -1 \quad (\text{B-2.56})$$

$$C_1^k = 1 \quad (\text{B-2.57})$$

$$D_1^k = 0 \quad (\text{B-2.58})$$

la única parte faltante es la ecuación del fluido.

B-2.4.- Fase Fluida

Comenzaremos por escribir la ecuación (B-2.2) como:

$$\left(\frac{dU_f}{d\tau} \right)_i^{k+1/2} = (\psi_{in} U_{in}(\tau))_i^{k+1/2} + \left[\psi_p U_p \Big|_{\xi=1} - (\psi_{in} + \psi_p) U_f \right]_i^{k+1/2} \quad (\text{B-2.59})$$

o bien, en forma aproximada

$$\begin{aligned} \left(\frac{dU_{pNP+1}}{d\tau} \right)_i^{k+1/2} &= (\psi_{in} U_{in})_i^{k+1/2} + (1-\lambda) \left[\psi_p U_{pNP} - (\psi_{in} + \psi_p) U_{pNP+1} \right]_i^k \\ &+ \lambda \left[\psi_p U_{pNP} - (\psi_{in} + \psi_p) U_{pNP+1} \right]_i^{k+1} \end{aligned} \quad (\text{B-2.60})$$

para el término del lado izquierdo:

$$\left(\frac{\partial U_{pNP+1}}{\partial \tau} \right)_i^{k+1/2} = \frac{U_{pNP+1}^{k+1} - U_{pNP+1}^k}{\Delta \tau} + Q(\Delta \tau)^2 \approx \frac{\Delta U_{pNP+1}^{k+1}}{\Delta \tau} \quad (\text{B-2.61})$$

por lo que:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta U_{pNP+1}^{k+1}}{\Delta \tau} &= (\psi_{in} U_{in})^{k+1/2} + (1-\lambda) \left[\psi_p U_{pNP} - (\psi_{in} + \psi_p) U_{pNP+1} \right]^k \\ &\quad + \lambda \left[\psi_p U_{pNP} - (\psi_{in} + \psi_p) U_{pNP+1} \right]^{k+1} \end{aligned} \quad (\text{B-2.62})$$

Es necesario linealizar los términos del instante $k+1$, alrededor de k :

$$(\psi_p U_{pNP})^{k+1} = (\psi_p U_{pNP})^k + \Delta \tau \psi_p \frac{\partial (U_{pNP})^k}{\partial \tau} = (\psi_p U_{pNP})^k + \psi_p \Delta U_{pNP}^{k+1} \quad (\text{B-2.63})$$

$$\left[(\psi_{in} + \psi_p) U_{pNP+1} \right]^{k+1} = \left[(\psi_{in} + \psi_p) U_{pNP+1} \right]^k + (\psi_{in} + \psi_p) (\Delta U_p)_{NP+1}^{k+1} \quad (\text{B-2.64})$$

por lo que:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta U_{pNP+1}^{k+1}}{\Delta \tau} &= (\psi_{in} U_{in})^{k+1/2} + (\psi_p U_{pNP})^k - \left[(\psi_{in} + \psi_p) U_{pNP+1} \right]^k \\ &\quad + \lambda \psi_p \Delta U_{pNP}^{k+1} - \lambda (\psi_{in} + \psi_p) (\Delta U_p)_{NP+1}^{k+1} \end{aligned} \quad (\text{B-2.65})$$

Rearreglando:

$$\begin{aligned} \left[1 + \lambda \Delta \tau (\psi_{in} + \psi_p) \right] (\Delta U_p)_{NP+1}^{k+1} - \lambda \Delta \tau \psi_p (\Delta U_p)_{NP}^{k+1} = \\ \Delta \tau (\psi_{in} U_{in})^{k+1/2} + \Delta \tau \psi_p (U_p)_{NP}^k - \Delta \tau (\psi_{in} + \psi_p) (U_p)_{NP+1}^k \end{aligned} \quad (\text{B-2.66})$$

Por último, se define:

$$A_{NP+1}^k = -\lambda \Delta \tau \psi_p \quad (\text{B-2.67})$$

$$B_{NP+1}^k = 1 + \lambda \Delta \tau (\psi_{in} + \psi_p) \quad (\text{B-2.68})$$

$$D_{NP+1}^k = \Delta \tau (\psi_{in} U_{in})^{k+1/2} + \Delta \tau \psi_p (U_p)_{NP}^k - \Delta \tau (\psi_{in} + \psi_p) (U_p)_{NP+1}^k \quad (\text{B-2.69})$$

por lo que:

$$\boxed{A_{NP+1}^k (\Delta U_p)_{NP}^{k+1} + B_{NP+1}^k (\Delta U_p)_{NP+1}^{k+1} = D_{NP+1}^k} \quad (\text{B-2.70})$$

Resumiendo, los elementos de la matriz tridiagonal son:

Para $i=1$:

$$\boxed{B_1^k (\Delta U_p)_1^{k+1} + C_1^k (\Delta U_p)_2^{k+1} = D_1^k} \quad (\text{B-2.55})$$

donde

$$B_1^k = -1 \quad (\text{B-2.56})$$

$$C_1^k = 1 \quad (\text{B-2.57})$$

$$D_1^k = 0 \quad (\text{B-2.58})$$

Para $2 \leq i \leq NP-1$

$$\boxed{A_i^k \Delta U_{p_{i-1}}^{k+1} + B_i^k \Delta U_{p_i}^{k+1} + C_i^k \Delta U_{p_{i+1}}^{k+1} = D_i^k} \quad (\text{B-2.34})$$

donde:

$$A_i^k = -\lambda \frac{r}{\xi^2} (\xi^2)_{i-1/2}^k \quad (\text{B-2.30})$$

$$B_i^k = 1 + \Phi^2 \lambda \Delta \tau \left(\frac{\partial g}{\partial U_p} \right)_i^k + \lambda \frac{r}{\xi^2} \left((\xi^2)_{i+1/2}^k + (\xi^2)_{i-1/2}^k \right) \quad (\text{B-2.31})$$

$$C_i^k = -\lambda \frac{r}{\xi^2} (\xi^2)_{i+1/2}^k \quad (\text{B-2.32})$$

$$D_i^k = \frac{r}{\xi^2} \left[(\xi^2)_{i+1/2}^k (U_{p_{i+1}}^k - U_{p_i}^k) - (\xi^2)_{i-1/2}^k (U_{p_i}^k - U_{p_{i-1}}^k) \right] - \Phi^2 \Delta \tau g_i^k \quad (\text{B-2.33})$$

Para $i = NP$

$$\boxed{A_{NP}^k (\Delta U_p)_{NP-1}^{k+1} + B_{NP}^k (\Delta U_p)_{NP}^{k+1} + C_{NP}^k (\Delta U_p)_{NP+1}^{k+1} = D_{NP}^k} \quad (\text{B-2.48})$$

donde,

$$A_{NP}^k = -1 \quad (\text{B-2.44})$$

$$B_{NP}^k = Bi\Delta\xi + 1 \quad (\text{B-2.45})$$

$$C_{NP}^k = -Bi\Delta\xi \quad (\text{B-2.46})$$

$$D_{NP}^k = 0 \quad (\text{B-2.47})$$

Para $i = NP + 1$

$$\boxed{A_{NP+1}^k (\Delta U_p)_{NP}^{k+1} + B_{NP+1}^k (\Delta U_p)_{NP+1}^{k+1} = D_{NP+1}^k} \quad (\text{B-2.70})$$

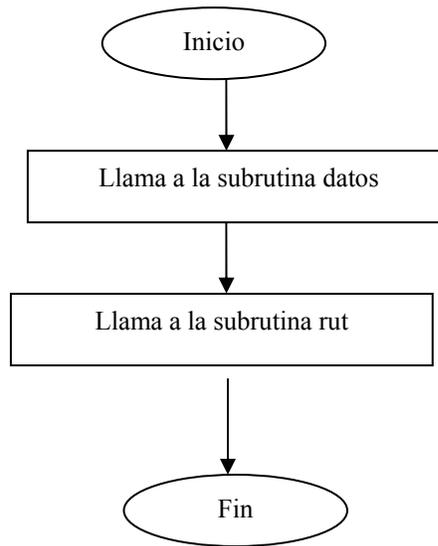
donde:

$$A_{NP+1}^k = -\lambda\Delta\tau\psi_p \quad (\text{B-2.67})$$

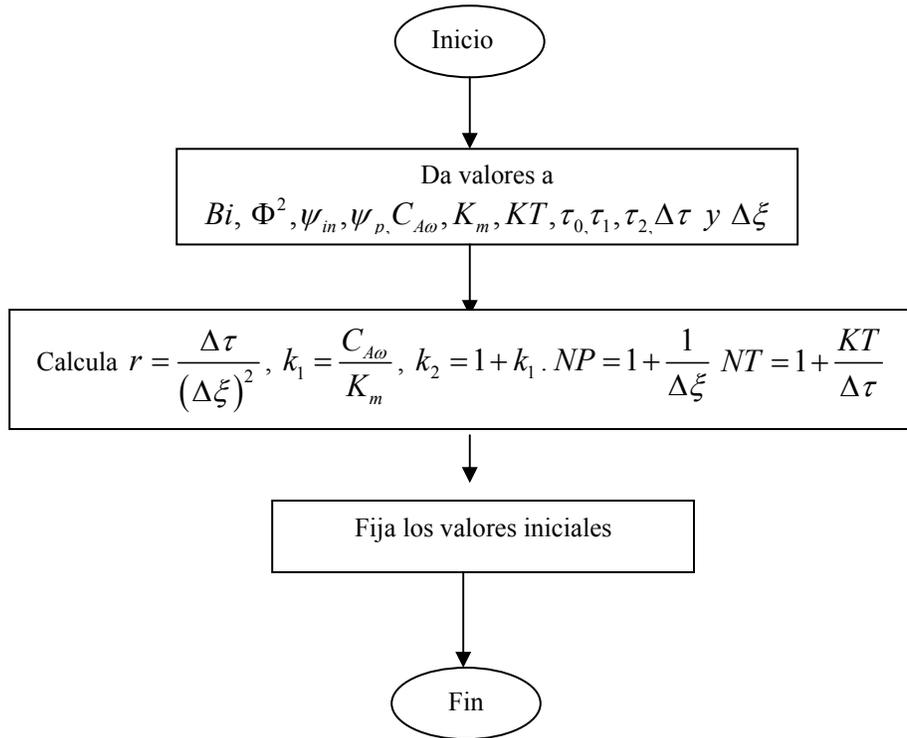
$$B_{NP+1}^k = 1 + \lambda\Delta\tau(\psi_{in} + \psi_p) \quad (\text{B-2.68})$$

$$D_{NP+1}^k = \Delta\tau(\psi_{in}U_{in})^{k+1/2} + \Delta\tau\psi_p(U_p)_{NP}^k - \Delta\tau(\psi_{in} + \psi_p)(U_p)_{NP+1}^k \quad (\text{B-2.69})$$

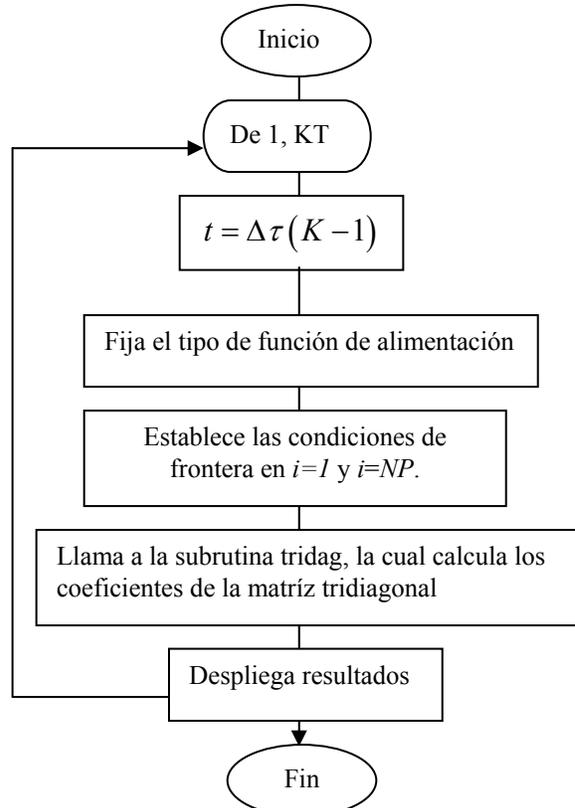
B-2.5.- Diagrama de flujo del programa



Subrutina datos



Subrutina rut



Apéndice C-1:

Figuras en estado cuasiestacionario

C-1.1.- Función escalón

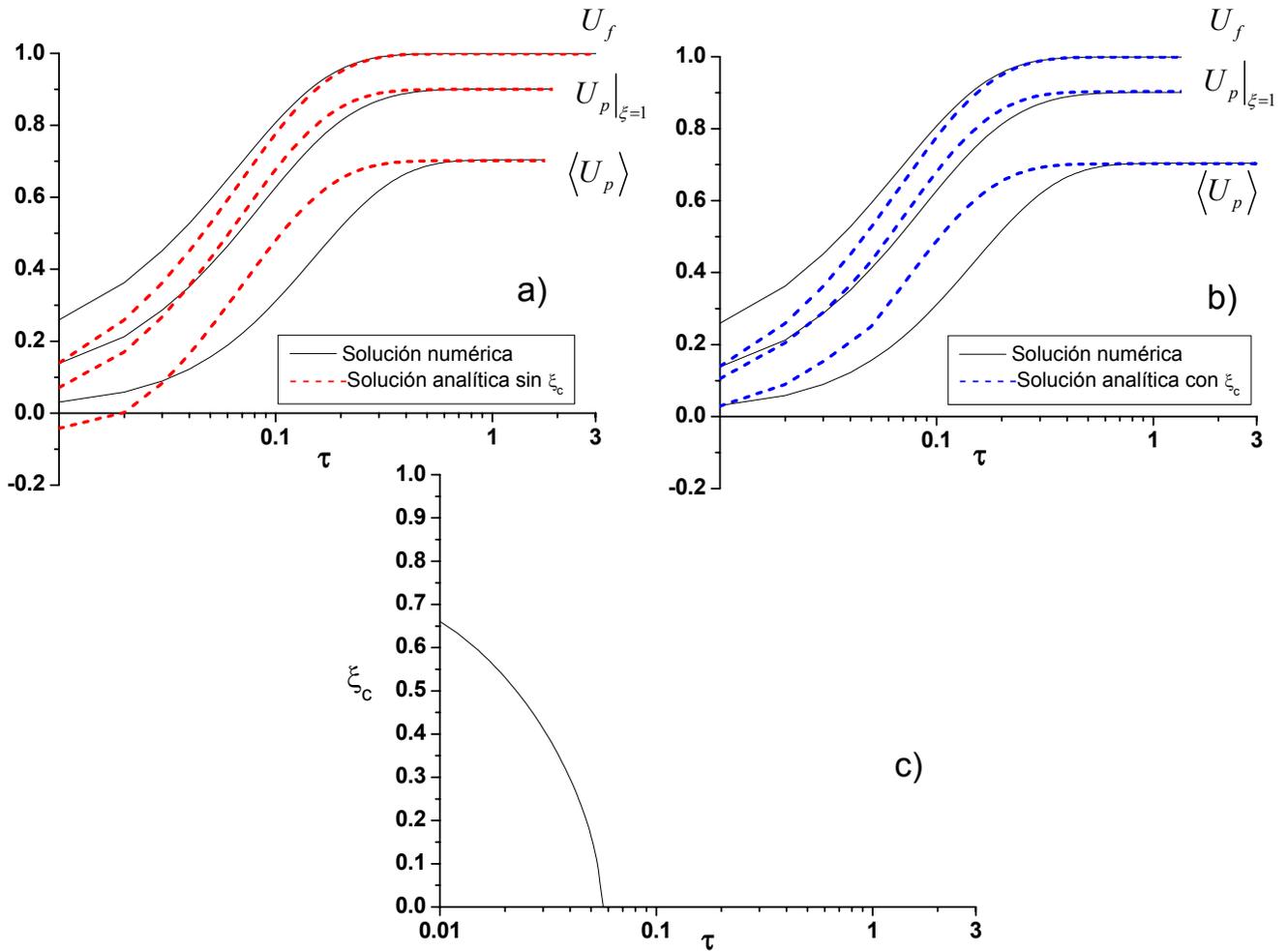


Figura C-1.1: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo escalón unitario y

$$Bi = 10, \psi_{in} = 15 \text{ y } \Phi^2 = 3.$$

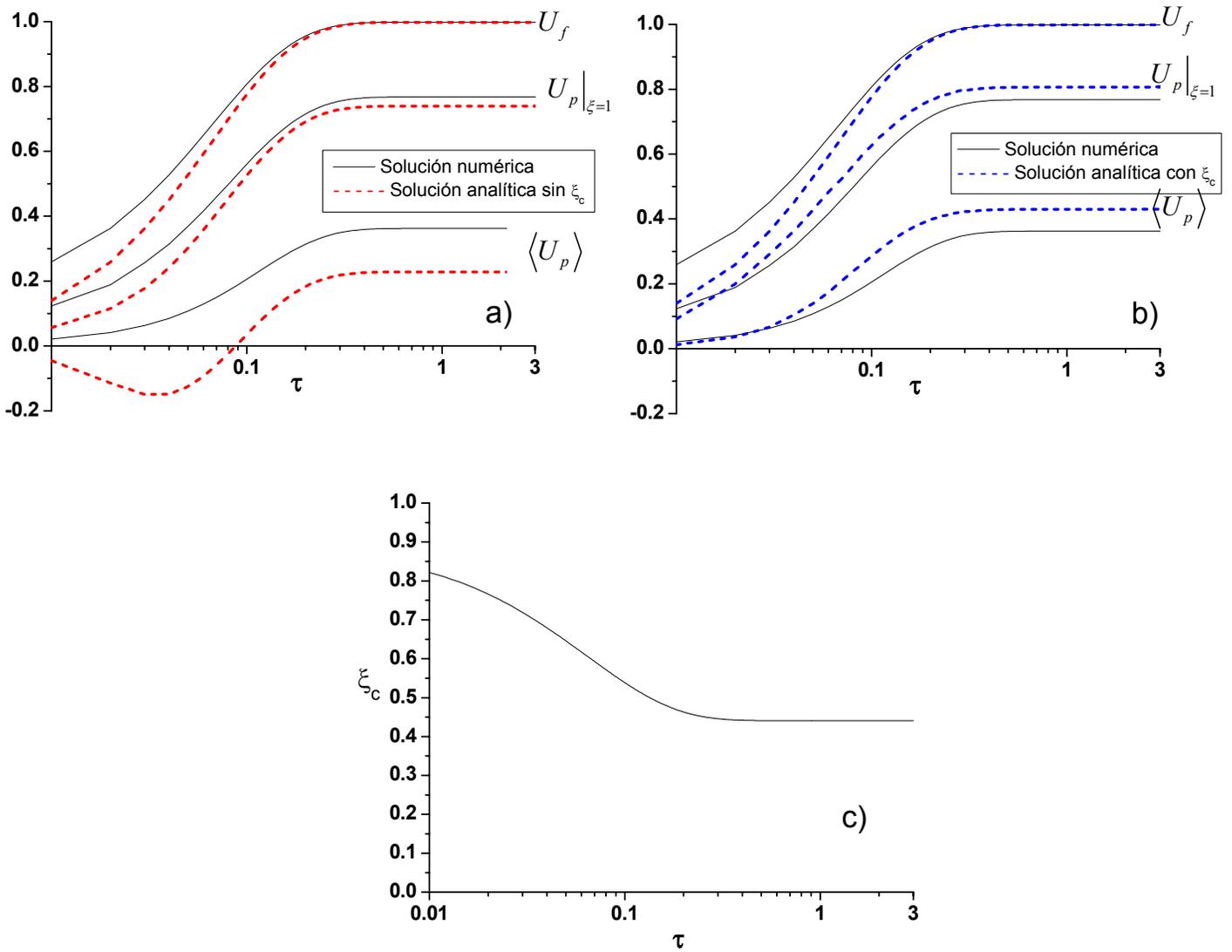


Figura C-1.2: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo escalón unitario y

$$Bi = 10, \psi_{in} = 15 \text{ y } \Phi^2 = 8.$$

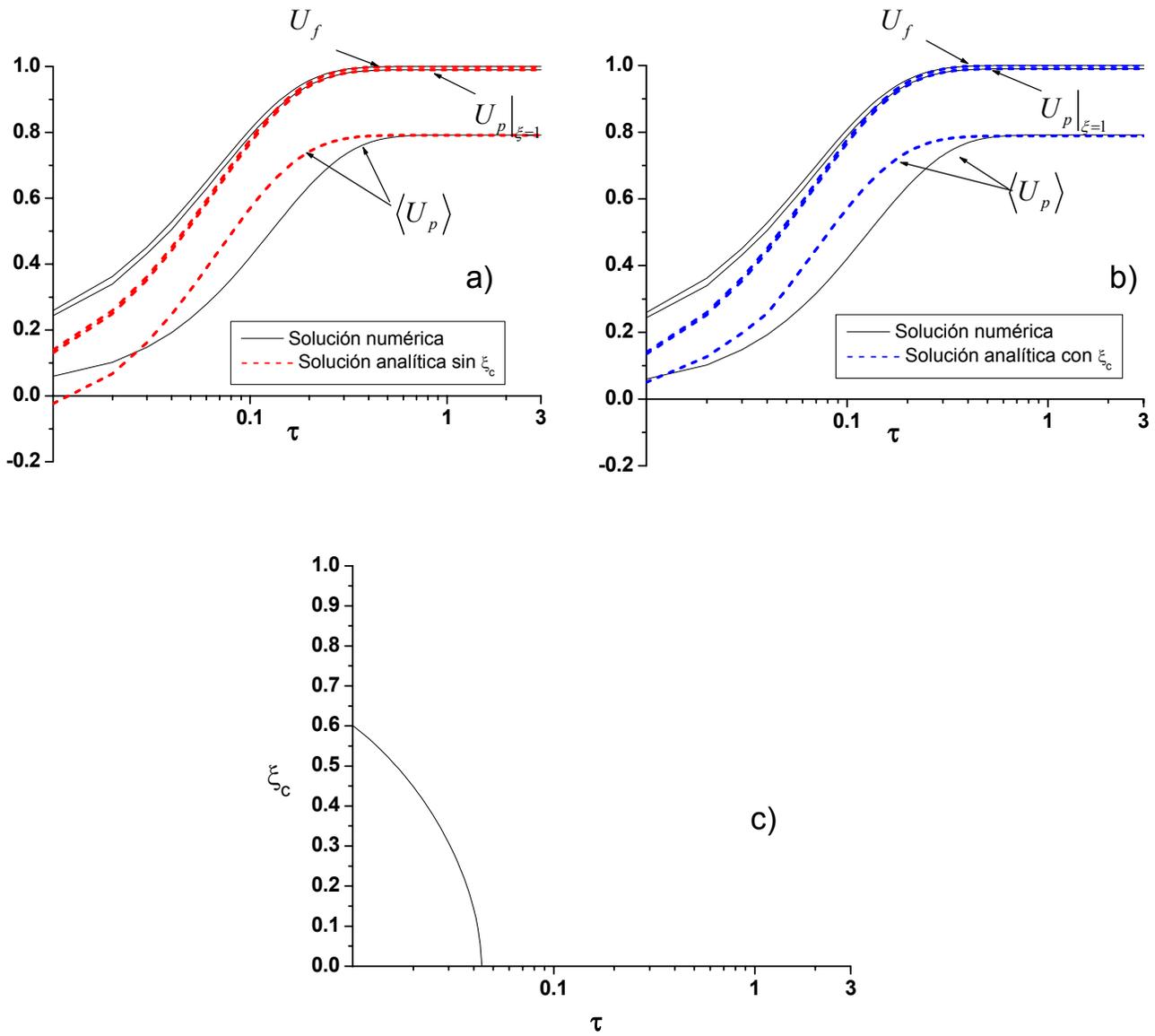


Figura C-1.3: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo escalón unitario y $Bi = 100$, $\psi_{in} = 15$ y $\Phi^2 = 3$.

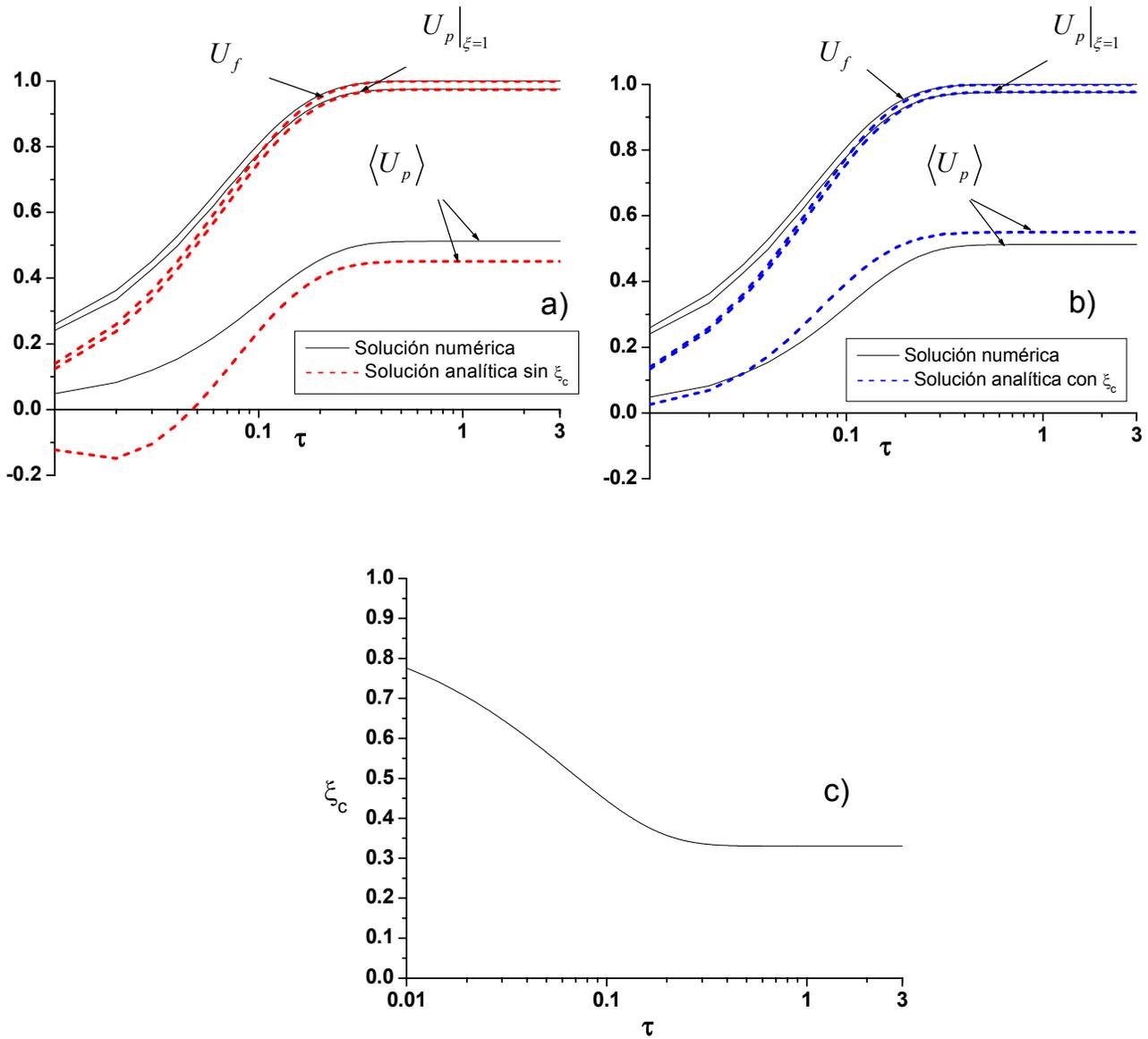


Figura C-1.4: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo escalón unitario y

$$Bi = 100, \psi_{in} = 15 \text{ y } \Phi^2 = 8.$$

C-1.2.- Función oscilatoria

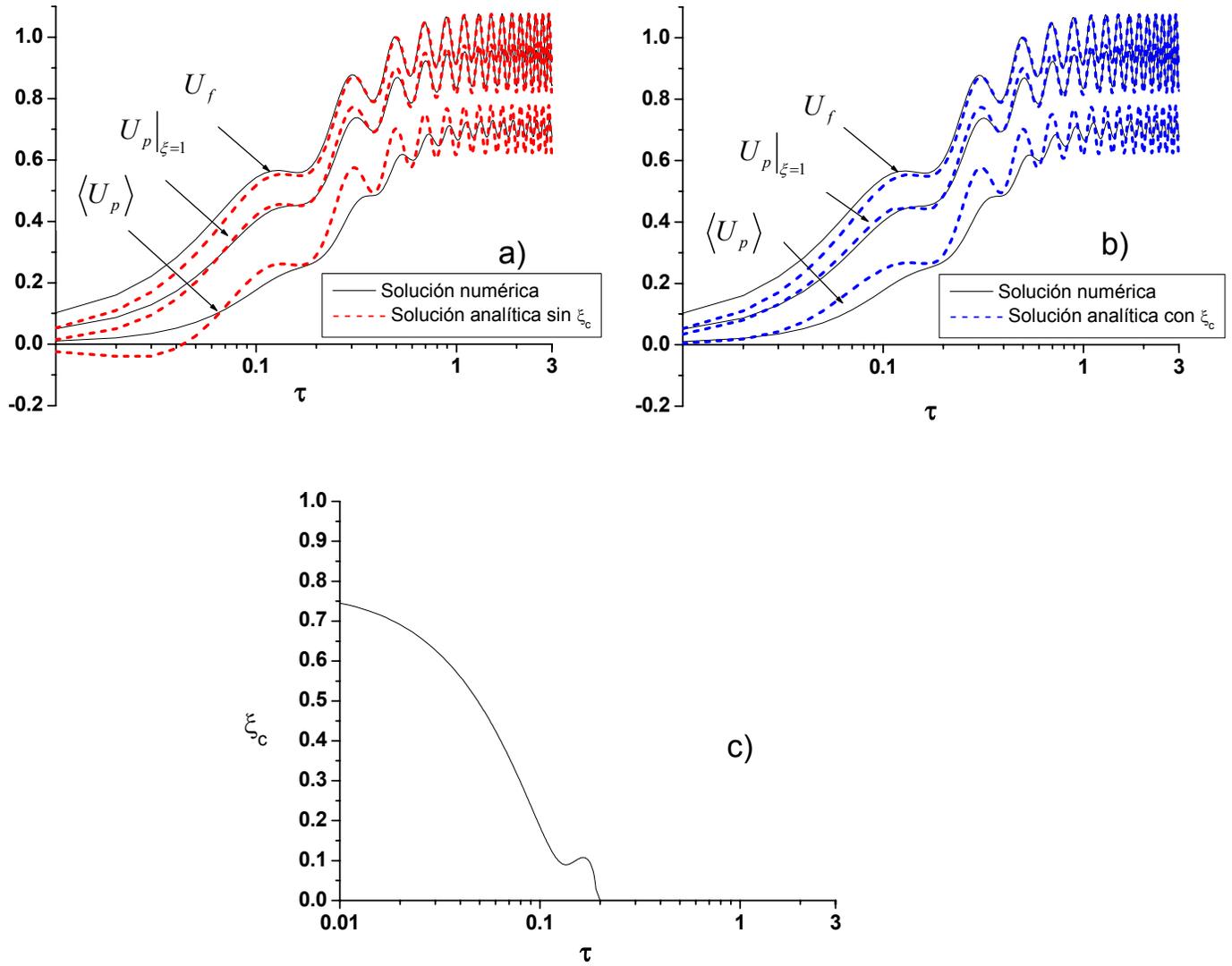


Figura C-1.5: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación oscilatoria y $Bi = 10$, $\psi_{in} = 5$ y $\Phi^2 = 3$.

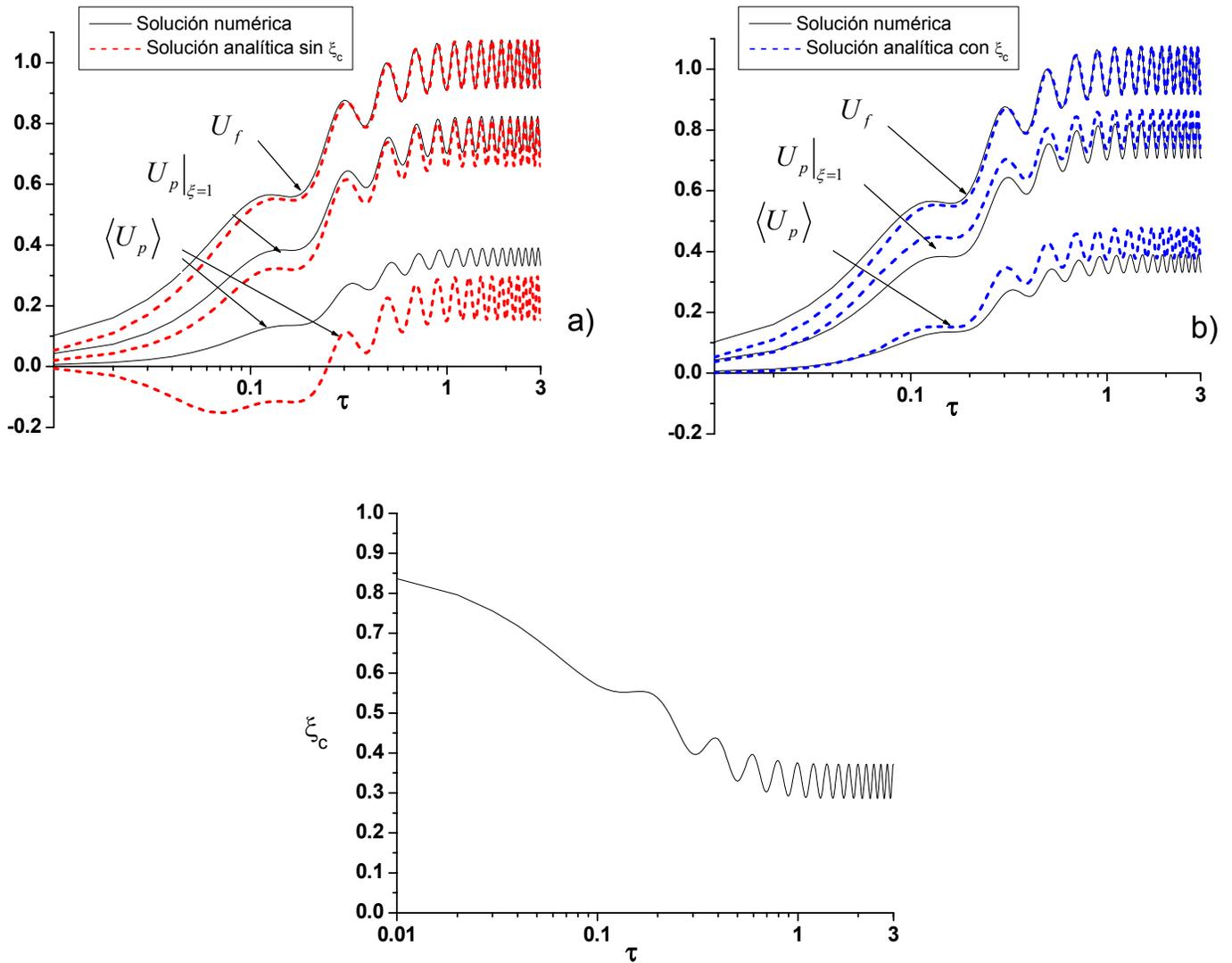


Figura C-1.6: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación oscilatoria y $Bi = 10$, $\psi_{in} = 5$ y $\Phi^2 = 8$.

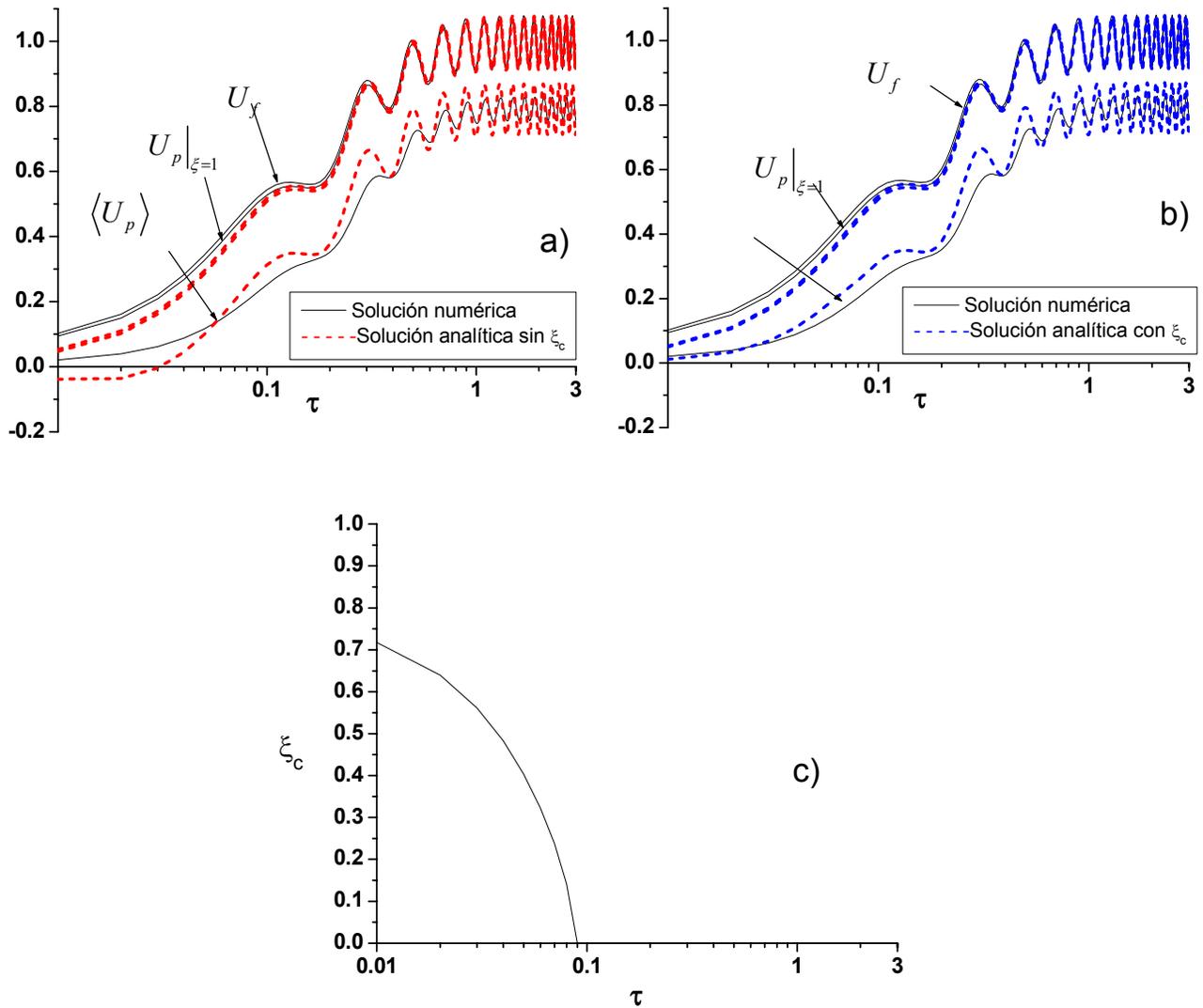


Figura C-1.7: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación oscilatoria y $Bi = 100$, $\psi_{in} = 5$ y $\Phi^2 = 3$.

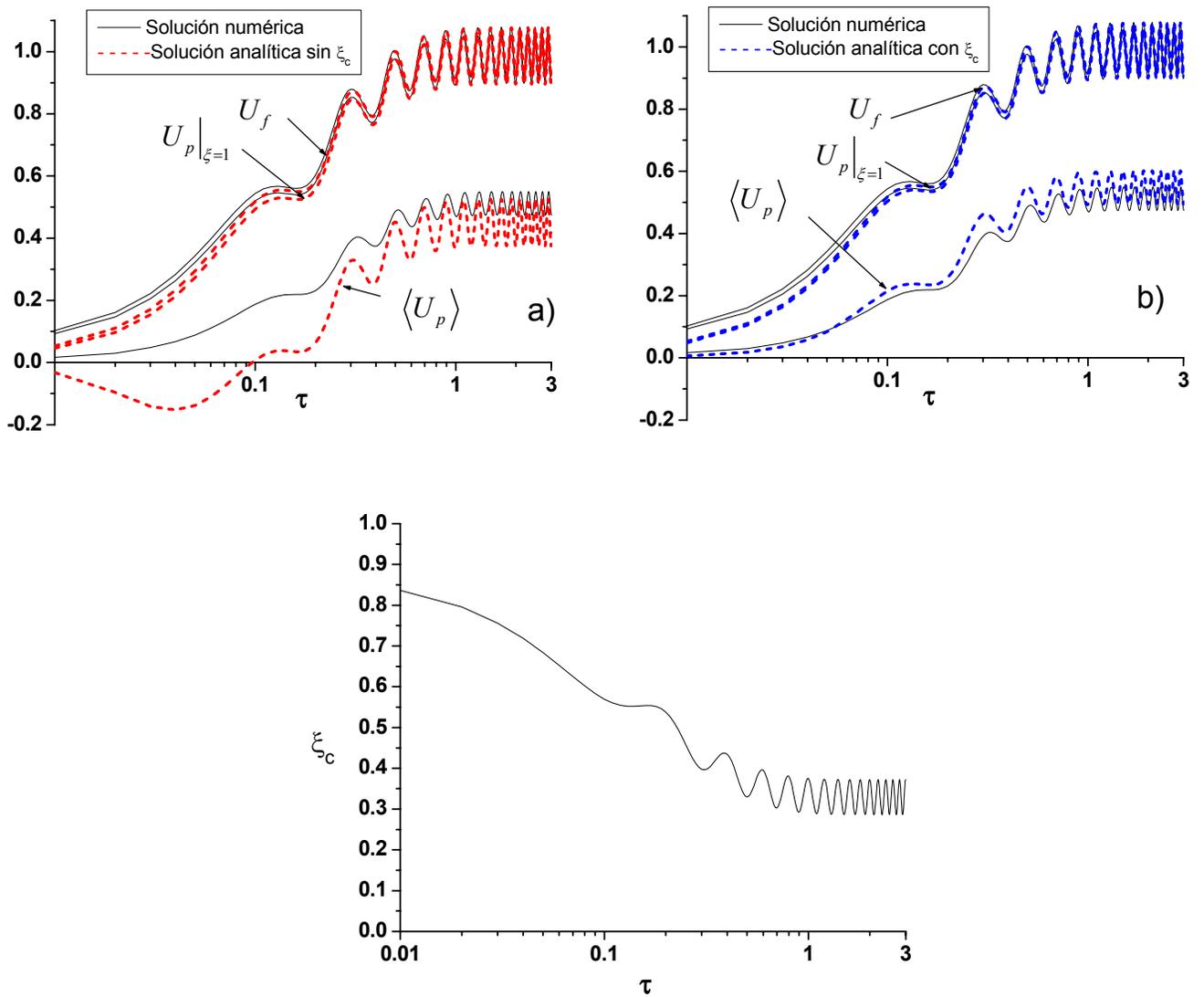


Figura C-1.8: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación oscilatoria y $Bi = 100$, $\psi_{in} = 5$ y $\Phi^2 = 8$.

C-1.3.- Pulso finito de duración $\Delta\tau = 0.5$

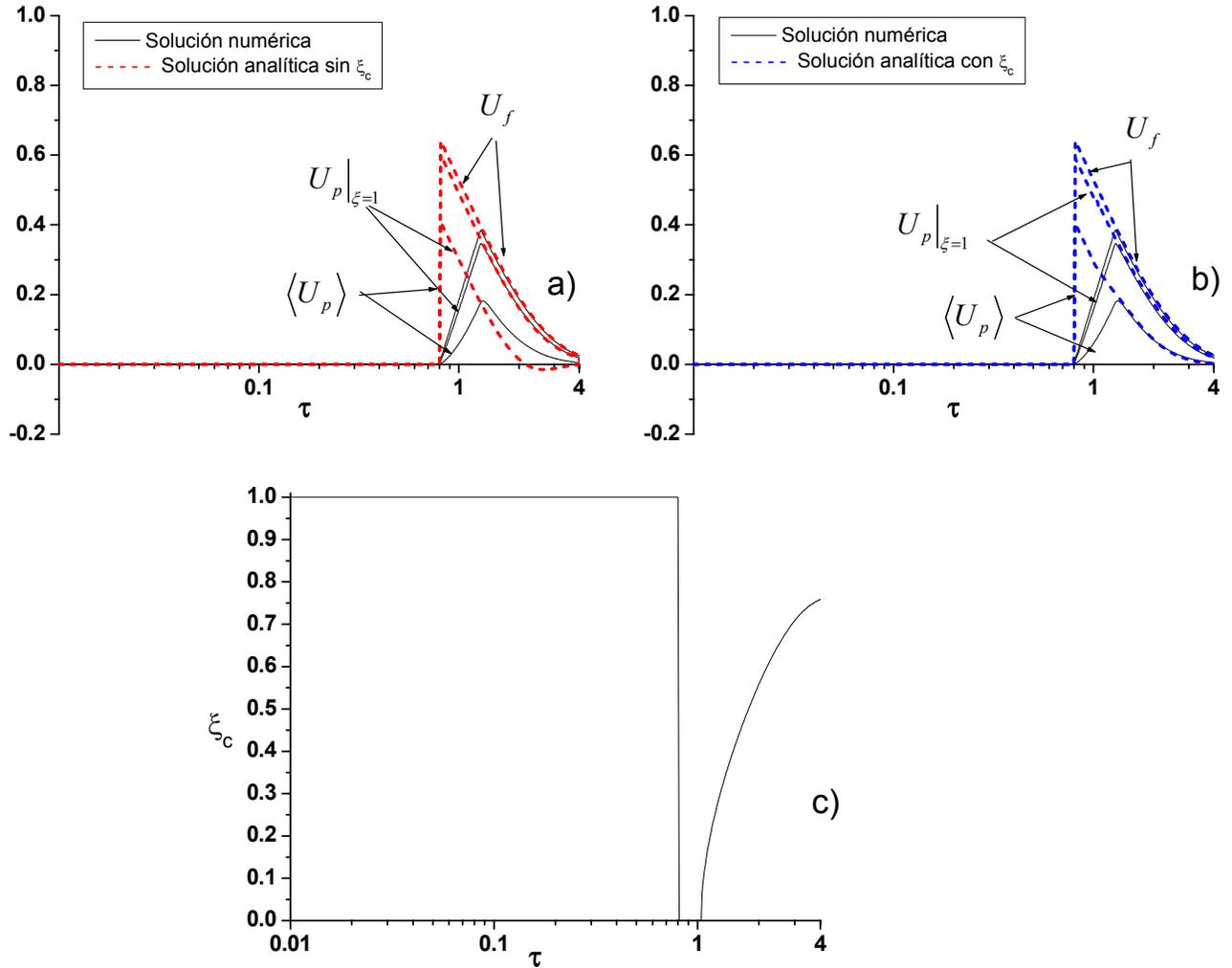


Figura C-1.9: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación de tipo pulso finito y $Bi = 25$, $\psi_{in} = 1$ y $\Phi^2 = 3$.

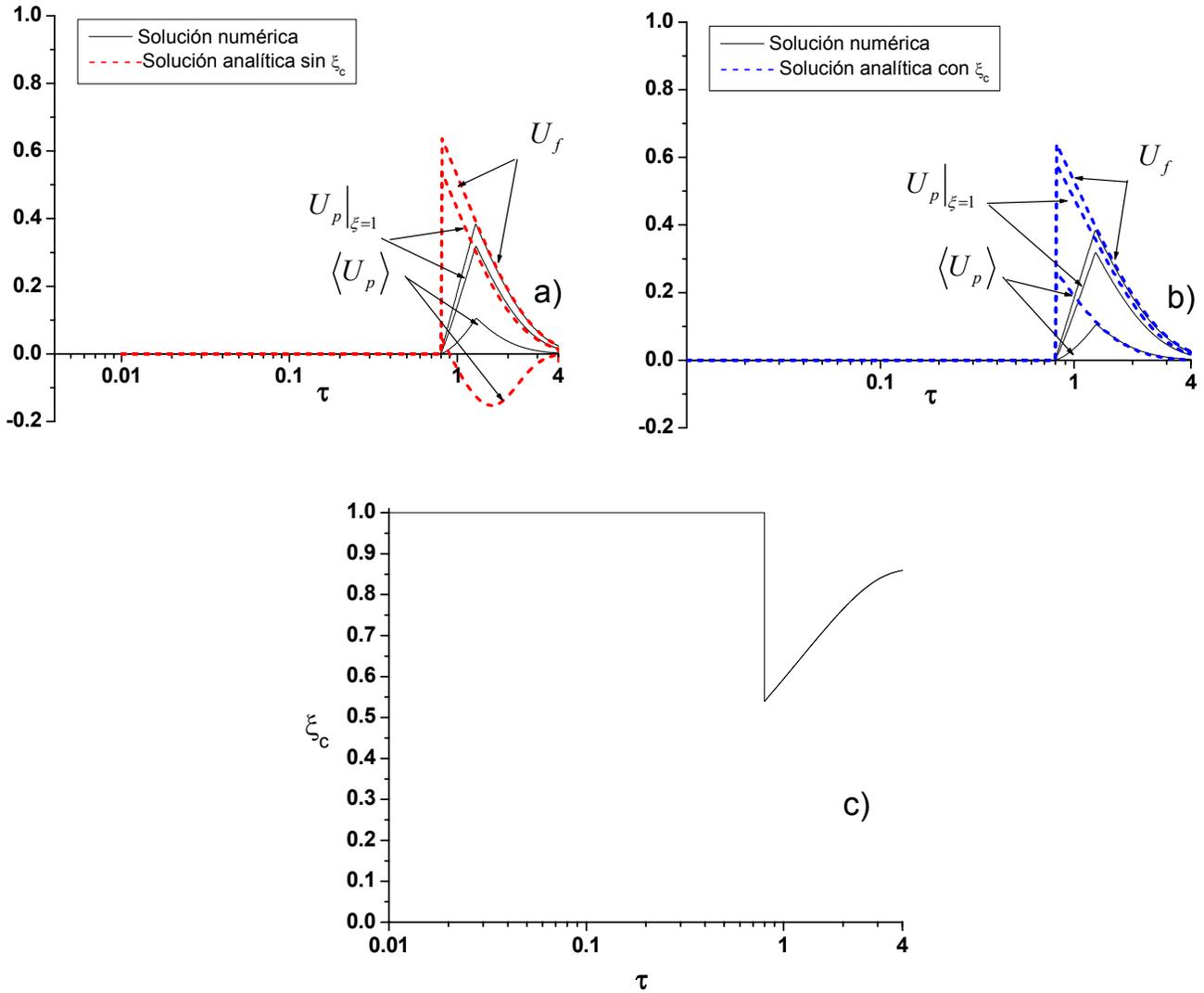


Figura C-1.10: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación de tipo pulso finito y $Bi = 25$, $\psi_{in} = 1$ y $\Phi^2 = 8$.

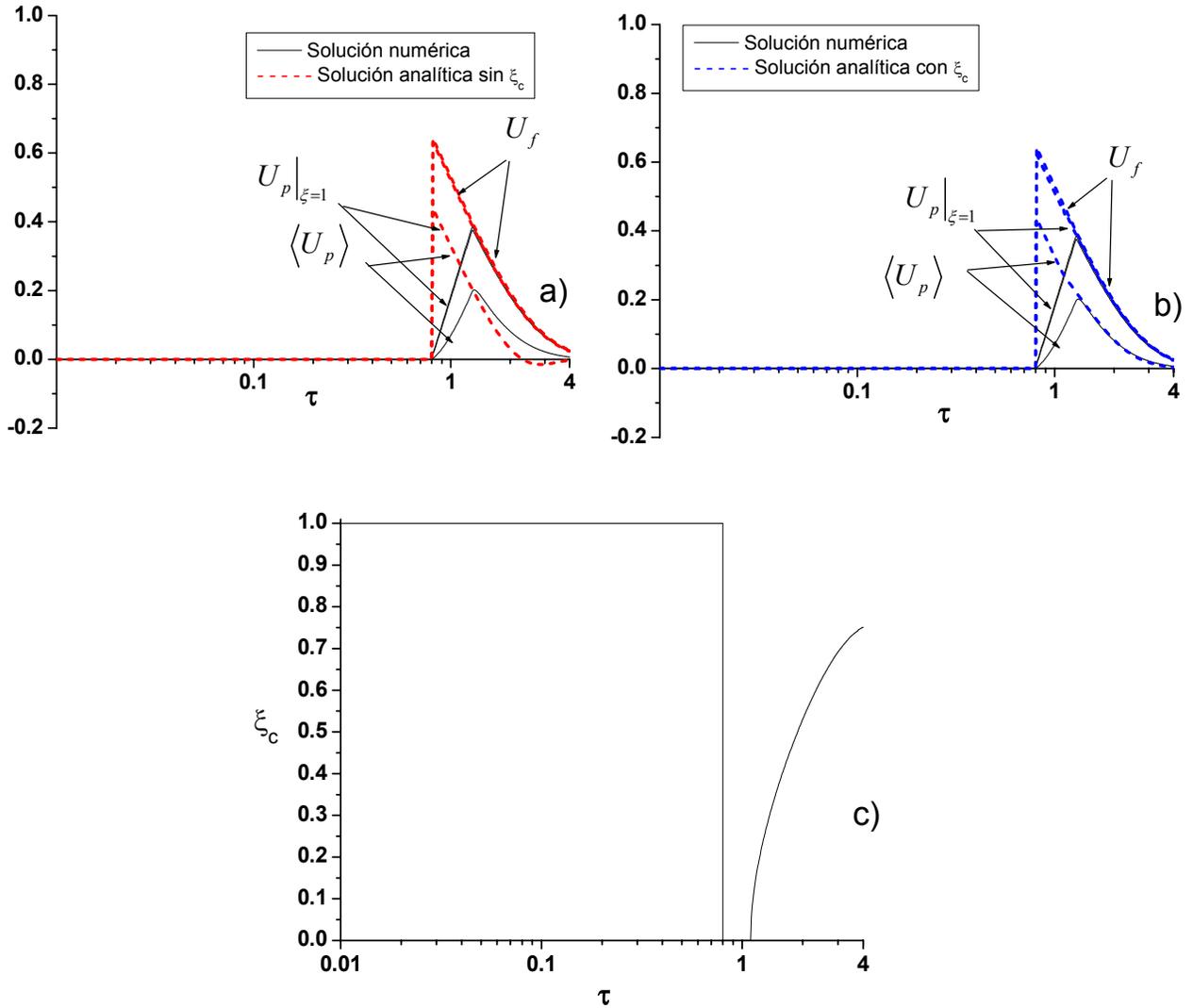


Figura C-1.11: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación de tipo pulso finito y $Bi = 100$, $\psi_{in} = 1$ y $\Phi^2 = 3$.

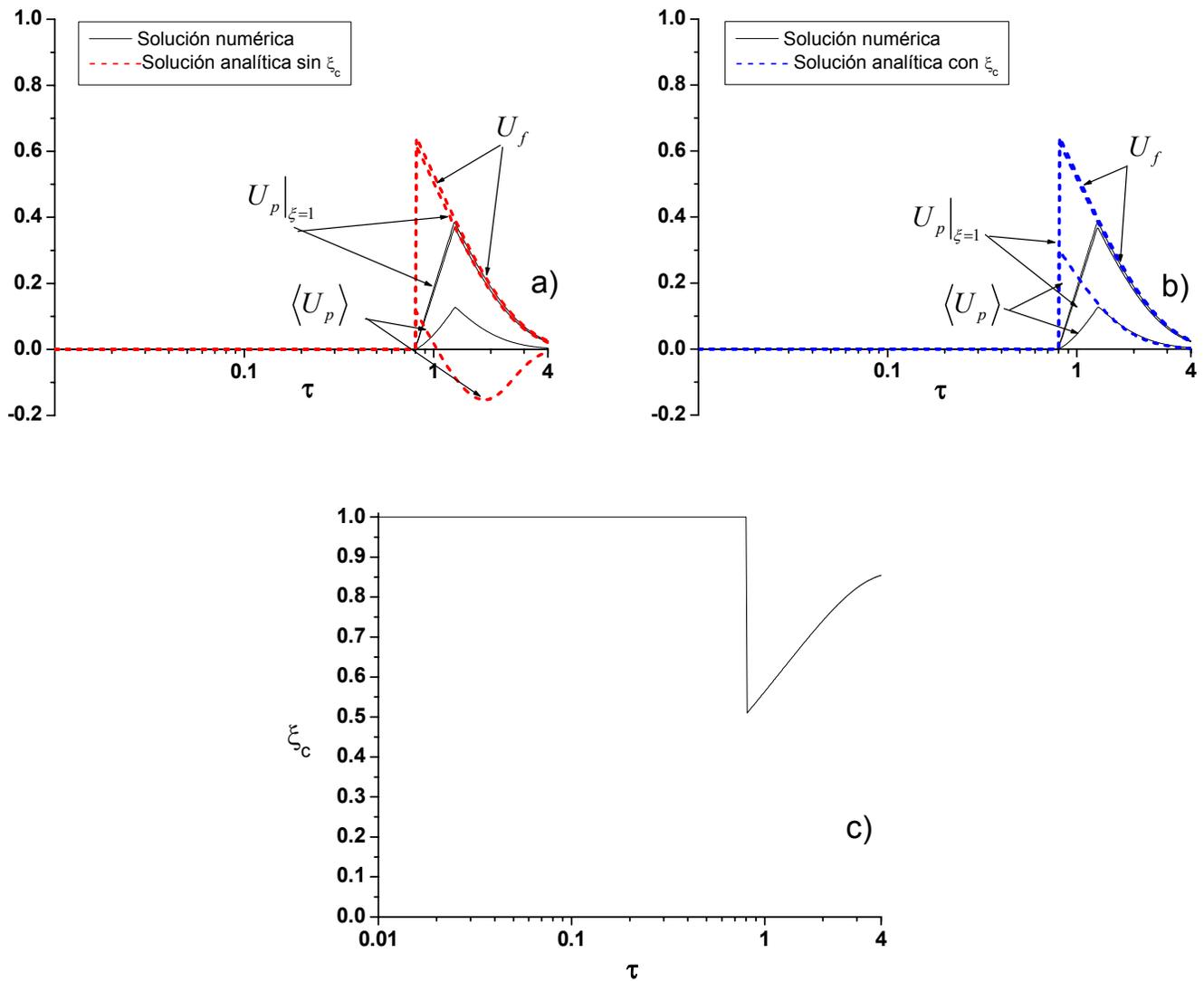


Figura C-1.12: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación de tipo pulso finito y $Bi = 100$, $\psi_{in} = 1$ y $\Phi^2 = 8$.

C-1.4.- Pulso finito de duración $\Delta\tau = 0.01$

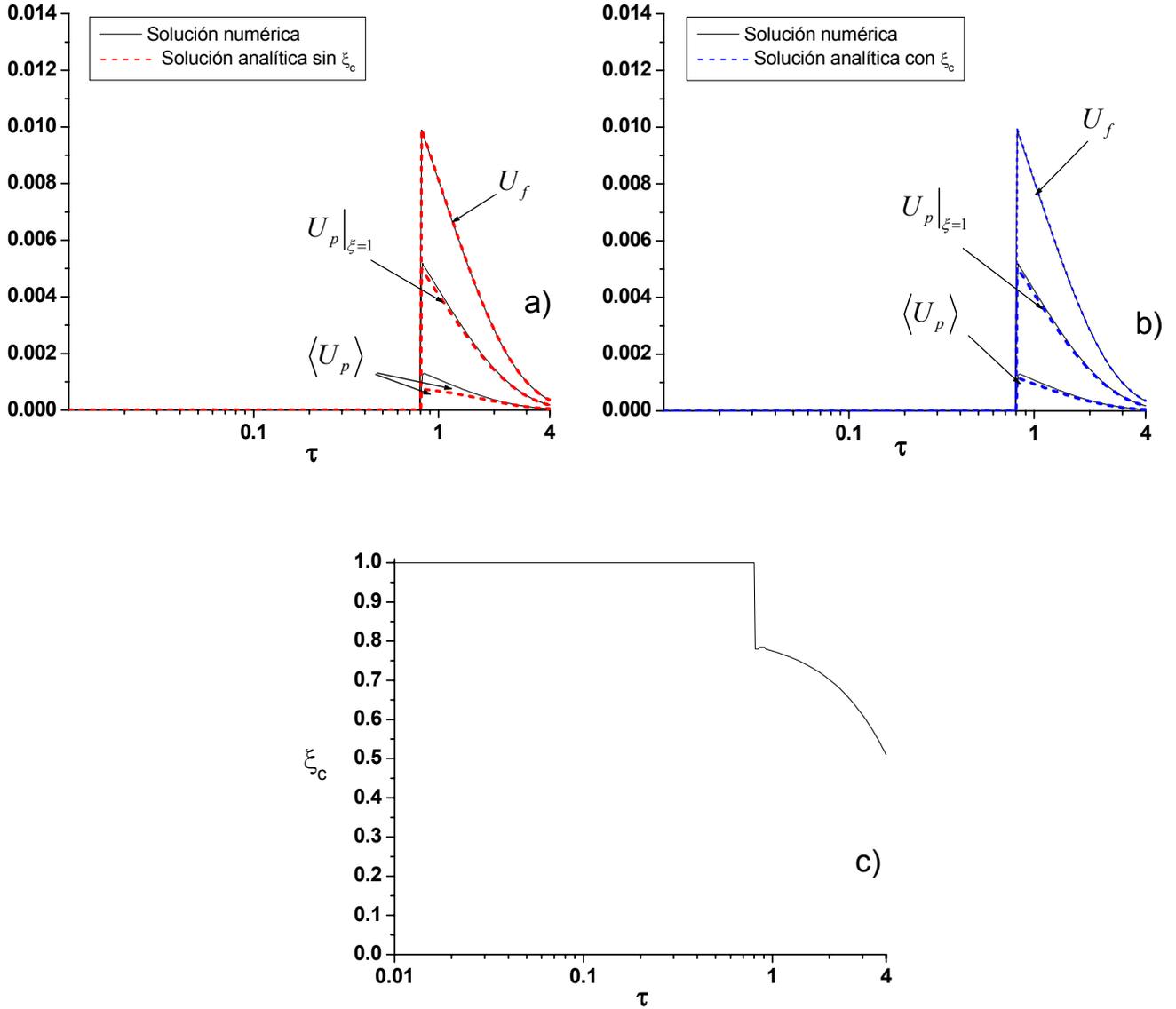


Figura C-1.13: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación de tipo pulso finito y $Bi = 20$, $\psi_{in} = 1$ y $\Phi^2 = 3$.

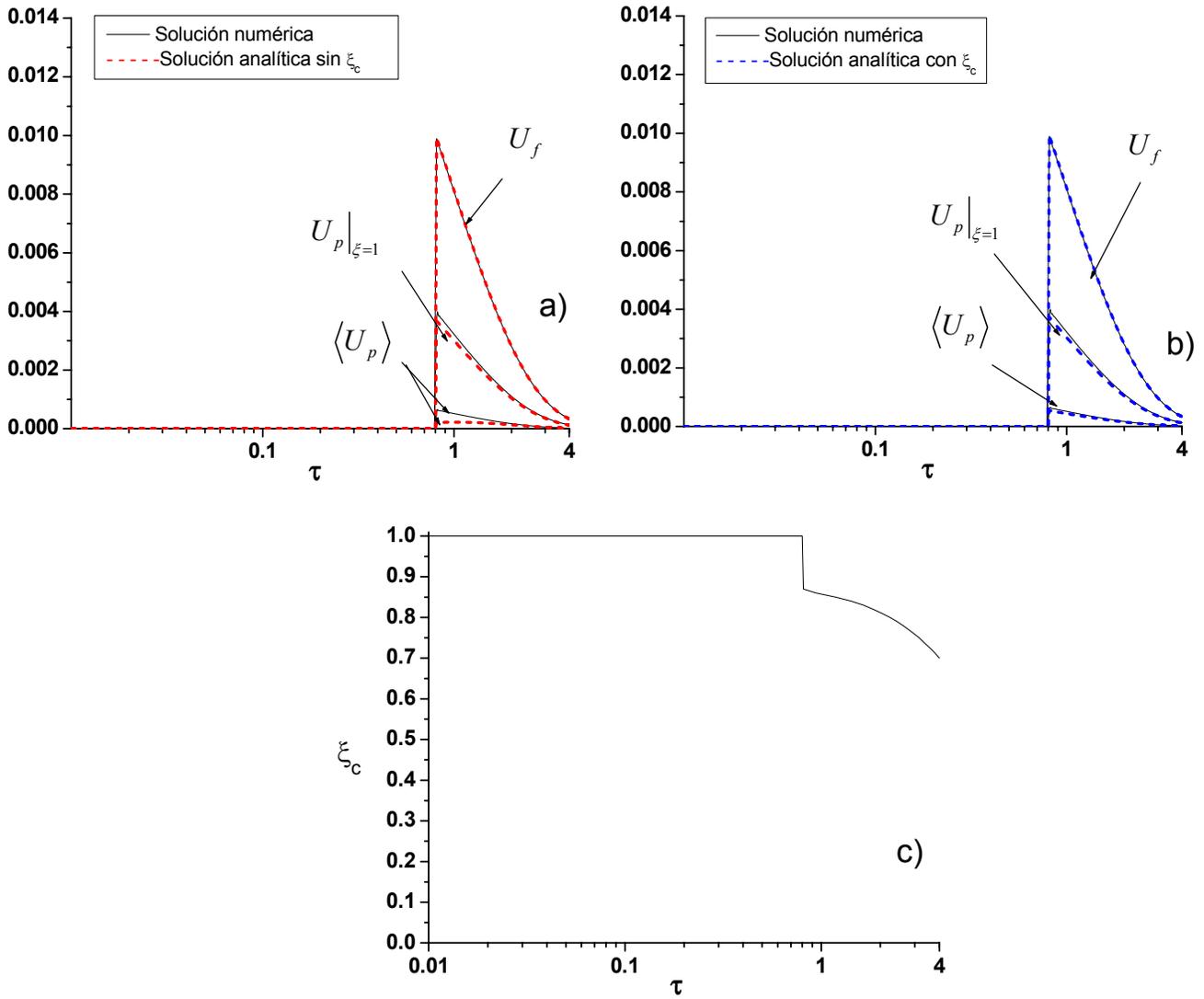


Figura C-1.14: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación de tipo pulso finito y $Bi = 20$, $\psi_{in} = 1$ y $\Phi^2 = 8$.

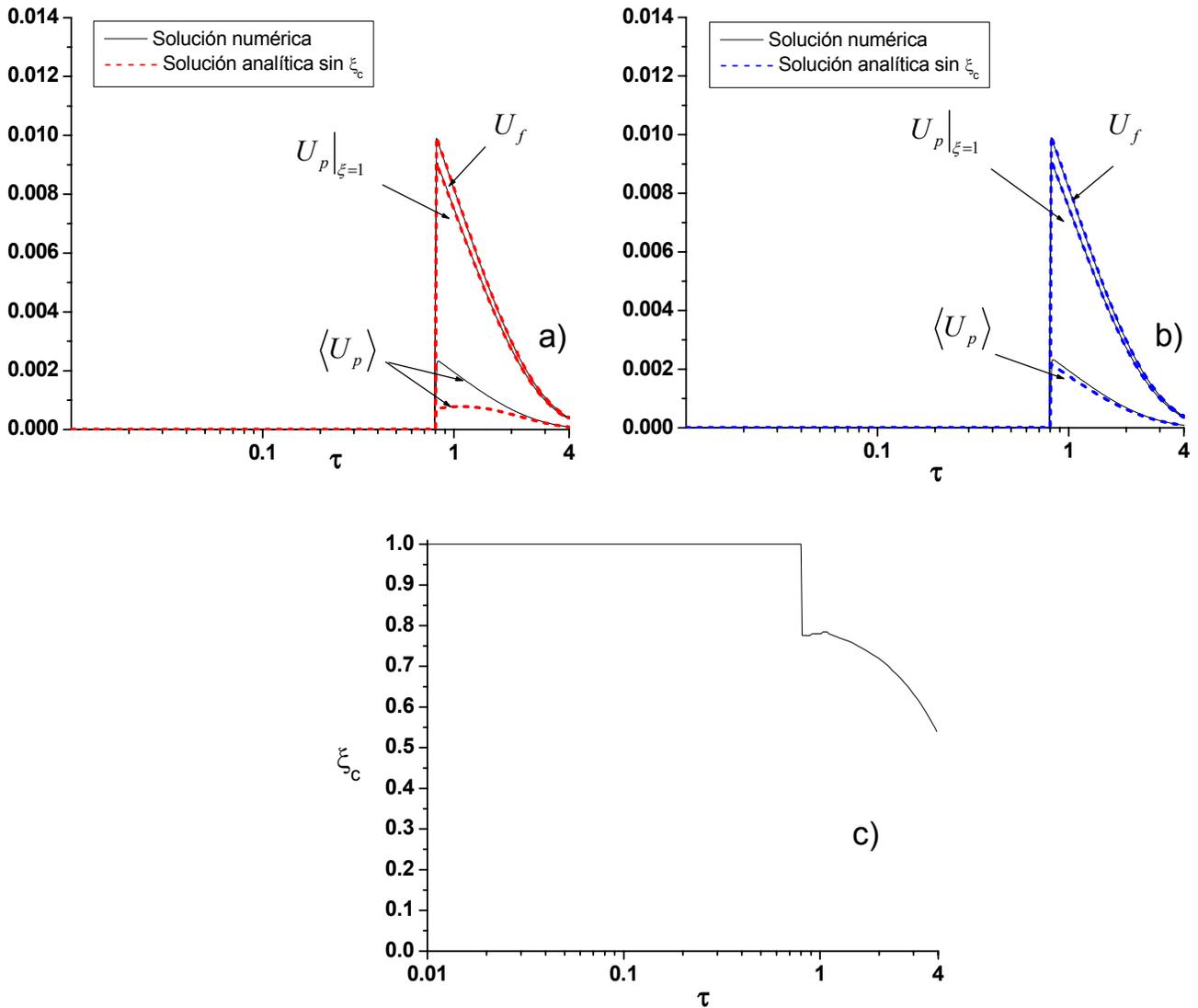


Figura C-1.15: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación de tipo pulso finito y $Bi = 40$, $\psi_{in} = 1$ y $\Phi^2 = 3$.

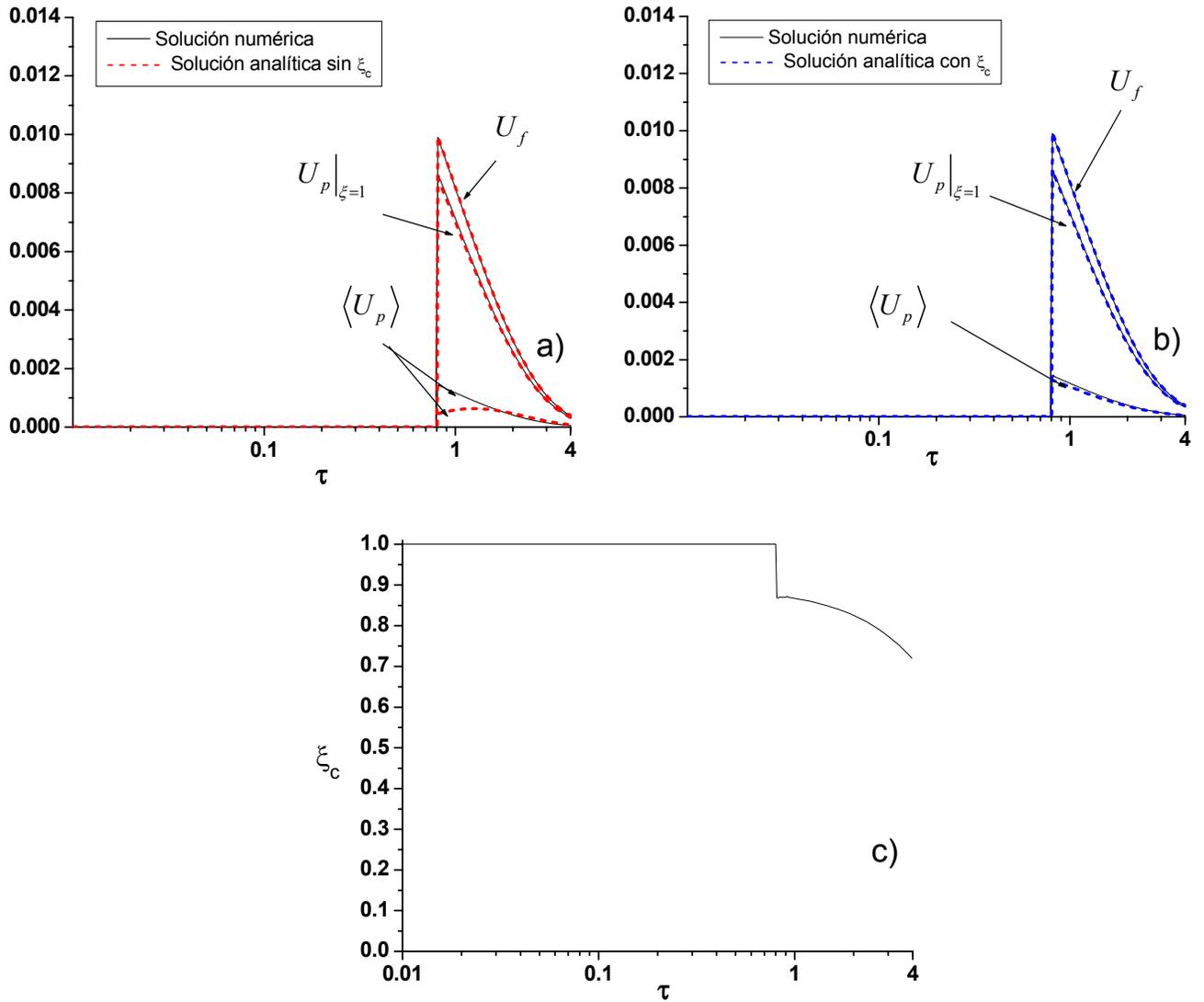


Figura C-1.16: Concentraciones aproximadas y exactas y comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación de tipo pulso finito y

$$Bi = 40, \psi_{in} = 1 \text{ y } \Phi^2 = 8.$$

Apéndice C-2:

Figuras en estado transitorio

C-2.1.- Función escalón.

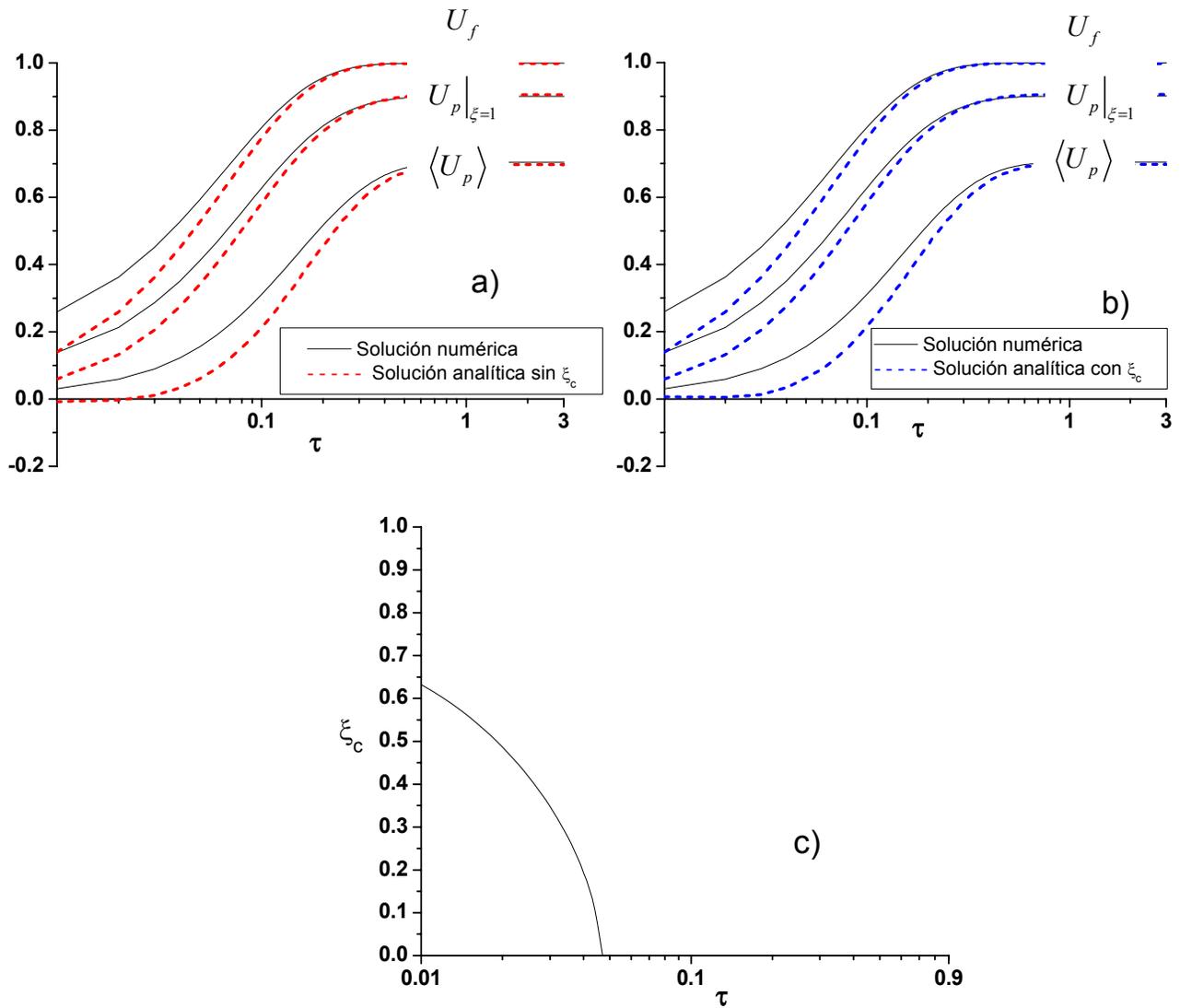


Figura C-2.1: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo escalón

unitario y $\psi_{in} = 15$, $Bi = 10$ y $\Phi^2 = 3$.

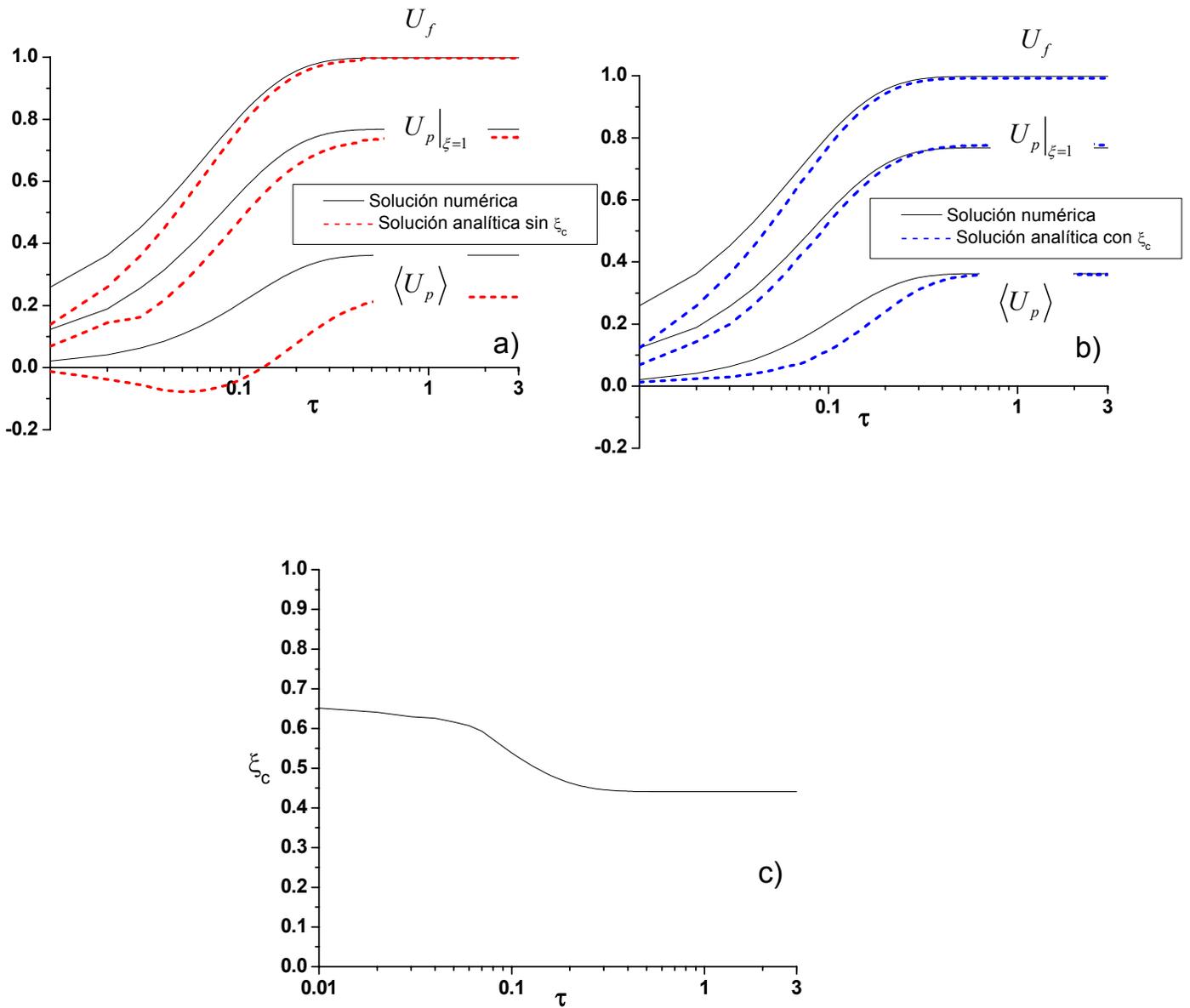


Figura C-2.2: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo escalón unitario y $\psi_{in} = 15$, $Bi = 10$ y $\Phi^2 = 8$.

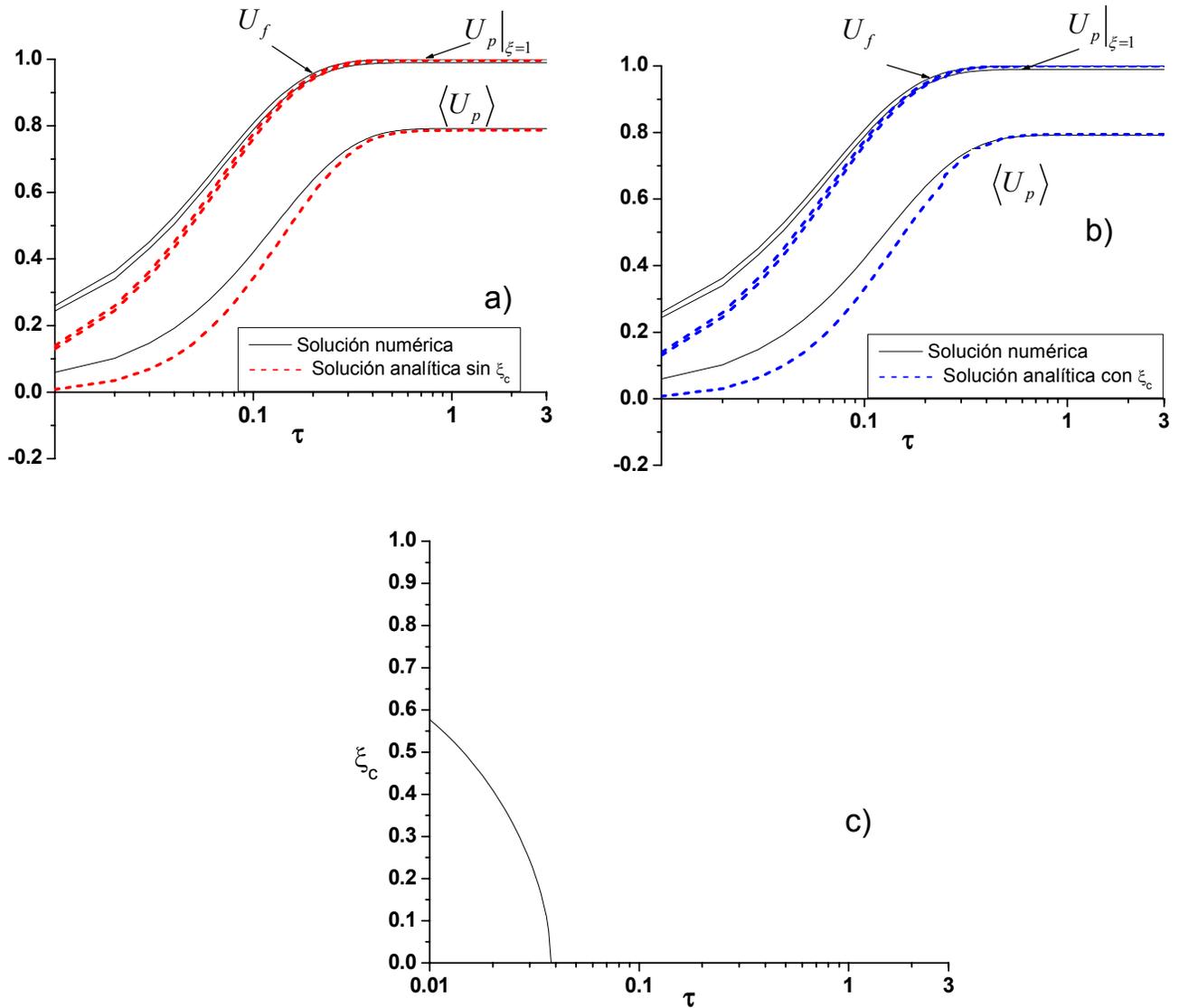


Figura C-2.3: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo escalón unitario y $\psi_{in} = 15$, $Bi = 100$ y $\Phi^2 = 3$.

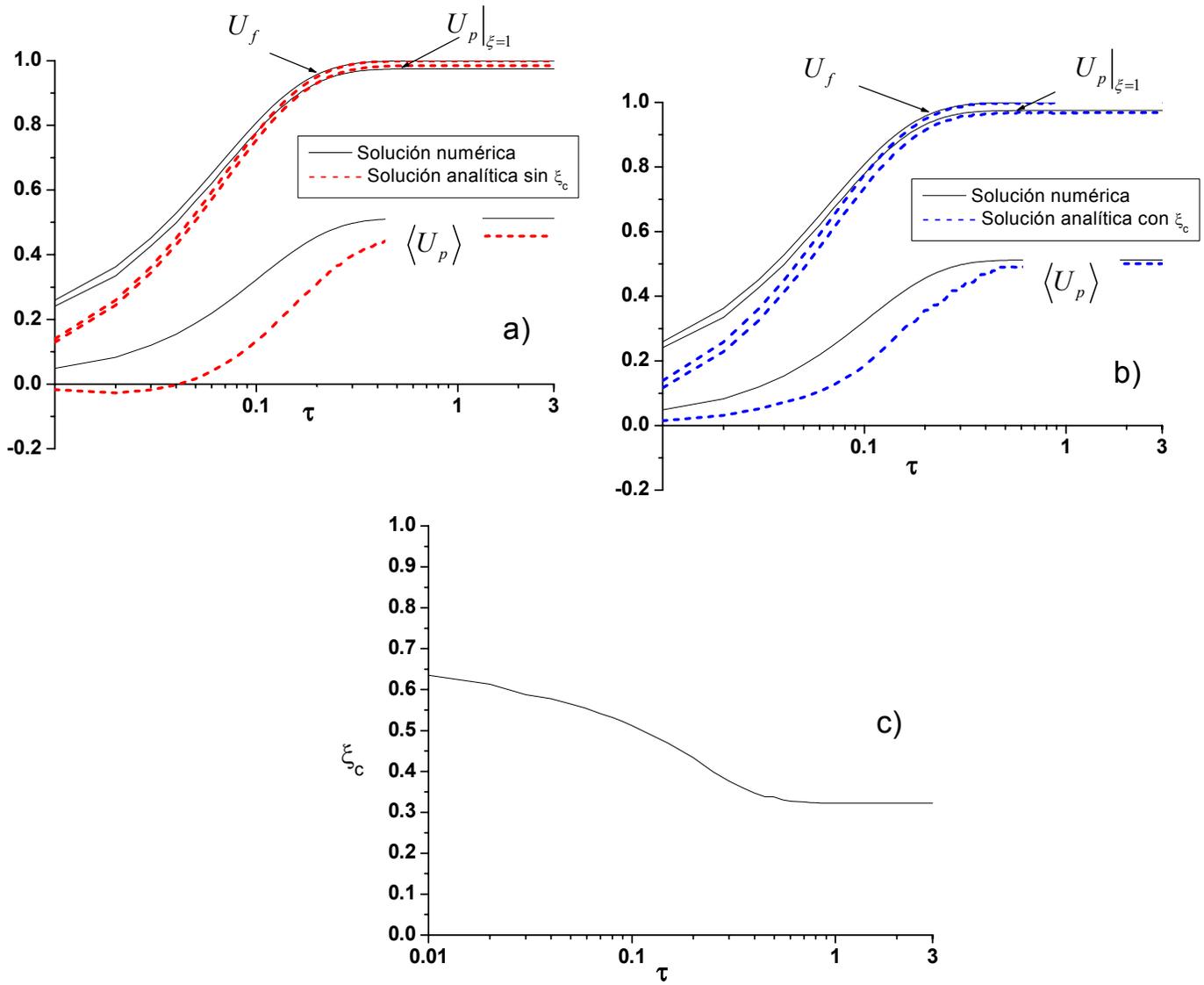


Figura C-2.4: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo escalón unitario y $\psi_{in} = 15$, $Bi = 100$ y $\Phi^2 = 8$.

C-2.2.- Función oscilatoria

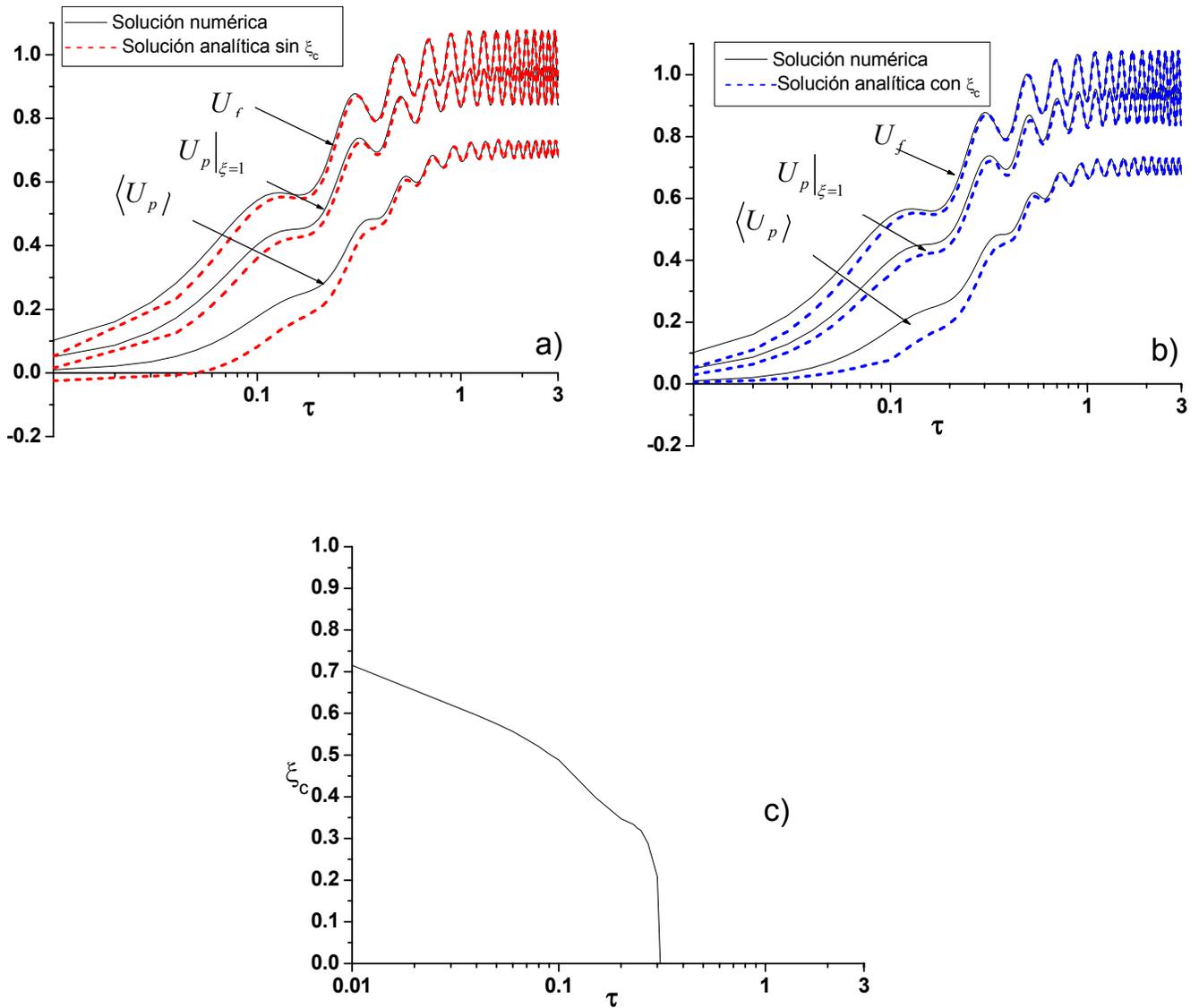


Figura C-2.5: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo oscilatoria y $\psi_{in} = 5$, $Bi = 10$ y $\Phi^2 = 3$.

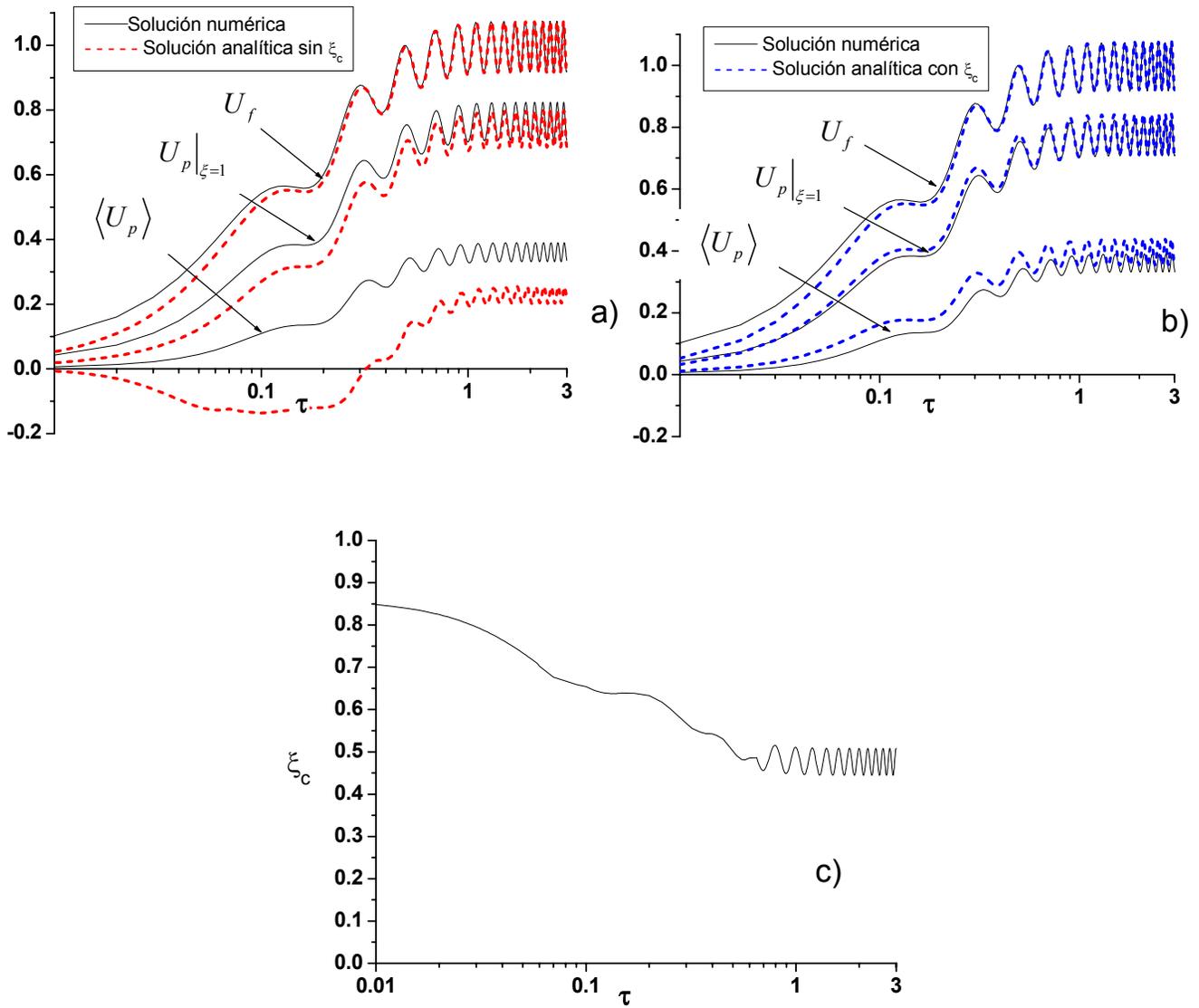


Figura C-2.6: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo oscilatoria y $\psi_{in} = 5$, $Bi = 10$ y $\Phi^2 = 8$.

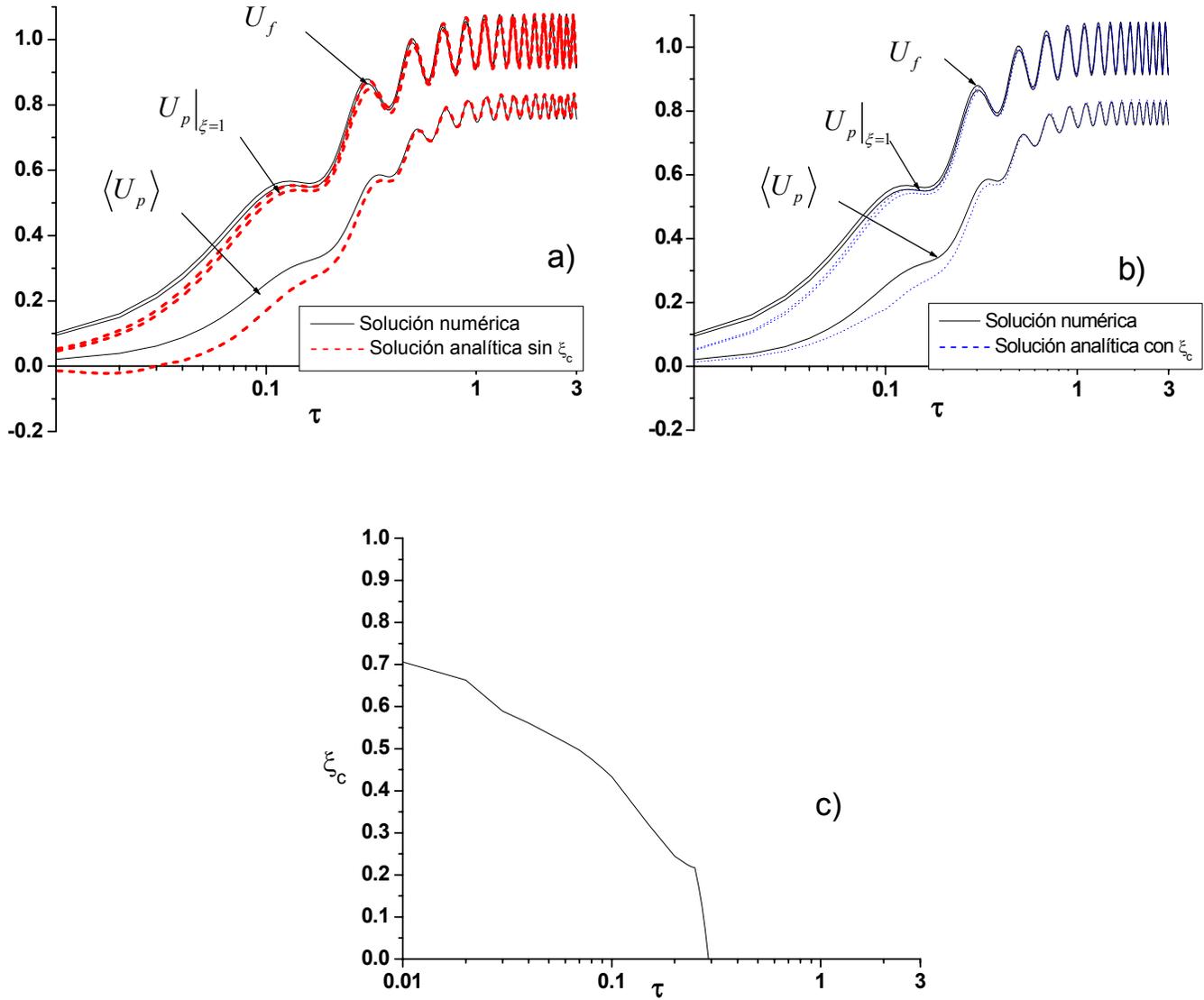


Figura C-2.7: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo oscilatoria y $\psi_{in} = 5$, $Bi = 100$ y $\Phi^2 = 3$.

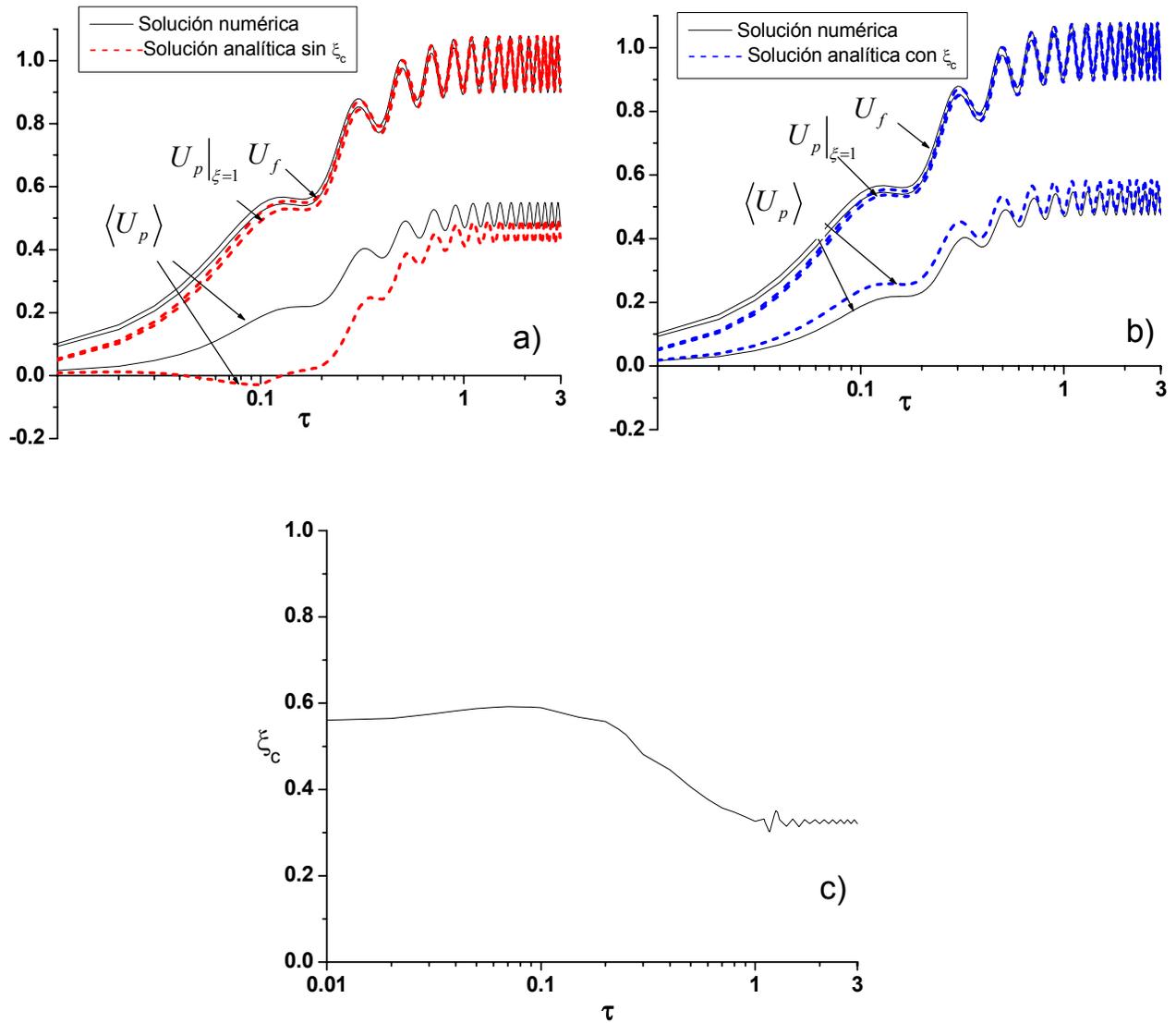


Figura C-2.8: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo oscilatoria y $\psi_{in} = 5$, $Bi = 100$ y $\Phi^2 = 8$.

5.7.3.- Pulso finito de duración $\Delta\tau = 0.5$

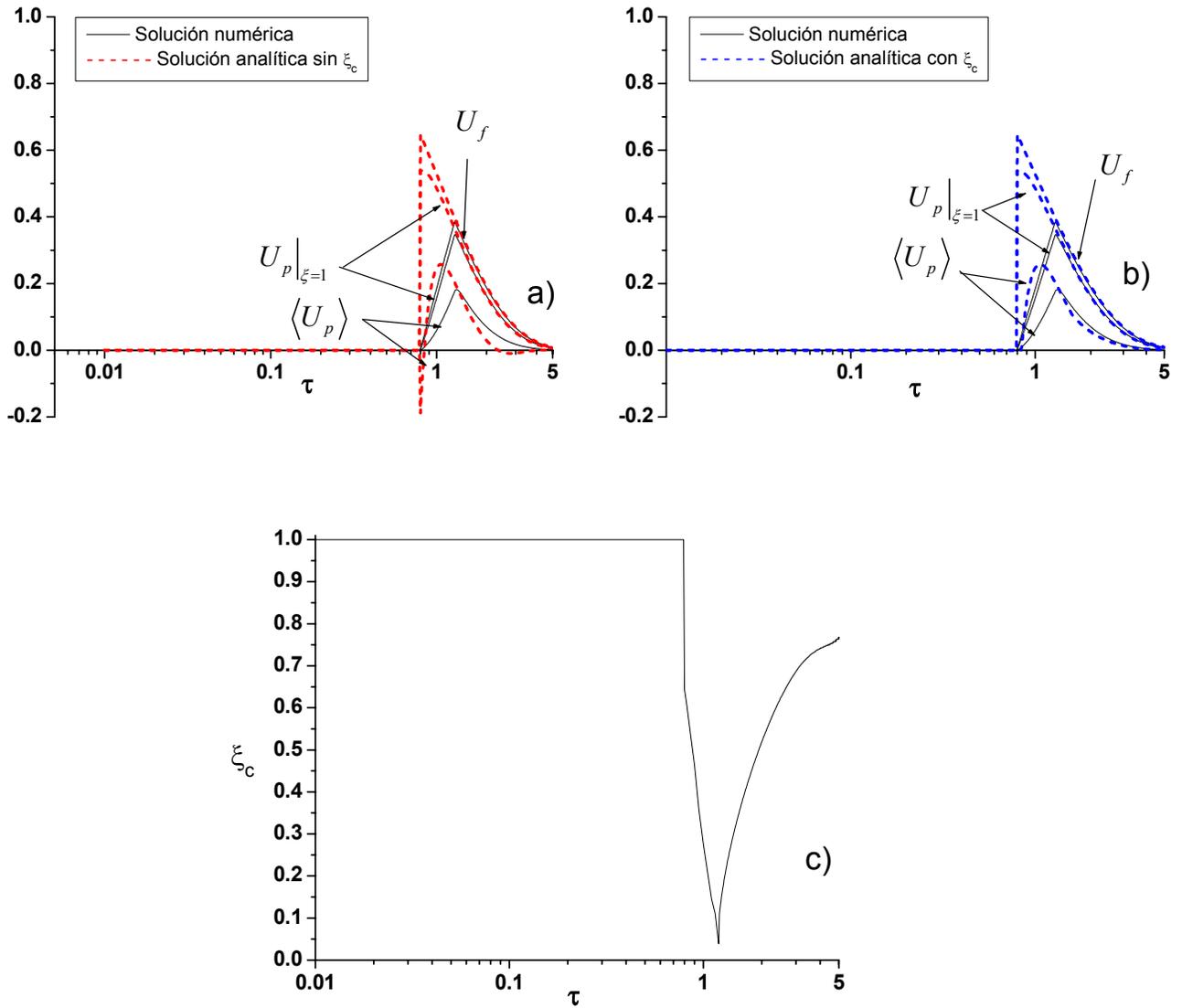


Figura C-2.9: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo pulso finito y $\psi_{in} = 1$, $Bi = 25$ y $\Phi^2 = 3$.

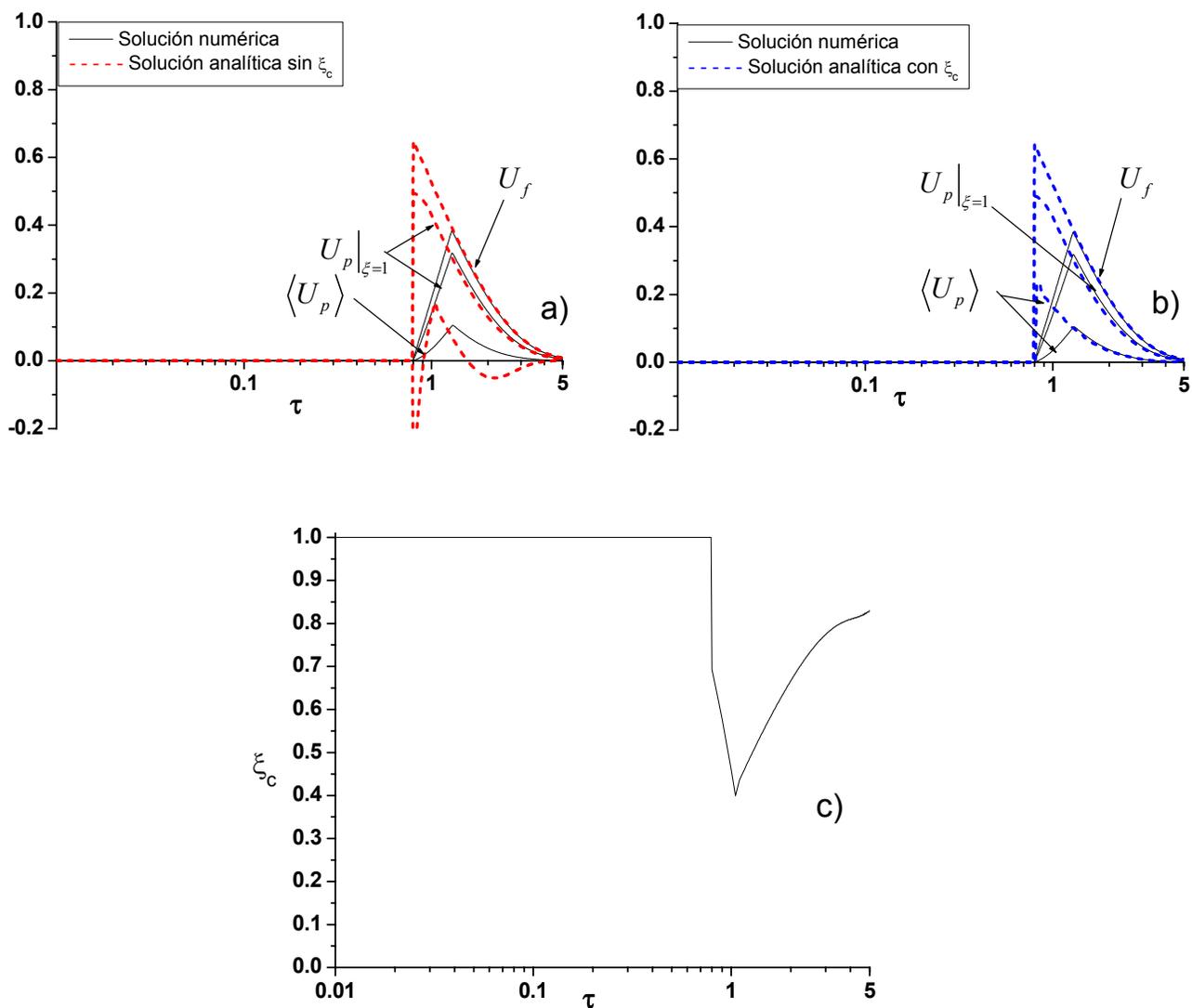


Figura C-2.10: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo pulso finito y $\psi_{in} = 1$, $Bi = 25$ y $\Phi^2 = 8$.

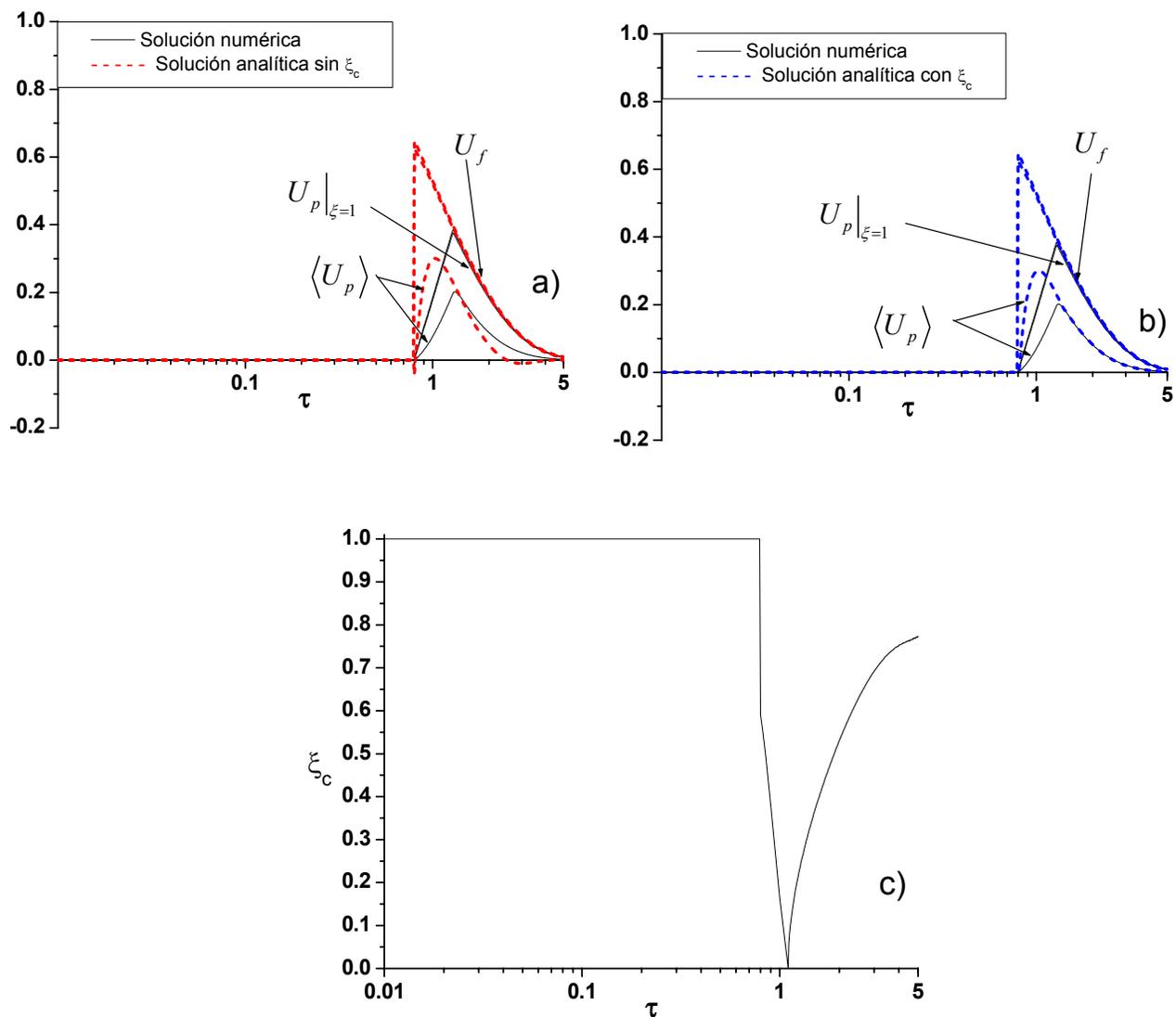


Figura C-2.11: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo pulso finito y $\psi_{in} = 1$, $Bi = 100$ y $\Phi^2 = 3$.

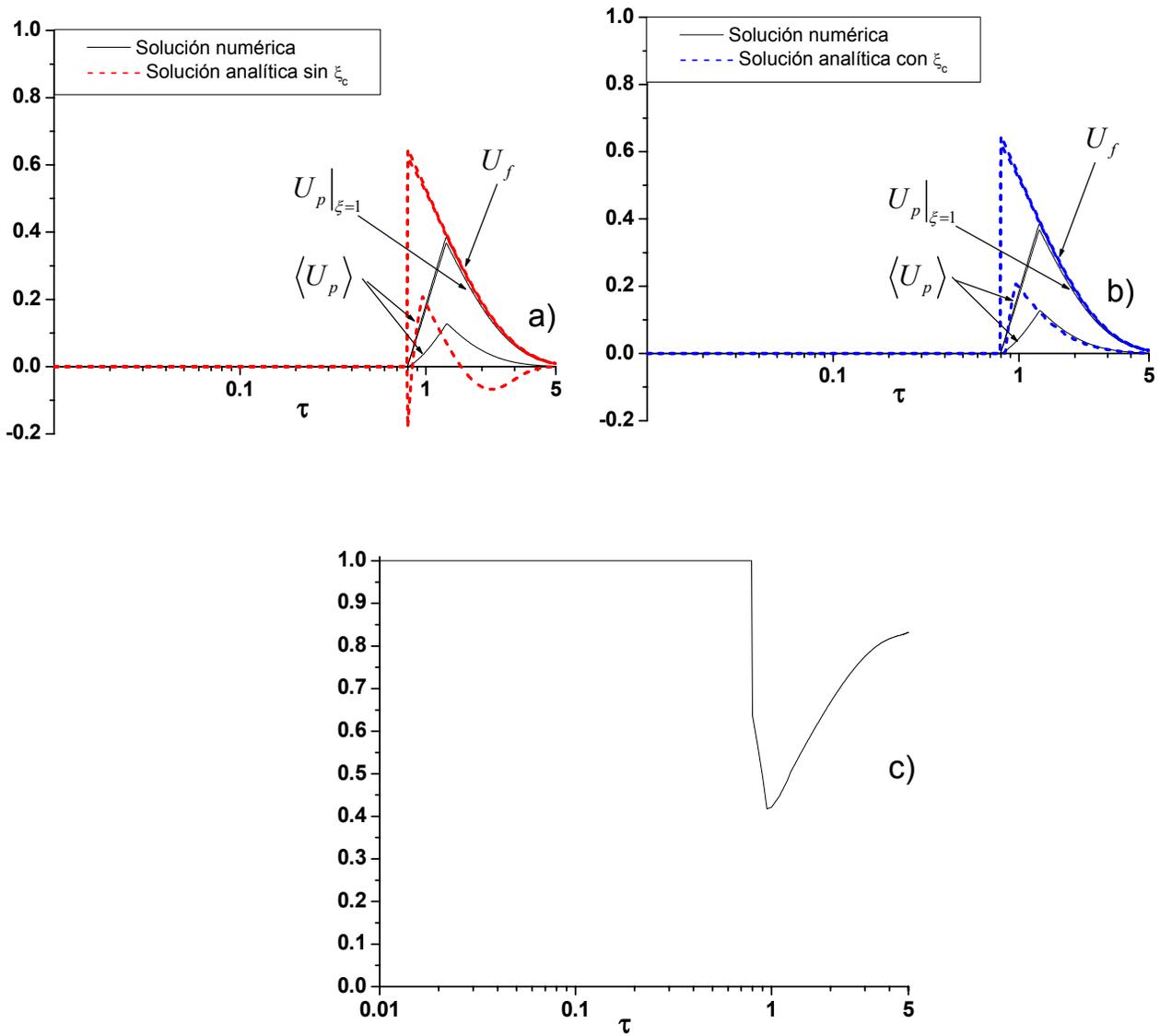


Figura C-2.12: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo pulso finito y $\psi_{in} = 1$, $Bi = 100$ y $\Phi^2 = 8$.

5.7.4.- Pulso finito de duración $\Delta\tau = 0.01$

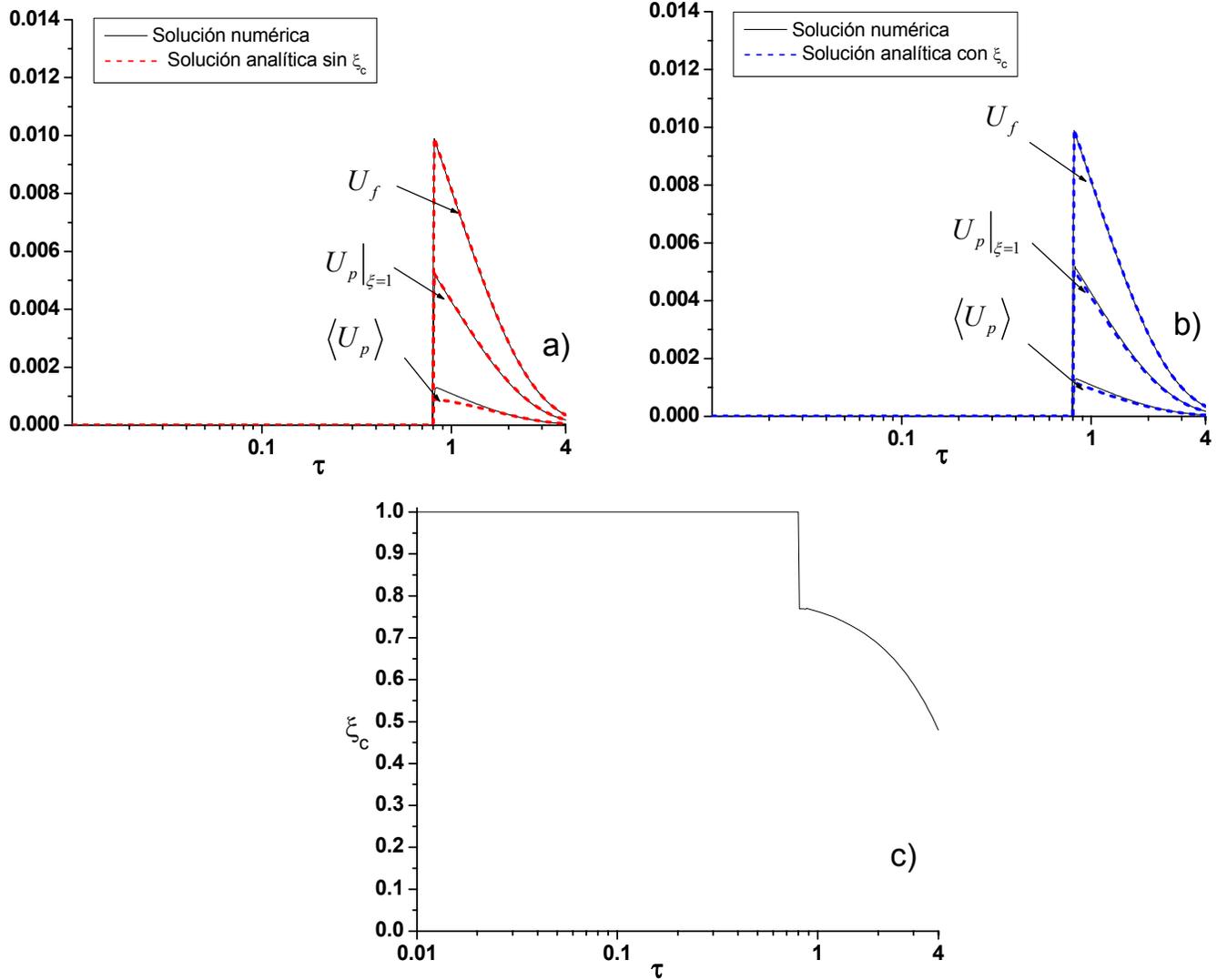


Figura C-2.13: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo pulso finito y $\psi_{in} = 1$, $Bi = 20$ y $\Phi^2 = 3$.

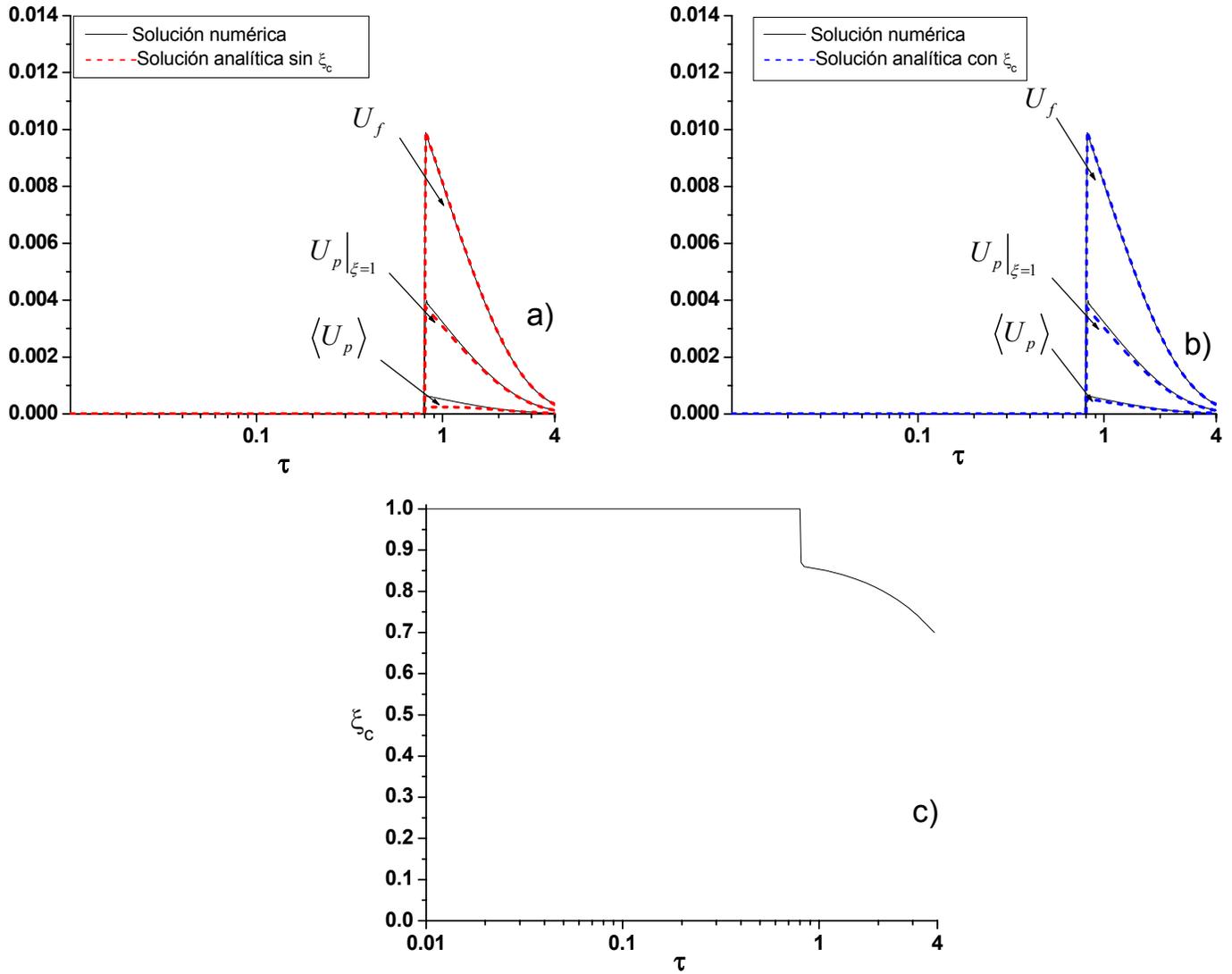


Figura C-2.14: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo pulso finito y $\psi_{in} = 1$, $Bi = 20$ y $\Phi^2 = 8$.

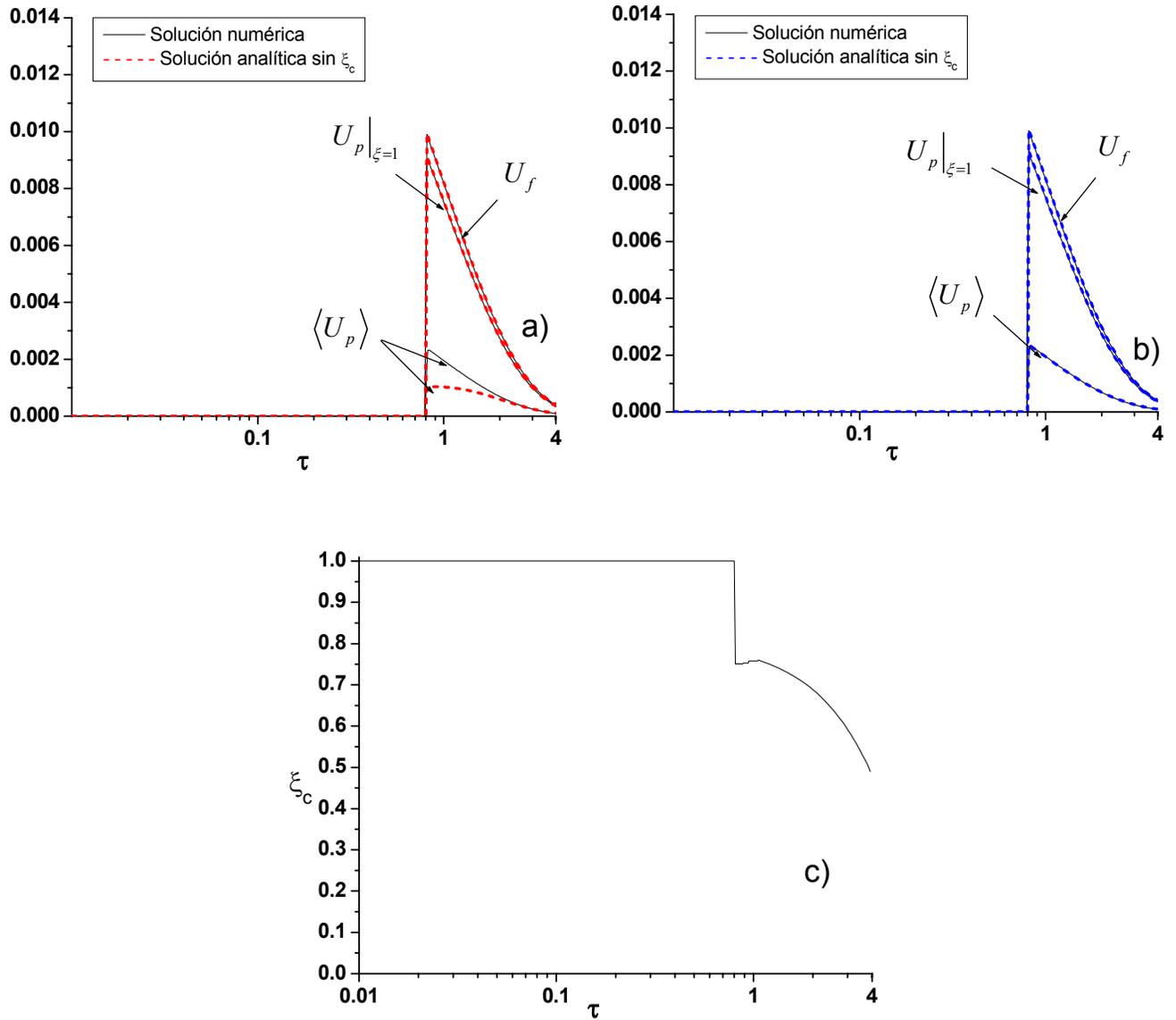


Figura C-2.15: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo pulso finito y $\psi_{in} = 1$, $Bi = 40$ y $\Phi^2 = 3$.

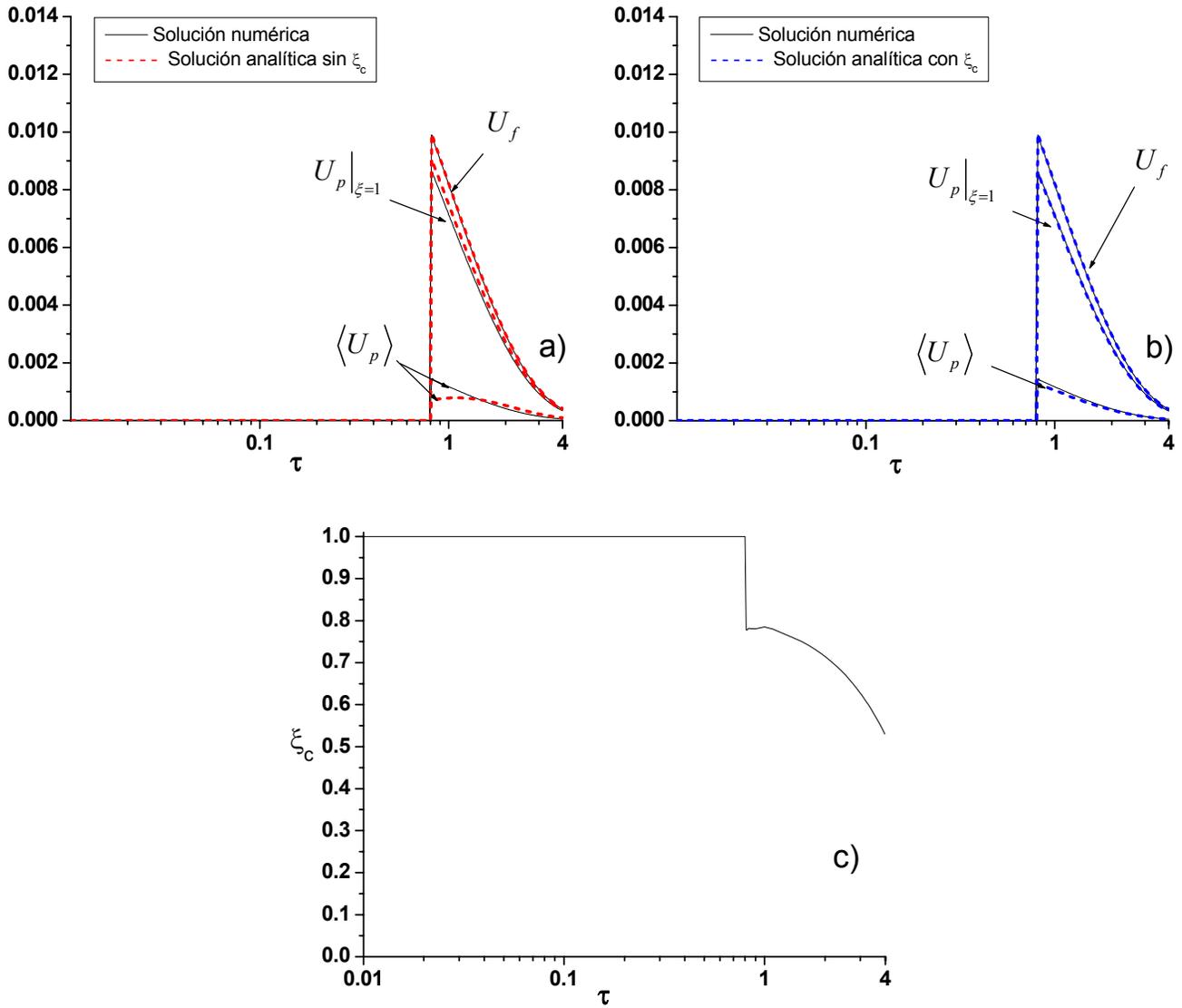


Figura C-2.16: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo pulso finito y $\psi_{in} = 1$, $Bi = 40$ y $\Phi^2 = 8$.

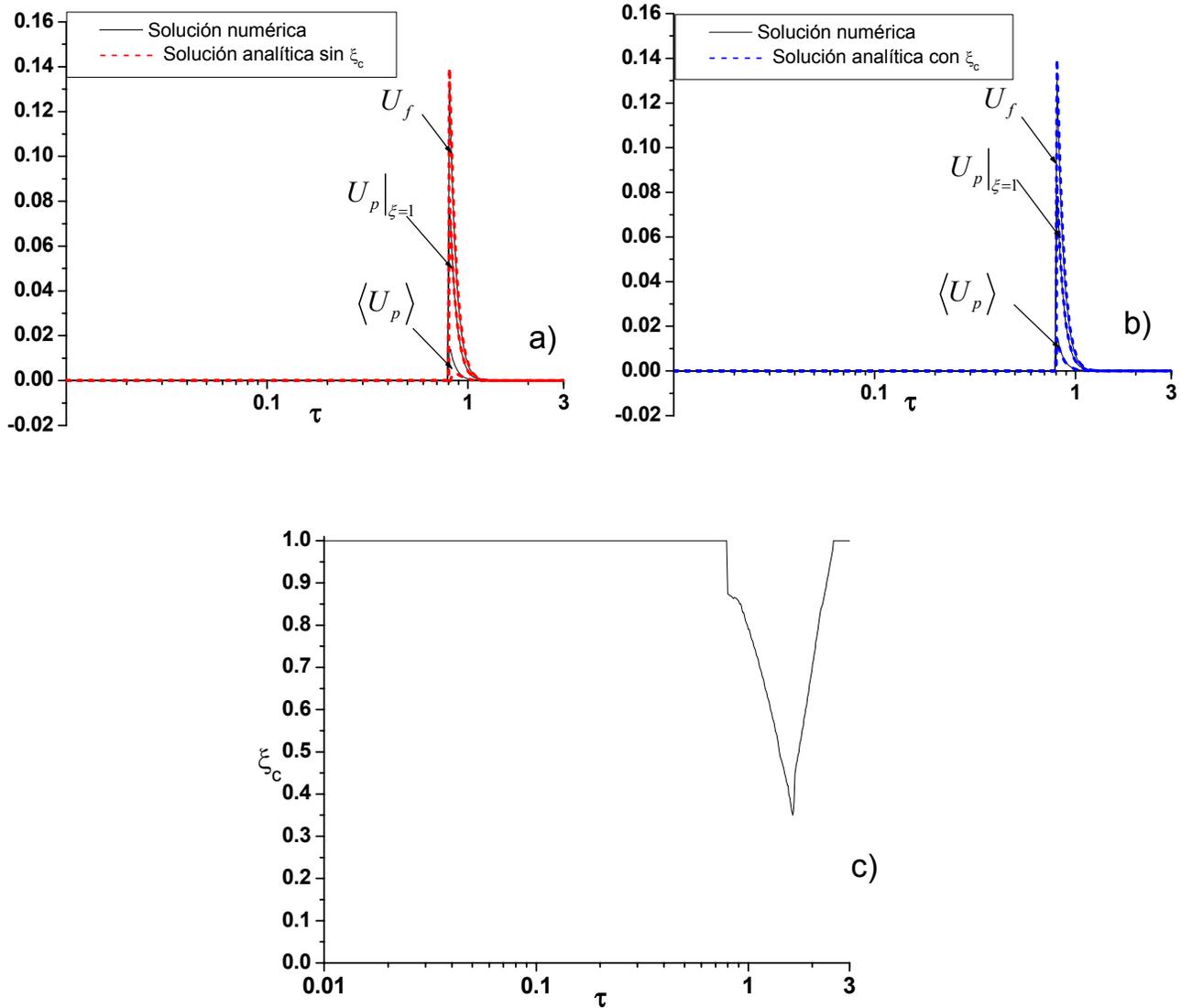


Figura C-2.17: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo pulso finito y $\psi_{in} = 15$, $Bi = 20$ y $\Phi^2 = 50$.

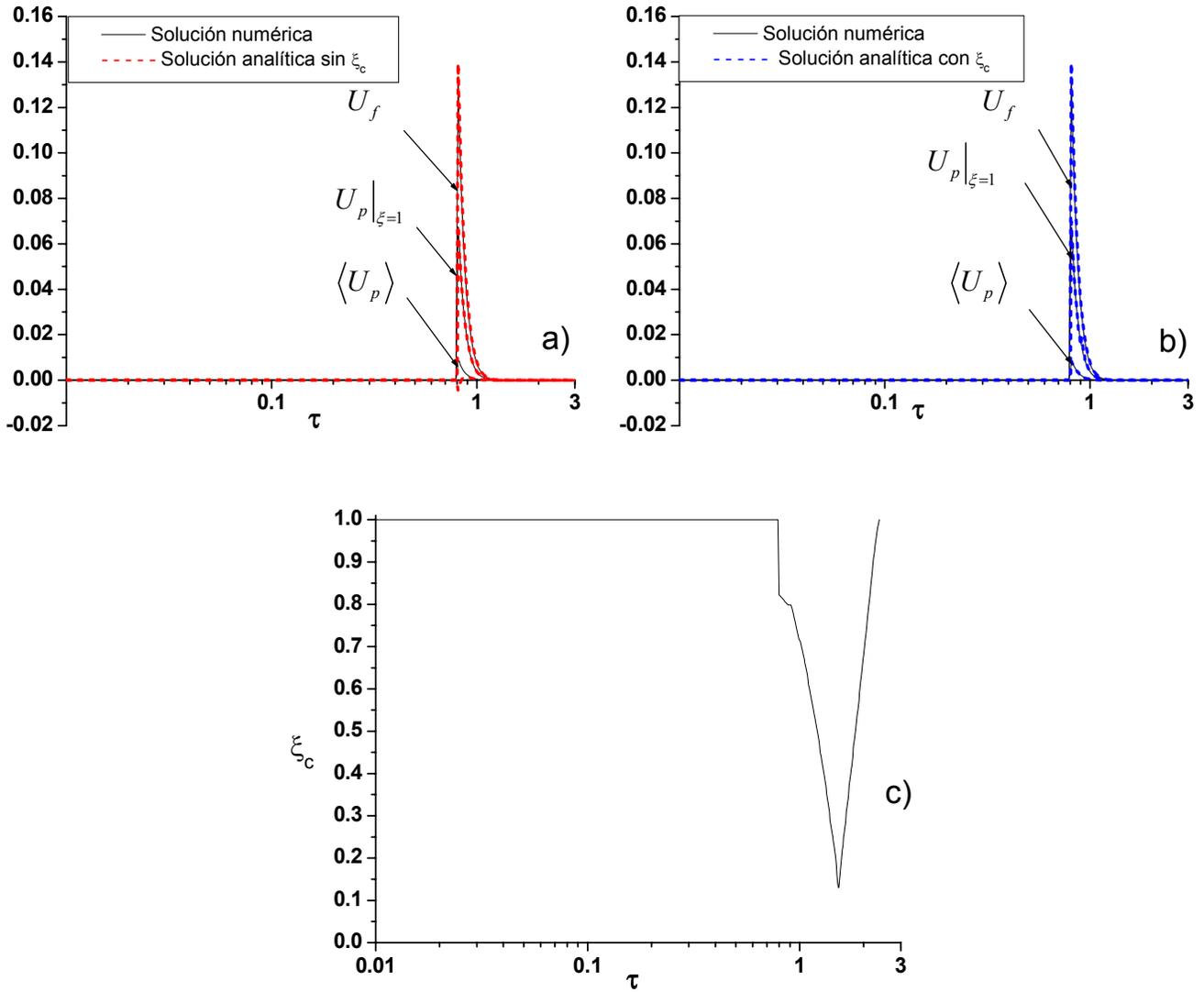


Figura C-2.18: Concentraciones aproximadas y exactas junto con el comportamiento dinámico del radio crítico para una función de alimentación tipo pulso finito y $\psi_{in} = 15$, $Bi = 20$ y $\Phi^2 = 100$.