

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA - IZTAPALAPA  
DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA**

**DIFUSIÓN Y REACCIÓN EN  
CATALIZADORES CON DISTRIBUCIÓN  
NO UNIFORME**

Tesis que presenta  
**Isaías Sánchez Ixmatlahua**  
Para obtener el grado de  
**Maestro en ciencias (Ingeniería química)**

Asesor: Dr. Jesús Alberto Ochoa Tapia

Jurado calificador

Presidente: Dr. Ricardo Alberto Lobo Oehmichen

Secretario: Dr. Jesús Alberto Ochoa Tapia

Vocal: Dr. Alejandro Estrada Baltazar

Mexico, DF. Junio 2015

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA - IZTAPALAPA  
DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

DIFUSIÓN Y REACCIÓN EN  
CATALIZADORES CON DISTRIBUCIÓN  
NO UNIFORME

Tesis que presenta  
**Isaías Sánchez Ixmatlahua**  
Para obtener el grado de  
**Maestro en ciencias (Ingeniería química)**

Asesor: Dr. Jesús Alberto Ochoa Tapia

Jurado calificador

Presidente: Dr. Ricardo Alberto Lobo Oehmichen

Secretario: Dr. Jesús Alberto Ochoa Tapia

Vocal: Dr. Alejandro Estrada Baltazar



Mexico, DF. Junio 2015



*Universidad Autónoma Metropolitana – Iztapalapa*  
*División de Ciencias Básicas e Ingeniería*

*Difusión y reacción en catalizadores con  
distribución no uniforme*

*Tesis que presenta*

*Isaías Sánchez Ixmatlahua*

*Para obtener el grado de*

*Maestro en Ciencias (Ingeniería Química)*

*Asesor*

*Dr. Jesús Alberto Ochoa Tapia*



# Índice

Nomenclatura.....	I
1. Antecedentes .....	1
2. Objetivos .....	12
3. Justificación .....	13
4. Casos de estudio .....	14
4.1. Modelo bidimensional con velocidad de reacción lineal y sus aproximaciones .....	18
4.1.1 Modelo promediado.....	21
4.1.1.1 Modelo promediado con salto .....	24
4.1.2 Modelo bidimensional con salto.....	25
4.2. Modelo unidimensional con velocidad de reacción no lineal .....	27
4.2.1 Modelo con salto .....	30
5. Resultados .....	41
6. Conclusiones.....	43
Apéndice A1 Solución del modelo promediado sin salto y sin resistencia en las fronteras verticales.....	47
Apéndice A2 Solución del modelo promediado sin salto y resistencia en las fronteras verticales .....	52
Apéndice A3 Solución del modelo promediado con salto y sin resistencia en las fronteras verticales .....	55
Apéndice A4 Solución del modelo promediado con salto y resistencia en las fronteras verticales .....	58
Apéndice A5 Gráficas de soluciones de los modelos bidimensional y promedio con y sin salto.....	61
Apéndice A6. Comparación del factor de efectividad teórico y experimental en el trabajo de Wu y col. ....	128
Referencias .....	129



## Resumen

Se obtuvo el factor de efectividad de un catalizador con distribución no uniforme, usando un modelo bidimensional con velocidad de reacción lineal. Se aproximó la zona de reacción del modelo bidimensional mediante una condición de salto; para valores típicos del módulo de Thiele los errores fueron menores al 10 %. Otra aproximación del modelo bidimensional se realizó mediante un modelo promediado, el error en la aproximación dependió mayormente de la resistencia en las fronteras horizontales del catalizador, para valores típicos del módulo de Thiele los errores estuvieron por debajo del 30 y 70 % para resistencias grandes y regulares, respectivamente; a resistencias prácticamente nulas se obtuvieron resultados con errores menores al 15 % para módulos de Thiele menores a 1, para módulos mayores el error aumento de forma desmedida. Finalmente, se realizó una aproximación del modelo promediado usando una condición de salto para representar la zona de reacción; el error en los resultados fue menor al 15 %.

Se obtuvo también el factor de efectividad de un catalizador unidimensional con distribución no uniforme y velocidad de reacción no lineal; se aproximó la zona de reacción mediante una condición de salto. En general, se obtuvieron resultados con errores menores al 10 %.



# Nomenclatura

$a^{(*)}$	Función de distribución de actividad.
$Bi_{m,x}$	Número de Biot sobre el eje vertical, $lk_{m,x}/\mathcal{D}_{e,x}$ , adimensional.
$Bi_{m,y}$	Número de Biot sobre el eje horizontal, $lk_{m,y}/\mathcal{D}_{e,y}$ , adimensional.
$c$	Concentración, $mol/m^3$ .
$c_f$	Concentración en la superficie, $mol/m^3$ .
$\mathcal{D}_e$	Difusividad efectiva, $m^2/s$ .
$h$	Dimensiones vertical del catalizador medido desde el centro del catalizador hacia la superficie, $m$ .
$k_m$	Coefficiente de transferencia de masa, $m/s$ .
$K_A$	Parámetro de la velocidad de reacción tipo Langmuir-Hishelwood.
$l$	Dimensiones horizontal del catalizador medido desde el centro del catalizador hacia la superficie. $m$ .
$l_1$	Distancia medida en forma horizontal desde el centro del catalizador hasta la frontera izquierda de la zona con agente activo, $m$ .
$l_2$	Distancia medida en forma horizontal desde el centro del catalizador hasta la frontera derecha de la zona con agente activo, $m$ .
$s$	Es un valor $s_1 \leq s \leq s_2$ , adimensional.
$s^-$	A la izquierda de $s$ , adimensional.
$s^+$	A la derecha de $s$ , adimensional.
$s_1$	Es el cociente $l_1/l$ , adimensional.
$s_2$	Es el cociente $l_2/l$ , adimensional.
$u$	Concentración adimensional.
$\langle u \rangle$	Concentración promedio, adimensional.
$x$	Coordenada correspondiente a la dirección horizontal. $m$ .
$X$	Coordenada adimensional en la dirección x.

$y$	Coordenada correspondiente a la dirección vertical.
$Y$	Coordenada adimensional en la dirección $y$ , m.

*Letras griegas*

$\beta^2$	Cociente dado por $Bi_{m,y}/\psi$ , adimensional.
$\Delta s$	Diferencia dada por $s_2 - s_1$ , adimensional.
$\eta$	Factor de efectividad, adimensional.
$\sigma$	Producto dado por $K_A c_f$ .
$\Phi$	Módulo de Thiele, adimensional.
$\psi$	Factor de forma definido como el cociente $h/l$ , adimensional.





# 1. Antecedentes

Los catalizadores son importantes para la industria de la transformación, y son por tanto, uno de los motores que mueven a la economía, hoy día, el consumo de petróleo de un país revela el nivel de su sociedad, y como consecuencia, el consumo de los insumos necesarios para su transformación.

Según un reporte publicado por *IHS Chemical* titulado “*Catalyst: Petroleum and Chemical Process*” [1] en diciembre del 2013, más del 90 % de los procesos de fabricación de productos químicos y más del 20 % de todos los productos industriales emplean pasos catalíticos subyacentes, y que la refinación del petróleo se compone casi enteramente de procesos catalíticos. El mismo reporte, reveló que en 2012 el mayor consumidor de catalizadores fue América del norte seguido por Europa occidental, Japón y China, y que se espera que para el año 2017 países emergentes y en vías de desarrollo de la región Asia-Pacífico y el medio oriente se conviertan en mercados importantes para los catalizadores de procesos.

Para enero de 1997 había 700 plantas de refinación en el mundo produciendo más de 75 millones de barriles de petróleo diariamente, para el proceso, la demanda de catalizadores ascendió a casi 7 millones de dólares diarios. México ocupó el lugar 12 en demanda de catalizadores destinados para la refinación de petróleo superado por Arabia Saudita y rebasando a países como España y Brasil, tal como lo muestran las Figuras 1.1 y 1.2.

Por otro lado, hasta enero del 1997 México ocupaba el primer lugar de los países latinoamericanos en demanda de catalizadores destinados a la refinación de petróleo, la Figuras 1.3 y 1.4 muestra la capacidad de refinación de petróleo y el gasto promedio en catalizadores destinados al proceso.

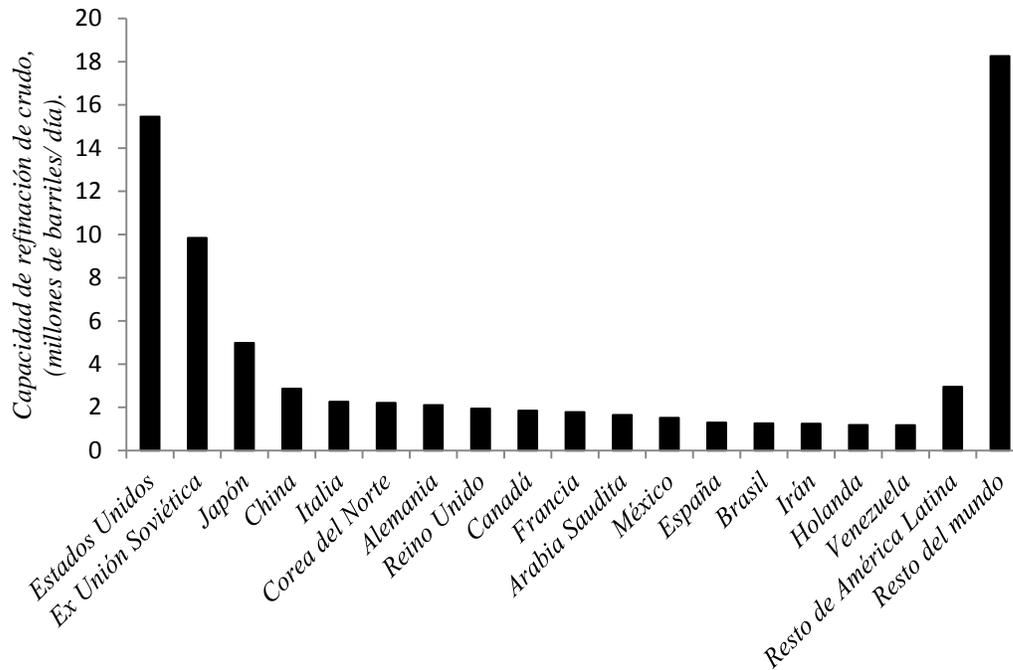


Figura 1.1. Capacidad de refinación de petróleo de diferentes países en 1997. Fuente: Luna, L. K. A. (2004) [2].

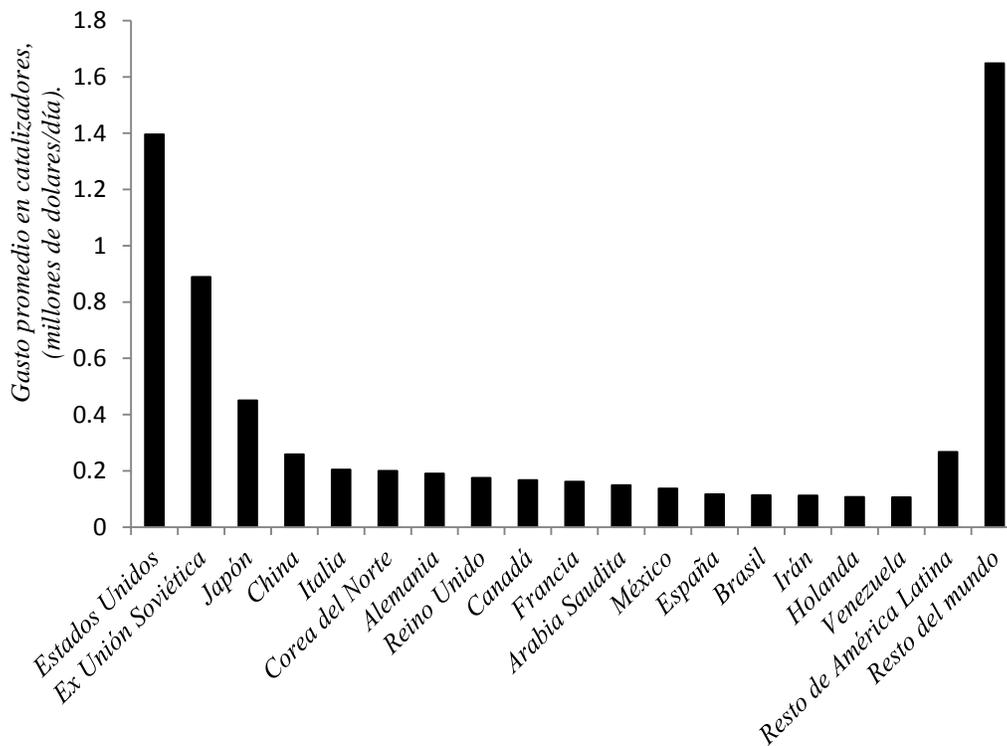


Figura 1.2. Gasto en catalizadores destinado a la refinación del petróleo de diferentes países en 1997. Fuente: Luna, L. K. A. (2004) [2].

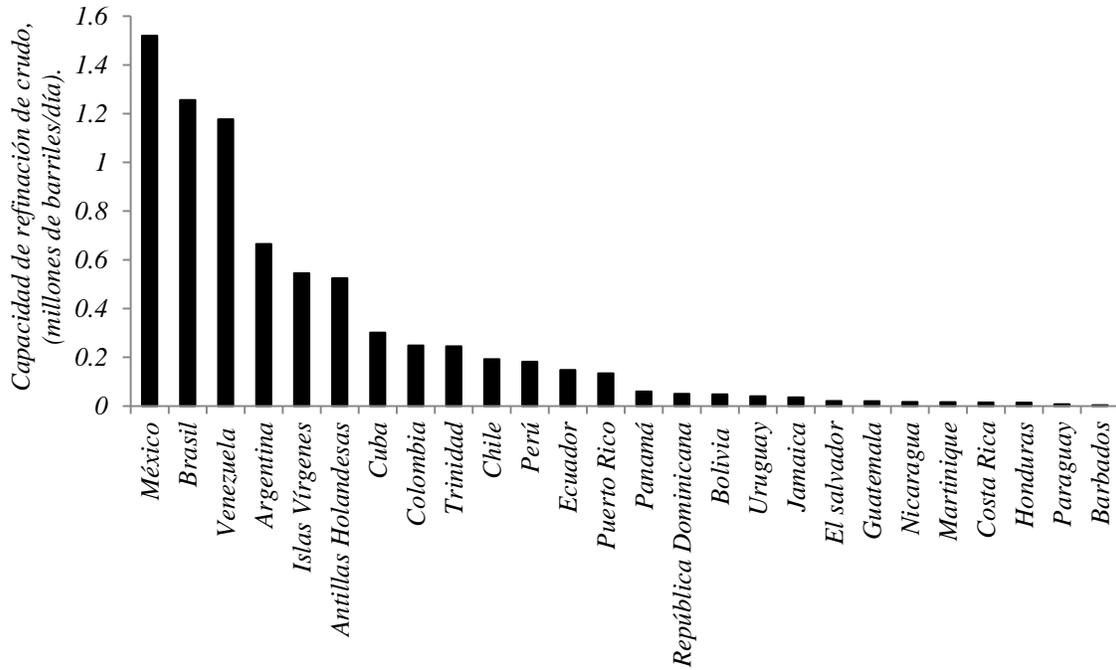


Figura 1.3. Capacidad de refinación de petróleo de diferentes países en 1997. Fuente: Luna, L. K. A. (2004) [2].

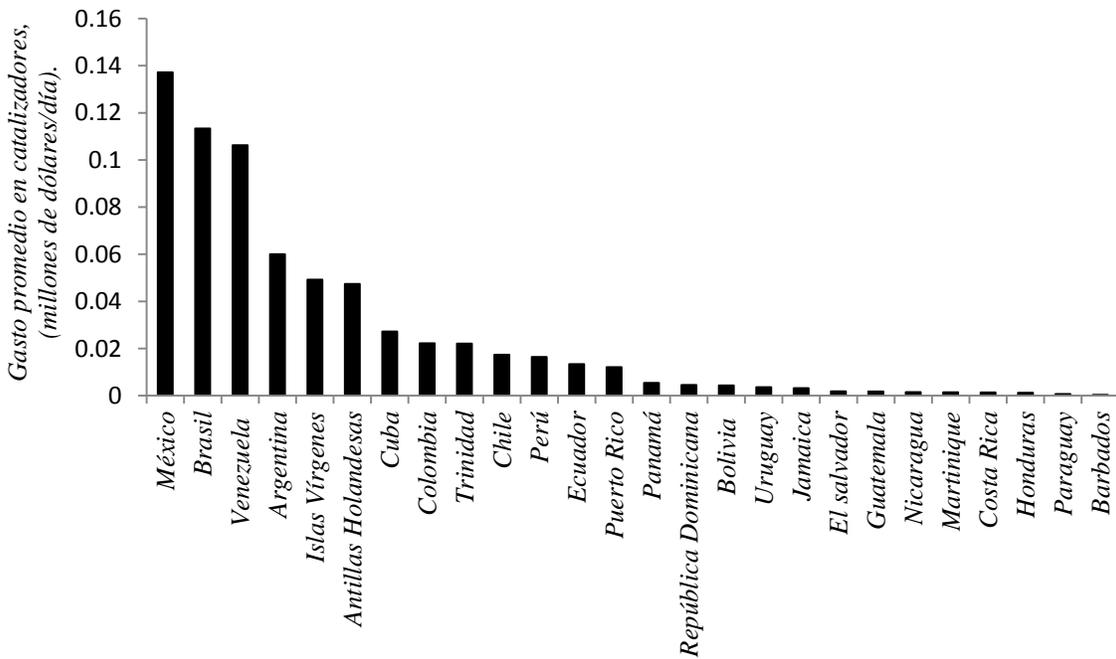


Figura 1.4. Capacidad de refinación de petróleo de diferentes países en 1997. Fuente: Luna, L. K. A. (2004) [2].

El 25 de Abril de 2013 el diario El universal, en su página de internet, en una nota titulada “Alerta sobre muertes por contaminación en el DF” reveló que “según datos del estudio del Clean Air Institute “Calidad del aire en América Latina” realizado con el apoyo del Banco Mundial (BM), los promedios de concentración de ozono en [la ciudad de México] rebasan en 150 % los niveles permitidos por la Organización Mundial de la Salud (OMS) y son los más altos de toda la región”. Con respecto a las consecuencias en la salud, mencionó que “el número de muertes en México por contaminación atmosférica asciende a los 14 mil decesos por año, el nivel más alto sólo superado por Brasil, que tiene cerca de 23 mil” [3].

El 19 de junio del 2014, el jefe de gobierno capitalino, Miguel Ángel Mancera Espinoza presentó la modernización del Programa Hoy no circula (cuyo objetivo es la de disminuir la contaminación del aire), sostuvo que dejarían de circular 560 mil vehículos diariamente, lo cual, dijo, mejoraría la calidad del aire [4]. No obstante, el centro Mario Molina advirtió que la modificación de dicho programa causaría un aumento en el parque vehicular de alrededor del 3 % [5], lo cual, empeoraría la situación, ya *per se* grave. Una posible solución, los catalizadores, el mismo gobierno capitalino puso en marcha un programa para el cambio o instalación de convertidores catalíticos en miles de autos. Según datos proporcionados por el gobierno capitalino, el convertidor catalítico puede reducir la generación de contaminantes hasta en un 80 % [6]. Lo anterior, sólo por mencionar un ejemplo del impacto de los catalizadores en materia medio ambiental.

Por otro lado, en enero del 2011, *BCC Reserch* en su reporte CHM027D titulado “*Petrochemical (Petroleum and chemical) Catalyst: The U.S Market*” estimó que en el año 2010 en los Estados Unidos, las ventas comerciales totales de catalizadores para procesos de petroquímica y refinación de petróleo ascendió alrededor de los \$ 4.1 billones de dólares, mientras que para el año 2015 se espera que alcancen los 4.6 billones de dólares [7]. La recuperación completa de los catalizadores sólidos hace a la catálisis heterogénea económicamente atractiva, ya que los agentes activos utilizados son bastante costosos. Y es que, la regeneración de catalizadores también constituye otro mercado importante, según *BCC Reserch* en su informe CHM046B titulado “*Global Markets for catalyst regeneration*”

publicado en enero de 2012 mencionó que el mercado global para la regeneración de catalizadores alcanzó \$ 3.5 billones de dólares en 2011 y que se espera crezca a \$ 4.1 billones de dólares para el año 2016 [8], esto, entre otras cosas, como resultado de políticas en pro del cuidado del medio ambiente. Por lo que, para que los agentes activos sean utilizados eficientemente son dispersados en soportes con gran área superficial. Como resultado del proceso de preparación, las pastillas catalíticas presentan gradientes de concentración del agente activo, lo cual, en un principio, se pensó eran perjudicial para el desempeño del catalizador [9].

No obstante, los estudios de los gradientes de concentración deliberados del agente activo en catalizadores soportados, como los de Beker y Wei [10,11] y Juang y Weng [12] mostraron las ventajas que podían tener este tipo de catalizadores: mayor factor de efectividad, resistencia al veneno y la posibilidad de modificar los perfiles de temperatura a conveniencia. Por su parte, Beker y Wei [13] encontraron que para una cinética bimolecular tipo Langmuir en un catalizador con el ingrediente catalítico concentrado en una capa colocada a una distancia de la superficie resultó en un factor de efectividad mayor a valores pequeños del módulo de Thiele.

En otro trabajo de Beker y Wei [11] sobre el mismo tema, pero ahora para una reacción de primer orden con envenenamiento. Propusieron diseñar pastillas catalíticas resistentes al envenenamiento mediante la distribución de agente activo. Aunque, como resultado de ella hubiera que tolerar cierto grado de resistencia a la difusión con tal de evitar la rápida desactivación por envenenamiento. Llegaron a la conclusión de que, en efecto, tales catalizadores incrementan su resistencia al envenenamiento.

Juang y Weng [12] estudiaron el desempeño de los catalizadores con distribución no uniforme a diferentes cinéticas como lo son: reacción simple, en paralelo y en serie, sujetos a ensuciamiento en serie y en paralelo, y en un reactor empacado de lecho fijo. Para investigar cuales eran los mejores perfiles de actividad en dichas circunstancias propusieron tres formas: convexa, uniforme y cóncava. Sus resultados revelaron que el uso de catalizadores con distribución no uniforme puede ser útil para controlar la temperatura

dentro de las pastillas del catalizador para obtener mayor velocidad de reacción y mejor selectividad. Reddy y Talukdar [13] también encontraron que la selectividad de un producto deseado depende fuertemente de la distribución de actividad en la pastilla catalítica.

Juang y Weng [12] recomendaron el uso de catalizadores con distribución no uniforme con el fin de obtener un mejor rendimiento y control de la temperatura en un reactor de lecho fijo. En épocas recientes, se ha confirmado que este tipo de catalizadores resultan ventajosos en relación a los convencionales [14]. A este tipo de catalizadores se les pasó a conocer con el nombre de catalizadores con distribución no uniforme, y son como los que se muestran en las Figura 1.5 y 1.6.

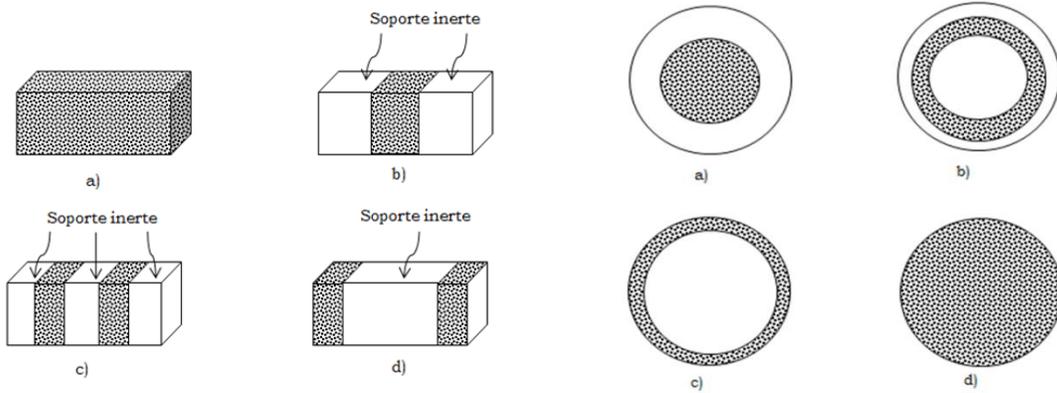


Figura 1.5. a) catalizador uniformemente distribuido, b), c) y d) diferentes configuraciones del catalizador con distribución no uniforme como las objeto de estudio en Beker y Wei [10].

Figura 1.6. a), b) y c) diferentes configuraciones del catalizador con distribución no uniforme d) catalizador uniformemente distribuido, como las objeto de estudio en Beker y Wei [11].

El factor de efectividad cobra importancia en el diseño de reactores químicos, de ahí la necesidad de contar con expresiones que lo predigan. Debido a la naturaleza no lineal de los modelos, que en muchas de las ocasiones involucra este tipo de sistemas, los investigadores en esta área han sido forzados a recurrir a diferentes métodos numéricos para resolverlos. Sin embargo, con el propósito de obtener una expresión analítica de problemas con valores

a la frontera no lineales, Do y Bailey [15] propusieron una transformada integral finita para aproximar la solución. Do [16] obtuvo una solución analítica aproximada para la ecuación de transferencia de masa, para una velocidad de reacción lineal que se lleva a cabo en un catalizador con distribución de actividad no uniforme mediante el uso de la transformada integral citada, de cuyo kernel según Do es explícito y mucho más simple que el kernel empleado por el del método de separación de variables clásico o el método usual de la transformada. Por su parte, Do y Bailey [17] aplicaron dicha metodología a un sistema con resistencia externa a la transferencia de masa y una velocidad de reacción del tipo Michaelis-Menten de  $n$ -ésimo orden; la comparación de los resultados obtenidos mediante el método de perturbaciones confirmaron la eficiencia del método.

El enfoque de la “normalización”, basado en la observación de que ciertas curvas del factor de efectividad en función del módulo de Thiele exhiben un comportamiento asintótico en zonas donde bien, domina la velocidad de reacción o la difusión, y que por tanto, aquella información puede ser incluida en una sola expresión. Lee [18] demostró que en la zona de difusión dominante el enfoque era aplicable a cinéticas generales, exceptuando los órdenes negativos, la solución a la que llegó fue muy simple, tanto que, según el mismo Lee, haría simple el proceso de diseño de reactores heterogéneos.

El mismo enfoque de la normalización fue utilizado en los trabajos de Wang y Varma [19], y Morbidelli y Varma [20]; el primero muestra que el mismo concepto podía aplicarse incluso, si las geometrías diferían. En el segundo, además, incluyeron los efectos de la transferencia de masa interna. Las aproximaciones mostraron ser muy buenas a módulos de Thiele muy grandes. Sin embargo, Wang y Varma advirtieron que la normalización es valiosa en términos de ahorro de tiempo de cómputo, sin embargo, deben ser usadas con suma precaución.

Los métodos numéricos y el método de las perturbaciones fueron algunos métodos para obtener expresiones semianalíticas de dichas aproximaciones asintóticas. Formas un tanto más rigurosas de este enfoque fueron tratadas en Gottifredi y colaboradores [21], [22] y [23]. Las Figuras 1.7 y 1.8 ilustran el concepto detrás del enfoque de la normalización.

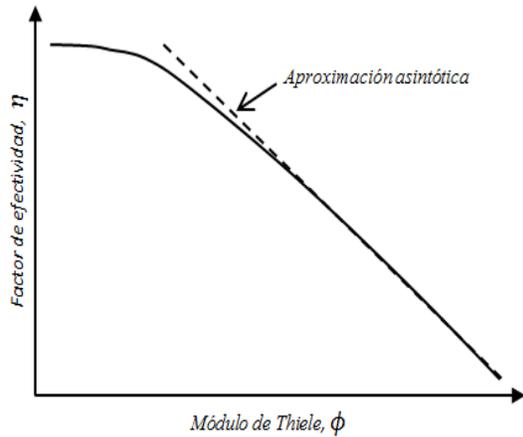


Figura 1.7. Enfoque de la normalización utilizado para aproximar el factor de efectividad  $\eta$  a valores grandes del Módulo de Thiele

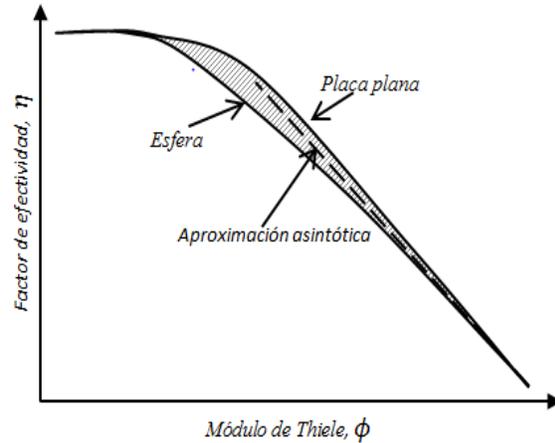


Figura 1.8. Enfoque de la normalización utilizado para aproximar el factor de efectividad de geometrías mediante una sola asíntota, como en Wang y Varma [19].

La optimización fue otro de los puntos de vista desde los que se trató el caso de los catalizadores con distribución no uniforme. Desde tal perspectiva, el factor de efectividad pasó a ser la función objetivo de un problema de maximización, es decir, la búsqueda de una zona dentro del catalizador en la cual depositar el agente activo de tal manera que el factor de efectividad fuera máximo. Se encontraron que una distribución tipo  $\delta$  de Dirac cumple con dicha condición para sistemas: isotérmico [24] y no isotérmico [25] sin resistencia a la transferencia de masa, e isotérmico con resistencia a la transferencia de masa [26].

Trabajos experimentales, tal como el de Wu y col. [27] cuyo propósito fue el de demostrar lo expuesto teóricamente en el trabajo de Morbidelli y colaboradores [25]. Para ello, procedieron fabricando catalizadores con aproximadamente la distribución  $\delta$  de Dirac destinados a la hidrogenación de etileno en  $Pd/Al_2O_3$  y a la metanización de CO en  $Ni/Al_2O_3$ . Al final de su trabajo, Juang y Weng encontraron que la dependencia del factor de efectividad frente al módulo de Thiele medido experimentalmente concuerda bien con lo calculado numéricamente (véase el Apéndice A7), y que además, la localización óptima del

agente activo existe dentro de la pastilla y se mueve hacia la superficie externa a medida que los efectos de la transferencia de masa aumentan.

Los mismos autores realizaron otro trabajo [28], esta vez para un sistema reactante competitivo: la metanización de CO sobre un catalizador Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> acompañado de deposición de carbón. El metal Ni fue depositado en bandas estrechas para simular una distribución  $\delta$  de Dirac; finalmente, concluyeron que para las condiciones dadas, se encontró la localización óptima de la banda. Para la pastilla catalítica con la banda activa en la localización óptima, no solo fue despreciable la influencia de la deposición del carbón, sino que también el factor de efectividad fue máximo.

Por otra parte, según Pavlou y colaboradores [29], el fenómeno del envenenamiento de los catalizadores es de gran importancia industrial y juega un importante papel y que, en general, no debería ser despreciable en el diseño óptimo de pastillas catalíticas. Aseguraron que, si en efecto, la distribución tipo delta de Dirac era óptima para varios casos en los que el envenenamiento fuera despreciable, no lo sería en el caso contrario, en cuya circunstancia, demostraron que la distribución óptima respondería a una distribución tipo bimodal suave. Otros casos de optimización de catalizadores con distribución no uniforme fueron recopilados en el libro “Catalyst design: optimal distribution of catalyst in pellets, reactors, and membranes” escrito por Morbidelli [9].

Los catalizadores huecos, son una nueva propuesta que ha surgido en el campo de los catalizadores no uniformes, cuyos modelos matemáticos son bidimensionales [30,31], que al igual que los catalizadores con gradientes de actividad, rebasan a los uniformes en tópicos como conversiones y factores de efectividad. Otro trabajo en el que también se ha considerado modelos bidimensionales es en Cominos y Gavriliadis [32].

El sistema, objeto de estudio en el presente es como el de la Figura 1.5 c), del cual, se pretende considerar la zona de reacción como una interfase, abordándola mediante la metodología de la condición de salto. Esta última, fue desarrollada para abordar fenómenos interfaciales, pues, en muchos de los procesos de interés para la ingeniería química: la

adsorción, la reacción heterogénea, el transporte de masa superficial y la transferencia de masa, ocurren en interfaces, cuya descripción precisa, requiere de la condición de salto [33]. Lo cual, está respaldado por el hecho de que si, en un sistema heterogéneo, como el que se muestra en la Figura 1.9, tomaran lugar fenómenos interfaciales importantes, se registrarían cambios abruptos en las variables dependientes del sistema en la vecindad de la interface. Por ejemplo: la adsorción, que en cuyo caso, los perfiles de concentración se verían como en la Figura 1.10

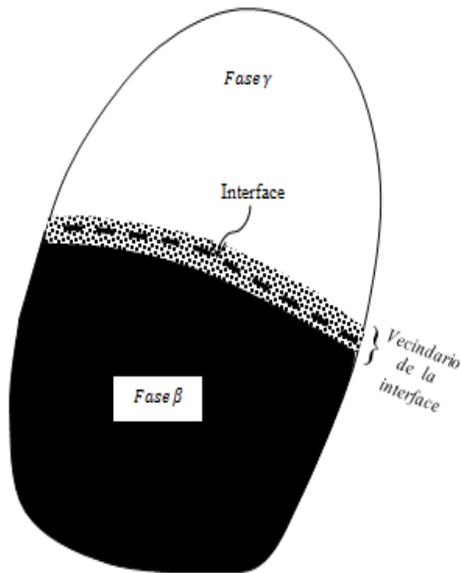


Figura 1.9. Sistema heterogéneo compuesto por dos fases:  $\beta$ ,  $\gamma$  y la interface.

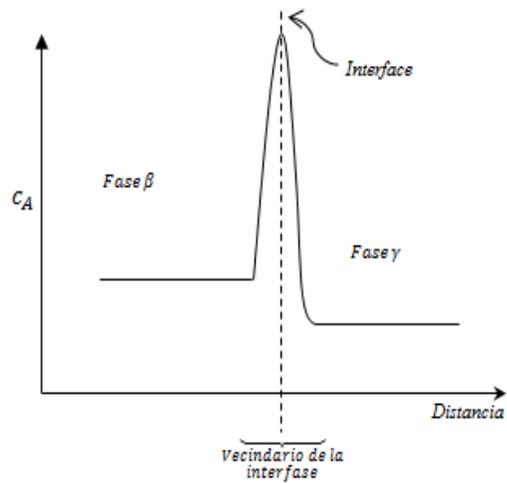


Figura 1.10. Perfiles de concentración cuando un fenómeno interfacial resulta ser importante, como en el caso de la adsorción.

Resolver la ecuación de difusión-reacción para tal zona requerirá una malla computacional fina, lo que en general se evita mediante la construcción de una condición de salto que se construye al promediar la ecuación diferencial para reducirla a una condición de frontera. De esta manera el modelo estará constituido por las ecuaciones de difusión para las zonas inertes acopladas por la condición de salto. Así, la condición de frontera o condición de salto, provee la conexión entre los flujos de las dos fases [34].

Recientemente, este concepto fue utilizado para el estudio de la difusión a través de un sistema de dos fases homogéneas [35]. En donde se consideró difusión y reacción en una fase, y sólo difusión en la otra. Después, al usar la condición de salto para representar la zona con reacción se obtuvieron resultados satisfactorios.

En el presente documento se reporta el modelo y solución de un catalizador con distribución no uniforme para dos casos: bidimensional con velocidad de reacción lineal, y unidimensional con velocidad de reacción no lineal. En particular se evalúa el uso de la condición de salto para representar la zona de reacción. Por ello el trabajo se ha organizado de la siguiente manera: en la sección 1 se ha presentado la importancia del rol económico y los trabajos que se han hecho al respecto de los catalizadores con distribución no uniforme, además de algunos aspectos de la metodología con la que se le pretende dar tratamiento. En la sección 2 se presentan los objetivos que se pretenden alcanzar con el presente trabajo. En la sección 3 se encuentra la justificación. En la sección 4 se presentan el modelo matemático de un catalizador bidimensional con velocidad de reacción lineal y sus simplificaciones mediante promediado y condición de salto; dentro de la misma sección se presenta también el modelo de un catalizador unidimensional con velocidad de reacción no lineal y su simplificación mediante condición de salto. En la sección 5 se presenta los resultados obtenidos, en tanto que en la sección 6, se presenta las conclusiones a las que se llegaron. Finalmente, en los apéndices se pueden encontrar los detalles de la solución de los modelos, así como resultados gráficos de los casos de estudio.

## 2. Objetivos

### Objetivo general

Se modelará un catalizador con distribución no uniforme, utilizando para su análisis, la metodología de la condición de salto. La Figura 2.1 representa el sistema del que se obtendrá el factor de efectividad; las partes sombreadas representan agente activo y el resto es soporte inerte. El estudio se realiza en dos secciones:

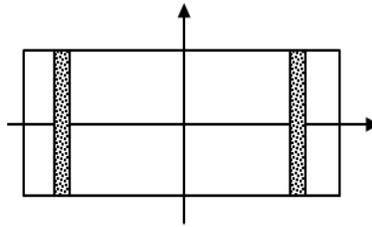


Figura 2.1. Catalizador con distribución no uniforme.

### Objetivos específicos

1. Obtener el factor de efectividad para un sistema bidimensional en el que ocurre una reacción lineal en una zona de espesor finito. En seguida, obtener una estimación del factor de efectividad con un modelo promediado unidimensional. A continuación, deducir una condición de salto que reemplace la zona de reacción y calcular con ella el factor de efectividad de los modelos bidimensional y del promediado.
2. Calcular el factor de efectividad para un sistema unidimensional en el que ocurre una reacción no lineal tipo Langmuir-Hishelwood, con y sin condición de salto para la zona de reacción.

### **3. Justificación**

El modelo matemático de los catalizadores con distribución no uniforme es más complejo que el de los catalizadores convencionales. Sin embargo, debido al uso casi generalizado de los catalizadores en la fabricación de productos químicos, su empleo en fabricación de productos industriales y las ventajas que los catalizadores con distribución no uniforme ofrecen, tal como factores de efectividad mayores, resultaría útil contar con modelos simplificados de los catalizadores con distribución no uniforme. De tal manera que la predicción de factores de efectividad sea, sin mucha pérdida de precisión, simple y acelere los cálculos necesarios.

## 4. Casos de estudio

### 4.1. Modelo bidimensional con velocidad de reacción lineal y sus aproximaciones.

Se consideró la geometría ilustrada en a) de la Figura 4.1, como objeto de estudio en el presente trabajo; se trata de un catalizador en dos dimensiones de longitud  $2l$  y altura  $2h$ , la cual consta de cinco zonas, dos de las cuales contienen agente activo (las zonas sombreadas en a) de la Figura 4.1), el resto de ellas son inertes. El sistema se describió mediante el modelo matemático de difusión y reacción en coordenadas cartesianas, sujeta a dos conjuntos de condiciones en las fronteras, ambos con resistencia al transporte de masa en las fronteras horizontales:

- \* Sin resistencia a la transferencia de masa en las fronteras verticales,
- \* Con resistencia a la transferencia de masa en las fronteras verticales.

Los modelos resultantes se sometieron a dos diferentes tratamientos

- \* Promediado en la dimensión vertical.
- \* Sin promedio

El modelo promediado (cuyo efecto geométrico puede apreciarse en c la Figura 4.1) resultó en un modelo de estructura matemática más simple, para aproximar a su homólogo bidimensional.

En seguida, cada modelo resultante, se trató de la siguiente manera

- \* Con condición de salto.
- \* Sin condición de salto.

La condición de salto, sustituyó la zona de reacción mediante una condición de frontera (tal como se muestra en las geometrías ilustradas en la figura b para el modelo bidimensional y d de la Figura 4.1 para el modelo promediado)

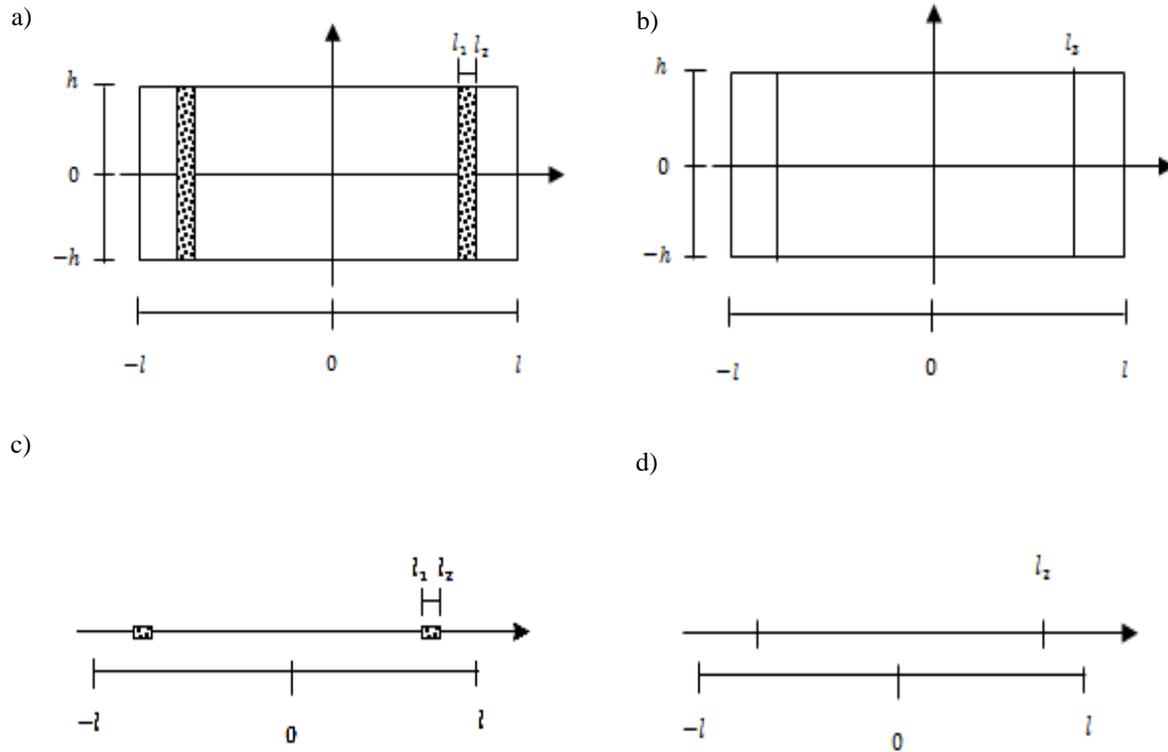


Figura 4.1. a) Modelo bidimensional, b) Modelo bidimensional con salto, c) Modelo promediado sin salto, d) Modelo promediado con salto.

El modelo matemático que corresponde al a) de la Figura 4.1 fue

$$\mathcal{D}_e \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) = a(x, y)kc, \quad (1)$$

sujeta a

$$\frac{\partial c}{\partial x}(0, y) = 0 \quad (2)$$

$$\mathcal{D}_{e,x} \frac{\partial c}{\partial x}(l, y) = -k_{m,x} [c(l, y) - c_f] \quad (3)$$

y

$$\frac{\partial c}{\partial y}(x, 0) = 0 \quad (4)$$

$$\mathcal{D}_{e,y} \frac{\partial c}{\partial y}(x, h) = -k_{m,y} [c(x, h) - c_f], \quad (5)$$

la función de distribución de actividad es como sigue

$$a(x, y) = \begin{cases} a & \text{si } l_1 < x < l_2 \text{ y } 0 < y < h \\ 0 & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (6)$$

y

$$a = \frac{l}{l_2 - l_1} \quad (7)$$

donde  $c$  es la concentración,  $c_f$  la concentración en la superficie,  $x$  y  $y$  las coordenadas correspondientes a la dirección horizontal y vertical, respectivamente;  $l$  y  $h$  son las dimensiones horizontal y vertical medidas desde el centro del catalizador hacia la superficie, respectivamente;  $l_1$  y  $l_2$  son, respectivamente, las distancias medidas en forma horizontal desde el centro del catalizador hasta la frontera izquierda y derecha de la zona con agente activo;  $k_m$  es el coeficiente de transferencia de masa,  $\mathcal{D}_e$  la difusividad efectiva.

Las ecuaciones (2) a la (5) representan las condiciones para el caso con resistencia en las fronteras verticales, para el caso sin resistencia en esas fronteras, se reemplaza la condición (3) se reduce a:  $c(l, y) = c_f$ . El modelo aprovecha la simetría horizontal y vertical de la

geometría, tal como lo expresan las condiciones en las fronteras (2) y (4), de modo que solo se resolvió una cuarta parte del total del dominio.

Se utilizaron las siguientes variables y parámetros adimensionales

$$u = \frac{c}{c_f}, \quad X = \frac{x}{l}, \quad Y = \frac{y}{l}, \quad s_1 = \frac{l_1}{l}, \quad s_2 = \frac{l_2}{l} \text{ y } \psi = \frac{h}{l}.$$

Con dichas definiciones se procedió a la adimensionalización, las ecuaciones (1) a la (5) quedaron

$$\frac{\partial^2 u}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial Y^2} = a(X, Y)\Phi^2 u, \quad (8)$$

sujeta a

$$\frac{\partial u}{\partial X}(0, Y) = 0 \quad (9)$$

$$\frac{\partial u}{\partial Y}(1, Y) = -Bi_{m,x}[u(1, Y) - 1], \quad (10)$$

$$\frac{\partial u}{\partial Y}(X, 0) = 0 \quad (11)$$

y

$$\frac{\partial u}{\partial Y}(X, \psi) = -Bi_{m,y}[u(X, \psi) - 1], \quad (12)$$

con

$$a(X, Y) = \begin{cases} a & \text{si } s_1 < X < s_2 \text{ y } 0 < Y < \psi \\ 0 & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (13)$$

y

$$a = \frac{1}{s_2 - s_1}. \quad (14)$$

Como consecuencia de la adimensionalización se obtuvieron los siguientes números adimensionales

$$\Phi^2 = \frac{l^2 k}{\mathcal{D}_e}, \quad Bi_{m,x} = \frac{lk_{m,x}}{\mathcal{D}_{e,x}} \quad \text{y} \quad Bi_{m,y} = \frac{lk_{m,y}}{\mathcal{D}_{e,y}}$$

donde  $\phi$  es el módulo de Thiele y  $Bi_m$  el número de Biot.

**4.1.1 Modelo promediado.** Se consideró la concentración adimensional  $u(X, Y)$  continua entre  $0 \leq Y \leq \psi$ , con lo que la concentración promedio se definió como

$$\langle c \rangle = \frac{1}{\psi} \int_0^\psi u(X, Y) dY \quad (15)$$

donde  $\langle u \rangle$  es sólo función de  $X$ . De esta manera, al aplicarla a las ecuaciones (8) a la (12) se obtuvo (La Figura 4.1 c representa el sistema resultante de tal operación)

$$\frac{d^2 \langle u \rangle}{dX^2} + \frac{1}{\psi} \frac{\partial u}{\partial Y} \Big|_0^\psi = a(X, Y) \Phi^2 \langle u \rangle \quad (16)$$

sujeta a

$$\frac{d \langle u \rangle}{dX} \Big|_{X=0} = 0 \quad (17)$$

$$\frac{d \langle u \rangle}{dX} \Big|_{X=1} = -Bi_{m,x} \left[ \langle u \rangle \Big|_{X=1} - 1 \right] \quad (18)$$

y

$$\frac{\partial u}{\partial Y}(X, 0) = 0 \quad (19)$$

$$\frac{\partial u}{\partial Y}(X, \psi) = -Bi_{m,Y} [u(X, \psi) - 1], \quad (20)$$

Se asumió válida la aproximación  $u(X, \psi) \approx \langle u \rangle$ , en la ecuación (20) obteniéndose así

$$\frac{\partial u}{\partial Y}(X, \psi) \approx -Bi_{m,Y} [\langle u \rangle - 1] \quad (21)$$

con lo cual el modelo descrito por las ecuaciones (16) a la (20) se redujo a

$$\frac{d^2 \langle u \rangle}{dX^2} - \beta^2 [\langle u \rangle - 1] = a(X, Y) \Phi^2 \langle u \rangle \quad (22)$$

sujeta a

$$\left. \frac{d \langle u \rangle}{dX} \right|_{X=0} = 0 \quad (23)$$

$$\left. \frac{d \langle u \rangle}{dX} \right|_{X=1} = -Bi_{m,X} [\langle u \rangle|_{X=1} - 1] \quad (24)$$

donde

$$\beta^2 = \frac{Bi_{m,Y}}{\psi}$$

Se supuso que la ecuación tiene solución en forma de una función a trozos, de la siguiente manera

$$\langle u \rangle = \begin{cases} \langle u \rangle_1 & \text{si } 0 \leq X \leq s_1 \\ \langle u \rangle_2 & \text{si } s_1 \leq X \leq s_2 \\ \langle u \rangle_3 & \text{si } s_2 \leq X \leq 1 \end{cases} \quad (25)$$

Para el caso sin resistencia en las fronteras verticales, es decir, para cuando  $Bi_{m,X}$  es muy grande, se obtuvo

$$\langle u \rangle_1 = A_1 \cosh(\beta X) + 1 \quad (26)$$

$$\langle u \rangle_2 = B_1 \sinh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} X\right) + C_1 \cosh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} X\right) + \frac{\beta^2}{\beta^2 + a\Phi^2} \quad (27)$$

$$\langle u \rangle_3 = D_1 \frac{\sinh[\beta(X-1)]}{\cosh(\beta)} + 1 \quad (28)$$

donde

$$A_1 = \frac{\lambda_{A1}}{\lambda_1}, B_1 = \frac{\lambda_{B1}}{\lambda_1}, C_1 = \frac{\lambda_{C1}}{\lambda_1} \text{ y } D_1 = \frac{\lambda_{D1}}{\lambda_1}. \quad (29)$$

donde  $\lambda_1, \lambda_{A1}, \lambda_{B1}, \lambda_{C1}$  y  $\lambda_{D1}$  es tan dados en el Apéndice A1. El factor de efectividad se obtuvo de su definición habitual

$$\eta = \frac{\text{Velocidad de reacción en la totalidad del catalizador}}{\text{Velocidad de reacción evaluada a las condiciones de la superficie}},$$

quedando para este caso como

$$\eta = \frac{1}{\psi(s_2 - s_1)\sqrt{\beta^2 + a\phi^2}} \left[ \begin{array}{l} B_1 \left[ \sinh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_2\right) - \sinh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_1\right) \right] \\ + C_1 \left[ \cosh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_2\right) - \cosh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_1\right) \right] \end{array} \right] + \frac{\beta^2}{\psi(\beta^2 + a\Phi^2)}$$

Para el caso con resistencia en  $x = l$ , se obtuvo

$$\langle u \rangle_1 = A_2 \cosh(\beta X) + 1 \quad (30)$$

$$\langle u \rangle_2 = B_2 \sinh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} X\right) + C_2 \cosh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} X\right) + \frac{\beta^2}{\beta^2 + a\Phi^2} \quad (31)$$

$$\langle u \rangle_3 = D_2 \left[ \frac{Bi_{m,x} \sinh[\beta(X-1)] - \beta \cosh[\beta(X-1)]}{\beta \sinh(\beta) + Bi_{m,x} \cosh(\beta)} \right] + 1 \quad (32)$$

donde

$$A_2 = \frac{\lambda_{A2}}{\lambda_2}, B_2 = \frac{\lambda_{B2}}{\lambda_2}, C_2 = \frac{\lambda_{C2}}{\lambda_2} \text{ y } D_2 = \frac{\lambda_{D2}}{\lambda_2}. \quad (33)$$

donde  $\lambda_2, \lambda_{A2}, \lambda_{B2}, \lambda_{C2}$  y  $\lambda_{D2}$  es tan dados en el Apéndice A2. El factor de efectividad quedó como sigue

$$\eta = \frac{1}{\psi(s_2 - s_1)\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2}} \left[ \begin{array}{l} B_2 \left[ \sinh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_2\right) - \sinh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_1\right) \right] \\ + C_2 \left[ \cosh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_2\right) - \cosh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_1\right) \right] \end{array} \right] + \frac{\beta^2}{\psi(\beta^2 + a\Phi^2)}$$

**4.1.1.1 Modelo promediado con salto.** Se supuso  $u(X, Y)$  continua entre  $s_1 \leq X \leq s_2$ , con lo que en seguida, se definió el promedio en la zona de reacción mediante la siguiente expresión

$$\bar{u} = \frac{1}{\Delta s} \int_{s_1}^{s_2} u(X, Y) dX, \quad (34)$$

donde  $\bar{u}$  es la concentración promedio en la zona de reacción. Tal definición permitió obtener una condición de salto como a continuación se muestra.

**Condición de salto.** Se tomó la parte de la ecuación (8) válida en la zona de reacción

$$\frac{\partial^2 u}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial Y^2} = a\Phi^2 u,$$

Se promedió la zona de reacción utilizando (34), con lo cual se obtuvo

$$\frac{1}{\Delta s} \left( \left. \frac{\partial u}{\partial X} \right|_{s_2} - \left. \frac{\partial u}{\partial X} \right|_{s_1} \right) + \frac{d^2 \bar{u}}{dY^2} = a\Phi^2 \frac{1}{\Delta s} \int_{s_1}^{s_2} u dX,$$

En seguida, se asumió la validez de las siguientes aproximaciones:  $\frac{\partial u}{\partial X}\Big|_{s_2} \approx \frac{\partial u}{\partial X}\Big|_{s^+}$  y

$\frac{\partial u}{\partial X}\Big|_{s_1} \approx \frac{\partial u}{\partial X}\Big|_{s^-}$  (obtenidas *ad libitum*), donde  $s_1 \leq s \leq s_2$ . Geométricamente, las

aproximaciones anteriores compactan la zona de reacción a una geometría singular que divide las zonas inertes del catalizador. Adicionalmente, y a consecuencia de las

aproximaciones hechas, se supuso que  $\frac{1}{\Delta s} \int_{s_1}^{s_2} u dX \approx u|_s$ . Finalmente, se consideró  $\Delta s$  muy

pequeña, por lo que se tomó  $\Delta s \frac{d^2 \bar{u}}{dY^2} \approx 0$ . Con lo anterior, la condición de salto quedó de la siguiente manera

$$\frac{\partial u}{\partial X}\Big|_{s^+} - \frac{\partial u}{\partial X}\Big|_{s^-} - \Phi^2 u|_s = 0, \quad (35)$$

Utilizando el promedio en  $Y$ , la condición de salto quedó

$$\frac{d\langle u \rangle}{dX}\Big|_{s^+} - \frac{d\langle u \rangle}{dX}\Big|_{s^-} - \Phi^2 \langle u \rangle|_s = 0, \quad (36)$$

Se aplicó la condición de salto a la ecuación (22) con condiciones en las fronteras (23) a la (24)

$$\frac{d^2 \langle u \rangle}{dX^2} - \beta^2 [\langle u \rangle - 1] = 0 \quad (37)$$

sujeta a

$$\frac{d\langle u \rangle}{dX}\Big|_{X=0} = 0 \quad (38)$$

$$\langle u \rangle|_{X=s^-} = \langle u \rangle|_{X=s^+} \quad (39)$$

$$\left. \frac{d\langle u \rangle}{dX} \right|_{s^+} - \left. \frac{d\langle u \rangle}{dX} \right|_{s^-} - \Phi^2 \langle u \rangle \Big|_s = 0 \quad (40)$$

$$\left. \frac{d\langle u \rangle}{dX} \right|_{X=1} = -Bi_{m,X} [\langle u \rangle \Big|_{X=1} - 1] \quad (41)$$

A diferencia de las ecuaciones (22) a la (24) las ecuaciones (37) a la (41) omiten la zona de reacción, cuyo efecto quedó resumido en la condición de salto en la interface en  $X = s$  (tal como lo ilustra el de la Figura 4.1 d); dicho de otro modo, el efecto de la fuente (la velocidad de reacción) quedó resumido en dicha condición. Se completó el problema exigiéndose la continuidad de la concentración en la interface. Se supuso una solución en forma de la función a trozos

$$\langle u \rangle = \begin{cases} \langle u \rangle_1 & \text{si } 0 \leq X \leq s \\ \langle u \rangle_2 & \text{si } s \leq X \leq 1 \end{cases} \quad (42)$$

Para el modelo sin resistencia en las fronteras verticales, es decir, para el caso en el que  $Bi_{m,X}$  es muy grande, se obtuvo

$$\langle u \rangle_1 = A_3 \cosh(\beta X) + 1 \quad (43)$$

$$\langle u \rangle_2 = B_3 \frac{\sinh(\beta(X-1))}{\cosh(\beta)} + 1 \quad (44)$$

para las cuales

$$A_3 = \frac{\lambda_{A3}}{\lambda_3} \text{ y } B_3 = \frac{\lambda_{B3}}{\lambda_3} \quad (45)$$

donde  $\lambda_3$ ,  $\lambda_{A3}$  y  $\lambda_{B3}$  es tan dados en el Apéndice A3. Empleado la definición habitual, el factor de efectividad quedó como a continuación

$$\eta = \frac{1}{\psi} [A_3 \cosh(\beta s) + 1]$$

Para el caso con resistencia en las fronteras verticales se obtuvo

$$\langle u \rangle_1 = A_4 \cosh(\beta X) + 1 \quad (46)$$

$$\langle u \rangle_2 = B_4 \left[ \frac{Bi_{m,x} \sinh[\beta(X-1)] - \beta \cosh[\beta(X-1)]}{\beta \sinh(\beta) + Bi_{m,x} \cosh(\beta)} \right] + 1 \quad (47)$$

con

$$A_4 = \frac{\lambda_{A4}}{\lambda_4} \text{ y } B_4 = \frac{\lambda_{B4}}{\lambda_4} \quad (48)$$

donde  $\lambda_4$ ,  $\lambda_{A4}$  y  $\lambda_{B4}$  es tan dados en el Apéndice A4. El factor de efectividad quedó como sigue

$$\eta = \frac{1}{\psi} [A_4 \cosh(\beta s) + 1]$$

**4.1.2 Modelo bidimensional con salto.** Se partió de la ecuación (8), se eliminó la fuente de la misma y se agregó la condición de salto (35)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial Y^2} = 0, \quad (49)$$

sujeta a

$$\frac{\partial u}{\partial X}(0, Y) = 0 \quad (50)$$

$$u(s^-, Y) = u(s^+, Y) \quad (51)$$

$$\frac{\partial u}{\partial X}(s^+, Y) - \frac{\partial u}{\partial X}(s^-, Y) - \Phi^2 u(s, Y) = 0, \quad (52)$$

$$\frac{\partial u}{\partial X}(1, Y) = -Bi_{m,x} [u(1, Y) - 1] \quad (53)$$

y

$$\frac{\partial u}{\partial Y}(X, 0) = 0 \quad (54)$$

$$\frac{\partial u}{\partial Y}(X, \psi) = -Bi_{m,Y}[u(X, \psi) - 1], \quad (55)$$

Para el caso sin resistencia en las fronteras verticales, bastó con cambiar la condición (53) por  $u(1, Y) = 1$ . Debido a la complejidad de los dos modelos resultantes, fueron resueltos mediante métodos numéricos.

#### 4.2. Modelo unidimensional con velocidad de reacción no lineal y sus aproximaciones

Se consideró la geometría ilustrada en la Figura 4.2, de longitud  $2l$  y velocidad de reacción tipo Langmuir Hinshelwood.

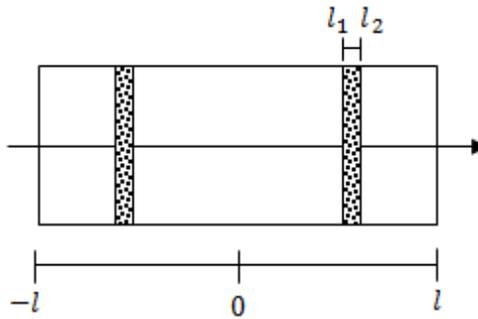


Figura 4.2. Modelo unidimensional

El modelo matemático correspondiente quedó

$$\mathcal{D}_e \frac{d^2 c}{dx^2} = a(x) \frac{k_A c}{(1 + K_A c)^2} \quad (56)$$

sujeta a

$$\left. \frac{dc}{dx} \right|_{x=0} = 0 \quad (57)$$

$$c|_{x=l} = c_f \quad (58)$$

la función de distribución de actividad del catalizador es

$$a(x) = \begin{cases} a & \text{para } l_1 < x < l_2 \\ 0 & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (59)$$

en la que

$$a = \frac{l}{l_2 - l_1} \quad (60)$$

y

donde  $c$  es la concentración,  $c_f$  la concentración superficial,  $x$  la posición horizontal,  $l$  es la dimensión horizontal medida desde el centro del catalizador hacia su superficie,  $l_1$  y  $l_2$  son, respectivamente, las distancias medidas en forma horizontal desde el centro del catalizador hasta la frontera izquierda y derecha de la zona con agente activo;  $k_m$  el coeficiente de transferencia de masa,  $\mathcal{D}_e$  la difusividad efectiva,  $k_A$  y  $K_A$  son parámetros de la velocidad de reacción. Se utilizó las siguientes variables adimensionales

$$u = \frac{c}{c_f}, \quad X = \frac{x}{l}, \quad s_1 = \frac{l_1}{l}, \quad s_2 = \frac{l_2}{l}, \quad s_2 = \frac{l_2}{l} \quad \text{y} \quad \sigma = K_A c_f \quad (61)$$

$u$  es la variable adimensional de la concentración,  $X$  las variables adimensionales de la posición horizontal y  $\sigma$  es parámetro de la velocidad de reacción. Con dichas definiciones el modelo adimensionalizado quedó como sigue

$$\frac{d^2 u}{dX^2} - \Phi^2 a(X) \frac{(1+\sigma)^2 u}{(1+\sigma u)^2} = 0 \quad (62)$$

sujeta a

$$\left. \frac{du}{dX} \right|_{X=0} = 0 \quad (63)$$

$$u|_{X=1} = 1 \quad (64)$$

con

$$a(X) = \begin{cases} a & \text{para } s_1 < s < s_2 \\ 0 & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (65)$$

donde

$$a = \frac{1}{s_2 - s_1} \quad (66)$$

Como consecuencia de la adimensionalización se obtuvo el número adimensional

$$\Phi^2 = \frac{l^2}{c_f \mathcal{D}_e} \frac{\sigma}{(1 + \sigma)^2} \quad (67)$$

donde  $\Phi$  es el módulo de Thiele.

**4.2.1 Modelo con salto.** Se procedió de manera análoga que para obtener las ecuaciones (34) y (36). Se supuso  $u(X)$  continua entre  $s_1 \leq X \leq s_2$ , en tanto, que se definió el promedio en la zona de reacción mediante la siguiente definición

$$\bar{u} = \frac{1}{\Delta s} \int_{s_1}^{s_2} u(X) dX, \quad (68)$$

donde  $\bar{u}$  es la concentración promedio en la zona de reacción. Tal definición se requirió para obtener una condición de salto.

**Condición de salto.** Se tomó la parte de la ecuación (62) válida para la zona de reacción

$$\frac{d^2 u}{dX^2} - \Phi^2 a \frac{(1 + \sigma)^2 u}{(1 + \sigma u)^2} = 0 \quad (69)$$

Se promedió la zona de reacción utilizando (16), con lo que se obtuvo

$$\frac{1}{\Delta s} \left( \frac{du}{dX} \Big|_{s_2} - \frac{du}{dX} \Big|_{s_1} \right) = a\Phi^2 \frac{1}{\Delta s} \int_{s_1}^{s_2} \frac{(1+\sigma)^2 u}{(1+\sigma u)^2} dX, \quad (70)$$

Se asumió la validez de las siguientes aproximaciones:  $\frac{\partial u}{\partial X} \Big|_{s_2} \approx \frac{\partial u}{\partial X} \Big|_{s^+}$  y  $\frac{\partial u}{\partial X} \Big|_{s_1} \approx \frac{\partial u}{\partial X} \Big|_{s^-}$

(nuevamente fueron obtenidas *ad libitum*). Geométricamente, las aproximaciones anteriores compactan la zona de reacción a una geometría singular que divide las zonas inertes del catalizador. Adicionalmente, y a consecuencia de las aproximaciones hechas, se supuso que

$$\frac{1}{\Delta s} \int_{s_1}^{s_2} \frac{(1+\sigma)^2 u}{(1+\sigma u)^2} dX \approx \frac{(1+\sigma)^2 u}{(1+\sigma u)^2} \Big|_s. \text{ Finalmente, se tomó } \Delta s \text{ muy pequeño, por lo que el}$$

producto  $\Delta s \frac{d^2 \bar{u}}{dY^2} \approx 0$ . Con lo anterior la condición de salto quedó de la siguiente manera

$$\frac{du}{dX} \Big|_{s^+} - \frac{du}{dX} \Big|_{s^-} - \Phi^2 \frac{(1+\sigma)^2 u}{(1+\sigma u)^2} \Big|_s = 0, \quad (71)$$

Se eliminó la fuente de la ecuación diferencial (62) e incluyó la condición de salto (71), de tal manera que el problema quedó

$$\frac{d^2 u}{dX^2} = 0 \quad (72)$$

sujeta a

$$\frac{du}{dX} \Big|_{X=0} = 0 \quad (73)$$

$$u \Big|_{X=s^-} = u \Big|_{X=s^+} \quad (74)$$

$$\frac{du}{dX} \Big|_{s^+} - \frac{du}{dX} \Big|_{s^-} - \Phi^2 \frac{(1+\sigma)^2 u}{(1+\sigma u)^2} \Big|_s = 0 \quad (75)$$

$$u \Big|_{X=1} = 1 \quad (76)$$

Se supuso una función a trozos como solución a la ecuación (72), de la siguiente manera

$$u = \begin{cases} u_1 & \text{si } 0 \leq X \leq s \\ u_2 & \text{si } s \leq X \leq 1 \end{cases} \quad (77)$$

con la cual se obtuvo

$$u = \begin{cases} u_1 = A_5 & 0 \leq X \leq s \\ u_2 = B_5 X + C_5 & s \leq X \leq 1 \end{cases} \quad (78)$$

donde

$$A_5 = u|_{X=s}, \quad B_5 = \frac{1-u|_{X=s}}{1-s} \quad \text{y} \quad C_5 = \frac{u|_{X=s} - s}{1-s}, \quad (79)$$

donde  $u|_{X=s}$  se obtuvo al resolver

$$u^3|_{X=s} - \left( \frac{\sigma^2 - 2\sigma}{\sigma^2} \right) u^2|_{X=s} - \left( \frac{2\sigma - (1-s)(1+\sigma)^2 \Phi^2 - 1}{\sigma^2} \right) u|_{X=s} - \frac{1}{\sigma^2} = 0 \quad (80)$$

La solución de la ecuación (80) se muestra en el Apéndice A5. En la siguiente sección se muestran los resultados obtenidos para cada uno de los modelos obtenidos en la presente sección.

## 5. Resultados

### 5.1. Modelo bidimensional con velocidad de reacción lineal y sus aproximaciones

#### 5.1.1 Modelos sin resistencia en las fronteras verticales.

Se supuso un catalizador rectangular con altura del 50 % de su base ( $\psi = 0.5$ ) con fronteras verticales expuestas a un fluido de concentración conocida. Se supusieron tres escenarios posibles para este: primero, fronteras horizontales prácticamente aisladas ( $Bi_{m,Y} = 10^{-5}$ ); segundo, fronteras horizontales sometidas a una resistencia media ( $Bi_{m,Y} = 5$ ) y finalmente, fronteras horizontales sometidas a una resistencia nula ( $Bi_{m,Y} = 10^4$ ). Se resolvieron los modelos bidimensional sin salto (BSS), bidimensional con salto (BCS), promediado sin salto (PSS) y promediado con salto (PCS). Se obtuvo el factor de efectividad utilizando su definición habitual para un amplio rango de módulos de Thiele ( $\Phi = [10^{-1}, 10^2]$ ).

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados predichos por el modelo BCS se acercaron a los predichos por el modelo BSS con errores menores al 10 % en cada escenario propuesto. El modelo PSS registró desviaciones no mayores del 20 % de los del modelo BSS para el caso de fronteras horizontales prácticamente aisladas y 30 % a resistencia media ( $Bi_{m,Y} = 5$ ); a menor resistencia, la aproximación dejó de funcionar. Para  $\Phi > 10$  los errores en los resultados predichos por el modelo BCS y el modelo PSS para aproximar los del modelo BSS aumenta hasta alrededor del 60 %. Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$  el modelo PCS aportó resultados con errores no mayores al 5 % de los predichos por el modelo PSS en todos los escenarios propuestos.

Se puede verificar que la solución del modelo BSS y BCS se mantienen próximas una de la otra, lo mismo sucede al comparar las soluciones de los modelos PSS y PCS, lo cual muestra que la condición de salto introduce una fuente de error significativamente

pequeños que crecen a medida que  $Bi_{m,y}$  y  $\Phi$  también lo hacen. No obstante, el distanciamiento de las soluciones de los modelos BSS-BCS de las de los modelos PSS-PCS aumenta a medida que  $Bi_{m,y}$  y  $\Phi$  crecen, dejando inservibles los modelos promediados a  $Bi_{m,y}$  muy grandes, lo anterior se atribuye a la aproximación hecha en la ecuación (21).

La Figura 5.1 muestra los resultados del factor de efectividad para cada uno de los escenarios propuestos. Para  $Bi_{m,y} = 10^{-5}, 5$  solo se muestran los resultados del modelo BSS; se han omitido los resultados del resto de los modelos por ser gráficamente muy cerrados a este. Para  $Bi_{m,y} = 10^4$  solo se han omitido los resultados del modelo BCS por la misma razón que los anteriores y se han incluido los de los modelos PSS y PCS, pues las predicciones de estos dos últimos modelos difieren substancialmente de las hechas por el resto. En el apéndice A6 se encuentran estos y los siguientes casos por separado.

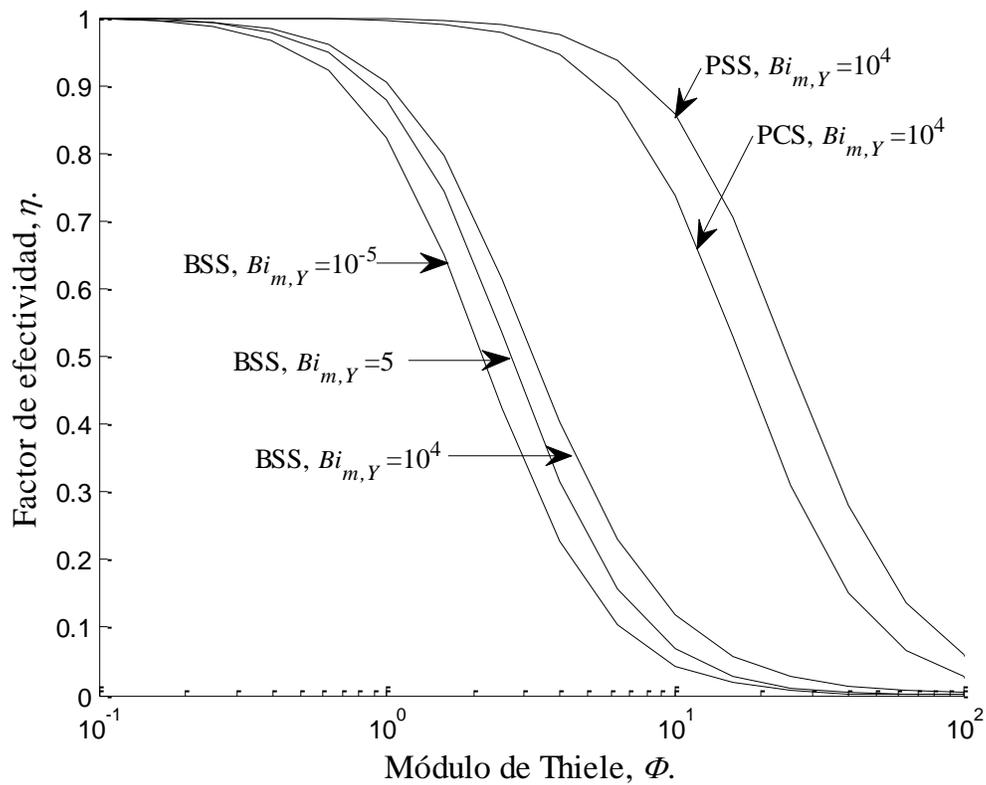


Figura 5.1. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo sin resistencia las fronteras verticales con  $\psi = 0.5$ . Efecto de la resistencia en las fronteras horizontales. Leyendas: modelo bidimensional sin salto (BSS), modelo promediado sin salto (PSS) y modelo promediado con salto (PCS).

En seguida, se estudiaron otros tres escenarios: en un primero, un catalizador con una altura el 25 % de su base ( $\psi = 0.25$ ), otro con una altura del 50 % de su base ( $\psi = 0.5$ ) y finalmente uno con base y altura iguales ( $\psi = 1$ ); con resistencia media en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,y} = 5$ ) y una concentración conocida en sus fronteras. Se procedió como anteriormente para obtener el factor de efectividad de los modelos BSS, BCS, PSS y PCS

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados predichos por el modelo BCS y el modelo PSS se acercan a los predichos por el modelo BSS con errores menores al 10 y 30 % en cada escenario propuesto, respectivamente. Para  $\Phi > 10$  los errores en los resultados predichos por el modelo BCS y el modelo promediado sin salto para aproximar los del modelo BSS aumenta. Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$  el modelo PCS aportó resultados con errores no mayores al 5 % de los predichos por el modelo PSS en todos los escenarios propuestos.

Al comparar la solución de los modelo BSS y BCS se puede verificar que se mantienen próximas una de la otra, lo mismo sucede al comparar las soluciones de los modelos PSS y PCS, nuevamente, lo anterior muestra que con la condición de salto se introdujo una fuente de error significativamente pequeños que se mantiene con  $\psi$  y que crece a medida que  $\Phi$  también lo hace. Por otra parte, el distanciamiento de las soluciones de los modelos BSS-BCS de las de los modelos PSS-PCS a medida que  $\psi$  y  $\Phi$  aumentan, lo que también se atribuye a la aproximación (21).

La Figura 5.2 solo muestra los resultados del modelo BSS para cada escenario propuesto, ya que para cada valor del parámetro  $\psi$  los resultados del resto de los modelos fueron muy cerrados con respecto al modelo en cuestión.

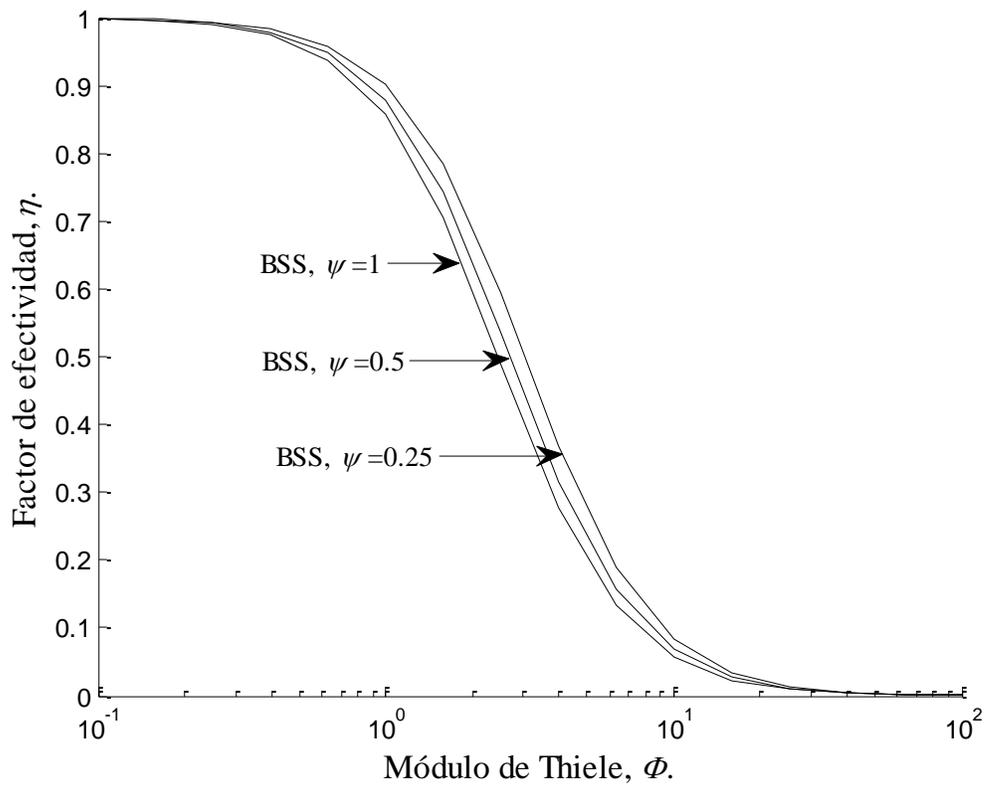


Figura 5.2. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo sin resistencia en las fronteras verticales con  $Bi_{m,x} = 5$ . Efecto de la forma del catalizador.

Leyenda: modelo bidimensional sin salto (BSS)

### 5.1.2 Modelos con resistencia en las fronteras verticales.

Se supuso un catalizador con altura del 50% de su base ( $\psi = 0.5$ ) con las fronteras horizontales sometidas a una resistencia media ( $Bi_{m,x} = 5$ ). Acto seguido, se supuso tres escenarios posibles para este: primero, fronteras horizontales prácticamente aisladas ( $Bi_{m,y} = 10^{-5}$ ); segundo, fronteras horizontales sometidas a una resistencia media ( $Bi_{m,y} = 5$ ) y finalmente, fronteras horizontales sometidas a una resistencia nula ( $Bi_{m,y} = 10^4$ ). Se resolvieron los modelos BSS, BCS, PSS y PCS para cada caso resultante. Se obtuvo el factor de efectividad utilizando su definición habitual para un amplio rango de módulos de Thiele ( $\Phi = [10^{-1}, 10^2]$ ).

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados predichos por el modelo BCS se acercan a los predichos por el modelo BSS con errores menores al 10 % en cada escenario propuesto. El modelo PSS registró desviaciones no mayores del 10 % de los del modelo BSS en el caso de fronteras horizontales prácticamente aisladas y 30 % a resistencia media (alrededor de  $Bi_{m,y} = 5$ ); a menor resistencia, la aproximación dejó de funcionar. Para  $\Phi > 10$  los errores en los resultados predichos por el modelo BCS y el modelo PSS para aproximar los del modelo BSS aumenta. Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$  el modelo PCS aportó resultados con errores no mayores al 5 % de los predichos por el modelo PSS en todos los escenarios propuestos. Los resultados se muestran en la Figura 5.3, en la que por circunstancias similares a las de la Figura 5.1 obligaron a disponerla de forma semejante.

Se puede verificar que la solución del modelo BSS y BCS se mantienen próximas una de la otra, lo mismo sucede al comparar las soluciones de los modelos PSS y PCS, lo cual muestra que la condición de salto introduce una fuente de error significativamente pequeños que crecen a medida que  $Bi_{m,y}$  y  $\Phi$  también lo hacen. No obstante, el distanciamiento de las soluciones de los modelos BSS-BCS de las de los modelos PSS-PCS aumenta a medida que  $Bi_{m,y}$  y  $\Phi$  crecen, dejando inservibles los modelos promediados a  $Bi_{m,y}$  muy grandes, lo anterior, se atribuye a la aproximación (21).

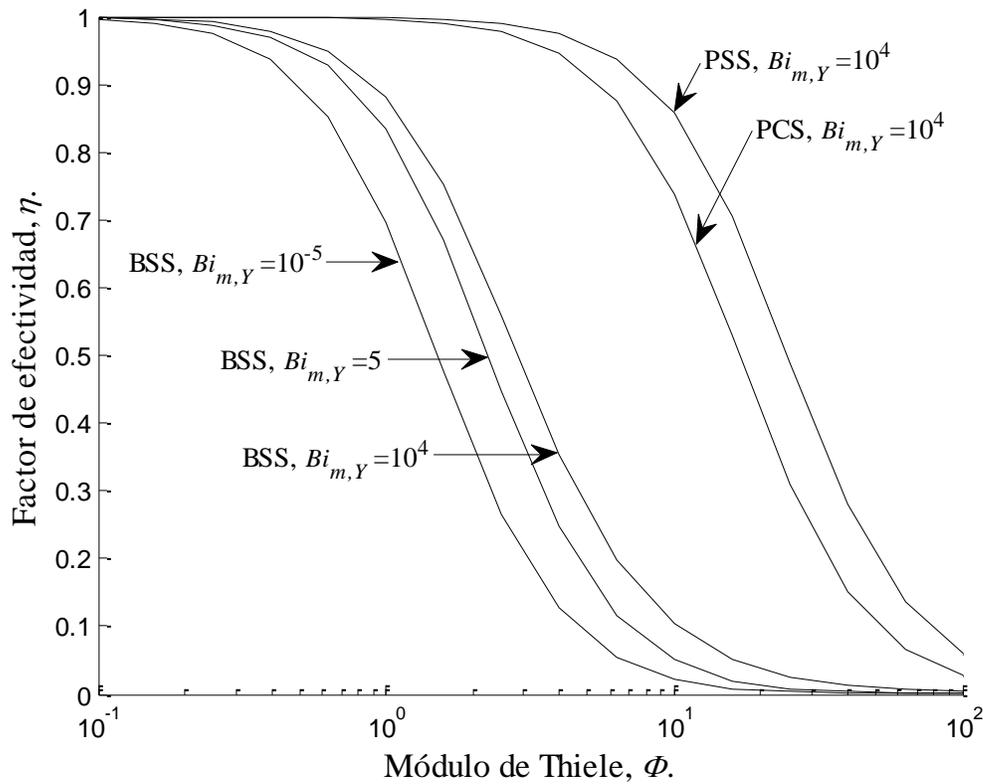


Figura 5.3. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 5$  y  $\psi = 0.5$ . Efecto de la resistencia en las fronteras horizontales. Leyendas: modelo bidimensional sin salto (BSS), modelo promediado sin salto (PSS) y modelo promediado con salto (PCS).

A continuación, se estudió un catalizador con altura del 50% de su base ( $\psi = 0.5$ ) y resistencia media en las fronteras verticales ( $Bi_{m,Y} = 5$ ). En seguida, se estudiaron tres escenarios posibles para este: en un primero, fronteras verticales prácticamente aisladas ( $Bi_{m,X} = 10^{-5}$ ); segundo, fronteras horizontales con resistencia mediar ( $Bi_{m,X} = 5$ ) y finalmente, fronteras horizontales con resistencia nula ( $Bi_{m,X} = 10^4$ ). Se resolvió los modelos BSS, BCS, PSS y PCS para cada caso resultante. Se obtuvo el factor de

efectividad utilizando su definición habitual, para un amplio rango de módulos de Thiele ( $\Phi = [10^{-1}, 10^2]$ ).

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados predichos por el modelo BCS se acercan a los predichos por el modelo BSS con errores menores al 10 % en cada escenario propuesto. El modelo PSS registró desviaciones no mayores del 45 % de los del modelo BSS en el caso de fronteras verticales prácticamente aisladas, 30 % a resistencia regular ( $Bi_{m,x} = 5$ ) y 20 % a menor resistencia. Para  $\Phi > 10$  los errores en los resultados predichos por el modelo BCS y el modelo PSS para aproximar los del modelo BSS aumenta. Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$  el modelo PCS aportó resultados con errores menores al 5 % de los predichos por el modelo PSS en todos los escenarios propuestos.

Como puede verificarse, la solución de los modelo BSS y BCS se mantienen próximas una de la otra, lo mismo sucede al comparar las soluciones de los modelos PSS y PCS, lo cual muestra que con la condición de salto se introdujo una fuente de error significativamente pequeño que se mantiene con  $Bi_{m,x}$  y que crece a medida que  $\Phi$  también lo hace. Por otra parte, el distanciamiento de las soluciones de los modelos BSS-BCS de las de los modelos PSS-PCS aumenta a medida que  $Bi_{m,x}$  disminuye y  $\Phi$  aumenta, lo cual se atribuye a la aproximación (21).

La Figura 5.4 muestra solo los resultados del modelo BSS para cada escenario propuesto, ya que para cada valor del parámetro  $\psi$  los resultados del resto de los modelos fueron gráficamente muy cerrados con respecto al modelo en cuestión.

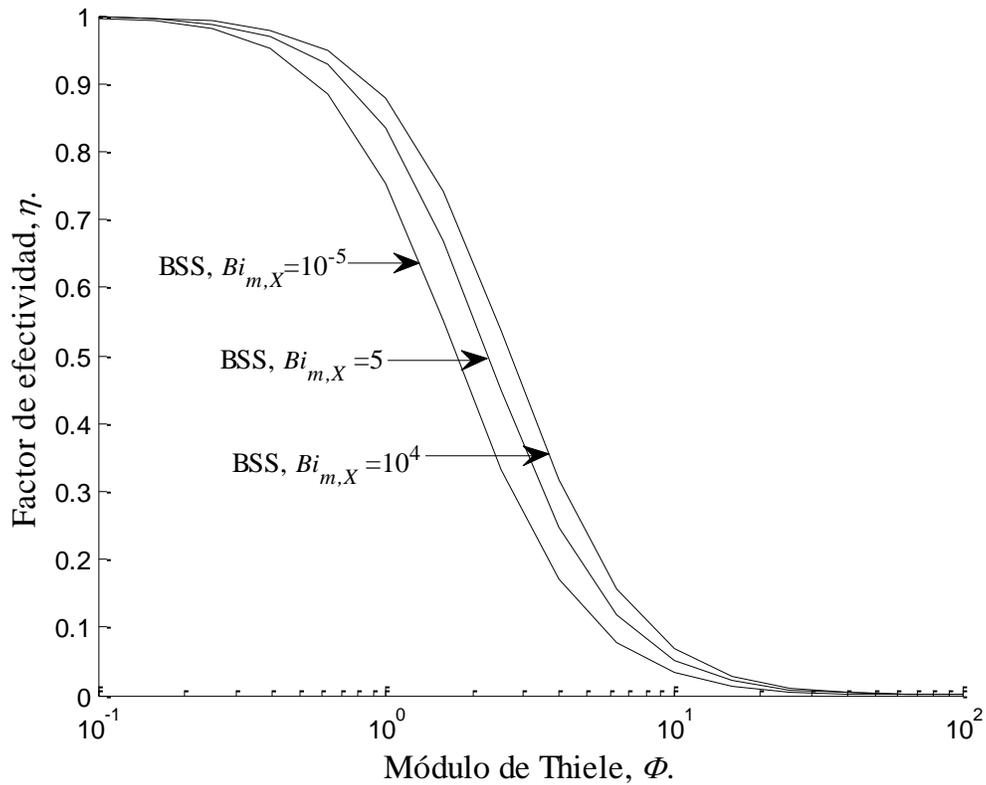


Figura 5.4. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,Y} = 5$  y  $\psi = 0.5$ . Efecto de la resistencia en las fronteras verticales. Leyendas: modelo bidimensional sin salto (BSS).

Finalmente, se estudiaron tres escenarios más: en un primero, un catalizador rectangular con una altura del 25 % de su base ( $\psi = 0.25$ ), otro con una altura del 50 % ( $\psi = 0.5$ ) de su base y finalmente uno con base y altura iguales ( $\psi = 1$ ); con resistencias media e iguales entre sí ( $Bi_{m,X} = 5$  y  $Bi_{m,Y} = 5$ ) en las fronteras tanto horizontales como verticales. Se procedió como anteriormente para obtener el factor de efectividad de los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, los resultados se ilustran en la Figura 5.5.

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  e independientemente del factor de escala  $\psi$  los resultados predichos por el modelo BCS se desviaron alrededor de un 10 % de los del modelo BSS. El modelo PSS pudo aproximar al modelo BSS con errores por debajo del 25 al 35 %, dependiendo del factor de escala, mayor error cuanto mayor el factor de escala. Para  $\Phi > 10$  los errores

en los resultados predichos por el modelo BCS y el modelo PSS para aproximar los del modelo BSS aumenta. Finalmente, para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$  los resultados del modelo PCS mostraron desviaciones por debajo del 5% en relación a los del modelo PSS. Al comparar la solución de los modelos BSS y BCS se puede verificar que se mantienen próximas una de la otra, lo mismo sucede al comparar las soluciones de los modelos PSS y PCS, nuevamente, lo anterior muestra que con la condición de salto se introdujo una fuente de error significativamente pequeños que se mantiene con  $\psi$  y que crece a medida que  $\Phi$  también lo hace. Por otra parte, el distanciamiento de las soluciones de los modelos BSS-BCS de las de los modelos PSS-PCS a medida que  $\psi$  y  $\Phi$  aumentan, lo que también se atribuye a la aproximación (21). Los resultados se muestran en la Figura 5.5, en la que por circunstancias similares a las de Figura 5.2 obligaron a disponerla de forma semejante.

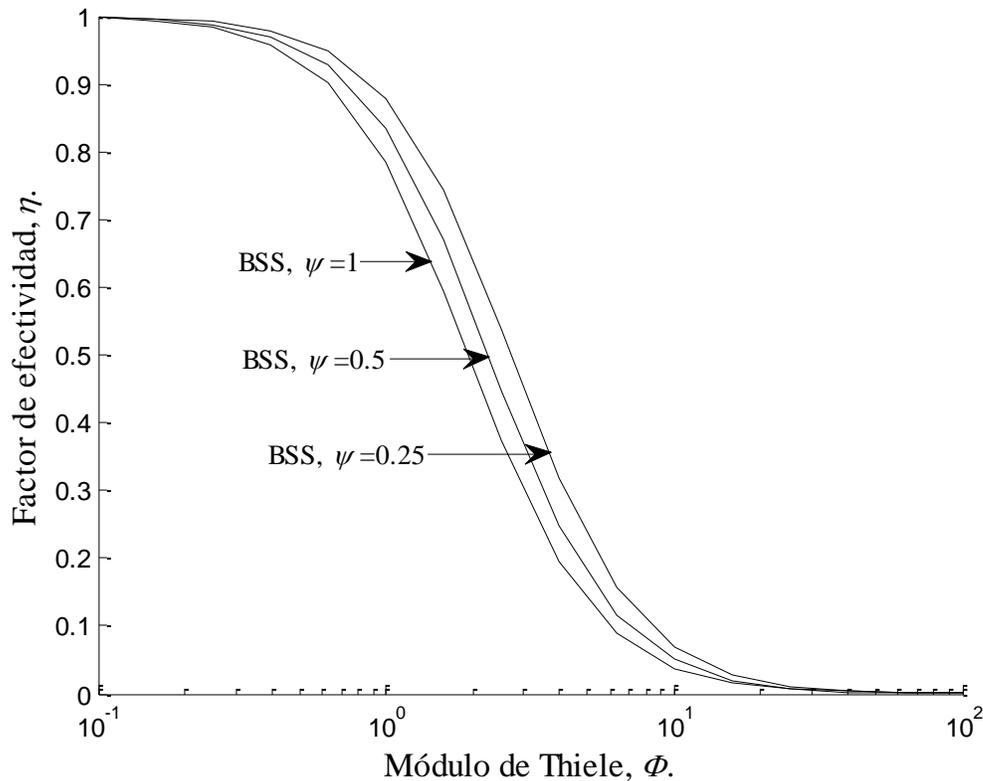


Figura 5.5. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelos con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 5$  y  $Bi_{m,Y} = 5$ . Efecto de la forma del catalizador. Leyendas: modelo bidimensional sin salto (BSS).

### 5.1.2 Modelo unidimensional con velocidad de reacción no lineal.

Los resultados gráficos del modelo unidimensional con velocidad de reacción no lineal se muestran en las Figuras 5.6. La solución sin salto se obtuvo mediante un método de disparo que incluyó el método de Euler, la ecuación que resultó de aplicar la condición de salto se resolvió analíticamente utilizando la solución de Cardano a la que finalmente se le aplicó la definición del factor de efectividad. El aproximar el modelo sin salto mediante el modelo con salto introdujo alrededor de un 10 % de error; la aproximación fue más eficiente a valores extremos del módulo de Thiele e incrementó alrededor de un módulo de Thiele igual a uno. En la siguiente sección se presentas las conclusiones a los que se llegó mediante los resultados mostrados en la presente sección.

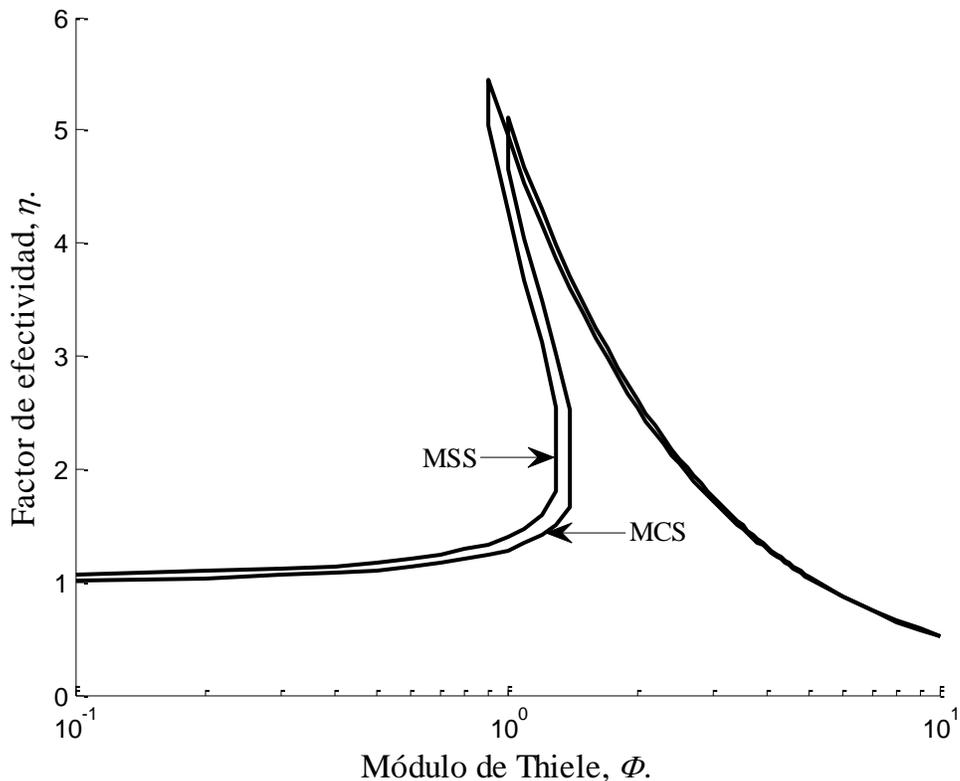


Figura 5.6. Comparación del factor de efectividad: Modelo sin salto (MSS), Modelo con condición de salto.

## 6. Conclusiones

### Modelo bidimensional con velocidad de reacción lineal y sus aproximaciones.

En general, se pudo observar los siguientes comportamientos:

1) Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS se acercaron a los del modelo BSS con errores menores al 10 %; para  $\Phi > 10$  los errores aumentaron. Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$  los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 15 %.

2) El modelo PSS mostró ser sensible a las variaciones del  $Bi_{m,Y}$  para predecir los resultados del modelo BSS; para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  y  $Bi_{m,Y} = 10^{-5}$  dio resultados con errores menores al 11 %; para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  y  $Bi_{m,Y} = 5$  errores menores 30 al 70 %, mayor error cuanto menor el  $Bi_{m,X}$  y mayor el  $\psi$ ; para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Para  $Bi_{m,Y} = 10^4$  el modelo PSS dio resultados con errores menores al 15 % para aproximar el modelo BSS dentro del rango de  $10^{-1} \leq \Phi \leq 1$ , para  $\Phi > 1$  el error aumenta desproporcionadamente hasta dejar al modelo inutilizable.

El hecho de que no haya grandes desviaciones de los resultados del modelo BCS de los del BSS, implica que con la condición de salto se introdujo una fuente de error sustancialmente pequeña que se mantiene al variar  $Bi_{m,X}$  y  $\psi$ , y crece a medida que  $Bi_{m,Y}$  y  $\Phi$  crecen. Por otra parte, la aproximación del modelo BSS mediante el modelo PSS resultó sensible a las variaciones del  $Bi_{m,Y}$ ,  $Bi_{m,X}$ ,  $\psi$  y  $\Phi$  que se atribuye a la aproximación  $u(X, \psi) \approx \langle u \rangle$  hecha en la frontera  $(X, \psi)$  durante el promediado, haciéndola mejor aproximación del modelo BSS a medida que  $Bi_{m,X}$  crece y que  $Bi_{m,Y}$ ,  $\Phi$  y  $\psi$  decrecen.

**Modelo unidimensional con velocidad de reacción no lineal.**

1) El modelo con condición de salto, en general, aproximar los resultados del modelo sin salto con errores menores al 10 %.

Nuevamente, la condición de salto muestra haber introducido una fuente de error significativamente pequeña.

## Apéndice A1. Solución del modelo promediado sin salto sin resistencia en las fronteras verticales.

Se partió de la ecuación (22) sujeta a las condiciones en las fronteras (23) y (24)

$$\frac{d^2 \langle u \rangle}{dX^2} - \beta^2 [\langle u \rangle - 1] = a(X, Y) \Phi^2 \langle u \rangle \quad (\text{A.1})$$

sujeta a

$$\left. \frac{d \langle u \rangle}{dX} \right|_{X=0} = 0 \quad (\text{A.2})$$

$$\langle u \rangle|_{X=1} = 1 \quad (\text{A.3})$$

Se supuso una solución en términos de la función a trozos (25)

$$\langle u \rangle = \begin{cases} \langle u \rangle_1 & \text{si } 0 \leq X \leq s_1 \\ \langle u \rangle_2 & \text{si } s_1 \leq X \leq s_2 \\ \langle u \rangle_3 & \text{si } s_2 \leq X \leq 1 \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

Al usar (A.4) en la ecuación (A.1) se obtienen los siguientes problemas

$$\frac{d^2 \langle u \rangle_1}{dX^2} - \beta^2 [\langle u \rangle_1 - 1] = 0 \quad (\text{A.5})$$

para

$$0 < X < s_1$$

sujeta a

$$\left. \frac{d \langle u \rangle_1}{dX} \right|_{X=0} = 0 \quad (\text{A.6})$$

$$\langle u \rangle_1 \Big|_{X=s_1} = \langle u \rangle_2 \Big|_{X=s_1} \quad (\text{A.7})$$

$$\left. \frac{d \langle u \rangle_1}{dX} \right|_{X=s_1} = \left. \frac{d \langle u \rangle_2}{dX} \right|_{X=s_1} \quad (\text{A.8})$$

$$\frac{d^2 \langle u \rangle_2}{dX^2} - \beta^2 [\langle u \rangle_2 - 1] = \Phi^2 a \langle u \rangle_2 \quad (\text{A.9})$$

para

$$s_1 < X < s_2$$

sujeta a

$$\langle u \rangle_1 \Big|_{X=s_1} = \langle u \rangle_2 \Big|_{X=s_1} \quad (\text{A.10})$$

$$\left. \frac{d \langle u \rangle_1}{dX} \right|_{X=s_1} = \left. \frac{d \langle u \rangle_2}{dX} \right|_{X=s_1} \quad (\text{A.11})$$

$$\langle u \rangle_2 \Big|_{X=s_2} = \langle u \rangle_3 \Big|_{X=s_2} \quad (\text{A.12})$$

$$\left. \frac{d \langle u \rangle_2}{dX} \right|_{X=s_2} = \left. \frac{d \langle u \rangle_3}{dX} \right|_{X=s_2} \quad (\text{A.13})$$

$$\frac{d^2 \langle u \rangle_3}{dX^2} - \beta^2 [\langle u \rangle_3 - 1] = 0 \quad (\text{A.14})$$

para

$$s_2 < x < 1$$

sujeta a

$$\langle u \rangle_2 \Big|_{X=s_2} = \langle u \rangle_3 \Big|_{X=s_2} \quad (\text{A.15})$$

$$\left. \frac{d \langle u \rangle_2}{dX} \right|_{X=s_2} = \left. \frac{d \langle u \rangle_3}{dX} \right|_{X=s_2} \quad (\text{A.16})$$

$$\langle u \rangle_3 = 1 \quad (\text{A.17})$$

La solución se obtuvo mediante variación de parámetros

$$\langle u \rangle_1 = A \cosh(\beta X) + 1 \quad (\text{A.18})$$

$$\langle u \rangle_2 = B \sinh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} X) + C \cosh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} X) + \frac{\beta^2}{\beta^2 + a\Phi^2} \quad (\text{A.19})$$

$$\langle u \rangle_3 = D \frac{\sinh[\beta(X-1)]}{\cosh(\beta)} + 1 \quad (\text{A.20})$$

donde se ha hizo uso de las condiciones (A.6) y (A.17). Al utilizar el resto de las condiciones en las fronteras se obtuvo el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{pmatrix} \cosh(\beta s_1) & -\sinh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_1) & -\cosh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_1) & 0 \\ 0 & \sinh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_2) & \cosh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_2) & -\frac{\sinh[\beta(s_2-1)]}{\cosh(\beta)} \\ \beta \sinh(\beta s_1) & -\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \cosh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_1) & -\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \sinh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_1) & 0 \\ 0 & \sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \cosh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_2) & \sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \sinh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_2) & -\frac{\beta \cosh[\beta(s_2-1)]}{\cosh(\beta)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{a\Phi^2}{\beta^2 + a\Phi^2} \\ \frac{a\Phi^2}{\beta^2 + a\Phi^2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.21})$$

La columna 1, 2, 3 y 4 de (A.21) pertenecen a los coeficientes de  $A, B, C$  y  $D$  respectivamente, tales constantes son

$$A = \frac{\lambda_A}{\lambda}, B = \frac{\lambda_B}{\lambda}, C = \frac{\lambda_C}{\lambda} \text{ y } D = \frac{\lambda_D}{\lambda}, \quad (\text{A.22})$$

donde  $\lambda, \lambda_A, \lambda_B, \lambda_C$  y  $\lambda_D$

$$\lambda_1 = \frac{\cosh(\beta s_1)}{\cosh(\beta)} \begin{bmatrix} (\beta^2 + a\Phi^2) \sinh[\beta(s_2-1)] \sinh[\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2}(s_2 - s_1)] \\ -\beta \sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \cosh[\beta(s_2-1)] \cosh[\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2}(s_2 - s_1)] \end{bmatrix} + \frac{\beta \sinh(\beta s_1)}{\cosh(\beta)} \begin{bmatrix} \sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \sinh[\beta(s_2-1)] \cosh[\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2}(s_2 - s_1)] \\ -\beta \cosh[\beta(s_2-1)] \sinh[\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2}(s_2 - s_1)] \end{bmatrix}$$

$$\lambda_{A1} =$$

$$\frac{a\Phi^2}{(\beta^2 + a\Phi^2)(\cosh(\beta))} \left[ \begin{array}{l} (\beta^2 + a\Phi^2) \sinh[\beta(s_2 - 1)] \sinh[\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2}(s_2 - s_1)] \\ -\beta\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \cosh[\beta(s_2 - 1)] \cosh[\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2}(s_2 - s_1)] \end{array} \right]$$

$$- \frac{a\beta\Phi^2 \sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \cosh[\beta(s_2 - 1)]}{(\beta^2 + a\Phi^2) \cosh(\beta)}$$

$$\lambda_{B1} =$$

$$\frac{a\beta\Phi^2 \sinh(\beta s_1)}{(\beta^2 + a\Phi^2)(\cosh(\beta))} \left[ \begin{array}{l} \sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \sinh[\beta(s_2 - 1)] \sinh[\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_2] \\ -\beta \cosh[\beta(s_2 - 1)] \cosh[\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_2] \end{array} \right]$$

$$- \frac{a\beta\Phi^2 \cosh[\beta(s_2 - 1)]}{(\beta^2 + a\Phi^2) \cosh(\beta)} \left[ \begin{array}{l} \beta \sinh(\beta s_1) \cosh[\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_1] \\ -\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \cosh(\beta s_1) \sinh[\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_1] \end{array} \right]$$

$$\lambda_{C1} =$$

$$\frac{a\beta\Phi^2 \sinh(\beta s_1)}{(\beta^2 + a\Phi^2) \cosh(\beta)} \left[ \begin{array}{l} \sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \sinh[\beta(s_2 - 1)] \cosh[\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_2] \\ -\beta \cosh[\beta(s_2 - 1)] \sinh[\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_2] \end{array} \right]$$

$$+ \frac{a\beta\Phi^2 \cosh[\beta(s_2 - 1)]}{(\beta^2 + a\Phi^2) \cosh(\beta)} \left[ \begin{array}{l} \beta \sinh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_1) \sinh(\beta s_1) \\ -\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \cosh(\beta s_1) \cosh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_1) \end{array} \right]$$

$$\lambda_{D1} =$$

$$\frac{a\beta\Phi^2 \sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \sinh(\beta s_1)}{\beta^2 + a\Phi^2}$$

$$- \frac{a\Phi^2}{\beta^2 + a\Phi^2} \left[ \begin{array}{l} (\beta^2 + a\Phi^2) \cosh(\beta s_1) \sinh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2}(s_2 - s_1)) \\ +\beta\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \sinh(\beta s_1) \cosh[\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2}(s_2 - s_1)] \end{array} \right]$$

## Apéndice A2. Solución del modelo promediado sin salto con resistencia en las fronteras verticales.

Se partió de la ecuación (22) sujeta a la condición en la frontera (23) y cambiando la condición (24) por la condición de resistencia a la transferencia de masa en las fronteras verticales como sigue

$$\frac{d^2 \langle u \rangle}{dX^2} - \beta^2 [\langle u \rangle - 1] = a(X, Y) \Phi^2 \langle u \rangle \quad (\text{A.23})$$

sujeta a

$$\left. \frac{d \langle u \rangle}{dX} \right|_{X=0} = 0 \quad (\text{A.24})$$

$$\left. \frac{d \langle u \rangle}{dX} \right|_{X=1} = -Bi_{m,X} [\langle u \rangle|_{X=1} - 1] \quad (\text{A.25})$$

Se supuso una solución en términos de la función a trozos (25)

$$\langle u \rangle = \begin{cases} \langle u \rangle_1 & \text{si } 0 \leq X \leq s_1 \\ \langle u \rangle_2 & \text{si } s_1 \leq X \leq s_2 \\ \langle u \rangle_3 & \text{si } s_2 \leq X \leq 1 \end{cases} \quad (\text{A.26})$$

Al usar (A.26) en la ecuación (A.23) se obtienen los siguientes problemas

$\frac{d^2 \langle u \rangle_1}{dX^2} - \beta^2 [\langle u \rangle_1 - 1] = 0$ <p>para</p> $0 < X < s_1$ <p>sujeta a</p> $\left. \frac{d \langle u \rangle_1}{dX} \right _{X=0} = 0$ <p style="text-align: right;">(A.28)</p> $\langle u \rangle_1 \Big _{X=s_1} = \langle u \rangle_2 \Big _{X=s_1}$ <p style="text-align: right;">(A.29)</p> $\left. \frac{d \langle u \rangle_1}{dX} \right _{X=s_1} = \left. \frac{d \langle u \rangle_2}{dX} \right _{X=s_1}$ <p style="text-align: right;">(A.30)</p>	$\frac{d^2 \langle u \rangle_2}{dX^2} - \beta^2 [\langle u \rangle_2 - 1] = \Phi^2 a \langle u \rangle_2$ <p style="text-align: right;">(A.31)</p> <p>para</p> $s_1 < X < s_2$ <p>sujeta a</p> $\langle u \rangle_1 \Big _{X=s_1} = \langle u \rangle_2 \Big _{X=s_1}$ <p style="text-align: right;">(A.32)</p> $\left. \frac{d \langle u \rangle_1}{dX} \right _{X=s_1} = \left. \frac{d \langle u \rangle_2}{dX} \right _{X=s_1}$ <p style="text-align: right;">(A.33)</p> $\langle u \rangle_2 \Big _{X=s_2} = \langle u \rangle_3 \Big _{X=s_2}$ <p style="text-align: right;">(A.34)</p> $\left. \frac{d \langle u \rangle_2}{dX} \right _{X=s_2} = \left. \frac{d \langle u \rangle_3}{dX} \right _{X=s_2}$ <p style="text-align: right;">(A.35)</p>	$\frac{d^2 \langle u \rangle_3}{dX^2} - \beta^2 [\langle u \rangle_3 - 1] = 0$ <p style="text-align: right;">(A.36)</p> <p>para</p> $s_2 < x < 1$ <p>sujeta a</p> $\langle u \rangle_2 \Big _{X=s_2} = \langle u \rangle_3 \Big _{X=s_2}$ <p style="text-align: right;">(A.37)</p> $\left. \frac{d \langle u \rangle_2}{dX} \right _{X=s_2} = \left. \frac{d \langle u \rangle_3}{dX} \right _{X=s_2}$ <p style="text-align: right;">(A.38)</p> $\left. \frac{d \langle u \rangle_3}{dX} \right _{X=1} = -Bi_{m,X} [\langle u \rangle_3 \Big _{X=1} - 1]$ <p style="text-align: right;">(A.39)</p>
---	--	--

La solución se obtuvo mediante variación de parámetros

$$\langle u \rangle_1 = A \cosh(\beta X) + 1 \tag{A.40}$$

$$\langle u \rangle_2 = B \sinh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} X\right) + C \cosh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} X\right) + \frac{\beta^2}{\beta^2 + a\Phi^2} \tag{A.41}$$

$$\langle u \rangle_3 = D \left[ \frac{Bi_{m,X} \sinh[\beta(X-1)] - \beta \cosh[\beta(X-1)]}{\beta \sinh(\beta) + Bi_{m,X} \cosh(\beta)} \right] + 1 \tag{A.42}$$

donde se hizo uso de las condiciones (A.28) y (A.39). Al utilizar el resto de las condiciones en las fronteras se obtuvo el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{pmatrix} \cosh(\beta s_1) & -\sinh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_1) & -\cosh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_1) & 0 \\ 0 & \sinh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_2) & \cosh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_2) & -\frac{Bi_{m,x} \sinh[\beta(s_2-1)] - \beta \cosh[\beta(s_2-1)]}{\beta \sinh(\beta) + Bi_{m,x} \cosh(\beta)} \\ \beta \sinh(\beta s_1) & -\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \cosh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_1) & -\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \sinh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_1) & 0 \\ 0 & \sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \cosh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_2) & \sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \sinh(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_2) & -\beta \left[ \frac{Bi_{m,x} \cosh[\beta(s_2-1)] - \beta \sinh[\beta(s_2-1)]}{\beta \sinh(\beta) + Bi_{m,x} \cosh(\beta)} \right] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{a\Phi^2}{\beta^2 + a\Phi^2} \\ \frac{a\Phi^2}{\beta^2 + a\Phi^2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.43})$$

La columna 1, 2, 3 y 4 de (A.43) pertenecen a los coeficientes de  $A, B, C$  y  $D$  respectivamente, tales constantes son

$$A = \frac{\lambda_A}{\lambda}, B = \frac{\lambda_B}{\lambda}, C = \frac{\lambda_C}{\lambda} \text{ y } D = \frac{\lambda_D}{\lambda}, \quad (\text{A.44})$$

donde  $\lambda, \lambda_A, \lambda_B, \lambda_C$  y  $\lambda_D$

$\lambda_2 =$

$$\begin{aligned} & \frac{\cosh(\beta s_1)}{\beta \sinh(\beta) + Bi_{m,x} \cosh(\beta)} \left[ \begin{array}{l} (\beta^2 + a\Phi^2) \left[ \frac{Bi_{m,x} \sinh[\beta(s_2-1)]}{-\beta \cosh[\beta(s_2-1)]} \right] \sinh \left[ \sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} (s_2 - s_1) \right] \\ -\beta \sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \left[ \frac{Bi_{m,x} \cosh[\beta(s_2-1)]}{-\beta \sinh[\beta(s_2-1)]} \right] \cosh \left[ \sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} (s_2 - s_1) \right] \end{array} \right] \\ & + \frac{\beta \sinh(\beta s_1)}{\beta \sinh(\beta) + Bi_{m,x} \cosh(\beta)} \left[ \begin{array}{l} \sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \left[ \frac{Bi_{m,x} \sinh[\beta(s_2-1)]}{-\beta \cosh[\beta(s_2-1)]} \right] \cosh \left[ \sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} (s_2 - s_1) \right] \\ -\beta \left[ \frac{Bi_{m,x} \cosh[\beta(s_2-1)]}{-\beta \sinh[\beta(s_2-1)]} \right] \sinh \left[ \sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} (s_2 - s_1) \right] \end{array} \right] \end{aligned}$$

$$\lambda_{A2} = \frac{a\Phi^2}{(\beta^2 + a\Phi^2)(\beta \sinh(\beta) + Bi_{m,x} \cosh(\beta))} \left[ \begin{array}{l} (\beta^2 + a\Phi^2) \left[ \begin{array}{l} Bi_{m,x} \sinh[\beta(s_2 - 1)] \\ -\beta \cosh[\beta(s_2 - 1)] \end{array} \right] \sinh\left[\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2}(s_2 - s_1)\right] \\ -\beta \sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \left[ \begin{array}{l} Bi_{m,x} \cosh[\beta(s_2 - 1)] \\ -\beta \sinh[\beta(s_2 - 1)] \end{array} \right] \cosh\left[\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2}(s_2 - s_1)\right] \end{array} \right] \\ - \frac{a\beta\Phi^2 \sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} (Bi_{m,x} \cosh[\beta(s_2 - 1)] - \beta \sinh[\beta(s_2 - 1)])}{(\beta^2 + a\Phi^2)(\beta \sinh(\beta) + Bi_{m,x} \cosh(\beta))}$$

$$\lambda_{B2} = \frac{a\beta\Phi^2 \sinh(\beta s_1)}{(\beta^2 + a\Phi^2)(\beta \sinh(\beta) + Bi_{m,x} \cosh(\beta))} \left[ \begin{array}{l} \sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \left( \begin{array}{l} Bi_{m,x} \sinh[\beta(s_2 - 1)] \\ -\beta \cosh[\beta(s_2 - 1)] \end{array} \right) \sinh\left[\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_2\right] \\ -\beta \left( \begin{array}{l} Bi_{m,x} \cosh[\beta(s_2 - 1)] \\ -\beta \sinh[\beta(s_2 - 1)] \end{array} \right) \cosh\left[\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_2\right] \end{array} \right] \\ - \frac{a\beta\Phi^2 (Bi_{m,x} \cosh[\beta(s_2 - 1)] - \beta \sinh[\beta(s_2 - 1)])}{(\beta^2 + a\Phi^2)(\beta \sinh(\beta) + Bi_{m,x} \cosh(\beta))} \left[ \begin{array}{l} \beta \sinh(\beta s_1) \cosh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_1\right) \\ -\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \sinh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_1\right) \cosh(\beta s_1) \end{array} \right]$$

$$\lambda_{C2} = \frac{a\beta\Phi^2 \sinh(\beta s_1)}{(\beta^2 + a\Phi^2)(\beta \sinh(\beta) + Bi_{m,x} \cosh(\beta))} \left[ \begin{array}{l} \sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \left( \begin{array}{l} Bi_{m,x} \sinh[\beta(s_2 - 1)] \\ -\beta \cosh[\beta(s_2 - 1)] \end{array} \right) \cosh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_2\right) \\ -\beta \left( \begin{array}{l} Bi_{m,x} \cosh[\beta(s_2 - 1)] \\ -\beta \sinh[\beta(s_2 - 1)] \end{array} \right) \sinh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_2\right) \end{array} \right] \\ + \frac{a\beta\Phi^2 (Bi_{m,x} \cosh[\beta(s_2 - 1)] - \beta \sinh[\beta(s_2 - 1)])}{(\beta^2 + a\Phi^2)(\beta \sinh(\beta) + Bi_{m,x} \cosh(\beta))} \left[ \begin{array}{l} \beta \sinh(\beta s_1) \sinh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_1\right) \\ -\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} \cosh(\beta s_1) \cosh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2} s_1\right) \end{array} \right]$$

$$\lambda_{D2} = \frac{a\beta\Phi^2\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2}\sinh(\beta s_1)}{\beta^2 + a\Phi^2} - \frac{a\Phi^2}{\beta^2 + a\Phi^2} \left[ \frac{\beta\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2}\sinh(\beta s_1)\cosh\left[\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2}(s_2 - s_1)\right]}{+(\beta^2 + a\Phi^2)\cosh(\beta s_1)\sinh\left(\sqrt{\beta^2 + a\Phi^2}(s_2 - s_1)\right)} \right]$$

### Apéndice A3. Solución del modelo promediado con salto sin resistencia en las fronteras verticales.

Se partió de la ecuación (37) sujeta a las condiciones de frontera (38) a la (41)

$$\frac{d^2 \langle u \rangle}{dX^2} - \beta^2 [\langle u \rangle - 1] = 0 \quad (\text{A.45})$$

sujeta a

$$\left. \frac{d \langle u \rangle}{dX} \right|_{X=0} = 0 \quad (\text{A.46})$$

$$\langle u \rangle|_{X=s^-} = \langle u \rangle|_{X=s^+} \quad (\text{A.47})$$

$$\left. \frac{d \langle u \rangle}{dX} \right|_{s^+} - \left. \frac{d \langle u \rangle}{dX} \right|_{s^-} - \Phi^2 \langle u \rangle|_s = 0 \quad (\text{A.48})$$

$$\langle u \rangle|_{X=1} = 1 \quad (\text{A.49})$$

Se supuso una solución en términos de función a trozos (42)

$$\langle u \rangle = \begin{cases} \langle u \rangle_1 & \text{si } 0 \leq X \leq s \\ \langle u \rangle_2 & \text{si } s \leq X \leq 1 \end{cases} \quad (\text{A.50})$$

Al sustituir (A.50) en las ecuaciones (A.46) a la (A.49)

$$\frac{d^2 \langle u \rangle_1}{dX^2} - \beta^2 [\langle u \rangle_1 - 1] = 0$$

(A.51)

para

$$0 < X < s$$

sujeta a

$$\left. \frac{d \langle u \rangle_1}{dX} \right|_{X=0} = 0$$

(A.52)

$$\langle u \rangle_1 \Big|_{X=s} = \langle u \rangle_2 \Big|_{X=s}$$

(A.53)

$$\left. \frac{d \langle u \rangle}{dX} \right|_{s^+} - \left. \frac{d \langle u \rangle}{dX} \right|_{s^-} - \Phi^2 \langle u \rangle \Big|_s = 0$$

(A.54)

$$\frac{d^2 \langle u \rangle_2}{dX^2} - \beta^2 [\langle u \rangle_2 - 1] = 0$$

(A.55)

para

$$s < x < 1$$

sujeta a

$$\langle u \rangle_2 \Big|_{X=s} = \langle u \rangle_1 \Big|_{X=s}$$

(A.56)

$$\left. \frac{d \langle u \rangle}{dX} \right|_{s^+} - \left. \frac{d \langle u \rangle}{dX} \right|_{s^-} - \Phi^2 \langle u \rangle \Big|_s = 0$$

(A.57)

$$\langle u \rangle_2 \Big|_{X=1} = 1$$

(A.58)

La solución se obtuvo mediante variación de parámetros

$$\langle u \rangle_1 = A \cosh(\beta X) + 1 \quad (\text{A.59})$$

$$\langle u \rangle_2 = B \frac{\sinh(\beta(X-1))}{\cosh(\beta)} + 1 \quad (\text{A.60})$$

donde se hizo uso de las condiciones (A.52) y (A.58). Al utilizar el resto de las condiciones en las fronteras se obtuvo el sistema de ecuaciones lineales representada en la siguiente matriz aumentada

$$\left( \begin{array}{cc|c} \cosh(\beta s) & -\frac{\sinh(\beta(s-1))}{\cosh(\beta)} & 0 \\ -[\beta \sinh(\beta s) + \Phi^2 \cosh(\beta s)] & \beta \frac{\cosh(\beta(s-1))}{\cosh(\beta)} & \Phi^2 \end{array} \right) \quad (\text{A.61})$$

La columna 1y 2 de (A.61) pertenecen a los coeficientes de  $A$  y  $B$  respectivamente, tales constantes son

$$A = \frac{\lambda_A}{\lambda} \text{ y } B = \frac{\lambda_B}{\lambda} \quad (\text{A.62})$$

donde  $\lambda$ ,  $\lambda_A$  y  $\lambda_B$

$$\lambda_3 = \frac{\beta \cosh(\beta) - \Phi^2 \cosh(\beta s) \sinh[\beta(s-1)]}{\cosh(\beta)}$$

$$\lambda_{A3} = \Phi^2 \frac{\sinh(\beta(s-1))}{\cosh(\beta)}$$

$$\lambda_{B3} = \Phi^2 \cosh(\beta s)$$

## Apéndice A4. Solución del modelo promediado con salto con resistencia en las fronteras verticales.

Se partió de la ecuación (37) sujeta a la condición en la frontera (38) a la (41) pero cambiando la condición (41) por la condición de resistencia a la transferencia de masa en las fronteras verticales

$$\frac{d^2 \langle u \rangle}{dX^2} - \beta^2 [\langle u \rangle - 1] = 0 \quad (\text{A.63})$$

sujeta a

$$\left. \frac{d \langle u \rangle}{dX} \right|_{X=0} = 0 \quad (\text{A.64})$$

$$\langle u \rangle|_{X=s^-} = \langle u \rangle|_{X=s^+} \quad (\text{A.65})$$

$$\left. \frac{d \langle u \rangle}{dX} \right|_{s^+} - \left. \frac{d \langle u \rangle}{dX} \right|_{s^-} - \Phi^2 \langle u \rangle|_s = 0 \quad (\text{A.66})$$

$$\left. \frac{d \langle u \rangle}{dX} \right|_{X=1} = -Bi_{m,X} [\langle u \rangle|_{X=1} - 1] \quad (\text{A.67})$$

Se supuso una solución en términos de función a trozos (42)

$$\langle u \rangle = \begin{cases} \langle u \rangle_1 & \text{si } 0 \leq X \leq s \\ \langle u \rangle_2 & \text{si } s \leq X \leq 1 \end{cases} \quad (\text{A.68})$$

Al sustituir (A.68) en las ecuaciones (A.63) a la (A.67)

$$\frac{d^2 \langle u \rangle_1}{dX^2} - \beta^2 [\langle u \rangle_1 - 1] = 0$$

(A.69)

para

$$0 < X < s$$

sujeta a

$$\left. \frac{d \langle u \rangle_1}{dX} \right|_{X=0} = 0$$

(A.70)

$$\langle u \rangle_1 \Big|_{X=s} = \langle u \rangle_2 \Big|_{X=s}$$

(A.71)

$$\left. \frac{d \langle u \rangle}{dX} \right|_{s^+} - \left. \frac{d \langle u \rangle}{dX} \right|_{s^-} - \Phi^2 \langle u \rangle \Big|_s = 0$$

(A.72)

$$\frac{d^2 \langle u \rangle_2}{dX^2} - \beta^2 [\langle u \rangle_2 - 1] = 0$$

(A.73)

para

$$s < x < 1$$

sujeta a

$$\langle u \rangle_2 \Big|_{X=s} = \langle u \rangle_1 \Big|_{X=s}$$

(A.74)

$$\left. \frac{d \langle u \rangle}{dX} \right|_{s^+} - \left. \frac{d \langle u \rangle}{dX} \right|_{s^-} - \Phi^2 \langle u \rangle \Big|_s = 0$$

(A.75)

$$\left. \frac{d \langle u \rangle_2}{dX} \right|_{X=1} = -Bi_{m,X} [\langle u \rangle_2 \Big|_{X=1} - 1]$$

(A.76)

La solución se obtuvo mediante variación de parámetros

$$\langle u \rangle_1 = A \cosh(\beta X) + 1 \quad (A.77)$$

$$\langle u \rangle_2 = B \frac{\sinh(\beta(X-1))}{\cosh(\beta)} + 1 \quad (A.78)$$

donde se hizo uso de las condiciones (A.70) y (A.76). Al utilizar el resto de las condiciones en las fronteras se obtuvo el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{pmatrix} \cosh(\beta s) & -\left[ \frac{Bi_x \sinh[\beta(s-1)] - \beta \cosh[\beta(s-1)]}{\beta \sinh(\beta) + Bi_{m,x} \cosh(\beta)} \right] \\ -[\beta \sinh(\beta s) + \Phi^2 \cosh(\beta s)] & \beta \left[ \frac{Bi_x \cosh[\beta(s-1)] - \beta \sinh[\beta(s-1)]}{\beta \sinh(\beta) + Bi_{m,x} \cosh(\beta)} \right] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \Phi^2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.79})$$

La columna 1 y 2 de (A.79) pertenecen a los coeficientes de  $A$  y  $B$  respectivamente, tales constantes son

$$A = \frac{\lambda_A}{\lambda} \text{ y } B = \frac{\lambda_B}{\lambda} \quad (\text{A.80})$$

donde  $\lambda_4$ ,  $\lambda_{A4}$  y  $\lambda_{B4}$

$$\lambda_4 = \frac{Bi_{m,x} [\beta \cosh(\beta) - \Phi^2 \cosh(\beta s) \sinh[\beta(s-1)]] + \beta [\beta \sinh(\beta) + \Phi^2 \cosh(\beta s) \cosh[\beta(s-1)]]}{\beta \sinh(\beta) + Bi_{m,x} \cosh(\beta)}$$

$$\lambda_{A4} = \Phi^2 \left[ \frac{Bi_{m,x} \sinh[\beta(s-1)] - \beta \cosh[\beta(s-1)]}{\beta \sinh(\beta) + Bi_{m,x} \cosh(\beta)} \right]$$

$$\lambda_{B4} = \Phi^2 \cosh(\beta s)$$

## Apéndice A5. Solución de la ecuación algebraica resultado del modelo unidimensional con condición de salto y velocidad de reacción no lineal.

Para resolver la ecuación (80) se procedió como en Rees y Sparks [36].

$$Q = -\frac{1}{9} \left[ 3 \left( \frac{2\sigma - (1-s_2)(1+\sigma)^2 \Phi^2 - 1}{\sigma^2} \right) + \left( \frac{\sigma^2 - 2\sigma}{\sigma^2} \right)^2 \right] \quad (\text{A.81})$$

y

$$R = \frac{1}{54} \left[ 9 \left( \frac{\sigma^2 - 2\sigma}{\sigma^2} \right) \left( \frac{2\sigma - (1-s_2)(1+\sigma)^2 \Phi^2 - 1}{\sigma^2} \right) + 2 \left( \frac{\sigma^2 - 2\sigma}{\sigma^2} \right)^3 + \frac{27}{\sigma^2} \right], \quad (\text{A.82})$$

y el discriminante

$$D = Q^3 + R^2 \quad (\text{A.83})$$

El problema solo tiene una solución real si  $D > 0$

$$u|_{x=s} = \left\{ \left( R + \sqrt{D} \right)^{\frac{1}{3}} + \left( R - \sqrt{D} \right)^{\frac{1}{3}} + \frac{1}{3} \left( \frac{\sigma^2 - 2\sigma}{\sigma^2} \right) \right\} \quad (\text{A.84})$$

Por lo que el factor de efectividad es

$$\eta = \frac{1}{1-s_2} \left[ 1 - \left\{ \left( R + \sqrt{D} \right)^{\frac{1}{3}} + \left( R - \sqrt{D} \right)^{\frac{1}{3}} + \frac{1}{3} \left( \frac{\sigma^2 - 2\sigma}{\sigma^2} \right) \right\} \right] \quad (\text{A.85})$$

Sí  $D = 0$  se obtiene tres soluciones reales, dos de las cuales son iguales. Sí esto es cierto, entonces también lo es que

$$(R + \sqrt{D})^{\frac{1}{3}} = (R - \sqrt{D})^{\frac{1}{3}} \quad (\text{A.86})$$

Por lo que

$$u_1|_{X=s} = \left\{ 2(R + \sqrt{D})^{\frac{1}{3}} + \frac{1}{3} \left( \frac{\sigma^2 - 2\sigma}{\sigma^2} \right) \right\} \quad (\text{A.87})$$

y

$$u_{2,3}|_{X=s} = \left\{ \frac{1}{3} \left( \frac{\sigma^2 - 2\sigma}{\sigma^2} \right) - (R + \sqrt{D})^{\frac{1}{3}} \right\} \quad (\text{A.88})$$

Por lo que las tres expresiones del factor de efectividad son

$$\eta_1 = \frac{1}{1-s_2} \left[ 1 - \left\{ 2(R + \sqrt{D})^{\frac{1}{3}} + \frac{1}{3} \left( \frac{\sigma^2 - 2\sigma}{\sigma^2} \right) \right\} \right] \quad (\text{A.89})$$

y

$$\eta_{2,3} = \frac{1}{1-s_2} \left[ 1 - \left\{ \frac{1}{3} \left( \frac{\sigma^2 - 2\sigma}{\sigma^2} \right) - (R + \sqrt{D})^{\frac{1}{3}} \right\} \right] \quad (\text{A.90})$$

Sí  $D < 0$ , existen tres soluciones reales y diferentes. Ellas son

$$u_1|_{X=s} = 2\sqrt{Q} \cos \left( \frac{\arccos \left( \frac{R}{\sqrt{-Q^3}} \right)}{3} \right) - \frac{1}{3} \left( \frac{\sigma^2 - 2\sigma}{\sigma^2} \right) \quad (\text{A.91})$$

$$u_2|_{X=s} = 2\sqrt{Q} \cos \left( \frac{\arccos \left( \frac{R}{\sqrt{-Q^3}} \right)}{3} + \frac{2}{3}\pi \right) - \frac{1}{3} \left( \frac{\sigma^2 - 2\sigma}{\sigma^2} \right) \quad (\text{A.92})$$

y

$$u_3|_{X=s} = 2\sqrt{Q} \cos \left( \frac{\arccos \left( \frac{R}{\sqrt{-Q^3}} \right)}{3} + \frac{5}{3}\pi \right) - \frac{1}{3} \left( \frac{\sigma^2 - 2\sigma}{\sigma^2} \right) \quad (\text{A.93})$$

Por lo que los factores de efectividad son

$$\eta_1 = \frac{1}{1-s_2} \left[ 1 - 2\sqrt{Q} \cos \left( \frac{\arccos \left( \frac{R}{\sqrt{-Q^3}} \right)}{3} \right) + \frac{1}{3} \left( \frac{\sigma^2 - 2\sigma}{\sigma^2} \right) \right] \quad (\text{A.94})$$

$$\eta_2 = \frac{1}{1-s_2} \left[ 1 - 2\sqrt{Q} \cos \left( \frac{\arccos \left( \frac{R}{\sqrt{-Q^3}} \right)}{3} + \frac{2}{3}\pi \right) + \frac{1}{3} \left( \frac{\sigma^2 - 2\sigma}{\sigma^2} \right) \right] \quad (\text{A.95})$$

y

$$\eta_3 = \frac{1}{1-s_2} \left[ 1 - 2\sqrt{Q} \cos \left( \frac{\arccos \left( \frac{R}{\sqrt{-Q^3}} \right)}{3} + \frac{5}{3}\pi \right) + \frac{1}{3} \left( \frac{\sigma^2 - 2\sigma}{\sigma^2} \right) \right] \quad (\text{A.96})$$

## Apéndice A6

Se utilizó el método convencional de diferencias finitas centradas para resolver las ecuaciones (1), (42), (61) y (77) junto a sus respectivas condiciones en las fronteras y la regla del trapecio para obtener el factor de efectividad. Con  $s_1 = 0.79$ ,  $s_2 = 0.81$  y  $s = 0.8$ . Los parámetros en los modelos sin resistencia en  $X$  fueron las combinaciones surgidas de

$$Bi_{m,Y} = [10^{-5}, 5, 10^4]$$

$$\psi = [0.25, 0.5, 1]$$

y los parámetros para los modelos con resistencia en  $X$  fueron las combinaciones que surgieron de

$$Bi_{m,X} = [10^{-5}, 5, 10^4]$$

$$Bi_{m,Y} = [10^{-5}, 5, 10^4]$$

$$\psi = [0.25, 0.5, 1]$$

en todos los casos los módulos de Thiele  $\phi$  fueron

$$\Phi = [10^{-1}, 10^{-0.8}, 10^{-0.6}, 10^{-0.4}, 10^{-0.2}, 10^0, 10^{0.2}, 10^{0.4}, 10^{0.6}, 10^{0.8}, 10^1, 10^{1.2}, 10^{1.4}, 10^{1.6}, 10^{1.8}, 10^2]$$

Las leyendas en las gráficas son

BSS= Modelo bidimensional sin salto,

BCS=Modelo bidimensional con salto,

PSS=Modelo promediado sin salto,

PCS=Modelo promediado con salto.

### Modelos sin resistencia las fronteras verticales

En la Figura A6.1 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 25 % de la longitud de su base, con fronteras horizontales prácticamente aisladas ( $Bi_{m,Y} = 1 \times 10^{-5}$ ) y a una concentración conocida en las fronteras verticales.

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS y PSS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 10 %, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 2% para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$ .

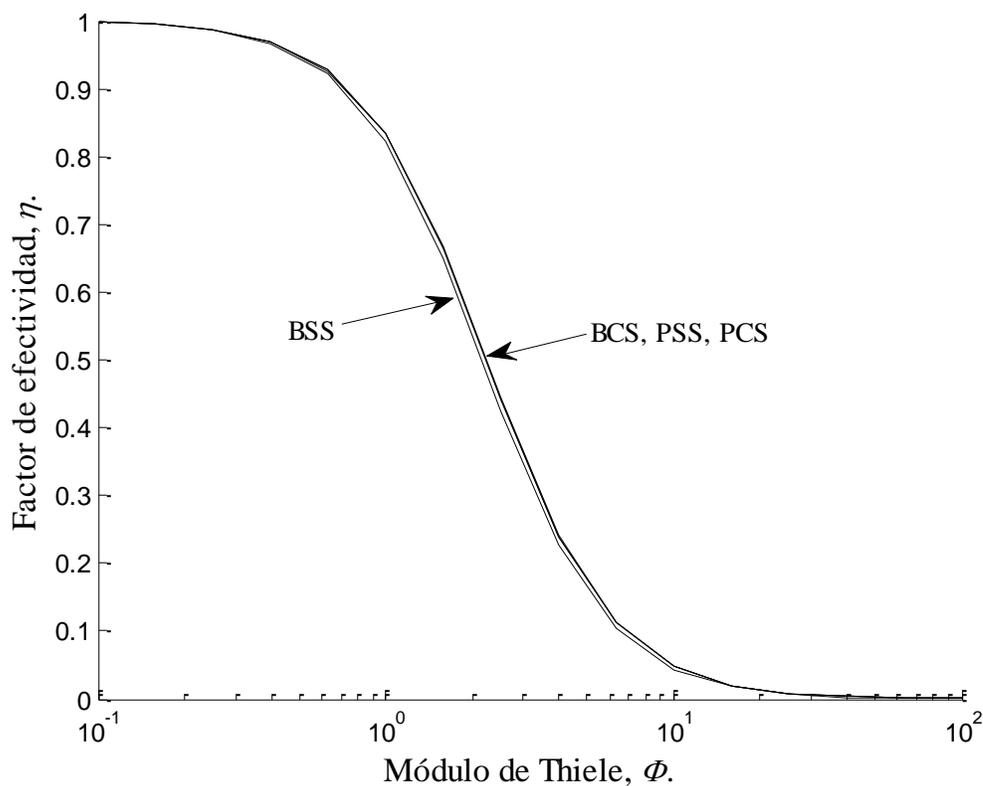


Figura A6.1. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\phi$  para los modelo sin resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,Y} = 1 \times 10^{-5}$  y  $\psi = 0.25$ .

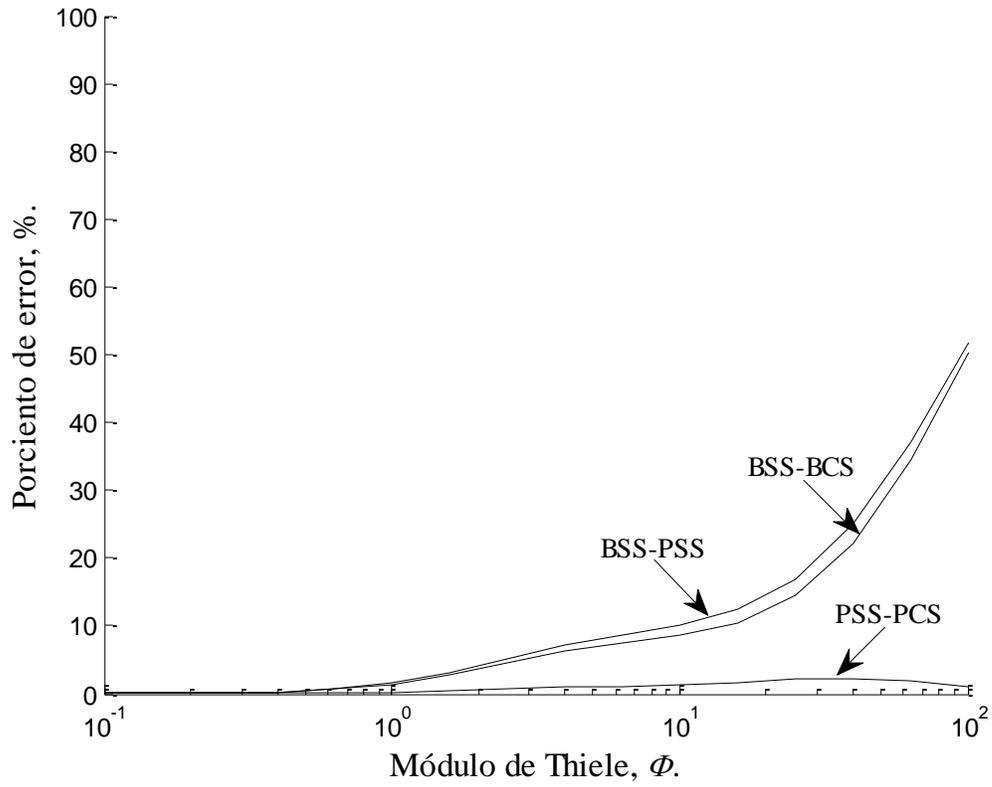


Figura A6.2. Comparación del factor de efectividad de los modelo sin resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,Y} = 1 \times 10^{-5}$  y  $\psi = 0.25$ .

En la Figura A6.3 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 25 % de la longitud de su base, con una resistencia regular en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,Y} = 5$ ) y a una concentración conocida en las fronteras verticales.

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS y PSS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 10 % y 20 %, respectivamente, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 3 % para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$ .

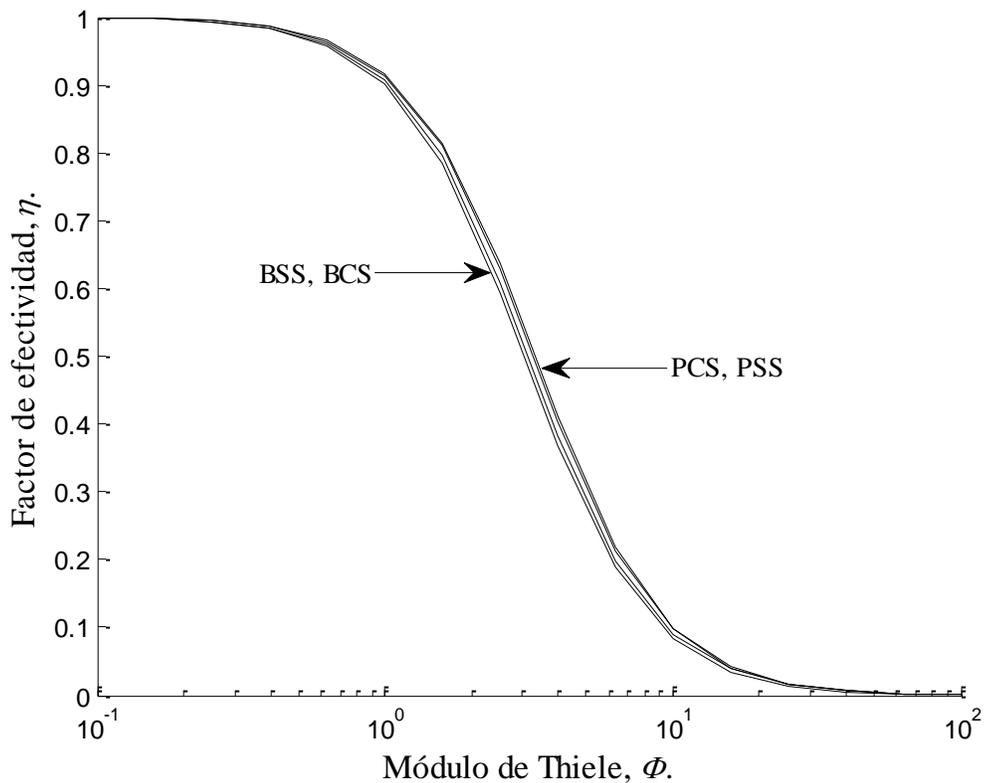


Figura A6.3. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo sin resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,Y} = 5$  y  $\psi = 0.25$ .

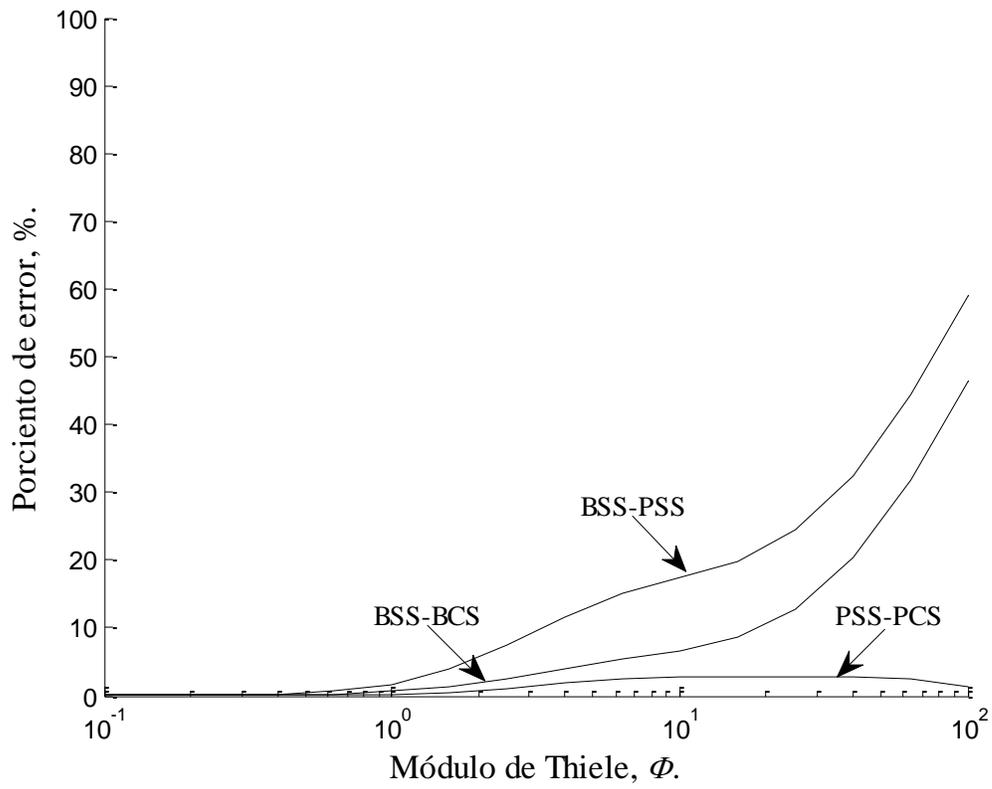


Figura A6.4. Comparación del factor de efectividad de los modelo sin resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,Y} = 5$  y  $\psi = 0.25$ .

En la Figura A6.5 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 25 % de la longitud de su base, con una resistencia prácticamente nula en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,Y} = 10^4$ ) y a una concentración conocida en las fronteras verticales.

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 1.5 % y los del modelo PCS a los del modelo PSS con errores menores al 12.5 %, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 1$  los resultados del modelo PSS aproximan a los del modelo PSS con errores por debajo del 10 %, para  $\Phi > 1$  el error aumenta desproporcionadamente hasta dejar al modelo inservible.

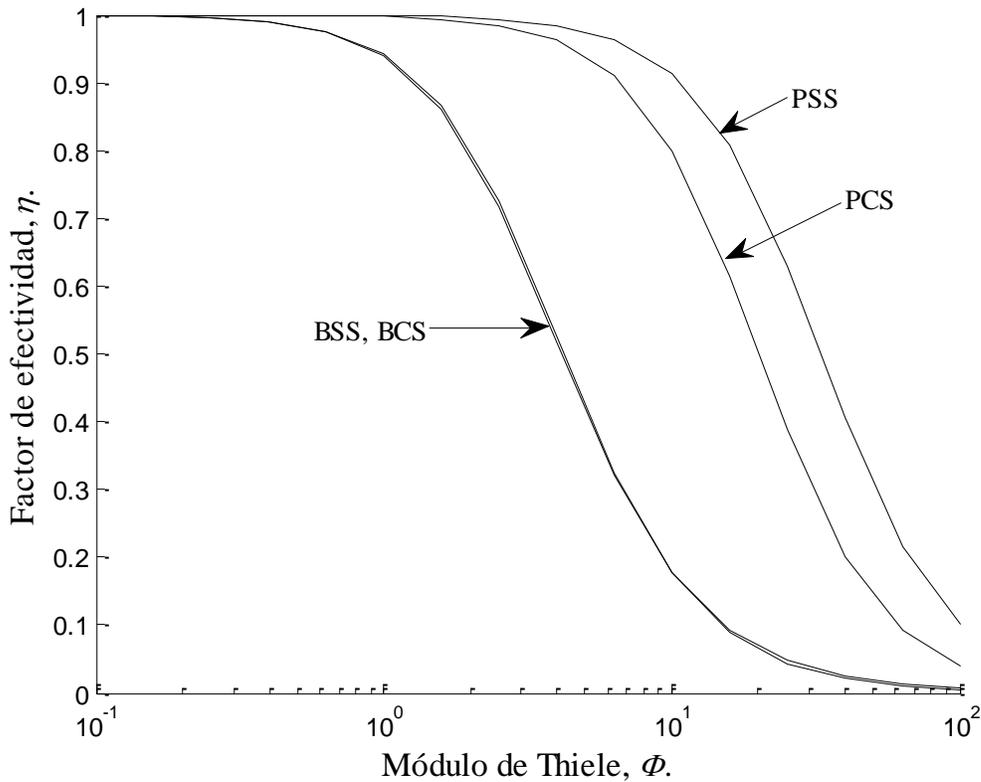


Figura A6.5. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo sin resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,Y} = 10^4$  y  $\psi = 0.25$ .

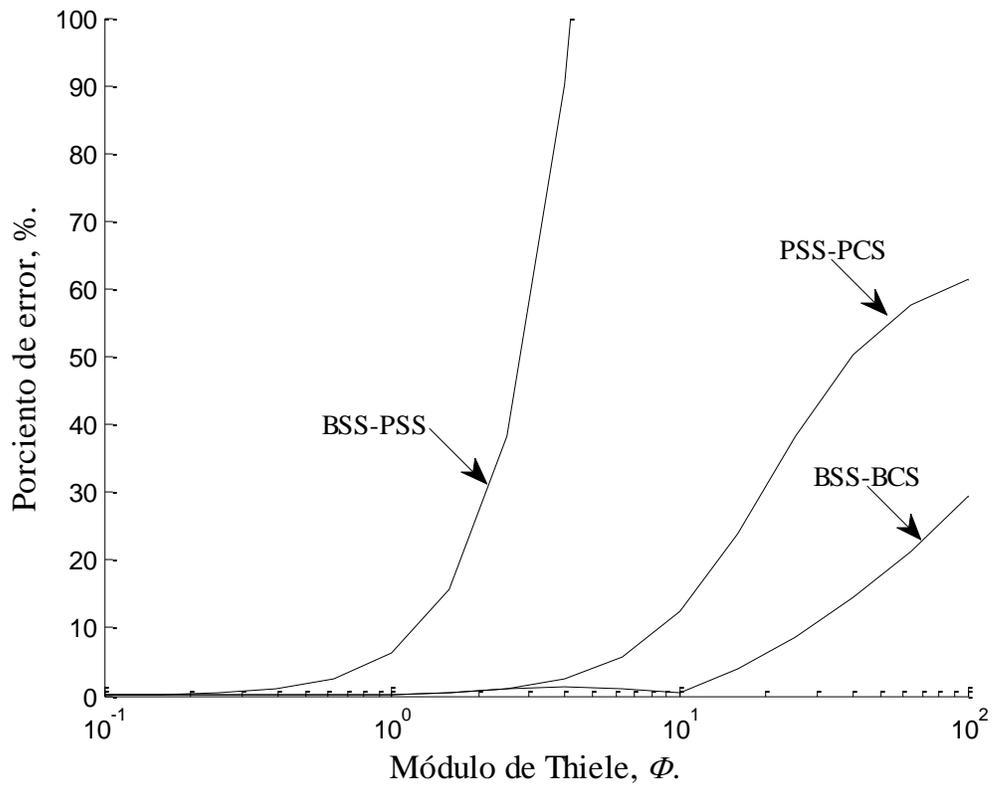


Figura A6.6. Comparación del factor de efectividad de los modelo sin resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,Y} = 10^4$  y  $\psi = 0.25$ .

En la Figura A6.7 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 50 % de la longitud de su base, con fronteras horizontales prácticamente aisladas ( $Bi_{m,Y} = 1 \times 10^{-5}$ ) y a una concentración conocida en las fronteras verticales.

Para  $10^{-1} \leq \phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS y PSS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 10 %, para  $\phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 2% para  $10^{-1} \leq \phi \leq 10^2$ .

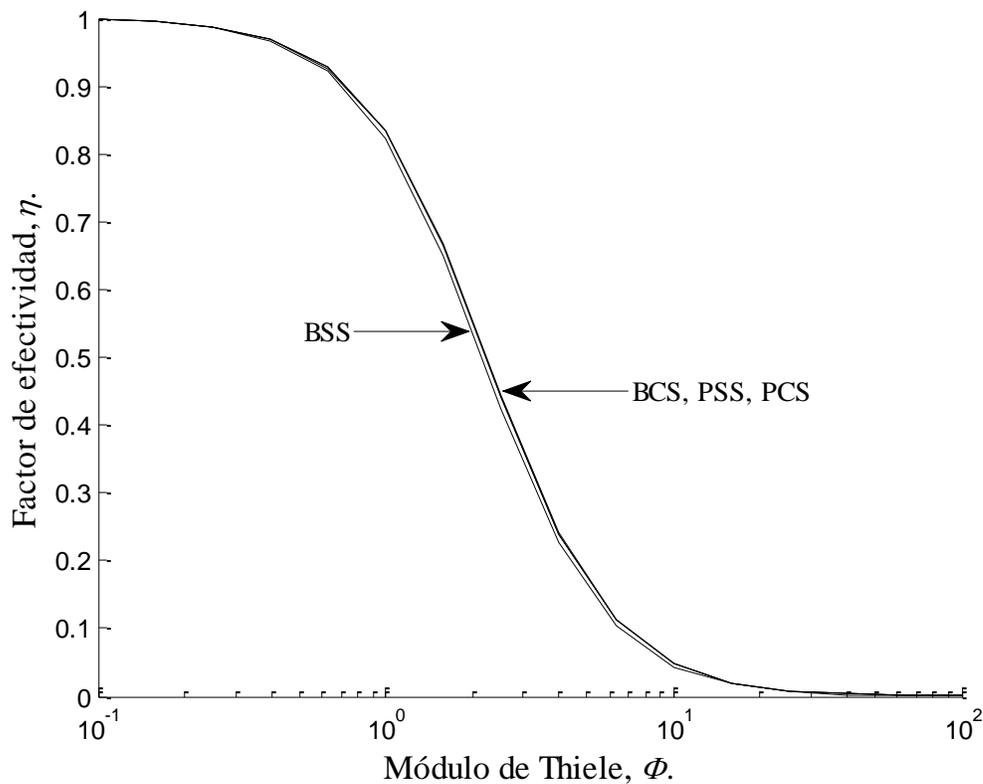


Figura A6.7. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\phi$  para los modelo sin resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,Y} = 1 \times 10^{-5}$  y  $\psi = 0.5$ .

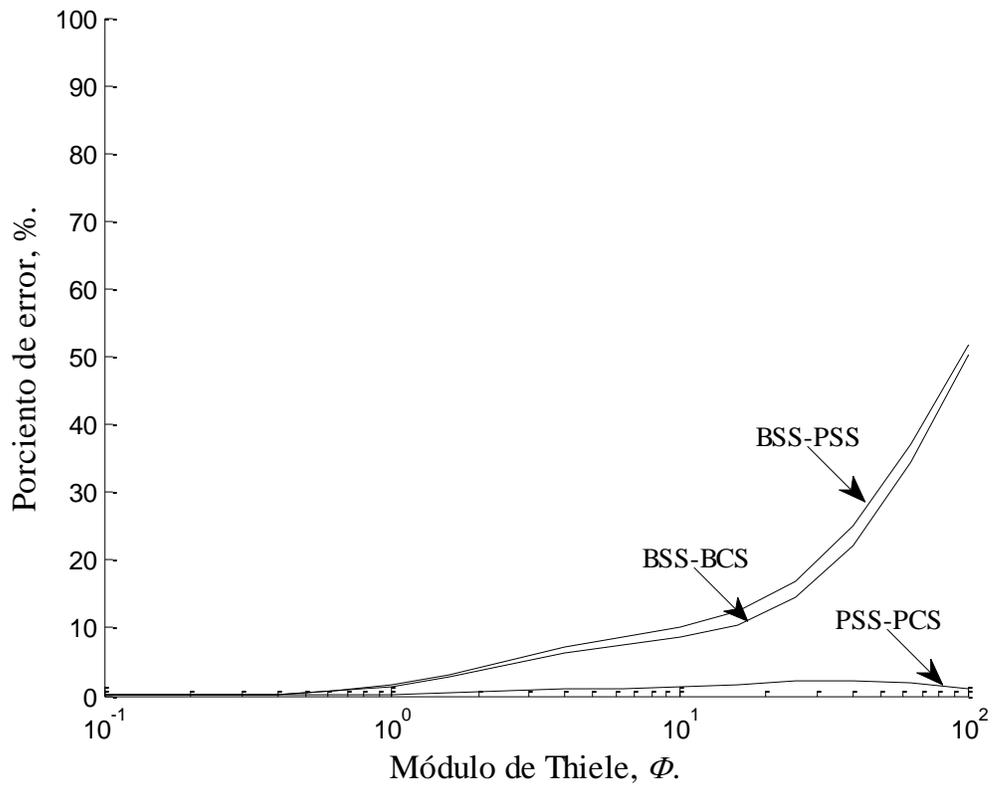


Figura A6.8. Comparación del factor de efectividad de los modelo sin resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,Y} = 1 \times 10^{-5}$  y  $\psi = 0.5$ .

En la Figura A6.9 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 50 % de la longitud de su base, con una resistencia regular en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,Y} = 5$ ) y a una concentración conocida en las fronteras verticales.

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS y PSS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 10 % y 20 %, respectivamente, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 2.5 % para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$ .

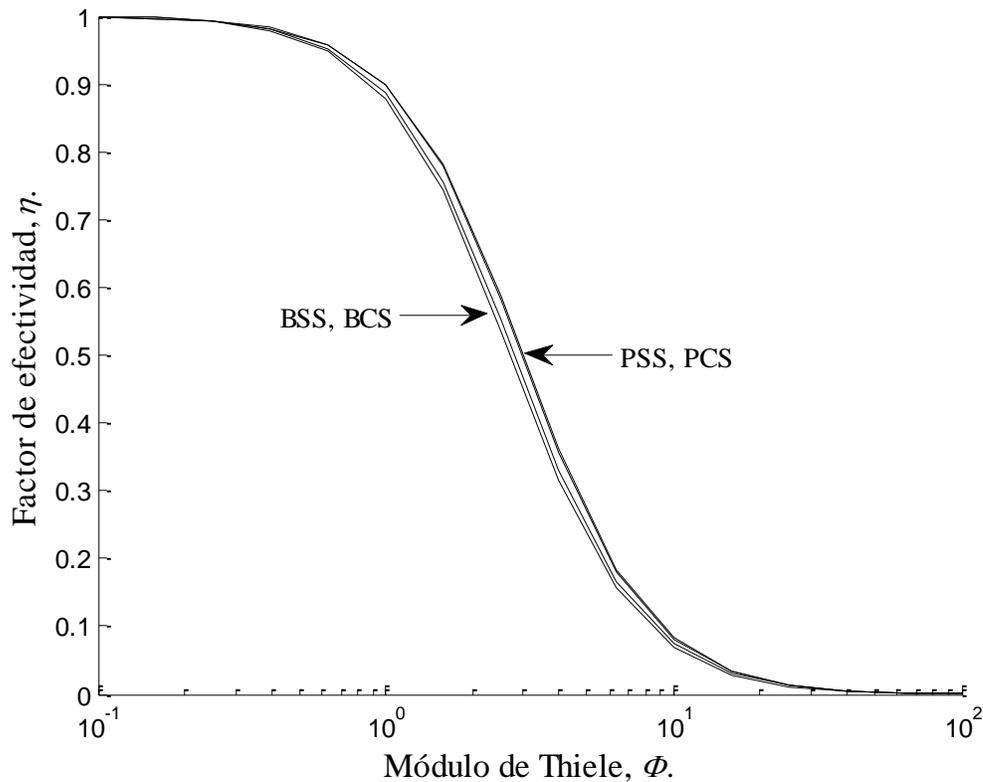


Figura A6.9. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo sin resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,Y} = 5$  y  $\psi = 0.5$ .

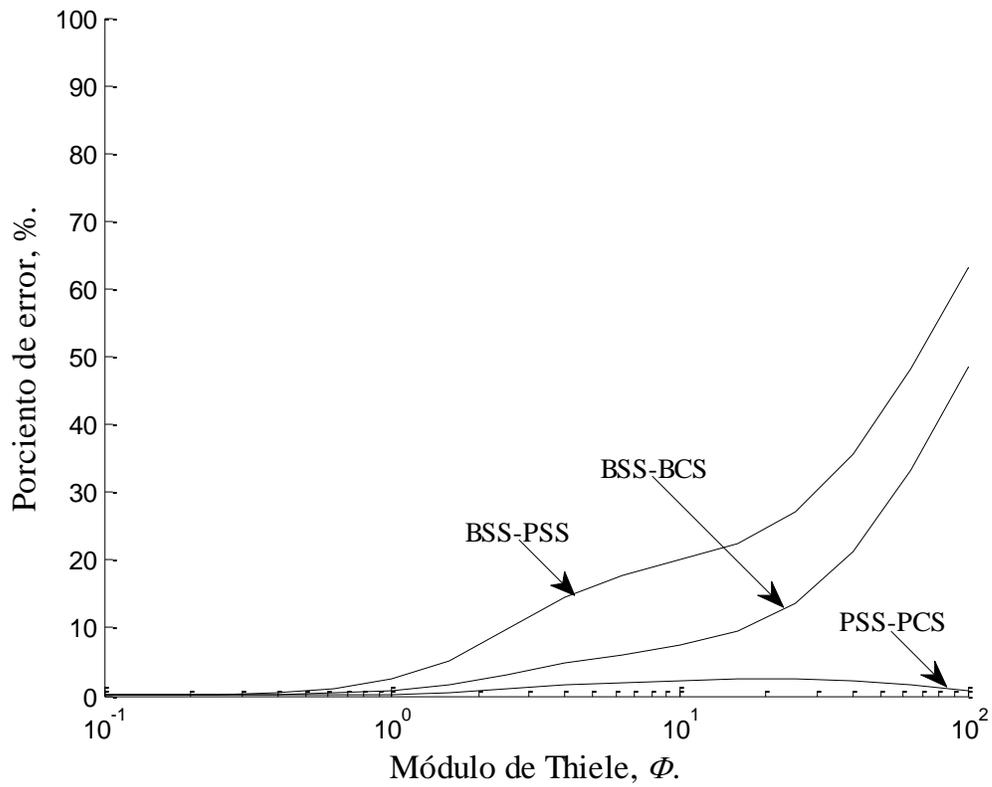


Figura A6.10. Comparación del factor de efectividad de los modelos sin resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,y} = 5$  y  $\psi = 0.5$ .

En la Figura A6.11 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 50 % de la longitud de su base, con una resistencia prácticamente nula en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,Y} = 10^4$ ) y a una concentración conocida en las fronteras verticales.

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 1.8 % y los del modelo PCS a los del modelo PSS con errores menores al 14 %, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 1$  los resultados del modelo PSS aproximan a los del modelo BSS con errores por debajo del 10 %, para  $\Phi > 1$  el error aumenta desproporcionadamente hasta dejar al modelo inservible.

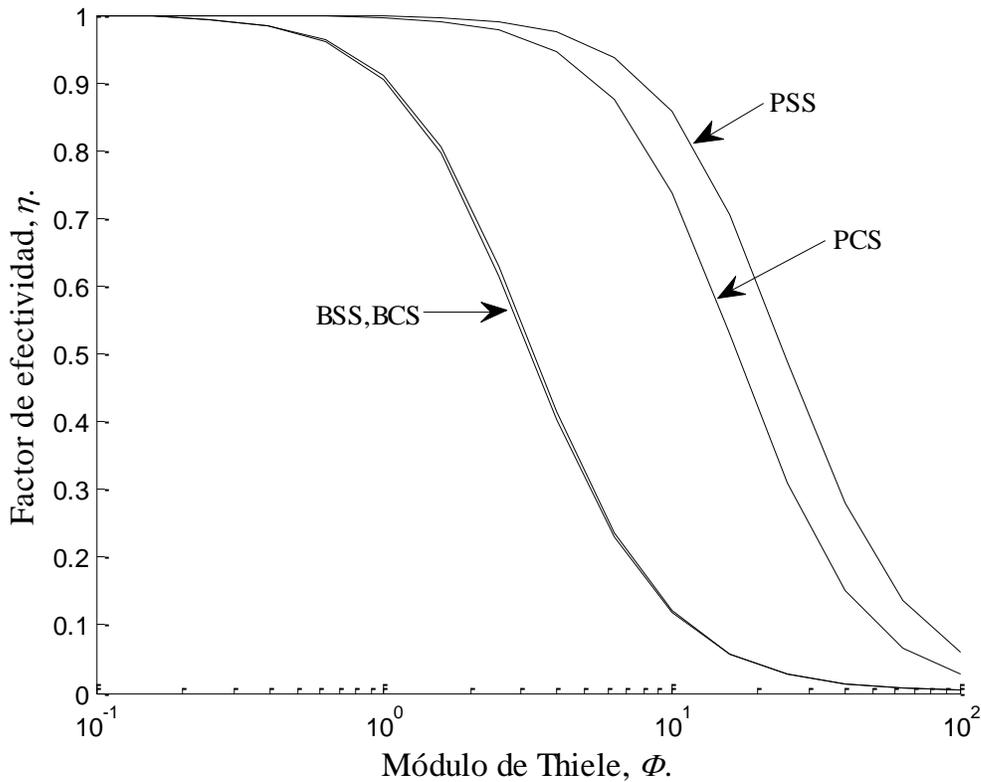


Figura A6.11. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo sin resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,Y} = 10^4$  y  $\psi = 0.5$ .

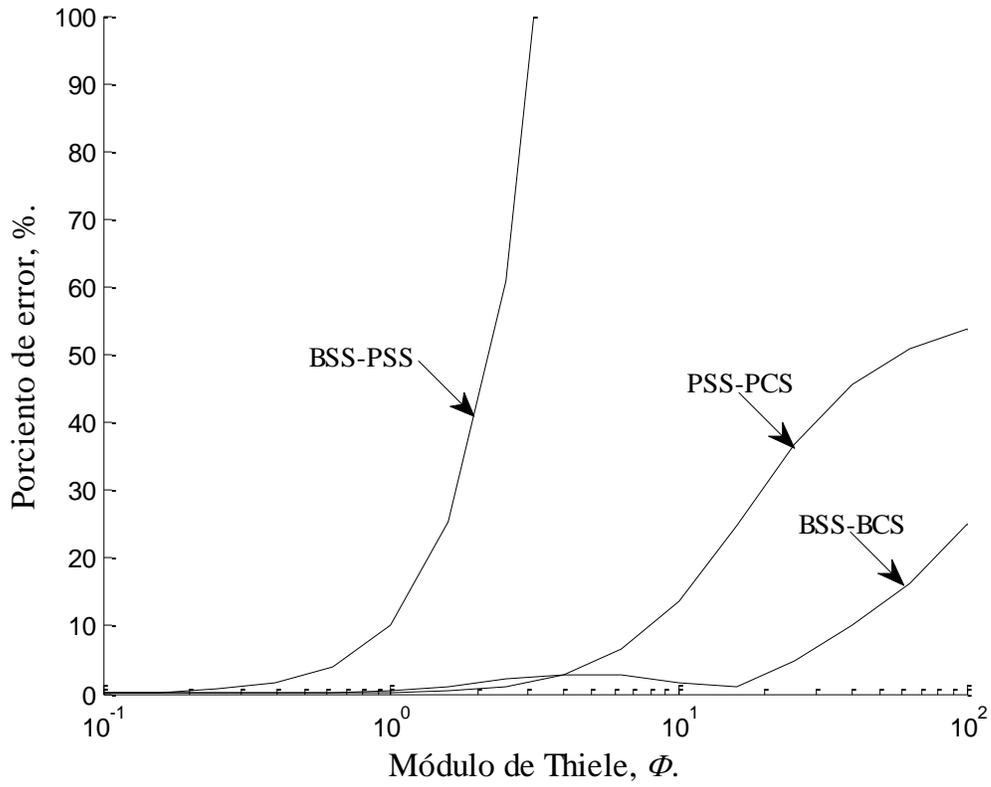


Figura A6.12. Comparación del factor de efectividad de los modelo sin resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,Y} = 10^4$  y  $\psi = 0.5$ .

En la Figura A6.13 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con una altura igual a la longitud de su base, que opere prácticamente aislado en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,y} = 10^{-5}$ ) y a una concentración conocida en las fronteras verticales.

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS y PSS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 10 %, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 2 % para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$ .

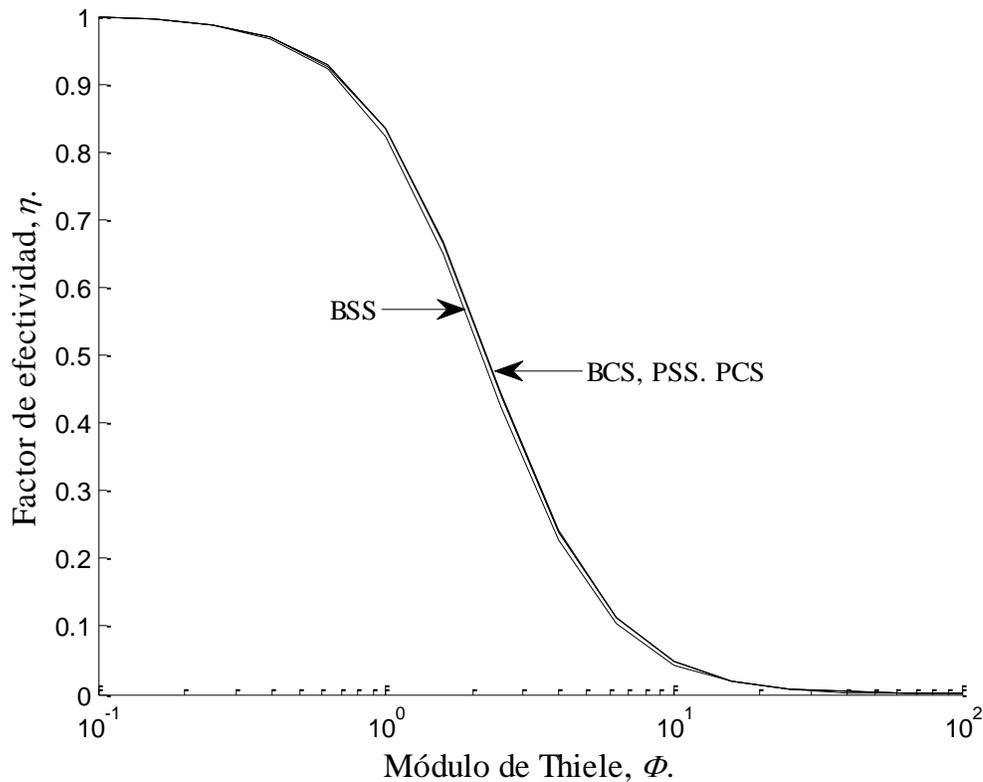


Figura A6.13. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo sin resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,y} = 10^{-5}$  y  $\psi = 1$ .

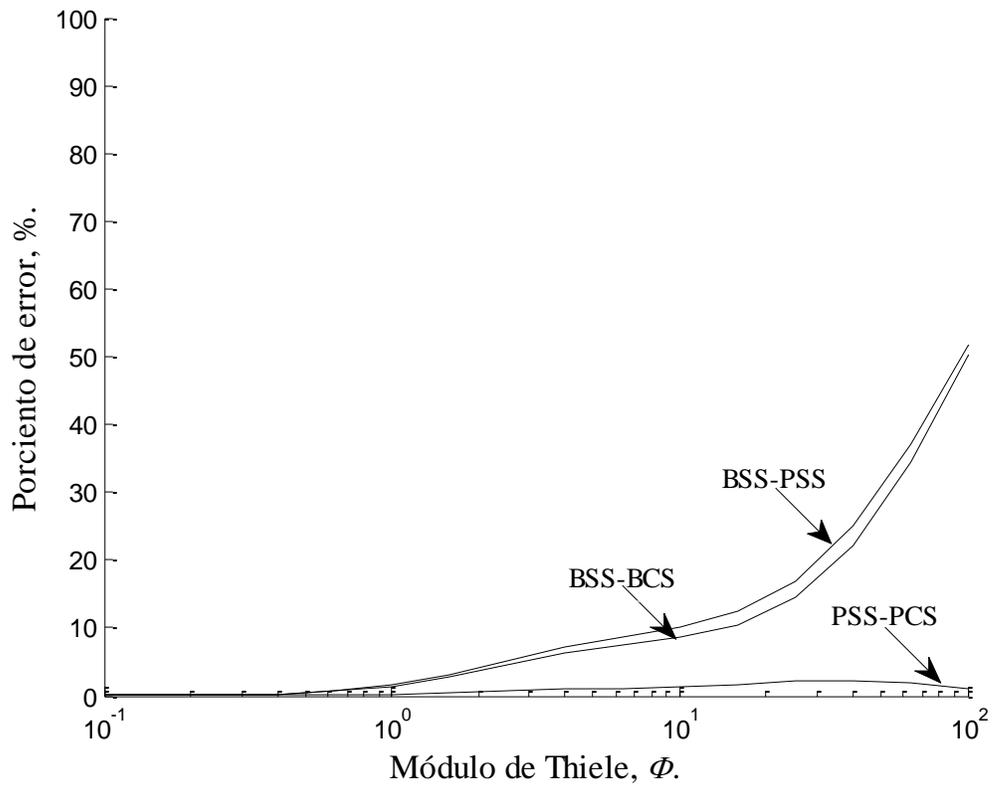


Figura A6.14. Comparación del factor de efectividad de los modelo sin resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,y} = 10^{-5}$  y  $\psi = 1$ .

En la Figura A6.15 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura igual a la longitud de su base, con una resistencia regular en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,Y} = 5$ ) y a una concentración conocida en las fronteras verticales.

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS y PSS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 8 % y 23 %, respectivamente, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 2 % para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$ .

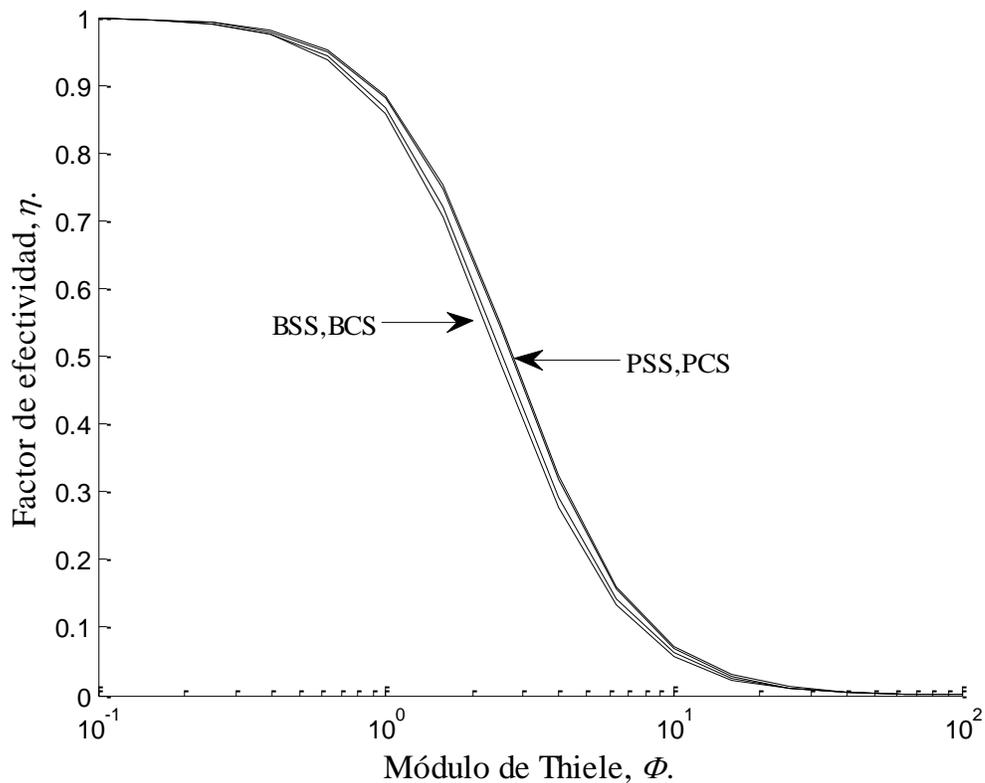


Figura A6.15. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo sin resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,Y} = 5$  y  $\psi = 1$ .

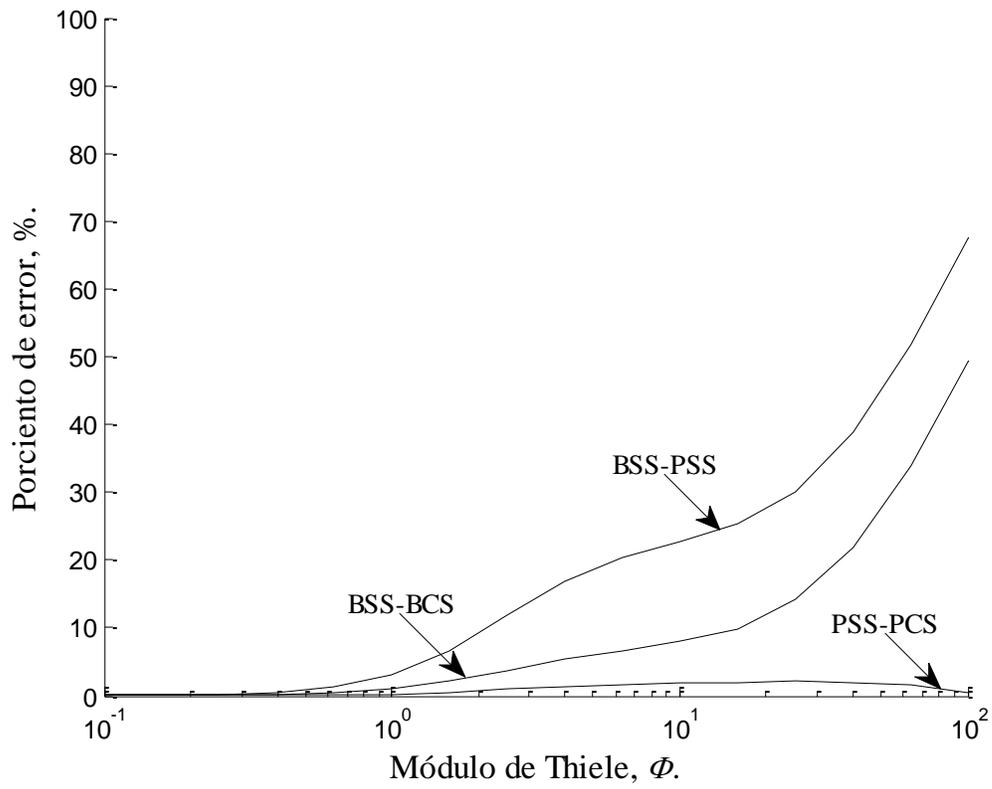


Figura A6.16. Comparación del factor de efectividad de los modelo sin resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,Y} = 5$  y  $\psi = 1$ .

En la Figura A6.17 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura igual a la longitud de su base, una resistencia prácticamente nula en las fronteras horizontales  $Bi_{m,Y} = 10^4$  y a una concentración conocida en las fronteras verticales.

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 4.5 % y los del modelo PCS a los del modelo PSS con errores menores al 14.5 %, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 1$  los resultados del modelo PSS aproximan a los del modelo BSS con errores por debajo del 14.2 %, para  $\Phi > 1$  el error aumenta desproporcionadamente hasta dejar al modelo inservible.

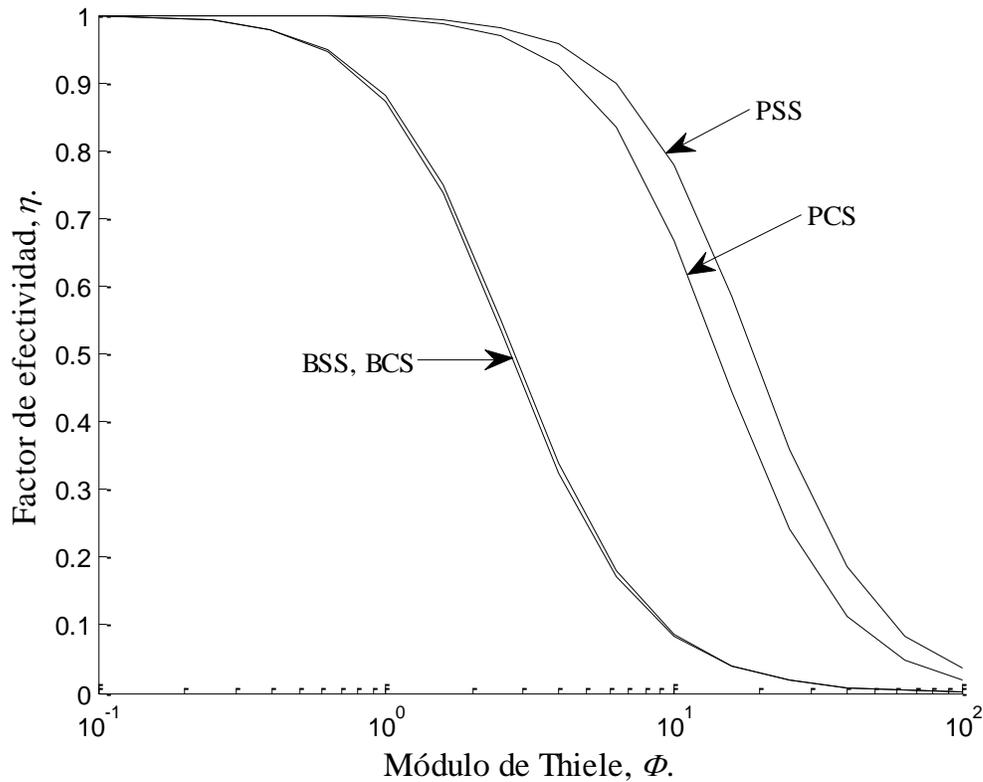


Figura A6.17. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo sin resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,Y} = 10^4$  y  $\psi = 1$ .

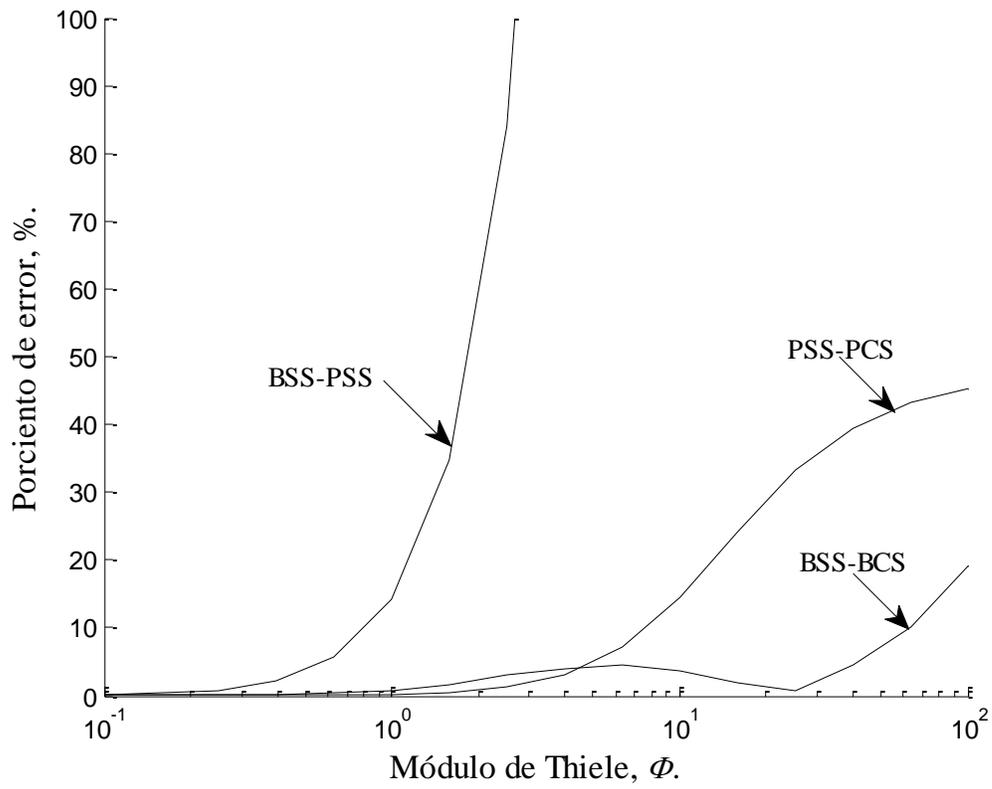


Figura A6.18. Comparación del factor de efectividad de los modelo sin resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,Y} = 10^4$  y  $\psi = 1$ .

### Modelos con resistencia en las fronteras verticales

En la Figura A6.19 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 25 % de la longitud de su base, con fronteras verticales prácticamente aisladas ( $Bi_{m,X} = 10^{-5}$ ) y con una resistencia regular en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,Y} = 5$ ).

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS y PSS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 8 % y 30 %, respectivamente, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 2 % para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$ .

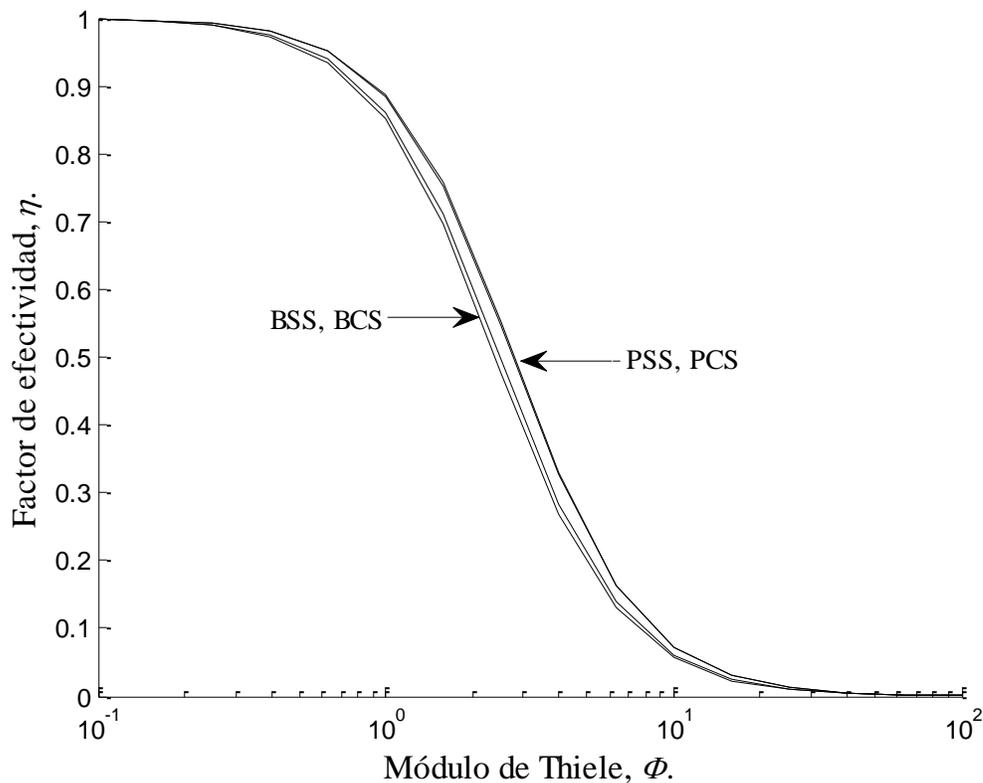


Figura A6.19. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 10^{-5}$ ,  $Bi_{m,Y} = 5$  y  $\psi = 0.25$ .

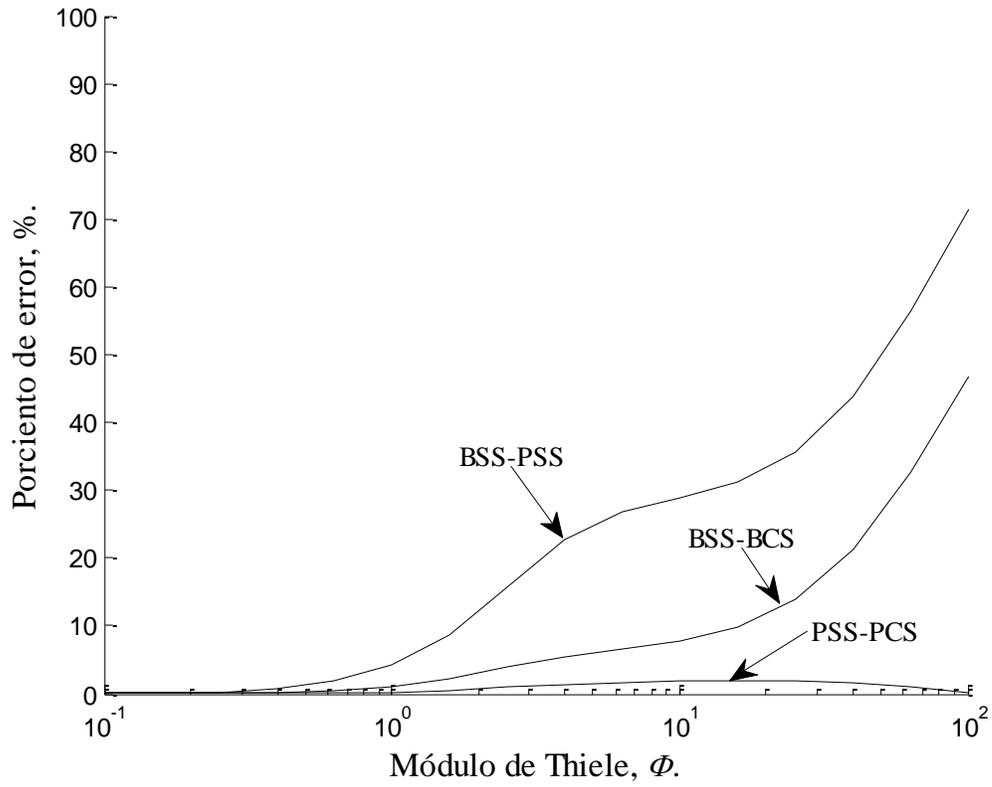


Figura A6.20. Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 10^{-5}$ ,  $Bi_{m,Y} = 5$  y  $\psi = 0.25$ .

En la Figura A6.21 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 25 % de la longitud de su base, con fronteras verticales prácticamente aisladas ( $Bi_{m,x} = 10^{-5}$ ) y con una resistencia prácticamente nula en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,y} = 10^4$ ). Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 1.8 % y los del modelo PCS a los del modelo PSS con errores menores al 12.5 %, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 1$  los resultados del modelo PSS aproximan a los del modelo BSS con errores por debajo del 7.5 %, para  $\Phi > 1$  el error aumenta desproporcionadamente hasta dejar al modelo inservible.

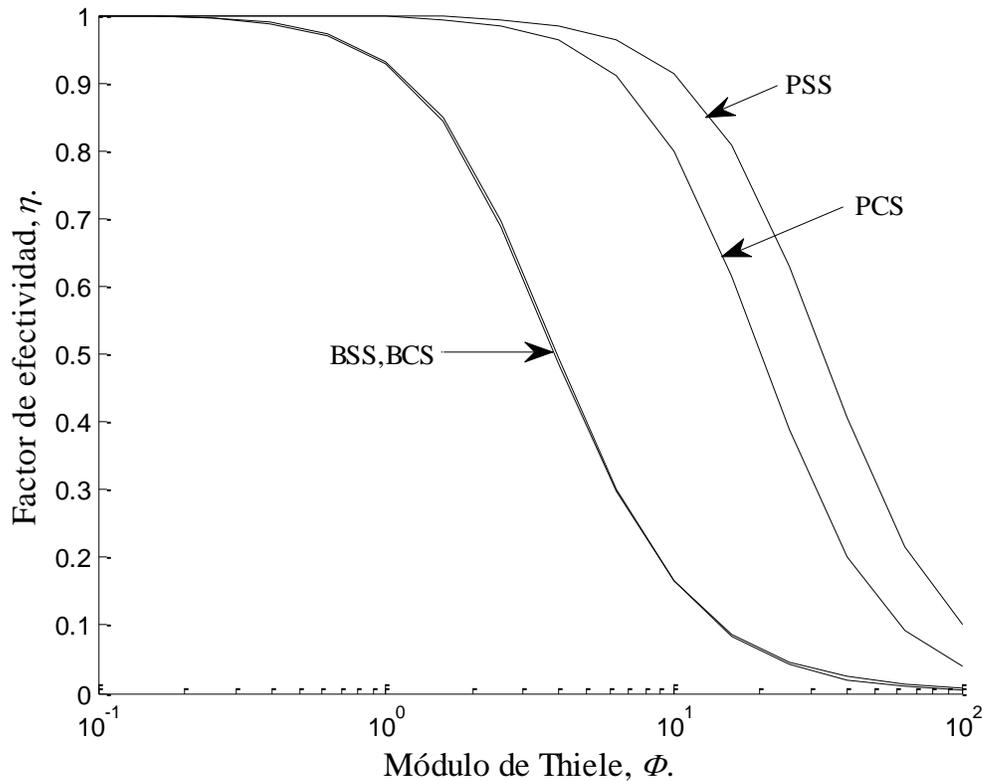


Figura A6.21. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 10^{-5}$ ,  $Bi_{m,y} = 10^4$  y  $\psi = 0.25$ .

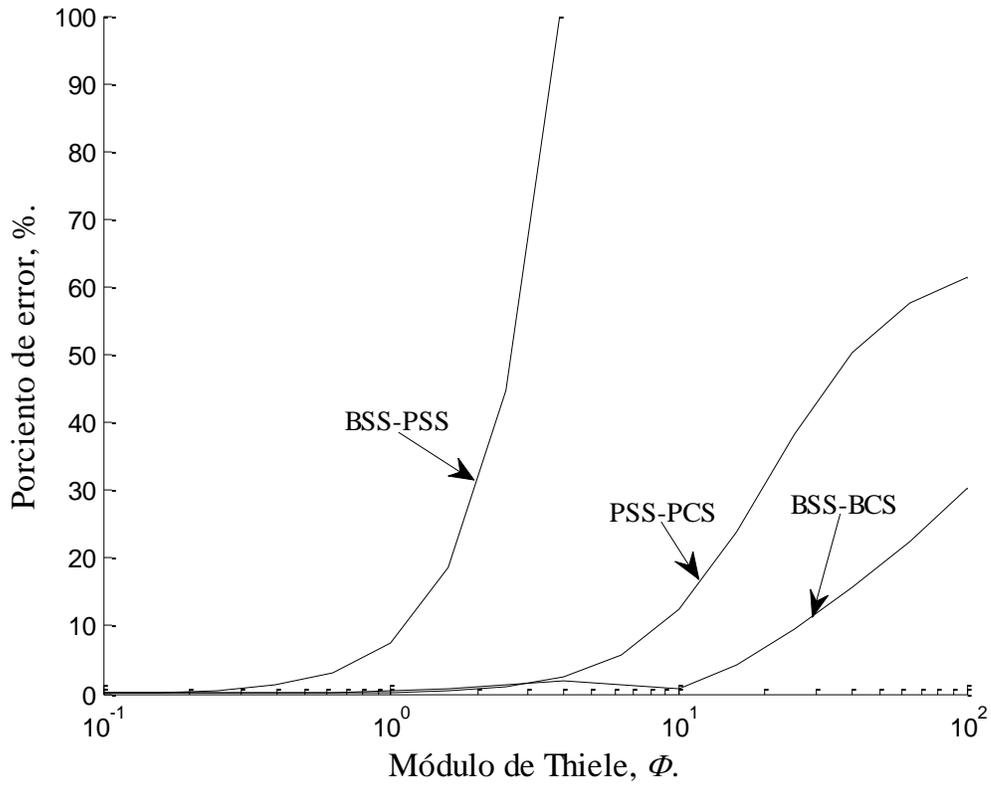


Figura A6.22. Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 10^{-5}$ ,  $Bi_{m,Y} = 10^4$  y  $\psi = 0.25$ .

En la Figura A6.23 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 25 % de la longitud de su base, con resistencia regular en las fronteras verticales ( $Bi_{m,X} = 5$ ) y con fronteras horizontales prácticamente aisladas ( $Bi_{m,Y} = 1 \times 10^{-5}$ ).

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS y PSS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 10.5 %, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 1.3 % para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$ .

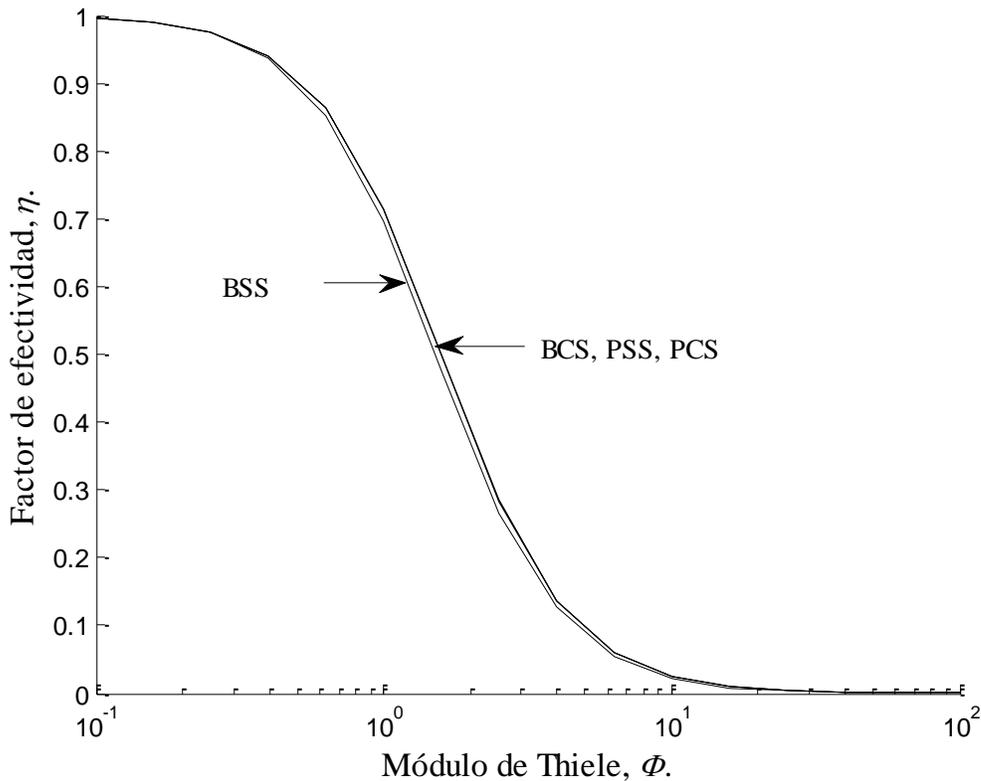


Figura A6.23. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 5$ ,  $Bi_{m,Y} = 1 \times 10^{-5}$  y  $\psi = 0.25$ .

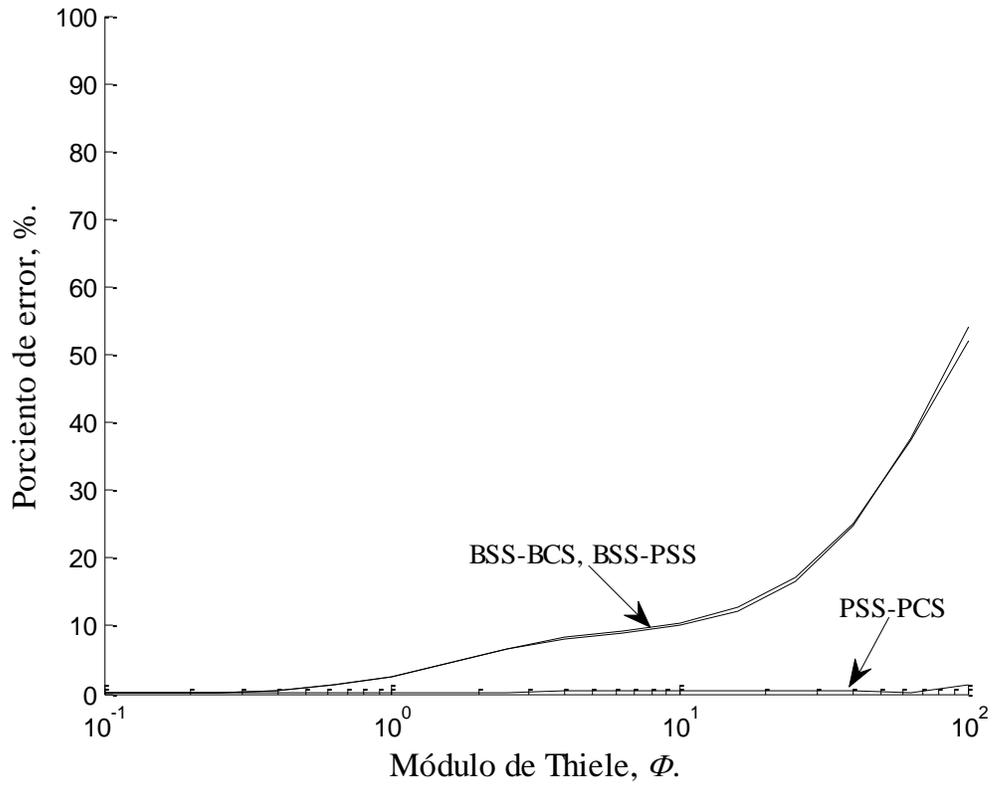


Figura A6.24. Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 5$ ,  $Bi_{m,Y} = 1 \times 10^{-5}$  y  $\psi = 0.25$ .

En la Figura A6.25 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 25 % de la longitud de su base, con resistencias regulares en las fronteras verticales ( $Bi_{m,X} = 5$ ) y con una resistencia regular en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,Y} = 5$ ). Los modelos bidimensionales con y sin salto llegaron a resultados prácticamente iguales.

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS y PSS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 7.5 % y 22 %, respectivamente, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 2.2 % para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$ .

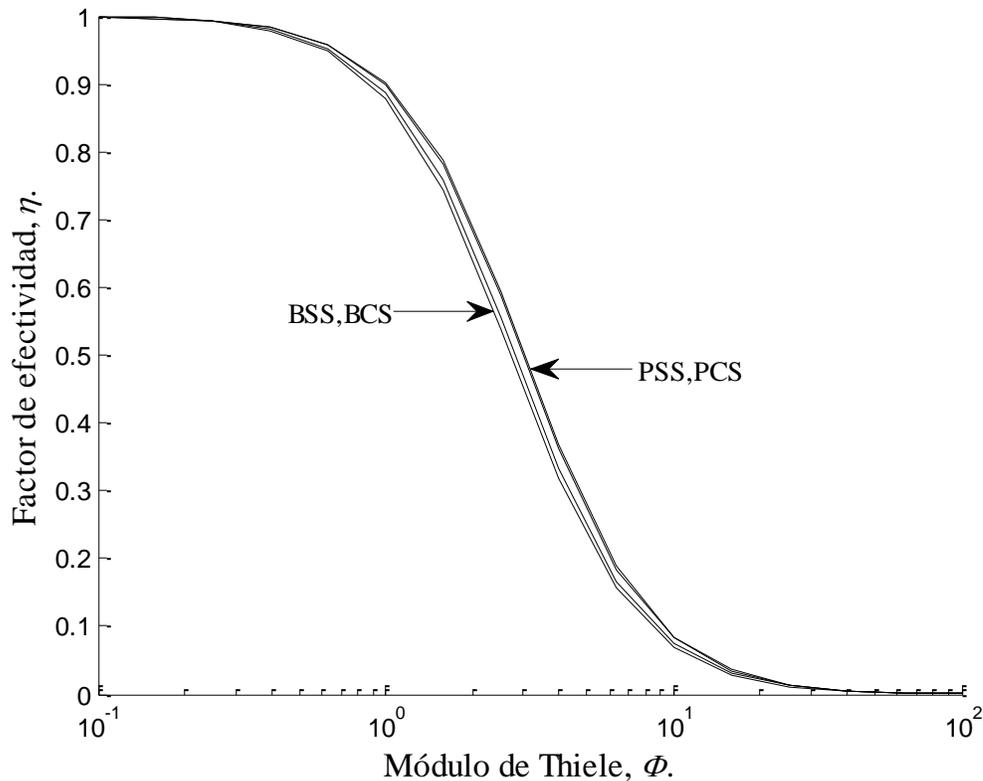


Figura A6.25. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelos con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 5$ ,  $Bi_{m,Y} = 5$  y  $\psi = 0.25$ .

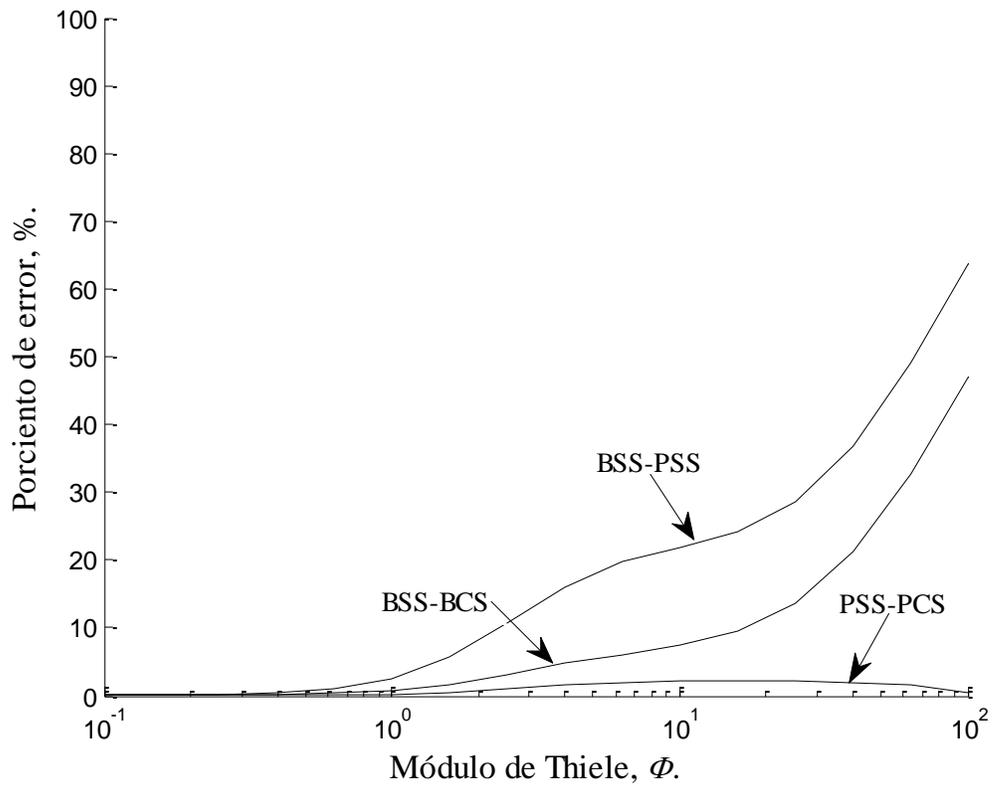


Figura A6.26. Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 5$ ,  $Bi_{m,Y} = 5$  y  $\psi = 0.25$ .

En la Figura A6.27 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 25 % de la longitud de su base, con resistencia regular en las fronteras verticales ( $Bi_{m,X} = 5$ ) y con una resistencia prácticamente nula en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,Y} = 10^4$ ). Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 1.7 % y los del modelo PCS a los del modelo PSS con errores menores al 12.5 %, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 1$  los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo BSS con errores por debajo del 7 %, para  $\Phi > 1$  el error aumenta desproporcionadamente hasta dejar al modelo inservible.

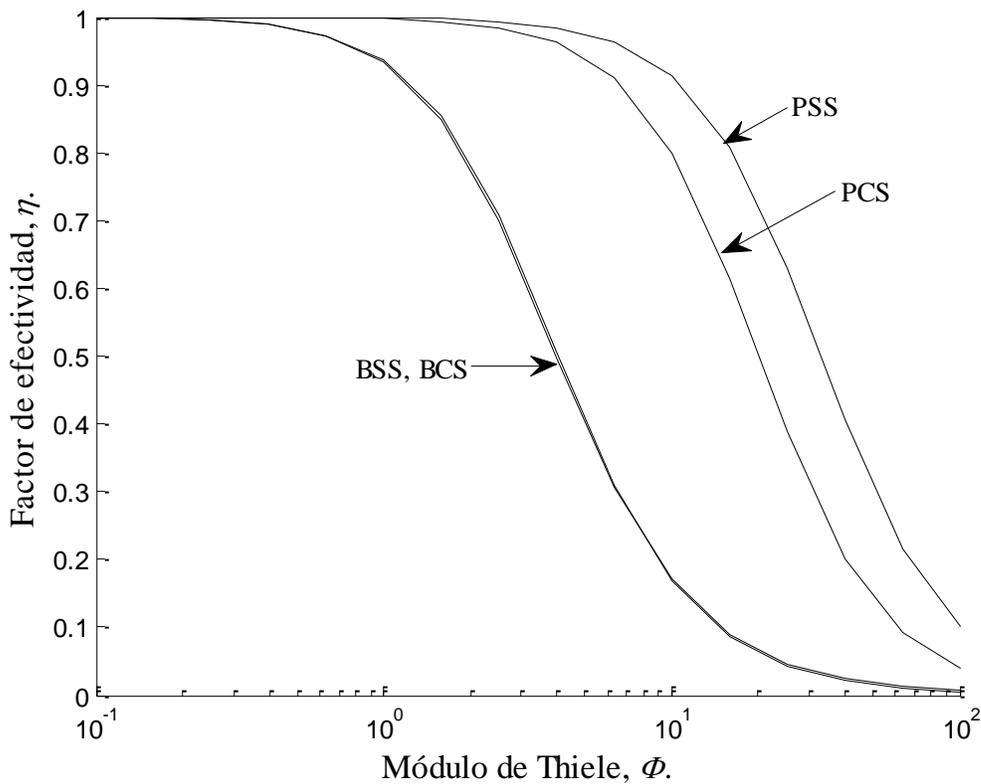


Figura A6.27. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 5$ ,  $Bi_{m,Y} = 10^4$  y  $\psi = 0.25$ .

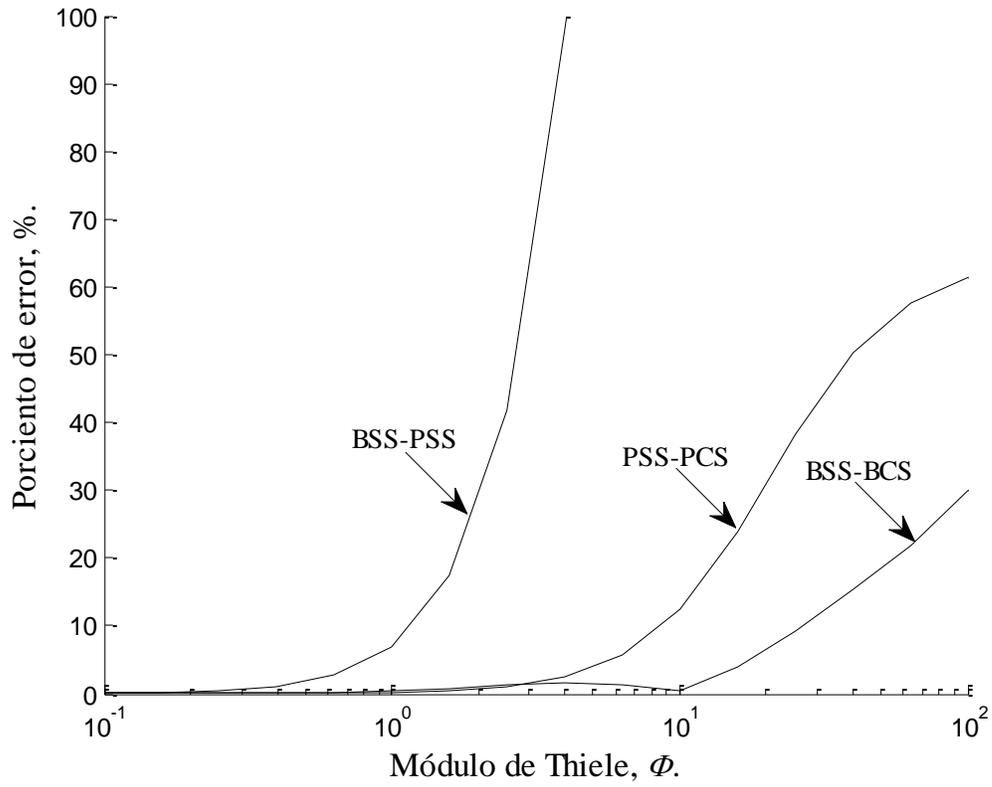


Figura A6.28. Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 5$ ,  $Bi_{m,y} = 10^4$  y  $\psi = 0.25$ .

En la Figura A6.29 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 25 % de la longitud de su base, con resistencia prácticamente nula en las fronteras verticales ( $Bi_{m,X} = 10^4$ ) y con fronteras horizontales prácticamente aisladas ( $Bi_{m,Y} = 1 \times 10^{-5}$ ). Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS y PSS se acercan a los del Modelo BSS con errores menores al 10 %, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS alto con errores menores al 2% para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$ .

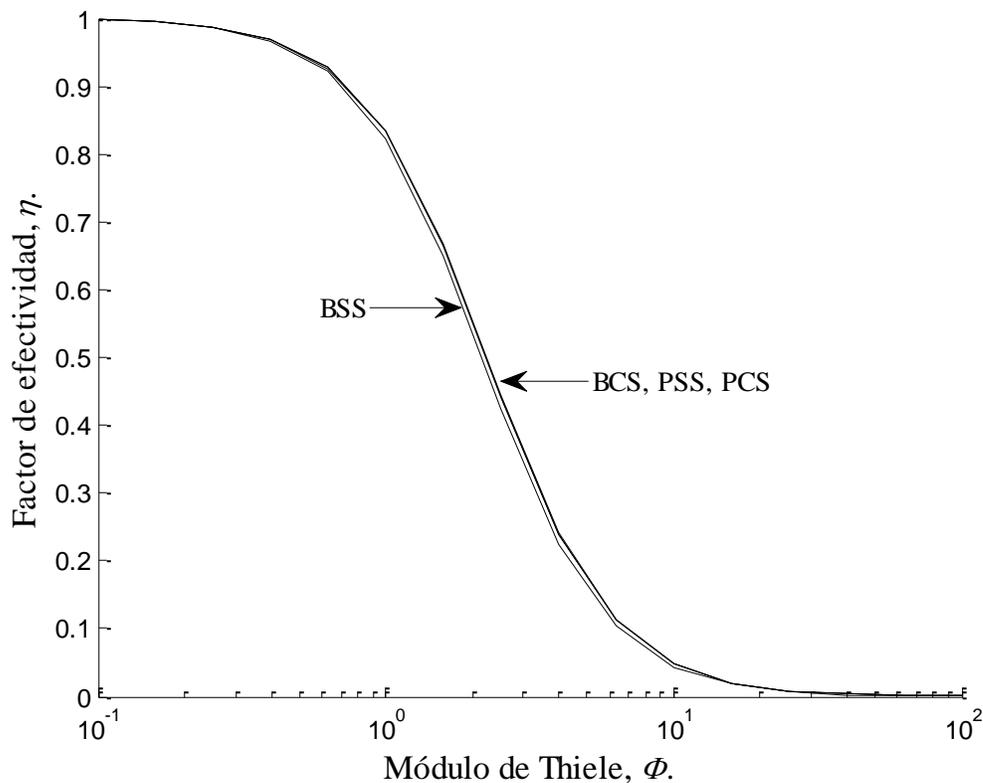


Figura A6.29. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 10^4$ ,  $Bi_{m,Y} = 1 \times 10^{-5}$  y  $\psi = 0.25$ .

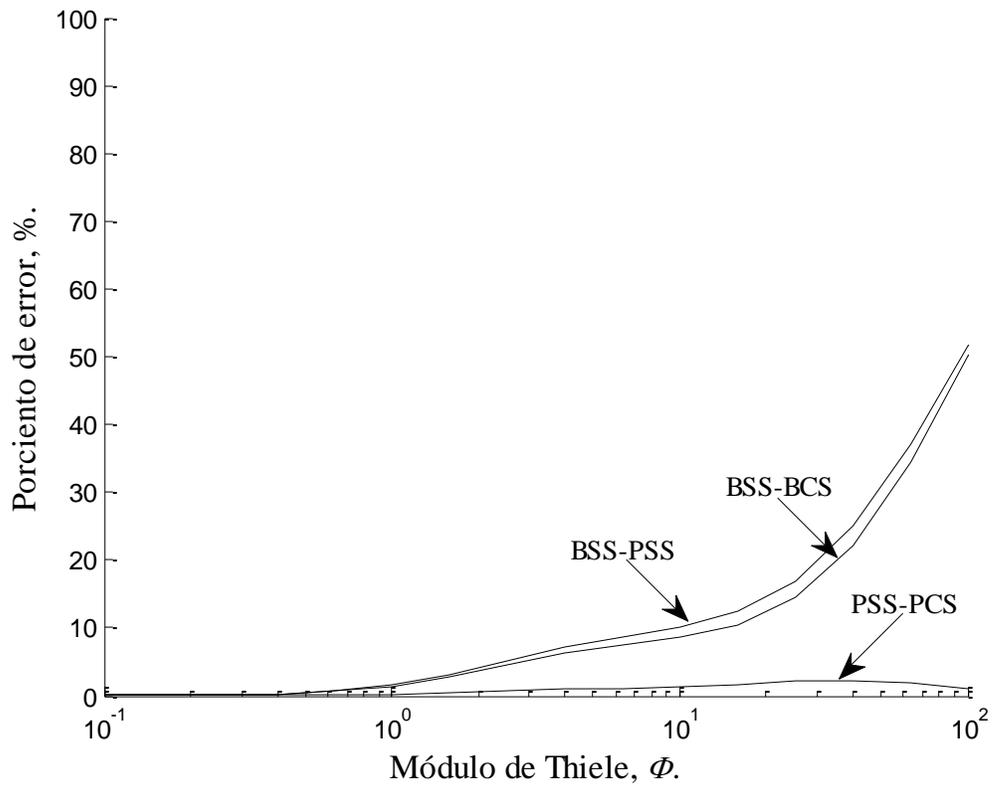


Figura A6.30. Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 10^4$ ,  $Bi_{m,y} = 1 \times 10^{-5}$  y  $\psi = 0.25$ .

En la Figura A6.31 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 25 % de la longitud de su base, con resistencias prácticamente nulas en las fronteras verticales ( $Bi_{m,x} = 10^4$ ) y con una resistencia regular en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,y} = 5$ ). Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS y PSS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 10 % y 20 %, respectivamente, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 3 % para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$ .

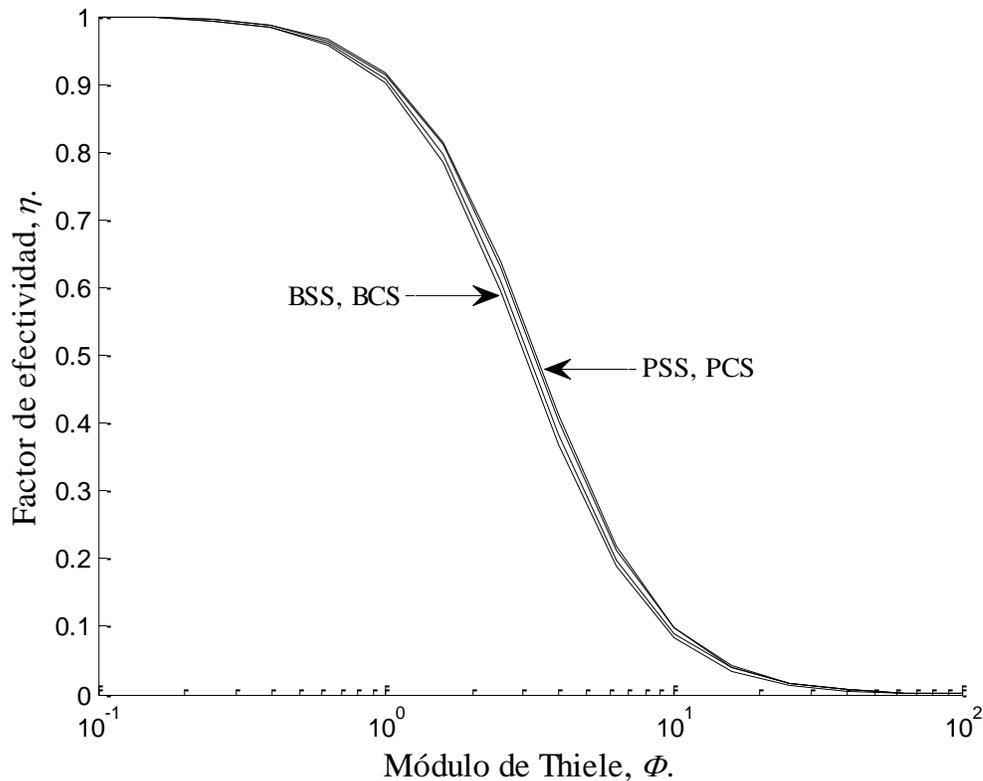


Figura A6.31. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 10^4$ ,  $Bi_{m,y} = 5$  y  $\psi = 0.25$ .

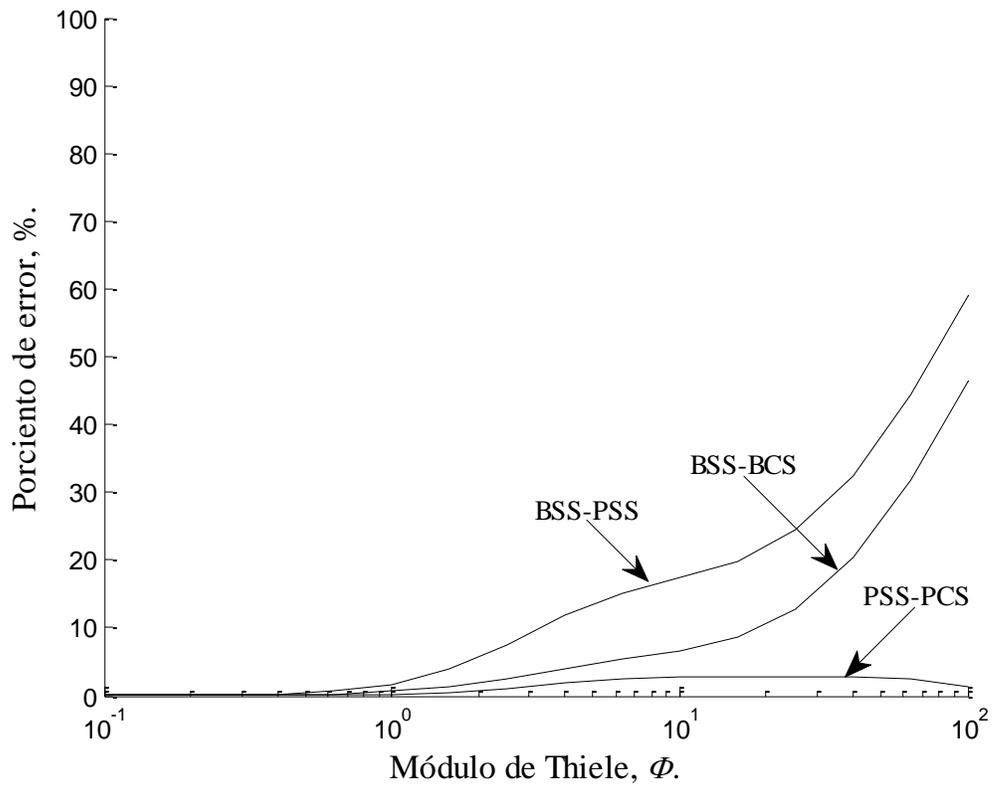


Figura A6.32. Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 10^4$ ,  $Bi_{m,y} = 5$  y  $\psi = 0.25$ .

En la Figura A6.33 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 25 % de la longitud de su base, con resistencias prácticamente nulas en las fronteras verticales ( $Bi_{m,x} = 10^4$ ) y con una resistencia prácticamente nula en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,y} = 10^4$ ). Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 1.5 % y los del modelo PCS a los del modelo PSS con errores menores al 12.5 %, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 1$  los resultados del modelo PSS aproximan a los del modelo BSS con errores por debajo del 6.5 %, para  $\Phi > 1$  el error aumenta desproporcionadamente hasta dejar al modelo inservible.

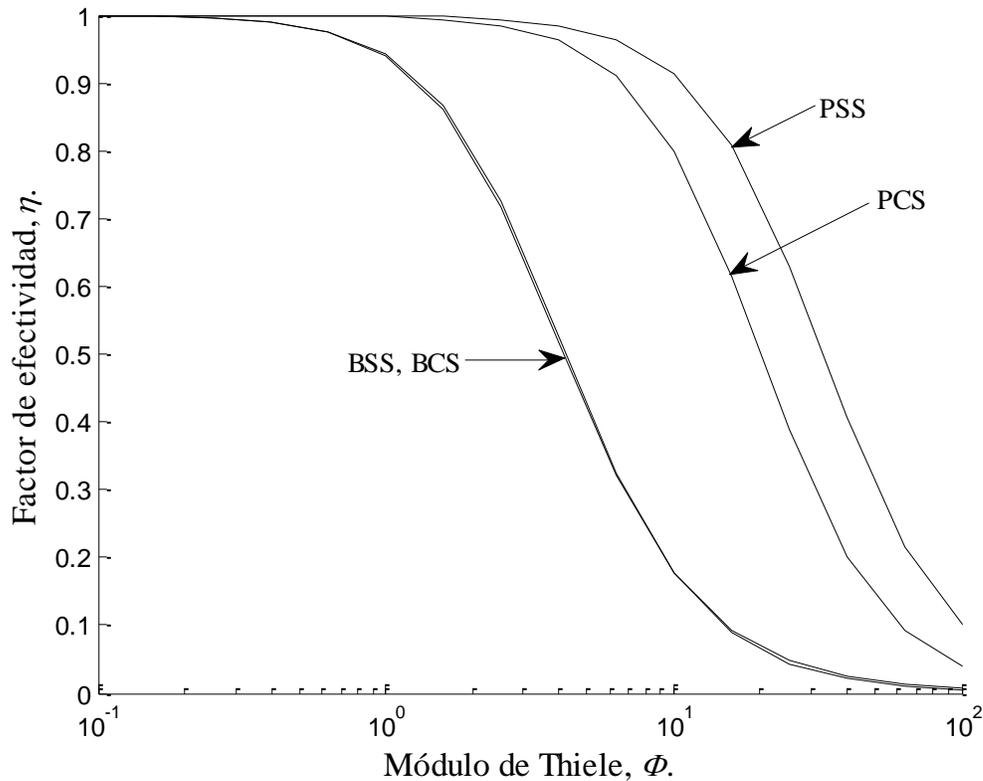


Figura A6.33. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 10^4$ ,  $Bi_{m,y} = 10^4$  y  $\psi = 0.25$ .

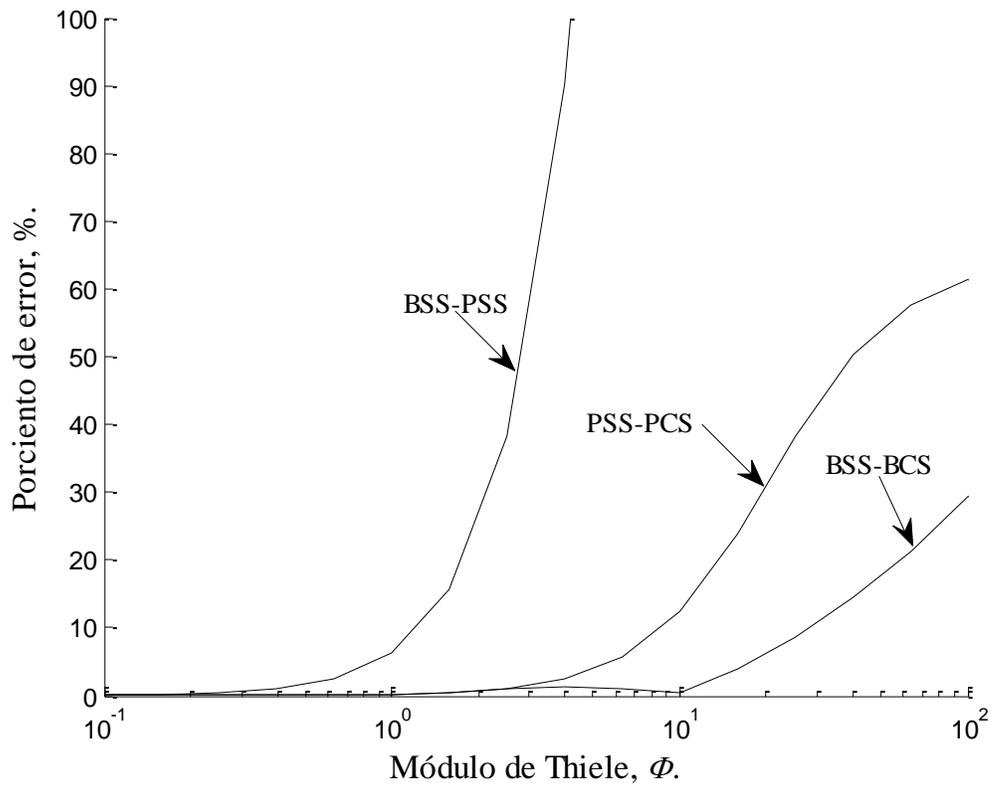


Figura A6.34. Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 10^4$ ,  $Bi_{m,y} = 10^4$  y  $\psi = 0.25$ .

En la Figura A6.35 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 50 % de la longitud de su base, con fronteras verticales prácticamente aisladas ( $Bi_{m,x} = 1 \times 10^{-5}$ ) y con una resistencia regular en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,y} = 5$ ). Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS y PSS se acercan a los del modelo PSS con errores menores al 11 % y 45 %, respectivamente, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 1 % para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$ .

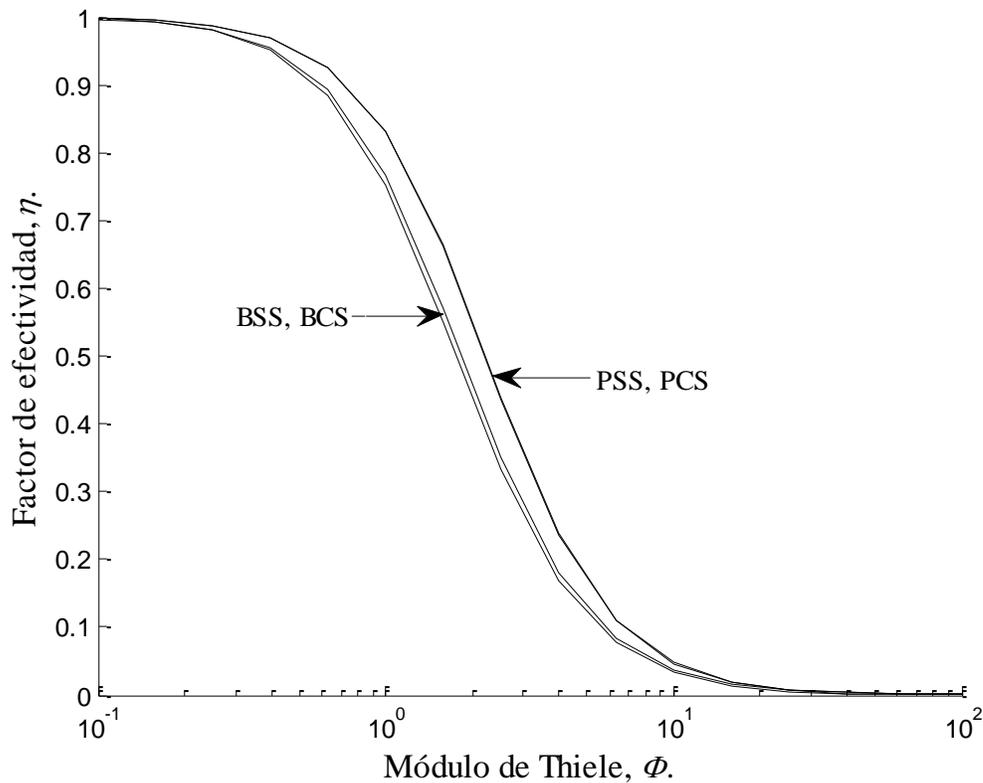


Figura A6.35. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 1 \times 10^{-5}$ ,  $Bi_{m,y} = 5$  y  $\psi = 0.5$ .

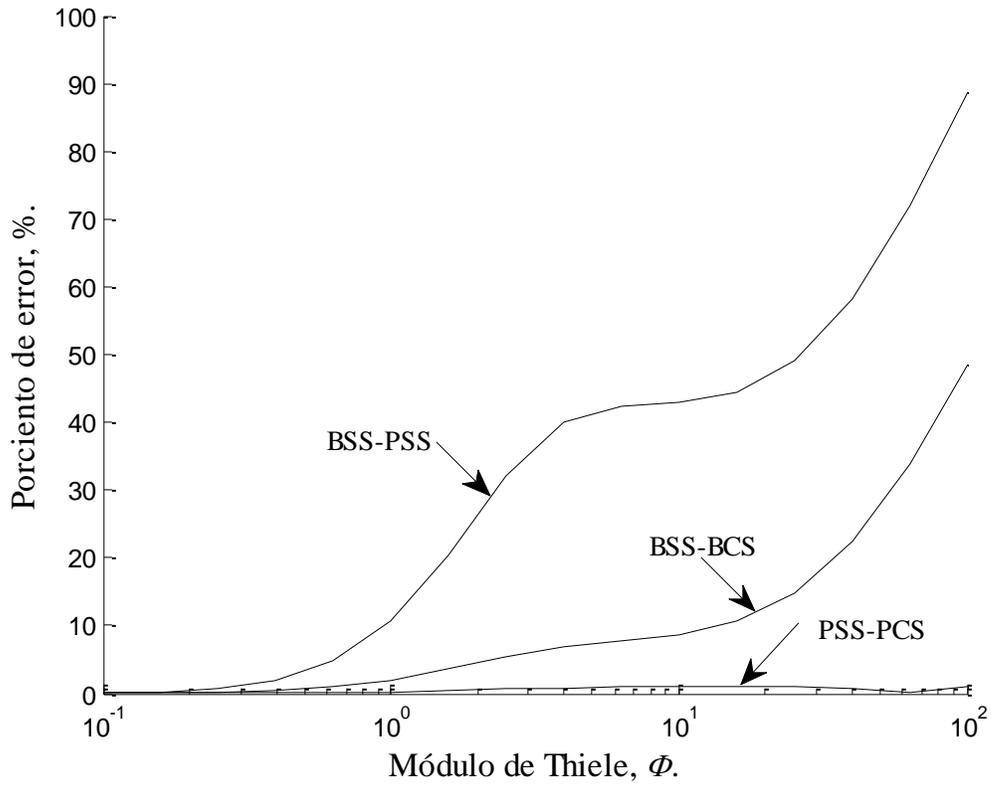


Figura A6.36 Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 1 \times 10^{-5}$ ,  $Bi_{m,Y} = 5$  y  $\psi = 0.5$ .

En la Figura A6.37 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 50 % de la longitud de su base, con fronteras verticales prácticamente aisladas ( $Bi_{m,x} = 10^{-5}$ ) y con una resistencia prácticamente nula en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,y} = 10^4$ ). Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 3 % y los del modelo PCS a los del modelo PSS con errores menores al 14 %, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 1$  los resultados del modelo PSS aproximan a los del modelo BSS con errores por debajo del 18 %, para  $\Phi > 1$  el error aumenta desproporcionadamente hasta dejar al modelo inservible.

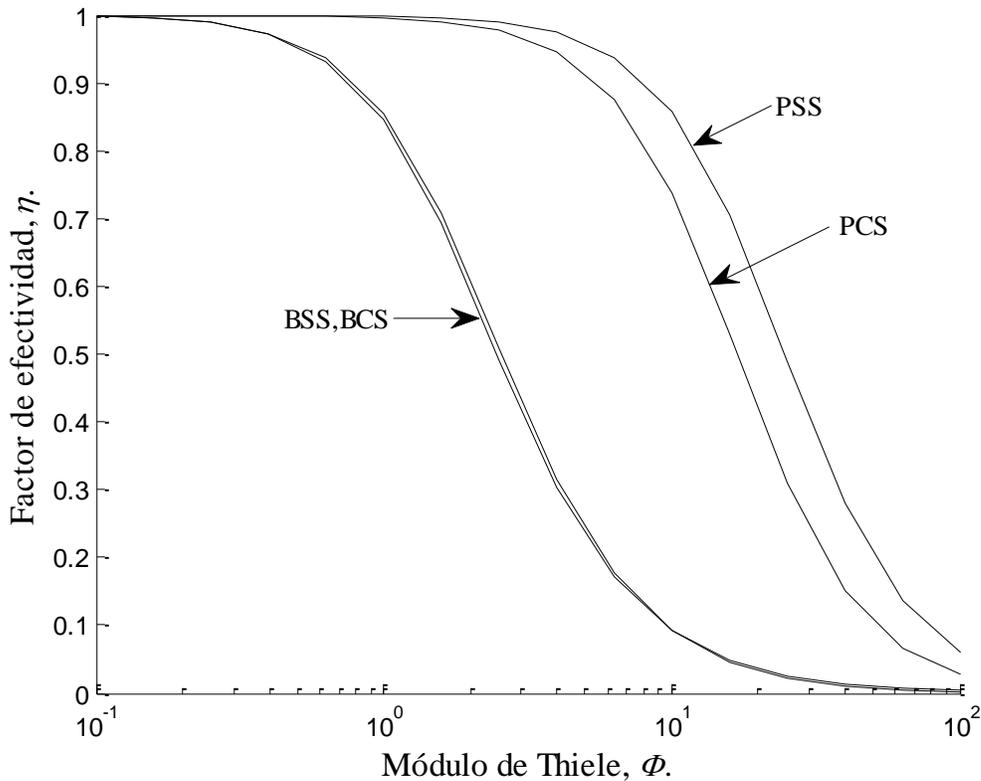


Figura A6.37. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 1 \times 10^{-5}$ ,  $Bi_{m,y} = 10^4$  y  $\psi = 0.5$ .

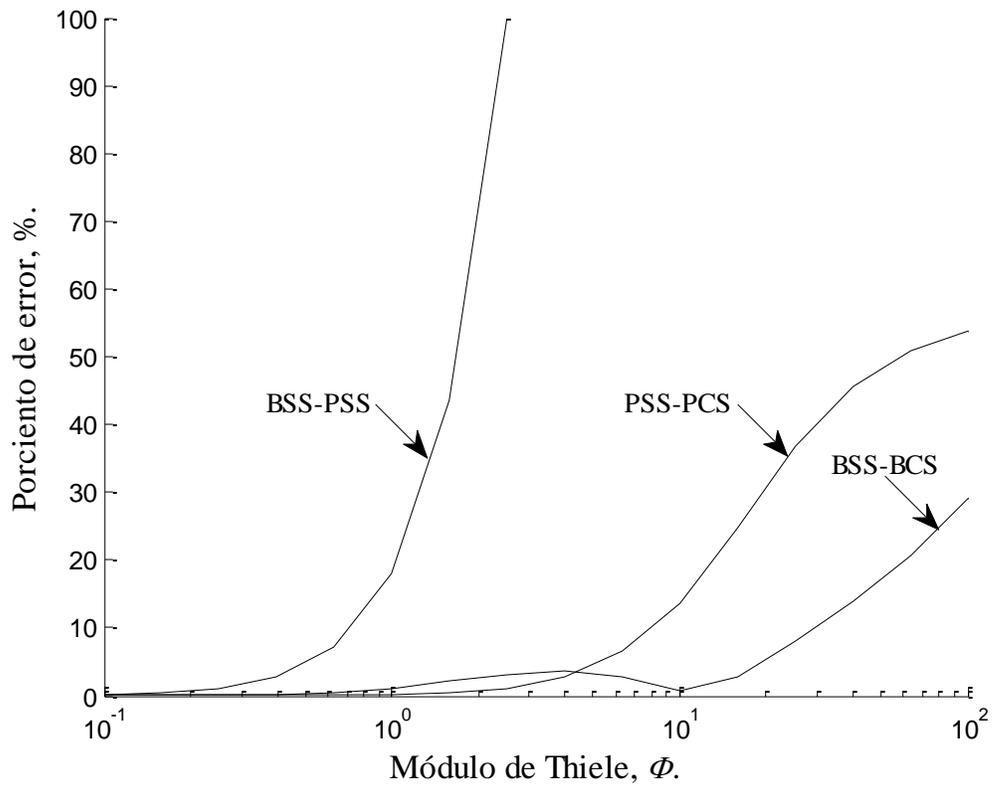


Figura A6.38. Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 1 \times 10^{-5}$ ,  $Bi_{m,Y} = 10^4$  y  $\psi = 0.5$ .

En la Figura A6.39 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 50 % de la longitud de su base, con resistencia regular en las fronteras verticales ( $Bi_{m,X} = 5$ ) y con fronteras horizontales prácticamente aisladas ( $Bi_{m,Y} = 10^{-5}$ ).

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos PCS y PSS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 11 %, para  $\phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 1.3 % para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$ .

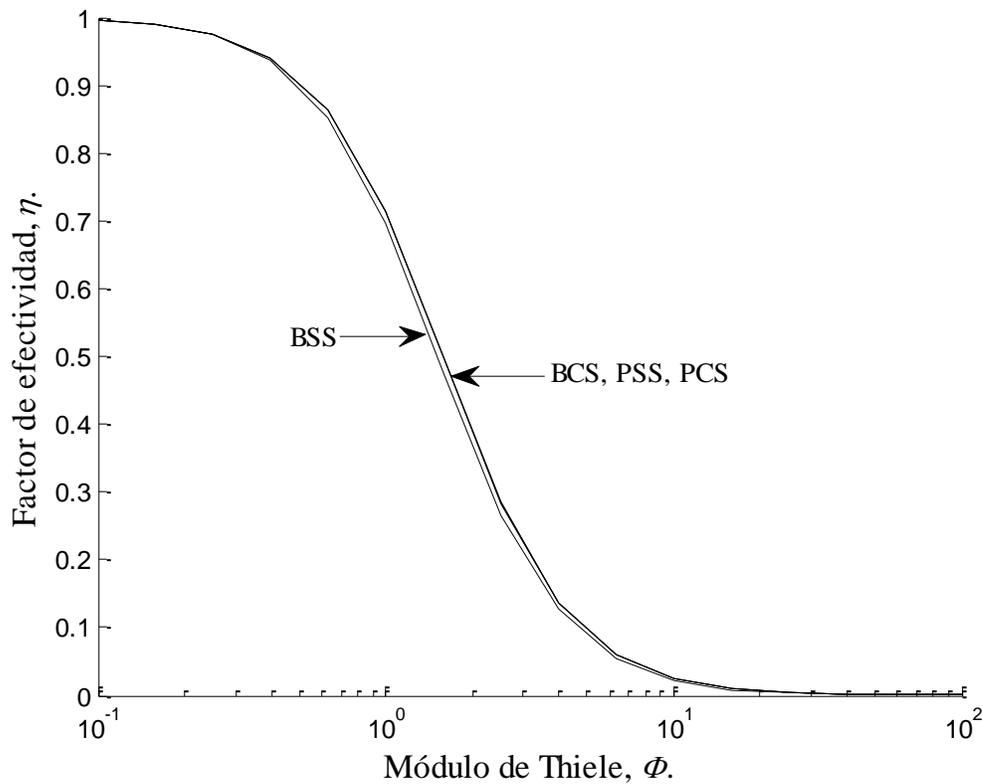


Figura A6.39. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 5$ ,  $Bi_{m,Y} = 10^{-5}$  y  $\psi = 0.5$ .

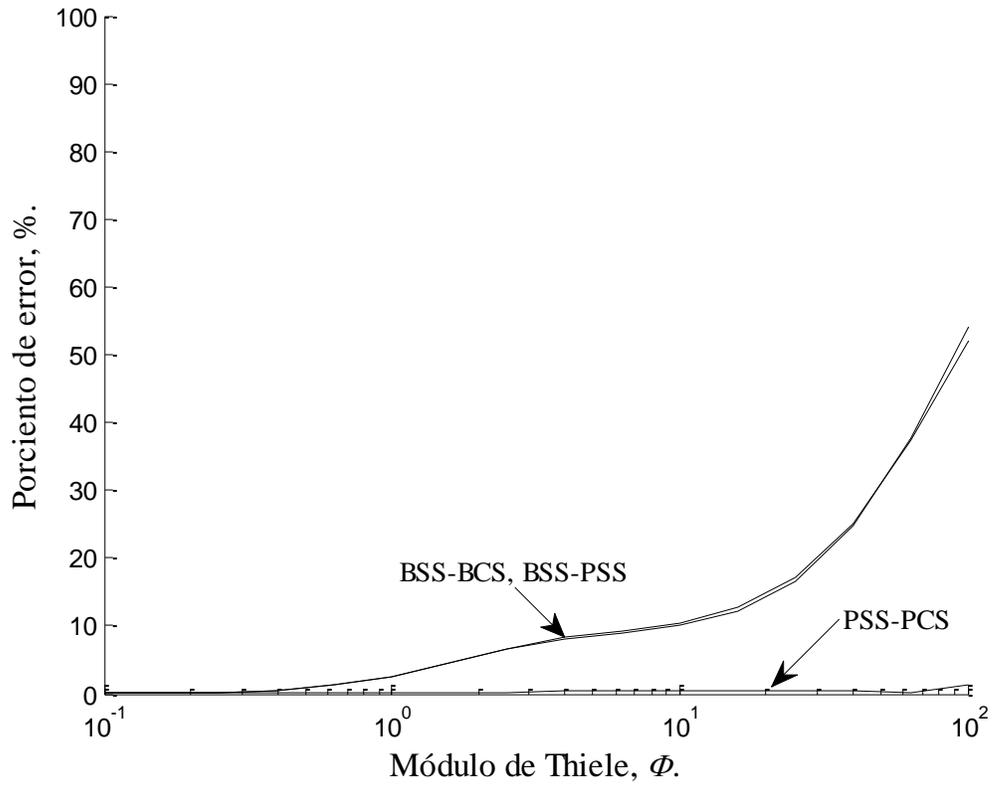


Figura A6.40. Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 5$ ,  $Bi_{m,Y} = 10^{-5}$  y  $\psi = 0.5$ .

En la Figura A6.41 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 50 % de la longitud de su base, con resistencias regulares en las fronteras verticales ( $Bi_{m,x} = 5$ ) y con una resistencia regular en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,y} = 5$ ). Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS y PSS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 9 % y 27 %, respectivamente, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 1.6 % para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$ .

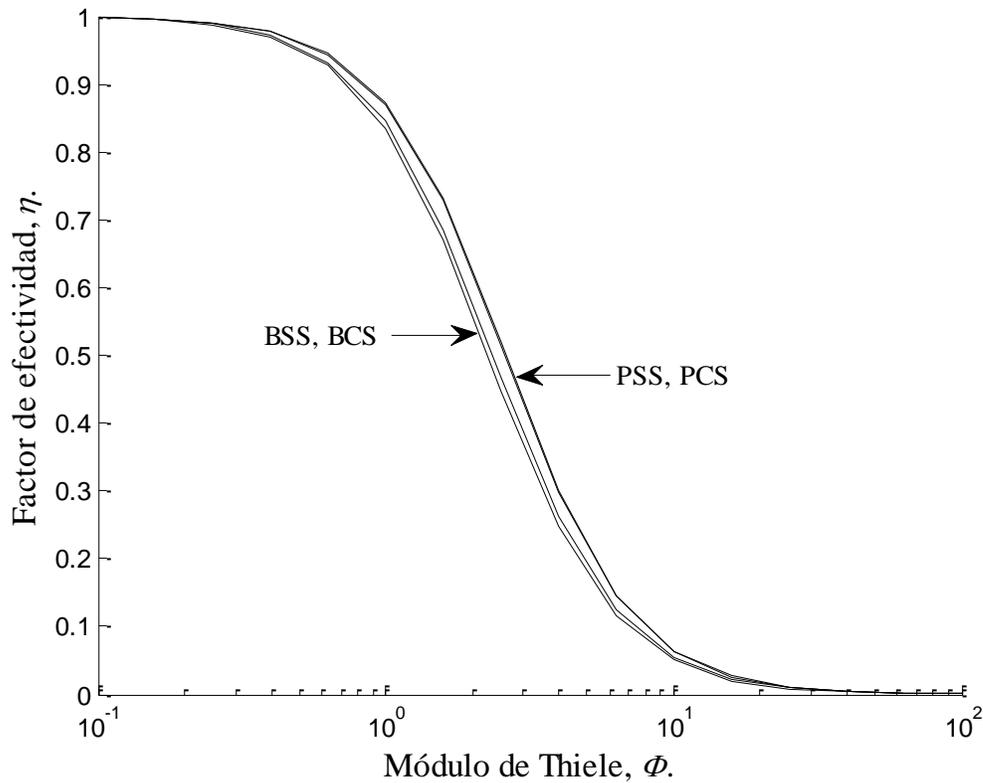


Figura A6.41. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 5$ ,  $Bi_{m,y} = 5$  y  $\psi = 0.5$ .

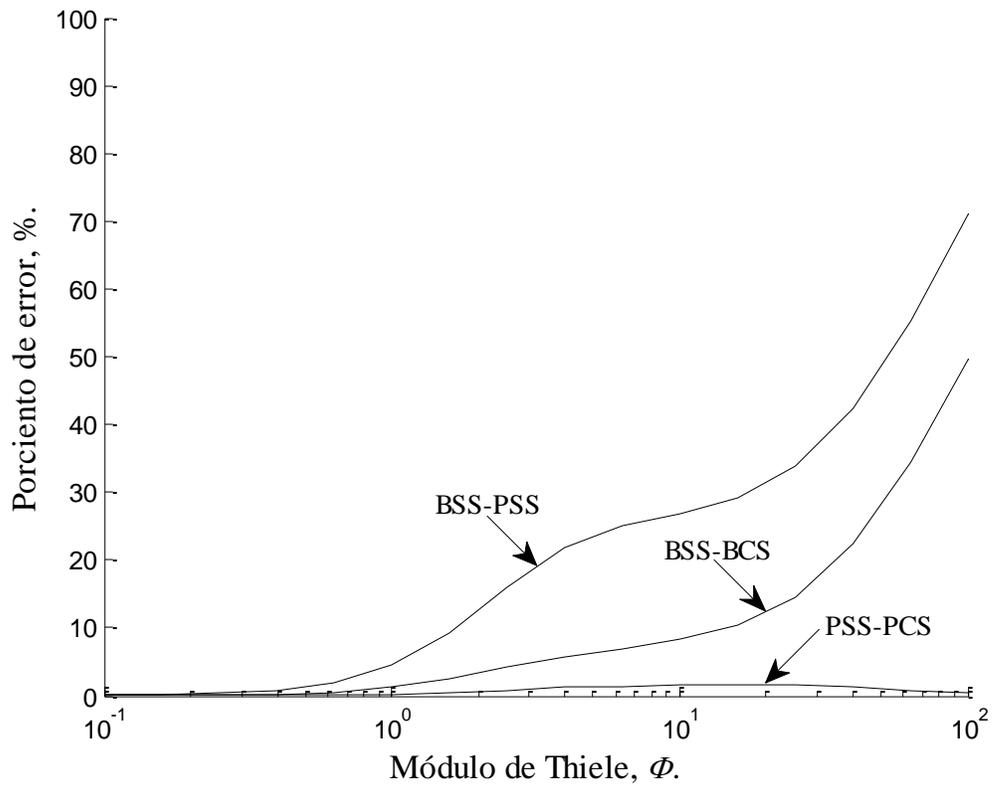


Figura A6.42. Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 5$ ,  $Bi_{m,Y} = 5$  y  $\psi = 0.5$ .

En la Figura A6.43 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 50 % de la longitud de su base, con resistencia regular en las fronteras verticales ( $Bi_{m,x} = 5$ ) y con una resistencia prácticamente nula en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,y} = 10^4$ ). Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 1.5 % y los del modelo PCS a los del modelo PSS con errores menores al 14 %, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 1$  los resultados del modelo PSS aproximan a los del modelo BSS con errores por debajo del 13.5 %, para  $\Phi > 1$  el error aumenta desproporcionadamente hasta dejar al modelo inservible.

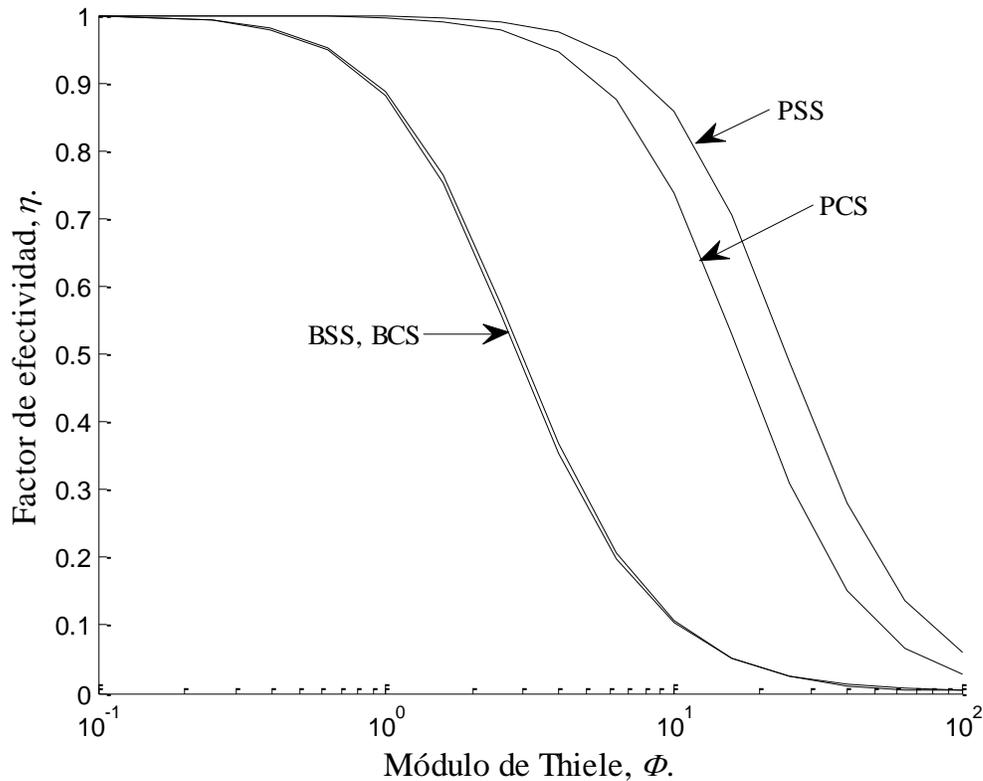


Figura A6.43. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 5$ ,  $Bi_{m,y} = 10^4$  y  $\psi = 0.5$ .

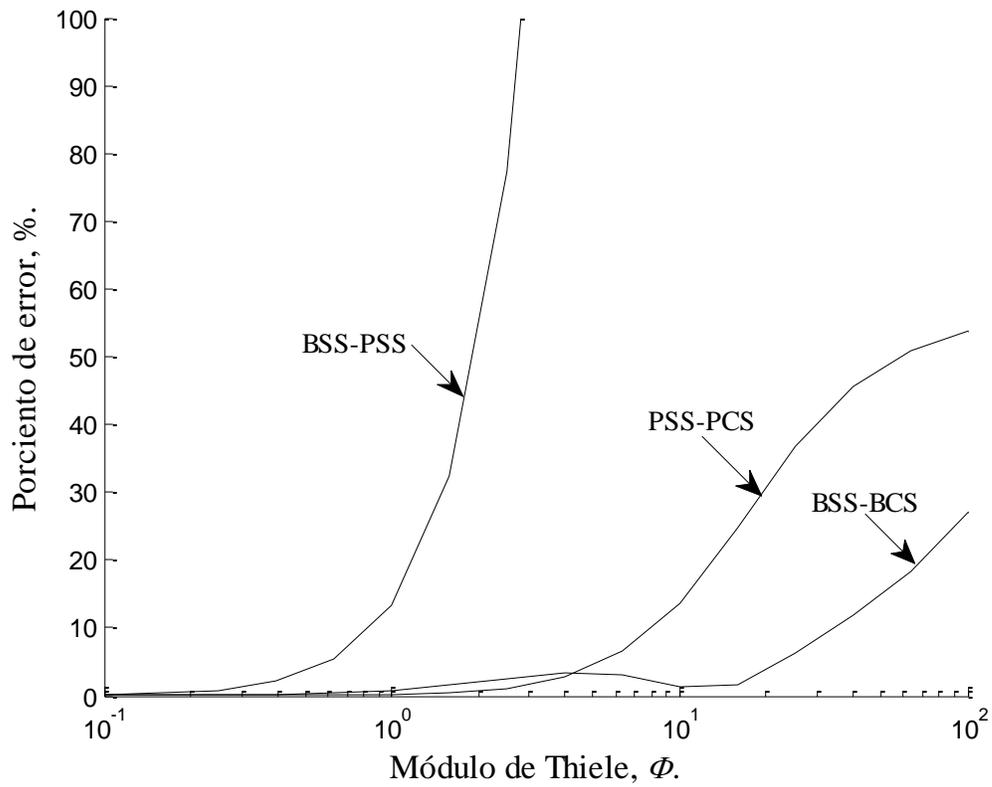


Figura A6.44 Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 5$ ,  $Bi_{m,y} = 10^4$  y  $\psi = 0.5$ .

En la Figura A6.45 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 50 % de la longitud de su base, con resistencia prácticamente nula en las fronteras verticales ( $Bi_{m,x} = 10^4$ ) y con fronteras horizontales prácticamente aisladas ( $Bi_{m,y} = 10^{-5}$ ). Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS y PSS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 10 %, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 2% para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$ .

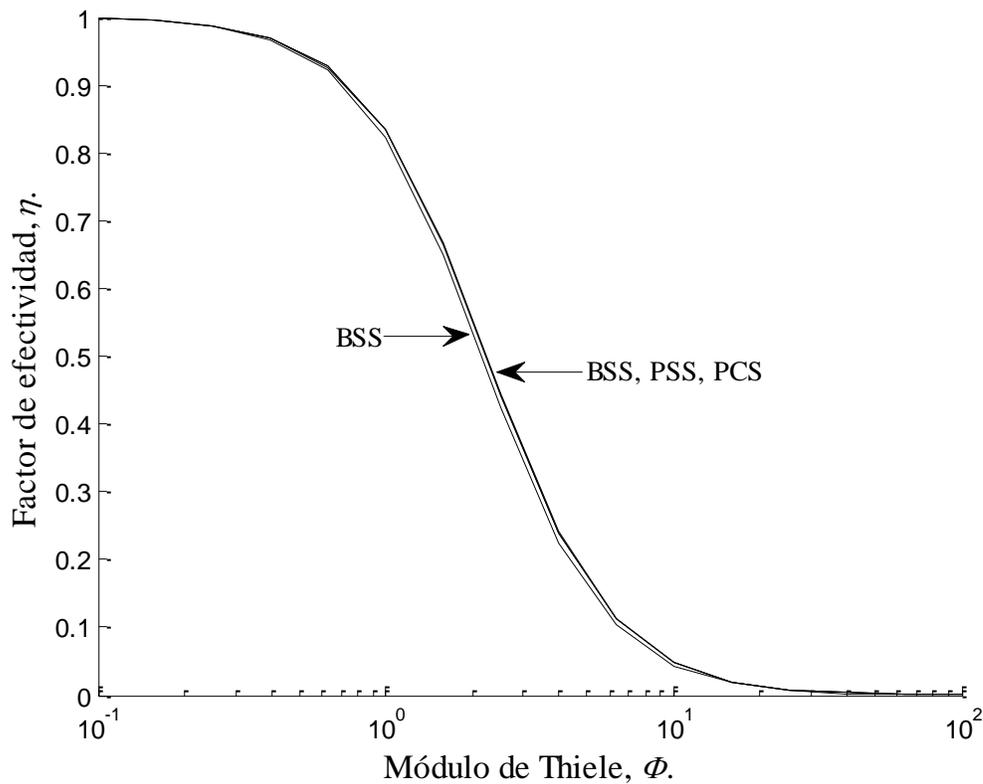


Figura A6.45. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 10^4$ ,  $Bi_{m,y} = 10^{-5}$  y  $\psi = 0.5$ .

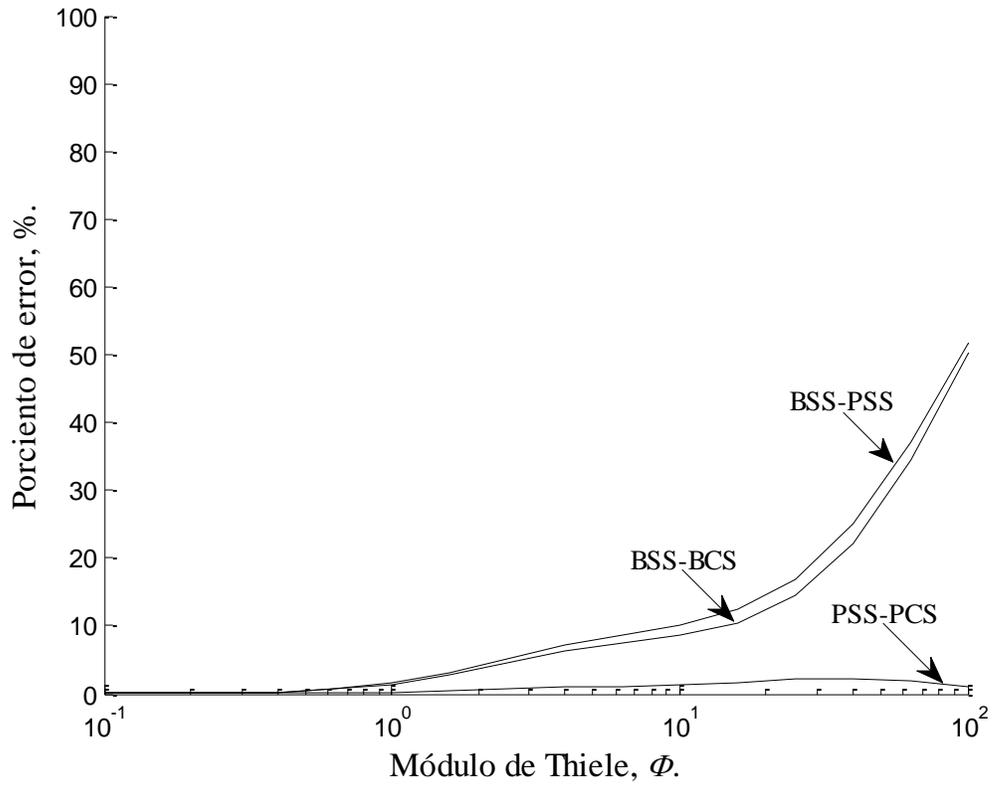


Figura A6.46. Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 10^4$ ,  $Bi_{m,y} = 10^{-5}$  y  $\psi = 0.5$ .

En la Figura A6.47 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 50 % de la longitud de su base, con resistencias prácticamente nulas en las fronteras verticales ( $Bi_{m,x} = 10^4$ ) y con una resistencia regular en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,y} = 5$ ).

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS y PSS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 7.5 % y 20 %, respectivamente, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 2.5 % para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$ .

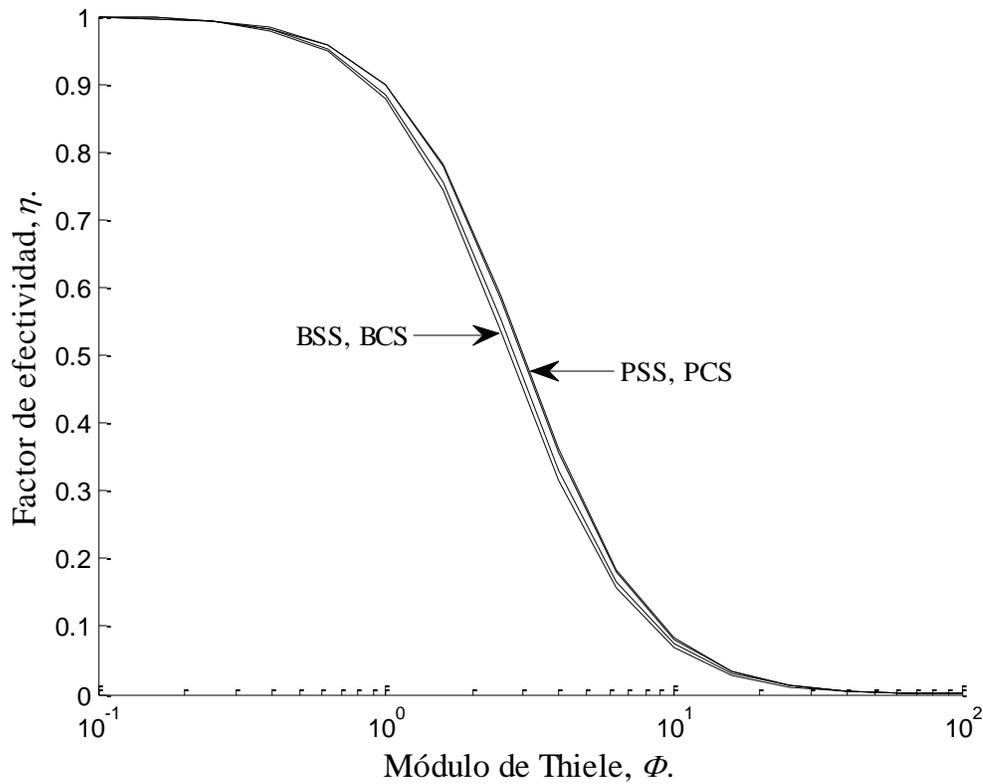


Figura A6.47. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 10^4$ ,  $Bi_{m,y} = 5$  y  $\psi = 0.5$ .

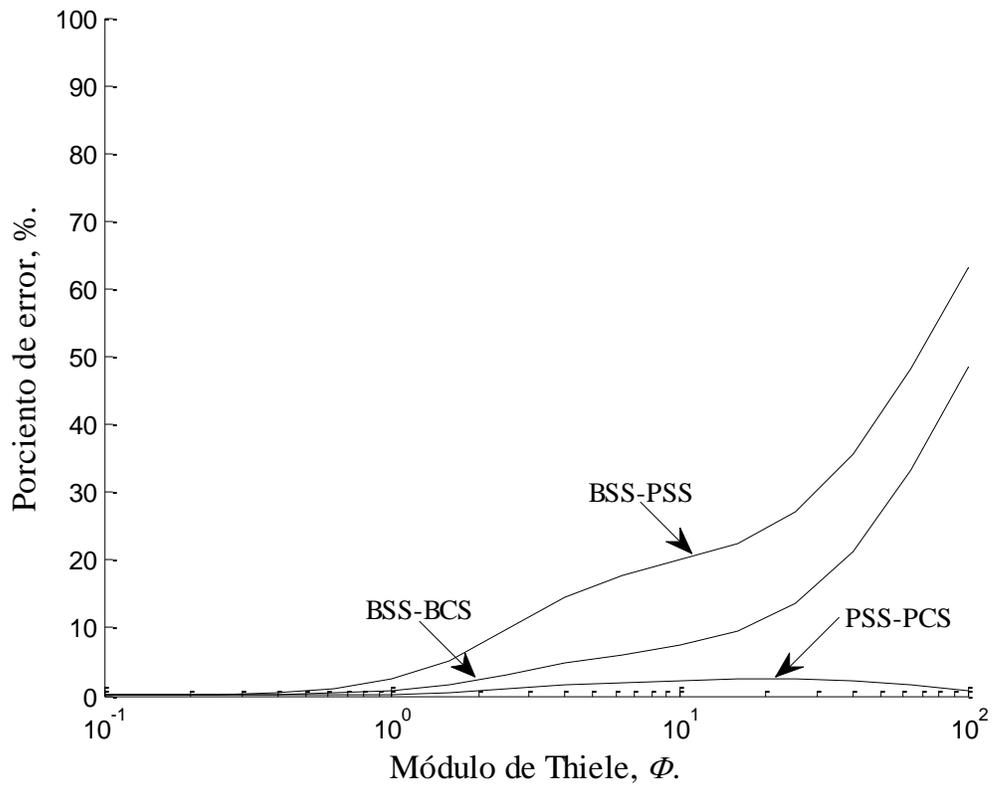


Figura A6.48. Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 10^4$ ,  $Bi_{m,y} = 5$  y  $\psi = 0.5$ .

En la Figura A6.49 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura del 50 % de la longitud de su base, con resistencias prácticamente nulas en las fronteras verticales ( $Bi_{m,x} = 10^4$ ) y con una resistencia prácticamente nula en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,y} = 10^4$ ). Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 3 % y los del modelo PCS a los del modelo PSS con errores menores al 14 %, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 1$  los resultados del modelo PSS aproximan a los del modelo BSS con errores por debajo del 10.2 %, para  $\Phi > 1$  el error aumenta desproporcionadamente hasta dejar al modelo inservible.

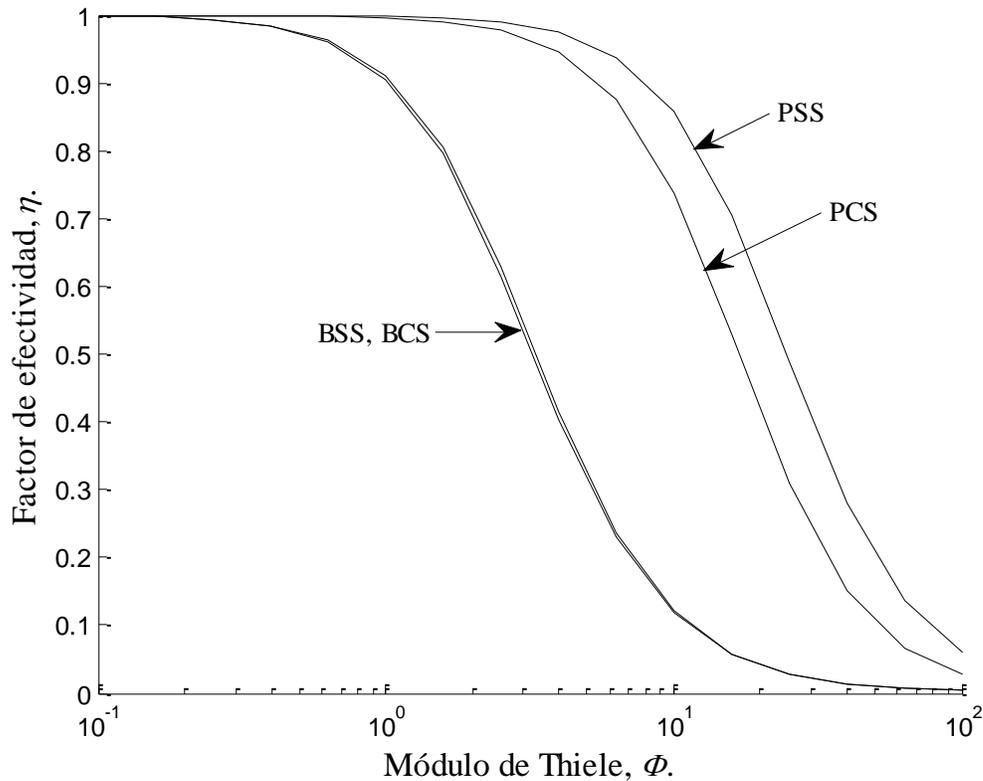


Figura A6.49. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 10^4$ ,  $Bi_{m,y} = 10^4$  y  $\psi = 0.5$ .

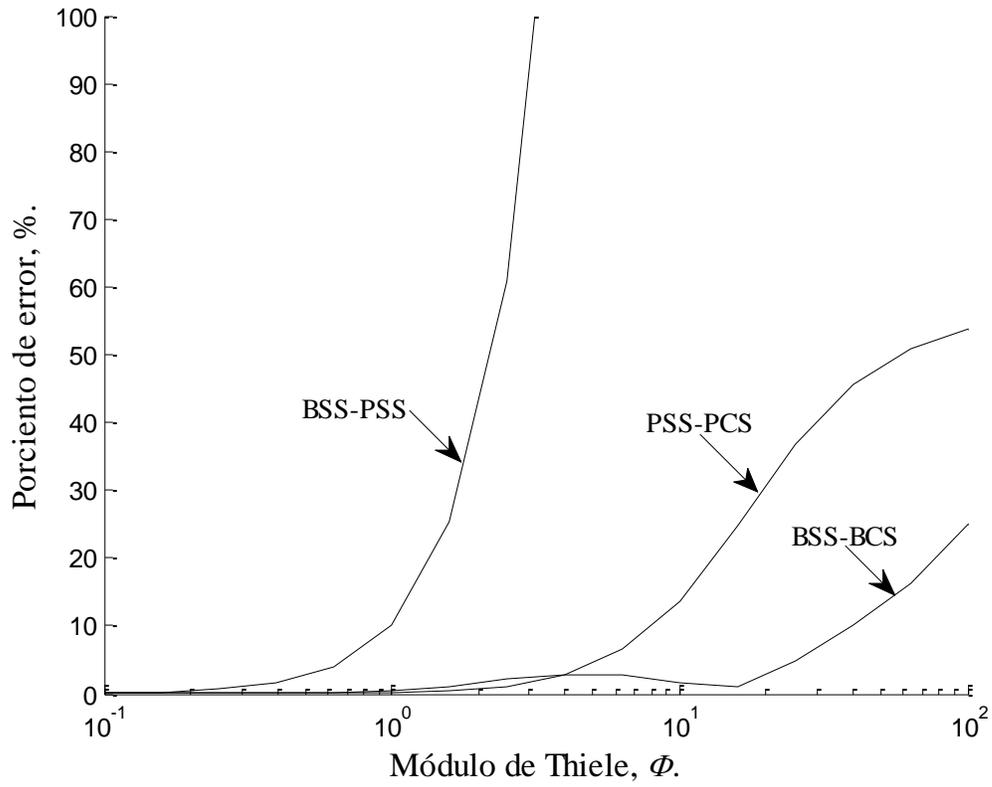


Figura A6.50 Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 10^4$ ,  $Bi_{m,y} = 10^4$  y  $\psi = 0.5$ .

En la Figura A6.51 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura igual a la longitud de su base, con fronteras verticales prácticamente aisladas ( $Bi_{m,X} = 1 \times 10^{-5}$ ) y con una resistencia regular en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,Y} = 5$ ).

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS y PSS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 9 % y 70 %, respectivamente, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 2 % para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$ .

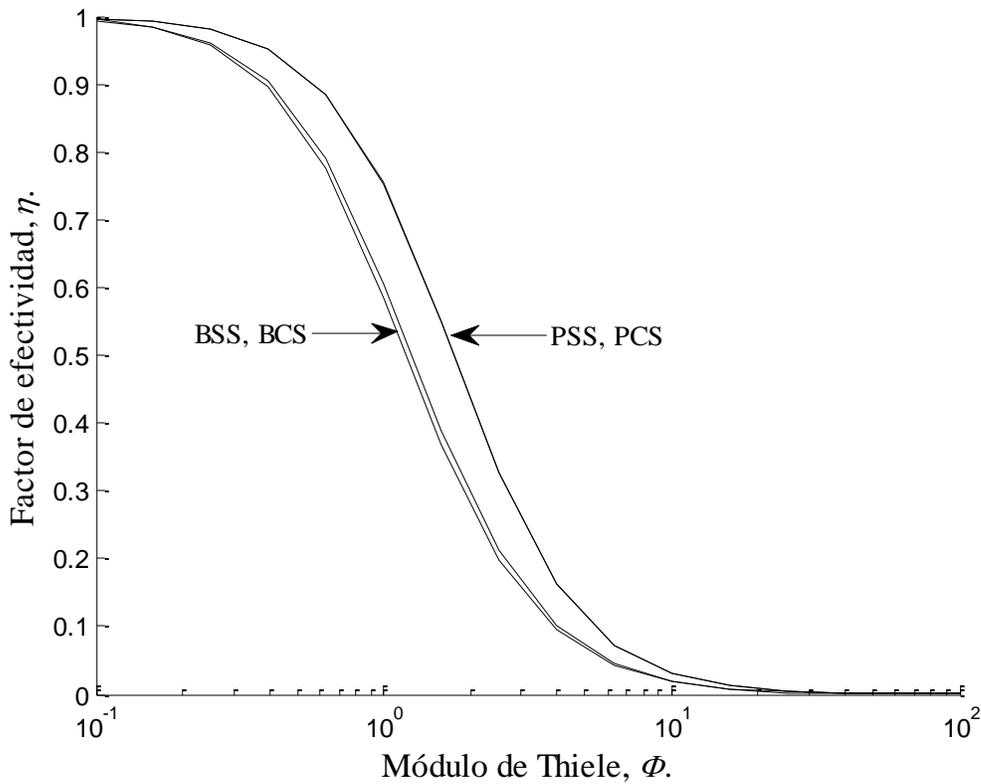


Figura A6.51. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 1 \times 10^{-5}$ ,  $Bi_{m,Y} = 5$  y  $\psi = 1$ .

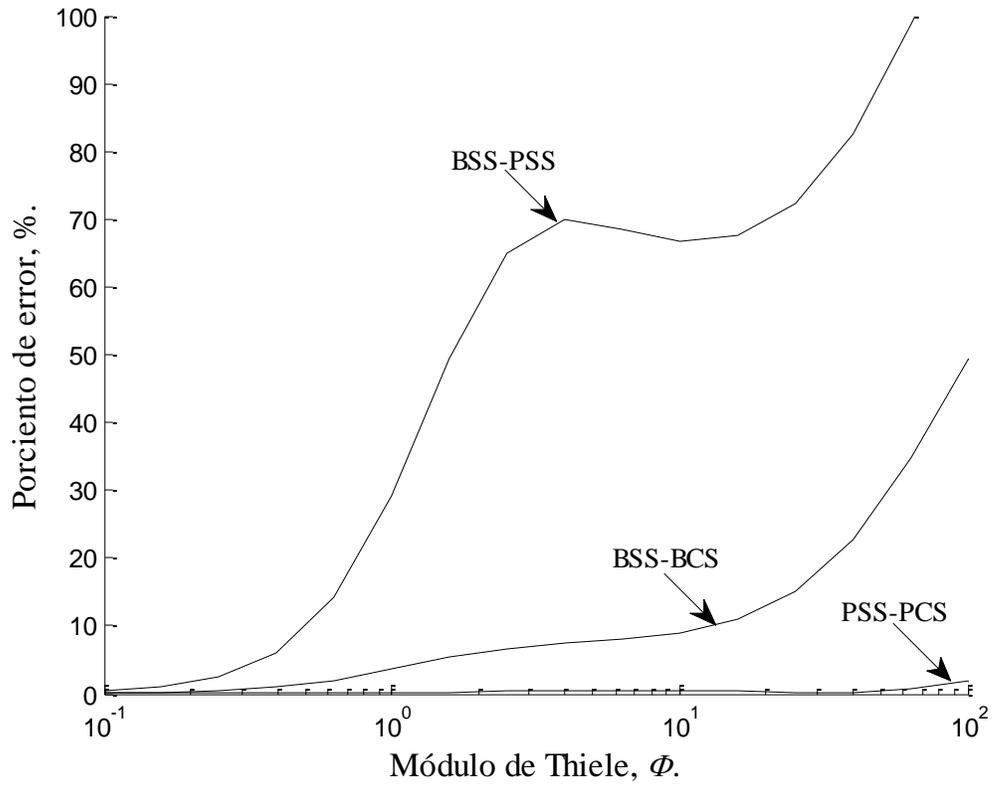


Figura A6.52. Comparación del factor de efectividad de los modelos con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 1 \times 10^{-5}$ ,  $Bi_{m,y} = 5$  y  $\psi = 1$ .

En la Figura A6.53 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura igual a la longitud de su base, con fronteras verticales prácticamente aisladas ( $Bi_{m,x} = 10^{-5}$ ) y con una resistencia prácticamente nula en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,y} = 10^4$ ).

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 4.7 % y los del modelo PCS a los del modelo PSS con errores menores al 14.5 %, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 1$  los resultados del modelo PSS aproximan a los del modelo BSS con errores por debajo del 47 %, para  $\Phi > 1$  el error aumenta desproporcionadamente hasta dejar al modelo inservible.

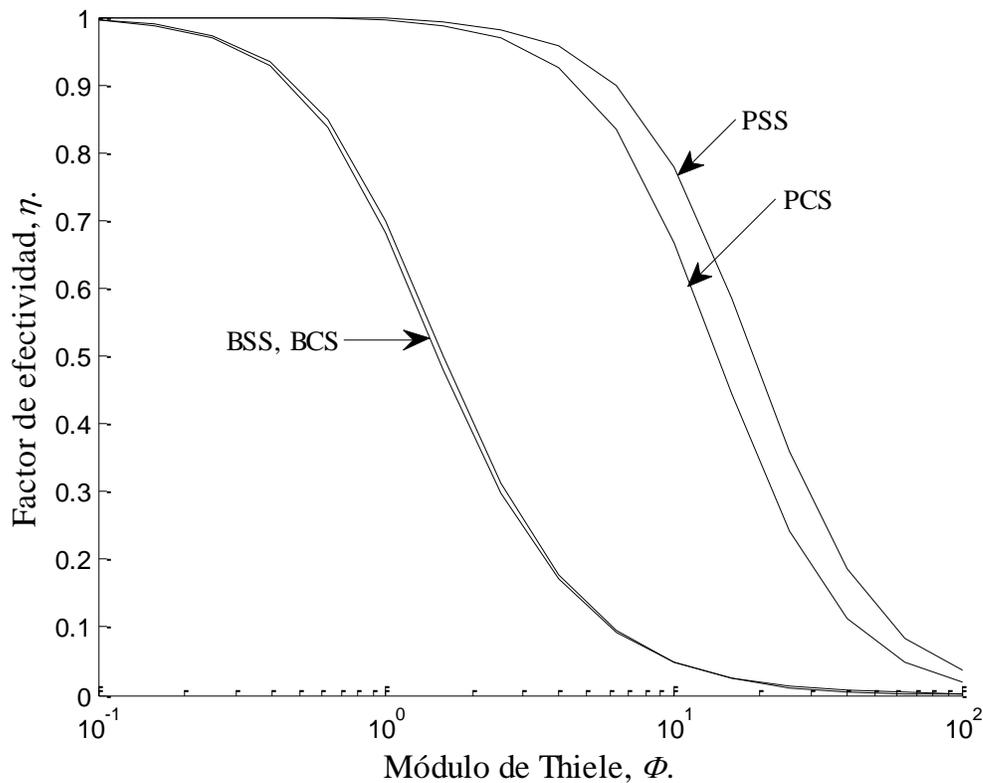


Figura A6.53. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 10^{-5}$ ,  $Bi_{m,y} = 10^4$  y  $\psi = 1$ .

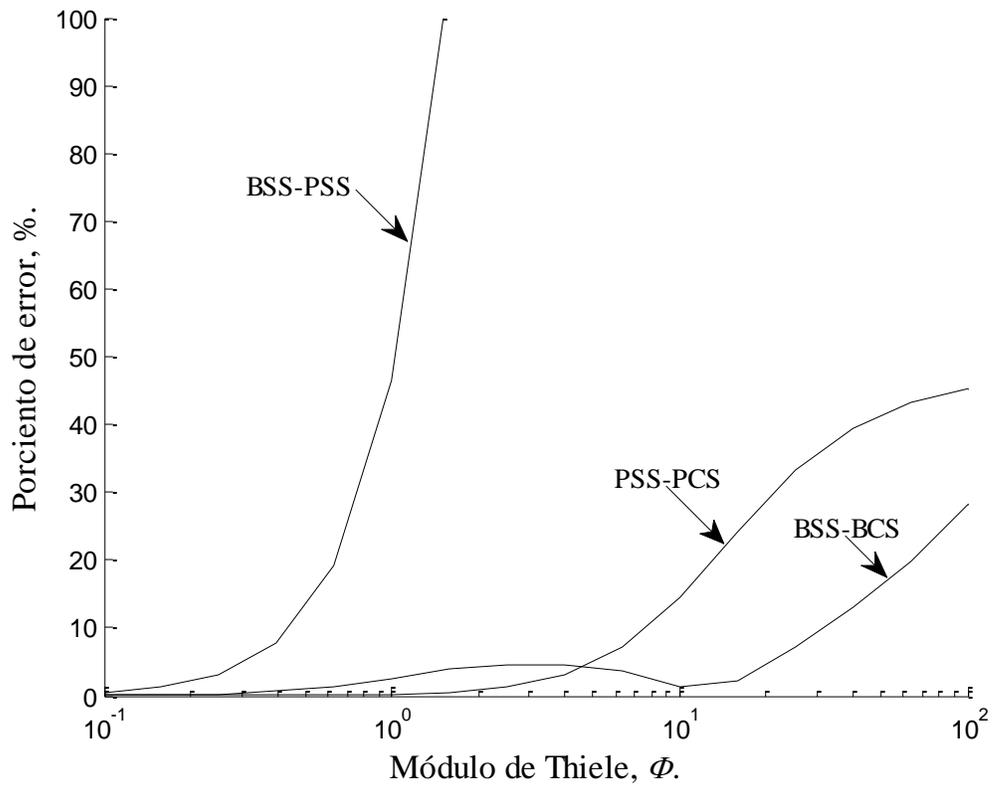


Figura A6.54. Comparación del factor de efectividad de los modelos con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 10^{-5}$ ,  $Bi_{m,Y} = 10^4$  y  $\psi = 1$ .

En la Figura A6.55 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura igual a la longitud de su base, con resistencia regular en las fronteras verticales ( $Bi_{m,x} = 5$ ) y con fronteras horizontales prácticamente aisladas ( $Bi_{m,y} = 10^{-5}$ ).

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS y PSS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 10 %, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 1.5 % para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$ .

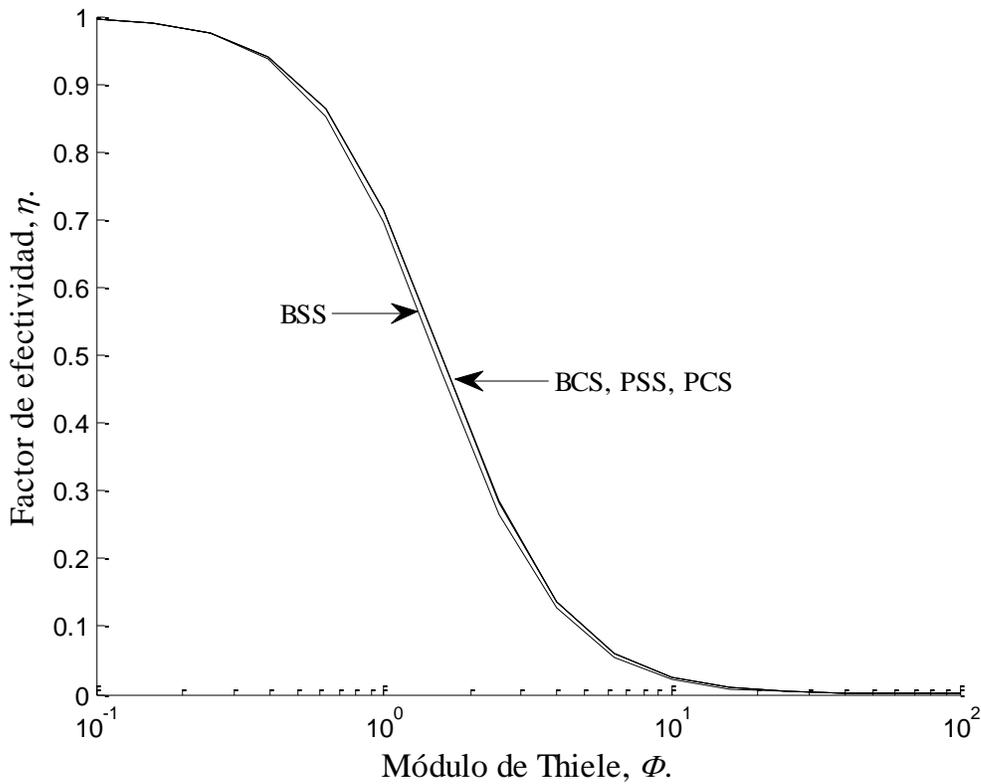


Figura A6.55. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 5$ ,  $Bi_{m,y} = 10^{-5}$  y  $\psi = 1$ .

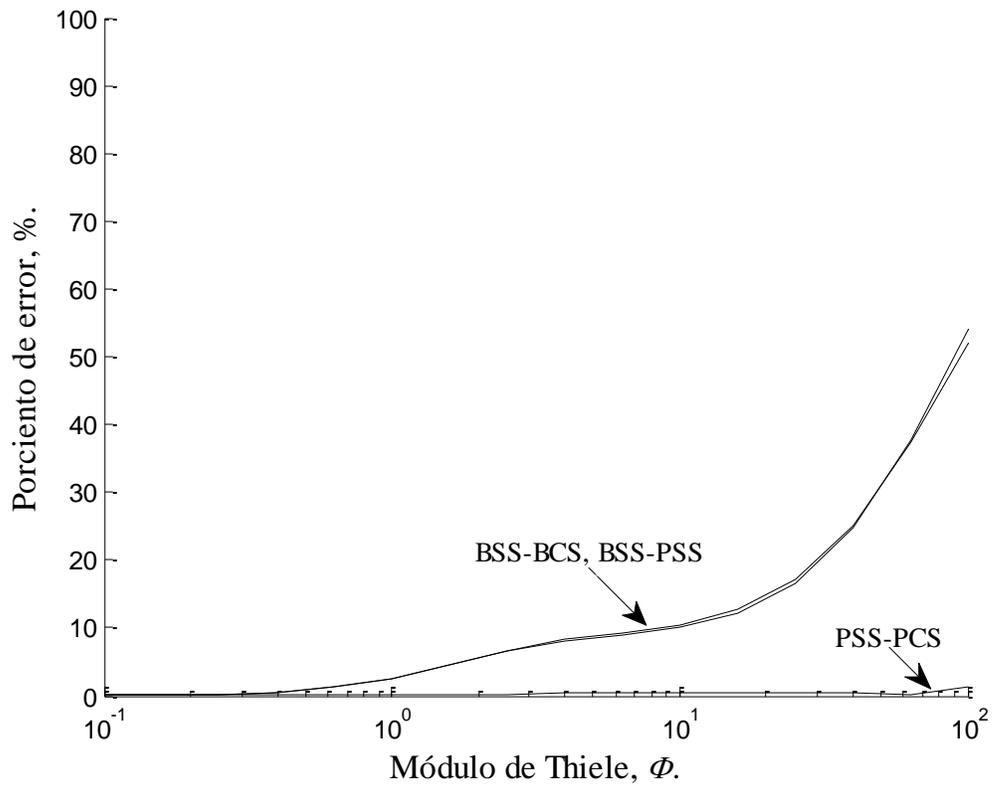


Figura A6.56. Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 5$ ,  $Bi_{m,Y} = 10^{-5}$  y  $\psi = 1$ .

En la Figura A6.57 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura igual a la longitud de su base, con resistencias regulares en las fronteras verticales ( $Bi_{m,x} = 5$ ) y con una resistencia regular en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,y} = 5$ ).

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS y PSS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 9 % y 33 %, respectivamente, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 1.2 % para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$ .

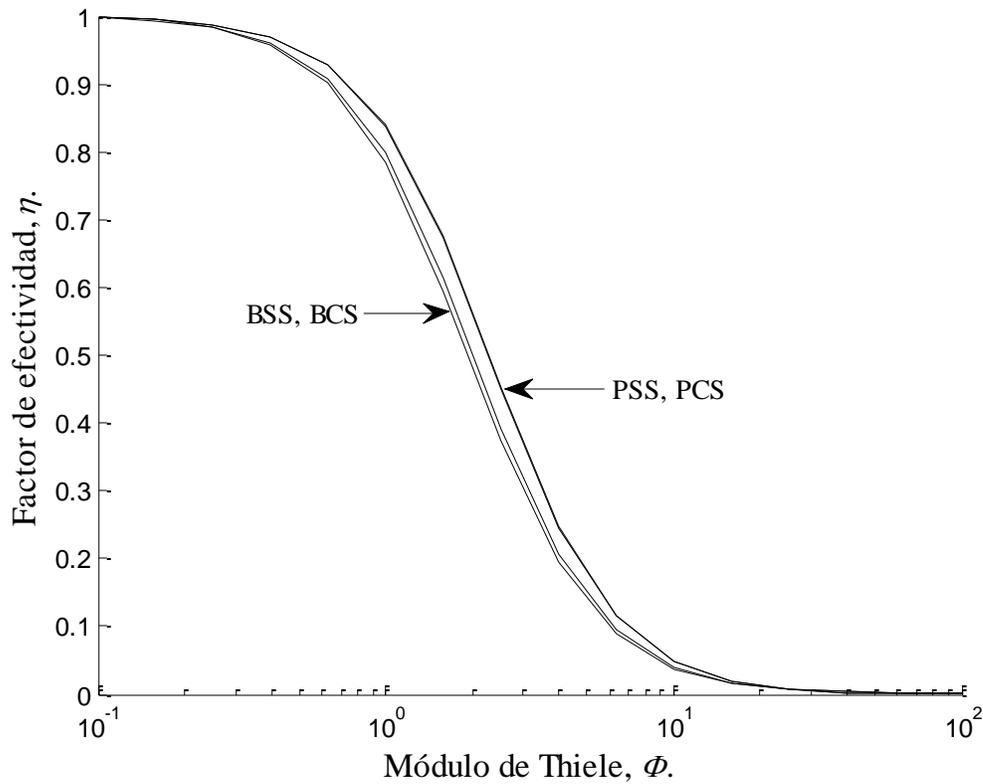


Figura A6.57. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 5$ ,  $Bi_{m,y} = 5$  y  $\psi = 1$ .

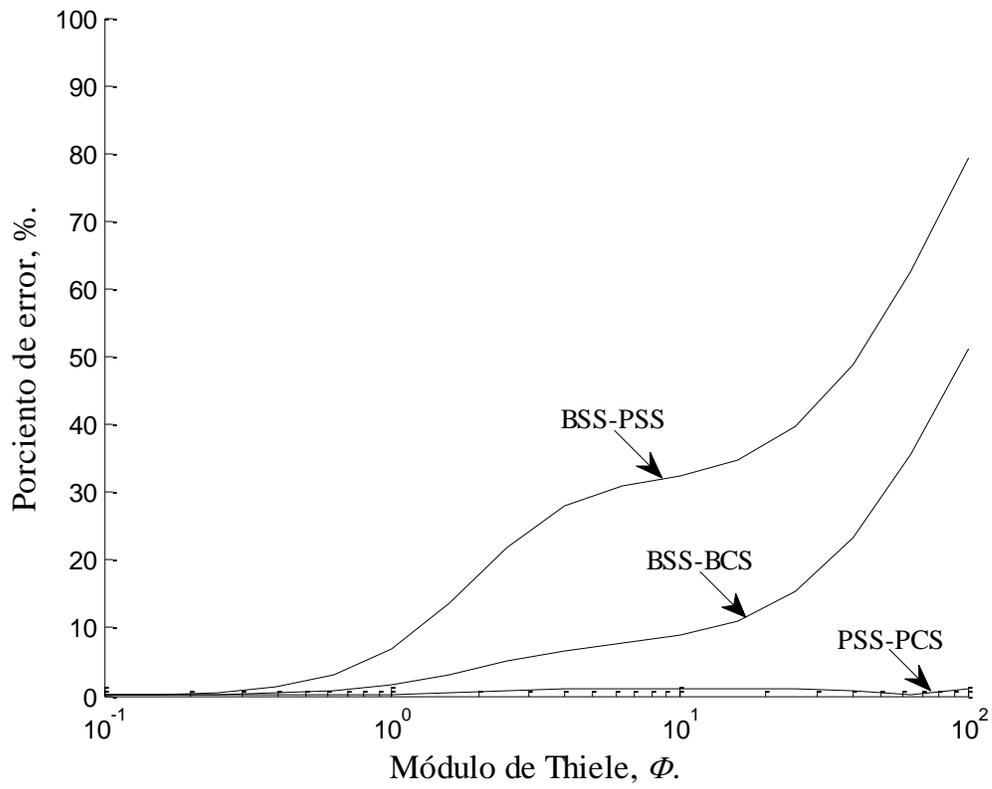


Figura A6.58. Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 5$ ,  $Bi_{m,Y} = 5$  y  $\psi = 1$ .

En la Figura A6.59 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura igual a la longitud de su base, con resistencia regular en las fronteras verticales ( $Bi_{m,x} = 5$ ) y con una resistencia prácticamente nula en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,y} = 10^4$ ).

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 5 % y los del modelo PCS a los del modelo PSS con errores menores al 14.5 %, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 1$  los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo BSS con errores por debajo del 22 %, para  $\Phi > 1$  el error aumenta desproporcionadamente hasta dejar al modelo inservible.

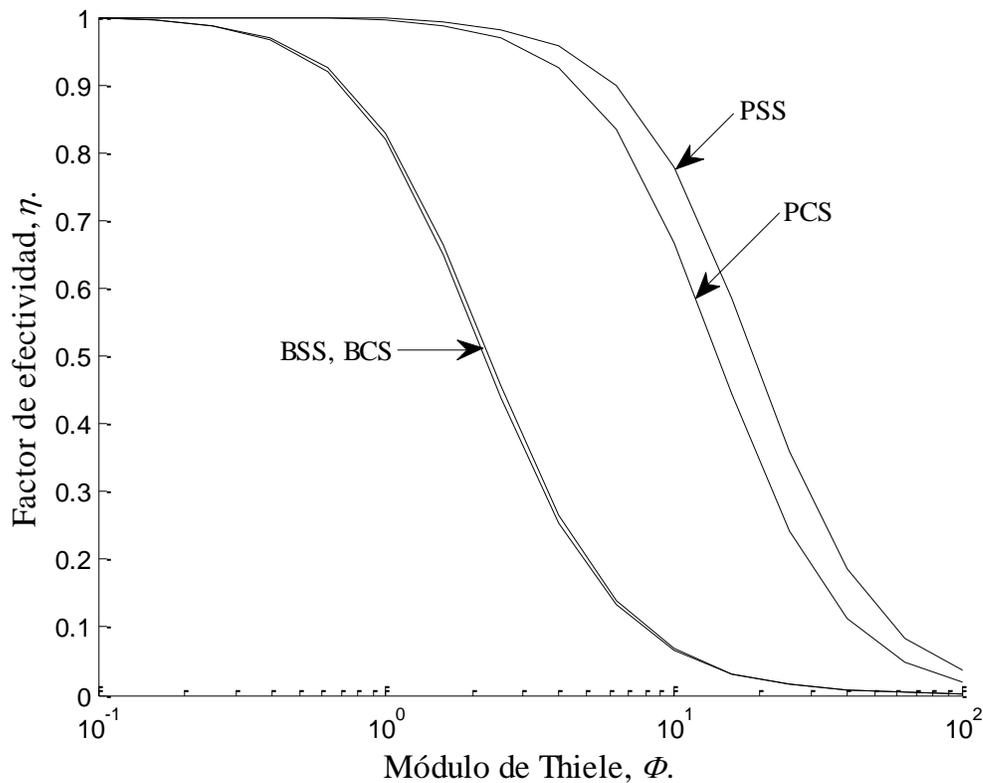


Figura A6.59. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 5$ ,  $Bi_{m,y} = 10^4$  y  $\psi = 1$ .

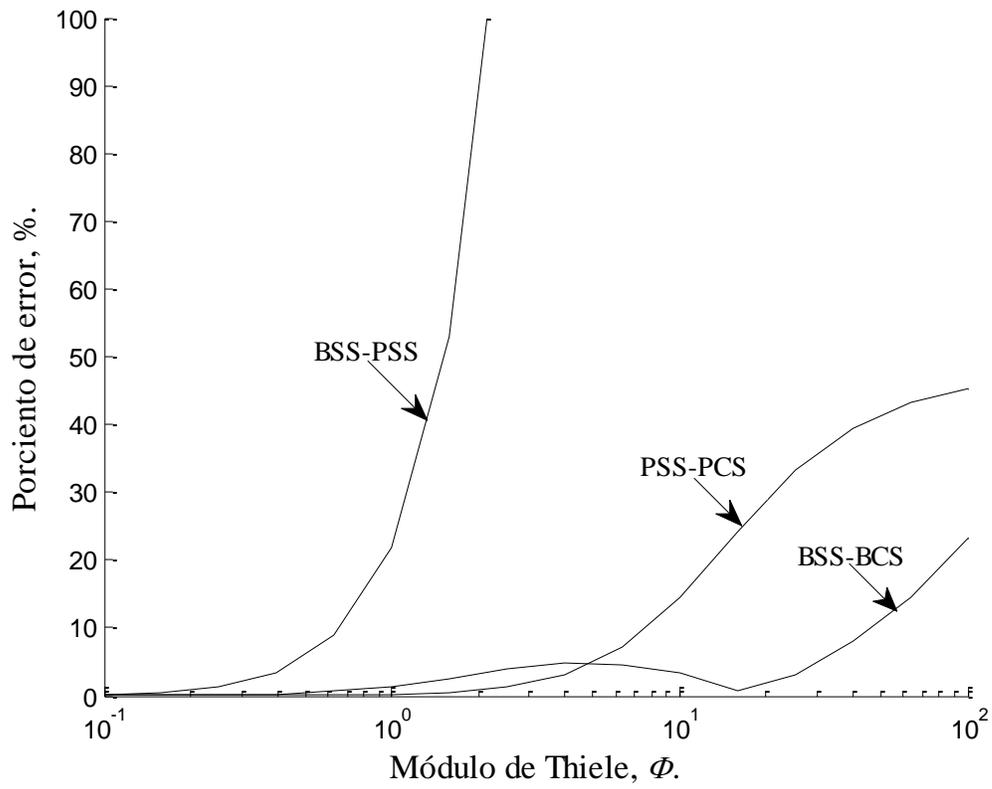


Figura A6.60. Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 5$ ,  $Bi_{m,Y} = 10^4$  y  $\psi = 1$ .

En la Figura A6.61 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura igual a la longitud de su base, con resistencia prácticamente nula en las fronteras verticales ( $Bi_{m,X} = 10^4$ ) y con fronteras horizontales prácticamente aisladas ( $Bi_{m,Y} = 10^{-5}$ ).

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS y PSS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 10 %, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 2.2 % para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$ .

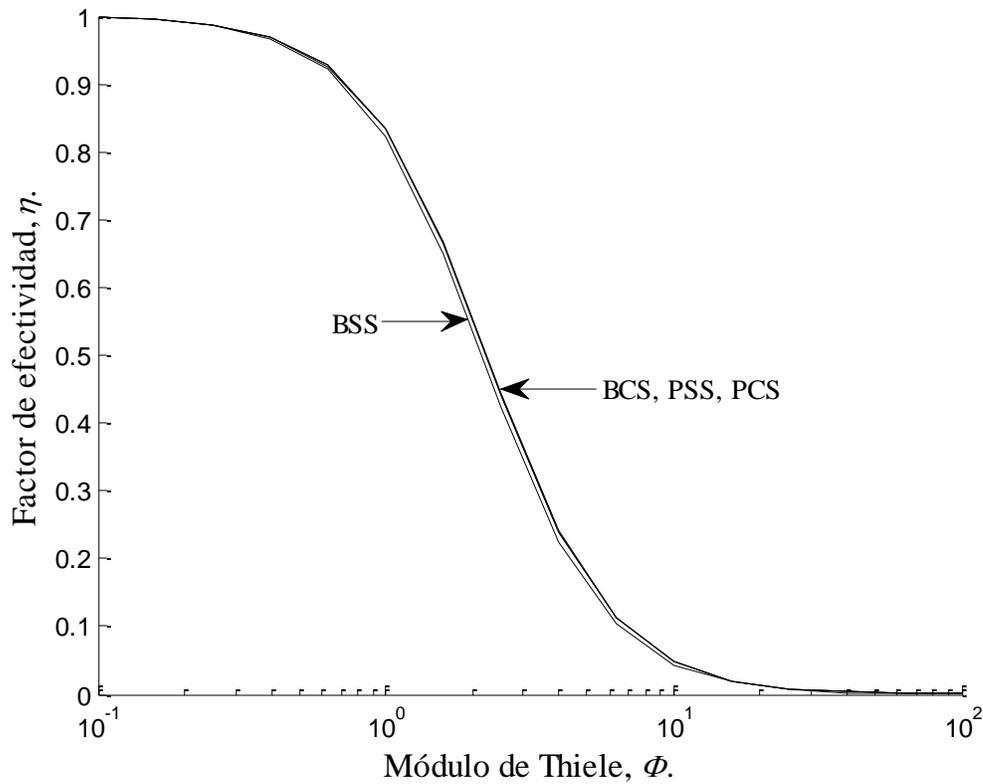


Figura A6.61. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 10^4$ ,  $Bi_{m,Y} = 10^{-5}$  y  $\psi = 1$ .

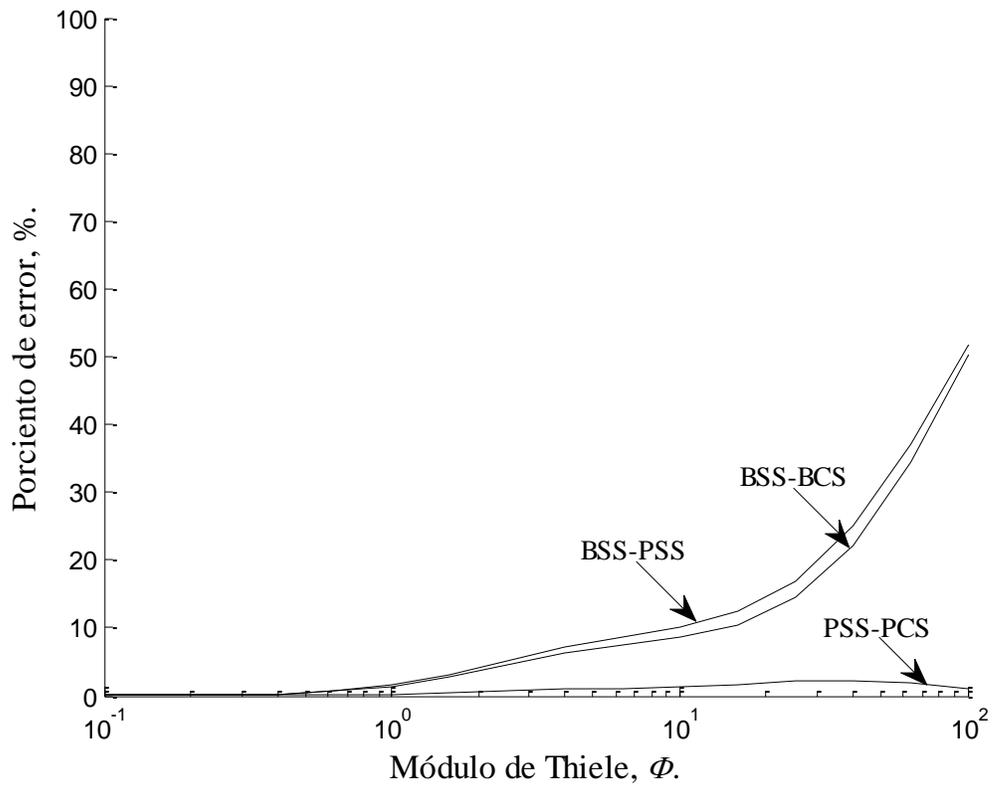


Figura A6.62. Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,X} = 10^4$ ,  $Bi_{m,Y} = 10^{-5}$  y  $\psi = 1$ .

En la Figura A6.63 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura igual a la longitud de su base, con resistencias prácticamente nulas en las fronteras verticales ( $Bi_{m,x} = 10^4$ ) y con una resistencia regular en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,y} = 5$ ).

Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS y PSS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 8 % y 23 %, respectivamente, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Los resultados del modelo PCS aproximan a los del modelo PSS con errores menores al 2 % para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10^2$ .

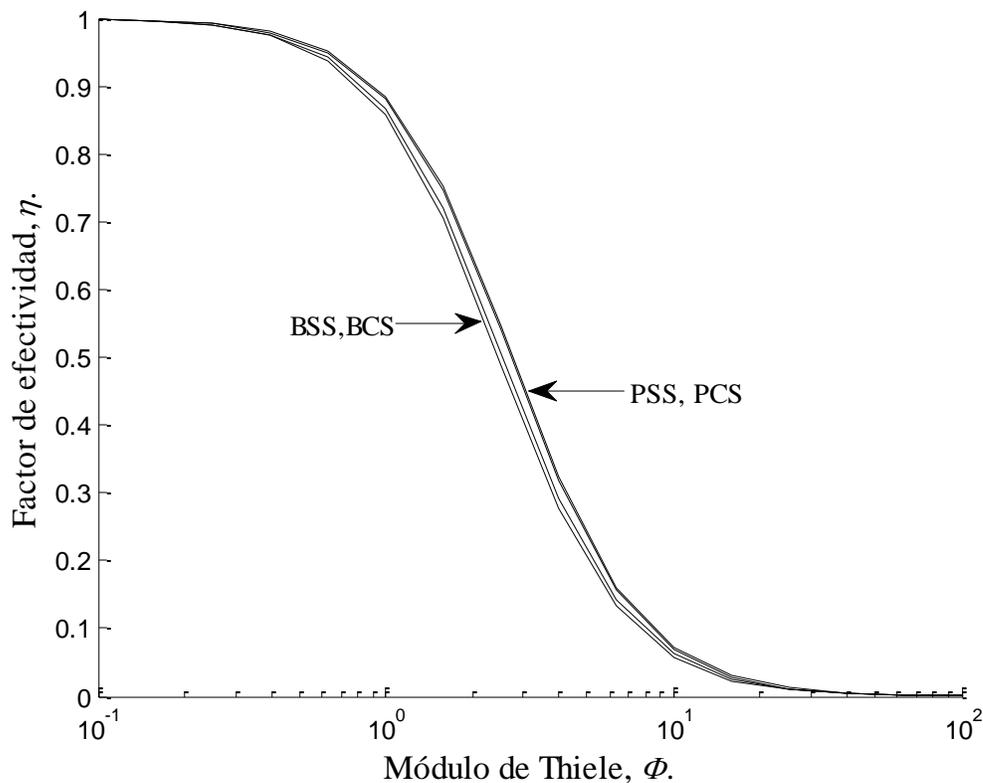


Figura A6.63. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 10^4$ ,  $Bi_{m,y} = 5$  y  $\psi = 1$ .

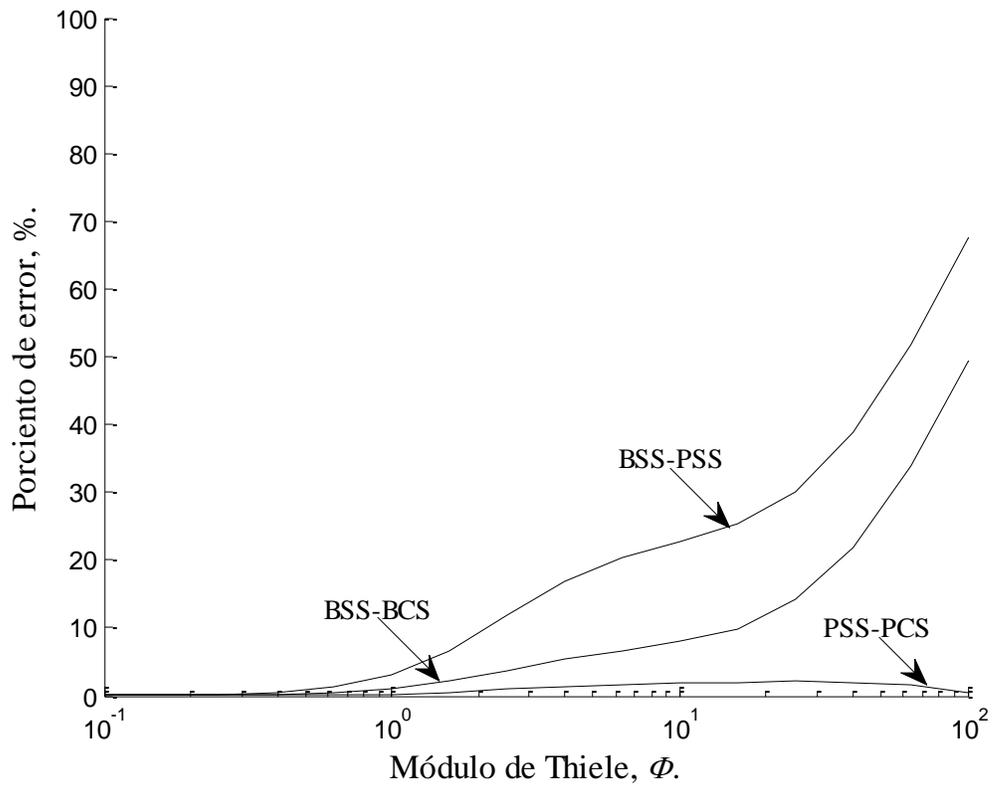


Figura A6.64. Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 10^4$ ,  $Bi_{m,y} = 5$  y  $\psi = 1$ .

En la Figura A6.65 se muestra los factores de efectividad para los modelos BSS, BCS, PSS y PCS, para un catalizador con altura igual a la longitud de su base, con resistencias prácticamente nulas en las fronteras verticales ( $Bi_{m,x} = 10^4$ ) y con una resistencia prácticamente nula en las fronteras horizontales ( $Bi_{m,y} = 10^4$ ). Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 10$  los resultados de los modelos BCS se acercan a los del modelo BSS con errores menores al 4.5 % y los del modelo PCS a los del modelo PSS con errores menores al 14.5 %, para  $\Phi > 10$  los errores aumentan. Para  $10^{-1} \leq \Phi \leq 1$  los resultados del modelo PSS aproximan a los del modelo BSS con errores por debajo del 14.2 %, para  $\Phi > 1$  el error aumenta desproporcionadamente hasta dejar al modelo inservible.

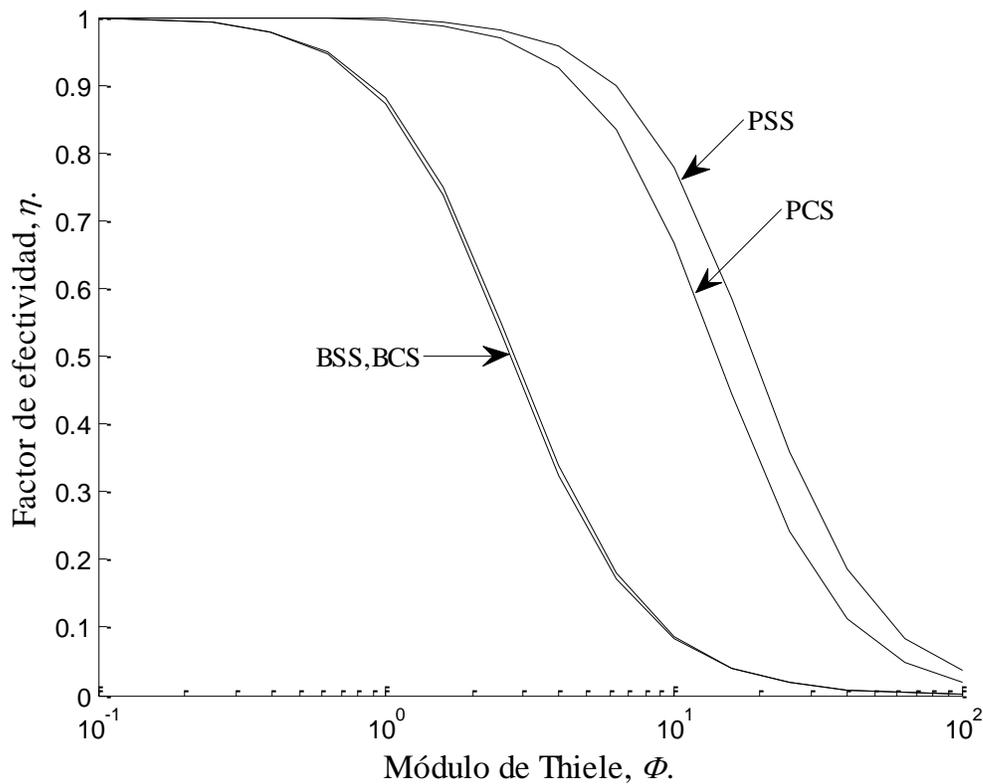


Figura A6.65. Factor de efectividad  $\eta$  en función del Módulo de Thiele  $\Phi$  para los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 10^4$ ,  $Bi_{m,y} = 10^4$  y  $\psi = 1$ .

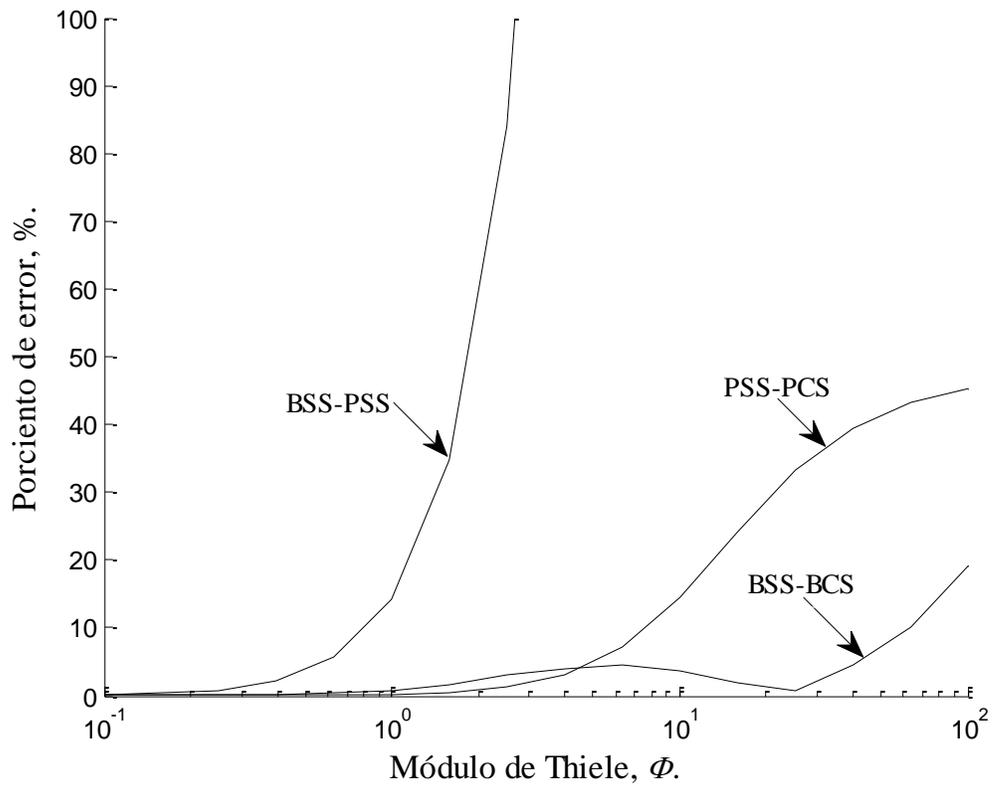


Figura A6.66. Comparación del factor de efectividad de los modelo con resistencia en las fronteras verticales, con  $Bi_{m,x} = 10^4$ ,  $Bi_{m,y} = 10^4$  y  $\psi = 1$ .

## Apéndice A7. Comparación del factor de efectividad teórico y experimental en el trabajo de Wu y col.

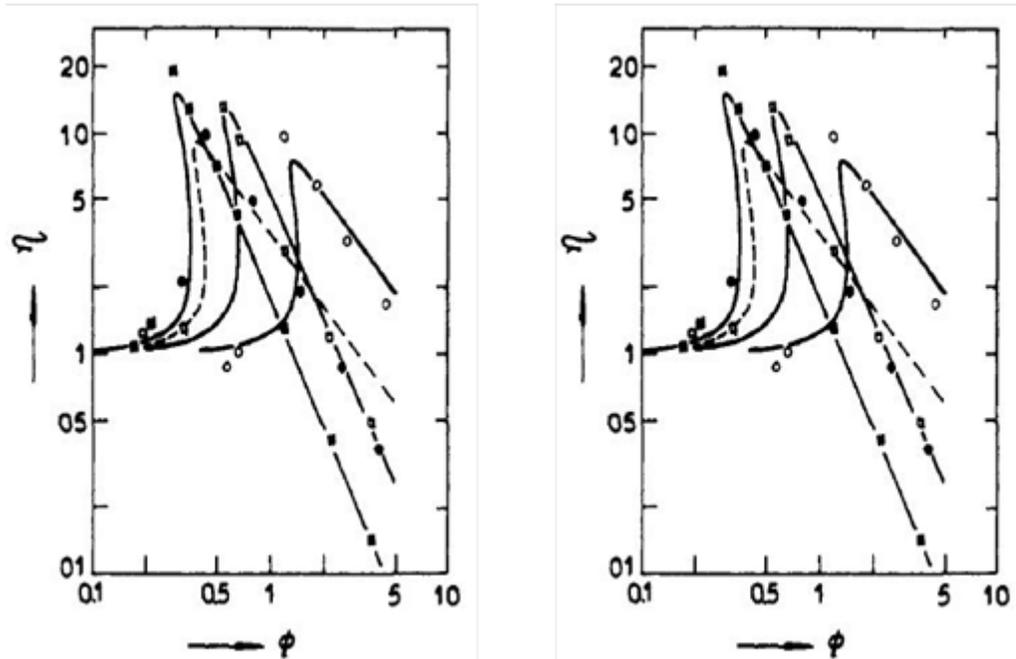


Figura A7. Comparación del factor de efectividad experimental y teórico en función del módulo de Thiele (las líneas continuas y guiones representan las predicciones teóricas), tomado de Wu y col [27]

## Referencias

- [1] (Diciembre de 2013). Catalyst: Petroleum and Chemical Process. Extraído el día 25 de julio del 2014 desde <http://www.ihs.com/products/chemical/planning/scup/catalysts-petroleum-and-chemical.aspx>
- [2] Luna, L. K. A. (2004). La gestión de la propiedad intelectual en el Instituto Mexicano del Petróleo: propuesta para el área de catalizadores. Tesis de maestría, Instituto politécnico nacional, D.F, México.
- [3] (25 de abril de 2013). Alerta sobre muertes por contaminación en el DF. Extraído el día 27 de julio del 2014 desde <http://www.eluniversaldf.mx/gustavoamadero/alertan-sobre-muertes-por-contaminacion-en-el-df.html>
- [4] (19 de junio de 2014). Endurecen programa hoy no circula. Extraído el día 27 de julio del 2014 desde <http://www.elpuntocritico.com/noticias-metropoli/noticias-df/89196-endurecen-programa-hoy-no-circula.html>
- [5] (26 de julio de 2014). Hoy No Circula lleva 24 años sin dar resultados. Extraído el día 27 de julio del 2014 desde <http://sipse.com/mexico/hoy-no-circula-programa-senadores-panistas-automoviles-transporte-103994.html>
- [6] (22 de julio de 2014). Las ONG piden catalizadores de calidad. Extraído el día 27 de julio del 2014 desde <http://www.cnnexpansion.com/economia/2014/07/21/catalizadores-chafas-riesgo-para-el-df>
- [7] (Enero de 2011). Petrochemical (Petroleum and chemical) Catalyst: The U.S Market. Extraído el día 25 de julio del 2014 desde <http://www.bccresearch.com/market-research/chemicals/petrochemical-catalysts-us-market-chm027d.html>

[8] (Febrero de 2012). Global Markets for catalyst regeneration. Extraído el día 26 de julio del 2014 desde <http://www.bccresearch.com/market-research/chemicals/global-catalyst-regeneration-markets-chm046b.html>

[9] Morbidelli, M., y Gavriilidis, A. (2005). Catalyst design: optimal distribution of catalyst in pellets, reactors, and membranes. Cambridge University Press. Sección 1.2

[10] Becker, E. R., y Wei, J. Nonuniform distribution of catalyst on supports I. Biomolecular Langmuir reactions. *Journal of Catalysis*, 46, 365-371, 1977.

[11] Becker, E. R., y Wei, J. Nonuniform distribution of catalyst on supports II. First order reactions with poisoning . *Journal of Catalysis*, 46, 372-381, 1977.

[12] Juang, H. D., y Weng, H. S. (1983). Performance of catalysts with nonuniform activity profiles. 2. Theoretical analysis for nonisothermal reactions. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 22(2), 224-230.

[13] Reddy, K. S. B. y Talukdar, J. (1986). Analisis of the performance of non-uniform active catalyst pellets for a non-isothermal series reaction. *Chemical Engineering communication*, 52, 127-134.

[14] Liu, B., Chai, Y., Liu, Y., Wang, Y., Liu, Y., y Liu, C. (2012). A simple method for preparation of presulfided eggshell CoMoS/ $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts for hydrodesulfurization of dibenzothiophene. *Fuel*, 95, 457-463.

[15] Do, D. D. y Bailey, J. E. (1986). A solution method for a class of nonlinear boundary value problems. *Chemical Engineering communications*, 43, 1-29.

[16] Do, D. D., (1984). A method for solving diffusion and reaction problems with nonuniform activity catalysts. *Chemical Engineering Science*, 39, 1519-1522.

- [17] Do, D. D., y Bailey, J. E. (1981). Approximate analytical solutions for porous catalysts with nonuniform activity. *Chemical Engineering Science*, 37, 545-551.
- [18] Lee Hong H. (1981). Generalized Effectiveness factor for pellets with nonuniform activity distribution: asymptotic region of strong effect. *Chemical Engineering Science*. 59, 161-167.
- [19] Wang, J. B., y Varma, A.(1980). On shape normalization for non-uniformly active catalyst pellets. *Chemical Engineering Science*, 35(3), 613-617.
- [20] Morbidelli, M., y Varma, A. (1983). On shape normalization for non-uniformly active catalyst pellets—II. *Chemical Engineering Science*, 38(2), 297-305.
- [21] Gottifredi, J. C., Gonzo, E. E., y Quiroga O.D. (1981). Isothermal effectiveness factor I. *Chemical Engineering Science*, 36, 705-711.
- [22] Gottifredi, J. C., Gonzo, E. E., y Quiroga O.D. (1981). Isothermal effectiveness factor II. *Chemical Engineering Science*, 36, 713-719.
- [23] Gottifredi, J. C., Gonzo, E. E. (1994). Approximate effectiveness factor estimation for wave shell catalyst. *Chemical Engineering Communications*, 128, 127-134.
- [24] Morbidelli, M., y Servida, A. (1982). Optimal catalyst activity profiles in pellets. 1. The case of negligible external mass transfer resistance. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 21, 284-289.
- [25] Morbidelli, M., Servida, A., Carra S., y Varma A. (1982). Optimal catalyst activity profiles in pellets. 3. The nonisotherminal case whit negligible external transport limitation. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 27, 1169-1174.

[26] Morbidelli, M., y Varma A. (1982). Optimal catalyst activity profiles in pellets. 2. The nonisothermical case with negligible external transport limitation. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 21, 278-284.

[27] Wu, H., Yuan, Q., y Zhu, B. (1988). An experimental investigation of optimal active catalyst distribution in nonisothermal pellets. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 27(7), 1169-1174.

[28] Wu, H., Yuan, Q., y Zhu, B. (1990). An experimental study of optimal active catalyst distribution in pellets for maximum selectivity. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 29, 1771-1776.

[29] Pavlou, S., y Vayenas C. G. (1990). Optimal catalyst activity profile in pellets with shell-progressive poisoning: The case of the fast linear kinetics. *Chemical Engineering Science*, 45(3), 695-703

[30] Asif, M. (2012). Conversion in chemical reactors using hollow cylindrical catalyst pellet. *International Journal of Chemical and Biology Engineering*, 6, 178-183.

[31] Asif, M. (2013). Conversion enhancement of fixed-bed reactors using two-dimensional hollow cylindrical catalyst pellet. *International Journal of Chemical and Biology Engineering*, 11(1), 1-10.

[32] Cominos, V., y Gavriilidis A. (2001). Theoretical investigation of axially non-uniform catalytic monoliths for methane combustion. *Chemical Engineering Science*, 56, 3455-3468.

[33] Whitaker, S. (1992). The species mass jump condition at a singular surface. *Chemical Engineering Science*, 47(7), 1677-1685.

[34] Whitaker, S. (2008). Chemical Engineering Education: Making Connections at Interfaces. Second international seminar on trends in chemical engineering, the XXI century, ciudad de México, del 28-29 de enero, 2008. Pág. 48-50.

[35] Aparicio, M., G. (2013). Uso de las condiciones de salto para el modelado de procesos de reacción y separación integrados. Tesis de maestría, Universidad Autónoma Metropolitana, México D. F.

[36] Rees, P. K., y Sparks, F. W. (2007). Algebra. Editorial reverté. Capítulo 12, sección 12.18.