

Casa abierta al tiempo UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA UNIDAD IZTAPALAPA

ECUACIONES PROMEDIO PARA EL TRANSPORTE DE ENERGÍA EN UN REACTOR DE TRES FASES

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

PRESENTA

I.Q JOSÉ ALBERTO MACÍAS VARGAS

ASESOR:

DR. JESÚS ALBERTO OCHOA TAPIA

Resumen

En este trabajo se desarrolla un modelo para el transporte de energía, en el proceso de hidrodesulfuración (HDS) en un reactor trifásico, en términos de ecuaciones promedio. También se plantea la metodología para la predicción de los coeficientes efectivos asociados a las ecuaciones promedio.

La deducción del modelo se realiza por la aplicación de la técnica del promedio volumétrico a las ecuaciones puntuales de energía térmica para obtener las del medio efectivo que son válidas en todo el dominio. Se considera contacto físico entre la fase líquida con el catalizador y la gaseosa. Pero se descarta entre el gas y el catalizador. En el desarrollo del modelo se utiliza la disparidad entre las longitudes características asociadas con el reactor para simplificar las ecuaciones promedio y el problema de cerradura que eventualmente da el método de predicción de los coeficientes efectivos de transporte. En el problema de cerradura se impone también la suposición de falso-estado estacionario y el equilibrio local de temperatura en las diferentes interfases.

El modelo obtenido consta de tres ecuaciones promedio de transporte de energía: una para la región porosa, otra para la fase gas y la última para la fase líquida. En ellas, además de otros, se observan términos de intercambio de energía con coeficientes de película que son generados por las condiciones de frontera interfaciales de las ecuaciones puntuales y por el proceso de cerradura. El método de predicción de los coeficientes de película se muestra detalladamente.

En el cuerpo principal del trabajo se presentan los resultados de la aplicación del método del promedio volumétrico y en los apéndices el desarrollo en extenso de cada resultado, así como una propuesta de solución al problema de cerradura.

			Página		
Rest	ımen		i		
I.	Introducción		1		
	a.	Antecedentes	2		
	b.	Justificación	4		
II.	Objeti	vos	6		
III.	Descripción del sistema				
	a. Proceso y condiciones				
	b.	Descripción del proceso y consideraciones sobre el sistema multi	fásico		
IV.	Metodología				
	a.	Descripción Método del Promedio Volumétrico	7		
	b.	Desarrollo del Promedio Volumétrico	7		
V.	Result	ados			
	a. Ecuaciones Promedio y coeficientes efectivos de transporte				
		i. De la región porosa ω	20		
		ii. De la fase gas γ	25		
		iii. De la fase líquida λ	30		
	b.	Discusión	35		
		b.1 Discusión 2ª etapa	39		
VI.	Conclu	usiones	41		
VII.	II. Nomenclatura				
VIII. Bibliografía					

I. Introducción

En este trabajo se modeló el transporte de energía en el proceso de hidrodesulfuración (HDS) en un reactor trifásico, mediante la deducción de ecuaciones promedio (o de medio efectivo), también se plantea la metodología para el cálculo de los coeficientes efectivos asociados a las ecuaciones promedio.

Bajo diferentes puntos de vista los reactores se han clasificado por forma física, por condiciones de operación, y por las fases que los constituyen. Los reactores químicos trifásicos se han observado como sistemas complejos [Gates y Col., 1979], sin embargo se han estudiado y propuesto modelos matemáticos que los representen, para ser utilizados en su optimización y simulación.

En este estudio de un reactor de lecho fijo, para el proceso de HDS, se presentan las consideraciones sobre las interacciones entre las fases, es decir el contacto físico que existe entre ellas; Región Porosa, Fase Líquida y Fase Gas, que se realizan para el desarrollo del modelo, así como los balances de energía puntuales que lo representan, en la descripción del sistema (§ III).

Los modelos para la representación e interpretación de procesos en áreas como la Ingeniería Química, son cruciales. De esto se desprende el estudio para la deducción del modelo mencionado a partir de los desarrollos de las ecuaciones promedio para cada fase (Apéndices A.1 a A.11), mediante la aplicación del método del Promedio Volumétrico [Whitaker, S., 1999]; en la sección de Metodología (§ IV) se detalla el método, sin embargo cabe señalar que el tratamiento matemático y desarrollo algebraico se presenta en los apéndices señalados, para no perder la continuidad en la exposición de resultados y conclusiones de esta investigación.

Las ecuaciones promedio y la expresión de los coeficientes efectivos de transporte de energía, se presentan resumidos en la sección de resultados (§ V.a y § V.b). En la sección

VI, se presenta un resumen de los resultados obtenidos para el modelo de un sistema trifásico como el de un reactor de HDS.

a. Antecedentes

El uso de reactores químicos en la industria, es sin duda una de las actividades más comunes, y debido a esto, el estudio y comprensión de los fenómenos que se presentan en ellos, representa un amplio campo de trabajo, que incluye desde la obtención y análisis de datos experimentales hasta la propuesta de modelos matemáticos que describan el comportamiento de estas unidades. Es así como desde los inicios de la ingeniería química se tiene conocimiento de algunas descripciones de reactores químicos, como la propuesta realizada por diversos autores [McCabe y Col., 1965; Carberry, 1976], donde se dice que un reactor químico es la pieza fundamental de un proceso, y se modela mediante balances de materia y energía en ecuaciones diferenciales ya sean estas, parciales u ordinarias, derivados del análisis de un elemento de volumen, etc.; continuando con otras descripciones y representaciones de reactores químicos realizadas por diferentes autores [Aris, 1973; Korsten y Col. 1996]. Otro aspecto importante dentro del campo de acción de este tipo de investigación son, sin duda, los modelos cinéticos que en conjunción con los modelos tradicionales o promediados ofrecen otra alternativa en el modelado y simulación de reactores químicos, en particular para el presente desarrollo, la hidrodesulfuración (HDS). En este sentido el estado del arte indica de manera general la siguiente descripción para el mencionado proceso.

El azufre está presente en diversas formas en las fracciones de petróleo: Mercáptanos R-SH, sulfuros R-S-R', disulfuros R-S-S-R', tiofeno, benzotiofeno, dibenzotiefeno y sus derivados alquilados [Froment, 1994]. El proceso de HDS es, básicamente, el tratamiento de fracciones de petróleo, con hidrógeno en presencia de un catalizador, como ya se ha mencionado, en un reactor trifásico de lecho fijo, a lo que debe incluirse la transferencia de calor y masa, la hidrodinámica del sistema y la cinética involucrada en la misma, a este respecto se puede mencionar la cinética propuesta por Froment [Froment y Col., 1994], trabajo en el cual se concluye acerca de la problemática que representa el sistema en cuanto

a la hidrodinámica, la naturaleza de la corriente de alimentación, el cálculo de propiedades termodinámicas y del aspecto cinético del proceso; lo cual presenta la oportunidad de continuar desarrollando este tema en función de las diferentes áreas mencionadas, es decir que, se presenta la oportunidad de proponer y evaluar modelos de reactores de HDS de fracciones de petróleo, encontrados en la literatura o como productos de la aplicación de otras metodologías.

Debido al desarrollo tecnológico y académico en diferentes etapas y grados de avance, se encuentran en la literatura planteamientos de modelos desde los que consideran el criterio de Mars, el cual indica la importancia de los efectos de la dispersión axial en un reactor [McCabe y Col., 1965], pasando por las observaciones sobre la interpretación del flujo de fluidos mediante modelos hidrodinámicos [Sicardi y Col., 1980], hasta la propuesta de modelos en ecuaciones diferenciales ordinarias; es decir, simplificando los modelos considerando operación adiabática, catalizador isotérmico, contribución por convección y conducción debido al transporte de entalpía por la transferencia de masa interfacial [Froment y Col., 1994], así como modelos que consideran operación adiabática e isobárica del reactor, y la no presencia de evaporación o condensación, etc., para un reactor de HDS [Korsten y Col., 1996]; también debe mencionarse los modelos llamados reactores ideales, (a) Reactor discontinuo, (b) Reactor de flujo pistón y (c) Reactor de mezcla completa, todos estos estudiados en el texto Ingeniería de las Reacciones Químicas [Levenspiel, O., 1997].

Dentro de la métodos, para la obtención de modelos de reactores multifásicos se encuentra el Método del Promedio Volumétrico [Whitaker, S., 1999]. Esta metodología ofrece la alternativa de obtener los balances de cantidad de movimiento, materia y energía, en términos de cantidades promedio, definidas mediante un operador; considerando la transferencia de energía en sus diversos mecanismos entre las diferentes fases. A este particular se encuentran diferentes desarrollos en temas como solidificación de mezclas binarias con dispersión en estructuras ramificadas [Bousquet-Melou y Col. 2002], transporte en medios heterogéneos [Chang, 1982a], modelos de reactores de lecho empacado [Chang, 1982], difusión y conducción efectiva en dos fases [Chang, 1983], difusión y reacción en medios heterogéneos [Ochoa-Tapia, J. A., 1988], modelo de una ecuación en sistemas de dos fases [Ochoa-Tapia, J. A., 1991], difusión en medios porosos [Ochoa-Tapia y Col, 1993], transporte difusivo en dos fases [Ochoa-Tapia y Col, 1994], transferencia de calor en la frontera de un medio poroso [Ochoa-Tapia y Col, 1998], transporte en medios porosos ordenados y desordenados [Quintard, M y Col, 1994], restricciones del equilibrio térmico local [Whitaker, S., 1991] y el propio método del promedio volumétrico [Whitaker, S., 1999].

Así que la conveniencia del estudio del comportamiento de un reactor trifásico de lecho fijo de hidrotratamiento de fracciones de petróleo, bajo el método del promedio volumétrico, representa la comprensión de los fenómenos de transferencia de energía y por ende la futura posibilidad de proponer modelos de simulación y optimización de procesos químicos bajo esta metodología.

b. Justificación

El interés fundamental por introducir un desarrollo en ecuaciones promedio para obtener un modelo de reactor radica en la necesidad de incluir o en su caso excluir, las resistencias a la transferencia de calor que deben considerarse para la operación de este tipo de reactores, así como la necesidad de un desarrollo que contemple el escalamiento del reactor, ya que se advierten diferencias importantes entre la operación a nivel laboratorio y la operación industrial (Fogler, H. S., 2000) y debido a la complejidad de los sistemas reactivos actuales, como por ejemplo los que se llevan a cabo en la industria petroquímica, tal como el proceso de HDS, en un reactor de lecho fijo; es necesario encontrar metodologías y herramientas, que interpreten el comportamiento del reactor bajo diferentes condiciones de operación, donde al resolver las incógnitas o parámetros, se consiga explicar los fenómenos presentes y de esta forma estar en posición de instrumentar modos de operación para el mejor rendimiento y eficiencia de un reactor químico.

Entonces la propuesta de un modelo en ecuaciones promedio, que cuantifique los diferentes tipos de transporte de energía, y permita el cálculo de coeficientes efectivos de

transferencia de calor, en tres fases, problema no resuelto en la bibliografía consultada y que se cita como una necesidad, así como el obtener modelos en tres fases para no perder de vista los efectos de los fenómenos de transporte como lo deduce Satterfield (1975) en un estudio sobre reactores de lecho empacado, así como la importancia en los campos de diseño, simulación y optimización de procesos.

Por los motivos antes expuestos se exhibe necesaria la generación de un modelo en ecuaciones promedio de energía de un sistema trifásico como el de un reactor de HDS.

II. Objetivos

- **a.** Deducción de un modelo para el transporte de energía en el reactor de HDS en términos de ecuaciones promedio
- b. Planteamiento de los problemas de valor a la frontera de cuya solución se obtienen los coeficientes efectivos de transferencia de energía asociados a las ecuaciones promedio

IV. Metodología

La metodología, el Método del Promedio Volumétrico [Whitaker, 1999], seleccionada por los motivos expresados en la introducción y la justificación, se ha utilizado en diferentes ocasiones para el estudio de problemas en una y dos fases, Ochoa-Tapia y Col. (1991), Ochoa-Tapia y Col. (1994), así como por Quintard y Whitaker (1994), entre otros citados en los antecedentes (§ I.a). En este texto se tratará un sistema de tres fases; también debe mencionarse el uso de métodos matemáticos aplicados en parte de la metodología de este trabajo, tales como el método de superposición de variables en problemas de valor a la frontera, y el método de separación de variables para resolver ecuaciones diferenciales, así como el de la celda de Chang, método este último que permite calcular soluciones analíticas, cuando en la literatura generalmente se presentan soluciones numéricas, de los problemas de cerradura generados por el promediado de las ecuaciones puntuales del sistema y consta de circunferencias concéntricas en las cuales se distribuyen las fases y se les asignan radios característicos a cada fase, teniendo así identificadas las interfases formadas por el contacto entre las fases, y condiciones de frontera homogéneas propuestas por el método, facilitando la solución de los problemas de cerradura mencionados.

La finalidad de aplicar el Método del Promedio Volumétrico es obtener las ecuaciones promedio de energía para cada fase, es decir el modelo del transporte de energía de un sistema trifásico. El desarrollo del método es complejo y largo, por lo tanto en el cuerpo principal del trabajo se resumen los pasos importantes del desarrollo, y los detalles del mismo se presenta en los apéndices listados al final de esta sección, sin embargo a lo largo de la sección se recurre a estos apéndices para la explicación de algunos de los resultados que así lo requieren.

a. Descripción

El método del promedio volumétrico es una técnica que puede aplicarse para la derivación rigurosa de las ecuaciones de conservación en sistemas multifásicos. Esto significa que las ecuaciones puntuales que describen el transporte de energía, en este caso, son válidas

dentro de una fase en particular, pero pueden suavizarse espacialmente para producir ecuaciones promedio que son válidas en cualquier punto del sistema [Whitaker, 1999].

De acuerdo a lo anterior el conjunto de ecuaciones puntuales que describen el transporte de energía en el sistema multifásico está dado por:

Ecuación de energía

Para las fases fluidas

$$\left(\rho C_{p}\right)_{\alpha}\left(\frac{\partial T_{\alpha}}{\partial t}+\mathbf{v}_{\alpha}\cdot\nabla T_{\alpha}\right)=\nabla\cdot\left(k_{\alpha}\nabla T_{\alpha}\right)$$
 para $\alpha=\lambda,\gamma$ (IV.1)

Para la región porosa

$$\left(\rho C_{p}\right)_{\omega} \frac{\partial T_{\omega}}{\partial t} = \nabla \cdot \left(k_{\omega} \nabla T_{\omega}\right) + \Phi_{\omega}$$
(IV.2)

en donde ρ es la densidad, C_p la capacidad calorífica, k la conductividad térmica, propiedades consideradas constantes en el volumen ∇ que se muestra en la Fig. 3-3. Además T es la temperatura, y **v** la velocidad; Φ_{ω} es el término de generación de calor debido a la reacción química que se lleva a cabo en la región porosa. Los subíndices $\alpha = \lambda, \gamma$ y ω indican la fase gas, líquida y región porosa respectivamente. Entonces el calor de reacción está dado por la expresión:

$$\Phi_{\omega} = a_{ve} \left\langle \sum_{i=L}^{i=n_{T}} R_{i} \left(-\Delta H_{i} \right) \right\rangle_{\lambda \omega}$$
(IV.3)

Donde a_{ve} es el área específica donde se lleva a cabo la reacción, R_i la tasa de reacción del i-ésimo componente y ΔH_i la entalpia de reacción de la i-ésima reacción química respectivamente. Las ecuaciones (IV.1) y (IV.2) están sujetas a las siguientes condiciones de frontera interfacial. Interfase líquido - gas

$$\mathbf{n}_{\gamma\lambda} \cdot \left(\mathbf{q}_{\lambda} - \mathbf{q}_{\gamma}\right) + \mathbf{n}_{\gamma\lambda} \cdot \left(\mathbf{v}_{\lambda} - \mathbf{w}\right) \left[\rho_{\lambda} \left(h_{\lambda} - h_{\gamma}\right) - P_{\lambda\gamma} \left(1 - \frac{\rho_{\lambda}}{\rho_{\gamma}}\right)\right] = 0 \qquad (IV.4)$$

$$T_{\lambda} = T_{\gamma} = T_{\lambda\gamma} \tag{IV.5}$$

Donde $\mathbf{n}_{\gamma\lambda}$ es el vector normal a la fase γ y en dirección a la fase λ , \mathbf{q}_{α} es el flux de calor, ρ_{α} la densidad y h_{α} la entalpía de cada fase o región, para $\alpha = \omega, \lambda, \gamma$.

Interfase líquido - partícula catalítica

$$T_{\lambda} = T_{\omega} = T_{\lambda\omega} \tag{IV.6}$$

$$\mathbf{n}_{\lambda\omega} \left(\mathbf{q}_{\lambda} - \mathbf{q}_{\omega} \right) = 0 \tag{IV.7}$$

En la ecuación (IV.4) $\mathbf{n}_{gl} \times \mathbf{w}$ es la rapidez de desplazamiento de la interfase gas-líquido. Así mismo es importante mencionar que las ecuación (IV.5) y (IV.6) representan el concepto de equilibrio térmico local, el cual propone la existencia de una sola temperatura en cada interfase que representa la continuidad de la temperatura. Además, el flux por conducción es

$$\mathbf{q}_{\alpha} = -k_{\alpha} \nabla T_{\alpha}$$
 para $\alpha = \lambda, \gamma, \omega$ (IV.8)

Y los símbolos restantes tienen el significado ya mencionado. A continuación se presenta el desarrollo condensado de la metodología propuesta para la deducción de un modelo en términos de ecuaciones promedio.

b. Desarrollo

Partiendo de las ecuaciones puntuales de transporte de energía del sistema, ecuaciones (IV.1) y (IV.2), se obtienen las ecuaciones promedio, con el fin de obtener un modelo de tres ecuaciones, considerando el volumen de la Fig. 3-3, se desarrolla el promedio local para cada fase, obteniendo

La ecuación promedio para la región porosa(ω),

$$\left(\rho C_{p}\right)_{\omega} \frac{\partial}{\partial t} \left(\epsilon_{\omega} \left\langle T_{\omega} \right\rangle^{\omega}\right) = \nabla \cdot \left\{\epsilon_{\omega} k_{\omega} \left[\nabla \left\langle T_{\omega} \right\rangle^{\omega} + \frac{1}{V_{\omega}} \int_{A_{\omega\lambda}} \mathbf{n}_{\omega\lambda} \mathcal{P}_{\omega} dA\right]\right\} + \frac{1}{V} \int_{A_{\omega\lambda}} \mathbf{n}_{\omega\lambda} \cdot k_{\omega} \nabla T_{\omega} dA + \epsilon_{\omega} \left\langle \Phi_{\omega} \right\rangle^{\omega}$$
(IV.9)

Ecuación promedio de la fase líquida (λ)

$$\left(\rho C_{p}\right)_{\lambda} \frac{\partial}{\partial t} \left(\varepsilon_{\lambda} \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda}\right) + \frac{1}{V} \int_{A_{\lambda\gamma}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\gamma} \cdot \left(\rho C_{p}\right)_{\lambda} T_{\lambda} \left(\mathbf{v}_{\lambda} - \mathbf{w}\right) dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\lambda\omega}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\omega} \cdot \left(\rho C_{p}\right)_{\lambda} T_{\lambda} \left(\mathbf{v}_{\lambda} - \mathbf{w}\right) dA + \left(\rho C_{p}\right)_{\lambda} \nabla \cdot \left(\varepsilon_{\lambda} \langle \mathbf{v}_{\lambda} \rangle^{\lambda} \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda}\right) = \nabla \cdot \left\{\varepsilon_{\lambda} k_{\lambda} \left[\nabla \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda} + \frac{1}{V_{\lambda}} \int_{A_{\lambda\gamma}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\gamma} t_{\lambda}^{\lambda} dA + \frac{1}{V_{\lambda}} \int_{A_{\lambda\omega}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\omega} t_{\lambda}^{\lambda} dA \right]\right\} - \left(\rho C_{p}\right)_{\lambda} \nabla \cdot \left\langle \mathbf{v}_{\lambda} t_{\lambda}^{\mu} \right\rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\lambda\gamma}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\gamma} \cdot k_{\lambda} \nabla T_{\lambda} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\lambda\omega}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\omega} \cdot k_{\lambda} \nabla T_{\lambda} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\lambda\omega}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\omega} \cdot k_{\lambda} \nabla T_{\lambda} dA$$

(IV.10)

Ecuación promedio de la fase $gas(\gamma)$

$$\left(\rho C_{p}\right)_{\gamma} \frac{\partial}{\partial t} \left(\epsilon_{\gamma} \left\langle T_{\gamma} \right\rangle^{\gamma}\right) + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta}(t)} \mathbf{n}_{\gamma \lambda} \cdot \left(\rho C_{p}\right)_{\gamma} T_{\gamma} \left(\mathbf{v}_{\gamma} - \mathbf{w}\right) dA + \left(\rho C_{p}\right)_{\gamma} \nabla \cdot \left(\epsilon_{\gamma} \left\langle \mathbf{v}_{\gamma} \right\rangle^{\gamma} \left\langle T_{\gamma} \right\rangle^{\gamma}\right)$$

$$= \nabla \cdot \left\{\epsilon_{\gamma} k_{\gamma} \left[\nabla \left\langle T_{\gamma} \right\rangle^{\gamma} + \frac{1}{V_{\gamma}} \int_{A_{\beta}(t)} \mathbf{n}_{\gamma \lambda} \mathcal{P}_{\gamma} dA\right]\right\} - \left(\rho C_{p}\right)_{\gamma} \nabla \cdot \left\langle \mathbf{v}_{\gamma} \mathcal{P}_{\gamma} \right\rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta}(t)} \mathbf{n}_{\gamma \lambda} \cdot k_{\gamma} \nabla T_{\gamma} dA$$

$$(IV.11)$$

Los detalles de la deducción de las ecuaciones (IV.9) a (IV.11), se presentan en el Apéndice A.1, donde se emplearon las siguientes definiciones:

$$\langle \Psi_{\alpha} \rangle = \frac{1}{V} \int_{V_{\alpha}} \Psi_{\alpha} dV$$
 promedio superficial de la fase (IV.12)

$$\langle \psi_{\alpha} \rangle^{\alpha} = \frac{1}{V_{\alpha}} \int_{V_{\alpha}} \psi_{\alpha} dV$$
 promedio intrínseco de la fase (IV.13)

$$\psi_{\alpha} = \psi_{\alpha} - \langle \psi_{\alpha} \rangle^{\alpha}$$
 desviación espacial (IV.14)

$$\varepsilon_{\alpha} = \frac{V_{\alpha}}{V}$$
 fracción volumen de la fase α (IV.15)

Donde ψ_{α} puede ser T_{α} ó \mathbf{v}_{α} . En las ecuaciones (IV.12) a (IV.15) el volumen V representa el volumen de muestra de la Fig. 3-3 y V_{α} representa el volumen de la fase α contenido en la muestra V, por último ε_{α} es la fracción volumen de cada fase. Las fracciones se consideran constantes en el resultado final. Para llegar a las ecuaciones (IV.9) a (IV.11) se introdujo la variable llamada desviación espacial de la temperatura \mathcal{T}_{α} , y el promedio de la temperatura en las tres fases. Por ello se requiere obtener las ecuaciones diferenciales de las desviaciones, para resolver y obtener la forma de las desviaciones de la temperatura, procedimiento que se lleva a cabo mediante la aplicación la definición (IV.14) y se presenta en extenso en el Apéndice A.2; entonces la ecuación para las desviaciones de la temperatura en las diferentes fases son:

Para la región porosa (ω), está dada por

Para la fase gas se tiene

Ecuación para $\not P_{\gamma}$

Para la fase líquida se tiene

Ecuación para $\not \!\!\! /_{\!\!\!\lambda}$

Sujetas a las siguientes condiciones de frontera

En
$$A_{\gamma\lambda}$$
; $T_{\lambda}^{h} = T_{\gamma}^{h} + \langle T_{\gamma}^{\lambda} - \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda}$ (IV.19)

En
$$A_{\omega\lambda}$$
; $f_{\lambda}^{b} = \langle \mathcal{T}_{\omega} \rangle^{\omega} + f_{\omega}^{b} - \langle \mathcal{T}_{\lambda} \rangle^{\lambda}$ (IV.21)
Fuente Fuente

$$\mathbf{n}_{\lambda\omega} \times k_{\lambda} \tilde{\mathbf{N}} \not P_{\lambda} = \mathbf{n}_{\lambda\omega} \times k_{\omega} \tilde{\mathbf{N}} \not P_{\omega} + \mathbf{n}_{\lambda\omega} \times k_{\omega} \tilde{\mathbf{N}} \not P_{\omega} - \mathbf{n}_{\omega} \times k_{\omega} \tilde{\mathbf{N}}$$
(IV.22)

Promedios
$$\left\langle \mathbf{P}_{\lambda} \right\rangle^{\lambda} = 0$$
 $\left\langle \mathbf{P}_{\gamma} \right\rangle^{\gamma} = 0$ $\left\langle \mathbf{P}_{\omega} \right\rangle^{\omega} = 0$ (IV.23)

Periodicidad

$$\mathbf{P}_{\omega}\left(\mathbf{r}+\mathbf{l}_{i}\right)=\mathbf{P}_{\omega}\left(\mathbf{r}\right) \tag{IV.24}$$

$$\mathbf{P}_{\gamma}\left(\mathbf{r}+\mathbf{l}_{i}\right)=\mathbf{P}_{\gamma}\left(\mathbf{r}\right) \tag{IV.25}$$

$$\mathbf{P}_{\lambda}\left(\mathbf{r}+\mathbf{l}_{i}\right)=\mathbf{P}_{\lambda}\left(\mathbf{r}\right) \tag{IV.26}$$

Del análisis de la ecuaciones (IV.16) a (IV.18), se determina la necesidad de conocer \not{P}_{α} , tomando en cuenta que existen fuentes generadoras de estas desviaciones, identificadas como los términos de las ecuaciones (IV.16) a (IV.23), que no están sólo en función de las variables de desviación, es decir aquellos términos que en su estructura contienen contribuciones diferentes a las desviaciones, por ejemplo promedios de alguna variable, o términos puntuales de las mismas. A este punto se especifican las contribuciones por evaporación, transporte interfacial y transferencia de calor debido al calor sensible de las fases, entre otros. Se propone entonces la forma de las desviaciones basándose en las

fuentes mencionadas, a esta propuesta se le considera como una de las contribuciones del trabajo; tomando en cuenta que si bien las ecuaciones diferenciales de las desviaciones de la temperatura son diferentes para cada fase también es cierto que podemos proponer una solución similar de la temperatura para cada fase con el fin de obtener problemas tipo e intentar generalizar las soluciones, como una consecuencia lógica de este tratamiento se desprende como resultado que algunos de los términos involucrados en las ecuaciones solución no existirán, y en parte debido a que algunos de estos términos darían razón del contacto entre las fases gas y región porosa, contacto inexistente debido a la descripción del sistema, así la solución propuesta a las desviaciones de la temperatura en las tres fases se escribe como:

$$\begin{aligned}
\dot{\mathcal{F}}_{\omega} &= \mathbf{b}_{\omega\omega} \times \mathbf{\tilde{N}} \langle T_{\omega} \rangle^{\omega} + \mathbf{b}_{\omega\gamma} \times \mathbf{\tilde{N}} \langle T_{\gamma} \rangle^{\gamma} + \mathbf{b}_{\omega\lambda} \times \mathbf{\tilde{N}} \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda} + S_{\omega\lambda} \left(\langle T_{\omega} \rangle^{\omega} - \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda} \right) \\
&+ S_{\omega} \left(\langle T_{\gamma} \rangle^{\gamma} - \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda} \right) + r_{\omega\lambda} \dot{\mathcal{M}}_{\lambda\gamma} \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda} + r_{\omega\gamma} \dot{\mathcal{M}}_{\lambda\gamma} \langle T_{\gamma} \rangle^{\gamma} + m_{\omega} \dot{\mathcal{M}}_{\lambda\gamma} \\
\dot{\mathcal{F}}_{\lambda} &= \mathbf{b}_{\lambda\omega} \times \mathbf{\tilde{N}} \langle T_{\omega} \rangle^{\omega} + \mathbf{b}_{\lambda\gamma} \times \mathbf{\tilde{N}} \langle T_{\gamma} \rangle^{\gamma} + \mathbf{b}_{\lambda\lambda} \times \mathbf{\tilde{N}} \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda} - S_{\lambda\omega} \left(\langle T_{\omega} \rangle^{\omega} - \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda} \right) \\
&+ S_{\lambda\gamma} \left(\langle T_{\gamma} \rangle^{\gamma} - \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda} \right) + r_{\lambda\lambda} \dot{\mathcal{M}}_{\lambda\gamma} \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda} + r_{\lambda\gamma} \dot{\mathcal{M}}_{\lambda\gamma} \langle T_{\gamma} \rangle^{\gamma} + m_{\lambda} \dot{\mathcal{M}}_{\lambda\gamma} \\
\dot{\mathcal{F}}_{\gamma} &= \mathbf{b}_{\gamma\omega} \times \mathbf{\tilde{N}} \langle T_{\omega} \rangle^{\omega} + \mathbf{b}_{\gamma\gamma} \times \mathbf{\tilde{N}} \langle T_{\gamma} \rangle^{\gamma} + \mathbf{b}_{\gamma\lambda} \times \mathbf{\tilde{N}} \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda} + S_{\gamma} \left(\langle T_{\omega} \rangle^{\omega} - \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda} \right) \\
&- S_{\gamma\lambda} \left(\langle T_{\gamma} \rangle^{\gamma} - \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda} \right) + r_{\gamma\lambda} \dot{\mathcal{M}}_{\lambda\gamma} \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda} + r_{\gamma\gamma} \dot{\mathcal{M}}_{\lambda\gamma} \langle T_{\gamma} \rangle^{\gamma} + m_{\gamma} \dot{\mathcal{M}}_{\lambda\gamma} \end{aligned} \tag{IV.29}$$

Donde los términos del tipo $\mathbf{b}_{\alpha\beta} \times \mathbf{\tilde{N}} \langle T_{\alpha} \rangle^{\alpha}$ en las ecuaciones (IV.27) a (IV.29) indican contribuciones de tipo difusivo por la estructura de los términos de donde provienen y se han señalado, los términos del tipo $S_{\alpha\beta} \left(\langle T_{\alpha} \rangle^{\alpha} - \langle T_{\beta} \rangle^{\beta} \right)$ en (IV.27) a (IV.29) indican transferencia de energía similar a la ley de enfriamiento; y los términos que contienen $M_{\lambda\gamma}$ dependen de la tasa de evaporación que ocurre en el proceso. Los coeficientes $\mathbf{b}_{\alpha\beta}$, $S_{\alpha\beta}$, $r_{\alpha\beta}$, $M_{\lambda\gamma}$, y m_{α} se consideran constantes en este desarrollo, aquí α , $\beta = \omega$, λ y γ , para las ecuaciones (IV.27) a (IV.29). Las variables restantes mantienen el mismo significado. De acuerdo a la inserción de las variables definidas como desviaciones de la temperatura \not{p}_{α} , se requiere entonces resolver problemas llamados de cerradura, es decir encontrar el valor de los coeficientes de las ecuaciones (IV.27) a (IV.29) que constituyen las desviaciones. En este sentido se presentan los problemas de cerradura generados al sustituir las definiciones (IV.27) a (IV.29) en las ecuaciones (IV.16) a (IV.18) y sus respectivas condiciones de forntera aplicando álgebra en esta operación, así como la consideración de falso estado estacionario debido a las restricciones impuestas en las ecuaciones (A.2.28) y (A.2.29) del Apéndice A.2, que dicen que la variación de las desviaciones con respecto al tiempo es menor que el producto de la conductividad térmica con el Laplaciano de las desviaciones, es decir, la contribución de las variaciones por acumulación es menor que la realizada por el término de conducción; el desarrollo en extenso de este procedimiento se puede consultar en el Apéndice A.3; entonces al realizar las operaciones mencionadas se generan ocho problemas de cerradura, cada uno con tres coeficientes desconocidos, por ejemplo para los coeficientes $\mathbf{b}_{\omega\omega}$, $\mathbf{b}_{\lambda\omega}$ y $\mathbf{b}_{\gamma\omega}$, se tiene el problema I dado por:

Problema I

En

Problema de $\mathbf{b}_{\omega\omega}$, $\mathbf{b}_{\lambda\omega}$ y $\mathbf{b}_{\gamma\omega}$ En la región ω : $k_{\omega}\nabla^{2}\mathbf{b}_{\omega\omega} = \mathbf{\epsilon}_{\omega}^{-1}\mathbf{c}_{\omega\omega}$

En
$$A_{\omega\lambda}$$
 $\mathbf{b}_{\omega\omega} = \mathbf{b}_{\lambda\omega}$ (IV.31)

$$\mathbf{n}_{\lambda\omega} \cdot k_{\lambda} \nabla \mathbf{b}_{\lambda\omega} = \mathbf{n}_{\lambda\omega} \cdot k_{\omega} \nabla \mathbf{b}_{\omega\omega} + \mathbf{n}_{\lambda\omega} k_{\omega}$$
(IV.32)

la fase
$$\lambda$$
: $(\rho C_p)_{\lambda} \mathbf{v}_{\lambda} \nabla \mathbf{b}_{\lambda\omega} = k_{\lambda} \nabla^2 \mathbf{b}_{\lambda\omega} + \varepsilon_{\lambda}^{-1} \mathbf{c}_{\gamma\omega} + \varepsilon_{\lambda}^{-1} \mathbf{c}_{\omega\omega}$ (IV.33)

En
$$A_{\lambda\gamma}$$
 $\mathbf{b}_{\lambda\omega} = \mathbf{b}_{\gamma\omega}$ (IV.34)

$$\mathbf{y} \qquad -\mathbf{n}_{\gamma\lambda} \cdot k_{\lambda} \nabla \mathbf{b}_{\lambda\omega} = -\mathbf{n}_{\gamma\lambda} \cdot k_{\gamma} \nabla \mathbf{b}_{\gamma\omega} \qquad (IV.35)$$

En la fase
$$\gamma$$
: $(\rho C_{\rho})_{\gamma} \mathbf{v}_{\gamma} \cdot \nabla \mathbf{b}_{\gamma\omega} = k_{\gamma} \nabla^2 \mathbf{b}_{\gamma\omega} - \varepsilon_{\gamma}^{-1} \mathbf{c}_{\gamma\omega}$ (IV.36)

$$\langle \mathbf{b} \rangle^{\omega} = 0 \langle \mathbf{b} \rangle^{\lambda} = 0 \langle \mathbf{b} \rangle^{\gamma} = 0$$
 (IV.37)

Promedios

$$\left\langle \mathbf{b}_{\omega\omega} \right\rangle^{\omega} = 0 \quad \left\langle \mathbf{b}_{\lambda\omega} \right\rangle^{\lambda} = 0 \quad \left\langle \mathbf{b}_{\gamma\omega} \right\rangle^{\gamma} = 0 \quad (IV.37)$$

Condición de Periodicidad

у

$$\mathbf{b}_{\omega\omega}\left(\mathbf{r}+\mathbf{l}_{i}\right)=\mathbf{b}_{\omega\omega}\left(\mathbf{r}\right) \quad \mathbf{b}_{\lambda\omega}\left(\mathbf{r}+\mathbf{l}_{i}\right)=\mathbf{b}_{\lambda\omega}\left(\mathbf{r}\right) \quad \mathbf{b}_{\gamma\omega}\left(\mathbf{r}+\mathbf{l}_{i}\right)=\mathbf{b}_{\gamma\omega}\left(\mathbf{r}\right) \quad (IV.38)$$

(IV.30)

El total de los problemas de cerradura se presenta en el Apéndice A.3, como ya se ha mencionado, en las ecuaciones (IV.30) a (IV.38) los coeficientes $\mathbf{c}_{\alpha\beta}$, son contribuciones por el intercambio de energía interfacial con la forma general dada por $\frac{1}{V} \int_{\mathbf{A}_{\alpha\beta}} \mathbf{n}_{\alpha\beta} \cdot k_{\alpha} \nabla \mathbf{b}_{\alpha\beta} dA$ y el desarrollo para la definición de estas contribuciones se presenta

en el Apéndice A.2. El procedimiento para solucionar las ecuaciones diferenciales de las desviaciones es formando problemas de valor a la frontera, por el método de superposición de variables, para obtener problemas menos complejos de resolver analíticamente, sin embargo, aun se presentan demasiado complejos, para el desarrollo general consultar el Apéndice A.7. En este sentido se presenta a continuación la forma en la que se aplica el método de superposición de variables a los problemas de cerradura, para esta aplicación es necesario proponer una descomposición de cada variable de las desviaciones en diversas contribuciones resultado del análisis de la estructura del problema de cerradura, ecuaciones (IV.30) a (IV.38), por ejemplo en la ecuación (IV.33) se tienen contribuciones que contienen $\mathbf{c}_{\infty }$ y $\mathbf{c}_{\gamma 0}$, términos involucrados en las ecuaciones (IV.30) y (IV.36) respectivamente, así la descomposición de variables de cerradura en base a este análisis para este ejemplo, está dado por:

$$\mathbf{b}_{\omega\omega} = \mathbf{b}_{\omega\omega}^{\prime} + \mathbf{B}_{\omega\omega} \quad \mathbf{c}_{\omega\omega} + \mathbf{A}_{\omega\omega} \quad \mathbf{c}_{\gamma\omega} \tag{IV.39}$$

$$\mathbf{b}_{\lambda\omega} = \mathbf{b}_{\lambda\omega}^{\prime} + \mathbf{B}_{\lambda\omega} \quad \mathbf{c}_{\gamma\omega} + \mathbf{A}_{\lambda\omega} \quad \mathbf{c}_{\omega\omega} \tag{IV.40}$$

$$\mathbf{b}_{\gamma\omega} = \mathbf{b}_{\gamma\omega} + \mathbf{B}_{\gamma\omega} \quad \mathbf{c}_{\gamma\omega} + \mathbf{A}_{\gamma\omega} \quad \mathbf{c}_{\omega\omega} \tag{IV.41}$$

Como una consecuencia lógica de la metodología que se sigue, es necesario encontrar la forma de los coeficientes $\mathbf{c}_{\alpha\beta}$, con α , $\beta = \omega$, λ , γ , y para esto se hace valer la condición dada por la ecuaciones (IV.37), que dicen que el promedio intrínseco de la temperatura en las tres fases es igual a cero, entonces aplicando esta condición y la definición de la ecuaciones (IV.39) a (IV.41), pueden escribirse las siguientes expresiones para los coeficientes efectivos:

$$\mathbf{c}_{\omega\omega} = -\left(\left\langle \mathbf{A}_{\lambda\omega} \right\rangle^{\lambda}\right)^{-1} \left\langle \mathbf{b}_{\lambda\omega} \right\rangle^{\lambda} \tag{IV.42}$$

$$\mathbf{c}_{\gamma\omega} = -\left(\left\langle \mathbf{B}_{\gamma\omega} \right\rangle^{\gamma}\right)^{-1} \left\langle \mathbf{b}_{\gamma\omega} \right\rangle^{\gamma} \tag{IV.43}$$

las ecuaciones (IV.34) a (IV.36), son uno de los resultados intermedios necesarios para la deducción de un modelo de transporte de energía en ecuaciones promedio, y a este respecto los coeficientes de las ecuaciones en mención quedarán determinados al resolver el problema de cerradura de este trabajo. Como puede observarse en las ecuaciones (IV.31) a (IV.33), están presentes las contribuciones $\mathbf{c}_{\omega\omega}$ y $\mathbf{c}_{\gamma\omega}$, ya mencionadas; y si bien en la región porosa ω , el coeficiente $\mathbf{c}_{\gamma\omega}$, no participa, y por tanto su valor es cero, es necesario proponer estas formas para la simplificación de la solución de los nuevos problemas generados por el método de superposición de variables para obtener problemas homogéneos, como los aquí presentados:

Aplicando las descomposiciones (A.7.1) a (A.7.3) del Apéndice A.7 al primer problema de cerradura (apéndice A.3), se tiene:

En la región Porosa ω:

$$0 = k_{\omega} \nabla^2 \left[\mathbf{b}_{\omega\omega} + \mathbf{B}_{\omega\omega} \quad \mathbf{c}_{\omega\omega} + \mathbf{A}_{\omega\omega} \quad \mathbf{c}_{\gamma\omega} \right] - \varepsilon_{\omega}^{-1} \mathbf{c}_{\omega\omega}$$
(IV.45)

Sujeta a las siguientes condiciones a la frontera: En la interfase $A_{\omega\lambda}$

$$\mathbf{b}_{\omega\omega}^{\prime} + \mathbf{B}_{\omega\omega} \quad \mathbf{c}_{\omega\omega} + \mathbf{A}_{\omega\omega} \quad \mathbf{c}_{\gamma\omega} = \mathbf{b}_{\lambda\omega}^{\prime} + \mathbf{B}_{\lambda\omega} \quad \mathbf{c}_{\gamma\omega} + \mathbf{A}_{\lambda\omega} \quad \mathbf{c}_{\omega\omega}$$
(IV.46)

У

$$\mathbf{n}_{\lambda\omega} \ k_{\lambda} \nabla \Big[\mathbf{b}_{\lambda\omega}^{\prime} + \mathbf{B}_{\lambda\omega} \ \mathbf{c}_{\gamma\omega} + \mathbf{A}_{\lambda\omega} \ \mathbf{c}_{\omega\omega} \Big] = \mathbf{n}_{\lambda\omega} \ k_{\omega} \nabla \Big[\mathbf{b}_{\omega\omega}^{\prime} + \mathbf{B}_{\omega\omega} \ \mathbf{c}_{\omega\omega} + \mathbf{A}_{\omega\omega} \ \mathbf{c}_{\gamma\omega} \Big] + \mathbf{n}_{\lambda\omega} k_{\omega}$$
(IV.47)

En la fase λ :

$$\left(\rho C_{p}\right)_{\lambda} \mathbf{v}_{\lambda} \nabla \left[\mathbf{b}_{\lambda\omega}^{\prime} + \mathbf{B}_{\lambda\omega} \quad \mathbf{c}_{\gamma\omega} + \mathbf{A}_{\lambda\omega} \quad \mathbf{c}_{\omega\omega}\right] = k_{\lambda} \nabla^{2} \left[\mathbf{b}_{\lambda\omega}^{\prime} + \mathbf{B}_{\lambda\omega} \quad \mathbf{c}_{\gamma\omega} + \mathbf{A}_{\lambda\omega} \quad \mathbf{c}_{\omega\omega}\right]$$
$$+ \varepsilon_{\lambda}^{-1} \mathbf{c}_{\gamma\omega} + \varepsilon_{\lambda}^{-1} \mathbf{c}_{\omega\omega}$$
(IV.48)

Sujeta a:

En la interfase $A_{\lambda\gamma}$

$$\mathbf{b}_{\lambda\omega}^{\prime} + \mathbf{B}_{\lambda\omega} \ \mathbf{c}_{\gamma\omega} + \mathbf{A}_{\lambda\omega} \ \mathbf{c}_{\omega\omega} = \mathbf{b}_{\gamma\omega}^{\prime} + \mathbf{B}_{\gamma\omega} \ \mathbf{c}_{\gamma\omega} + \mathbf{A}_{\gamma\omega} \ \mathbf{c}_{\omega\omega}$$
(IV.49)

У

$$-\mathbf{n}_{\gamma\lambda} \ k_{\lambda} \nabla \left[\mathbf{b}_{\lambda\omega}^{\prime} + \mathbf{B}_{\lambda\omega} \ \mathbf{c}_{\gamma\omega} + \mathbf{A}_{\lambda\omega} \ \mathbf{c}_{\omega\omega} \right] = -\mathbf{n}_{\gamma\lambda} \ k_{\gamma} \nabla \left[\mathbf{b}_{\gamma\omega}^{\prime} + \mathbf{B}_{\gamma\omega} \ \mathbf{c}_{\gamma\omega} + \mathbf{A}_{\gamma\omega} \ \mathbf{c}_{\omega\omega} \right]$$
(IV.50)

En la fase γ

$$\left(\rho C_{p}\right)_{\gamma} \mathbf{v}_{\gamma} \nabla \left[\mathbf{b}_{\gamma\omega}^{\prime} + \mathbf{B}_{\gamma\omega} \ \mathbf{c}_{\gamma\omega} + \mathbf{A}_{\gamma\omega} \ \mathbf{c}_{\omega\omega}\right] = k_{\gamma} \nabla^{2} \left[\mathbf{b}_{\gamma\omega}^{\prime} + \mathbf{B}_{\gamma\omega} \ \mathbf{c}_{\gamma\omega} + \mathbf{A}_{\gamma\omega} \ \mathbf{c}_{\omega\omega}\right] - \varepsilon_{\gamma}^{-1} \mathbf{c}_{\gamma\omega}$$
(IV.51)

Promedios

$$\langle \mathbf{b}_{\omega\omega} \rangle^{\omega} = 0 \qquad \langle \mathbf{b}_{\lambda\omega} \rangle^{\lambda} = 0 \qquad \langle \mathbf{b}_{\gamma\omega} \rangle^{\gamma} = 0 \qquad (IV.52)$$

Periodicidad

$$\mathbf{b}_{\omega\omega}\left(\mathbf{r}+\mathbf{l}_{i}\right)=\mathbf{b}_{\omega\omega}\left(\mathbf{r}\right) \qquad \mathbf{b}_{\lambda\omega}\left(\mathbf{r}+\mathbf{l}_{i}\right)=\mathbf{b}_{\lambda\omega}\left(\mathbf{r}\right) \qquad \mathbf{b}_{\gamma\omega}\left(\mathbf{r}+\mathbf{l}_{i}\right)=\mathbf{b}_{\gamma\omega}\left(\mathbf{r}\right) \quad (IV.53)$$

Continuando con la estrategia utilizada, se genera el siguiente conjunto de problemas de valor a la frontera, para cada coeficiente de los utilizados en la forma propuesta para las desviaciones de la temperatura y se escribe a manera de ejemplo el primer problema para el coeficiente $\mathbf{b}_{\omega\omega}$ de la ecuación (IV.31) que indirectamente define el coeficiente $\mathbf{b}_{\omega\omega}$ de la ecuación (IV.19); el procedimiento para el total de los coeficientes se presenta en el Apéndice A.7, donde se desarrolla paso a paso la obtención de este resultado:

Problema I' En la región ω:

$$\nabla^2 \mathbf{b}_{00} = 0 \tag{IV.54}$$

En la interfase $A_{\omega\lambda}$

$$\mathbf{b}_{\omega\omega}^{\prime} = \mathbf{b}_{\lambda\omega}^{\prime} \tag{IV.55}$$

$$\mathbf{n}_{\lambda\omega} \ k_{\lambda} \nabla \mathbf{b}_{\lambda\omega}^{\prime} = \mathbf{n}_{\lambda\omega} \ k_{\omega} \nabla \mathbf{b}_{\omega\omega}^{\prime} + \mathbf{n}_{\lambda\omega} k_{\omega}$$
(IV.56)

En la fase λ :

$$\left(\rho C_{p}\right)_{\lambda} \mathbf{v}_{\lambda} \nabla \mathbf{b}_{\lambda\omega} = k_{\lambda} \nabla^{2} \mathbf{b}_{\lambda\omega}$$
(IV.57)

En la interfase $A_{\lambda\nu}$

$$\mathbf{b}_{\lambda\omega}^{\prime} = \mathbf{b}_{\gamma\omega}^{\prime} \tag{IV.58}$$

$$-\mathbf{n}_{\gamma\lambda} \ k_{\lambda} \nabla \mathbf{b}_{\lambda\omega}^{\prime} = -\mathbf{n}_{\gamma\lambda} \ k_{\gamma} \nabla \mathbf{b}_{\gamma\omega}^{\prime} \tag{IV.59}$$

En la fase γ

$$\left(\rho C_{p}\right)_{\gamma} \mathbf{v}_{\gamma} \nabla \mathbf{b}_{\gamma \omega} = k_{\gamma} \nabla^{2} \mathbf{b}_{\gamma \omega}$$
(IV.60)

Promedios

$$\langle \mathbf{b}_{\omega\omega} \rangle^{\omega} = 0 \qquad \langle \mathbf{b}_{\lambda\omega} \rangle^{\lambda} = 0 \qquad \langle \mathbf{b}_{\gamma\omega} \rangle^{\gamma} = 0 \quad (IV.61)$$

Condición de periodicidad

$$\mathbf{b}_{\omega\omega}\left(\mathbf{r}+\mathbf{l}_{i}\right)=\mathbf{b}_{\omega\omega}\left(\mathbf{r}\right) \qquad \mathbf{b}_{\lambda\omega}\left(\mathbf{r}+\mathbf{l}_{i}\right)=\mathbf{b}_{\lambda\omega}\left(\mathbf{r}\right) \qquad \mathbf{b}_{\gamma\omega}\left(\mathbf{r}+\mathbf{l}_{i}\right)=\mathbf{b}_{\gamma\omega}\left(\mathbf{r}\right) \quad (IV.62)$$

De esta manera se forman los problemas de valor a la frontera con características en su estructura tales que permiten consideran la aplicación de celdas para la solución de los mismos, las celdas mencionadas son herramientas que permiten tener condiciones de frontera homogéneas partiendo de la consideración de la condición de periodicidad ecuaciones (IV.54), en el volumen muestra ∨, generándose valores conocidos de las variables en las interfases del sistema. Existen diferentes tipos de celdas en la literatura; la idea general de estas celdas se basa en que una celda unitaria rectangular contenga la o las fases dispersas del sistema y que las condiciones de frontera cambien en la nueva frontera creada por cada celda, de este modo se generan celdas unitarias simétricas para medios porosos espaciados periódicamente, una propuesta de esta metodología se encuentra en los Apéndices A.9 y A.10, sin embargo para efectos de este trabajo sólo se menciona como anexo al resultado, que es el modelo en ecuaciones promedio de energía, obtenidas a este punto. En la Sección siguiente se presentan los resultados obtenidos de la aplicación del Método del Promedio Volumétrico a un sistema trifásico.

V. Resultados

a. Ecuaciones Promedio y coeficientes efectivos de transporte

En esta sección se presentan las ecuaciones promedio de energía del sistema trifásico, este conjunto de ecuaciones es el modelo que podrá predecir el comportamiento de los perfiles de temperatura generados por los diferentes procesos de intercambio de calor en el sistema.

i. De la región porosa ω

Para la región porosa ω, la ecuación promedio está dada por la expresión:

$$\begin{pmatrix} \rho C_{p} \end{pmatrix}_{\text{E}} & \left\{ \begin{array}{c} \frac{\partial \langle T_{\omega} \rangle^{\omega}}{\partial t_{\text{E}}} + \mathbf{u}_{\text{E}} \cdot \nabla \langle T_{\omega} \rangle^{\omega} + \mathbf{u}_{\text{E}} \cdot \nabla \langle T_{\gamma} \rangle^{\gamma} + \mathbf{u}_{\omega} \cdot \nabla \langle T_{\omega} \rangle^{\lambda} \\ \text{BE} \stackrel{\text{E}}{\underset{\text{Lowerison}}} & \left\{ \begin{array}{c} \nabla \cdot \left(\mathbf{K}_{\omega\omega} \cdot \nabla \langle T_{\omega} \rangle^{\omega} + \mathbf{K}_{\omega\gamma} \cdot \nabla \langle T_{\gamma} \rangle^{\gamma} + \mathbf{K}_{\omega\lambda} \cdot \nabla \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda} \right) + d_{\lambda}^{\lambda\omega} h_{1} \left(\langle T_{\omega} \rangle^{\omega} - \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda} \right) \\ \text{BE} \stackrel{\text{E}}{\underset{\text{E}}} & \text{E} \stackrel{\text{E}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}}{\underset{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}} \stackrel{\text{E}} \stackrel{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}} \stackrel{\text{E}}} \stackrel{\text{E}} \stackrel{\text{E}} \stackrel{\text{E}}} \stackrel{\text{E}} \stackrel{\text{E}} \stackrel{\text{E}}} \stackrel{\text{E}} \stackrel{\text{E}} \stackrel{\text{$$

En la ecuación (V.1), el primer término del lado izquierdo es de acumulación y del segundo a cuarto términos refieren de contribuciones tipo convección, mediante los coeficientes efectivos que involucran, $\mathbf{u}_{\omega\omega}$, $\mathbf{u}_{\omega\gamma}$ y $\mathbf{u}_{\omega\lambda}$. Así el primer término del lado derecho de la ecuación indica el transporte por conducción, segundo y tercero de intercambio de calor interfacial en forma de ley de enfriamiento, cuarto y quinto términos involucran la evaporación y el último el calor por reacción química; que se lleva a cabo en la Región Porosa. La ecuación (V.1), está en función de coeficientes efectivos, cuyos desarrollos completos se presentan en el Apéndice A.4, los cuales se detallan a continuación:

$$\mathbf{K}_{\omega\omega} = \varepsilon_{\omega} k_{\omega} \left(\mathbf{I} + \frac{1}{V_{\omega}} \int_{A_{\omega\lambda}} \mathbf{n}_{\omega\lambda} \mathbf{b}_{\omega\omega} dA \right) \quad \text{Tensor de conductividad térmica efectiva} \quad (V.2)$$

Donde

$$\mathbf{b}_{\omega\omega} = \mathbf{b}_{\omega\omega}^{\prime} + \mathbf{B}_{\omega\omega} \quad \mathbf{c}_{\omega\omega} + \mathbf{A}_{\omega\omega} \quad \mathbf{c}_{\gamma\omega} \tag{V.3}$$

Por el método de superposición de variables (Apéndice A.7) y

$$\mathbf{c}_{\omega\omega} = -\left(\left\langle \mathbf{A}_{\lambda\omega} \right\rangle^{\lambda}\right)^{-1} \left\langle \mathbf{b}_{\lambda\omega} \right\rangle^{\lambda} \tag{V.4}$$

$$\mathbf{c}_{\gamma\omega} = -\left(\left\langle \mathbf{B}_{\gamma\omega} \right\rangle^{\gamma}\right)^{-1} \left\langle \mathbf{b}_{\gamma\omega} \right\rangle^{\gamma} \tag{V.5}$$

$$\mathbf{K}_{\omega\gamma} = \frac{\varepsilon_{\omega} k_{\omega}}{V_{\omega}} \left(\int_{A_{\omega\lambda}} \mathbf{n}_{\omega\lambda} \mathbf{b}_{\omega\gamma} dA \right)$$
 Tensor de conductividad térmica efectiva (V.6)

Donde

$$\mathbf{b}_{\omega\gamma} = \mathbf{b}_{\omega\gamma}' + \mathbf{B}_{\omega\gamma} \quad \mathbf{c}_{\omega\gamma} + \mathbf{A}_{\omega\gamma} \quad \mathbf{c}_{\gamma\gamma} \tag{V.7}$$

Por el método de superposición de variables (Apéndice A.7) y

$$\mathbf{c}_{\omega\gamma} = -\left(\left\langle \mathbf{A}_{\lambda\gamma} \right\rangle^{\lambda}\right)^{-1} \left\langle \mathbf{b}_{\lambda\gamma} \right\rangle^{\lambda} \tag{V.8}$$

$$\mathbf{c}_{\gamma\gamma} = -\left(\left\langle \mathbf{B}_{\gamma\gamma} \right\rangle^{\gamma}\right)^{-1} \left\langle \mathbf{b}_{\gamma\gamma} \right\rangle^{\gamma} \tag{V.9}$$

$$\mathbf{K}_{\omega\lambda} = \frac{k_{\omega}}{V_{\omega}} \int_{A_{\omega\lambda}} \mathbf{n}_{\omega\lambda} \mathbf{b}_{\omega\lambda} dA \qquad \text{Tensor de conductividad térmica efectiva} \quad (V.10)$$

Donde

$$\mathbf{b}_{\omega\lambda} = \mathbf{b}_{\omega\lambda}^{\prime} + \mathbf{B}_{\omega\lambda} \quad \mathbf{c}_{\omega\lambda} + \mathbf{A}_{\omega\lambda} \quad \mathbf{c}_{\gamma\lambda} \tag{V.11}$$

Por el método de superposición de variables (Apéndice A.7) y

$$\mathbf{c}_{\omega\lambda} = -\left(\left\langle \mathbf{A}_{\lambda\lambda} \right\rangle^{\lambda}\right)^{-1} \left\langle \mathbf{b}_{\lambda\lambda}^{\prime} \right\rangle^{\lambda} \tag{V.12}$$

$$\mathbf{c}_{\gamma\lambda} = -\left(\left\langle \mathbf{B}_{\gamma\lambda} \right\rangle^{\gamma}\right)^{-1} \left\langle \mathbf{b}_{\gamma\lambda} \right\rangle^{\gamma} \tag{V.13}$$

$$\mathbf{u}_{\omega\omega} = \mathbf{c}_{\omega\omega} + \frac{k_{\omega}}{V} \int_{A_{\omega\lambda}} \mathbf{n}_{\omega\lambda} S_{\omega\lambda} dA \qquad \text{Coeficiente efectivo tipo convección} \qquad (V.14)$$

Donde

$$S_{\omega\lambda} = S_{\omega\lambda}^{\prime} + d_{\omega\lambda}h_1 + p_{\omega\lambda}h_3 \qquad (V.15)$$

Por el método de superposición de variables (Apéndice A.7) y

$$h_{\rm l} = -\frac{\left\langle S_{\lambda\omega}^{\,\prime} \right\rangle^{\lambda}}{\left\langle p_{\lambda\omega} \right\rangle^{\lambda}} \tag{V.16}$$

$$h_{3} = -\frac{\left\langle S_{\gamma}^{\,\prime} \right\rangle^{\gamma}}{\left\langle d_{\gamma} \right\rangle^{\gamma}} \tag{V.17}$$

$$\mathbf{u}_{\omega\gamma} = \mathbf{c}_{\omega\gamma} + \frac{k_{\omega}}{\nabla} \int_{A_{\omega\lambda}} \mathbf{n}_{\omega\lambda} S_{\omega} dA + \left(\frac{k_{\omega}}{\nabla} \int_{A_{\omega\lambda}} \mathbf{n}_{\omega\lambda} r_{\omega\gamma} dA\right) \bar{M}_{\lambda\gamma}$$

Coeficiente efectivo tipo convección (V.18)

Donde

$$S_{\omega} = S_{\omega}' + d_{\omega}h_2 + p_{\omega}h_4 \tag{V.19}$$

Por el método de superposición de variables (Apéndice A.7) y

$$h_{2} = -\frac{\left\langle S_{\lambda\gamma}^{*} \right\rangle^{\lambda}}{\left\langle P_{\lambda\gamma} \right\rangle^{\lambda}} \tag{V.20}$$

$$h_4 = -\frac{\left\langle S_{\gamma\lambda} \right\rangle^{\gamma}}{\left\langle d_{\gamma\lambda} \right\rangle^{\gamma}} \tag{V.21}$$

Y además

$$r_{\omega\gamma} = r_{\omega\gamma} + d_{\omega\gamma} f_{\omega\gamma} + p_{\omega\gamma} f_{\gamma\gamma}$$
(V.22)

Por el método de superposición de variables (Apéndice A.7) y

$$f_{\omega\gamma} = -\frac{\left\langle r_{\lambda\gamma}^{\prime} \right\rangle^{\lambda}}{\left\langle p_{\lambda\gamma} \right\rangle^{\lambda}} \tag{V.23}$$

$$f_{\gamma\gamma} = -\frac{\left\langle r_{\gamma\gamma}^{\prime} \right\rangle^{\gamma}}{\left\langle d_{\gamma\gamma} \right\rangle^{\gamma}} \tag{V.24}$$

$$\mathbf{u}_{\omega\lambda} = \mathbf{c}_{\omega\lambda} - \frac{k_{\omega}}{\nabla} \int_{A_{\omega\lambda}} \mathbf{n}_{\omega\lambda} S_{\omega\lambda} dA - \frac{k_{\omega}}{\nabla} \int_{A_{\omega\lambda}} \mathbf{n}_{\omega\lambda} S_{\omega} dA + \left(\frac{k_{\omega}}{\nabla} \int_{A_{\omega\lambda}} \mathbf{n}_{\omega\lambda} r_{\omega\gamma} dA\right) \dot{M}_{\lambda\gamma}$$

Coeficiente efectivo tipo convección (V.25)

Donde los coeficientes $S_{\omega\lambda}$, S_{ω} y $r_{\omega\gamma}$ mantienen el significado dado. A este punto es necesario mencionar que los tensores efectivos de conductividad térmica $\mathbf{K}_{\omega\omega}$, $\mathbf{K}_{\omega\gamma}$ y $\mathbf{K}_{\omega\lambda}$ y los efectivos de tipo convección $\mathbf{u}_{\omega\omega}$, $\mathbf{u}_{\omega\gamma}$ y $\mathbf{u}_{\omega\lambda}$, se han desarrollado para la región porosa y se espera que algunos de ellos no existan en el modelo final o que su contribución sea despreciable con respecto a sus símil en el proceso de transporte y por lo tanto no se consideren. Al solucionar los problemas de cerradura correspondientes a los coeficientes de este de las ecuaciones (V.1) a (V.25) en el Apéndice 10, se obtiene el resultado para la ecuación promedio y los coeficientes efectivos de la región porosa bajo la consideración de que no se tiene presencia de un campo de velocidad como una primera aproximación de solución mediante la aplicación de la Celda de Chang:

$$\left(\rho C_{p}\right)_{\omega}\varepsilon_{\omega}\frac{\partial\left\langle T_{\omega}\right\rangle^{\omega}}{\partial t}=\nabla\cdot\left(\mathbf{K}_{\omega\omega}\cdot\nabla\left\langle T_{\omega}\right\rangle^{\omega}+\mathbf{K}_{\omega\gamma}\cdot\nabla\left\langle T_{\gamma}\right\rangle^{\gamma}+\mathbf{K}_{\omega\lambda}\cdot\nabla\left\langle T_{\lambda}\right\rangle^{\lambda}\right)+\varepsilon_{\omega}\left\langle\Phi_{\omega}\right\rangle^{\omega}\quad(V.26)$$

Donde

$$\mathbf{K}_{\omega\omega} = \varepsilon_{\omega} k_{\omega} \left(\mathbf{I} + \frac{1}{V_{\omega}} \int_{A_{\omega\lambda}} \mathbf{n}_{\omega\lambda} \left(\xi B_{1\alpha} Cos(\theta) \right) dA \right)$$

Tensor de conductividad térmica efectiva (V.27)

$$\mathbf{K}_{\omega\gamma} = \frac{\varepsilon_{\omega}k_{\omega}}{V_{\omega}} \left(\int_{A_{\omega\lambda}} \mathbf{n}_{\omega\lambda} \left(\xi B_{2\alpha} Cos(\theta) \right) dA \right)$$

Tensor de conductividad térmica efectiva (V.28)

$$\mathbf{K}_{\omega\lambda} = \frac{k_{\omega}}{V_{\omega}} \int_{A_{\omega\lambda}} \mathbf{n}_{\omega\lambda} \left(\xi B_{3\alpha} \cos(\theta) \right) dA$$

Tensor de conductividad térmica efectiva (V.29)

$$\mathbf{u}_{\omega\omega} = 0$$
 Coeficiente efectivo tipo convección (V.30)

$$\mathbf{u}_{\omega\gamma} = 0$$
 Coeficiente efectivo tipo convección (V.31)

$$\mathbf{u}_{\omega\lambda} = 0$$
 Coeficiente efectivo tipo convección (V.32)

Las ecuaciones (V.27) a (V.29) son la expresión de los tensores de conductividad térmica efectiva obtenidos para la región porosa del sistema y los valores obtenidos para

 $\mathbf{u}_{\omega\omega}, \mathbf{u}_{\omega\gamma}, \mathbf{y}, \mathbf{u}_{\omega\lambda}$, ecuaciones (IV.30) a (IV.32) son los obtenidos por el hecho de no tener contribución de velocidad.

ii. De la Fase Gas y

Para la Fase Gas γ , la ecuación promedio está dada por la expresión:

En la ecuación (V.36), el segundo término del lado izquierdo de la ecuación es la cantidad de calor sensible acarreado entre fases, el tercer término de contribución por convección. El segundo término del lado derecho de la ecuación es del intercambio de calor interfacial. Los términos no mencionados representan la misma contribución que su símil en la región porosa.

La ecuación (V.36), está en función de coeficientes efectivos, cuyos desarrollos completos se presentan en el Apéndice 5, que a continuación se detallan:

$$\vec{E} = \frac{1}{V_{\lambda}} \int_{A_{\lambda\gamma}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\gamma} \cdot (\rho C_p)_{\lambda} T_{\lambda} (\mathbf{v}_{\lambda} - \mathbf{w}) dA = \begin{cases} \text{Rápidez de calor} \\ \text{sensible neto acarreado} \\ \text{por la cantidad de líquido} \\ \text{de } \lambda \text{ a } \gamma \end{cases} \left[= \right] \frac{E}{t}$$

$$\mathbf{n}_{\lambda\gamma} \cdot (\mathbf{v}_{\lambda} - \mathbf{w}) = \frac{\dot{M}_{\lambda\gamma}}{\rho_{\lambda} a_{\lambda\gamma}} = \begin{cases} \text{Rápidez de evaporación} \\ \text{neta de la fase líquida} \end{cases} = \dot{M}_{\lambda\gamma}$$

De igual forma se tienen los coeficientes efectivos:

$$\mathbf{K}_{\gamma\gamma} = \mathbf{\varepsilon}_{\gamma} k_{\gamma} \left[\mathbf{I} + \frac{1}{V_{\gamma}} \int_{A_{j\lambda}(t)} \mathbf{n}_{\gamma\lambda} \mathbf{b}_{\gamma\gamma} dA \right]$$
 Tensor de conductividad térmica efectiva (V.34)

Donde

$$\mathbf{b}_{\gamma\gamma} = \mathbf{b}_{\gamma\gamma} + \mathbf{B}_{\gamma\gamma} \quad \mathbf{c}_{\gamma\gamma} + \mathbf{A}_{\gamma\gamma} \quad \mathbf{c}_{\omega\gamma} \tag{V.35}$$

Por el método de superposición de variables (Apéndice A.7) y

$$\mathbf{c}_{\omega\gamma} = -\left(\left\langle \mathbf{A}_{\lambda\gamma} \right\rangle^{\lambda}\right)^{-1} \left\langle \mathbf{b}_{\lambda\gamma} \right\rangle^{\lambda} \tag{V.36}$$

$$\mathbf{c}_{\gamma\gamma} = -\left(\left\langle \mathbf{B}_{\gamma\gamma} \right\rangle^{\gamma}\right)^{-1} \left\langle \mathbf{b}_{\gamma\gamma} \right\rangle^{\gamma} \tag{V.37}$$

$$\mathbf{K}_{\gamma\omega} = \frac{\mathbf{\varepsilon}_{\gamma} k_{\gamma}}{V_{\gamma}} \int_{A_{j\lambda}(t)} \mathbf{n}_{\gamma\lambda} \mathbf{b}_{\gamma\omega} dA \qquad \text{Tensor de conductividad térmica efectiva} \quad (V.38)$$

Donde

$$\mathbf{b}_{\gamma\omega} = \mathbf{b}_{\gamma\omega}' + \mathbf{B}_{\gamma\omega} \quad \mathbf{c}_{\gamma\omega} + \mathbf{A}_{\gamma\omega} \quad \mathbf{c}_{\omega\omega} \tag{V.39}$$

Por el método de superposición de variables (Apéndice A.7) y

$$\mathbf{c}_{\omega\omega} = -\left(\left\langle \mathbf{A}_{\lambda\omega} \right\rangle^{\lambda}\right)^{-1} \left\langle \mathbf{b}_{\lambda\omega}^{\prime} \right\rangle^{\lambda} \tag{V.40}$$

$$\mathbf{c}_{\gamma\omega} = -\left(\left\langle \mathbf{B}_{\gamma\omega} \right\rangle^{\gamma}\right)^{-1} \left\langle \mathbf{b}_{\gamma\omega} \right\rangle^{\gamma} \tag{V.41}$$

у

$$\mathbf{K}_{\gamma\lambda} = \frac{\mathbf{\varepsilon}_{\gamma} k_{\gamma}}{V_{\gamma}} \int_{A_{j\lambda}(t)} \mathbf{n}_{\gamma\lambda} \mathbf{b}_{\gamma\lambda} dA \qquad \text{Tensor de conductividad térmica efectiva} \quad (V.42)$$

Donde

$$\mathbf{b}_{\gamma\lambda} = \mathbf{b}_{\gamma\lambda}^{\prime} + \mathbf{B}_{\gamma\lambda} \quad \mathbf{c}_{\gamma\lambda} + \mathbf{A}_{\gamma\lambda} \quad \mathbf{c}_{\omega\lambda} \tag{V.43}$$

Por el método de superposición de variables (Apéndice A.7) y

$$\mathbf{c}_{\omega\lambda} = -\left(\left\langle \mathbf{A}_{\lambda\lambda} \right\rangle^{\lambda}\right)^{-1} \left\langle \mathbf{b}_{\lambda\lambda} \right\rangle^{\lambda} \tag{V.44}$$

$$\mathbf{c}_{\gamma\lambda} = -\left(\left\langle \mathbf{B}_{\gamma\lambda} \right\rangle^{\gamma}\right)^{-1} \left\langle \mathbf{b}_{\gamma\lambda} \right\rangle^{\gamma} \tag{V.45}$$

$$\mathbf{u}_{\gamma\gamma} = \mathbf{c}_{\gamma\gamma} - \left(\frac{\varepsilon_{\gamma}k_{\gamma}}{V_{\gamma}}\int_{A_{\beta}(t)}\mathbf{n}_{\gamma\lambda}S_{\gamma\lambda}dA\right) + \left(\frac{\varepsilon_{\gamma}k_{\gamma}}{V_{\gamma}}\int_{A_{\beta}(t)}\mathbf{n}_{\gamma\lambda}r_{\gamma\gamma}dA\right)\vec{M}_{\lambda\gamma}$$

Coeficiente efectivo tipo convección (V.46)

Donde

$$S_{\gamma\lambda} = S_{\gamma\lambda} + d_{\gamma\lambda}h_4 + p_{\gamma\lambda}h_2 \tag{V.47}$$

Por el método de superposición de variables (Apéndice A.7) y

$$h_{2} = -\frac{\left\langle S_{\lambda\gamma}^{i} \right\rangle^{\lambda}}{\left\langle P_{\lambda\gamma} \right\rangle^{\lambda}} \tag{V.48}$$

$$h_{4} = -\frac{\left\langle S_{\gamma\lambda} \right\rangle^{\gamma}}{\left\langle d_{\gamma\lambda} \right\rangle^{\gamma}} \tag{V.49}$$

Y además

$$r_{\gamma\gamma} = r_{\gamma\gamma} + d_{\gamma\gamma} f_{\gamma\gamma} + p_{\gamma\gamma} f_{\omega\gamma}$$
(V.50)

Por el método de superposición de variables (Apéndice A.7) y

$$f_{\omega\gamma} = -\frac{\left\langle r_{\lambda\gamma}^{\prime} \right\rangle^{\lambda}}{\left\langle P_{\lambda\gamma} \right\rangle^{\lambda}} \tag{V.51}$$

$$f_{\gamma\gamma} = -\frac{\left\langle r_{\gamma\gamma}^{\prime} \right\rangle^{\gamma}}{\left\langle d_{\gamma\gamma} \right\rangle^{\gamma}} \tag{V.52}$$

$$\mathbf{u}_{\gamma\omega} = \mathbf{c}_{\gamma\omega} + \left(\frac{\varepsilon_{\gamma}k_{\gamma}}{V_{\gamma}}\int_{A_{j\lambda}(t)}\mathbf{n}_{\gamma\lambda}S_{\gamma}dA\right)$$

Coeficiente efectivo tipo convección (V.53)

Donde

$$S_{\gamma} = S_{\gamma} + d_{\gamma} h_3 + p_{\gamma} h_1 \tag{V.54}$$

Por el método de superposición de variables (Apéndice A.7) y

$$h_{\rm l} = -\frac{\left\langle S_{\lambda\omega}^{\,\prime} \right\rangle^{\lambda}}{\left\langle p_{\lambda\omega} \right\rangle^{\lambda}} \tag{V.55}$$

$$h_{3} = -\frac{\left\langle S_{\gamma} \right\rangle^{\gamma}}{\left\langle d_{\gamma} \right\rangle^{\gamma}} \tag{V.56}$$

$$\mathbf{u}_{\gamma\lambda} = \mathbf{c}_{\gamma\lambda} - \left(\frac{\varepsilon_{\gamma}k_{\gamma}}{V_{\gamma}}\int_{A_{\beta\lambda}(t)}\mathbf{n}_{\gamma\lambda}S_{\gamma}dA\right) + \left(\frac{\varepsilon_{\gamma}k_{\gamma}}{V_{\gamma}}\int_{A_{\beta\lambda}(t)}\mathbf{n}_{\gamma\lambda}S_{\gamma\lambda}dA\right) + \left(\frac{\varepsilon_{\gamma}k_{\gamma}}{V_{\gamma}}\int_{A_{\beta\lambda}(t)}\mathbf{n}_{\gamma\lambda}r_{\gamma\lambda}dA\right) \mathbf{M}_{\lambda\gamma}$$

Coeficiente efectivo tipo convección (V.57)

Donde los coeficientes mantienen el significado mostrado. En la fase gas, los coeficientes $\mathbf{K}_{\gamma\gamma}$, $\mathbf{K}_{\gamma\omega}$ y $\mathbf{K}_{\gamma\lambda}$, son los tensores de conductividad térmica efectivos y los coeficientes $\mathbf{u}_{\gamma\gamma}\mathbf{u}_{\gamma\omega}\mathbf{u}_{\gamma\lambda}$, son los coeficientes efectivos de tipo convección. Al solucionar los problemas de cerradura, apéndice 10, se obtiene el siguiente resultado para la ecuación promedio y los coeficientes efectivos de transporte:

$$\left(\rho C_{p}\right)_{\gamma}\left[\varepsilon_{\gamma}\frac{\partial\left\langle T_{\gamma}\right\rangle^{\gamma}}{\partial t}+\left\langle T_{\gamma}\right\rangle^{\gamma}\frac{\partial\varepsilon_{\gamma}}{\partial t}\right]=\nabla\cdot\left(\mathbf{K}_{\gamma\gamma}\times\mathbf{\tilde{N}}\left\langle T_{\gamma}\right\rangle^{\gamma}+\mathbf{K}_{\gamma\omega}\times\mathbf{\tilde{N}}\left\langle T_{\omega}\right\rangle^{\omega}+\mathbf{K}_{\gamma\lambda}\times\mathbf{\tilde{N}}\left\langle T_{\lambda}\right\rangle^{\lambda}\right) \quad (V.58)$$

$$\mathbf{K}_{\gamma\gamma} = \varepsilon_{\gamma} k_{\gamma} \left[\mathbf{I} + \frac{1}{V_{\gamma}} \int_{A_{\gamma\lambda}(t)}^{t} \mathbf{n}_{\gamma\lambda} \left(\left(\xi^{-1} - \xi \right) B_{2\mu} \cos\left(\theta\right) \right) dA \right]$$

Tensor de conductividad térmica efectiva (V.59)

$$\mathbf{K}_{\gamma\omega} = \frac{\varepsilon_{\gamma} k_{\gamma}}{V_{\gamma}} \int_{A_{\gamma\lambda}(t)} \mathbf{n}_{\gamma\lambda} \left(\left(\xi^{-1} - \xi \right) B_{1\mu} Cos(\theta) \right) dA$$

Tensor de conductividad térmica efectiva (V.60)

$$\mathbf{K}_{\gamma\lambda} = \frac{\varepsilon_{\gamma} k_{\gamma}}{V_{\gamma}} \int_{A_{\gamma\lambda}(t)} \mathbf{n}_{\gamma\lambda} \left(\left(\xi^{-1} - \xi \right) B_{3\mu} Cos(\theta) \right) dA$$

Tensor de conductividad térmica efectiva (V.61)

 $\mathbf{u}_{\gamma\gamma} = 0$ Coeficiente efectivo tipo convección

 $\mathbf{u}_{\gamma\omega} = 0$ Coeficiente efectivo tipo convección

(V.63)

$$\mathbf{u}_{\gamma\lambda} = 0$$
 Coeficiente efectivo tipo convección (V.64)

iii. De la Fase Líquida λ

Para la Fase Líquida λ , la ecuación promedio está dada por la expresión:

En la ecuación (V.65), debe notarse que a diferencia con la ecuación promedio de la fase gas, la de la fase líquida, presenta contribuciones dobles por un mismo fenómeno de transporte y esto es debido a su interacción tanto con la región porosa como con la fase gas. Los términos y sus contribuciones son semejantes a los de la fase gas. La ecuación (V.65), está en función de coeficientes efectivos, cuyos desarrollos completos se presentan en el Apéndice A.6, y a continuación se detallan los resultados obtenidos en los desarrollos mencionados:

$$\mathbf{K}_{\lambda\lambda} = \varepsilon_{\lambda} k_{\lambda} \left[\mathbf{I} + \frac{1}{\nabla} \int_{A_{\lambda\gamma}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\gamma} \mathbf{b}_{\lambda\lambda} dA + \frac{1}{\nabla} \int_{A_{\lambda\omega}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\omega} \mathbf{b}_{\lambda\lambda} dA \right]$$

Tensor de conductividad térmica efectiva (V.66)

Donde

$$\mathbf{b}_{\lambda\lambda} = \mathbf{b}_{\lambda\lambda}^{\prime} + \mathbf{B}_{\lambda\lambda} \quad \mathbf{c}_{\gamma\lambda} + \mathbf{A}_{\lambda\lambda} \quad \mathbf{c}_{\omega\lambda} \tag{V.67}$$

Por el método de superposición de variables (Apéndice A.7) y

$$\mathbf{c}_{\omega\lambda} = -\left(\left\langle \mathbf{A}_{\lambda\lambda} \right\rangle^{\lambda}\right)^{-1} \left\langle \mathbf{b}_{\lambda\lambda} \right\rangle^{\lambda} \tag{V.68}$$

$$\mathbf{c}_{\gamma\lambda} = -\left(\left\langle \mathbf{B}_{\gamma\lambda} \right\rangle^{\gamma}\right)^{-1} \left\langle \mathbf{b}_{\gamma\lambda} \right\rangle^{\gamma} \tag{V.69}$$

$$\mathbf{K}_{\lambda\omega} = \mathbf{\varepsilon}_{\lambda} k_{\lambda} \left[\frac{1}{\mathsf{V}} \int_{A_{\lambda\gamma}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\gamma} \mathbf{b}_{\lambda\omega} dA + \frac{1}{\mathsf{V}} \int_{A_{\lambda\omega}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\omega} \mathbf{b}_{\lambda\omega} dA \right]$$

Tensor de conductividad térmica efectiva (V.70)

Donde

$$\mathbf{b}_{\lambda\omega} = \mathbf{b}_{\lambda\omega}^{\prime} + \mathbf{B}_{\lambda\omega} \quad \mathbf{c}_{\gamma\omega} + \mathbf{A}_{\lambda\omega} \quad \mathbf{c}_{\omega\omega} \tag{V.71}$$

Por el método de superposición de variables (Apéndice A.7) y

$$\mathbf{c}_{\omega\omega} = -\left(\left\langle \mathbf{A}_{\lambda\omega} \right\rangle^{\lambda}\right)^{-1} \left\langle \mathbf{b}_{\lambda\omega} \right\rangle^{\lambda} \tag{V.72}$$

$$\mathbf{c}_{\gamma\omega} = -\left(\left\langle \mathbf{B}_{\gamma\omega} \right\rangle^{\gamma}\right)^{-1} \left\langle \mathbf{b}_{\gamma\omega} \right\rangle^{\gamma} \tag{V.73}$$

$$\mathbf{K}_{\lambda\gamma} = \varepsilon_{\lambda} k_{\lambda} \left[\frac{1}{\mathsf{V}} \int_{A_{\lambda\gamma}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\gamma} \mathbf{b}_{\lambda\gamma} dA + \frac{1}{\mathsf{V}} \int_{A_{\lambda\omega}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\omega} \mathbf{b}_{\lambda\gamma} dA \right]$$

Tensor de conductividad térmica efectiva (V.74)

Donde

$$\mathbf{b}_{\lambda\gamma} = \mathbf{b}_{\lambda\gamma} + \mathbf{B}_{\lambda\gamma} \ \mathbf{c}_{\gamma\gamma} + \mathbf{A}_{\lambda\gamma} \ \mathbf{c}_{\omega\gamma}$$
(V.75)

Por el método de superposición de variables (Apéndice A.7) y

$$\mathbf{c}_{\omega\gamma} = -\left(\left\langle \mathbf{A}_{\lambda\gamma} \right\rangle^{\lambda}\right)^{-1} \left\langle \mathbf{b}_{\lambda\gamma} \right\rangle^{\lambda} \tag{V.76}$$

$$\mathbf{c}_{\gamma\gamma} = -\left(\left\langle \mathbf{B}_{\gamma\gamma} \right\rangle^{\gamma}\right)^{-1} \left\langle \mathbf{b}_{\gamma\gamma} \right\rangle^{\gamma} \tag{V.77}$$

$$\mathbf{u}_{\lambda\lambda} = -\mathbf{c}_{\gamma\lambda} - \mathbf{c}_{\omega\lambda} + \frac{k_{\lambda}}{\nabla} \int_{A_{\lambda\gamma}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\gamma} S_{\lambda\omega} dA - \frac{k_{\lambda}}{\nabla} \int_{A_{\lambda\gamma}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\gamma} S_{\lambda\gamma} dA + \left(\frac{k_{\lambda}}{\nabla} \int_{A_{\lambda\gamma}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\gamma} r_{\lambda\lambda} dA\right) \dot{M}_{\lambda\gamma} + \frac{k_{\lambda}}{\nabla} \int_{A_{\lambda\omega}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\omega} S_{\lambda\omega} dA - \frac{k_{\lambda}}{\nabla} \int_{A_{\lambda\omega}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\omega} S_{\lambda\gamma} dA + \left(\frac{k_{\lambda}}{\nabla} \int_{A_{\lambda\omega}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\omega} r_{\lambda\lambda} dA\right) \dot{M}_{\lambda\gamma}$$

Coeficiente efectivo tipo convección (V.78)

Donde

$$S_{\lambda\omega} = S_{\lambda\omega}' + d_{\lambda\omega}h_3 + p_{\lambda\omega}h_1 \tag{V.79}$$

Por el método de superposición de variables (Apéndice A.7) y

$$h_{1} = -\frac{\left\langle S_{\lambda\omega} \right\rangle^{\lambda}}{\left\langle P_{\lambda\omega} \right\rangle^{\lambda}} \tag{V.80}$$

$$h_{3} = -\frac{\left\langle S_{\gamma} \right\rangle^{\gamma}}{\left\langle d_{\gamma} \right\rangle^{\gamma}} \tag{V.81}$$

$$\mathbf{u}_{\lambda\omega} = -\mathbf{c}_{\gamma\omega} - \mathbf{c}_{\omega\omega} - \frac{k_{\lambda}}{\mathsf{V}} \int_{A_{\lambda\gamma}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\gamma} S_{\lambda\omega} dA - \frac{k_{\lambda}}{\mathsf{V}} \int_{A_{\lambda\omega}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\omega} S_{\lambda\omega} dA$$

Coeficiente efectivo tipo convección (V.82)

Donde los coeficientes en (V.82) conservan su significado.

$$\mathbf{u}_{\lambda\gamma} = -\mathbf{c}_{\gamma\gamma} - \mathbf{c}_{\omega\gamma} + \frac{k_{\lambda}}{\nabla} \int_{A_{\lambda\gamma}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\gamma} S_{\lambda\gamma} dA + \frac{k_{\lambda}}{\nabla} \int_{A_{\lambda\omega}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\omega} S_{\lambda\gamma} dA + \left(\frac{k_{\lambda}}{\nabla} \int_{A_{\lambda\gamma}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\gamma} r_{\lambda\gamma} dA\right) \dot{M}_{\lambda\gamma} + \left(\frac{k_{\lambda}}{\nabla} \int_{A_{\lambda\omega}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\omega} r_{\lambda\gamma} dA\right) \dot{M}_{\lambda\gamma}$$

Coeficiente efectivo tipo convección (V.83)

Donde los coeficientes en (V.83) conservan su significado. Como en la fase anterior, los coeficientes $K_{\lambda\lambda}$, $K_{\lambda\omega}$ y $K_{\lambda\gamma}$, son tensores de conductividad térmica efectiva y $u_{\lambda\lambda}$, $u_{\lambda\omega}$ y $u_{\lambda\gamma}$, coeficientes efectivos de tipo convección, ambos tensores y coeficientes objetos de estudio de este trabajo, y aunque como resultado se obtienen las expresiones analíticas, aún existe trabajo por desarrollar, por otra parte estos coeficientes se espera contribuyan de forma incidente, mas no en la totalidad de los coeficientes en las ecuaciones de transporte de energía obtenidas al resolver los problemas de cerradura, Apéndice A.10, entonces el resultado para la ecuación promedio y los coeficientes efectivos de la fase líquida, de acuerdo a lo anterior y mediante la aplicación de la Celda de Chang, está dado por

$$\left(\rho C_{p}\right)_{\lambda} \varepsilon_{\lambda} \frac{\partial \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda}}{\partial t} + \left(\rho C_{p}\right)_{\lambda} \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda} \frac{\partial \varepsilon_{\lambda}}{\partial t} = \tilde{\mathbf{N}} \times \left[\mathbf{K}_{\lambda\lambda} \rtimes \tilde{\mathbf{N}} \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda} + \mathbf{K}_{\lambda\omega} \rtimes \tilde{\mathbf{N}} \langle T_{\omega} \rangle^{\omega} + \mathbf{K}_{\lambda\gamma} \rtimes \tilde{\mathbf{N}} \langle T_{\gamma} \rangle^{\gamma}\right]$$
(V.84)

$$\mathbf{K}_{\lambda\lambda} = \varepsilon_{\lambda} k_{\lambda} \left[\mathbf{I} + \frac{1}{\mathsf{V}} \int_{A_{\lambda\gamma}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\gamma} \left(\left(\xi + \varepsilon_{\omega} \xi^{-1} \right) B_{3\beta} \cos\left(\theta\right) \right) dA + \frac{1}{\mathsf{V}} \int_{A_{\lambda\omega}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\omega} \left(\left(\xi + \varepsilon_{\omega} \xi^{-1} \right) B_{3\beta} \cos\left(\theta\right) \right) dA \right] \right]$$
Tensor de conductividad térmica efectiva (V.85)

$$\mathbf{K}_{\lambda\omega} = \varepsilon_{\lambda} k_{\lambda} \left[\frac{1}{\mathsf{V}} \int_{A_{\lambda\gamma}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\gamma} \left(\left(\xi + \varepsilon_{\omega} \xi^{-1} \right) B_{1\beta} \cos\left(\theta\right) \right) dA + \frac{1}{\mathsf{V}} \int_{A_{\lambda\omega}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\omega} \left(\left(\xi + \varepsilon_{\omega} \xi^{-1} \right) B_{1\beta} \cos\left(\theta\right) \right) dA \right] \right]$$

Tensor de conductividad térmica efectiva (V.86)

$$\mathbf{K}_{\lambda\gamma} = \varepsilon_{\lambda} k_{\lambda} \left[\frac{1}{\mathsf{V}} \int_{A_{\lambda\gamma}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\gamma} \left(\left(\xi + \varepsilon_{\omega} \xi^{-1} \right) B_{2\beta} \cos(\theta) \right) dA + \frac{1}{\mathsf{V}} \int_{A_{\lambda\omega}(t)} \mathbf{n}_{\lambda\omega} \left(\left(\xi + \varepsilon_{\omega} \xi^{-1} \right) B_{2\beta} \cos(\theta) \right) dA \right] \right]$$

Tensor de conductividad térmica efectiva (V.87)

$$\mathbf{u}_{\lambda\lambda} = 0$$
 Coeficiente efectivo tipo convección

$$\mathbf{u}_{\lambda\omega} = 0$$

$$\mathbf{u}_{\lambda\omega} = 0$$

$$\mathbf{u}_{\lambda\gamma} = 0$$

$$\mathbf{v}_{\lambda\gamma} = 0$$

El modelo en ecuaciones promedio de energía del sistema trifásico está compuesto por las ecuaciones (V.1), (V.36) y (V.84), las cuales están en función de coeficientes efectivos de transporte de energía que se han calculado en el Apéndice A.10. Como se mencionó en los objetivos (§ II), la forma de los coeficientes efectivos de transporte de energía es otro de los resultados del desarrollo de este trabajo, los cuales se obtuvieron para cuando no existe un campo de velocidad, como aproximación de la solución del modelo de tres ecuaciones. En la siguiente sección se presentan las conclusiones que sobre los resultados se han formado.

b. Discusión (Análisis o comparación de los resultados de una investigación, a la luz de otros existentes o posibles.)

El modelo de un sistema trifásico como el de un reactor de HDS en ecuaciones promedio de transporte de energía está dado por el siguiente conjunto de ecuaciones, obtenidas en el desarrollo de este trabajo, cabe señalar que como parte de la discusión de resultados se presenta el análisis de la presencia o ausencia de algunos de los términos que componen cada ecuación, es decir en los desarrollos y la sección de resultados se exponen las ecuaciones con la totalidad de los términos calculados y en esta parte de la discusión se agregan las cuestiones físicas del sistema, como por ejemplo la ausencia de un campo de velocidad en la región porosa, ya que está fija y por lo tanto los términos debidos a la convección no aparecerán en la ecuación promedio que modela esta fase. A continuación se presenta este análisis.

De la región porosa ω



Se observa en (V.91) la presencia del término de generación por reacción química y se menciona debido a que sólo aparece en esta ecuación indicando que en las fases líquida y gas únicamente existe transporte de energía y no generación. En una segunda etapa de discusión se presentará el modelo simplificado de acuerdo a los encontrados en la literatura.

De la fase líquida λ

La ecuación que modela la fase líquida presenta contribución por convección a diferencia de la ecuación para la región porosa, y debido a la presencia de un campo de velocidad es que se cuenta con términos del tipo $\vec{E}_{\gamma\lambda}$ en (V.92) y que simboliza el transporte de calor entre fases debido a la diferencia de velocidad entre las interfases, aunado a esto el contacto físico entre la fase líquida con las fases restantes, región porosa y fase gas, duplican las contribuciones del mismo tipo, especificando el transporte de energía por diversos mecanismos hacia la región porosa y fase gas, como ya se ha señalado y por esta razón la ecuación promedio para la fase líquida es la que presenta mayor número de términos en comparación con las otras dos fases, que modelan el transporte de energía en el sistema.

De la Fase Gas y

La ecuación que modela la fase gas presenta contribución por convección a diferencia de la ecuación para la región porosa, y debido a la presencia de un campo de velocidad es que se cuenta con términos del tipo $\vec{E}_{\gamma\lambda}$ en (V.93) y que simboliza el transporte de calor entre fases debido a la diferencia de velocidad entre las interfases, es decir las contribuciones por convección empiezan a cobrar importancia en el modelo, y claro la ausencia de términos de generación de calor debido a que la reacción química se lleva a cabo en la región porosa. La ecuación para la fase gas se desarrolló considerando las condiciones de frontera que presenta y debido a que sólo tiene contacto con la fase líquida, presenta menor número de términos que la ecuación para la fase líquida como puede observarse al comparar visualmente ambas y cuya razón se explica en el contacto de la fase líquida con la región porosa, que la fase gas no presenta.

Condiciones de Frontera

Las ecuaciones promedio para las tres fases, ecuaciones (IV.91) a (IV.93) están sujetas a las siguientes condiciones de frontera.

En la interfase región porosa – fase líquida

$$\left\langle T_{\lambda}\right\rangle^{\lambda} + \not{T}_{\lambda} = \left\langle T_{\omega}\right\rangle^{\omega} + \not{T}_{\omega} \tag{V.94}$$

$$\mathbf{n}_{\lambda\omega} \times k_{\lambda} \nabla \dot{\mathcal{P}}_{\lambda} = \mathbf{n}_{\lambda\omega} \times k_{\omega} \tilde{\mathbf{N}} \, \dot{\mathcal{P}}_{\omega} + \mathbf{n}_{\lambda\omega} \times k_{\omega} \tilde{\mathbf{N}} \, \left\langle T_{\omega} \right\rangle^{\omega} - \mathbf{n}_{\lambda\omega} \times k_{\lambda} \tilde{\mathbf{N}} \, \left\langle T_{\lambda} \right\rangle^{\lambda} \qquad (V.95)$$

En la interfase fase líquida – fase gas

$$\langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda} + \not{T}_{\lambda} = \langle T_{\gamma} \rangle^{\gamma} + \not{T}_{\gamma}$$

$$(V.96)$$

$$- \mathbf{n}_{\lambda\gamma} \times k_{\lambda} \tilde{\mathbf{N}} \not{T}_{\lambda} = -\mathbf{n}_{\gamma\lambda} \times k_{\gamma} \tilde{\mathbf{N}} \not{T}_{\gamma} + \mathbf{n}_{\lambda} \times k_{\gamma} \tilde{\mathbf{N}} \not{T}_{\gamma} \rangle^{\lambda} - \mathbf{n}_{\lambda} \times k_{\gamma} \tilde{\mathbf{N}} \not{T}_{\gamma} \rangle^{\gamma}$$

$$= \mathbf{n}_{\gamma\lambda} \times k_{\gamma} \tilde{\mathbf{N}} \not{T}_{\gamma} + \mathbf{n}_{\lambda} \times k_{\gamma} \tilde{\mathbf{N}} \not{T}_{\gamma} \rangle^{\lambda} - \mathbf{n}_{\lambda} \times k_{\gamma} \tilde{\mathbf{N}} \not{T}_{\gamma} \rangle^{\gamma}$$

$$= \mathbf{n}_{\gamma\lambda} \times k_{\gamma} \tilde{\mathbf{N}} \not{T}_{\gamma} + \mathbf{n}_{\lambda} \times k_{\gamma} \tilde{\mathbf{N}} \not{T}_{\gamma} \rangle^{\lambda} - \mathbf{n}_{\lambda} \times k_{\gamma} \tilde{\mathbf{N}} \not{T}_{\gamma} \rangle^{\gamma}$$

$$= \mathbf{n}_{\gamma\lambda} \times k_{\gamma} \tilde{\mathbf{N}} \not{T}_{\gamma} + \mathbf{n}_{\lambda\gamma} \times k_{\gamma} \tilde{\mathbf{N}} \not{T}_{\gamma} \rangle^{\lambda} - \mathbf{n}_{\lambda} \times k_{\gamma} \tilde{\mathbf{N}} \not{T}_{\gamma} \rangle^{\gamma}$$

$$= \mathbf{n}_{\gamma\lambda} \times k_{\gamma} \tilde{\mathbf{N}} \not{T}_{\gamma} + \mathbf{n}_{\lambda\gamma} \times k_{\gamma} \tilde{\mathbf{N}} \not{T}_{\gamma} + \mathbf{n}_{\lambda\gamma} \cdot \mathbf{n}_{\lambda\gamma} \cdot \mathbf{n}_{\lambda\gamma} + \mathbf{n}_{\lambda\gamma} \cdot \mathbf{n}_{\lambda\gamma} \cdot \mathbf{n}_{\lambda\gamma} + \mathbf{n}_{\lambda\gamma} \cdot \mathbf{n}_$$

Donde todas las variables mantienen el significado dado a su aparición. Dentro del desarrollo de este modelo se aplico el Método del Promedio volumétrico a cada una de las ecuaciones que describen el transporte de energía en cada fase, y se debieron observar las características de cada fase y por lo tanto realizar el desarrollo para cada ecuación, incluidas las condiciones de frontera mostradas en (V.94) a (V.97) donde por formato las variables contenidas en estas ecuaciones se presentan sin la expansión que tiene cada una puesto que se han definido anteriormente.

b.1 Discusión 2ª etapa

Se ha mostrado el desarrollo de la aplicación del Método del Promedio Volumétrico para la obtención de un modelo de un sistema trifásico en ecuaciones promedio de transporte de energía, manteniendo la rigurosidad de las herramientas matemáticas utilizadas y de la teoría de los fenómenos de transporte, sin embargo se considera la simplificación del modelo obtenido en base a los presentados por otros autores en la bibliografía consultada y es en este sentido que se presenta el modelo en ecuaciones promedio de energía de un sistema trifásico simplificado.

De la región porosa ω

$$\left(\rho C_{p}\right)_{\omega} \varepsilon_{\omega} \frac{\partial \langle T_{\omega} \rangle^{\omega}}{\partial t} = \mathbf{K}_{\omega\omega} \nabla^{2} \langle T_{\omega} \rangle^{\omega} + \varepsilon_{\omega} \langle \Phi_{\omega} \rangle^{\omega}$$
(V.98)

De la fase líquida λ

$$\left(\rho C_{p}\right)_{\lambda} \varepsilon_{\lambda} \frac{\partial \left\langle T_{\lambda} \right\rangle^{\lambda}}{\partial t} = \mathbf{K}_{\lambda\lambda} \nabla^{2} \left\langle T_{\lambda} \right\rangle^{\lambda} \tag{V.99}$$

De la Fase Gas y

$$\left(\rho C_{p}\right)_{\gamma} \varepsilon_{\gamma} \frac{\partial \left\langle T_{\gamma} \right\rangle^{\gamma}}{\partial t} = \mathbf{K}_{\gamma\gamma} \nabla^{2} \left\langle T_{\gamma} \right\rangle^{\gamma} \tag{V.100}$$

Condiciones de Frontera

En la interfase región porosa - fase líquida

$$\left\langle T_{\lambda}\right\rangle^{\lambda} + \mathcal{P}_{\lambda} = \left\langle T_{\omega}\right\rangle^{\omega} + \mathcal{P}_{\omega} \tag{V.101}$$

$$\mathbf{n}_{\lambda\omega} \not \approx k_{\lambda} \nabla \not = \mathbf{n}_{\lambda\omega} \not \approx k_{\omega} \tilde{\mathbf{N}} \not = \mathbf{n}_{\lambda\omega} \not \approx k_{\omega} \tilde{\mathbf{N}} \not = \mathbf{n}_{\lambda\omega} \not \approx k_{\omega} \tilde{\mathbf{N}} \langle T_{\omega} \rangle^{\omega} - \mathbf{n}_{\lambda\omega} \not \approx k_{\lambda} \tilde{\mathbf{N}} \langle T_{\lambda} \rangle^{\lambda}$$
(V.102)

En la interfase fase líquida – fase gas

$$\left\langle T_{\lambda}\right\rangle^{\lambda} + \mathcal{P}_{\lambda} = \left\langle T_{\gamma}\right\rangle^{\gamma} + \mathcal{P}_{\gamma} \tag{V.103}$$

$$-\mathbf{n}_{\lambda\gamma} \times k_{\lambda} \tilde{\mathbf{N}} \not P_{\lambda} = -\mathbf{n}_{\gamma\lambda} \times k_{\gamma} \tilde{\mathbf{N}} \not P_{\gamma} + \mathbf{n}_{\beta\lambda} \times k_{\gamma} \tilde{\mathbf{N}} \not (T_{\beta\lambda})^{\lambda} - \mathbf{n}_{\beta\lambda} \times k_{\gamma} \tilde{\mathbf{N}} \not (T_{\beta\lambda})^{\gamma}$$
(V.104)
Fuente

Donde todas las variables tienen el mismo significado ya mencionado.

Como puede observarse en las ecuaciones (V.98) a (104), un modelo simplificado para un sistema trifásico puede dejar de lado algunas contribuciones que pudieran ser relevantes en el transporte de energía que se desarrolla en el reactor, siendo estas contribuciones las relativas a la convección, el transporte interfacial por mecanismos similares a la ley de enfriamiento, la dependencia del tiempo de las fracciones volumen en cada fase, así como la contribución por la evaporación y el transporte debido a cambios de fase, mecanismos contemplados en el modelo en ecuaciones promedio de energía desarrollado en esta tesis; sin embargo es necesario poder cuantificar todos estos términos para contemplar o discriminar en forma definitiva su participación en el modelo, trabajo planeado a futuro en la continuación de este trabajo. Y aunque se ha presentado un ejemplo de solución en esta sección de resultados bajo la consideración de no tener un campo de velocidad mediante la aplicación de la celda de Chang (Apéndices A.9 y A.10), este ejemplo se presenta con la finalidad de precisar la alta dificultad que involucra resolver de manera analítica el sistema y que las herramientas disponibles como los métodos matemáticos utilizados en este trabajo han permitido generar un avance significativo en el modelado de sistemas trifásicos como los presentes en reactores de lecho fijo para el proceso de HDS. En la sección siguiente se presentan las conclusiones que sobre estos resultados se han generado mediante el estudio y discusión del modelo obtenido.

VI. Conclusiones

De acuerdo a los objetivos planteados para este trabajo, y en virtud de los resultados presentados, puede concluirse que se satisficieron los primeros, mediante la obtención de un modelo en ecuaciones promedio de energía de un sistema trifásico como el de un reactor de HDS y de las expresiones que permitirán el cálculo de los coeficientes efectivos de transferencia de calor derivado de la aplicación del Método del Promedio Volumétrico.

Estos resultados permitirán la simulación de un sistema trifásico, en la medida de la obtención de los balances de masa y el acople al obtenido para energía; Así como la metodología de solución de los coeficientes efectivos. Para efectos de la metodología de solución de los coeficientes efectivos de transferencia de calor, se propone el uso de la Celda de Chang modificada para trabajar en tres fases, la cual no ha sido aplicada al menos en la literatura consultada y que representa otra de las propuestas importantes de este trabajo, esta metodología que se sigue en los apéndices A.9 y A.10, donde se obtiene la forma de una de las variables de cerradura que conforman los coeficientes efectivos de transferencia de calor, y que en total deben resolverse veinticuatro de estos problemas para el mismo número de coeficientes; entonces como se plantea en la cerradura del promedio realizado y considerando la existencia de un campo de velocidad conocido, ya que de este campo dependen tanto la distribución de fases como las condiciones de frontera que describan correctamente el sistema como ya se ha mencionado y en función de este arreglo o distribución de fases es que se presentarán diferentes términos de los propuestos en las representaciones de las desviaciones de la temperatura y por tanto la contribución de diferente tensores y coeficientes efectivos de transporte de energía, así como de la forma de los coeficientes de película calculados. Cabe mencionar que la propuesta de solución de las desviaciones de la temperatura permite la implantación de las condiciones de laboratorio e industriales, debido a que contempla la interacción entre las tres fases en sus coeficientes donde los existentes para condiciones de laboratorio valdrán cero y, considerando para este trabajo los coeficientes actuantes en el modelo industrial. Para simular experimentos a nivel laboratorio o escala industrial sólo se necesita la modificación de las condiciones de frontera, ya que como se mencionó en la descripción del sistema la distribución de fases es diferente en cada escala [Satterfield, 1975], sin embargo debido al riguroso desarrollo aplicado al modelo, este permitirá simular las dos escalas mediante la declaración de condiciones de frontera adecuadas a cada escala.

Puede mencionarse también, que mediante la aplicación del Método del Promedio Volumétrico, partiendo de las ecuaciones puntuales que describen el sistema se obtiene un conjunto de tres ecuaciones que describen el transporte de energía en cada una de las fases en términos de cantidades promedio conocidas u observables considerando el mayor número de mecanismos posible, mediante los cuales se realiza el transporte de energía y señalando las expresiones que cuantifican cada mecanismo de transporte. De manera similar se obtuvo un modelo simplificado de transporte de energía en ecuaciones promedio para un sistema trifásico con el cual se muestra la probable omisión de contribuciones de transferencia de calor, quizá relevantes en el transporte de energía que se observan en algunos modelos tradicionales encontrados en la literatura.

De igual forma al resolver el sistema se obtiene la forma analítica de los tensores y coeficientes efectivos de transferencia de calor asociados a estos diferentes mecanismos de transferencia de energía, siendo esto otra medida de la importancia de los diferentes fenómenos de transporte presentes en el proceso y resultado por demás importante debido a la escasez de resultados analíticos para este tipo de tensores y coeficientes. De la forma de estos tensores efectivos de conductividad térmica y coeficientes efectivos cabe resaltar la relevancia de poder aproximar valores de los mismos con la expresión analítica bajo condiciones de proceso ya que tradicionalmente se cuenta con correlaciones a condiciones estándar o fuera de los rangos de operación deseados o requeridos.

Como trabajo futuro se pretende resolver los problemas de cerradura mediante la aplicación del Método de la Celda de Chang, como el ejemplo presentando, con la salvedad de incluir un campo de velocidad y la información requerida de los balances de masa e hidrodinámica del sistema. Permitiendo esto la simulación del proceso de HDS en un reactor de tres fases.

VII. Nomenclatura

Letras

Unidades

	A Tensor	
А	Constante	2
Α	Área	L^2
B	Tensor	
В	Constante	
b C	Vector	
C	Voctor	
C D	Vector	
D F	Energía	F
Г Т	Banidez de calor sensible neto acarreado	L
L	por la cantidad de líquido de λ a v	F/t
н	Entalnía	E/t F
h h	Coeficiente de la desviación de temperatura	E
I	Tensor Unitario	L
-	i Vector unitario	
V.	j Vector unitario	
VI.	K Conductividad térmica Efectiva	E /
	t L T	
k	Conductividad Térmica	E/tLT
L	Longitud o longitud característica	L
l _{dn}	Longitud de la Celda de Chang	L
LHSV	Velocidad Espacial	vol. Alim/ vol. Cat. hr
М	Tasa de evaporación	$M / t L^2$
m	Coeficiente de la desviación de temperatura	
n	Vector normal unitario	
р	Coeficiente de las desviaciones de la temperatura	
Q	Calor	E
q	Flux de calor	E/tL^2
r	Coeficiente de la desviación de temperatura	
S	Coeficiente de la desviación de temperatura	
Т	Temperatura	°K
t	tiempo	S
u	Coeficiente efectivo de transporte	E/tLT

V	Volumen	L^3
V	Volumen de la muestra para promedio	L^3
v	Velocidad	L / s
w	Velocidad de la interfase	L / s
х	coordenada cartesiana	
у	coordenada cartesiana	

Griegas

- β Raíz de
- δ Delta de Kronecker
- ε Fracción Volumen
- Raíz de
- γ Raíz de
- η Raíz de
- λ Fase Líquida
- μ Raíz de
- v Raíz de
- π PI
- θ Ángulo
- ρ Densidad
- ω Región Porosa
- ξ Radio adimensional
- ψ Suma de fracción volumen $\epsilon_{\omega}^{\frac{1}{2}} + \epsilon_{\lambda}^{\frac{1}{2}}$
- ζ Cualquier variable

Superíndices

 M/L^3

- I relativo a l problema de cerradura
- II relativo a l problema de cerradura

- III relativo a l problema de cerradura
- IV relativo a l problema de cerradura
- V relativo a l problema de cerradura
- VI relativo a l problema de cerradura
- VII relativo a l problema de cerradura
- VIII relativo a l problema de cerradura
- ° Relativo a descomposición de variables
- χ Cualquier Raíz

Subíndices

- 1 Número de constante
- 2 Número de constante
- 3 Número de constante
- α Raíz de o relativo a
- β Raíz de o relativo a
- Raíz de o relativo a
- γ Raíz de o relativo a
- η Raíz de o relativo a
- μ Raíz de o relativo a
- v Raíz de o relativo a
- ω Raíz de o relativo a

Caracteres especiales

- \oint Desviación de la temperatura
- Ψ Cualquier propiedad
- $\langle \Psi \rangle$ Promedio superficial de cualquier propiedad
- $\langle \Psi \rangle^{\alpha}$ Promedio intrínseco de cualquier propiedad con $\alpha = \omega, \lambda, \gamma$

Bibliografía

- Aris, R., (1973), Análisis de Reactores. Editorial Alambra S.A., Madrid, España
- Bird, R. B., Stewart, W. E. y Lightfoot, E. N., (1960). Transport Phenomena. John Wiley & Sons. E.U.A.
- Bousquet-Melou, P., Neculae, A., Goyeau, B. y Quintard, M. (2002). Averaged Solute Transport during Solidification of a Binary Mixture: Active Dispersion in Dendritic Structures. Metallurgical and Materials Transactions B. Vol. 33B, Month 2002-1
- Carberry, J.J. (1976). Chemical and catalytic reaction engineering. McGraw-Hill, Inc. EUA.
- Chang, H-C., (1982 a). Multi-Scale analysis of effective transport in periodic heterogeneous media. Chem. Eng. Commun., Vol. 15, 83-91.
- Chang, H-C., (1982). A non-fickian model of packed-bed reactors, AIChE Journal, Vol. 28, No. 2, 208-214
- Chang, H-C., (1983). Effective diffusion and conduction in two-phasse media: a unified approach. AIChE Journal, Vol. 29, No. 5, 846-853
- Del Rio, F., (1990). El arte de investigar (Colección CBI). Universidad Autónoma Metropolitana. México, D. F.
- Fogler, H. S. (2000). Elements of Chemical Reaction Engineering. Prentice Hall International PTR, Nueva Jersey, EUA.
- Froment, G. F., Depauw, G. A. y Vanrysselberghe, V. (1994). Kinetic modeling and reactor simulation in Hydrodesulfurization of oil fraction. Ind. Eng. Chem. Res., 33, 2975-2988
- Gates, B. C., Katzer, J. R. y Schuit, G. C. A. (1979), Chemistry of catalytic processes, McGraw Hill, EUA.
- Gray, W. G. (1975). A derivation of the equations for multiple transport, Chem. Engng. Sci. 30, 229-233
- Korsten, H y Hoffmann, U. (1996). Three-phase reactor model for hydrotreating in pilot trickle-bed reactors. AIChE Journal. 42, 1350-1360
- Levenspiel, O. (1997). Ingeniería de las reacciones químicas. Reverté Ediciones , S.A. de C.V., México
- McCabe, W. L. y Smith, J. C. (1965). Unit Operations of Chemical Engineering. McGraw-Hill Book Company. EUA.
- Myint-U, T. (1981). Partial Differential Equations of Mathematical Physics, Second edition. Elsevier North Holland, Inc., New York, Oxford, E.U.A., 151-155
- Ochoa-Tapia, J. A. (1991). On the method of volume averaging: the one-equation model for two-phase system whit diffusion and reaction. XX Winter Meeting on statistical Physics. Lectures on thermodynamics and statistical mechanics. Editores Mariano López de Haro y Carmen Varea. México
- Ochoa-Tapia, J. A., (1988). Difusión and Reaction in Heterogeneous Media. Dissertation PhD in Chemical Engineering, University of California Davis, 1988.

- Ochoa-Tapia, J. A., Del Río P., J. A. y Whitaker, S. (1993). Bulk and Surface diffusion in porous media; an application of the surface-averaging theorem. Chem. Engn. Sci., Vol. 48, No. 11, 2061-2082
- Ochoa-Tapia, J. A., Strove, P. y Whitaker, S. (1994). Diffusive transport in twophase media: spatially periodic models and Maxwell's Theory for isotropic and anisotropy system. Chem. Engn. Sci., Vol. 49, No. 5, 709-726
- Ochoa-Tapia, J. A., Strove, P. y Whitaker, S. (1998). Heat transfer at the boundary between a porous medium and a homogeneous fluid: The one-equation model. Journal of Porous Media, 1(1), 31-46
- Quintard, M. y Whitaker, S. (1994). Transport in ordered and disordered porous media II: Generalized volume averaging, Transport in Porous Media 14, 179-206
- Satterfield, C.N., (1975). Trickle-Bed Reactors. AIChE Journal, Vol 21, No. 2, 209-228
- Sicardi, S., Baldi, G. y Specchia, V. (1980). Hydrodynamics models for the interpretation of the liquid flow in trickled bed reactors. Chem. Engn. Sci., 35, 1775-1782
- Whitaker, S., (1991). Improved constraints for the principle of local thermal equilibrium. Ind. Eng. Chem., 30, 983-987
- Whitaker, S., (1999). The Method of Volume Averaging. Kluwer Academic Publishers. EUA