

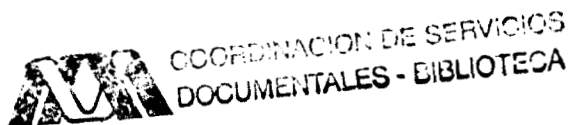
**ANÁLISIS DE LA SUPOSICIÓN DEL ESTADO
CUASI ESTACIONARIO PARA PROBLEMAS DE
DIFUSIÓN EN SISTEMAS DE CAPAS MÚLTIPLES**

Tesis que presenta

ALFONSO MAURICIO SALES CRUZ

Para la obtención del grado de

MAESTRO EN INGENIERIA QUIMICA



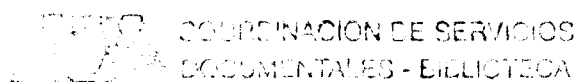


Casa abierta al tiempo

Universidad Autónoma Metropolitana – Iztapalapa

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica



Título:

**ANÁLISIS DE LA SUPOSICIÓN DEL ESTADO CUASI
ESTACIONARIO PARA PROBLEMAS DE DIFUSIÓN EN SISTEMAS
DE CAPAS MÚLTIPLES**

Tesis que presenta

ALFONSO MAURICIO SALES CRUZ

(Matrícula: 92351963)

Para la obtención del grado de

MAESTRO EN INGENIERIA QUIMICA

Asesor:

Dr. Jesús Alberto Ochoa Tapia

Junio de 2001.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco el apoyo económico otorgado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT, registro 64542) para el desarrollo de mis estudios de maestría.

RESUMEN

En este trabajo se analiza la validez de la suposición del estado cuasi estacionario en el cálculo de los coeficientes de transferencia de masa globales para un sistema en el que existe transporte de un soluto a través de una pared formada por dos capas. Utilizando conceptos matemáticos sencillos como el de separación de variables y superposición, se desarrolla una solución analítica para el problema de transporte difusivo en estado transitorio. Dicha solución es usada junto con tres diferentes funcionalidades (con respecto al tiempo) de la concentración en el seno del fluido para cada lado de la pared. Los resultados muestran que el tipo de funcionalidad afecta fuertemente la diferencia entre los coeficientes globales obtenidos utilizando la suposición del estado cuasi estacionario y los calculados en el estado transitorio. Lo que predice en cierta medida y para algunos casos, especialmente cuando la funcionalidad es fuertemente dependiente del tiempo, que la suposición del estado cuasi estacionario puede no ser adecuada, debido a que existe una zona al inicio del proceso en donde la representación obtenida bajo esta suposición, para los perfiles de concentración y los fluxes, muestra grandes diferencias comparada con la solución dinámica. Otra ventaja de este resultado analítico es la reducción en el tiempo de cómputo necesario para evaluar la solución del problema con casi la misma exactitud cuando se compara con la solución numérica correspondiente.

ÍNDICE

CAPÍTULO 1 INTRODUCCIÓN.....	225969	1
1.1 MARCO HISTÓRICO		1
1.2 OBJETIVO GENERAL		6
1.3 OBJETIVOS PARTICULARES		6
1.4 ESTRUCTURA DE LA TESIS.....		7
CAPÍTULO 2 EL SISTEMA DE CAPAS MÚLTIPLES		9
2.1 DEFINICIÓN DEL PROBLEMA		9
2.2 FORMA ESQUEMÁTICA DE LOS PERFILES DE CONCENTRACIÓN		10
2.3 EL MODELO MATEMÁTICO		12
2.4 METODOLOGÍA DE SOLUCIÓN		16
2.4.1 <i>Superposición</i>		17
2.4.2 <i>Generación y solución del problema de Sturm-Liouville</i>		19
2.4.3 <i>Solución del problema no-homogéneo para $\tilde{U}_{(i)}$</i>		22
CAPÍTULO 3 CASOS DE ESTUDIO		25
3.1 CÁLCULO DE LOS TÉRMINOS INTEGRALES.....		25
3.2 FUNCIONALIDADES PARA $U_{(1)\infty}$ Y $U_{(2)\infty}$ CON EL TIEMPO.....		27
3.2.1 <i>Caso I</i>		27
3.2.2 <i>Caso II</i>		27
3.2.3 <i>Caso III</i>		28

3.3	DEFINICIÓN DE LOS COEFICIENTES DE TRANSPORTE.....	30
CAPÍTULO 4 RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....		33
4.1	BÚSQUEDA DE LOS VALORES PROPIOS	34
4.2	CASO I.....	37
4.3	CASO II.....	41
4.4	CASO III	45
4.5	SOLUCIÓN NUMÉRICA CONTRA SOLUCIÓN ANALÍTICA	50
4.6	POSIBLES CASOS DE APLICACIÓN	51
	CONCLUSIONES.....	53
	Nomenclatura.....	57
	Bibliografía.....	59
	Apéndice A. Detalles de la solución analítica del problema de difusión	63
	Apéndice B. Método de Müller	101
	Apéndice C. Algoritmo de evaluación de la solución analítica.....	109

ÍNDICE DE TABLAS

<i>Tabla 2.1 Definición de variables adimensionales.</i>	<i>15</i>
<i>Tabla 2.2 Parámetros adimensionales utilizados en el modelo.</i>	<i>15</i>
<i>Tabla 3.1 Coeficientes $A_n(\tau)$ y $C_n(\tau)$ para un conjunto de tres expresiones diferentes de la concentración del seno de los fluidos $U_{(2)\infty}(\tau)$ y $U_{(2)\infty}(\tau)$.....</i>	<i>29</i>
<i>Tabla 4.1 Raíces de la condición de los valores propios.....</i>	<i>35</i>
<i>Tabla 4.2 Solución Analítica vs. Solución Numérica.</i>	<i>50</i>

ÍNDICE DE FIGURAS

<i>Figura 2.1 Sistema formado por dos capas con coeficientes de transporte diferentes las cuales están en contacto con dos fluidos perfectamente mezclados.....</i>	<i>9</i>
<i>Figura 2.2 Diagrama esquemático de los perfiles de concentración para un sistema formado por dos capas en contacto con dos fluidos de concentración controlada.....</i>	<i>11</i>
<i>Figura 4.1 Gráficas de la función que determina los valores propios para los casos en que el parámetro $\alpha_{(0)}$ toma los valores de 0.1, 10.0 y 100.0. El parámetro $\alpha_{(2)}$ se mantiene en 100.0.....</i>	<i>34</i>
<i>Figura 4.2 Evolución de los perfiles de concentración adimensional para un sistema sujeto a concentraciones de fluido constantes. Caso I.</i>	<i>38</i>
<i>Figura 4.3 Comparación de los mapas de concentración para el sistema formado por dos capas: (a) Suposición de estado cuasi estacionario, (b) Solución exacta. Caso I.</i>	<i>39</i>
<i>Figura 4.4 Comparación de los fluxes de concentración para el sistema formado por dos capas entre la suposición de estado cuasi estacionario y la solución completa. Caso I.....</i>	<i>40</i>
<i>Figura 4.5 Números de Nusselt transitorios al inicio y al final de las capas, y el evaluado con la suposición del estado cuasi estacionario. Caso I.....</i>	<i>40</i>

<i>Figura 4.6 Evolución de los perfiles de concentración adimensional para un sistema sujeto a concentraciones de fluido variables. Caso II.</i>	42
<i>Figura 4.7 Comparación de los mapas de concentración para el sistema formado por dos capas: (a) Suposición de estado cuasi estacionario, (b) Solución exacta. Caso II.</i>	43
<i>Figura 4.8 Comparación de los fluxes de concentración para el sistema formado por dos capas entre la suposición de estado cuasi estacionario y la solución completa. Caso II.</i>	44
<i>Figura 4.9 Números de Nusselt transitorios al inicio y al final de las capas, y el evaluado con la suposición del estado cuasi estacionario. Caso II.</i>	44
<i>Figura 4.10 Evolución de los perfiles de concentración adimensional para un sistema sujeto a concentraciones de fluido constantes y periódicamente dependientes del tiempo. Caso III.</i>	47
<i>Figura 4.11 Comparación de los mapas de concentración para el sistema formado por dos capas: (a) Suposición de estado cuasi estacionario, (b) Solución exacta. Caso III.</i>	48
<i>Figura 4.12 Comparación de los fluxes de concentración para el sistema formado por dos capas entre la suposición de estado cuasi estacionario y la solución completa. Caso III.</i>	49
<i>Figura 4.13 Números de Nusselt transitorios al inicio y al final de las capas, y el evaluado con la suposición del estado cuasi estacionario. Caso III.</i>	49

<i>Figura B.1 Diagrama esquemático de los pasos requeridos para la búsqueda de raíces por el Método de Müller.....</i>	<i>102</i>
--	------------

<i>Figura C.1 Diagrama de flujo para evaluar de la solución analítica</i>	<i>110</i>
---	------------

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

1.1 Marco histórico

Muchos de los sistemas de interés en ingeniería química y en otros campos del conocimiento son de naturaleza dinámica, y por ello frecuentemente las ecuaciones que los modelan incluyen ecuaciones diferenciales parciales (EDP's). Este es el caso de procesos de transferencia de calor y masa en sistemas con varias capas (resistencias) como los que se encuentran en intercambiadores de calor, reactores catalíticos heterogéneos, y reactores de membrana (Aris, 1989; Cussler, 1997).

La presencia de derivadas parciales en los modelos matemáticos complica la solución del problema y por ello se han intentado algunas simplificaciones razonables. Una de las simplificaciones que se invoca frecuentemente es la del **estado cuasi-estacionario**, por ejemplo, un reactor de tanque agitado por lotes, que es un proceso dinámico, se modela utilizando dicha suposición, el consumo de reactivo en partículas catalíticas se modela en términos de factores de efectividad los que se obtienen de la solución de la ecuación de difusión-reacción en estado estacionario, en este caso la suposición puede ser válida debido a la diferencia entre los tiempos característicos del sistema. Sin embargo para muchos otros sistemas la suposición puede no ser adecuada (Cheremisinoff, 1986).

En los años recientes, los rápidos adelantos en el área del cálculo computacional han promovido un alto desarrollo de los métodos numéricos para la solución de ecuaciones diferenciales parciales. Sin embargo, a pesar de las mejoras en las técnicas numéricas, las **soluciones analíticas** de las EDP's son muy útiles, porque

- (i) se puede obtener información valiosa acerca de su comportamiento cualitativo,*
- (ii) se puede analizar claramente la influencia de los diferentes parámetros involucrados en el modelo,*
- (iii) pueden ser evaluadas para un valor puntal sin requerir de un conocimiento anterior (historia) de la(s) variable(s) involucradas, con esto*
- (iv) reducen significativamente el tiempo de computo, y por lo tanto*
- (v) son deseables para las tareas de simulación.*

Más sobre la conveniencia de soluciones analíticas comparadas con las soluciones numéricas puede encontrarse en el trabajo de Lewellen y col. (1982).

De interés particular para la simulación de procesos es la solución de problemas que involucran EDP's parabólicas que se originan en el modelado de procesos de separación dinámicos y en la representación de la transferencia de calor transiente en una pared. En este tipo de modelos puede ser importante evaluar los esquemas de separación y los sistemas de transferencia de calor respectivamente. Las soluciones exactas del caso lineal de los problemas descritos han sido obtenidas independientemente por Ramkrishma y Amundson (1974) y Mikhailov y Özişik (1984). La metodología para obtener la solución

exacta presentada por Ramkrishma y Amundson (1974) está basada en el uso del operador de Sturm-Liouville. Su formalismo matemático lleva a una solución elegante, pero no muestran ningún caso en donde su solución analítica sea evaluada. Un comentario similar puede expresarse sobre el trabajo presentado por Mikhailov y Özişik (1984). La metodología de Ramkrishma y Amundson (1974) se ha aplicado con éxito para resolver formalmente problemas de difusión en partículas sumergidas en mezclas de fluidos (Gandek y col., 1989; Hatton y col., 1979, 1982; Hatton, 1985).

Una solución analítica a cualquier problema de transporte debe satisfacer la ecuación diferencial general que describe la transferencia así como las condiciones de frontera especificadas por la situación física. Un estudio completo de las soluciones analíticas en sistemas temporales unidimensionales, bidimensionales y tridimensionales requiere de un conocimiento de las ecuaciones diferenciales parciales, así como de la teoría de variable compleja.

En la literatura encontramos varios métodos de análisis disponibles para la solución de estos problemas, por ejemplo la técnica de expansión con funciones ortogonales o el uso de las funciones de Greens (Bulavin y Kascheev, 1965; Tittle, 1965; Mikhailov y Özişik, 1984; Mulholland y Cobble, 1975). Todas estas técnicas de solución se han discutido en los trabajos de Mikhailov y Özişik (1984) y Mulholland y Cobble (1975), técnicas mas complejas como el uso de la transformada de Laplace se han utilizado por Carslaw y Jaeger (1959) y las técnicas de transformación integral finitas se han aplicado por Mikhailov y Özişik (1984), sin embargo todos estos estudios aunque elegantes en su formulación

matemática son difíciles de seguir, tal es el caso del trabajo presentado por Ventras y col. (1997), ellos desarrollan una solución a este problema utilizando transformada de la Laplace, sin embargo no muchas personas conocen o entienden el proceso de cambiar del dominio de Laplace al dominio del tiempo, por eso creemos que es importante explorar una técnica de solución más sencilla y atractiva para los ingenieros, el método clásico, de obtención de una solución analítica exacta es el de separación de variables. En este trabajo se explora el uso de este método, el cual a diferencia de la creencia extendida en la comunidad de Ingeniería Química de que solo es útil para sistemas de una sola fase - esto como consecuencia de la definición del problema de Sturm Lioville -, aquí se demuestra que es posible construir problemas equivalentes tal como lo proponen Mikhailov y Özişik (1984). Esto es, se necesitan condiciones de frontera homogéneas, periódicas y una ecuación diferencial de cierto tipo para obtener funciones propias ortogonales.

Con respecto a la uso de métodos numéricos, si bien pueden pensarse como la forma más fácil de plantear una solución al problema, no resulta la forma más eficiente para evaluar la solución al mismo, debido a que todos los métodos numéricos además de los parámetros físicos involucrados inherentes al sistema, existen parámetros propios del método (criterios de convergencia, tolerancias de error, iteraciones, puntos de malla o de integración, etc.) aunado a que para poder conocer el valor de la variable en alguna posición espacial o en el tiempo es necesario contar con toda la historia de la evolución de la misma, esto hace - siempre que sea posible- muy atractivo contar con una solución analítica la cual rescatando algunas ideas de los métodos propuestos en la literatura nos permita resolver paso a paso el

problema de difusión y el cálculo de los coeficientes de transporte de masa en un sistema compuesto de dos capas.

Es importante comentar que la solución analítica obtenida en este trabajo es completamente equivalente a la encontrada por Ramkrishna y Amundson (1974) y Mikhailov y Ozisik (1984). Sin embargo, la simplicidad de la metodología seguida aquí, permite una evaluación más rápida de la solución. En este trabajo, la solución analítica obtenida se evalúa y el cálculo de los valores propios asociado al problema de Sturm-Liouville se discute. Se obtienen resultados para un conjunto de tres condiciones de frontera diferentes y se comparan con la solución numérica correspondiente.

Siguiendo esta misma metodología y con una redefinición apropiada de las variables y parámetros, es posible extender el problema para el cálculo de coeficientes de transferencia de calor dinámicos en sistemas de varias capas.

1.2 Objetivo general

Evaluar los coeficientes de transporte de masa globales en condiciones transitorias y compararlos con los obtenidos bajo la suposición del estado cuasi estacionario en un sistema unidimensional formado por dos capas con propiedades de transporte diferentes.

1.3 Objetivos particulares

- Estudiar la suposición del estado cuasi estacionario.
 - Contar con una solución analítica.
 - Utilizar un método de solución sencillo y eficiente.
 - Evaluar la solución.
 - Utilizar un método robusto para la búsqueda de los valores propios
 - Concluir sobre la validez de la suposición del estado cuasi estacionario.
-

1.4 Estructura de la tesis

Para lograr los objetivos planteados anteriormente, el presente trabajo se divide de la siguiente forma: en el capítulo dos se hace una descripción del sistema de estudio (secciones 2.1 y 2.2), en la sección 2.3 se plantean las ecuaciones que gobiernan la transferencia de masa en un sistema formado por dos capas considerando que la concentración depende de una dimensión y del tiempo, en la sección 2.4 se analiza la metodología de solución.

En el capítulo tres se plantean tres diferentes casos para la funcionalidad de la concentración del seno de los fluidos en los extremos con respecto al tiempo, asimismo se definen los coeficientes de transporte en términos de números de Nusselt (sección 3.3).

En el capítulo cuatro se evalúan los valores propios (sección 4.1) y se encuentra la solución analítica para cada uno de los casos propuestos (secciones 4.2 - 4.4), posteriormente se discuten los resultados obtenidos comparando contra la solución numérica (sección 4.5), y por último en este capítulo, se plantean algunos posibles casos de aplicación (Sección 4.6). Cerrando en el capítulo cinco con las conclusiones de este trabajo.

Finalmente después de presentar las referencias y la bibliografía, se concluye con una sección de apéndices en donde se presentan los detalles de la solución analítica, del método numérico para el cálculo de los valores propios, y el algoritmo de evaluación de la solución.

CAPÍTULO 2

EL SISTEMA DE CAPAS MÚLTIPLES

2.1 Definición del Problema

Se tiene interés en resolver en forma analítica el problema transitorio de difusión del soluto A a través de un sistema formado por dos placas homogéneas e isotrópicas con propiedades de transporte constantes en el espesor y diferentes de la capa adyacente. Tal como se muestra en la Figura 2.1.

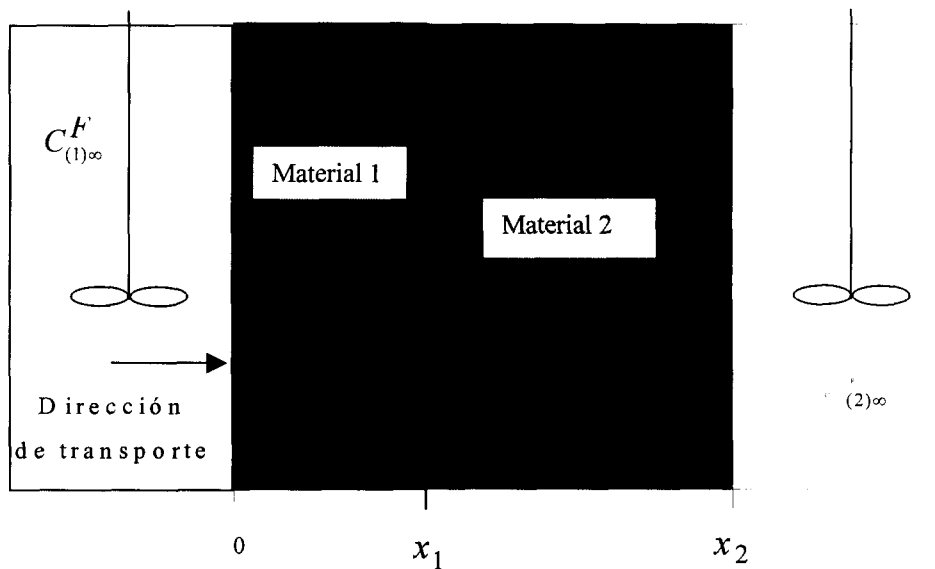


Figura 2.1 Sistema formado por dos capas con coeficientes de transporte diferentes las cuales están en contacto con dos fluidos perfectamente mezclados.

En este sistema se considera el transporte de masa unidireccional en un sólido formado por dos capas que se extiende desde $x = 0$ hasta $x = x_2$. Se supone que la sección que se extiende desde $x = 0$ hasta $x = x_1$ está inicialmente a la concentración dada por $f_1(x)$ y tiene una difusividad $\mathcal{D}_1$, mientras que la sección comprendida entre $x = x_1$ y $x = x_2$ está inicialmente a la concentración dada por $f_2(x)$ y tiene una difusividad $\mathcal{D}_2$.

Si se considera que las concentraciones en el seno del fluido en cada uno de los extremos de las capas ($C_{(1)\infty}^F$ y $C_{(2)\infty}^F$) son dependientes del tiempo, el problema consiste en encontrar la historia de la concentración en el sólido multi-capas, así como en calcular los coeficientes de transferencia de masa globales.

2.2 Forma esquemática de los perfiles de concentración

Considerando el equilibrio que existe en las interfases entre el fluido y el material sólido, así como el correspondiente entre las dos capas, se puede establecer de forma esquemática las concentraciones que existen en cada uno de los puntos de interfase, tal como se muestra en la Figura 2.2, la cual nos ayuda a plantear las ecuaciones que rigen la transferencia de masa y sus condiciones de frontera asociadas. En esta Figura, las concentraciones $C_{(1)\infty}^F$ y $C_{(2)\infty}^F$ son las correspondientes al seno del fluido en cada uno de los extremos de la pared sólida. Las concentraciones $C_{(1)0}^F$ y $C_{(1)0}^S$ corresponden a la interfase

entre el fluido y el material 1. De la misma forma las concentraciones $C_{(2)2}^S$ y $C_{(2)2}^F$ corresponden a la interfase entre el material 2 y el fluido. Mientras que las concentraciones en equilibrio entre la interfase del material 1 y material 2 están por representadas por $C_{(1)1}^S$ y $C_{(2)1}^S$, respectivamente.

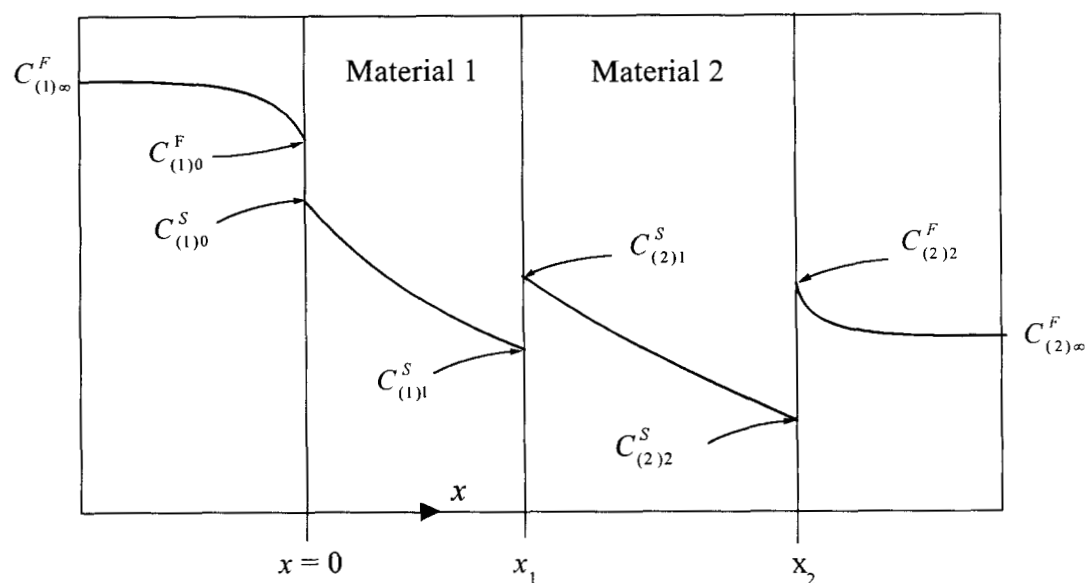


Figura 2.2 Diagrama esquemático de los perfiles de concentración para un sistema formado por dos capas en contacto con dos fluidos de concentración controlada.

2.3 El modelo Matemático

La formulación matemática para el problema de difusión unidimensional que gobierna la distribución de concentración, es el que describen las ecuaciones diferenciales parciales de difusión siguientes:

$$\frac{\partial C_{(1)}^S}{\partial t} = \mathcal{D}_{(1)} \frac{\partial^2 C_{(1)}^S}{\partial x^2}, \quad \text{para } 0 < x < x_1 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial C_{(2)}^S}{\partial t} = \mathcal{D}_{(2)} \frac{\partial^2 C_{(2)}^S}{\partial x^2}, \quad \text{para } x_1 < x < x_2 \quad (2.2)$$

Sujeto a las condiciones a la frontera

$$\text{en } x = 0 \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} = k_0 (C_{(1)0}^F - C_{(1)\infty}^F)$$

$$\text{ó} \quad +\mathcal{D}_{(1)} \frac{\partial C_{(1)0}^S}{\partial x} = k_0 (C_{(1)0}^F - C_{(1)\infty}^F), \quad \text{para } t > 0 \quad (2.3)$$

$$\text{en } x = x_2 \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} = k_2 (C_{(2)2}^F - C_{(2)\infty}^F)$$

$$\text{ó} \quad -\mathcal{D}_{(2)} \frac{\partial C_{(2)2}^S}{\partial x} = k_2 (C_{(2)2}^F - C_{(2)\infty}^F), \quad \text{para } t > 0 \quad (2.4)$$

$$\text{en } x = x_1 \quad C_{(1)}^S = K_{eq} C_{(2)}^S, \quad \text{para } t > 0 \quad (2.5)$$

$$\text{en } x = x_1 \quad -\mathcal{D}_{(1)} \frac{\partial C_{(1)}^S}{\partial x} = -\mathcal{D}_{(2)} \frac{\partial C_{(2)}^S}{\partial x}, \quad \text{para } t > 0 \quad (2.6)$$

y condiciones iniciales:

$$\text{en } t = 0 \quad C_{(1)}^S = f_1(x), \quad \text{para } 0 < x < x_1 \quad (2.7)$$

$$C_{(2)}^S = f_2(x), \quad \text{para } x_1 < x < x_2 \quad (2.8)$$

Se requiere una breve explicación de la nomenclatura debido a la presencia de dos fases y porque una generalización de la solución para considerar N capas será realizado posteriormente. Por lo tanto, el superíndice (S o F) indica la fase a la cual la concentración es referida, el subíndice (i) se refiere a la i -ésima capa en la película multi-capa S , y finalmente el subíndice j en el lado derecho indica la posición x_j . Por ejemplo, $C_{(1)3}^S$ es la concentración del soluto en la capa (1) de la película multi-capa S , que corresponde a la posición x_3 . Además, se ha designado a la concentración del soluto en el seno de la fase fluida como $C_{(1)\infty}^F$ y $C_{(2)\infty}^F$, respectivamente. El resto de parámetros adimensionales se definen en la Tabla 2.2.

Las ecuaciones diferenciales parciales (2.1) y (2.2) describen una situación física en la que no existe ninguna contribución por parte del movimiento global y no existe reacción química, además establecen que la velocidad de acumulación en la pared del material sólido es igual a la cantidad de masa que se difunde a través del sistema compuesto por dos capas.

Las condiciones de frontera [Ecs. (2.3)-(2.4)] se refieren a los valores de la concentración y sus derivadas que existen en posiciones específicas en las fronteras del sistema, en este caso relacionan la difusión de masa en la superficie a través de un coeficiente de transferencia de masa.

Las condiciones en $x = x_1$, Ecs. (2.6) y (2.5), describen la continuidad del flux y el equilibrio que existe entre las concentraciones de la interfase formada por las capas, respectivamente.

Las condiciones iniciales [Ecs. (2.7) y (2.8)] se refieren específicamente a los valores de la concentración que prevalecen al iniciarse el proceso que se está estudiando. Para este caso las condiciones iniciales se especifican de tal manera que puede existir una distribución de concentración al iniciar la medición del tiempo representada por funciones generales que en el caso más sencillo pueden ser constantes.

El problema definido por las Ecs. (2.1)-(2.8) puede reescribirse utilizando las variables definidas en la Tabla 2.1 en la forma adimensional siguiente:

$$\frac{\partial U_{(1)}}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 U_{(1)}}{\partial X^2}, \quad \text{para } 0 < X < X_1 \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial U_{(2)}}{\partial \tau} = \gamma_{(2)} \frac{\partial^2 U_{(2)}}{\partial X^2}, \quad \text{para } X_1 < X < 1 \quad (2.10)$$

para las condiciones a la frontera:

$$\text{en } X = 0 \quad + \frac{\partial U_{(1)}}{\partial X} = \alpha_{(0)} (U_{(1)} - U_{(1)\infty}), \quad \text{para } \tau > 0 \quad (2.11)$$

$$\text{en } X = 1 \quad - \frac{\partial U_{(2)}}{\partial X} = \alpha_{(2)} (U_{(2)} - U_{(2)\infty}), \quad \text{para } \tau > 0 \quad (2.12)$$

$$\text{en } X = X_1 \quad U_{(1)} = U_{(2)}, \quad \text{para } \tau > 0 \quad (2.13)$$

$$\text{en } X = X_1 \quad - \frac{\partial U_{(1)}}{\partial X} = -\beta_1 \frac{\partial U_{(2)}}{\partial X}, \quad \text{para } \tau > 0 \quad (2.14)$$

y la condición inicial:

$$\text{en } \tau = 0 \quad U_{(1)} = F_{(1)}(X) \quad \text{para } 0 < X < X_1 \quad (2.15)$$

$$U_{(2)} = F_{(2)}(X) \quad \text{para } X_1 < X < 1 \quad (2.16)$$

Los detalles de la adimensionalización se pueden consultar en la primera parte del Apéndice A.

Tabla 2.1 Definición de variables adimensionales.

$U_{(1)} = \frac{C_{(1)}^S}{C_{ref}^S}$	$U_{(2)} = \frac{K_{eq} C_{(2)}^S}{C_{ref}^S}$
$U_{(1)\infty} = \frac{k_0 C_{(1)\infty}^F}{C_{ref}^S}$	$U_{(2)\infty} = \frac{K_{eq} k_2 C_{(2)\infty}^F}{C_{ref}^S}$
$X = \frac{x}{x_2}$	$\tau = \frac{t \mathcal{D}_1}{x_2^2}$

Tabla 2.2 Parámetros adimensionales utilizados en el modelo.

$\alpha_{(0)} = \frac{k_1 x_2}{k_0 \mathcal{D}_{(1)}}$	$\alpha_{(2)} = \frac{k_2 x_2}{k_2 \mathcal{D}_{(2)}}$
$F_{(1)}(X) = \frac{f_1(x)}{C_{ref}^S}$	$F_{(2)}(X) = \frac{K_{eq} f_2(x)}{C_{ref}^S}$
$\beta_1 = \frac{\mathcal{D}_{(2)}}{\mathcal{D}_{(1)} K_{eq}}$	$\gamma_{(2)} = \frac{\mathcal{D}_{(2)}}{\mathcal{D}_{(1)}}$
$X_1 = \frac{x_1}{x_2}$	

2.4 Metodología de solución

La solución de las ecuaciones diferenciales parciales (EDP's), Ecs. (2.9)-(2.10), junto con las condiciones a la frontera, Ecs. (2.11)-(2.14), y las condiciones iniciales, Ecs. (2.15) y (2.16), requiere una metodología que permita, paso a paso, obtener una solución analítica, de tal manera que fácilmente se pueda extender a un sistema multi-capa (más de dos capas). En general, la metodología para resolver analíticamente el problema está basado en la expansión en términos de las funciones propias generadas por un problema de Sturm-Liouville. Este problema está definido considerando condiciones de frontera homogéneas para el problema de EDP's. Los pasos principales de este método de solución son:

- (a) Proponer y desarrollar la superposición $U_{(i)} = \tilde{U}_{(i)} + g_{(i)}$, donde las funciones $g_{(i)}$ pueden ser cualquier función que satisfaga las condiciones de frontera no-homogéneas [Ecs. (2.11)-(2.12)] para $U_{(i)}$. Esto genera condiciones de frontera homogéneas para $\tilde{U}_{(i)}$ y EDP's no-homogéneas.
- (b) Aplicar el método de separación de variables al sistema de EDP's transformado (EDP's no-homogéneas para $\tilde{U}_{(i)}$) con condiciones de frontera homogéneas, obteniendo un problema de Sturm-Liouville. La solución este problema permite encontrar un conjunto de funciones propias $\varphi_{(i)}$ junto con sus valores propios $\lambda_{(i)}$.
- (c) Resolver las EDP's no-homogéneas para $\tilde{U}_{(i)}$ a través de una expansión en términos de las funciones propias $\varphi_{(i)}$.

A continuación se describe en detalle cada uno de estos tres pasos.

2.4.1 Superposición

Con la finalidad de simplificar las condiciones a la frontera de las EDP's, se propone la siguiente superposición:

$$U_{(i)} = \tilde{U}_{(i)} + g_{(i)} \quad \text{para } i = 1, 2 \quad (2.17)$$

Aquí las funciones $g_{(i)}(X, \tau)$ se seleccionan de tal manera que satisfagan las condiciones de frontera no-homogéneas del problema original para $U_{(i)}$. Este requisito no compromete que las funciones $g_{(i)}(X, \tau)$ satisfagan las ecuaciones diferenciales. De tal manera que es posible proponer cualquier función que satisfaga la parte no-homogénea de las Ecs. (2.11)-(2.14). Es decir, que al eliminar la parte transitoria de las EDP's se deben seleccionar funciones lineales de la forma

$$g_{(1)}(X, \tau) = a_1 X + b_1 \quad (2.18)$$

$$g_{(2)}(X, \tau) = a_2 X + b_2 \quad (2.19)$$

Con esta proposición se obtienen relaciones lineales en X (los detalles de la deducción se encuentran disponibles en el Apéndice A):

$$g_{(1)}(X, \tau) = (U_{(2)\infty} - U_{(1)\infty}) \frac{\beta_1 \alpha_{(2)} [\alpha_{(0)} X + 1]}{\alpha_{(0)} + \alpha_{(2)} \alpha_{(0)} [1 + X_1 (\beta_1 - 1)] + \alpha_{(2)} \beta_1} + U_{(1)\infty}, \quad 0 < X < X_1 \quad (2.20)$$

$$g_{(2)}(X, \tau) = (U_{(2)\infty} - U_{(1)\infty}) \frac{\alpha_{(2)} \alpha_{(0)} [X + X_1 (\beta_1 - 1)] + \beta_1 \alpha_{(2)}}{\alpha_{(0)} + \alpha_{(2)} \alpha_{(0)} [1 + X_1 (\beta_1 - 1)] + \alpha_{(2)} \beta_1} + U_{(1)\infty}, \quad X_1 < X < 1 \quad (2.21)$$

Estas relaciones son iguales a las encontradas si el problema original se resolviera para el caso en el cual $U_{(1)\infty}$ y $U_{(2)\infty}$ fueran constantes.

La sustitución de la Ec. (2.17) en las Ecs. (2.9)-(2.16), y con las $g_{(i)}$ conocidas, nos permite formular el siguiente problema para $\tilde{U}_{(i)}$.

Ecuaciones diferenciales parciales transformadas:

$$\frac{\partial \tilde{U}_{(1)}}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \tilde{U}_{(1)}}{\partial X^2} - \frac{\partial g_{(1)}}{\partial \tau} \quad 0 < X < X_1 \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial \tilde{U}_{(2)}}{\partial \tau} = \gamma_{(2)} \frac{\partial^2 \tilde{U}_{(2)}}{\partial X^2} - \frac{\partial g_{(2)}}{\partial \tau} \quad X_1 < X < 1 \quad (2.23)$$

Condiciones de frontera homogéneas:

$$\text{en } X = 0 \quad + \frac{\partial \tilde{U}_{(1)}}{\partial X} = \alpha_{(0)} \tilde{U}_{(1)}, \text{ para } \tau > 0 \quad (2.24)$$

$$\text{en } X = 1 \quad - \frac{\partial \tilde{U}_{(2)}}{\partial X} = \alpha_2 \tilde{U}_{(2)}, \text{ para } \tau > 0 \quad (2.25)$$

$$\text{en } X = X_1 \quad \tilde{U}_{(1)} = \tilde{U}_{(2)}, \text{ para } \tau > 0 \quad (2.26)$$

$$\text{en } X = X_1 \quad - \frac{\partial \tilde{U}_{(1)}}{\partial X} = -\beta_1 \frac{\partial \tilde{U}_{(2)}}{\partial X}, \text{ para } \tau > 0 \quad (2.27)$$

Condición inicial:

$$\text{en } \tau = 0 \quad \tilde{U}_{(1)} = F_{(1)}(X) - g_{(1)}(X, 0), \text{ para } 0 < X < X_1 \quad (2.28)$$

$$\tilde{U}_{(2)} = F_{(2)}(X) - g_{(2)}(X, 0), \text{ para } X_1 < X < 1 \quad (2.29)$$

2.4.2 Generación y solución del problema de Sturm-Liouville

Con el fin de obtener la solución general del problema transformado [Ecs. (2.22)-(2.29)], primero debemos encontrar la solución del problema homogéneo, para el cual se puede aplicar el método de separación de variables, proponiendo soluciones de la forma

$\tilde{U}_{(i)} = \varphi_{(i)}(X)G(\tau)$, y obtener el problema de Sturm-Liouville asociado con las funciones.

Una vez encontrada la solución del problema homogéneo, en la siguiente sección se resuelve para el problema no homogéneo. Aquí es importante reconocer que la contribución del tiempo dada por la función $G(\tau)$ es la misma para ambas capas. Por lo tanto, el problema de Sturm-Liouville que se obtiene para este caso es:

Ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO):

$$\frac{d^2 \varphi_{(1)n}}{dX^2} = -\lambda_{(1)n}^2 \varphi_{(1)n}, \quad \text{para } 0 < X < X_1 \quad (2.30)$$

$$\gamma_{(2)} \frac{d^2 \varphi_{(2)n}}{dX^2} = -\lambda_{(2)n}^2 \varphi_{(2)n}, \quad \text{para } X_1 < X < 1 \quad (2.31)$$

Condiciones de frontera:

$$\text{en } X = 0 \quad + \frac{d \varphi_{(1)n}}{dX} = \alpha_{(0)} \varphi_{(1)n} \quad (2.32)$$

$$\text{en } X = 1 \quad - \frac{d \varphi_{(2)n}}{dX} = \alpha_{(2)} \varphi_{(2)n} \quad (2.33)$$

$$\text{en } X = X_1 \quad \varphi_{(1)n} = \varphi_{(2)n} \quad (2.34)$$

$$\text{en } X = X_1 \quad -\frac{d\varphi_{(1)n}}{dX} = -\beta_1 \frac{d\varphi_{(2)n}}{dX} \quad (2.35)$$

La solución del problema de valores a la frontera definido por las Ecs. (2.30)-(2.35) genera las funciones propias $\varphi_{(1)n}(X)$, $\varphi_{(2)n}(X)$ y la condición para encontrar los valores propios $\lambda_{(1)n}$:

Funciones propias

$$\varphi_{(1)n}(X) = K_{(1)n} \left[\frac{\alpha_{(0)}}{\lambda_{(1)n}} \text{sen}(\lambda_{(1)n} X) + \cos(\lambda_{(1)n} X) \right], \quad \text{para } 0 < X < X_1 \quad (2.36)$$

$$\varphi_{(2)n}(X) = K_{(2)n} \left[\alpha_{(2)} \frac{\text{sen}[\lambda_{(2)n}(1-X)]}{\lambda_{(2)n}} + \cos[\lambda_{(2)n}(1-X)] \right], \quad \text{para } X_1 < X < 1 \quad (2.37)$$

donde
$$\lambda_{(2)n} = \frac{\lambda_{(1)n}}{\sqrt{\gamma_{(2)}}} \quad (2.38)$$

$$K_{(1)n} = \frac{\alpha_{(2)} \frac{\text{sen}[\lambda_{(2)n}(1-X_1)]}{\lambda_{(2)n}} + \cos[\lambda_{(2)n}(1-X_1)]}{\left[\alpha_{(2)} \frac{\text{sen}(\lambda_{(2)n})}{\lambda_{(2)n}} + \cos(\lambda_{(2)n}) \right] \left[\frac{\alpha_{(0)}}{\lambda_{(1)n}} \text{sen}(\lambda_{(1)n} X_1) + \cos(\lambda_{(1)n} X_1) \right]} \quad (2.39)$$

$$K_{(2)n} = \frac{1}{\alpha_{(2)} \frac{\text{sen}(\lambda_{(2)n})}{\lambda_{(2)n}} + \cos(\lambda_{(2)n})} \quad (2.40)$$

Condiciones para los valores propios

$$\left\{ \frac{\alpha_{(2)} \text{sen} [\lambda_{(2)n} (1 - X_1)]}{\lambda_{(2)n}} + \cos [\lambda_{(2)n} (1 - X_1)] \right\} \left\{ \alpha_{(0)} \cos(\lambda_{(1)n} X_1) - \lambda_{(1)n} \text{sen}(\lambda_{(1)n} X_1) \right\} +$$

$$\beta_1 \left\{ \alpha_{(2)} \cos [\lambda_{(2)n} (1 - X_1)] - \lambda_{(2)n} \text{sen} [\lambda_{(2)n} (1 - X_1)] \right\} \left\{ \frac{\alpha_{(0)} \text{sen}(\lambda_{(1)n} X_1)}{\lambda_{(1)n}} + \cos(\lambda_{(1)n} X_1) \right\} = 0 \quad (2.41)$$

Una consecuencia del problema de Sturm-Liouville es la obtención de la condición de ortogonalidad de la solución, esto es, la propiedad de ortogonalidad de las funciones propias. En este caso, la *condición de ortogonalidad* es:

$$\int_0^{X_1} \varphi_{(1)n} \varphi_{(1)m} dX + \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} \int_{X_1}^1 \varphi_{(2)n} \varphi_{(2)m} dX = 0, \quad \text{para } m \neq n \quad (2.42)$$

La deducción de esta ecuación es similar a la que se obtiene cuando se resuelve el problema de Sturm-Liouville en un medio homogéneo. Sin embargo, en este caso de capas múltiples es necesario involucrar a las condiciones interfaciales.

Todos los detalles de la solución del problema de Sturm, así como la condición de ortogonalidad asociada se pueden revisar en el Apéndice A.

2.4.3 Solución del problema no-homogéneo para $\tilde{U}_{(i)}$

El proceso de solución inicia con la expansión para $\tilde{U}_{(i)}$ y la parte no-homogénea de las ecuaciones (2.22)-(2.23) en términos de las funciones propias, esto es:

$$\tilde{U}_{(i)} = \sum_{n=1}^{\infty} C_n(\tau) \varphi_{(i)n}, \quad \text{para } i=1,2 \quad (2.43)$$

Las expresiones para $\tilde{U}_{(i)}$ satisfacen las condiciones de frontera homogéneas dadas por las ecuaciones (2.24)-(2.27), pero no satisfacen las ecuaciones diferenciales (2.22) y (2.23). Este hecho se puede usar para obtener los coeficientes desconocidos dependientes del tiempo $C_n(\tau)$. Esto produce:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \varphi_{(1)n}(X) \frac{dC_n(\tau)}{d\tau} = \sum_{n=1}^{\infty} C_n(\tau) \frac{d^2 \varphi_{(1)n}(X)}{dX^2} - \frac{\partial g_{(1)}}{\partial \tau} \quad (2.44)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \varphi_{(2)n}(X) \frac{dC_n(\tau)}{d\tau} = \sum_{n=1}^{\infty} C_n(\tau) \gamma_{(2)} \frac{d^2 \varphi_{(2)n}(X)}{dX^2} - \frac{\partial g_{(2)}}{\partial \tau} \quad (2.45)$$

Para los últimos términos en ambas ecuaciones proponemos las siguientes expansiones

$$-\frac{\partial g_{(1)}}{\partial \tau} = \sum_{n=1}^{\infty} A_n(\tau) \varphi_{(1)n}(X) \quad (2.46)$$

$$-\frac{\partial g_{(2)}}{\partial \tau} = \sum_{n=1}^{\infty} A_n(\tau) \varphi_{(2)n}(X) \quad (2.47)$$

Los coeficientes dependientes del tiempo de estas expansiones $A_n(\tau)$ se determinan usando la condición de ortogonalidad [Ec. (2.42)] junto con las Ecs. (2.46)-(2.47). Esto es:

$$A_n(\tau) = \frac{-\int_0^{X_1} \frac{\partial g_{(1)}}{\partial \tau} \varphi_{(1)n} dX - \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} \int_{X_1}^1 \frac{\partial g_{(2)}}{\partial \tau} \varphi_{(2)n} dX}{\int_0^{X_1} \varphi_{(1)n}^2 dX + \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} \int_{X_1}^1 \varphi_{(2)n}^2 dX} \quad (2.48)$$

La substitución de (2.30)-(2.31), (2.46) y (2.47) en (2.44) y (2.45) nos lleva al resultado

$$\sum_{n=1}^{\infty} \varphi_{(1)n} \left(\frac{d C_n(\tau)}{d \tau} - \lambda_{(1)n}^2 C_n(\tau) - A_n(\tau) \right) = 0 \quad (2.49)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \varphi_{(2)n} \left(\frac{d C_n(\tau)}{d \tau} - \lambda_{(1)n}^2 C_n(\tau) - A_n(\tau) \right) = 0 \quad (2.50)$$

Ambas ecuaciones nos dan la misma ecuación diferencial para $C_n(\tau)$

$$\frac{d C_n(\tau)}{d \tau} - \lambda_{(1)n}^2 C_n(\tau) = A_n(\tau) \quad (2.51)$$

La solución de (2.51), que es una ecuación diferencial lineal de primer orden, es:

$$C_n(\tau) = \exp(-\lambda_{(1)n}^2 \tau) \left\{ C_n(0) + \int_0^{\tau} \exp(+\lambda_{(1)n}^2 \zeta) A_n(\zeta) d\zeta \right\} \quad (2.52)$$

En donde la constante $C_n(0)$ se obtiene a partir de las condiciones iniciales dadas por las Ecs. (2.28)-(2.29), las soluciones propuestas (2.43) y la condición de ortogonalidad (2.42), y está dada por:

$$C_n(0) = \frac{\int_0^{X_1} [F_{(1)}(X) - g_{(1)}(X, 0)] \varphi_{(1)n} dX + \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} \int_{X_1}^1 [F_{(2)}(X) - g_{(2)}(X, 0)] \varphi_{(2)n} dX}{\int_0^{X_1} \varphi_{(1)n}^2 dX + \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} \int_{X_1}^1 \varphi_{(2)n}^2 dX} \quad (2.53)$$

En este punto, se cuenta con una solución analítica para el problema originalmente definido por las Ecs. (2.9)-(2.16).

Todos los detalles asociados a la solución del problema no-homogéneo se encuentran reportados en la última sección del Apéndice A.

CAPÍTULO 3

CASOS DE ESTUDIO

Con el fin de integrar la solución analítica es necesario resolver las integrales indicadas para diferentes casos en donde la concentración dependa del tiempo. En estas secciones se proponen tres diferentes tipos de funcionalidades y se desarrollan las soluciones correspondientes.

3.1 Cálculo de los términos integrales

Como resultado de realizar las integrales indicadas para los coeficientes $C_n(0)$ y $A_n(\tau)$, dados por las Ecs. (2.48) y (2.53), se obtienen las siguientes expresiones:

$$A_n(\tau) = K_{(3)n} \frac{dU_{(1)\infty}}{d\tau} + K_{(4)n} \frac{dU_{(2)\infty}}{d\tau} \quad (3.1)$$

$$C_n(0) = \frac{I_{(1)n}(0) - I_{(2)n}(0)}{\mathcal{J}_n} \quad (3.2)$$

en donde

$$K_{(3)n} = -\frac{\alpha_{(0)} \varphi_{(1)n}(0)}{\mathcal{J}_n} \quad (3.3)$$

$$K_{(4)n} = \frac{\beta_1 \alpha_{(2)} \varphi_{(2)n}(1)}{\mathcal{J}_n} \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} 2\mathcal{J}_n = \varphi_{(2)n}^2(X_1) \left\{ X_1 + \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}}(1 - X_1) \right\} + \frac{1}{\lambda_{(1)n}^2} \left(\frac{d \varphi_{(2)n}}{d X} \right)^2 \Big|_{X_1} \{ X_1 \beta_1^2 + \beta_1(1 - X_1) \} \\ + \frac{1}{\lambda_{(1)n}^2} \{ \alpha_{(0)} \varphi_{(1)n}^2(0) + \alpha_{(2)} \beta_1 \varphi_{(2)n}^2(1) \} \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$I_{(1)n}(0) = \frac{U_{(1)0}}{\lambda_{(1)n}^2} [\alpha_{(0)} \varphi_{(1)n}(0) + \alpha_{(2)} \beta_1 \varphi_{(2)n}(1)] \quad (3.6)$$

$$I_{(2)n}(0) = [\alpha_{(0)} \varphi_{(1)n}(0) U_{(1)\infty}(0) + \alpha_{(2)} \beta_1 \varphi_{(2)n}(1) U_{(2)\infty}(0)] \frac{1}{\lambda_{(1)n}^2} \quad (3.7)$$

El término $I_{(1)n}(0)$ ha sido restringido al caso en donde $F_{(1)}(X) = F_{(2)}(X) = U_{(1)0}$. Las demás expresiones mantienen su forma general. Para obtener las Ecs. (3.3)-(3.7) se integra por partes junto con las condiciones de frontera dadas por las Ecs. (2.32)-(2.35).

Para poder realizar una evaluación de esta solución debemos proponer funcionalidades para las concentraciones en el seno de las fases fluidas, en este trabajo analizaremos tres funcionalidades del tiempo (τ) diferentes para estas concentraciones adimensionales, con el fin de evaluar los términos $A_n(\tau)$ y $C_n(\tau)$.

Los detalles correspondientes a la evaluación de los términos $K_{(3)n}$, $K_{(4)n}$, $\mathcal{J}_n$, $I_{(1)n}$, $I_{(2)n}$ se encuentran disponibles en el Apéndice A.

3.2 Funcionalidades para $U_{(1)\infty}$ y $U_{(2)\infty}$ con el tiempo.

A continuación se muestran las tres diferentes funcionalidades de las concentraciones del seno de las fases fluidas a considerar.

3.2.1 Caso I

$U_{(1)\infty}$ y $U_{(2)\infty}$ se consideran constante, esto es:

$$U_{(1)\infty} = U_{(1)0} \quad \text{y} \quad U_{(2)\infty} = U_{(2)0}$$

por lo tanto

$$A_n(\tau) = 0$$

$$C_n(\tau) = C_n(0) e^{(-\lambda_{(1)n}^2 \tau)}$$

3.2.2 Caso II

La concentración en el seno de las fases fluidas se considera que dependen exponencialmente del tiempo, esto es:

$$U_{(1)\infty} = U_{(1)0} - \sigma_1 e^{(-\mu_1 \tau)} \quad \text{y} \quad U_{(2)\infty} = U_{(2)0} - \sigma_2 e^{(-\mu_2 \tau)}$$

Por lo tanto

$$A_n(\tau) = -\frac{\alpha_{(0)} \varphi_{(1)n}(0)}{\mathcal{J}_n} \mu_1 \sigma_1 e^{(-\mu_1 \tau)} - \frac{\beta_1 \alpha_{(2)} \varphi_{(2)n}(1)}{\mathcal{J}_n} \mu_2 \sigma_2 e^{(-\mu_2 \tau)}$$

y

$$C_n(\tau) = C_n(0) e^{(-\lambda_{(1)n}^2 \tau)} + \frac{\mu_1 \sigma_1 K_{(3)n}}{\lambda_{(1)n}^2 - \mu_1} \left[e^{(-\mu_1 \tau)} - e^{(-\lambda_{(1)n}^2 \tau)} \right]$$

3.2.3 Caso III

Las concentración en el seno de la fase fluida se consideran que es constante al inicio del sistema formado por las dos capas sólidas y que depende periódicamente del tiempo al final de la segunda capa, es decir:

$$U_{(1)\infty} = U_{(1)0} \quad \text{y} \quad U_{(2)\infty} = U_{(2)0} - \sigma_2 \text{sen}(\omega_2 \tau)$$

por lo tanto

$$A_n(\tau) = \frac{\beta_1 \alpha_{(2)} \varphi_{(2)n}(1)}{\mathcal{J}_n} \omega_2 \sigma_2 \cos(\omega_2 \tau)$$

y

$$C_n(\tau) = C_n(0) e^{(-\lambda_{(1)n}^2 \tau)} - \frac{\omega_2 \sigma_2 K_{4n}}{\lambda_{(1)n}^4 + \omega_2^2} \left[\lambda_{(1)n}^2 \cos(\omega_2 \tau) + \omega_2 \text{sen}(\omega_2 \tau) - \lambda_{(1)n}^2 e^{(-\lambda_{(1)n}^2 \tau)} \right]$$

Finalmente a manera de resumen en la Tabla 3.1 se muestran las expresiones específicas de los coeficientes $C_n(\tau)$ y $A_n(\tau)$, para las tres funciones diferentes de la concentración adimensional de los fluidos perfectamente mezclados en contacto con el final de las capas. Es necesario remarcar que los coeficientes $C_n(0)$ dados por la Ec. (3.2) son los mismos, siempre y cuando la condición inicial sea $U_{(i)0}$. De cualquier manera, los coeficientes $A_n(\tau)$, dados por la Ec. (3.3), requieren la sustitución directa de las derivadas temporales de $U_{(1)\infty}$ y $U_{(2)\infty}$. Todos los detalles para la obtención de estas derivadas temporales también se encuentran disponibles en el Apéndice A.

El algoritmo que describe los pasos para obtener las evaluaciones de los casos mencionados se describe en el Apéndice C.

Tabla 3.1 Coeficientes $A_n(\tau)$ y $C_n(\tau)$ para un conjunto de tres expresiones diferentes de la concentración del seno de los fluidos $U_{(2)\infty}(\tau)$ y $U_{(2)0}(\tau)$.

Caso I $U_{(1)\infty} = U_{(1)0}$ y $U_{(2)\infty} = U_{(2)0}$	
$A_n(\tau)$	0
$C_n(\tau)$	$C_n(0)e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau}$
Caso II $U_{(1)\infty} = U_{(1)0} - \sigma_1 e^{-\mu_1 \tau}$ y $U_{(2)\infty} = U_{(2)0} - \sigma_2 e^{-\mu_2 \tau}$	
$A_n(\tau)$	$-\frac{\alpha_{(0)} \varphi_{(1)n}(0)}{\mathcal{J}_n} \mu_1 \sigma_1 e^{-\mu_1 \tau} - \frac{\beta_1 \alpha_{(2)} \varphi_{(2)n}(1)}{\mathcal{J}_n} \mu_2 \sigma_2 e^{-\mu_2 \tau}$
$C_n(\tau)$	$C_n(0)e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} + \frac{\mu_1 \sigma_1 K_{(3)n}}{\lambda_{(1)n}^2 - \mu_1} \left(e^{-\mu_1 \tau} - e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} \right) + \frac{\mu_2 \sigma_2 K_{(4)n}}{\lambda_{(1)n}^2 - \mu_2} \left(e^{-\mu_2 \tau} - e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} \right)$
Caso III $U_{(1)\infty} = U_{(1)0}$ y $U_{(2)\infty} = U_{(2)0} - \sigma_2 \text{sen}(\omega_2 \tau)$	
$A_n(\tau)$	$\frac{\beta_1 \alpha_{(2)} \varphi_{(2)n}(1)}{\mathcal{J}_n} \omega_2 \sigma_2 \cos(\omega_2 \tau)$
$C_n(\tau)$	$C_n(0)e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} - \frac{\omega_2 \sigma_2 K_{(4)n}}{\lambda_{(1)n}^4 + \omega_2^2} \left[\lambda_{(1)n}^2 \cos(\omega_2 \tau) + \omega_2 \text{sen}(\omega_2 \tau) - \lambda_{(1)n}^2 e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} \right]$

3.3 Definición de los coeficientes de transporte

Una vez encontrada la solución analítica del problema, esto es los perfiles de concentración en las capas sólidas, podemos utilizarla para calcular los coeficientes de transporte en términos de un número de Nusselt modificado. Es decir:

Partiendo de la definición, en el líquido

$$\mathbf{n}^{SF} \cdot \mathbf{N}_A^s = k_{(0)} (C_{(1)}^F - C_{(1)\infty}^F) \quad \text{en } x = x_0 \quad (3.8)$$

$$\mathbf{n}^{SF} \cdot \mathbf{N}_A^s = k_{(2)} (C_{(2)}^F - C_{(2)\infty}^F) \quad \text{en } x = x_2 \quad (3.9)$$

y en el sólido

$$N_{Ax}^s = -\mathcal{D}_{(1)} \frac{C_{(1)L}^s - C_{(1)0}^s}{x_L - x_0} \quad (3.10)$$

$$N_{Ax}^s = -\mathcal{D}_{(2)} \frac{C_{(2)2}^s - C_{(2)L}^s}{x_2 - x_L} \quad (3.11)$$

Podemos encontrar que los coeficientes de transferencia de masa quedan definidos a través de las siguientes expresiones (ver detalle en el Apéndice A):

$$k_{(0)} = \frac{-\mathcal{D}_{(1)} \left. \frac{\partial C_{(1)}^s}{\partial x} \right|_{x_0}}{C_{(1)\infty}^{s*} - k_{eq} C_{(2)\infty}^{s*}} \quad (3.12)$$

o en forma adimensional

$$k_{(0)} = \frac{-\mathcal{D}_{(1)} \left. \frac{\partial U_{(1)}}{\partial x} \right|_{x_0}}{x_2 U_{(1)\infty} - U_{(2)\infty}} \quad (3.13)$$

$$Nu_{(0)} = \frac{K_{(0)}x_2}{\mathcal{D}_{(1)}} = - \frac{\left. \frac{\partial U_{(1)}}{\partial x} \right|_{x_0}}{U_{(1)\infty} - U_{(2)\infty}} \quad (3.14)$$

El lado derecho de la Ec. (3.14) involucra al coeficiente de transporte de masa, representado por el número de Nusselt. **225969**

Del mismo modo para el material 2

$$Nu_{(2)} = \frac{K_{(2)}x_2}{\mathcal{D}_{(2)}} = - \frac{\left. \frac{\partial U_{(2)}}{\partial x} \right|_{x_2}}{U_{(1)\infty} - U_{(2)\infty}} \quad (3.15)$$

CAPÍTULO 4

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

El objetivo de evaluar la solución analítica del problema de difusión dinámico es encontrar los perfiles de concentración temporales y obtener los coeficientes de transferencia de masa globales, y compararlos con los obtenidos bajo la suposición del estado cuasi estacionario. Hasta este momento se han encontrado las soluciones analíticas para estos problemas. A continuación, para cada uno de los casos de estudio, se evalúa la solución analítica y los resultados se muestran en términos de los perfiles de concentración adimensionales, los fluxes temporales, y los coeficientes de transporte expresados en términos del número de Nusselt. Estos resultados también se compararan con los obtenidos a partir de la solución numérica correspondiente.

4.1 Búsqueda de los valores propios

Un primer paso para evaluar la solución es encontrar los valores propios asociados, para lo cual se resuelve la Ec. (2.41). En la Figura 4.1 se muestra una gráfica representativa de esta función cuyas raíces dan los valores propios buscados. Para la determinación de las raíces se utilizó el método de Müller, el cual se describe en el Apéndice B. Es importante mencionar que dado que los valores propios $\lambda_{(1)n}$ son una colección infinita, la solución analítica exacta se obtendría solamente con el conjunto completo de esta colección, sin embargo para propósitos de evaluación se toma un número determinado de valores propios tales que las solución de $U_{(1)}$ y $U_{(2)}$ tengan convergencia. Como ejemplo, la Tabla 4.1 muestra solamente los primeros siete valores propios para diferentes combinaciones de los parámetros $\alpha_{(0)}$ y $\alpha_{(2)}$.

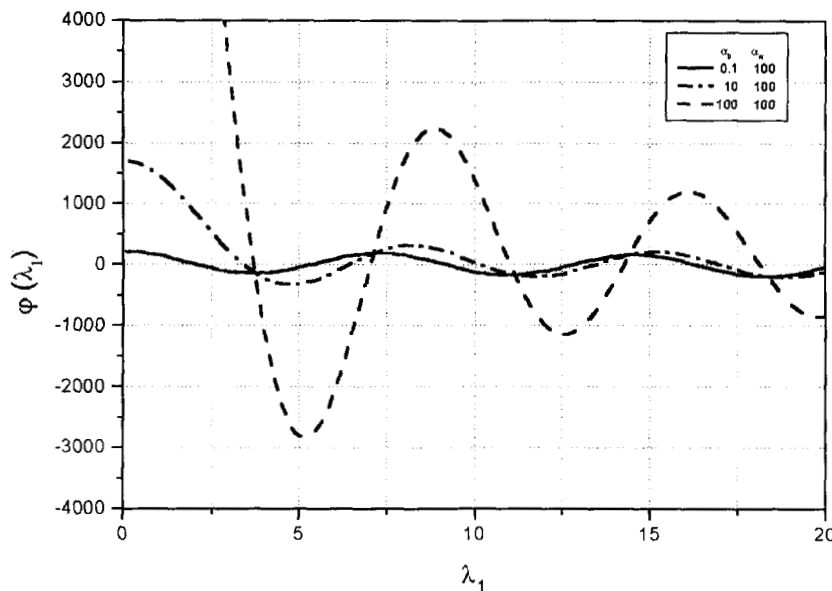


Figura 4.1 Gráficas de la función que determina los valores propios para los casos en que el parámetro $\alpha_{(0)}$ toma los valores de 0.1, 10.0 y 100.0. El parámetro $\alpha_{(2)}$ se mantiene en 100.0.

Tabla 4.1 Raíces de la condición de los valores propios

$\alpha_{(0)}$	$\alpha_{(2)} = 0.1$						
	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_6	λ_7
0.1	0.542655	3.653414	7.579777	10.86589	14.90612	18.33004	22.07767
10	1.581771	5.069331	8.47392	11.71197	15.6005	18.83039	22.62591
100	1.726318	5.60954	9.086742	12.66536	16.55307	19.82057	23.82477
	$\alpha_{(2)} = 10.0$						
0.1	1.941782	4.960962	8.72008	11.96756	15.61712	19.21222	22.6102
10	3.168221	6.073589	9.643738	12.63095	16.31502	19.66286	23.12891
100	3.421458	6.654249	10.34915	13.47666	17.3577	20.55433	24.33621
	$\alpha_{(2)} = 100.0$						
0.1	2.075618	5.347884	9.197526	12.82708	16.30623	20.27395	23.53558
10	3.412271	6.436911	10.18778	13.45381	16.99288	20.75325	27.96293
100	3.712369	7.045245	11.02348	14.26765	18.12832	21.67424	25.15356

Los valores de los parámetros utilizados en la evaluación de la solución analítica, que aquí se reporta, son:

- (a) $\alpha_{(0)} = 10.0$ y $\alpha_{(2)} = 1.0$. Estos representan los números de Biot de masa al principio y al final de las capas. Estos valores se seleccionaron de tal manera que la resistencia a la transferencia de masa en $x = 0$ sea importante, lo cual implica que el sistema tarda en alcanzar el equilibrio entre la concentración del fluido circundante y la del sólido. Valores reportados en la literatura muestran que para Números de Biot mucho mayores que 1.0 la resistencia a la transferencia de masa en las paredes sólidas domina el proceso de transporte, mientras que para Números de Biot mucho menores que 1.0 la resistencia a la transferencia de masa en la película fluida domina el proceso (Middleman, 1998).

- (b) $X_1 = 0.5$. Se refiere a que los espesores de los materiales 1 y 2 son iguales.
- (c) $\gamma_{(2)} = 3.0$. Este parámetro implica que la difusividad del soluto en el material 1 ($\mathcal{D}_1$) es tres veces menor que la difusividad en el material 2 ($\mathcal{D}_2$).
- (d) $\beta_1 = 4.0$. Lo cual implica que la constante de equilibrio en la interfase entre el material 1 y el material 2 es $k_{eq} = 0.75$, esto es se favorece el transporte hacia el material 2.
- (e) Por último, los parámetros pre-exponenciales $\sigma_1 = 0.8$ y $\sigma_2 = 0.4$, los factores de decaimiento de las funciones exponenciales $\mu_1 = 10.0$ y $\mu_2 = 20.0$, así como el factor de frecuencia de la función periódica $\omega_2 = 5.0$, fueron seleccionados tales que representen cambios suaves de las concentraciones en el seno de los dos fluidos en los extremos de la multi-capa para los casos II y III.

Una vez que los valores propios $\lambda_{(1)n}$ han sido evaluados, las expresiones para $U_{(1)\infty}$ y $U_{(2)\infty}$ como funciones del tiempo y sus derivadas deben ser conocidas para completar la evaluación de la solución analítica. La condición inicial se fijó en $U_{(1)0} = 1.0$ y $U_{(2)0} = 2.0$, y se usan tres diferentes funcionalidades en el tiempo para las concentraciones $U_{(1)\infty}$ y $U_{(2)\infty}$ tal como se describió en el capítulo anterior.

4.2 Caso I

La concentración adimensional del seno de las fases fluidas $U_{(1)\infty}$ y $U_{(2)\infty}$ se considera constante. En la Figura 4.2 se muestran los resultados de la evolución de la solución analítica para este caso. Los perfiles de concentración adimensionales en ambas capas se presentan como función de la posición adimensional (X) y del tiempo adimensional (τ). En la Figura 4.2 puede notarse que cuando el tiempo τ se incrementa, los perfiles de concentración cambian de un comportamiento no lineal con respecto a la posición a un estado estacionario lineal definido. Además, se observa que la concentración en los bordes de la película cambia con el tiempo hasta que éstos alcanzan sus valores en estado estacionario. Es importante señalar que debido a la resistencia al transporte presentado por el fluido, los valores de estado estacionario en los bordes de la película son diferentes para $U_{(1)0} = 1$ y $U_{(2)0} = 2$. El cambio en la pendiente de los perfiles para ambas capas (1 y 2) en $X = 0.5$ es debido a las diferencias entre los coeficientes de difusión de ambas fases y a la incorporación del coeficiente de equilibrio, lo cual se genera debido a que $\beta_1 = 4.0$.

Asimismo en la Figura 4.3 se muestran los mapas de concentración comparando la solución analítica completa con la obtenida bajo la suposición del estado cuasi estacionario. Como podemos observar cuando las condiciones del seno fluido no dependen del tiempo la suposición solo predice, como era de esperarse, el estado estacionario que se alcanza cuando $\tau > 0.9$, y cuya diferencia se refleja en el flux difusivo (Figura 4.4).

En la Figura 4.5 se muestran los números de Nusselt transitorios al inicio y final de las capas, así como el evaluado con la suposición del estado cuasi estacionario. En esta figura

se puede apreciar que existen cambios significativos a tiempos cortos al principio y final de la pared, logrando alcanzar los valores en estado estacionario a $\tau > 0.9$.

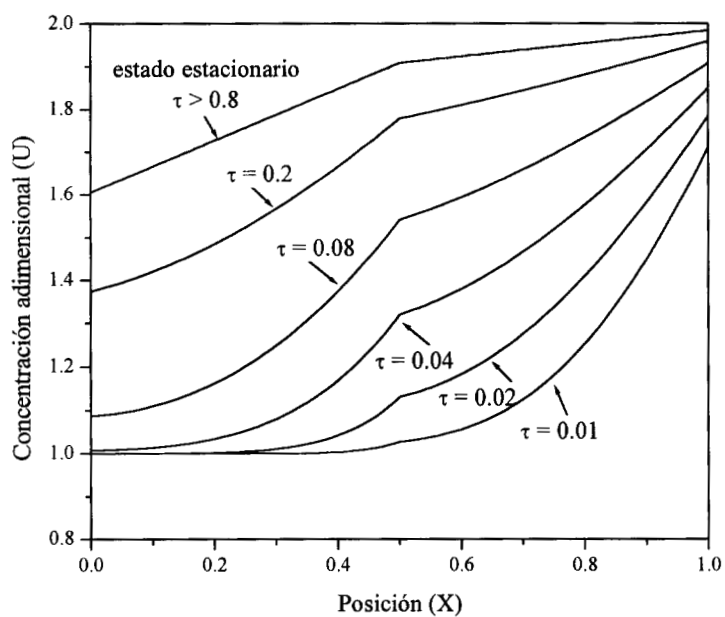


Figura 4.2 Evolución de los perfiles de concentración adimensional para un sistema sujeto a concentraciones de fluido constantes. Caso I.

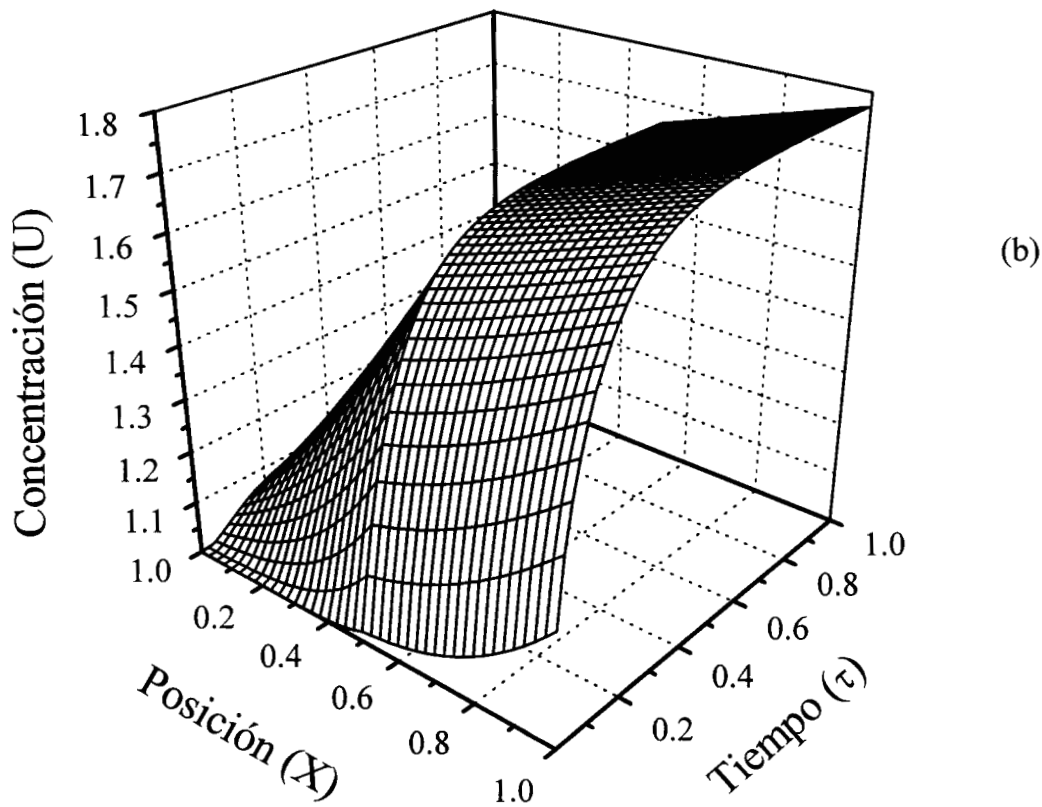
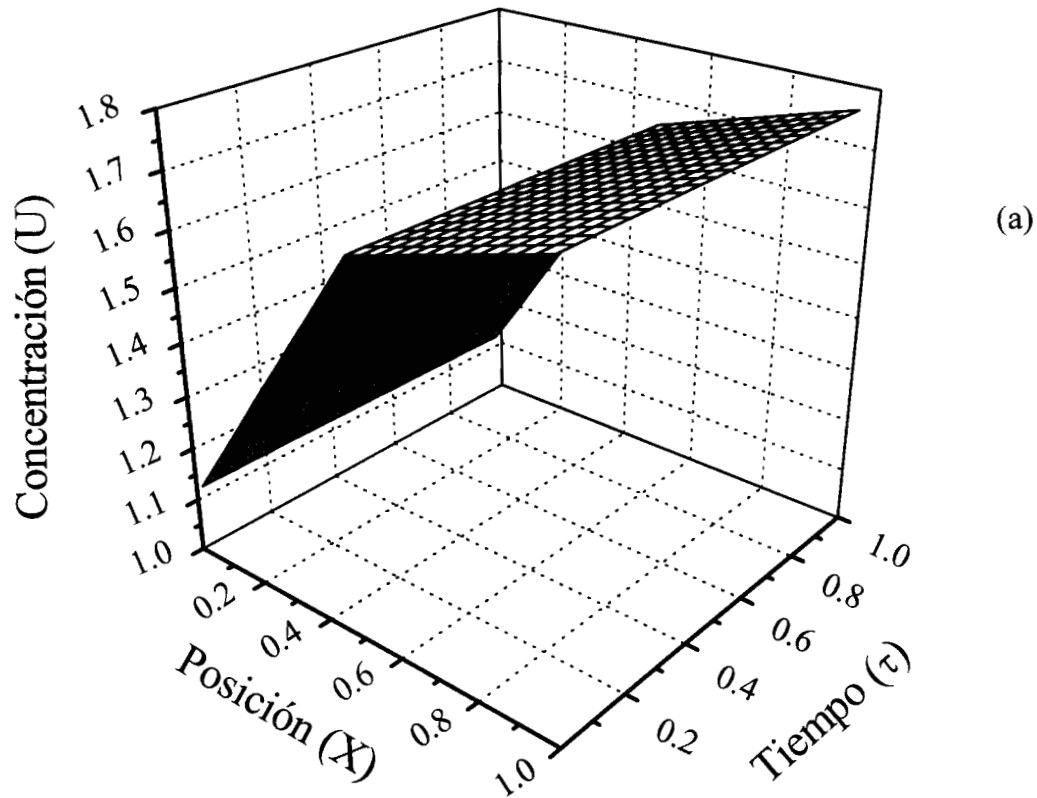


Figura 4.3 Comparación de los mapas de concentración para el sistema formado por dos capas: (a) Suposición de estado cuasi estacionario, (b) Solución exacta. Caso I.

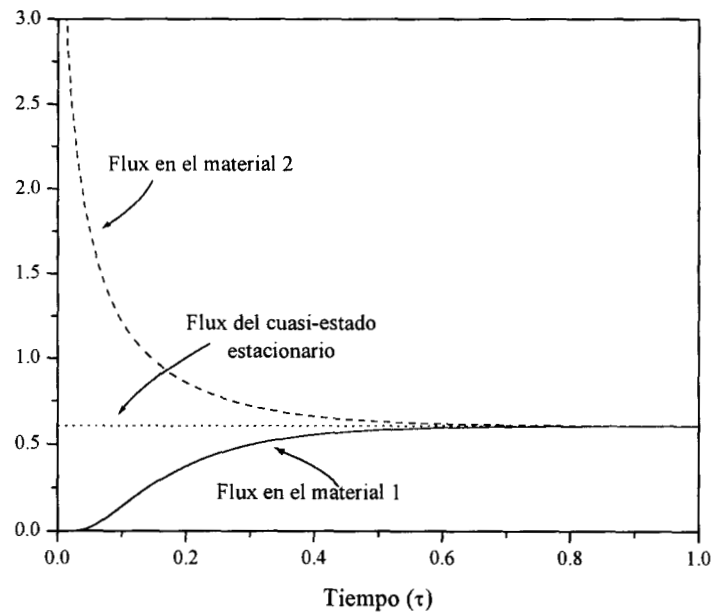


Figura 4.4 Comparación de los flujos de concentración para el sistema formado por dos capas entre la suposición de estado cuasi estacionario y la solución completa. Caso I.

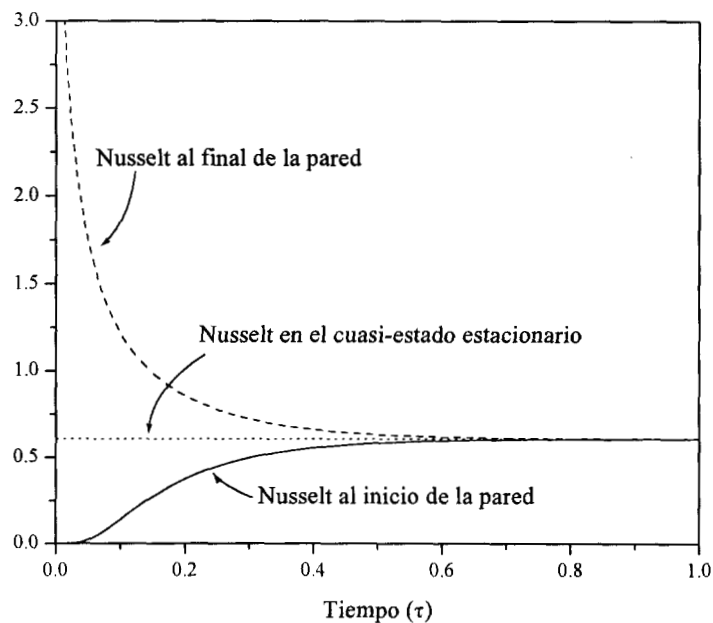


Figura 4.5 Números de Nusselt transitorios al inicio y al final de las capas, y el evaluado con la suposición del estado cuasi estacionario. Caso I.

4.3 Caso II

Para este caso se considera la concentración adimensional en el seno de las fases $U_{(1)\infty}$ y $U_{(2)\infty}$ como funciones exponenciales. Los valores para los parámetros $\alpha_{(0)}$, $\alpha_{(2)}$, X_1 , $\gamma_{(2)}$, y β_1 son los mismos que se emplearon para el caso I. En este caso ambas concentraciones, en el seno de las fase fluidas cambia continuamente con el tiempo hasta que alcanzan un valor constante para $\tau \gg 0.9$.

En la Figura 4.6 se muestran los resultados de la evaluación analítica para este caso. Se puede ver dos comportamientos diferentes de los perfiles. Conforme el tiempo τ aumenta, el perfil de concentración en la capa 1 disminuye y cambia de un comportamiento parabólico con respecto a la posición a un comportamiento en estado estacionario lineal definido. Por otra parte, para la capa 2, se puede ver que el perfil de concentración es lineal y aumenta continuamente con el tiempo. Los perfiles de estado estacionario se alcanzan en $\tau > 0.9$. Como en el caso I, se puede ver que la concentración en los bordes de la película cambian con el tiempo hasta que alcanzan sus valores en estado estacionario. Debido a la resistencia al transporte de los fluidos, los valores en estado estacionario en los bordes de los fluidos son diferentes para $U_{(1)0} = 1.0$ y $U_{(2)0} = 2.0$.

Tal vez este sea el caso más representativo de un proceso real de transporte difusivo líquido-sólido debido a que la forma exponencial de la concentración en el seno de las fases fluidas puede representar cambio pequeños y suaves (cambio rampa) hasta cambios bruscos en tiempos muy cortos (cambio escalón). La Figura 4.7 se muestran los perfiles de concentración en la posición y en el tiempo, en esta gráfica se observa que la forma exponencial de la concentración en el seno de las fases provoca que a pequeños cambios en el tiempo existan cambios drásticos en los perfiles de concentración y en los fluxes Figura 4.8. El perfil predicho utilizando la suposición del estado cuasi estacionario muestra un

comportamiento lineal, sin embargo el obtenido de la solución del modelo dinámico lo presenta una vez alcanzado el estado estacionario ($\tau > 0.9$).

Los coeficientes de equilibrio y la diferencia de difusividades se observa en $X = 0.5$, que es el valor en donde se fijó el espesor para cada uno de los materiales. Por otra parte, el factor de decaimiento exponencial se fijó en $\mu_1 = 10.0$, con el objetivo de no obtener un cambio drástico de la concentración en un tiempo pequeño, como se observa en la Figura 4.8. La representación obtenida con la suposición del estado cuasi estacionario es adecuada a partir de que se alcanza el estado estacionario.

En la Figura 4.9 se observa que la dependencia exponencial afecta fuertemente los números de Nusselt a tiempos mayores logrando alcanzar el estado estacionario a $\tau > 0.9$.

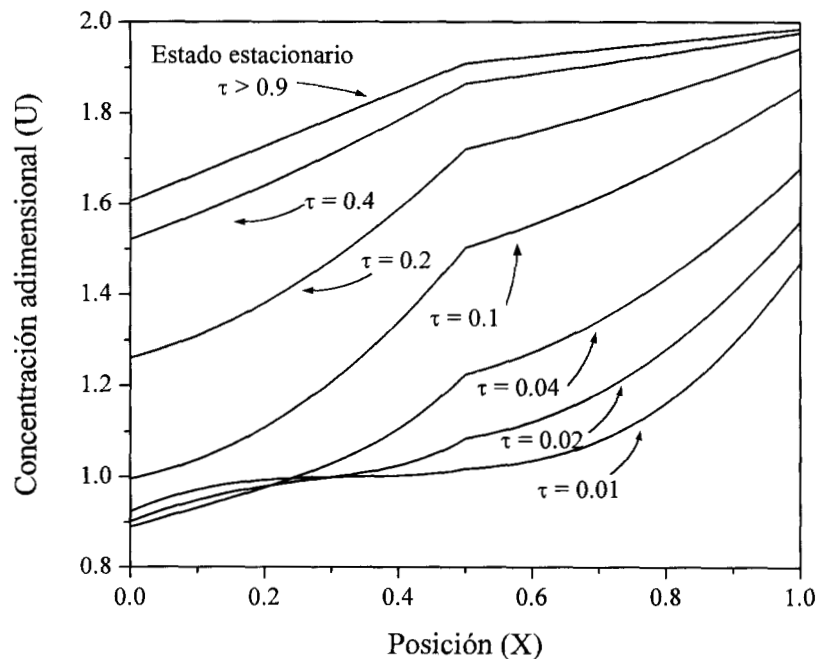


Figura 4.6 Evolución de los perfiles de concentración adimensional para un sistema sujeto a concentraciones de fluido variables. Caso II.

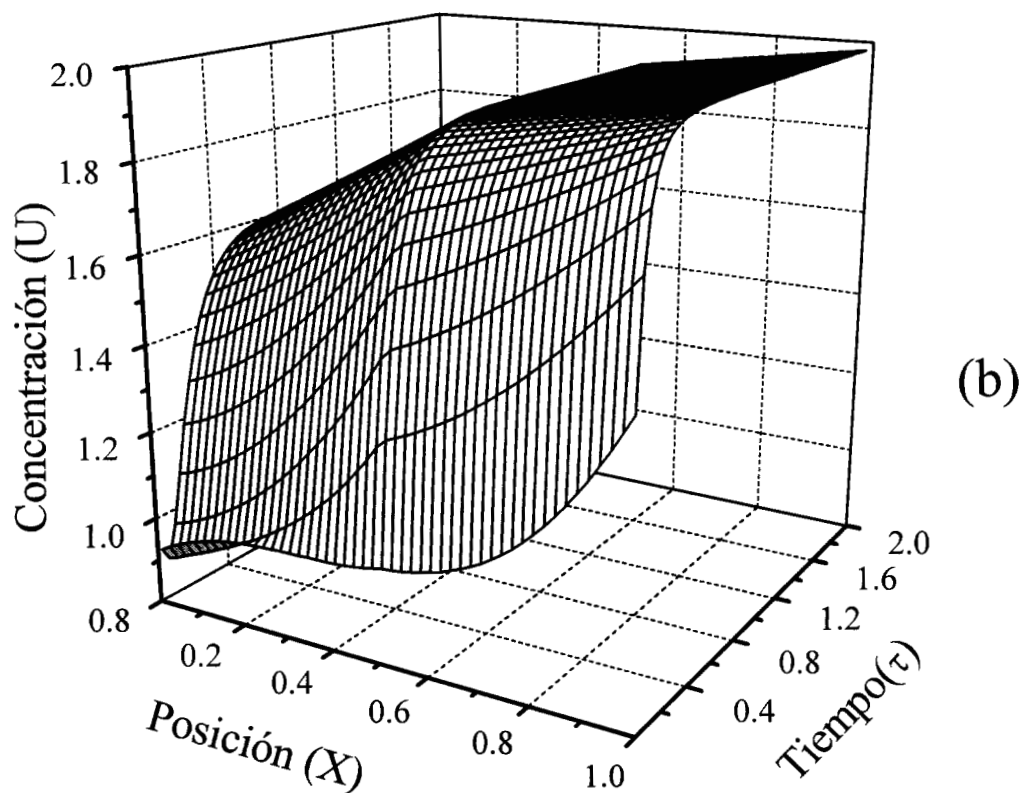
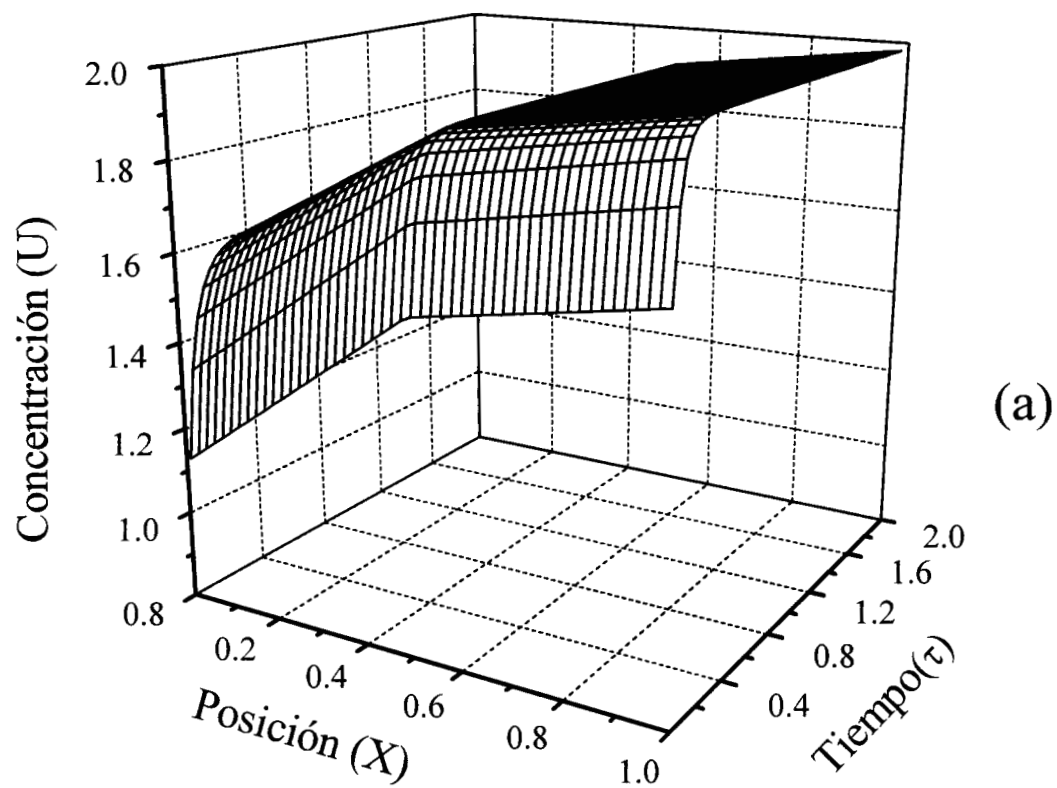


Figura 4.7 Comparación de los mapas de concentración para el sistema formado por dos capas: (a) Suposición de estado cuasi estacionario, (b) Solución exacta. Caso II.

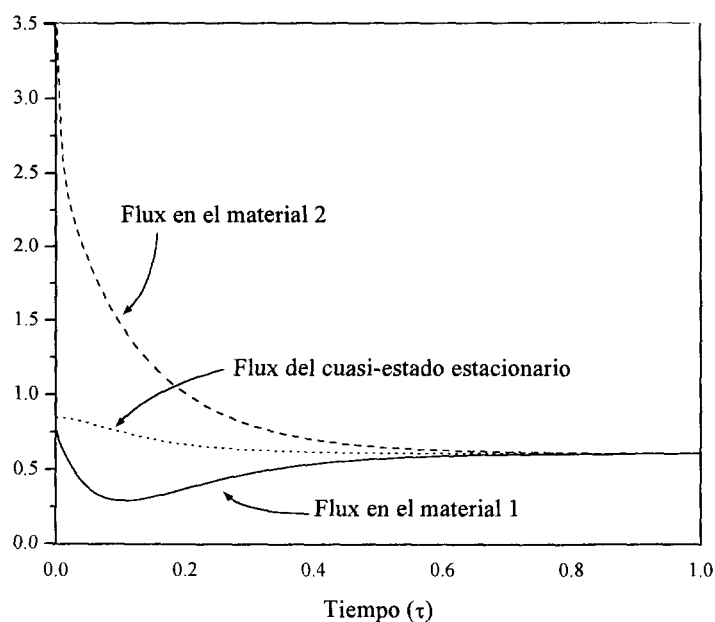


Figura 4.8 Comparación de los flujos de concentración para el sistema formado por dos capas entre la suposición de estado cuasi estacionario y la solución completa. Caso II.

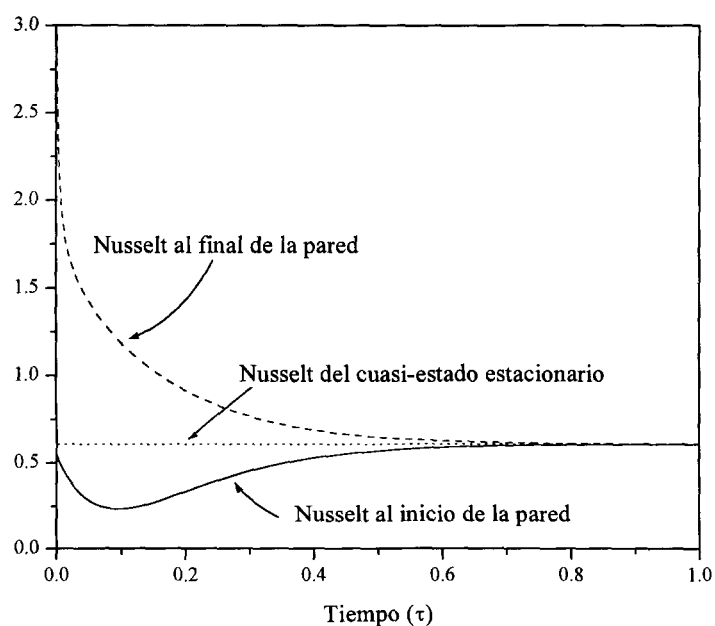


Figura 4.9 Números de Nusselt transitorios al inicio y al final de las capas, y el evaluado con la suposición del estado cuasi estacionario. Caso II.

4.4 Caso III

La mayoría de procesos estudiados son idealizaciones, en el mundo real por ejemplo, las concentraciones en el seno del fluido no pueden cambiar instantáneamente ni existe transporte en una sola dirección ni en bloques de geometría perfectamente definida. No obstante hay procesos reales donde las concentraciones en la superficie se incrementan rápidamente hasta alcanzar una concentración constante, y hay procesos reales donde el espesor de la capa límite de masa es pequeño comparado con el espesor del bloque para tiempos cortos. Bajo estas circunstancias, las soluciones idealizadas son aproximaciones razonables de los procesos reales.

El caso que se estudia a continuación corresponde a la idealización de un proceso real sujeto a una concentración en el seno del fluido que rodea al bloque multi-capa, la cual puede variar periódicamente. Por analogía con la transferencia de calor, se puede ejemplificar este proceso como el caso de la temperatura de la superficie de la tierra que experimenta variaciones periódicas: enfriamiento durante la noche y calentamiento durante el día. Además de estas variaciones diarias, existen variaciones anuales; la temperatura promedio en la superficie aumenta durante el verano y disminuye durante el invierno.

El análisis de los procesos periódicos está frecuentemente asociado con el diseño de sistemas de control, el cual evita variaciones en la temperatura o en la concentración de algún proceso que ocasionan que el proceso sea inestable de manera indeseable. Aunque los problemas de este tipo son normalmente complicados, se puede obtener cierta comprensión

de éstos mediante el estudio de la transferencia en un bloque finito sujeto a temperaturas superficiales o concentraciones en el seno del fluido periódicas.

Por esta razón consideramos para este caso que la concentración en el seno de la fase $U_{(1)\infty}$ se mantiene constante y $U_{(2)\infty}$ es una función periódica del tiempo. Los valores usados para los parámetros son los mismos que los usados en los casos anteriores.

En la Figura 4.10 se muestran los resultados de la evaluación de la solución analítica para este caso. Es importante señalar que no se alcanza el estado estacionario. Sin embargo, se observan dos comportamientos diferentes en los perfiles. Se mantiene una tendencia creciente, y posteriormente a tiempos grandes los perfiles de concentración disminuyen, este comportamiento es consecuencia de la naturaleza periódica de la concentración en el seno del fluido en contacto con la capa 2.

En la Figura 4.11 se muestran los mapas de concentración temporales comparados con los obtenidos utilizados con la suposición del estado cuasi estacionario. En estas figuras se observa que la predicción aproximada se acerca a medida que el tiempo avanza y se encuentra con la solución dinámica (en $\tau \approx 1.0$), para posteriormente reproducir el mismo comportamiento, sin alcanzar un estado estacionario definido pero sí un ciclo límite.

La Figura 4.12 muestra los fluxes correspondientes. Como puede observarse en ningún caso los fluxes son constantes, pero son iguales en $\tau \approx 1.0$, lo que lleva a concluir que la suposición del estado cuasi estacionario para este caso y para la combinación de parámetros usados puede no ser adecuada.

En la Figura 4.13 se observa que la dependencia periódica de la condición de frontera con el tiempo provoca oscilaciones en la predicción de los números de Nusselt, existiendo variaciones importantes al inicio y al final de las paredes del material sólido lo que puede predecir para este caso la no validez de la suposición del estado cuasi estacionario.

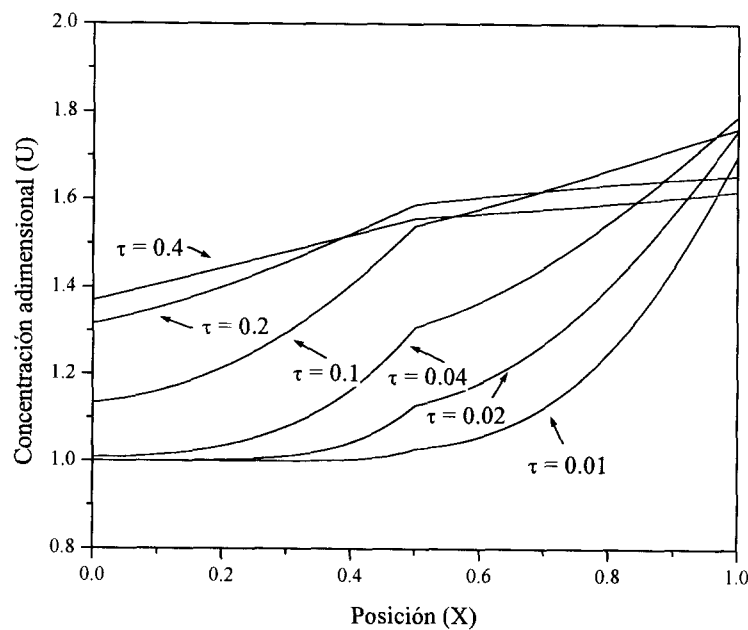


Figura 4.10 Evolución de los perfiles de concentración adimensional para un sistema sujeto a concentraciones de fluido constantes y periódicamente dependientes del tiempo. Caso III.

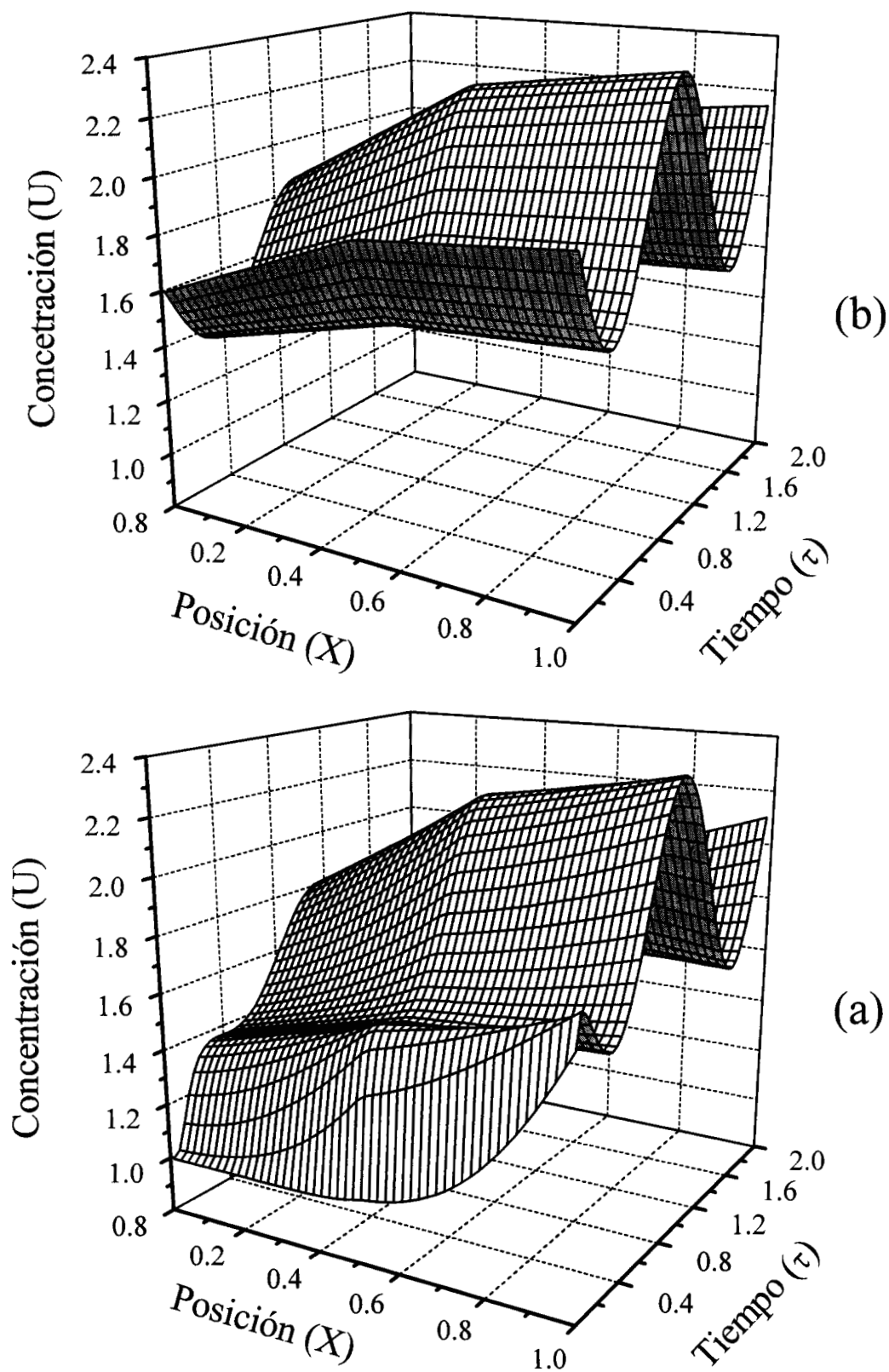


Figura 4.11 Comparación de los mapas de concentración para el sistema formado por dos capas: (a) Suposición de estado cuasi estacionario, (b) Solución exacta. Caso III.

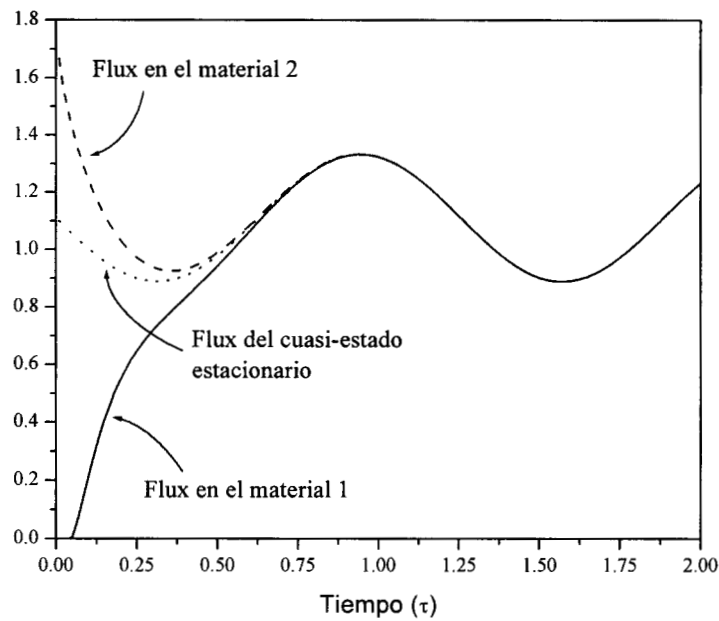


Figura 4.12 Comparación de los fluxes de concentración para el sistema formado por dos capas entre la suposición de estado cuasi estacionario y la solución completa. Caso III.

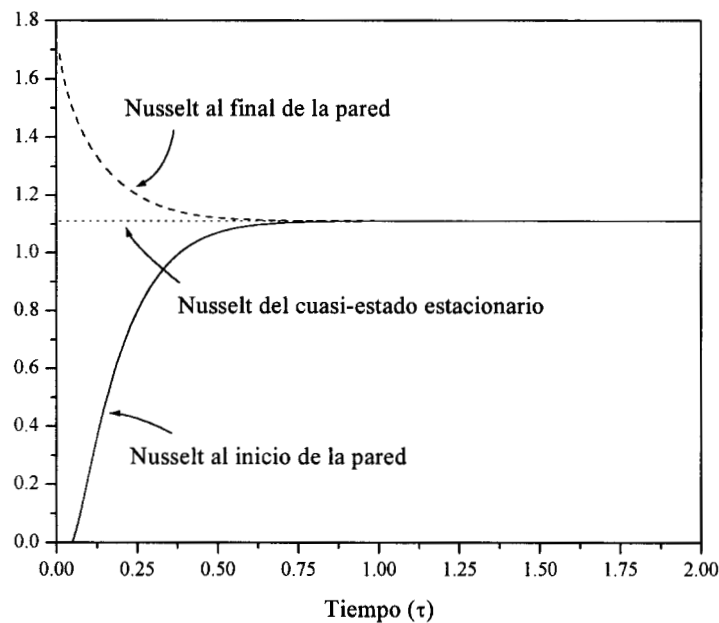


Figura 4.13 Números de Nusselt transitorios al inicio y al final de las capas, y el evaluado con la suposición del estado cuasi estacionario. Caso III.

4.5 Solución numérica contra solución analítica

En la Tabla 4.2 se muestra la comparación entre la solución numérica (método de diferencias finitas) y la solución analítica del problema. Es importante remarcar en la Tabla 4.2 que el error es nulo en la condición inicial ($\tau = 0$), y cuando se alcanza el estado estacionario. También, se puede ver que el error disminuye. Es obvio que el tiempo de computo necesario para la solución analítica es mucho menor que el empleado para la solución numérica del problema.

Tabla 4.2 Solución Analítica vs. Solución Numérica.

t	Posición X								
τ	0.250			0.500			0.750		
	Num	Analítica	Error	Num	Analítica	Error	Num.	Analítica	Error
0.000	1.000	1.000	0.000%	1.000	1.000	0.000%	1.000	1.000	0.000%
0.200	1.560729	1.543920	1.089%	1.844744	1.833050	0.638%	1.892920	1.885115	0.414%
0.400	1.761317	1.754934	0.364%	1.944132	1.940976	0.163%	1.965206	1.963074	0.109%
0.600	1.794908	1.793294	0.090%	1.958793	1.958042	0.038%	1.975619	1.975107	0.026%
0.800	1.800269	1.799912	0.020%	1.961103	1.96094	0.008%	1.977256	1.977143	0.006%
1.000	1.801121	1.801047	0.004%	1.961469	1.961436	0.002%	1.977515	1.977492	0.001%
Est. Esta	1.801282	1.801282	0.000%	1.961539	1.961539	0.000%	1.977564	1.977564	0.000%
Tiempo	Solución Numérica			0:01:09					
CPU	Solución Analítica			0:00:04					

Comparación porcentual de los perfiles de concentración o temperatura y tiempos de computo entre la solución numérica y la solución analítica utilizando la siguiente combinación de parámetros $X_1 = 0.50$, $\alpha_{(0)} = 1.0$, $\alpha_{(2)} = 10.0$, $\beta_1 = 4.0$, $\gamma_{(2)} = 3.0$, $U_{(1)0} = 1.0$, $U_{(2)0} = 2.0$

4.6 Posibles casos de aplicación

225969

Transporte de masa dinámico a través de barreras en rellenos sanitarios

Las regulaciones actuales para la construcción de rellenos sanitarios municipales requieren la preparación de una barrera que separe la región en la que serán depositados los residuos de los mantos acuíferos subterráneos. La barrera consta usualmente de una película polimérica con una permeabilidad baja para los solutos tóxicos, la cual es colocada encima de una capa gruesa de arcilla que previene el paso vertical de agua que podría llevar contaminantes hacia los mantos acuíferos. Debido a que la arcilla tiene una alta resistencia al flujo (una baja permeabilidad hidráulica), la capa de arcilla es diseñada usualmente (esto es, especificada) para tener un espesor que reduzca al mínimo la velocidad de flujo vertical. Sin embargo, este concepto ignora la posibilidad de difusión como una ruta paralela e importante mediante el cual las toxinas se pueden mover en dirección vertical. Como una consecuencia para predecir la tasa a la cual los contaminantes se mueven hacia los mantos acuíferos subterráneos, se debe estudiar la hidráulica de la fase acuosa así como el transporte difusivo de los contaminante en la fase acuosa y a través de la barrera de membrana polimérica y arcilla.

En un posible análisis se puede considerar un sistema formado por dos capas (membrana polimérica y arcilla) con una concentración C_A para la especie tóxica de estudio. Es necesario conocer la solubilidad y la difusividad/permeabilidad de la especie A en la película polimérica y en la barrera de arcilla, con la complicación adicional que la arcilla es un medio compuesto caracterizado por una porosidad, una tortuosidad y un coeficiente de

retardo que depende de la capacidad de la arcilla para absorber a la especie *A*. El método más directo para caracterizar la barrera consiste en tomar muestras del medio arcilloso y obtener sus coeficientes de difusión experimentales, en el cual el transporte sea controlado y medido. Si se tiene acceso al relleno sanitario o a otra región geológicamente similar, este problema puede ser estudiado.

Administración de medicamentos vía cutánea

Un sistema para poner en circulación a un fármaco anti-nausea (Dramamine) consiste en disolver el fármaco en una película gruesa de gelatina y aplicarla como un parche sobre la piel. La gelatina es puesta entre dos membranas poliméricas delgadas que no presentan resistencia al paso del fármaco. Además el fármaco no es volátil en el aire del alrededor.

El problema de difusión consiste en determinar el tiempo requerido para que el fármaco sea transferido al sistema circulatorio, a través del sistema difusivo formado por la capa de gelatina y la capa de la piel.

CONCLUSIONES

Una gran cantidad de trabajos en su mayoría con un nivel matemático complejo y sofisticado en sus desarrollos se encuentra disponible en la literatura para problemas de difusión de calor o de masa en sistemas sólidos compuestos por varias capas. En los últimos años con la disponibilidad de computadoras digitales, de alta velocidad y poder de cálculo, se han implementado esquemas numéricos y se han logrado avances significativos en la búsqueda de soluciones de algunos tipos de problemas complicados aplicando técnicas de colocación, diferencias finitas o elemento finito. Sin embargo, existe una gran cantidad de problemas de importancia práctica que pueden ser estudiados por métodos analíticos, aún más las soluciones analíticas son importantes debido a que permiten analizar el significado de los parámetros que afectan o favorecen los procesos de transporte, así como el de servir de referencia para los métodos numéricos. Por otro lado, los tratamientos analíticos disponibles en la literatura para problemas de calor y masa aún están en desarrollo, y el número y tipo de problemas a resolver son cada vez mayores debido a la variedad de combinaciones de parámetros físicos que gobiernan las ecuaciones de conservación, las condiciones de frontera, y el acoplamiento entre ellas.

Una revisión de los trabajos disponibles muestra soluciones para casos específicos, por lo que hace necesario encontrar soluciones analíticas generales para abordar un mayor número de problemas específicos.

En este trabajo se desarrolló una solución analítica para el problema de difusión transitoria en un sistema formado por dos capas, guardando la generalidad de la solución para diferentes condiciones.

La solución analítica se obtuvo utilizando conceptos matemáticos sencillos, tales como el de la superposición y la separación de variables, demostrando que es posible construir soluciones analíticas para sistemas multi-capa. La sencillez en la metodología de solución y evaluación para el problema de difusión dinámica, como el presentado en este trabajo, hace pensar que la técnica descrita puede aplicarse para obtener soluciones satisfactorias de problemas de difusión dinámica en sistemas de paredes compuestas más complejos e incluso que incluyan reacción química de orden cero o de pseudo primer orden.

En este trabajo se consideraron tres expresiones diferentes para la concentración del seno de las fase fluidas $U_{(1)\infty}$ y $U_{(2)\infty}$. La solución de estos casos de estudio permite abordar una gran variedad de problemas, tales como el endurecimiento de aleaciones de fierro, secado de madera o de sal, el transporte difusivo de oxígeno en células, etc.

Se analizó y comparó la solución dinámica con la que se obtiene bajo la suposición del estado cuasi estacionario. Los resultados muestran que el tipo de funcionalidad con el tiempo para $U_{(1)\infty}$ y $U_{(2)\infty}$ puede afectar la forma de los perfiles de concentración, los fluxes y los coeficientes de transporte representados por el número de Nusselt dentro del sistema multi-capa. En el mismo sentido, el efecto de la funcionalidad no permite alcanzar un estado estacionario (caso III).

Otro aspecto importante de la solución analítica fue el estudio de los coeficientes globales de transporte dependientes del tiempo y su comparación con los que se obtienen bajo la suposición del estado cuasi estacionario, encontrando diferencias importantes para algunos casos.

Esto nos permite concluir que existen situaciones en las cuales la suposición puede no ser adecuada.

Como es sabido, es de importancia fundamental la estimación de coeficientes de transporte para el diseño de reactores catalíticos o de membrana, flujo a través de camas empacadas, y que en su mayoría se obtienen bajo la suposición del estado cuasi estacionario. El análisis demuestra que existen situaciones en las que la suposición del estado cuasi estacionario en problemas de transporte difusivo en sistemas de varias resistencias no siempre es adecuado y su introducción en la solución de estos problemas puede provocar un error significativo en la predicción de los coeficientes de transporte globales, esto por consecuencia, provocará errores en el diseño y en el análisis de sistemas dinámicos.

Otra ventaja de la solución analítica para este modelo lineal, cuando ésta se compara con la obtenida numéricamente, es la reducción en el tiempo de cálculo empleado para evaluar la solución del problema con la misma exactitud. Este hecho confirma el valor que tiene una solución analítica en la solución de problemas en los que se involucra tareas intensivas.

El problema así tratado se puede generalizar para más de dos placas y se puede intentar la solución analítica para el problema de difusión bidimensional o investigar el efecto de cualquier tipo de condición de frontera sobre el cálculo de los coeficientes de transporte

transitorios, además con la redefinición apropiada de variables y parámetros esta misma metodología se puede aplicar a un problema de transferencia de calor.

El principal objetivo y contribución de este trabajo se orientó hacia el uso de un método teórico más que al uso de correlaciones empíricas, entendiendo por método teórico el desarrollo de un modelo que relaciona los parámetros efectivos de transporte con los parámetros esenciales medibles de los procesos difusivos. Por lo tanto, las constantes no empíricas o ajustables son involucradas.

Finalmente, es importante comentar que los resultados obtenidos en este trabajo deberán esperar una verificación con resultados experimentales, es decir, esta tesis es solo el primer paso en la búsqueda de soluciones analíticas que permitan, en alguna medida, el cálculo satisfactorio de coeficiente de transporte dinámicos.

NOMENCLATURA

$A_n(\tau)$	=	Función definida en la Ec. (2.48), adimensional.
$C_n(\tau)$	=	Función definida en la Ec. (2.52), adimensional.
$C_{(i)j}^S$	=	Concentración de soluto en la i -ésima en la posición x_j , mol/m^3 .
$C_{(i)j}^F$	=	Concentración de soluto en la fase fluida en contacto con la i -ésima capa en la posición x_j , mol/m^3 .
C_{ref}^S	=	Concentración de referencia de la fase sólida, mol/m^3 .
$\mathcal{D}_{(i)}$	=	Coefficiente de difusión del i -ésimo material, m^2/s .
$f_i(x)$	=	Condición de distribución inicial en la i -ésima capa, mol/m^3 .
$F_i(X)$	=	Condición de distribución inicial en la i -ésima capa, adimensional.
$g_{(i)}$	=	Función que satisface las condiciones de frontera no homogéneas, adimensional.
$I_{(1)n}(0)$	=	Función definida por la Ec. (3.6), adimensional.
$I_{(2)n}(0)$	=	Función definida por la Ec. (3.7), adimensional.
$\mathcal{J}_n$	=	Definido en la Ec. (3.5), adimensional.
κ_0	=	Coefficiente de distribución de equilibrio entre el fluido y el material 1.
κ_2	=	Coefficiente de distribución de equilibrio entre el fluido y el material 2.
k_0	=	Coefficiente de transferencia de masa de película en la posición x_0 , m/s .
k_2	=	Coefficiente de transferencia de masa de película en la posición x_2 , m/s .
$K_{(0)}$	=	Coefficiente global de transferencia de masa para el material 1.
$K_{(2)}$	=	Coefficiente global de transferencia de masa para el material 2.
K_{eq}	=	Coefficiente de Equilibrio entre las dos capas sólidas, adimensional.
$K_{(j)n}$	=	Constantes definidas en las Ecs. (2.39), (2.40), (3.3), y (3.4), adimensional.
$Nu_{(0)}$	=	Nusselt al inicio de la pared.
$Nu_{(2)}$	=	Nusselt al final de la pared.

t	=	Tiempo, s.
$U_{(i)}$	=	Concentración en la i -ésima capa, adimensional.
$U_{(i)\infty}$	=	Concentración en el seno del fluido que esta en contacto con la i -ésima capa, adimensional.
$\tilde{U}_{(i)}$	=	Función de concentración obtenida por la solución del problema de valores a la frontera homogéneo, adimensional.
X	=	Posición, adimensional
x	=	Posición, m.
x_i	=	Espesor de la i -ésima capa, m.

Letras Griegas

$\alpha_{(0)}$	=	Número de Biot del fluido en la posición x_0 , $k_0 x_2 / K_0 \mathcal{D}_{(1)}$.
$\alpha_{(2)}$	=	Número de Biot del fluido en la posición x_2 , $k_2 x_2 / K_2 \mathcal{D}_{(2)}$.
β_1	=	Relación de permeabilidad de las capas sólidas, $\mathcal{D}_{(2)} K_{eq} / \mathcal{D}_{(1)}$.
$\gamma_{(2)}$	=	Relación de coeficientes de difusión, $\mathcal{D}_{(2)} / \mathcal{D}_{(1)}$.
ζ	=	Variable muda, adimensional.
$\lambda_{(j)}$	=	Valores propios.
τ	=	Tiempo, adimensional.
$\varphi_{(j)}$	=	Funciones propias.

Subíndices

i	=	Indica la i -ésima capa de material ($i = 1, 2$)
j	=	Contador ($j = 1, 2, \dots$)
0	=	Condición inicial
∞	=	Seno de la fase fluida.

Superíndices

S	=	Sólido
F	=	Fluido

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Aris, R., 1989, *Elementary Chemical Reactor Analysis*, Butterworths, Boston.
- [2] Bulavin, P.E., y Kascheev, V.M., 1965, "Solution of the Nonhomogeneous Heat Conduction Equation for Multilayered Bodies", *Int. Chem. Eng.* **1**, 112.
- [3] Bird, R.B., Stewart, W.E., y Lightfoot, E.N. , 1987, *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons, New York.
- [4] Carslaw, H.S., y Jaeger, J.C., 1959, *Conduction of Heat in Solids*, 2a. Ed., Oxford University Press, Oxford, Great Britain.
- [5] Conte, S.D., y de Boor, C., 1980, *Elementary Numerical Analysis*, 3a. Ed., McGraw-Hill, Tokyo.
- [6] Crank, J., 1975, *The Mathematics of Diffusion*, Claredon Press, 2a. Ed., Oxford, Great Britain.
- [7] Crank, J., y Park, G.S., 1968, *Diffusion in Polymers*, Academic Press, London.
- [8] Cussler, E.L., 1997, *Diffusion: Mass transfer in fluid systems*, 2a. Ed., Cambridge Univ. Press, New York.
- [9] Cheremisinoff, N.P. (Ed.), 1986, *Handbook of Heat and Mass Transfer*, Vol. 2: Mass Transfer and Reactor Design, Gulf Pub. Co., Houston, Texas.
- [10] Churchill, R.V., 1939, "On the problem of Temperatures in a Non-Homogeneous Bar with Discontinuous Initial Temperatures", *J. Math.* **41**, 651.

- [11] Faridi, N., Duda, J.L., y Hadj-Romadhane, I., 1995, "Unsteady-state diffusion in block copolymers with lamellar domains", *Ind. Engng. Chem. Res.* **34**, 3556.
- [12] Gandek, T.P., Hatton, T.A., y Reid, R.E., 1989, *Ind. Eng. Chem. Res.* **28**, 1030.
- [13] Hatton, T.A., Chiang, A.S., Noble, P.T., y Lightfoot, E.N., 1979, *Chem. Engng. Sci.* **34**, 133.
- [14] Hatton, T.A., Lewellen, P.C., y Lightfoot, E.N., 1982, *Chem. Engng. Sci.* **37**, 1315.
- [15] Hatton, T.A., 1985, *Chem. Engng. Sci.* **40**, 167.
- [16] Kern, D.Q., 1989, *Process Heat Transfer*, McGraw Hill, New York.
- [17] Lewellen, P.C., Hatton, T.A., y Lightfoot, E.N., 1982, *Chem. Engng. Sci.* **37**, 1315.
- [18] Lowan, A.N., 1935, "Heat Conduction in a semi-infinite solid of two different materials", *Duke Math. J.* **1**, 94.
- [19] Middleman, S., 1998, *An introduction to mass and heat transfer: Principles of analysis and design*, John Wiley & Sons, Inc., New York.
- [20] Mikhailov, M.D., y Özişik, M.N., 1984, *Unified Analysis and Solution of Heat and Mass Diffusion*, Dover Publications, Inc., New York.
- [21] Mulholland, G.P., y Cobble, M.N., 1975, "Diffusion Through Composite Media", *Int. J. Heat Mass Transf.* **15**, 147.
- [22] Ochoa Tapia, J.A., 1999, *Métodos Matemáticos Aplicados a la Ingeniería Química*, Universidad Autónoma Metropolitana, Cap. III., 69.
- [23] Ramkrishna D., y Amundson, N.R., 1974, "Transport in composite materials: reduction to a self adjoint formalism", *Chem. Eng. Sci.* **29**, 1457.

225969

- [24] Rein, D.H., Baddour, R.F., y Cohen, R.E., 1992, "Gas solubility and diffusion in a polystyrene-polybutadiene block copolymer", *J. Appl. Polym. Sci.* **45**, 1223.
- [25] Rein, D.H., Csernica, J., Baddour, R.F., y Cohen R.E., 1990, "CO₂ diffusion and solubility in a polystyrene-polybutadiene block copolymer with a highly oriented lamellar morphology", *Macromolecules* **23**, 4456.
- [26] Sales Cruz, A.M., y Ochoa Tapia, J.A., 1998, "Difusión dinámica en un sistema de dos fases: separación de variables no convencional", *Memorias del XIX Encuentro Nacional de la AMIDIQ*, 287.
- [27] Sales Cruz, A.M., y Ochoa Tapia, J.A., 1999, "La suposición de estado cuasi estacionario en problemas de difusión en sistemas de multi-capa", *Memorias del XX Encuentro Nacional de la AMIDIQ*.
- [28] Tittle, C.W., 1965, "Boundary Value Problems in Composite Media: Quasi-orthogonal Functions", *J. Applied Physics* **36**, 1486.
- [29] Ventras, J.S., y Ventras, C.M., 1997, "An exact solution for unsteady diffusion in a block copolymer with a highly oriented lamellar morphology", *Chem. Eng. Sci.* **52**, 985.

APÉNDICE A. DETALLES DE LA SOLUCIÓN ANALÍTICA DEL PROBLEMA DE DIFUSIÓN

Detalles de la adimensionalización de las ecuaciones diferenciales parciales de difusión.

Utilizando las definiciones de las variables adimensionales (Tabla 2.1) se lleva a cabo la adimensionalización de las ecuaciones diferenciales (2.1) y (2.2) para obtener las ecuaciones (2.9) y (2.10) como sigue:

$$\frac{\partial C_{(1)}^S}{\partial t} = C_{ref}^S \frac{\partial U_{(1)}}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial t} = \frac{C_{ref}^S \mathcal{D}_1}{x_2^2} \frac{\partial U_{(1)}}{\partial \tau} \quad (A.1)$$

$$\frac{\partial C_{(1)}^S}{\partial x} = C_{ref}^S \frac{\partial U_{(1)}}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial x} = \frac{C_{ref}^S}{x_2} \frac{\partial U_{(1)}}{\partial X} \quad (A.2)$$

$$\frac{\partial^2 C_{(1)}^S}{\partial x^2} = \frac{C_{ref}^S}{x_2} \left(\frac{\partial^2 U_{(1)}}{\partial X^2} \frac{\partial X}{\partial x} \right) = \frac{C_{ref}^S}{x_2^2} \frac{\partial^2 U_{(1)}}{\partial X^2} \quad (A.3)$$

$$\frac{C_{ref}^S \mathcal{D}_1}{x_2^2} \frac{\partial U_{(1)}}{\partial \tau} = \mathcal{D}_1 \frac{C_{ref}^S}{x_2^2} \frac{\partial^2 U_{(1)}}{\partial X^2} \quad (A.4)$$

$$\boxed{\frac{\partial U_{(1)}}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 U_{(1)}}{\partial X^2}} \quad (A.5)$$

Ec. (2.9)

$$\frac{\partial C_{(2)}^S}{\partial t} = \frac{C_{ref}^S}{K_{eq}} \frac{\partial U_{(2)}}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial t} = \frac{C_{ref}^S \mathcal{D}_1}{K_{eq} x_2^2} \frac{\partial U_{(2)}}{\partial \tau} \quad (A.6)$$

$$\frac{\partial C_{(2)}^S}{\partial x} = \frac{C_{ref}^S}{K_{eq}} \frac{\partial U_{(2)}}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial x} = \frac{C_{ref}^S}{K_{eq} x_2} \frac{\partial U_{(2)}}{\partial X} \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{\partial^2 C_{(2)}^S}{\partial x^2} = \frac{C_{ref}^S}{K_{eq} x_2} \left(\frac{\partial^2 U_{(2)}}{\partial X^2} \frac{\partial X}{\partial x} \right) = \frac{C_{ref}^S}{K_{eq} x_2^2} \frac{\partial^2 U_{(2)}}{\partial X^2} \quad (\text{A.8})$$

$$\frac{C_{ref}^S \mathcal{D}_{(1)}}{K_{eq} x_2^2} \frac{\partial U_{(2)}}{\partial \tau} = \mathcal{D}_{(2)} \frac{C_{ref}^S}{K_{eq} x_2^2} \frac{\partial^2 U_{(2)}}{\partial X^2} \quad (\text{A.9})$$

$$\frac{\partial U_{(2)}}{\partial \tau} = \frac{\mathcal{D}_{(2)}}{\mathcal{D}_{(1)}} \frac{\partial^2 U_{(2)}}{\partial X^2} = \gamma_{(2)} \frac{\partial^2 U_{(2)}}{\partial X^2} \quad (\text{A.10})$$

$$\boxed{\frac{\partial U_{(2)}}{\partial \tau} = \gamma_{(2)} \frac{\partial^2 U_{(2)}}{\partial X^2}} \quad (\text{A.11})$$

Ec. (2.10)

Procediendo de la misma forma, adimensionalizamos las condiciones de frontera, Ecs. (2.3)

-(2.5), y las iniciales, Ecs. (2.7)-(2.8), para obtener las Ecs. (2.11) a (2.16) como sigue

en $X = 0$

$$\left. \frac{\partial C_{(1)}^S}{\partial x} \right|_{x=0} = C_{ref}^S \frac{\partial U_{(1)}}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial x} = \frac{C_{ref}^S}{x_2} \frac{\partial U_{(1)}}{\partial X} \quad (\text{A.12})$$

$$\mathcal{D}_{(1)} \frac{C_{ref}^S}{x_2} \frac{\partial U_{(1)}}{\partial X} = k_0 \left(\frac{C_{ref}^S U_{(1)}}{K_0} - \frac{C_{ref}^S U_{(1)\infty}}{K_0} \right) \quad (\text{A.13})$$

$$\mathcal{D}_{(1)} \frac{C_{ref}^S}{x_2} \frac{\partial U_{(1)}}{\partial X} = k_0 \frac{C_{ref}^S}{K_0} (U_{(1)} - U_{(1)\infty}) \quad (\text{A.14})$$

$$\frac{\partial U_{(1)}}{\partial X} = k_0 \frac{x_2 C_{ref}^S}{K_0 \mathcal{D}_{(1)} C_{ref}^S} (U_{(1)} - U_{(1)\infty}) \quad (\text{A.15})$$

$$\boxed{\frac{\partial U_{(1)}}{\partial X} = \alpha_{(0)} (U_{(1)} - U_{(1)\infty})} \quad (\text{A.16})$$

Ec. (2.11)

en $X = 1$

$$\left. \frac{\partial C_{(2)}^S}{\partial x} \right|_{x=x_2} = \frac{C_{ref}^S}{K_{eq}} \frac{\partial U_{(2)}}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial x} = \frac{C_{ref}^S}{K_{eq} x_2} \frac{\partial U_{(2)}}{\partial X} \quad (\text{A.17})$$

$$-\mathcal{D}_{(2)} \frac{C_{ref}^S}{K_{eq} x_2} \frac{\partial U_{(2)}}{\partial X} = k_2 \left(\frac{C_{ref}^S U_{(2)}}{K_{eq} K_2} - \frac{C_{ref}^S U_{(2)\infty}}{K_{eq} K_2} \right) \quad (\text{A.18})$$

$$-\mathcal{D}_{(2)} \frac{C_{ref}^S}{K_{eq} x_2} \frac{\partial U_{(2)}}{\partial X} = k_2 \frac{C_{ref}^S}{K_{eq} K_2} (U_{(2)} - U_{(2)\infty}) \quad (\text{A.19})$$

$$-\frac{\partial U_{(2)}}{\partial X} = k_2 \frac{x_2 K_{eq} C_{ref}^S}{\mathcal{D}_{(2)} K_2 K_{eq} C_{ref}^S} (U_{(2)} - U_{(2)\infty}) \quad (\text{A.20})$$

$$\boxed{-\frac{\partial U_{(2)}}{\partial X} = \alpha_{(2)} (U_{(2)} - U_{(2)\infty})} \quad (\text{A.21})$$

Ec. (2.12)

en $X = X_1$

$$C_{ref}^S U_{(1)} = K_{eq} \frac{C_{ref}^S}{K_{eq}} U_{(2)} \quad (\text{A.22})$$

$$U_{(1)} = \frac{K_{eq} C_{ref}^S}{K_{eq} C_{ref}^S} U_{(2)} \quad (\text{A.23})$$

$$\boxed{U_{(1)} = U_{(2)}} \quad (\text{A.24})$$

Ec. (2.13)

en $X = X_1$

$$-\mathcal{D}_{(1)} \frac{C_{ref}^S}{x_2} \frac{\partial U_{(1)}}{\partial X} = -\mathcal{D}_{(2)} \frac{C_{ref}^S}{K_{eq} x_2} \frac{\partial U_{(2)}}{\partial X} \quad (\text{A.25})$$

$$\frac{\partial U_{(1)}}{\partial X} = \frac{\mathcal{D}_{(2)}}{\mathcal{D}_{(1)}} \frac{x_2 C_{ref}^S}{K_{eq} x_2 C_{ref}^S} \frac{\partial U_{(2)}}{\partial X} \quad (\text{A.26})$$

$$\boxed{\frac{\partial U_{(1)}}{\partial X} = \beta_1 \frac{\partial U_{(2)}}{\partial X}} \quad (\text{A.27})$$

Ec. (2.14)

y las condiciones iniciales

cuando $\tau = 0$

$$C_{ref}^S U_{(1)} = C_{ref}^S F_{(1)}(X) \quad (\text{A.28})$$

$$\boxed{U_{(1)} = F_{(1)}(X)} \quad (\text{A.29})$$

Ec. (2.15)

$$\frac{C_{ref}^S}{K_{eq}} U_{(2)} = \frac{C_{ref}^S}{K_{eq}} F_{(2)}(X) \quad (\text{A.30})$$

$$\boxed{U_{(2)} = F_{(2)}(X)} \quad (\text{A.31})$$

Ec. (2.16)

Detalles de la superposición (cuasi - estado estacionario)

Al eliminar la parte transitoria de las ecuaciones diferenciales, Ec. (2.9)-(2.10), se proponen funciones que satisfagan las condiciones a la frontera, Ec. (2.11)-(2.14):

$$\text{en } X=0, \quad +\frac{\partial g_{(1)}}{\partial X} = \alpha_{(0)} (g_{(1)} - U_{(1)\infty}), \quad \text{para } \tau > 0 \quad (\text{A.32})$$

$$\text{en } X=1, \quad -\frac{\partial g_{(2)}}{\partial X} = \alpha_{(2)} (g_{(2)} - U_{(2)\infty}), \quad \text{para } \tau > 0 \quad (\text{A.33})$$

$$\text{en } X=X_1, \quad g_{(1)} = g_{(2)}, \quad \text{para } \tau > 0 \quad (\text{A.34})$$

$$\text{en } X=X_1, \quad -\frac{\partial g_{(1)}}{\partial X} = -\beta_1 \frac{\partial g_{(2)}}{\partial X}, \quad \text{para } \tau > 0 \quad (\text{A.35})$$

para ello proponemos relaciones lineales en X , tales que satisfagan las condiciones (A.32)-(A.35) esto es:

$$g_{(1)}(X, \tau) = a_1 X + b_1 \quad (\text{A.36})$$

$$g_{(2)}(X, \tau) = a_2 X + b_2 \quad (\text{A.37})$$

Sustituyendo las ecuaciones (A.36)-(A.37), se obtiene que las condiciones (A.32)-(A.35) corresponden a:

$$a_1 = \alpha_{(0)} (b_1 - U_{(1)\infty}) \quad (\text{A.38})$$

$$-a_2 = \alpha_{(2)} (a_2 + b_2 - U_{(2)\infty}) \quad (\text{A.39})$$

$$a_1 X_1 + b_1 = a_2 X_1 + b_2 \quad (\text{A.40})$$

$$a_1 = \beta_1 a_2 \quad (\text{A.41})$$

Despejando b_1 de la ec. (A.38) se obtiene

$$b_1 = \frac{a_1}{\alpha_{(0)}} + U_{(1)\infty} \quad (\text{A.42})$$

Despejando a_2 de la ec. (A.41) se obtiene

$$a_2 = \frac{a_1}{\beta_1} \quad (\text{A.43})$$

Despejando b_2 de la ec. (A.39) y sustituyendo a_2 [ec. (A.43)] se obtiene

$$b_2 = U_{(2)\infty} - \frac{(\alpha_{(2)} + 1)}{\alpha_{(2)}} a_2 \quad (\text{A.44})$$

$$b_2 = U_{(2)\infty} - \frac{(\alpha_{(2)} + 1) a_1}{\alpha_{(2)} \beta_1} \quad (\text{A.45})$$

Sustituyendo b_1 [ec (A.42)], a_2 [ec. (A.43)], y b_2 [ec. (A.45)] en la ec. (A.40) se tiene que:

$$a_1 X_1 + \frac{a_1}{\alpha_{(0)}} + U_{(1)\infty} = \frac{a_1 X_1}{\beta_1} + U_{(2)\infty} - \frac{(\alpha_{(2)} + 1) a_1}{\alpha_{(2)} \beta_1} \quad (\text{A.46})$$

Despejando a_1 de esta última ecuación se llega a:

$$a_1 \left(X_1 + \frac{1}{\alpha_{(0)}} - \frac{X_1}{\beta_1} + \frac{\alpha_{(2)} + 1}{\alpha_{(2)} \beta_1} \right) = U_{(2)\infty} - U_{(1)\infty} \quad (\text{A.47})$$

$$a_1 \left(\frac{\alpha_{(0)} \alpha_{(2)} \beta_1 X_1 + \alpha_{(2)} \beta_1 - \alpha_{(0)} \alpha_{(2)} X_1 + \alpha_{(0)} \alpha_{(2)} + \alpha_{(0)}}{\alpha_{(0)} \alpha_{(2)} \beta_1} \right) = U_{(2)\infty} - U_{(1)\infty} \quad (\text{A.48})$$

$$a_1 \left[\frac{\alpha_{(0)} \alpha_{(2)} (\beta_1 X_1 - X_1 + 1) + \alpha_{(2)} \beta_1 + \alpha_{(0)}}{\alpha_{(0)} \alpha_{(2)} \beta_1} \right] = U_{(2)\infty} - U_{(1)\infty} \quad (\text{A.49})$$

$$a_1 = (U_{(2)\infty} - U_{(1)\infty}) \frac{\alpha_{(0)}\alpha_{(2)}\beta_1}{\alpha_{(0)} + \alpha_{(0)}\alpha_{(2)}[1 + X_1(\beta_1 - 1)] + \alpha_{(2)}\beta_1} \quad (\text{A.50})$$

Sustituyendo ec. (A.50) en ec. (A.42) se obtiene la expresión para b_1 :

$$b_1 = (U_{(2)\infty} - U_{(1)\infty}) \frac{\alpha_{(2)}\beta_1}{\alpha_{(0)} + \alpha_{(0)}\alpha_{(2)}[1 + X_1(\beta_1 - 1)] + \alpha_{(2)}\beta_1} + U_{(1)\infty} \quad (\text{A.51})$$

Sustituyendo ec. (A.50) en ec. (A.43) se obtiene la expresión para a_2 :

$$a_2 = (U_{(2)\infty} - U_{(1)\infty}) \frac{\alpha_{(0)}\alpha_{(2)}}{\alpha_{(0)} + \alpha_{(0)}\alpha_{(2)}[1 + X_1(\beta_1 - 1)] + \alpha_{(2)}\beta_1} \quad (\text{A.52})$$

Sustituyendo Ecs. (A.42)-(A.43) en ec. (A.40), se tiene que

$$a_1 X_1 + \frac{a_1}{\alpha_{(0)}} + U_{(1)\infty} = \frac{a_1}{\beta_1} X_1 + b_2 \quad (\text{A.53})$$

$$b_2 = \left[\left(1 - \frac{1}{\beta_1} \right) X_1 + \frac{1}{\alpha_{(0)}} \right] a_1 + U_{(1)\infty} \quad (\text{A.54})$$

$$b_2 = \left[\frac{\alpha_{(0)}(\beta_1 - 1)X_1 + \beta_1}{\beta_1\alpha_{(0)}} \right] a_1 + U_{(1)\infty} \quad (\text{A.55})$$

Y sustituyendo la ec. (A.50) en la ec. (A.55), se obtiene la expresión para b_2 :

$$b_2 = (U_{(2)\infty} - U_{(1)\infty}) \frac{\alpha_{(2)}\alpha_{(0)}X_1(\beta_1 - 1) + \alpha_{(2)}\beta_1}{\alpha_{(0)} + \alpha_{(2)}\alpha_{(0)}[1 + X_1(\beta_1 - 1)] + \alpha_{(2)}\beta_1} + U_{(1)\infty} \quad (\text{A.56})$$

Finalmente sustituyendo las expresiones de a_1 , b_1 , a_2 y b_2 [Ecs. (A.50), (A.51), (A.52) y (A.56), respectivamente] en las relaciones lineales propuestas para $g_{(1)}$ y $g_{(2)}$ [Ecs. (A.36)-(A.37)] se llega a:

$$g_{(1)}(X, \tau) = (U_{(2)\infty} - U_{(1)\infty}) \frac{\alpha_{(2)}\alpha_{(0)}\beta_1}{\alpha_{(0)} + \alpha_{(2)}\alpha_{(0)}[1 + X_1(\beta_1 - 1)] + \alpha_{(2)}\beta_1} X +$$

$$(U_{(2)\infty} - U_{(1)\infty}) \frac{\alpha_{(2)}\beta_1}{\alpha_{(0)} + \alpha_{(2)}\alpha_{(0)}[1 + X_1(\beta_1 - 1)] + \alpha_{(2)}\beta_1} + U_{(1)\infty} \quad (\text{A.57})$$

y simplificando

$$g_{(1)}(X, \tau) = (U_{(2)\infty} - U_{(1)\infty}) \frac{\beta_1\alpha_{(2)}(\alpha_{(0)}X + 1)}{\alpha_{(0)} + \alpha_{(2)}\alpha_{(0)}[1 + X_1(\beta_1 - 1)] + \alpha_{(2)}\beta_1} + U_{(1)\infty} \quad (\text{A.58})$$

Ec. (2.20)

$$g_{(2)}(X, \tau) = (U_{(2)\infty} - U_{(1)\infty}) \frac{\alpha_{(2)}\alpha_{(0)}}{\alpha_{(0)} + \alpha_{(2)}\alpha_{(0)}[1 + X_1(\beta_1 - 1)] + \alpha_{(2)}\beta_1} X +$$

$$(U_{(2)\infty} - U_{(1)\infty}) \frac{\alpha_{(2)}\alpha_{(0)}X_1(1 - \beta_1) + \alpha_{(2)}\beta_1}{\alpha_{(0)} + \alpha_{(2)}\alpha_{(0)}[1 + X_1(\beta_1 - 1)] + \alpha_{(2)}\beta_1} + U_{(1)\infty} \quad (\text{A.59})$$

del mismo modo para $g_{(2)}$

$$g_{(2)}(X, \tau) = (U_{(2)\infty} - U_{(1)\infty}) \frac{\alpha_{(2)}\alpha_{(0)}[X + X_1(\beta_1 - 1)] + \alpha_{(2)}\beta_1}{\alpha_{(0)} + \alpha_{(2)}\alpha_{(0)}[1 + X_1(\beta_1 - 1)] + \alpha_{(2)}\beta_1} + U_{(1)\infty} \quad (\text{A.60})$$

Ec. (2.21)

Detalles de la separación de variables (Solución del problema de Sturm Liouville)

Ecuaciones diferenciales

$$\frac{d^2 \varphi_{(1)}}{dX^2} = -\lambda_{(1)}^2 \varphi_{(1)} \quad (\text{A.61})$$

$$\gamma_{(2)} \frac{d^2 \varphi_{(2)}}{dX^2} = -\lambda_{(2)}^2 \varphi_{(2)} \quad (\text{A.62})$$

Condiciones de frontera

$$\text{en } X = 0 \quad + \frac{d \varphi_{(1)}}{dX} = \alpha_{(0)} \varphi_{(1)} \quad (\text{A.63})$$

$$\text{en } X = 1 \quad - \frac{d \varphi_{(2)}}{dX} = \alpha_{(2)} \varphi_{(2)} \quad (\text{A.64})$$

$$\text{en } X = X_1 \quad \varphi_{(1)} = \varphi_{(2)} \quad (\text{A.65})$$

$$\text{en } X = X_1 \quad - \frac{d \varphi_{(1)}}{dX} = -\beta_1 \frac{d \varphi_{(2)}}{dX} \quad (\text{A.66})$$

Las soluciones de (A.61) y (A.62) son:

$$\varphi_{(1)}(X) = C_{11} \text{sen}(\lambda_{(1)} X) + C_{12} \cos(\lambda_{(1)} X) \quad (\text{A.67})$$

$$\varphi_{(2)}(X) = C_{21} \text{sen}(\lambda_{(2)} X) + C_{22} \cos(\lambda_{(2)} X) \quad (\text{A.68})$$

con

$$\lambda_{(2)} = \frac{\lambda_{(1)}}{\sqrt{\gamma_{(2)}}} \quad (\text{A.69})$$

para determinar el valor de las constantes primero usaremos la condición definida por la ecuación (A.63):

en $X = 0$

$$\frac{d\varphi_{(1)}}{dX} = \lambda_{(1)} [C_{11} \cos(\lambda_{(1)} X) - C_{12} \text{sen}(\lambda_{(1)} X)]$$

$$\lambda_{(1)} [C_{11} \cos(0) - C_{12} \text{sen}(0)] = \alpha_{(0)} [C_{11} \text{sen}(0) + C_{12} \cos(0)]$$

$$\lambda_{(1)} [C_{11}] = \alpha_{(0)} [C_{12}]$$

$$C_{11} = \frac{\alpha_{(0)}}{\lambda_{(1)}} C_{12} \quad (\text{A.70})$$

así la ec.(A.67) para $\varphi_{(1)}(X)$ toma la forma

$$\varphi_{(1)}(X) = C_{12} \left[\frac{\alpha_{(0)}}{\lambda_{(1)}} \text{sen}(\lambda_{(1)} X) + \cos(\lambda_{(1)} X) \right] \quad (\text{A.71})$$

La derivada de $\varphi_{(2)}(X)$ a partir de la ec. (A.68) es

$$\frac{d\varphi_{(2)}}{dX} = \lambda_{(2)} [C_{21} \cos(\lambda_{(2)} X) - C_{22} \text{sen}(\lambda_{(2)} X)]$$

Usando la condición de frontera dada por la ec. (A.64) se obtiene

en $X = 1$

$$-\left[\lambda_{(2)} \cos(\lambda_{(2)}) + \alpha_{(2)} \text{sen}(\lambda_{(2)}) \right] C_{21} = \left[\alpha_{(2)} \cos(\lambda_{(2)}) - \lambda_{(2)} \text{sen}(\lambda_{(2)}) \right] C_{22}$$

De aquí se obtiene

$$C_{21} = K_{(1)n}(\lambda_{(2)}) C_{22} \quad (\text{A.72})$$

en donde hemos usado

$$K_{(1)n}(\lambda_{(2)}) = \frac{\lambda_{(2)} \text{sen}(\lambda_{(2)}) - \alpha_{(2)} \cos(\lambda_{(2)})}{\lambda_{(2)} \cos(\lambda_{(2)}) + \alpha_{(2)} \text{sen}(\lambda_{(2)})}$$

Con (A.72) la ec.(A.68) puede escribirse como

$$\varphi_{(2)}(X) = C_{22} \left[K_{(1)n}(\lambda_{(2)}) \text{sen}(\lambda_{(2)}X) + \cos(\lambda_{(2)}X) \right] \quad (\text{A.73})$$

Ahora usando(A.71) y (A.73) en (A.65)

en $X = X_1$

$$\left[\frac{\alpha_{(0)}}{\lambda_{(1)}} \text{sen}(\lambda_{(1)}X_1) + \cos(\lambda_{(1)}X_1) \right] C_{12} = \left[K_{(1)n}(\lambda_{(2)}) \text{sen}(\lambda_{(2)}X_1) + \cos(\lambda_{(2)}X_1) \right] C_{22} \quad (\text{A.74})$$

de la cual obtenemos

$$C_{12} = K_{(2)n}(\lambda_{(1)}) C_{22} \quad (\text{A.75})$$

en donde hemos definido

$$K_{(2)n}(\lambda_{(1)}) = \frac{\alpha_{(2)} \text{sen}[\lambda_{(2)}(1-X_1)] + \lambda_{(2)} \cos[\lambda_{(2)}(1-X_1)]}{\left[\frac{\alpha_{(0)}}{\lambda_{(1)}} \text{sen}(\lambda_{(1)}X_1) + \cos(\lambda_{(1)}X_1) \right] \left[\lambda_{(2)} \cos(\lambda_{(2)}) + \alpha_{(2)} \text{sen}(\lambda_{(2)}) \right]} \quad (\text{A.76})$$

En este momento tenemos $\varphi_{(1)}(X)$ y $\varphi_{(2)}(X)$ solo en términos de C_{22} y tienen la forma

$$\varphi_{(1)}(X) = C_{22} \left\{ \frac{\alpha_{(2)} \text{sen}[\lambda_{(2)}(1-X_1)] + \lambda_{(2)} \cos[\lambda_{(2)}(1-X_1)]}{\alpha_{(2)} \text{sen}(\lambda_{(2)}) + \lambda_{(2)} \cos(\lambda_{(2)})} \frac{\frac{\alpha_{(0)}}{\lambda_{(1)}} \text{sen}(\lambda_{(1)}X) + \cos(\lambda_{(1)}X)}{\frac{\alpha_{(0)}}{\lambda_{(1)}} \text{sen}(\lambda_{(1)}X_1) + \cos(\lambda_{(1)}X_1)} \right\} \quad (\text{A.77})$$

Ec. (2.36)

$$\varphi_{(2)}(X) = C_{22} \frac{\alpha_{(2)} \text{sen}[\lambda_{(2)}(1-X)] + \lambda_{(2)} \cos[\lambda_{(2)}(1-X)]}{\alpha_{(2)} \text{sen}(\lambda_{(2)}) + \lambda_{(2)} \cos(\lambda_{(2)})} \quad (\text{A.78})$$

Ec. (2.37)

225969

El uso de la condición de frontera restante nos llevará a una ecuación para encontrar los valores propios.

La substitución de Ecs. (A.77) y (A.78) en la condición de frontera dada por el ec. (A.66) da

$$\begin{aligned} & [\lambda_{(1)} \text{sen}(\lambda_{(1)} X_1) - \alpha_{(0)} \cos(\lambda_{(1)} X_1)] K_{(2)n}(\lambda_{(1)}) C_{22} + \\ & \beta_1 \lambda_{(2)} [K_{(1)n}(\lambda_{(1)}) \cos(\lambda_{(2)} X_1) - \text{sen}(\lambda_{(2)} X_1)] C_{22} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.79})$$

Dividiendo entre C_{22}

$$\begin{aligned} & [\lambda_{(1)} \text{sen}(\lambda_{(1)} X_1) - \alpha_{(0)} \cos(\lambda_{(1)} X_1)] K_{(2)n}(\lambda_{(1)}) + \\ & \beta_1 \lambda_{(2)} [K_{(1)n}(\lambda_{(1)}) \cos(\lambda_{(2)} X_1) - \text{sen}(\lambda_{(2)} X_1)] = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.80})$$

Con lo que obtenemos la condición de los valores propios

$$\begin{aligned} & \text{sen}[\lambda_{(2)n}(1-X_1)] \text{sen}(\lambda_{(1)n} X_1) \left[\frac{\beta_1 \lambda_{(2)}^2 \alpha_{(0)}}{\lambda_{(1)}} + \lambda_{(1)} \alpha_{(2)} \right] + \\ & \cos[\lambda_{(2)n}(1-X_1)] \text{sen}(\lambda_{(1)n} X_1) [\lambda_{(1)} \lambda_{(2)} - \beta_1 \lambda_{(2)} \alpha_{(0)} \alpha_{(2)}] + \\ & \text{sen}[\lambda_{(2)n}(1-X_1)] \cos(\lambda_{(1)n} X_1) [\beta_1 \lambda_{(2)}^2 - \alpha_{(0)} \alpha_{(2)}] - \\ & \cos[\lambda_{(2)n}(1-X_1)] \cos(\lambda_{(1)n} X_1) [\lambda_{(2)} \alpha_{(0)} + \beta_1 \lambda_{(2)} \alpha_{(2)}] = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.81})$$

$$\begin{aligned} & \left\{ \frac{\alpha_{(2)} \text{sen}[\lambda_{(2)n}(1-X_1)]}{\lambda_{(2)n}} + \cos[\lambda_{(2)n}(1-X_1)] \right\} \left\{ \alpha_{(0)} \cos(\lambda_{(1)n} X_1) - \lambda_{(1)n} \text{sen}(\lambda_{(1)n} X_1) \right\} + \\ & \beta_1 \left\{ \alpha_{(2)} \cos[\lambda_{(2)n}(1-X_1)] - \lambda_{(2)n} \text{sen}[\lambda_{(2)n}(1-X_1)] \right\} \left\{ \frac{\alpha_{(0)} \text{sen}(\lambda_{(1)n} X_1)}{\lambda_{(1)n}} + \cos(\lambda_{(1)n} X_1) \right\} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.82})$$

Ec. (2.41)

Determinación de la condición de ortogonalidad de las funciones propias

De las ecuaciones diferenciales (A.61) y (A.62) obtenemos para el componente (1)

$$\varphi_{(1)m} \frac{d^2 \varphi_{(1)n}}{dX^2} = -\lambda_{(1)n}^2 \varphi_{(1)n} \varphi_{(1)m} \quad (\text{A.83})$$

$$\varphi_{(1)n} \frac{d^2 \varphi_{(1)m}}{dX^2} = -\lambda_{(1)m}^2 \varphi_{(1)m} \varphi_{(1)n} \quad (\text{A.84})$$

sumando (A.83)-(A.84)

$$(\lambda_{(1)m}^2 - \lambda_{(1)n}^2) \varphi_{(1)m} \varphi_{(1)n} = \varphi_{(1)m} \frac{d^2 \varphi_{(1)n}}{dX^2} - \varphi_{(1)n} \frac{d^2 \varphi_{(1)m}}{dX^2}$$

integrando este resultado

$$(\lambda_{(1)m}^2 - \lambda_{(1)n}^2) \int_0^{X_1} \varphi_{(1)m} \varphi_{(1)n} dX = \int_0^{X_1} \varphi_{(1)m} \frac{d^2 \varphi_{(1)n}}{dX^2} dX - \int_0^{X_1} \varphi_{(1)n} \frac{d^2 \varphi_{(1)m}}{dX^2} dX$$

reescribiendo el lado derecho y usando integración por partes tenemos

$$= \varphi_{(1)m} \frac{d \varphi_{(1)n}}{dX} \Big|_0^{X_1} - \int_0^{X_1} \frac{d \varphi_{(1)m}}{dX} \frac{d \varphi_{(1)n}}{dX} dX - \varphi_{(1)n} \frac{d \varphi_{(1)m}}{dX} \Big|_0^{X_1} + \int_0^{X_1} \frac{d \varphi_{(1)n}}{dX} \frac{d \varphi_{(1)m}}{dX} dX$$

Este resultado se puede simplificar y escribir en forma compacta

$$I_{(1)nm} = \varphi_{(1)m} \frac{d \varphi_{(1)n}}{dX} \Big|_0^{X_1} - \varphi_{(1)n} \frac{d \varphi_{(1)m}}{dX} \Big|_0^{X_1} \quad (\text{A.85})$$

En donde hemos introducido la definición

$$I_{(1)nm} = (\lambda_{(1)m}^2 - \lambda_{(1)n}^2) \int_0^{X_1} \varphi_{(1)m} \varphi_{(1)n} dX$$

De la misma manera para el componente (2) se plantea

$$\gamma_{(2)} \varphi_{(2)m} \frac{d^2 \varphi_{(2)n}}{dX^2} = -\lambda_{(1)n}^2 \varphi_{(2)n} \varphi_{(2)m} \quad (\text{A.86})$$

$$\gamma_{(2)} \varphi_{(2)n} \frac{d^2 \varphi_{(2)m}}{dX^2} = -\lambda_{(1)m}^2 \varphi_{(2)m} \varphi_{(2)n} \quad (\text{A.87})$$

al sumar (A.86) y (A.87)

$$\left(\lambda_{(1)m}^2 - \lambda_{(1)n}^2 \right) \varphi_{(2)n} \varphi_{(2)m} = \gamma_{(2)} \left(\varphi_{(2)m} \frac{d^2 \varphi_{(2)n}}{dX^2} - \varphi_{(2)n} \frac{d^2 \varphi_{(2)m}}{dX^2} \right)$$

integrando

$$I_{(2)nm} = \gamma_{(2)} \left(\varphi_{(2)m} \frac{d\varphi_{(2)n}}{dX} \Big|_{X_1}^1 - \varphi_{(2)n} \frac{d\varphi_{(2)m}}{dX} \Big|_{X_1}^1 \right) \quad (\text{A.88})$$

En donde hemos introducido

$$I_{(2)nm} = \left(\lambda_{(1)m}^2 - \lambda_{(1)n}^2 \right) \int_0^{X_1} \varphi_{(2)n} \varphi_{(2)m} dX$$

Debemos notar que de las ecuaciones (A.63) a (A.66) se obtiene

$$\text{en } X = 0 \quad + \frac{d\varphi_{(1)n}}{dX} = \alpha_{(0)} \varphi_{(1)n} \quad (\text{A.89})$$

$$\text{en } X = 1 \quad - \frac{d\varphi_{(2)n}}{dX} = \alpha_{(2)} \varphi_{(2)n} \quad (\text{A.90})$$

$$\text{en } X = X_1 \quad \varphi_{(1)n} = \varphi_{(2)n} \quad (\text{A.91})$$

$$\text{en } X = X_1 \quad - \frac{d\varphi_{(1)n}}{dX} = -\beta_1 \frac{d\varphi_{(2)n}}{dX} \quad (\text{A.92})$$

Ahora notemos que $I_{(1)nm}$, Ec. (A.85), se puede escribir como

$$\begin{aligned} I_{(1)nm} &= \varphi_{(1)m} \frac{d\varphi_{(1)n}}{dX} \Big|_{X_1} - \varphi_{(1)m} \frac{d\varphi_{(1)n}}{dX} \Big|_0 - \left[\varphi_{(1)n} \frac{d\varphi_{(1)m}}{dX} \Big|_{X_1} - \varphi_{(1)n} \frac{d\varphi_{(1)m}}{dX} \Big|_0 \right] \\ &= \varphi_{(1)n} \frac{d\varphi_{(1)m}}{dX} \Big|_0 - \varphi_{(1)m} \frac{d\varphi_{(1)n}}{dX} \Big|_0 + \varphi_{(1)m} \frac{d\varphi_{(1)n}}{dX} \Big|_{X_1} - \varphi_{(1)n} \frac{d\varphi_{(1)m}}{dX} \Big|_{X_1} \end{aligned} \quad (A.93)$$

y usando la condición de frontera en $X = 0$, Ec. (A.89), en los 2 primeros términos se llega a

$$\varphi_{(1)n} \frac{d\varphi_{(1)m}}{dX} \Big|_0 - \varphi_{(1)m} \frac{d\varphi_{(1)n}}{dX} \Big|_0 = \varphi_{(1)n} \alpha_{(0)} \varphi_{(1)m} - \varphi_{(1)m} \alpha_{(0)} \varphi_{(1)n} = 0$$

entonces la Ec. (A.93) queda como

$$I_{(1)nm} = \varphi_{(1)m} \frac{d\varphi_{(1)n}}{dX} \Big|_{X_1} - \varphi_{(1)n} \frac{d\varphi_{(1)m}}{dX} \Big|_{X_1} \quad (A.94)$$

De forma análoga usando la Ec. (A.88)

$$I_{(2)nm} = \gamma_{(2)} \left[\left(\varphi_{(2)m} \frac{d\varphi_{(2)n}}{dX} \Big|_1 - \varphi_{(2)m} \frac{d\varphi_{(2)n}}{dX} \Big|_{X_1} \right) - \left(\varphi_{(2)n} \frac{d\varphi_{(2)m}}{dX} \Big|_1 - \varphi_{(2)n} \frac{d\varphi_{(2)m}}{dX} \Big|_{X_1} \right) \right]$$

simplificando

$$I_{(2)nm} = \gamma_{(2)} \left(\varphi_{(2)m} \frac{d\varphi_{(2)n}}{dX} \Big|_1 - \varphi_{(2)n} \frac{d\varphi_{(2)m}}{dX} \Big|_1 + \varphi_{(2)n} \frac{d\varphi_{(2)m}}{dX} \Big|_{X_1} - \varphi_{(2)m} \frac{d\varphi_{(2)n}}{dX} \Big|_{X_1} \right) \quad (A.95)$$

que al usar la condición de frontera en $X = X_1$, Ec. (A.90), nos lleva a

$$\varphi_{(2)m} \frac{d\varphi_{(2)n}}{dX} \Big|_1 - \varphi_{(2)n} \frac{d\varphi_{(2)m}}{dX} \Big|_1 = -\varphi_{(2)m} \alpha_{(2)} \varphi_{(2)n} + \varphi_{(2)n} \alpha_{(2)} \varphi_{(2)m} = 0$$

Por lo tanto, la Ec. (A.88) se reduce a

$$I_{(2)nm} = \gamma_{(2)} \left(\varphi_{(2)n} \frac{d\varphi_{(2)m}}{dX} \Big|_{X_1} - \varphi_{(2)m} \frac{d\varphi_{(2)n}}{dX} \Big|_{X_1} \right) \quad (\text{A.96})$$

Ahora sumando (A.94) y (A.96)

$$I_{(1)nm} + \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} I_{(2)nm} = \varphi_{(1)m} \frac{d\varphi_{(1)n}}{dX} \Big|_{X_1} - \varphi_{(1)n} \frac{d\varphi_{(1)m}}{dX} \Big|_{X_1} + \beta_1 \varphi_{(2)n} \frac{d\varphi_{(2)m}}{dX} \Big|_{X_1} - \beta_1 \varphi_{(2)m} \frac{d\varphi_{(2)n}}{dX} \Big|_{X_1}$$

de tal manera que las condiciones en X_1 puedan ser usadas para simplificar el resultado, el

factor β_1/γ_2 se introdujo para que las Ecs. (A.91) y (A.92). Esto se muestra a continuación:

$$\begin{aligned} I_{(1)nm} + \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} I_{(2)nm} &= \varphi_{(2)m} \frac{d\varphi_{(1)n}}{dX} \Big|_{X_1} - \varphi_{(2)n} \frac{d\varphi_{(1)m}}{dX} \Big|_{X_1} + \beta_1 \varphi_{(2)n} \frac{d\varphi_{(2)m}}{dX} \Big|_{X_1} - \beta_1 \varphi_{(2)m} \frac{d\varphi_{(2)n}}{dX} \Big|_{X_1} \\ &= \left(\frac{d\varphi_{(1)n}}{dX} \Big|_{X_1} - \beta_1 \frac{d\varphi_{(2)n}}{dX} \Big|_{X_1} \right) \varphi_{(2)m} + \left(\beta_1 \frac{d\varphi_{(2)m}}{dX} \Big|_{X_1} - \frac{d\varphi_{(1)m}}{dX} \Big|_{X_1} \right) \varphi_{(2)n} = 0 \quad (\text{A.97}) \end{aligned}$$

O sea se ha encontrado que

$$I_{(1)nm} + \frac{\beta_1}{\gamma_2} I_{(2)nm} = 0$$

la cual en forma explícita es

$$\boxed{\int_0^{X_1} \varphi_{(1)n} \varphi_{(1)m} dX + \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} \int_{X_1} \varphi_{(2)n} \varphi_{(2)m} dX = 0, \quad \text{para } m \neq n} \quad (\text{A.98})$$

Ec. (2.42)

que es la denominada condición de ortogonalidad.

Algunas fórmulas útiles

Con el fin de evaluar las integrales de los denominadores para $\mathcal{A}_n(\tau)$, y $C_n(\tau)$ deduciremos algunas formulas.

Si la siguiente ecuación diferencial ordinaria determina a $y(x)$

$$\frac{d^2 y}{d x^2} + \lambda^2 y = 0 \quad (\text{A.99})$$

Entonces se pueden demostrar las siguientes fórmulas a partir de integración por partes

$$\text{I.} \quad \left(\frac{d y}{d x} \right)^2 \Big|_a^b = -\lambda^2 y^2 \Big|_a^b$$

$$\text{II.} \quad \int_a^b x y dx = -\frac{1}{\lambda^2} \left[x \frac{d y}{d x} \Big|_a^b - y \Big|_a^b \right]$$

$$\text{III} \quad \int_a^b y dx = -\frac{1}{\lambda^2} \left[\frac{d y}{d x} \Big|_a^b \right]$$

$$\text{IV} \quad 2 \lambda^2 \int_a^b y^2 dx = \lambda^2 (x y^2) \Big|_a^b + \left[x \left(\frac{d y}{d x} \right)^2 \right]_a^b + \left(y \frac{d y}{d x} \right) \Big|_a^b$$

Usando ahora la fórmula (I), la fórmula (IV) se puede simplificar a una de las siguientes dos versiones

$$\text{Va} \quad 2\lambda^2 \int_a^b y^2 dx = \lambda^2(b-a)y^2(a) + (b-a) \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 \Big|_a - y(b) \frac{dy}{dx} \Big|_b + y(a) \frac{dy}{dx} \Big|_a$$

$$\text{Vb} \quad 2\lambda^2 \int_a^b y^2 dx = \lambda^2(b-a)y^2(b) + (b-a) \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 \Big|_b - y(b) \frac{dy}{dx} \Big|_b + y(a) \frac{dy}{dx} \Big|_a$$

Demostración de la fórmula I

De (A.99)

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = -\lambda^2 y \quad (\text{A.100})$$

multiplicando ambos lados de la ecuación (A.100) por $2 \frac{dy}{dx}$

$$2 \frac{dy}{dx} \frac{d^2 y}{dx^2} = -2\lambda^2 \frac{dy}{dx} y \quad (\text{A.101})$$

ó

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 = -\lambda^2 \frac{dy^2}{dx} \quad (\text{A.102})$$

Integrando directamente ambos lados de la ecuación obtenemos:

$$\left(\frac{dy}{dx} \right)^2 \Big|_a^b = -\lambda^2 y^2 \Big|_a^b \quad (\text{A.103})$$

Lo cual corresponde a la fórmula I.

Demostración de la formula II

Multiplicando (A.100) por x e integrando:

$$\lambda^2 \int_a^b xy dx = - \int_a^b x \frac{d^2 y}{dx^2} dx \quad (A.104)$$

Resolviendo por integración por partes el lado derecho de la ecuación (A.104) tenemos:

si

$$u = x \quad du = dx$$

$$dv = \frac{d^2 y}{dx^2} dx \quad v = \frac{dy}{dx}$$

entonces

$$\lambda^2 \int_a^b xy dx = -x \frac{dy}{dx} \Big|_a^b + \int_a^b dy \quad (A.105)$$

simplificando

$$\int_a^b xy dx = \frac{1}{\lambda^2} \left[-x \frac{dy}{dx} \Big|_a^b + y \right] \Big|_a^b \quad (A.106)$$

$$\int_a^b xy dx = \frac{1}{\lambda^2} \left[-b \frac{dy}{dx} \Big|_{x=b} + a \frac{dy}{dx} \Big|_{x=a} + y(b) - y(a) \right] \quad (A.107)$$

hasta aquí la demostración de la fórmula II.

Demostración de la fórmula III

Ahora a partir de (A.100) se plantea

$$\lambda^2 \int_a^b y dx = - \int_a^b \frac{d^2 y}{dx^2} dx \quad (\text{A.108})$$

$$\int_a^b y dx = -\frac{1}{\lambda^2} \left[\frac{dy}{dx} \right]_a^b = -\frac{1}{\lambda^2} \left[\frac{dy}{dx} \Big|_{x=b} - \frac{dy}{dx} \Big|_{x=a} \right] \quad (\text{A.109})$$

lo cual corresponde a la fórmula III.

Demostración de la formula IV

Multiplicando (A.100) por y e integrando:

$$\lambda^2 \int_a^b y^2 dx = - \int_a^b y \frac{d^2 y}{dx^2} dx \quad (\text{A.110})$$

Resolviendo el lado derecho de la ecuación (A.110) por integración por partes tenemos:

si

$$u = y \quad du = \frac{dy}{dx}$$

$$dv = \frac{d^2 y}{dx^2} dx \quad v = \frac{dy}{dx}$$

entonces

$$\lambda^2 \int_a^b y^2 dx = -y \frac{dy}{dx} + \int_a^b \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 dx \quad (\text{A.111})$$

A partir de (A.103)

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 = \left(\frac{dy}{dx}\right)^2 \Big|_{x=a} - \lambda^2 y^2(x) + \lambda^2 y^2(a) \quad (\text{A.112})$$

y de aquí

$$\int_a^b \left(\frac{dy}{dx}\right)^2 dx = -\lambda^2 \int_a^b y^2(b) dx + \left[\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 \Big|_{x=a} + \lambda^2 y^2(a) \right] (b-a) \quad (\text{A.113})$$

o también

$$\int_a^b \left(\frac{dy}{dx}\right)^2 dx = -\lambda^2 \int_a^b y^2(b) dx + \left[\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 \Big|_{x=b} + \lambda^2 y^2(b) \right] (b-a) \quad (\text{A.114})$$

Ahora usando (A.113) ó (A.114) en (A.111)

$$\lambda^2 \int_a^b y^2 dx = -y \frac{dy}{dx} \Big|_a^b - \lambda^2 \int_a^b y^2(b) dx + \left[\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 \Big|_{x=a} + \lambda^2 y^2(a) \right] (b-a) \quad (\text{A.115})$$

ó

$$\lambda^2 \int_a^b y^2 dx + \lambda^2 \int_a^b y^2 dx = -y \frac{dy}{dx} \Big|_a^b + \left[\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 \Big|_{x=a} + \lambda^2 y^2(a) \right] (b-a) \quad (\text{A.116})$$

simplificando

$$2\lambda^2 \int_a^b y^2 dx = -y \frac{dy}{dx} \Big|_a^b + \left[\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 \Big|_{x=a} + \lambda^2 y^2(a) \right] (b-a) \quad (\text{A.117})$$

ó

$$2\lambda^2 \int_a^b y^2 dx = -y \frac{dy}{dx} \Big|_a^b + \left[\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 \Big|_{x=b} + \lambda^2 y^2(b) \right] (b-a) \quad (\text{A.118})$$

Con lo que queda demostrado.

Cálculo de $\mathcal{J}_n$

De acuerdo a la definición

$$\int_X^{X_1} \varphi_{(1)n}^2(X) dX + \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} \int_{X_1}^1 \varphi_{(2)n}^2(X) dX = \mathcal{J}_n \quad (\text{A.119})$$

ó

$$2\lambda_{(1)n}^2 \int_X^{X_1} \varphi_{(1)n}^2(X) dX + 2\frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} \lambda_{(1)n}^2 \int_{X_1}^1 \varphi_{(2)n}^2(X) dX = 2\lambda_{(1)n}^2 \mathcal{J}_n \quad (\text{A.120})$$

recuérdese que:

$$\lambda_{(2)n}^2 = \frac{\lambda_{(1)n}^2}{\gamma_{(2)}}$$

Usando las fórmulas V, $\mathcal{J}_n$ es

$$2\lambda_{(1)n}^2 \int_0^{X_1} \varphi_{(1)n}^2 dx = -\varphi_{(1)n} \frac{d\varphi_{(1)n}}{dx} \Big|_0^{X_1} + [\varphi_{(1)n}^2(X_1) + \lambda_{(1)n}^2 \varphi_{(1)n}^2(X_1)](X_1) \quad (\text{A.121})$$

y

$$2\lambda_{(2)n}^2 \int_{X_1}^1 \varphi_{(2)n}^2 dx = -\varphi_{(2)n} \frac{d\varphi_{(2)n}}{dx} \Big|_{X_1}^1 + [\varphi_{(2)n}^2(X_1) + \lambda_{(2)n}^2 \varphi_{(2)n}^2(X_1)](1 - X_1) \quad (\text{A.122})$$

por lo que

$$\begin{aligned} 2\lambda_{(1)n}^2 \mathcal{J}_n = & -\varphi_{(1)n}(X_1) \varphi'_{(1)n}(X_1) + \varphi_{(1)n}(0) \varphi'_{(1)n}(0) + [\varphi_{(1)n}^2(X_1) + \lambda_{(1)n}^2 \varphi_{(1)n}^2(X_1)] X_1 \\ & + \beta_1 \{ -\varphi_{(2)n}(1) \varphi'_{(2)n}(1) + \varphi_{(2)n}(X_1) \varphi'_{(2)n}(X_1) + [\varphi_{(2)n}^2(X_1) + \lambda_{(2)n}^2 \varphi_{(2)n}^2(X_1)] (1 - X_1) \} \end{aligned} \quad (\text{A.123})$$

aquí debemos recordar que

$$\varphi_{(1)n}(X_1) = \varphi_{(2)n}(X_1)$$

y

$$\varphi'_{(1)n}(X_1) = \beta_1 \varphi'_{(2)n}(X_1)$$

entonces

$$\begin{aligned} 2\lambda_{(1)n}^2 \mathcal{J}_n &= \varphi_{(2)n}^2(X_1) [\lambda_{(1)n}^2 X_1 + \beta_1 \lambda_{(2)n}^2 (1 - X_1)] \\ &+ \varphi'_{(2)n}(X_1) [X_1 \beta_1^2 + \beta_1 (1 - X_1)] \\ &- \varphi_{(2)n}(X_1) \varphi'_{(2)n}(X_1) [\beta_1 - \beta_1] \\ &+ \varphi_{(1)n}(0) \varphi'_{(1)n}(0) - \beta_1 \varphi_{(2)n}(1) \varphi'_{(2)n}(1) \end{aligned} \quad (\text{A.124})$$

Simplificando

$$\begin{aligned} 2\lambda_{(1)n}^2 \mathcal{J}_n &= \lambda_{(1)n}^2 \varphi_{(2)n}^2(X_1) \left[X_1 + \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} (1 - X_1) \right] \\ &+ \varphi'_{(2)n}(X_1) [X_1 \beta_1^2 + \beta_1 (1 - X_1)] \\ &+ \varphi_{(1)n}(0) \varphi'_{(1)n}(0) - \beta_1 \varphi_{(2)n}(1) \varphi'_{(2)n}(1) \end{aligned} \quad (\text{A.125})$$

Usando ahora

$$\text{en } x=0 \quad \frac{d\varphi_{(1)n}}{dx} = \alpha_{(0)} \varphi_{(1)n}$$

y

$$\text{en } x=1 \quad \frac{d\varphi_{(2)n}}{dx} = \alpha_{(2)} \varphi_{(2)n}$$

llegamos a

$$\begin{aligned}
2\lambda_{(1)n}^2 \mathcal{J}_n &= \lambda_{(1)n}^2 \varphi_{(2)n}^2(X_1) \left[X_1 + \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} (1 - X_1) \right] \\
&+ \varphi_{(2)n}^2(X_1) [X_1 \beta_1^2 + \beta_1 (1 - X_1)] \\
&+ \alpha_{(0)} \varphi_{(1)n}^2(0) + \beta_1 \alpha_{(2)} \varphi_{(2)n}^2(1)
\end{aligned} \tag{A.126}$$

finalmente despejando $\mathcal{J}_n$

$$\begin{aligned}
2\mathcal{J}_n &= \varphi_{(2)n}^2(X_1) \left\{ X_1 + \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} (1 - X_1) \right\} + \frac{1}{\lambda_{(1)n}^2} \left(\frac{d \varphi_{(2)n}^2}{d X} \right)^2 \bigg|_{X_1} \{ X_1 \beta_1^2 + \beta_1 (1 - X_1) \} \\
&+ \frac{1}{\lambda_{(1)n}^2} \{ \alpha_{(0)} \varphi_{(2)n}^2(0) - \alpha_{(2)} \beta_1 \varphi_{(2)n}^2(1) \}
\end{aligned} \tag{A.127}$$

Cálculo de los numeradores de $A_n(\tau)$ y $C_n(0)$

$$A_n(\tau) = \frac{-\int_0^{X_1} \frac{\partial g_{(1)}}{\partial \tau} \varphi_{(1)n} dX - \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} \int_{X_1}^1 \frac{\partial g_{(2)}}{\partial \tau} \varphi_{(2)n} dX}{\mathcal{J}_n} \quad (\text{A.128})$$

$$C_n(0) = \frac{I_{(1)n}(0) - I_{(2)n}(0)}{\mathcal{J}_n} \quad (\text{A.129})$$

Para los numeradores usaremos la siguiente nomenclatura

$$-D_n(\tau) = \int_0^{X_1} \frac{\partial g_{(1)}}{\partial \tau} \varphi_{(1)n} dX + \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} \int_{X_1}^1 \frac{\partial g_{(2)}}{\partial \tau} \varphi_{(2)n} dX \quad (\text{A.130})$$

Aquí introducimos

$$I_{(1)n}(0) = \int_0^{X_1} F_{(1)}(X) \varphi_{(1)n} dX + \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} \int_{X_1}^1 F_{(2)}(X) \varphi_{(2)n} dX \quad (\text{A.131})$$

y

$$I_{(2)n}(0) = \int_0^{X_1} g_{(1)}(X, 0) \varphi_{(1)n} dX + \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} \int_{X_1}^1 g_{(2)}(X, 0) \varphi_{(2)n} dX \quad (\text{A.132})$$

Limitaremos el resultado de $I_{(1)n}(0)$ para el caso en que $F_{(1)}(X) = F_{(2)}(X) = U_{(1)0}$ son constantes. Sin embargo $I_{(1)n}(0)$ y $D_n(\tau)$ son generales.

Entonces (A.131) se puede simplificar

$$I_{(1)n}(0) = U_{(1)0} \left\{ \int_0^{X_1} \varphi_{(1)n} dx + \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} \int_{X_1}^1 \varphi_{(2)n} dx \right\} \quad (\text{A.133})$$

y usando la formula III llegamos a

$$I_{(1)n}(0) = U_{(1)0} \left\{ -\frac{1}{\lambda_{(1)n}^2} \left[\frac{d\varphi_{(1)n}}{dx} \right]_{X=X_1} - \left[\frac{d\varphi_{(1)n}}{dx} \right]_{X=0} + \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} \left(-\frac{1}{\lambda_{(2)n}^2} \right) \left[\frac{d\varphi_{(2)n}}{dx} \right]_{X=1} - \left[\frac{d\varphi_{(2)n}}{dx} \right]_{X=X_1} \right\} \quad (\text{A.134})$$

simplicando

$$I_{(1)n}(0) = U_{(1)0} \left\{ -\frac{1}{\lambda_{(1)n}^2} \frac{d\varphi_{(1)n}}{dx} \Big|_{X=0} - \frac{\beta_1}{\lambda_{(1)n}^2} \frac{d\varphi_{(2)n}}{dx} \Big|_{X=1} \right\} + U_{(1)0} \left\{ -\frac{1}{\lambda_{(1)n}^2} \frac{d\varphi_{(1)n}}{dx} \Big|_{X=X_1} - \frac{\beta_1}{\lambda_{(1)n}^2} \frac{d\varphi_{(2)n}}{dx} \Big|_{X=X_1} \right\} \quad (\text{A.135})$$

Finalmente

$$I_{(1)n}(0) = \frac{U_{(1)0}}{\lambda_{(1)n}^2} [\alpha_{(0)} \varphi_{(1)n}(0) + \alpha_{(2)} \beta_1 \varphi_{(2)n}(1)] \quad (\text{A.136})$$

Ahora para evaluar I_{2n} es importante recordar que

$$\frac{dg_{(1)}}{dx} = a_1(0) \quad y \quad \frac{dg_{(2)}}{dx} = a_2(0)$$

no dependen de X , tal vez solo de τ o son constantes

$$I_{(2)n} = \int_0^{X_1} g_{(1)}(X, 0) \varphi_{(1)n}(X) dx + \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} \int_{X_1}^1 g_{(2)}(X, 0) \varphi_{(2)n}(X) dx \quad (\text{A.137})$$

recordemos que

$$g_{(1)}(X, 0) = a_1(0)X + b_1(0), \quad \frac{\partial g_{(1)}}{\partial X} = a_1(0) \quad (\text{A.138})$$

$$g_{(2)}(X, 0) = a_2(0)X + b_2(0), \quad \frac{\partial g_{(2)}}{\partial X} = a_2(0) \quad (\text{A.139})$$

así

$$\begin{aligned}
 I_{(2)n}(0) &= a_1(0) \int_0^{X_1} X \varphi_{(1)n}(X) dx + a_2(0) \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} \int_{X_1}^1 X \varphi_{(2)n}(X) dx \\
 &+ b_1(0) \int_0^{X_1} \varphi_{(1)n}(X) dx + b_2(0) \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} \int_{X_1}^1 \varphi_{(2)n}(X) dx
 \end{aligned} \tag{A.140}$$

para evaluar las integrales utilizamos las formulas II y III, esto es:

$$\int_0^{X_1} X \varphi_{(1)n}(X) dx = \frac{1}{\lambda_{(1)n}^2} \left[-X_1 \frac{d \varphi_{(1)n}}{d X} \Big|_{X_1} \right] + \frac{\varphi_{(1)n}(X_1) - \varphi_{(1)n}(0)}{\lambda_{(1)n}^2} \tag{A.141}$$

$$\int_{X_1}^1 X \varphi_{(2)n}(X) dx = \frac{1}{\lambda_{(2)n}^2} \left[X_1 \frac{d \varphi_{(2)n}}{d X} \Big|_{X_1} - \frac{d \varphi_{(2)n}}{d X} \Big|_1 \right] + \frac{\varphi_{(2)n}(1) - \varphi_{(2)n}(X_1)}{\lambda_{(2)n}^2} \tag{A.142}$$

$$\int_0^{X_1} \varphi_{(1)n}(X) dx = -\frac{1}{\lambda_{(1)n}^2} \left[\frac{d \varphi_{(1)n}}{d X} \Big|_{X_1} - \frac{d \varphi_{(1)n}}{d X} \Big|_0 \right] \tag{A.143}$$

$$\int_{X_1}^1 \varphi_{(2)n}(X) dx = -\frac{1}{\lambda_{(2)n}^2} \left[\frac{d \varphi_{(2)n}}{d X} \Big|_1 - \frac{d \varphi_{(2)n}}{d X} \Big|_{X_1} \right] \tag{A.144}$$

por lo que

$$\begin{aligned}
 \lambda_{(1)n}^2 I_{(2)n}(0) &= a_1(0) \left\{ -X_1 \frac{d \varphi_{(1)n}}{d X} \Big|_{X_1} + \varphi_{(1)n}(X_1) - \varphi_{(1)n}(0) \right\} \\
 &+ a_2(0) \beta_1 \left\{ X_1 \frac{d \varphi_{(2)n}}{d X} \Big|_{X_1} - \frac{d \varphi_{(2)n}}{d X} \Big|_1 + \varphi_{(2)n}(1) - \varphi_{(2)n}(X_1) \right\} \\
 &+ b_1(0) \left\{ \frac{d \varphi_{(1)n}}{d X} \Big|_0 - \frac{d \varphi_{(1)n}}{d X} \Big|_{X_1} \right\} \\
 &+ b_2(0) \beta_1 \left\{ \frac{d \varphi_{(2)n}}{d X} \Big|_{X_1} - \frac{d \varphi_{(2)n}}{d X} \Big|_1 \right\}
 \end{aligned} \tag{A.145}$$

Simplificando

$$\begin{aligned}
\lambda_{(1)n}^2 I_{(2)n}(0) &= \frac{d\varphi_{(1)n}}{dX} \Big|_{X_1} \{-a_1(0) - b_1(0)\} + \beta_1 \frac{d\varphi_{(2)n}}{dX} \Big|_{X_1} \{a_2(0)X_1 + b_2(0)\} \\
&+ \frac{d\varphi_{(1)n}}{dX} \Big|_0 \{a_1(0)(0) + b_1(0)\} + \beta_1 \frac{d\varphi_{(2)n}}{dX} \Big|_1 \{-a_2(0)(1) - b_2(0)\} \\
&+ a_1(0) \{ \varphi_{(1)n}(X_1) - \varphi_{(1)n}(0) \} + a_1(0) \beta_1 \{ \varphi_{(2)n}(1) - \varphi_{(2)n}(X_1) \}
\end{aligned} \tag{A.146}$$

sustituyendo

$$\begin{aligned}
\lambda_{(1)n}^2 I_{(2)n}(0) &= \frac{d\varphi_{(1)n}}{dX} \Big|_{X_1} \{-g_{(1)}(X_1, 0) + g_{(2)}(X_1, 0)\} \\
&+ \frac{d\varphi_{(1)n}}{dX} \Big|_0 g_{(1)}(0, 0) - \beta_1 \frac{d\varphi_{(2)n}}{dX} \Big|_1 g_{(2)}(1, 0) \\
&+ a_1(0) \{ \varphi_{(1)n}(X_1) - \varphi_{(1)n}(0) + \varphi_{(2)n}(1) - \varphi_{(2)n}(X_1) \}
\end{aligned} \tag{A.147}$$

aquí usamos $a_1(0) = \beta_1 a_2(0)$

$$\lambda_{(1)n}^2 I_{(2)n}(0) = \frac{d\varphi_{(1)n}}{dX} \Big|_0 g_{(1)}(0, 0) - \beta_1 \frac{d\varphi_{(2)n}}{dX} \Big|_1 g_{(2)}(1, 0) + a_1(0) \{ \varphi_{(2)n}(1) - \varphi_{(1)n}(0) \} \tag{A.148}$$

pero de las condiciones de frontera sabemos que

$$\frac{d\varphi_{(1)n}}{dX} \Big|_0 = \alpha_{(0)} \varphi_{(1)n}(0)$$

y

$$\frac{d\varphi_{(1)n}}{dX} \Big|_1 = -\alpha_{(2)} \varphi_{(2)n}(1)$$

Así que

$$\begin{aligned}
\lambda_{(1)n}^2 I_{(2)n}(0) &= \\
&\alpha_{(0)} \varphi_{(1)n}(0) g_{(1)}(0, 0) + \beta_1 \alpha_{(2)} \varphi_{(2)n}(1) g_{(2)}(1, 0) + a_1(0) \{ \varphi_{(2)n}(1) - \varphi_{(1)n}(0) \}
\end{aligned} \tag{A.149}$$

pero

$$\alpha_{(0)} g_{(1)}(0, 0) = \frac{\partial g_{(1)}}{\partial X} + \alpha_{(0)} U_{(1)\infty}(0)$$

y

$$\alpha_{(2)} g_{(2)}(1, 0) = -\frac{\partial g_{(2)}}{\partial X} + \alpha_{(2)} U_{(2)\infty}(0)$$

así que

$$\frac{\partial g_{(1)}}{\partial X} = a_1(\tau), \quad \frac{\partial g_{(2)}}{\partial X} = a_2(\tau) \quad y \quad a_1(\tau) = \beta_1 a_2(\tau)$$

por lo tanto

$$\begin{aligned} \lambda_{(1)n}^2 I_{(2)n}(0) &= \varphi_{(1)n}(0) \frac{\partial g_{(1)}}{\partial X} + \varphi_{(1)n}(0) \alpha_{(0)} U_{(1)\infty}(0) - \varphi_{(2)n}(1) \left(\frac{\partial g_{(2)}}{\partial X} \right) \\ &+ \beta_1 \alpha_{(2)} \varphi_{(2)n}(1) U_{(2)\infty}(0) + \varphi_{(2)n}(1) \frac{\partial g_{(2)}}{\partial X} - \varphi_{(1)n}(0) \frac{\partial g_{(1)}}{\partial X} \end{aligned} \quad (A.150)$$

Así llegamos finalmente a

$$I_{(2)n}(0) = \frac{\alpha_{(0)} \varphi_{(1)n}(0) U_{(1)\infty}(0) + \beta_1 \alpha_{(2)} \varphi_{(2)n}(1) U_{(2)\infty}(0)}{\lambda_{(1)n}^2} \quad (A.151)$$

Ahora evaluaremos $D_n(\tau)$

Recordemos que:

$$-D_n(\tau) = \int_0^{x_1} \frac{\partial g_{(1)}}{\partial \tau} \varphi_{(1)n} dX + \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} \int_{x_1}^1 \frac{\partial g_{(2)}}{\partial \tau} \varphi_{(2)m} dX \quad (A.152)$$

y

$$g'_{(1)} = \frac{\partial g_{(1)}}{\partial \tau} = \frac{dU_{(1)\infty}}{d\tau}$$

$$g'_{(2)} = \frac{\partial g_{(2)}}{\partial \tau} = \frac{dU_{(2)\infty}}{d\tau}$$

entonces

$$D_n(\tau) = - \int_0^{X_1} g'_{(1)} \varphi_{(1)n} dX - \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} \int_{X_1}^1 g'_{(2)} \varphi_{(2)n} dX \quad (\text{A.153})$$

como $g'_{(1)}$ y $g'_{(2)}$ no son funciones de X , entonces

$$D_n(\tau) = -g'_{(1)} \int_0^{X_1} \varphi_{(1)n} dX - \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)}} g'_{(2)} \int_{X_1}^1 \varphi_{(2)n} dX \quad (\text{A.154})$$

Aplicando la formula III

$$= g'_{(1)} \frac{1}{\lambda_{(1)n}^2} [\varphi'_{(1)n}]_0^{X_1} + g'_{(2)} \frac{\beta_1}{\gamma_{(2)} \lambda_{(2)n}^2} [\varphi'_{(2)n}]_{X_1}^1 \quad (\text{A.155})$$

esto es

$$= \frac{g'_{(2)}}{\lambda_{(1)n}^2} [\varphi'_{(1)n}(X_1) - \varphi'_{(1)n}(0)] + \frac{g'_{(2)} \beta_1}{\gamma_{(2)} \lambda_{(2)n}^2} [\varphi'_{(2)n}(1) - \varphi'_{(2)n}(X_1)] \quad (\text{A.156})$$

recordemos que $X = X_1$

$$\varphi'_{(1)n}(X_1) = \beta_1 \varphi'_{(2)n}(X_1)$$

y que

$$\lambda_{(2)n}^2 = \frac{\lambda_{(1)n}^2}{\gamma_{(2)}}$$

entonces

$$= \frac{1}{\lambda_{(1)n}^2} \left[g'_{(1)} \varphi'_{(1)n}(X_1) - g'_{(1)} \varphi'_{(1)n}(0) + g'_{(2)} \beta_1 \varphi'_{(2)n}(1) - \frac{g'_{(2)} \beta_1}{\beta_1} \varphi'_{(1)n}(X_1) \right] \quad (\text{A.157})$$

reordenando

$$= \frac{1}{\lambda_{(1)n}^2} \left\{ -g'_{(1)} \varphi'_{(1)n}(0) - g'_{(2)} \beta_1 \varphi'_{(2)n}(1) + \varphi'_{(1)n}(X_1) [g'_{(1)} - g'_{(2)}] \right\} \quad (\text{A.158})$$

como

$$\text{en } X = 0 \quad + \frac{d \varphi_{(1)n}}{d X} = \alpha_{(0)} \varphi_{(1)n}$$

$$\text{en } X = 1 \quad - \frac{d \varphi_{(2)n}}{d X} = \alpha_{(2)} \varphi_{(2)n}$$

$$\text{en } X = X_1 \quad \varphi_{(1)n} = \varphi_{(2)n}$$

Por lo tanto

$$-D_n(\tau) = \alpha_{(0)} \varphi_{(1)n}(0) \frac{d U_{(1)\infty}}{d \tau} + \beta_1 \alpha_{(2)} \varphi_{(2)n}(1) \frac{d U_{(2)\infty}}{d \tau} \quad (\text{A.159})$$

Evaluación de $C_n(\tau)$

$$C_n(\tau) = e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} \left\{ C_n(0) + \int_0^\tau e^{+\lambda_{(1)n}^2 \zeta} A_n(\zeta) d\zeta \right\} \quad (\text{A.160})$$

Es conveniente escribir $A_n(\tau)$ como

$$A_n(\tau) = K_{(3)n} \frac{dU_{(1)\infty}}{d\tau} + K_{(4)n} \frac{dU_{(2)\infty}}{d\tau} \quad (\text{A.161})$$

en donde

$$K_{(3)n} = -\frac{\alpha_{(0)} \varphi_{(1)n}(0)}{\mathcal{J}_n} \quad K_{(4)n} = -\frac{\beta_1 \alpha_{(2)} \varphi_{(2)n}(1)}{\mathcal{J}_n}$$

Caso I

$$U_{(1)\infty} = U_{(1)0} \quad \text{y} \quad U_{(2)\infty} = U_{(2)0}$$

$$\frac{dU_{(1)\infty}}{d\tau} = 0 \quad (\text{A.162})$$

y

$$\frac{dU_{(1)\infty}}{d\tau} = 0 \quad (\text{A.163})$$

Por lo tanto

$$A_n(\tau) = 0 \quad (\text{A.164})$$

y

$$C_n(\tau) = e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} C_n(0) \quad (\text{A.165})$$

Caso II

$$U_{(1)\infty} = U_{(1)0} - \sigma_1 e^{(-\mu_1 \tau)} \quad \text{y} \quad U_{(2)\infty} = U_{(2)0} - \sigma_2 e^{(-\mu_2 \tau)}$$

entonces

$$\frac{dU_{(1)\infty}}{d\tau} = \mu_1 \sigma_1 e^{(-\mu_1 \tau)} \quad (\text{A.166})$$

y

$$\frac{dU_{(1)\infty}}{d\tau} = \mu_2 \sigma_2 e^{(-\mu_2 \tau)} \quad (\text{A.167})$$

Por lo tanto

$$A_n(\tau) = K_{(3)n} \mu_1 \sigma_1 e^{(-\mu_1 \tau)} + K_{(4)n} \mu_2 \sigma_2 e^{(-\mu_2 \tau)} \quad (\text{A.168})$$

Así

$$C_n(\tau) = e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} \left\{ C_n(0) + \int_0^\tau e^{+\lambda_{(1)n}^2 \zeta} \left[k_{(3)n} \mu_1 \sigma_1 e^{(-\mu_1 \zeta)} + k_{(4)n} \mu_2 \sigma_2 e^{(-\mu_2 \zeta)} \right] d\zeta \right\} \quad (\text{A.169})$$

simplificando

$$C_n(\tau) = e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} \left[C_n(0) + k_{(3)n} \mu_1 \sigma_1 \int_0^\tau e^{+\lambda_{(1)n}^2 \zeta} e^{(-\mu_1 \zeta)} d\zeta + k_{(4)n} \mu_2 \sigma_2 \int_0^\tau e^{+\lambda_{(1)n}^2 \zeta} e^{(-\mu_2 \zeta)} d\zeta \right] \quad (\text{A.170})$$

$$C_n(\tau) = e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} C_n(0) + e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} \left[k_{(3)n} \mu_1 \sigma_1 \int_0^\tau e^{(\lambda_{(1)n}^2 \zeta - \mu_1 \zeta)} d\zeta + k_{(4)n} \mu_2 \sigma_2 \int_0^\tau e^{(\lambda_{(1)n}^2 \zeta - \mu_2 \zeta)} d\zeta \right] \quad (\text{A.171})$$

$$C_n(\tau) = e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} C_n(0) + e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} \left[\frac{k_{(3)n} \mu_1 \sigma_1}{\lambda_{(1)n}^2 - \mu_1} \left(e^{(\lambda_{(1)n}^2 \tau - \mu_1 \tau)} \right) \right]_0^\tau + \frac{k_{(4)n} \mu_2 \sigma_2}{\lambda_{(1)n}^2 - \mu_2} \left(e^{(\lambda_{(1)n}^2 \tau - \mu_2 \tau)} \right) \right]_0^\tau \quad (\text{A.172})$$

$$C_n(\tau) = e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} C_n(0) + e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} \left[\frac{k_{(3)n} \mu_1 \sigma_1}{\lambda_{(1)n}^2 - \mu_1} \left(1 - e^{(\lambda_{(1)n}^2 \tau - \mu_1 \tau)} \right) + \frac{k_{(4)n} \mu_2 \sigma_2}{\lambda_{(1)n}^2 - \mu_2} \left(1 - e^{(\lambda_{(1)n}^2 \tau - \mu_2 \tau)} \right) \right] \quad (\text{A.173})$$

$$\begin{aligned} C_n(\tau) = & e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} C_n(0) + \frac{k_{(3)n} \mu_1 \sigma_1}{\lambda_{(1)n}^2 - \mu_1} \left[\left(e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} - e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau} e^{(-\mu_1 \tau)} \right) \right] \\ & + \frac{k_{(4)n} \mu_2 \sigma_2}{\lambda_{(1)n}^2 - \mu_2} \left[\left(e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} - e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau} e^{(-\mu_2 \tau)} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.174})$$

Finalmente

$$C_n(\tau) = e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} C_n(0) + \frac{k_{(3)n} \mu_1 \sigma_1}{\lambda_{(1)n}^2 - \mu_1} \left[\left(e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} - e^{(-\mu_1 \tau)} \right) \right] + \frac{k_{(4)n} \mu_2 \sigma_2}{\lambda_{(1)n}^2 - \mu_2} \left[\left(e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} - e^{(-\mu_2 \tau)} \right) \right] \quad (\text{A.175})$$

Caso III

Sea

$$U_{(1)\infty} = U_{(1)0} \quad \text{y} \quad U_{(2)\infty} = U_{(2)0} - \sigma_2 \text{sen}(\omega_2 \tau) \quad (\text{A.176})$$

Entonces

$$\frac{dU_{(1)\infty}}{d\tau} = 0 \quad (\text{A.177})$$

y

$$\frac{dU_{(1)\infty}}{d\tau} = \omega_2 \sigma_2 \cos(\omega_2 \tau) \quad (\text{A.178})$$

Por lo tanto

$$A_n(\tau) = k_{(4)n} \omega_2 \sigma_2 \cos(\omega_2 \tau) \quad (\text{A.179})$$

$$C_n(\tau) = e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} \left\{ C_n(0) + \int_0^\tau e^{+\lambda_{(1)n}^2 \zeta} \left[k_{(4)n} \omega_2 \sigma_2 \cos(\omega_2 \tau) \right] d\zeta \right\} \quad (\text{A.180})$$

$$C_n(\tau) = e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} C_n(0) + e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} k_{(4)n} \omega_2 \sigma_2 \left[\int_0^\tau e^{+\lambda_{(1)n}^2 \zeta} \cos(\omega_2 \tau) d\zeta \right] \quad (\text{A.181})$$

Para resolver la integral de (A.181) hacemos:

$$u = e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau} \quad \text{entonces} \quad du = \lambda_{(1)n}^2 e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau} d\tau$$

$$dv = \cos(\omega_2 \tau) d\tau \quad \text{entonces} \quad v = \frac{1}{\omega_2} \text{sen}(\omega_2 \tau) \Big|_0^\tau = \frac{1}{\omega_2} \text{sen}(\omega_2 \tau)$$

entonces la integral es

$$\int_0^\tau e^{\lambda_{(1)n}^2 \zeta} \cos(\omega_2 \zeta) d\zeta = \frac{e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau}}{\omega_2} \text{sen}(\omega_2 \tau) - \frac{\lambda_{(1)n}^2}{\omega_2} \int_0^\tau e^{\lambda_{(1)n}^2 \zeta} \text{sen}(\omega_2 \zeta) d\zeta \quad (\text{A.182})$$

Sea nuevamente

$$u = e^{\lambda_{(1)n}^2 \zeta} \quad \text{entonces} \quad du = \lambda_{(1)n}^2 e^{\lambda_{(1)n}^2 \zeta} d\zeta$$

$$dv = \text{sen}(\omega_2 \tau) d\zeta \quad \text{entonces} \quad v = -\frac{1}{\omega_2} \cos(\omega_2 \zeta) \Big|_0^\tau = \frac{1}{\omega_2} (1 - \cos(\omega_2 \tau))$$

Sustituyendo en el lado derecho de (A.182)

$$\begin{aligned} \int_0^\tau e^{\lambda_{(1)n}^2 \zeta} \cos(\omega_2 \zeta) d\zeta &= \frac{e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau}}{\omega_2} \text{sen}(\omega_2 \tau) - \frac{\lambda_{(1)n}^2}{\omega_2} \left[e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau} \frac{1}{\omega_2} (1 - \cos(\omega_2 \tau)) \right. \\ &\quad \left. - \int_0^\tau \left(\frac{1}{\omega_2} (1 - \cos(\omega_2 \tau)) \right) \lambda_{(1)n}^2 e^{\lambda_{(1)n}^2 \zeta} d\zeta \right] \end{aligned} \quad (\text{A.183})$$

Simplificando

$$\begin{aligned} \int_0^\tau e^{\lambda_{(1)n}^2 \zeta} \cos(\omega_2 \zeta) d\zeta &= \frac{e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau}}{\omega_2} \text{sen}(\omega_2 \tau) - \frac{\lambda_{(1)n}^2}{\omega_2^2} e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau} (1 - \cos(\omega_2 \tau)) \\ &\quad + \frac{\lambda_{(1)n}^4}{\omega_2^2} \left[\int_0^\tau e^{\lambda_{(1)n}^2 \zeta} d\zeta - \int_0^\tau e^{\lambda_{(1)n}^2 \zeta} \cos(\omega_2 \tau) d\zeta \right] \end{aligned} \quad (\text{A.184})$$

$$\begin{aligned} \int_0^\tau e^{\lambda_{(1)n}^2 \zeta} \cos(\omega_2 \zeta) d\zeta &= \frac{e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau}}{\omega_2} \text{sen}(\omega_2 \tau) - \frac{\lambda_{(1)n}^2}{\omega_2^2} e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau} (1 - \cos(\omega_2 \tau)) \\ &\quad + \frac{\lambda_{(1)n}^4}{\omega_2^2} \left[\frac{1}{\lambda_{(1)n}^2} (e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau} - 1) - \int_0^\tau e^{\lambda_{(1)n}^2 \zeta} \cos(\omega_2 \tau) d\zeta \right] \end{aligned} \quad (\text{A.185})$$

$$\begin{aligned} \int_0^\tau e^{\lambda_{(1)n}^2 \zeta} \cos(\omega_2 \zeta) d\zeta &= \frac{e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau}}{\omega_2} \text{sen}(\omega_2 \tau) - \frac{\lambda_{(1)n}^2}{\omega_2^2} e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau} (1 - \cos(\omega_2 \tau)) \\ &+ \frac{\lambda_{(1)n}^2}{\omega_2^2} (e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau} - 1) - \frac{\lambda_{(1)n}^4}{\omega_2^2} \int_0^\tau e^{\lambda_{(1)n}^2 \zeta} \cos(\omega_2 \zeta) d\zeta \end{aligned} \quad (\text{A.186})$$

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{\lambda_{(1)n}^4}{\omega_2^2}\right) \int_0^\tau e^{\lambda_{(1)n}^2 \zeta} \cos(\omega_2 \zeta) d\zeta &= \frac{e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau}}{\omega_2} \text{sen}(\omega_2 \tau) - \frac{\lambda_{(1)n}^2}{\omega_2^2} e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau} + \frac{\lambda_{(1)n}^2}{\omega_2^2} e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau} \cos(\omega_2 \tau) \\ &+ \frac{\lambda_{(1)n}^2}{\omega_2^2} e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau} - \frac{\lambda_{(1)n}^2}{\omega_2^2} \end{aligned} \quad (\text{A.187})$$

$$\left(\frac{\omega_2^2 + \lambda_{(1)n}^4}{\omega_2^2}\right) \int_0^\tau e^{\lambda_{(1)n}^2 \zeta} \cos(\omega_2 \zeta) d\zeta = \frac{e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau}}{\omega_2} \text{sen}(\omega_2 \tau) + \frac{\lambda_{(1)n}^2}{\omega_2^2} e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau} \cos(\omega_2 \tau) - \frac{\lambda_{(1)n}^2}{\omega_2^2} \quad (\text{A.188})$$

$$\int_0^\tau e^{\lambda_{(1)n}^2 \zeta} \cos(\omega_2 \zeta) d\zeta = \left(\frac{\omega_2^2}{\lambda_{(1)n}^4 + \omega_2^2}\right) \left[\frac{e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau}}{\omega_2} \text{sen}(\omega_2 \tau) + \frac{\lambda_{(1)n}^2}{\omega_2^2} e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau} \cos(\omega_2 \tau) - \frac{\lambda_{(1)n}^2}{\omega_2^2} \right] \quad (\text{A.189})$$

$$\int_0^\tau e^{\lambda_{(1)n}^2 \zeta} \cos(\omega_2 \zeta) d\zeta = \left(\frac{1}{\lambda_{(1)n}^4 + \omega_2^2}\right) \left[\omega_2 e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau} \text{sen}(\omega_2 \tau) + \lambda_{(1)n}^2 e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau} \cos(\omega_2 \tau) - \lambda_{(1)n}^2 \right] \quad (\text{A.190})$$

Sustituyendo esta última en (A.181)

$$\begin{aligned} C_n(\tau) &= e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} C_n(0) + \\ &e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} k_{(4)n} \omega_2 \sigma_2 \left(\frac{1}{\lambda_{(1)n}^4 + \omega_2^2}\right) \left[\omega_2 e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau} \text{sen}(\omega_2 \tau) + \lambda_{(1)n}^2 e^{\lambda_{(1)n}^2 \tau} \cos(\omega_2 \tau) - \lambda_{(1)n}^2 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.191})$$

simplicando se obtiene finalmente

$$C_n(\tau) = e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} C_n(0) + \frac{\omega_2 \sigma_2 k_{(4)n}}{\lambda_{(1)n}^4 + \omega_2^2} \left[\lambda_{(1)n}^2 \cos(\omega_2 \tau) + \omega_2 \text{sen}(\omega_2 \tau) - \lambda_{(1)n}^2 e^{-\lambda_{(1)n}^2 \tau} \right] \quad (\text{A.192})$$

Deducción de los coeficientes de transferencia de masa

Partiendo de las definiciones, Ecs. (3.8)-(3.11), podemos encontrar que

$$C_{(1)L}^s = k_{eq} C_{(2)L}^s \quad (A.193)$$

$$N_{Ax}^s = -\mathcal{D}_{(1)} \frac{\partial C_{(1)}^s}{\partial x} \quad (A.194)$$

$$-N_{Ax}^s = \frac{k_{(0)}}{k_0} (C_{(1)0}^s - C_{(1)\infty}^{s*}) \Rightarrow C_{(1)\infty}^{s*} - C_{(1)0}^s = \frac{k_0}{k_{(0)}} N_{Ax}^s \quad (A.195)$$

$$N_{Ax}^s = \frac{k_{(2)}}{k_2} (C_{(2)2}^s - C_{(2)\infty}^{s*}) \Rightarrow C_{(2)2}^s - C_{(2)\infty}^{s*} = \frac{k_2}{k_{(2)}} N_{Ax}^s \quad (A.196)$$

y sustituyendo (A.193) en la Ec. (3.10) se obtiene

$$N_{Ax}^s = -\mathcal{D}_{(1)} \frac{k_{eq} C_{(2)L}^s - C_{(1)0}^s}{x_L - x_0} \Rightarrow C_{(1)0}^s - k_{eq} C_{(2)L}^s = \frac{x_L - x_0}{\mathcal{D}_{(1)}} N_{Ax}^s \quad (A.197)$$

y de la Ec. (3.11) se obtiene

$$C_{(2)L}^s - C_{(2)2}^s = \frac{x_2 - x_L}{\mathcal{D}_{(2)}} N_{Ax}^s \quad (A.198)$$

Multiplicando las Ecs. (A.198) y (A.196) por k_{eq} , se obtiene

$$k_{eq} C_{(2)L}^s - k_{eq} C_{(2)2}^s = \frac{x_2 - x_L}{\mathcal{D}_{(2)}} k_{eq} N_{Ax}^s \quad (A.199)$$

$$k_{eq} C_{(2)2}^s - k_{eq} C_{(2)\infty}^{s*} = \frac{k_2}{k_{(2)}} k_{eq} N_{Ax}^s \quad (A.200)$$

Sumando las Ecs. (A.195), (A.197), (A.199) y (A.200) se llega a

$$C_{(1)\infty}^{s*} - k_{eq} C_{(2)\infty}^{s*} = N_{Ax}^s \left(\frac{k_0}{k_{(0)}} + \frac{x_L - x_0}{\mathcal{D}_{(1)}} + \frac{x_2 - x_L}{\mathcal{D}_{(2)}} k_{eq} + \frac{k_2}{k_{(2)}} k_{eq} \right) \quad (A.201)$$

Despejando de esta última para N_{Ax}^s

$$N_{Ax}^s = K_{(1)} \left(C_{(1)\infty}^{s*} - k_{eq} C_{(2)\infty}^{s*} \right) \quad (A.202)$$

donde

$$K_{(1)} = \frac{1}{\frac{k_0}{k_{(0)}} + \frac{x_L - x_0}{\mathcal{D}_{(1)}} + \frac{x_2 - x_L}{\mathcal{D}_{(2)}} k_{eq} + \frac{k_2}{k_{(2)}} k_{eq}} \quad (A.203)$$

O bien, la Ec. (A.202) puede escribirse como

$$N_{Ax}^s = K_{(2)} \left(\frac{C_{(1)\infty}^{s*}}{k_{eq}} - C_{(2)\infty}^{s*} \right), \quad k_{eq} = \frac{K_{(2)}}{K_{(1)}} \quad (A.204)$$

La ec. (A.194) evaluada en $x = x_0$

$$N_{Ax}^s \Big|_{x_0} = -\mathcal{D}_{(1)} \frac{\partial C_{(1)}^s}{\partial x} \Big|_{x_0} \quad (A.205)$$

utilizando la expresión (A.202) para evaluar $N_{Ax}^s \Big|_{x_0}$ y sustituyendo en esta ultima

$$K_{(1)} = \frac{-\mathcal{D}_{(1)} \frac{\partial C_{(1)}^s}{\partial x} \Big|_{x_0}}{C_{(1)\infty}^{s*} - k_{eq} C_{(2)\infty}^{s*}} \quad (A.206)$$

$$K_{(1)} = \frac{-\mathcal{D}_{(1)} \frac{\partial U_{(1)}}{\partial x} \Big|_{x_0}}{x_2 \left(U_{(1)\infty} - U_{(2)\infty} \right)} \quad (A.207)$$

$$\frac{K_{(1)} x_2}{\mathcal{D}_{(1)}} = - \frac{\frac{\partial U_{(1)}}{\partial x} \Big|_{x_0}}{U_{(1)\infty} - U_{(2)\infty}} \quad (A.208)$$

Ecs. (3.12), (3.13), (3.14)

APÉNDICE B. MÉTODO DE MÜLLER

El método de Müller se usa para encontrar cualquier número de raíces, reales o complejas, de una función arbitraria. El método es iterativo, converge casi cuadráticamente en la vecindad de una raíz, no requiere de la evaluación de la derivada de la función, y obtiene ambas raíces reales y complejas aún cuando estas raíces no sean simples (Conte y de Boor, 1980).

Aún más, el método es global en el sentido de que el usuario no necesita proporcionar una aproximación inicial. En esta sección se describe brevemente la derivación del método para localizar las raíces, omitiendo cualquier discusión sobre convergencia, ya que este problema es de gran importancia en muchas ramas de ingeniería.

El método de Müller generaliza el método de la secante, este método usa interpolación cuadrática entre tres puntos en lugar de interpolación lineal entre dos puntos. Encontrando las raíces de la ecuación cuadrática, se obtienen los pares de raíces. Dadas tres aproximaciones previas (x_{i-2} , x_{i-1} , x_i) para la raíz, y los valores del polinomio $P(x)$ en esos puntos, la siguiente aproximación x_{i+1} es generada por las siguientes fórmulas:

$$q \equiv \frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i-1} - x_{i-2}} \quad (\text{B.1})$$

$$A \equiv qP(x_i) - q(1+q)P(x_{i-1}) + q^2P(x_{i-2}) \quad (\text{B.2})$$

$$B \equiv (2q+1)P(x_i) - (1+q)^2P(x_{i-1}) + q^2P(x_{i-2}) \quad (\text{B.3})$$

$$C \equiv (1+q)P(x_i) \quad (\text{B.4})$$

$$x_{i+1} = x_i - (x_i - x_{i-1}) \left[\frac{2C}{B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}} \right] \quad (\text{B.5})$$

En la Figura B.1 se muestra la situación de obtener raíces reales a partir de la ec. (B.5). Es importante hacer notar, que aún si la raíz que se está buscando es real, es posible encontrar aproximaciones complejas debido a que la solución dada por la ec. (B.5) puede ser compleja. Para la implementación de este método se utilizó la rutina de IMSL DZREAL.

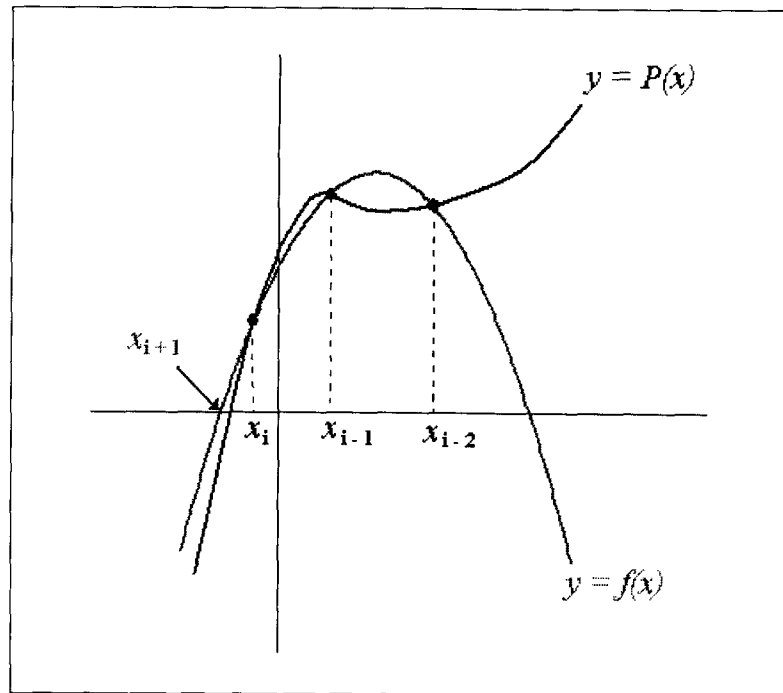


Figura B.1 Diagrama esquemático de los pasos requeridos para la búsqueda de raíces por el Método de Müller.

Subrutina para encontrar los valores propios

Las definiciones de los parámetros de la subrutina siguiente se tomaron del manual del compilador de Fortran.

ZREAL/DZREAL (precisión Simple/Doble)

Encuentra las raíces reales de una función real usando el método de Müller.

Uso

CALL ZREAL (F, ERRABS, ERRREL, EPS, ETA, NROOT, ITMAX, XGUESS, X, INFO)

Argumentos

F — La FUNCION para la cual se van a encontrar los valores de las raíces.
La forma es $F(X)$, en donde

X — El punto en el que la función se evalúa. (Entrada)

F — La función calculada en el punto **X**. (Salida)

F — debe ser declarada como EXTERNA en el programa de llamado

ERRABS — Primer criterio de paro (Entrada)
Existe una raíz en $X(I)$ si $ABS(F(X(I))).LT. ERRABS$.

ERRREL — Segundo criterio de paro con el error relativo. (Entrada).
Existe una raíz en $X(I)$ si el cambio del error relativo de dos aproximaciones sucesivas a $X(I)$ es menor que **ERRREL**.

EPS — Ver **ETA**. (Entrada)

ETA — Criterio de propagación para múltiples raíces (Entrada).
Si la raíz $X(I)$ se ha calculado y $ABS(X(I) - X(J)).LT.EPS$, donde $X(J)$ es una raíz previamente calculada, entonces los cálculos se reinician con un valor aproximado igual a $X(I) + ETA$.

NROOT — El número de raíces a encontrar por ZREAL. (Entrada)

ITMAX — El máximo número de iteraciones para encontrar una raíz. (Entrada)

XGUESS — Un vector de longitud **NROOT**. (Entrada)
XGUESS contiene los valores supuestos de las raíces

X — Un vector de longitud **NROOT**. (Salida)
X Contiene las raíces calculadas

INFO — Un vector entero de longitud **NROOT**. (Salida)
INFO(J) Contiene el número de iteraciones empleadas en la búsqueda de la J-ésima raíz cuando se alcanzó el criterio de convergencia. Si el criterio de convergencia no se alcanzó en **ITMAX** iteraciones, entonces **INFO(J)** contiene el número máximo de iteraciones **ITMAX**.

Comentarios

Información sobre los errores

Tipo	Código	
3	1	Falla la convergencia en ITMAX iteraciones para al menos una de las NROOT raíces.

La rutina **ZREAL** siempre regresa la última aproximación para la j-ésima raíz en **X(J)**. Si se satisface el criterio de convergencia, entonces **INFO(J)** es menor o igual a **ITMAX**. Si el criterio de convergencia no se satisface, entonces **INFO (J)** se fija igual a **ITMAX + 1**.

La rutina **ZREAL** supone que existen **NROOT** raíces reales distintas para la función **F** y que éstas se pueden encontrar a partir del conjunto de valores iniciales proporcionados. La rutina está diseñada tal que la convergencia de cualquier raíz sencilla no se pueda obtener de dos valores iniciales diferentes propuestos.

Algoritmo

La Rutina **ZREAL** calcula las n raíces reales de una función real **F**. El usuario debe proporcionar la función $f(x)$ y un vector de n valores iniciales aproximados $x_1, x_2, \dots, x_n$, la rutina usa el método de Müller para localizar las n raíces reales de f , esto es, los n valores reales x para los cuales $f(x) = 0$. La rutina cuenta con dos criterios de convergencia: El primero necesita que $|f(x_i^m)|$ sea menor que **ERRABS**; el segundo requiere que el cambio relativo de cualquiera de las dos aproximaciones sucesivas a x_i sea menor que **ERRREL**.

Aquí, x_i^m es la aproximación m-ésima de x_i .

Podemos expresar estos criterios matemáticamente como sigue:

Sea **ERRABS** = ε_1 , y **ERRREL** = ε_2 , entonces

Criterio 1:

$$|f(x_i^m)| < \varepsilon_1$$

Criterio 2:

$$\left| \frac{x_i^{m+1} - x_i^m}{x_i^m} \right| < \varepsilon_2$$

Existe “convergencia” si se satisface cualquiera de estos criterios.

Para nuestro caso

```

C      Declaración de variables
      Integer      ItMax, NRaiz
      Real*8       Eps,ErrAbs,ErrRel,Eta
      Parameter    (NRaiz=20)
      Integer      Info(NRaiz)
      Real*8       F, X(NRaiz),Xinit(NRaiz)
      External     F, WRRRN, ZREAL

C      Conjunto de valores iniciales XINIT
      Do I=1,NRaiz
          Xinit(I) = Dfloat(2*I)
      End Do

C      Conjunto de valores para todos los parámetros de entrada
      Eps  = 1.0D-5
      ErrAbs = 1.0D-5
      ErrRel = 1.0D-5
      Eta  = 1.0D-2
      ItMax = 100

C      Encuentra las raices
      Call DZREAL (F,ERRABS,ERRREL,EPS,ETA,NRaiz,ITMAX,Xinit, X,INFO)

C      Imprime los resultados
      Call WRRRN ('Las raices son', 1, NRaiz, X, 1, 0)
      End

C      función externa real definida por el usuario
      Real Function F (X)
      Real*8  X,LAMNDA1,LAMNDA2,FA,FB,FC,FD,FE,FF,FG,FH
          LAMNDA1 = X
          ALFAN = 10.0D0
          ALFA0 = 1.0D0
          AX1  = 0.5D0

```

```
BETA1 = 5.0D0
GAMA2 = 5.0D0
LAMNDA2 = LAMNDA1/DSqrt(GAMA2)
FA = DSin(LAMNDA2*(1.0-AX1))
FB = DCos(LAMNDA2*(1.0-AX1))
FC = DCos(LAMNDA1*AX1)
FD = DSin(LAMNDA1*AX1)
FE = LAMNDA1*(ALFAN*FA+ FB*LAMNDA2)
FF = ALFA0*FC - LAMNDA1*FD
FG = BETA1*(ALFAN*FB - LAMNDA2*FA)
FH = LAMNDA2*(ALFA0*FD + FC*LAMNDA1)
F = FE*FF + FG*FH
```

Return

End

APÉNDICE C. ALGORITMO DE EVALUACIÓN DE LA SOLUCIÓN ANALÍTICA

Paso 1. Fijar los parámetros adimensionales $\alpha_{(0)}$, $\alpha_{(2)}$, X_1 , $\gamma_{(2)}$, β_1

Paso 2. Resolver la Ec. (2.39) y encontrar los valores propios $\lambda_{(1)n}$'s

Paso 3. Usar Ecs. (2.37) y (2.38) para Evaluar $K_{(1)n}$ y $K_{(2)n}$.

Paso 4. Usar Ec. (2.55) para obtener $C_n(0)$.

Para un tiempo τ dado:

Paso 5. Usar Ec. (2.52) para obtener $C_n(\tau)$, con las condiciones de frontera específicas

$U_{1\infty}(\tau)$ y $U_{2\infty}(\tau)$.

para una posición X dada:

Paso 6. Evaluar $g_{(1)}(X, \tau)$ ó $g_{(2)}(X, \tau)$ Usando Ecs. (2.18) ó (2.19)

Paso 7. Usar Ecs. (2.34)-(2.35) para Evaluar $\varphi_{(1)n}(X)$ ó $\varphi_{(2)n}(X)$.

Paso 8. Evaluar $U_{(i)}$ Usando Ecs. (2.17) y (2.41).

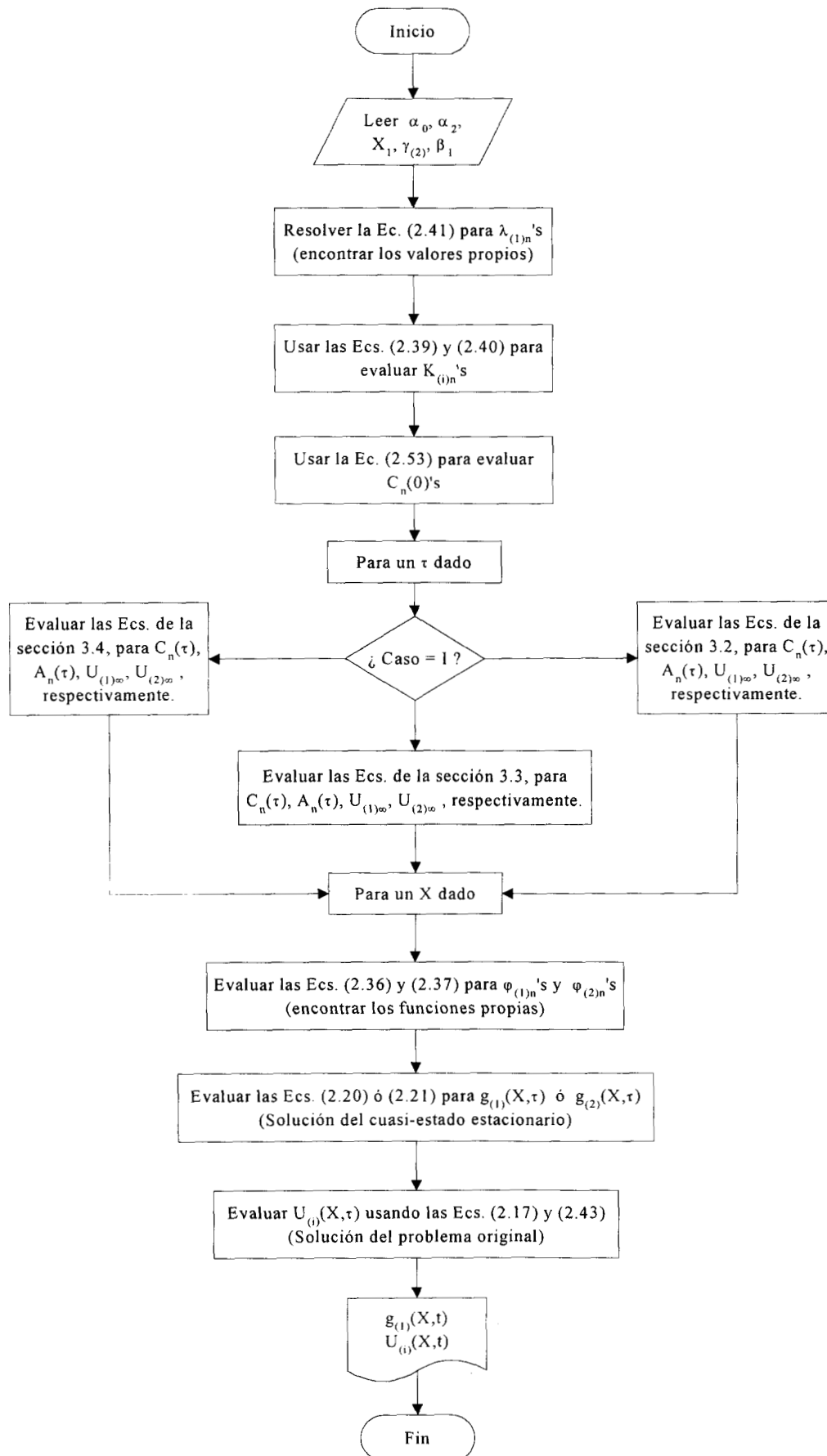


Figura C.1 Diagrama de flujo para evaluar de la solución analítica