

**Condiciones de frontera para el  
transporte entre medios  
multifásicos**

**Francisco José Valdés Parada**



Universidad Autónoma Metropolitana  
Unidad Iztapalapa

**Condiciones de frontera para el transporte  
entre medios multifásicos**

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

Presenta:

**M. en C. Francisco José Valdés Parada**

Asesor:

**Dr. J. Alberto Ochoa Tapia**

*If it is true, there is a proof*

De John C. Slattery a Stephen Whitaker

## Agradecimientos

*La realización de este trabajo no habría sido posible sin el financiamiento otorgado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología. Al mismo tiempo, le estoy sumamente agradecido a mi asesor, el Dr. J. Alberto Ochoa-Tapia, por haberme aceptado para llevar a cabo este trabajo y por siempre compartir parte de su tiempo para discutir mis inquietudes y apoyarme en todo momento.*

*Aprecio sinceramente las revisiones de las versiones preliminares del trabajo que muy amablemente hicieron los doctores Benoît Goyeau y Michel Quintard, quienes además me permitieron visitarlos y me propusieron importantes mejoras en aspectos específicos del trabajo. En particular, deseo expresar mi sincero agradecimiento al profesor Stephen Whitaker, no sólo por sus valiosas correcciones y recomendaciones, sino también por su amable disponibilidad para platicar conmigo sobre una gran variedad de temas en los días previos a la defensa pública de este trabajo. Asimismo, deseo agradecer a los profesores José Álvarez-Ramírez, Antonio del Río-Portilla, Felipe López Isunza y Rosa María Velasco-Belmont, quienes aportaron importantes comentarios y sugerencias al trabajo durante las diversas etapas de evaluación. En particular, le estoy plenamente agradecido al profesor Alberto Soria-López por las valiosas horas de discusión que tuvimos, lo cual me ayudó y motivó considerablemente a mejorar el trabajo. Como siempre, estoy eternamente agradecido a todas las personas que, en un momento u otro, han creído en mí.*

*Lo último que me resta es manifestar que ha sido un honor y un placer llevar a cabo este trabajo.*

## Resumen

Las condiciones de frontera adecuadas, ya sea de transferencia de cantidad de movimiento, calor o masa, entre dos regiones es un elemento indispensable en el desarrollo de modelos que describan el transporte en sistemas heterogéneos. Por tal razón, es común encontrar en la literatura condiciones de frontera que, si bien pueden ser adecuadas para describir un fenómeno particular, se obtuvieron empíricamente y frecuentemente incluyen coeficientes desconocidos.

Lo anterior ha despertado el interés de varios autores que, en las tres últimas décadas, han presentado metodologías que permiten obtener condiciones de frontera fundamentadas en la física del fenómeno estudiado. Entre las distintas metodologías reportadas en la literatura se encuentra la de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a,b), que permite, (mediante la aplicación del método del promedio volumétrico (Whitaker, 1999)), obtener condiciones de salto *no cerradas*, es decir en términos de coeficientes indeterminados, para el flux de cantidad de movimiento, calor o masa entre medios heterogéneos. Recientemente, Wood y col. (2000) propusieron una metodología que permite obtener condiciones de salto *cerradas*, es decir aquellas en las que el coeficiente responsable de la discontinuidad se determina a partir de la solución del problema de cerradura correspondiente.

En este trabajo, se utilizan las ideas de estos trabajos (Ochoa-Tapia y Whitaker 1995a y Wood y col., 2000) para desarrollar una metodología que lleve a condiciones de salto cerradas en la frontera medio poroso-fluido. Esta metodología se aplica al estudio de los fenómenos de transferencia (difusiva y convectiva) de masa y cantidad de movimiento en la frontera entre regiones homogéneas. Para describir la dependencia de los coeficientes efectivos resultantes, se plantean y resuelven los problemas de cerradura correspondientes. Los resultados se comparan con los obtenidos con otras metodologías.

---

## Índice

Introducción	1
Capítulo 1: Revisión bibliográfica	4
1.1.- <i>Condición de salto empírica</i>	5
1.2.- <i>Condición de salto metodológica</i>	9
1.3.- <i>Predicción del coeficiente de salto</i>	14
1.4.- <i>Condiciones de salto cerradas</i>	16
1.5.- <i>Estimación de la permeabilidad del medio poroso homogéneo</i>	17
1.6.- <i>Modelos capilares</i>	18
1.7.- <i>Modelo basado en el radio hidráulico</i>	19
1.8.- <i>Modelos de arrastre para estructuras periódicas</i>	20
Objetivos	24
<i>Objetivo general</i>	24
<i>Objetivos particulares</i>	24
<b>Parte I: Transferencia de masa difusiva</b>	
Capítulo 2: Deducción de la condición de salto de transferencia de masa en la inter-región microporo-fluido	26
2.1.- <i>Planteamiento del problema</i>	26
2.2.- <i>Promedio volumétrico</i>	27
2.3.- <i>Ecuación de transferencia de masa generalizada</i>	30
2.4.- <i>Ecuaciones de transferencia de masa en cada región</i>	34
2.5.- <i>Condición de salto</i>	36
2.6.- <i>Relación entre <math>\langle R_A \rangle_s</math> y <math>R_{As}</math></i>	43
Capítulo 3: Planteamiento y solución del problema de cerradura	
3.1.- <i>Problemas puntual y promedio</i>	47
3.2.- <i>Planteamiento del problema de cerradura</i>	48
3.3.- <i>Forma cerrada de la condición de salto</i>	59
3.4.- <i>Solución del problema de cerradura</i>	60
3.5.- <i>Resultados</i>	64
3.6.- <i>Efecto de la microestructura</i>	66
3.7.- <i>Resumen de la metodología</i>	71
Capítulo 4: Ecuación de transferencia de masa generalizada cerrada para difusión pasiva en la frontera fluido-medio poroso	74

4.1.- Ecuación de transferencia de masa generalizada	75
4.2.- Problema de cerradura	77
4.3.- Solución del problema de cerradura	82
4.4.- Ecuaciones de medio efectivo y condición de salto	86
4.4.1.- Ecuaciones de medio efectivo para las regiones homogéneas	86
4.4.2.- Condición de salto	87
4.5.- Comparación cuantitativa	91
<b>Parte II: Transferencia de cantidad de movimiento</b>	
Capítulo 5: Condición de salto de transferencia de cantidad de movimiento en la inter-región medio poroso-fluido	98
5.1.- Problema puntual	99
5.2.- Promedio volumétrico	100
5.3.- Ecuaciones de transferencia generalizadas	101
5.4.- Condiciones de salto	106
5.5.- Relación entre $\langle \psi \rangle_s$ y $\psi_s$	113
Capítulo 6: Estimación del tensor mixto de esfuerzos	117
6.1.- Problemas local y promedio	118
6.2.- Problema de cerradura	120
6.3.- Forma cerrada del tensor de esfuerzos globales	126
6.4.- Problema de cerradura bidimensional	128
6.5.- Cambios de propiedades geométricas con la posición	131
6.6.- Comparación de modelos de permeabilidad	135
6.7.- Esfuerzos globales	138
6.8.- Tensor mixto de esfuerzos	141
6.9.- Resumen de resultados	145
<b>Parte III: Transferencia convectiva de masa</b>	
Capítulo 7: Condición de salto de transferencia difusiva y convectiva de masa entre un medio poroso y un fluido	147
7.1.- Problema puntual	148
7.2.- Ecuaciones de medio efectivo	149
7.3.- Condición de salto	155
7.4.- Problema de cerradura	160
7.5.- Condición de salto cerrada	168
Conclusiones	172

---

Bibliografía	175
Apéndice A-1: Prueba de simetría y antisimetría de los problemas de cerradura	A-1.1
A-1.1. <i>Problema bidimensional para la inter-región</i>	A-1.1
A-1.2. <i>Problema de cerradura adimensional</i>	A-1.5
Apéndice A-2: Solución numérica del problema de cerradura	A-2.1
A-2.1.- <i>Planteamiento del problema</i>	A-2.1
A-2.2.- <i>Discretización de las ecuaciones diferenciales</i>	A-2.2
A-2.3.- <i>Esquema numérico</i>	A-2.3
A-2.4.- <i>Independencia de parámetros numéricos y del número de     cuadrados</i>	A-2.10
Apéndice A-3: Prueba de simetría y antisimetría para el modelo de medio poroso centrado en el cuerpo	A-3.1
A-3.1.- <i>Medio poroso centrado en el cuerpo horizontal</i>	A-3.1
A-3.2.- <i>Medio poroso centrado en el cuerpo vertical</i>	A-3.6
Apéndice A-4: Gráficos de la variable de cerradura $s_\gamma$	A-4.1

---

## Índice de figuras

<b>Figura 1-1:</b> Modelo periódico de medio poroso y celda unitaria usando cilindros paralelos y considerando; <i>i</i> ) flujo paralelo y <i>ii</i> ) flujo perpendicular.	22
<b>Figura 1-2:</b> Modelo de medio poroso y celda unitaria usando esferas.	23
<b>Figura 2-1:</b> Niveles de escala de interés.	27
<b>Figura 2-2:</b> Promediado para la <i>Escala III</i> .	29
<b>Figura 2-3:</b> Región de promediado $V_\infty$ y vectores unitarios para la inter-región $\omega - \eta$ .	38
<b>Figura 2-4:</b> Distancias características en la inter-región.	45
<b>Figura 2-5:</b> Esquema de distribución de velocidad de reacción en la inter-región para el transporte dominado por a) reacción y b) difusión.	45
<b>Figura 3-1:</b> Zona representativa de la inter-región.	52
<b>Figura 3-2:</b> Modelo de medio poroso centrado en las caras y celdas unitarias para la inter-región y la región homogénea $-\omega$ .	63
<b>Figura 3-3:</b> Coeficiente efectivo vs. $\phi$ como función de la razón de aspecto $A$ ; vista bidimensional.	65
<b>Figura 3-4:</b> Coeficiente efectivo vs. $\phi$ como función de la razón de aspecto $A$ ; vista tridimensional.	66
<b>Figura 3-5:</b> Modelo de medio poroso centrado en el cuerpo horizontal.	68
<b>Figura 3-6:</b> Comparación del coeficiente efectivo obtenido para un medio poroso centrado en el cuerpo horizontal (---) y centrado en las caras (—).	68
<b>Figura 3-7:</b> Modelo de medio poroso centrado en el cuerpo vertical.	69
<b>Figura 3-8:</b> Comparación del coeficiente efectivo obtenido para un medio poroso centrado en el cuerpo vertical (---) y centrado en las caras (—).	69
<b>Figura 3-9:</b> Modelo de medio microporoso bidisperso, centrado en el cuerpo horizontal.	70
<b>Figura 3-10:</b> Coeficiente efectivo vs. $\phi$ para un medio poroso centrado en el cuerpo horizontal con distribución bidispersa de diámetros de	71

---

microporo (---) y su comparación con el caso monodisperso (—).	
<b>Figura 4-1:</b> Región de promediado, longitudes y regiones (homogéneas y heterogéneas) características del sistema.	76
<b>Figura 4-2:</b> Zona representativa de la inter-región.	80
<b>Figura 4-3:</b> Campos de la componente $X$ de la variable de cerradura para a) $\xi/2h = 0.4$ , b) $\xi/2h = 0.0$ y c) $\xi/2h = -0.5$ .	83
<b>Figura 4-4:</b> Dependencia espacial de las componentes tangencial (—) y normal (----) del tensor de difusión efectiva como función de $\varepsilon_{\gamma\omega}$ .	84
<b>Figura 4-5:</b> Región de promediado para la inter-región y vectores unitarios asociados.	88
<b>Figura 4-6:</b> Influencia de la porosidad en los perfiles de concentración como función del tiempo. a) $\varepsilon_{\gamma\omega} = 0.2$ , b) $\varepsilon_{\gamma\omega} = 0.4$ , c) $\varepsilon_{\gamma\omega} = 0.6$ , d) $\varepsilon_{\gamma\omega} = 0.8$ . (—) <i>Modelo-I</i> , (•••••) <i>Modelo-I*</i> y (----) <i>Modelo-II</i> .	94
<b>Figura 4-7:</b> Influencia de la porosidad en el flux de masa en la superficie divisoria como función del tiempo. a) $\varepsilon_{\gamma\omega} = 0.2$ , b) $\varepsilon_{\gamma\omega} = 0.4$ , c) $\varepsilon_{\gamma\omega} = 0.6$ , d) $\varepsilon_{\gamma\omega} = 0.8$ . (—) <i>Modelo-I</i> , (•••••) <i>Modelo-I*</i> y (----) <i>Modelo-II</i> .	95
<b>Figura 5-1:</b> Flujo de un fluido sobre un medio poroso en un sistema tipo BJ.	100
<b>Figura 5-2:</b> Región de promediado en las regiones homogéneas y en la inter-región.	101
<b>Figura 5-3:</b> Región de promediado $V_\infty$ y vectores unitarios para la inter-región.	107
<b>Figura 5-4:</b> Distribución de esfuerzos globales con la posición.  denota $\int_{y=-r_0}^{y=0} \langle \mathbf{t}_\beta \rangle_\omega dy$ y  representa $\int_{y=-r_0}^{y=+r_0} \langle \mathbf{t}_\beta \rangle dy$ .	114
<b>Figura 5-5:</b> Distribución de esfuerzos de Brinkman con la posición.	116
<b>Figura 6-1:</b> Zona representativa de la inter-región.	121
<b>Figura 6-2:</b> Cambios espaciales de a) la porosidad y b) su derivada respecto a $y$ . En ambos casos se identifican las curvas correspondientes a los	132

---



<b>Figura A-2.3:</b> Diagrama de flujo de la subrutina <i>rut</i> .	A-2.8
<b>Figura A-2.4:</b> Diagrama de flujo de la subrutina <i>cuadrado</i> .	A-2.9
<b>Figura A-2.5:</b> Coeficiente efectivo contra el inverso del número de puntos para $A = 0.2$ , $\phi = 1$ y once cuadrados.	A-2.11
<b>Figura A-2.6:</b> Coeficiente efectivo vs. inverso del número de cuadrados para $A = 0.5$ y $\phi = 3$ .	A-2.12
<b>Figura A-3.1:</b> Celda unitaria para el problema en la inter-región.	A-3.3
<b>Figura A-3.2:</b> Celda unitaria simplificada para la inter-región.	A-3.6
<b>Figura A-3.3:</b> Celda unitaria para el problema en la inter-región.	A-3.8
<b>Figura A-3.4:</b> Celda unitaria simplificada para la inter-región.	A-3.11
<b>Figura A-4.1:</b> Campo de la variable de cerradura $s_\gamma$ para $A = 0.1$ , $\phi = 0.5$ obtenidos con los modelos del medio poroso, a) centrado en las caras (M1), b) centrado en el cuerpo horizontal (M2), c) centrado en el cuerpo vertical (M3). Comparación del coeficiente efectivo obtenido a partir de estos tres modelos para $A = 0.1$ .	A-4.1
<b>Figura A-4.2:</b> Campo de la variable de cerradura $s_\gamma$ para $A = 0.2$ , $\phi = 0.95$ obtenidos los modelos del medio poroso, a) centrado en las caras (M1), b) centrado en el cuerpo horizontal (M2), c) centrado en el cuerpo vertical (M3). Comparación del coeficiente efectivo obtenido a partir de estos tres modelos para $A = 0.2$ .	A-4.2
<b>Figura A-4.3:</b> Campo de la variable de cerradura $s_\gamma$ para $A = 0.3$ , $\phi = 1.5$ obtenidos con los modelos del medio poroso, a) centrado en las caras (M1), b) centrado en el cuerpo horizontal (M2), c) centrado en el cuerpo vertical (M3). Comparación del coeficiente efectivo obtenido a partir de estos tres modelos para $A = 0.3$ .	A-4.3
<b>Figura A-4.4:</b> Campo de la variable de cerradura $s_\gamma$ para $A = 0.4$ , $\phi = 2.25$ obtenidos los modelos del medio poroso, a) centrado en las caras (M1), b) centrado en el cuerpo horizontal (M2), c) centrado en el cuerpo vertical (M3). Comparación del coeficiente efectivo obtenido a partir de estos tres modelos para $A = 0.4$ .	A-4.4
<b>Figura A-4.5:</b> Campo de la variable de cerradura $s_\gamma$ para $A = 0.5$ , $\phi = 3.25$ obtenidos los modelos del medio poroso, a) centrado en las caras (M1), b) centrado en el cuerpo horizontal (M2), c) centrado en el	A-4.5

---

cuerpo vertical (M3). Comparación del coeficiente efectivo  
obtenido a partir de estos tres modelos para  $A = 0.5$ .

**Figura A-4.6:** Campo de la variable de cerradura  $s_y$  para  $A = 0.6, \phi = 4.75$  A-4.6

obtenidos los modelos del medio poroso, a) centrado en las caras (M1), b) centrado en el cuerpo horizontal (M2), c) centrado en el cuerpo vertical (M3). Comparación del coeficiente efectivo obtenido a partir de estos tres modelos para  $A = 0.6$ .

**Figura A-4.7:** Campo de la variable de cerradura  $s_y$  para  $A = 0.7, \phi = 7$  A-4.7

obtenidos con los modelos del medio poroso, a) centrado en las caras (M1), b) centrado en el cuerpo horizontal (M2), c) centrado en el cuerpo vertical (M3). Comparación del coeficiente efectivo obtenido a partir de estos tres modelos para  $A = 0.7$ .

**Figura A-4.8:** Campo de la variable de cerradura  $s_y$  para  $A = 0.8, \phi = 11.5$  A-4.8

obtenidos los modelos del medio poroso, a) centrado en las caras (M1), b) centrado en el cuerpo horizontal (M2), c) centrado en el cuerpo vertical (M3). Comparación del coeficiente efectivo obtenido a partir de estos tres modelos para  $A = 0.8$ .

**Figura A-4.9:** Campo de la variable de cerradura  $s_y$  para  $A = 0.9, \phi = 23$  A-4.9

obtenidos con los modelos del medio poroso, a) centrado en las caras (M1), b) centrado en el cuerpo horizontal (M2), c) centrado en el cuerpo vertical (M3). Comparación del coeficiente efectivo obtenido a partir de estos tres modelos para  $A = 0.9$ .

---

## Índice de tablas

<b>Tabla 4-1:</b> Comparación de los cambios espaciales de las componentes tangencial y normal del tensor de difusión efectiva para $\varepsilon_{\gamma w} = 0.2$ y 0.8.	85
<b>Tabla 4-2:</b> Dependencia de los coeficientes de las ecuaciones (4.34) y (4.35) con $\varepsilon_{\gamma w}$ .	86
<b>Tabla 6-1:</b> Datos de los materiales estudiados por Beavers y Joseph (BJ)	133
<b>Tabla 6-2:</b> Estimación del coeficiente de salto para los materiales usados por BJ	142
<b>Tabla A-2.1:</b> Dependencia del coeficiente efectivo con la tolerancia escogida	A-2.10
<b>Tabla A-2.2:</b> No. de cuadrados y % error absoluto respecto a la ordenada al origen.	A-2.12

---

## Nomenclatura

$A_{\eta\omega}$	área de la inter-región, $m^2$ .
$\mathbf{A}_\beta$	tensor de segundo orden que mapea $\mu_\beta \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$ en $\tilde{\mathbf{p}}_\beta$ .
$A_\infty$	área de la superficie de la región de promediado $V_\infty$ , $m^2$ .
$A_j$	área de la región- $j$ contenida en $A_\infty$ , $j = \omega, \eta$ , $m^2$ .
$A_{i,j}$	área entre las fases $i$ y $j$ , $i = \gamma$ o $\beta$ , $j = \kappa$ o $\sigma$ , $m^2$ .
$a_{vs} = a_v(0)$	área interfacial por unidad de volumen en la inter-región, $m^{-1}$ .
$a_{v\omega}$	área interfacial por unidad de volumen en la región homogénea- $\omega$ , $m^{-1}$ .
$B(z)$	esfuerzos de Brinkman, $m^{-2}$ .
$\mathbf{B}_\beta$	tensor de segundo orden que mapea $\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$ en $\tilde{\mathbf{v}}_\beta$ .
$\mathbf{B}_\omega$	tensor de segundo orden que mapea $\langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega^\beta$ en $\tilde{\mathbf{v}}_\omega$ .
$\mathbf{b}_\beta$	vector que mapea $\mu_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$ en $\tilde{\mathbf{p}}_\beta$ , $m^{-1}$ .
$\mathbf{b}_\omega$	vector que mapea $\mu_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega^\beta$ en $\tilde{\mathbf{p}}_{\beta,\omega}$ , $m^{-1}$ .
$\mathbf{C}_\beta$	tensor de tercer orden que mapea $\nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$ en $\tilde{\mathbf{v}}_\beta$ , $m$ .
$c_{Aj}$	concentración molar de la especie $A$ en la fase- $j$ , $j = \beta, \sigma$ , $\text{mol}/m^3$ .
$\langle c_{A\gamma} \rangle_j^\gamma, \langle c_{A\beta} \rangle_j^\beta$	promedio intrínseco de la especie $A$ en la región homogénea $j$ , $j = \eta, \omega$ ,  $\text{mol}/m^3$ .
$\langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma, \langle c_{A\beta} \rangle^\beta$	promedio intrínseco de la especie $A$ , $\text{mol}/m^3$ .
$\tilde{c}_{Aj}$	desviación espacial de la concentración de la especie $A$ en la fase- $j$ ,  $j = \beta, \sigma$ , $\text{mol}/m^3$ .

---

---

$\mathbf{D}(\mathbf{x})$	tensor de difusión dependiente de la posición, $\text{m}^2/\text{s}$ .
$\mathbf{D}(\mathbf{x}_\omega) = \mathbf{D}_\omega$	tensor de difusión en la región homogénea $-\omega$ , $\text{m}^2/\text{s}$ .
$\mathcal{D}_\gamma, \mathcal{D}_\beta$	difusión molecular, $\text{m}^2/\text{s}$ .
$\mathbf{g}$	vector de gravedad, $\text{m}/\text{s}^2$ .
$h$	mitad de la longitud vertical de la celda unitaria para la inter-región, m.
$\mathbf{I}$	tensor identidad.
$\mathbf{i}$	vector unitario tangente a la superficie del medio poroso.
$\mathbf{j}$	vector unitario normal a la superficie del medio poroso.
$\mathbf{K}^{-1}$	tensor mixto de esfuerzos, $\text{m}^{-2}$ .
$K^{-1}$	componente tangencial del tensor mixto de esfuerzos, $\text{m}^{-2}$ .
$K_{\text{eff}} = K_{\text{eff}}^{rx}$	coeficiente efectivo de velocidad de reacción para la inter-región, $\text{m} / \text{s}$ .
$K_{\text{eff}}^{ads}$	coeficiente efectivo de adsorción para la inter-región, m.
$K$	coeficiente local de velocidad de adsorción, m.
$k$	coeficiente local de velocidad de reacción, $\text{m} / \text{s}$ .
$k_r$	coeficiente local de pseudo-reacción, $\text{m} / \text{s}$ .
$\tilde{K}$	desviaciones espaciales de $K$ , $\text{m} / \text{s}$ .
$\tilde{k}$	desviaciones espaciales de $k$ , $\text{m} / \text{s}$ .
$\langle k \rangle_{\eta\omega}$	promedio en área de $k$ , $\text{m} / \text{s}$ .
$\mathbf{K}_\beta$	tensor de permeabilidad dependiente de la posición, $\text{m}^2$ .
$K_\beta^{-1}$	forma escalar del tensor de esfuerzos globales, $\text{m}^2$ .
$\mathbf{K}_{\beta\omega}$	tensor de permeabilidad de Darcy en la región $-\omega$ , $\text{m}^2$ .
$K_{\beta\omega}$	norma del tensor $\mathbf{K}_{\beta\omega}$ , $\text{m}^2$ .
$\ell_i$	vectores de la celda unitaria ( $i = 1, 2$ ), m.

---

---

$l_j$	longitud característica de la fase $-j$ ; $j = \beta, \gamma, \sigma, \kappa$ , m.
$l_\sigma$	diámetro de cada esfera que compone el medio poroso en los modelos de CK y LH, m.
$L$	longitud característica asociada con cantidades macroscópicas, m.
$\mathbf{n}_{ij}$	vector unitario normal dirigido de la fase $-i = \gamma$ o $\beta$ , hacia la fase $-j = \kappa$ o $\sigma$ .
$\mathbf{n}_{\eta\omega}$	vector unitario normal dirigido de la región $-\eta$ hacia la región $-\omega$ .
$p_\beta$	presión en la fase $-\beta$ , $\text{N/m}^2$ .
$\tilde{p}_\beta$	desviaciones espaciales de la presión en la fase $-\beta$ , $\text{N/m}^2$ .
$\tilde{p}_{\beta,j}$	desviaciones espaciales de la presión en la región $-j$ ; $j = \omega, \eta$ , $\text{N/m}^2$ .
$\langle p_\beta \rangle^\beta$	promedio intrínseco de la presión, $\text{N/m}^2$ .
$\langle p_\beta \rangle_j^\beta$	promedio intrínseco de la presión en la región $-j$ ; $j = \omega, \eta$ , $\text{N/m}^2$ .
$\langle p_\beta \rangle_j$	promedio superficial de la presión en la región $-j$ ; $j = \omega, \eta$ , $\text{N/m}^2$ .
$\mathbf{r}$	vector de posición, m.
$r_0$	radio del volumen de promediado, m.
$r_p$	radio de la partícula catalítica, m.
$s_\gamma$	variable de cerradura que mapea $\langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma$ en $\tilde{c}_{A\gamma}$ .
$s_\omega$	variable de cerradura que mapea $\langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma$ en $\tilde{c}_{A\omega}$ .
$\langle \mathbf{T} \rangle_s$	esfuerzo superficial, $\text{N/m}^2$ .
$\langle \mathbf{T}_\beta \rangle_s$	esfuerzo global, $\text{N/m}^2$ .
$t$	tiempo, s.

---

---

$t^*$	tiempo característico del proceso, s.
$V_\infty$	región de promediado para la inter-región.
$V$	región de promediado.
$\mathcal{V}_j$	volumen de la región- $j$ contenida en $V_\infty$ , $j = \omega, \eta$ , $\text{m}^3$ .
$V_j$	espacio de la fase- $j$ contenido en la región de promediado, $j = \beta, \gamma, \sigma, \kappa$ .
$\mathbf{v}_\beta$	vector de velocidad en la fase- $\beta$ , m/s.
$\tilde{\mathbf{v}}_\beta$	desviaciones espaciales de la velocidad en la fase- $\beta$ , m/s.
$\tilde{\mathbf{v}}_j$	desviaciones espaciales de la velocidad en la región- $j$ ; $j = \omega, \eta$ , m/s.
$\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$	promedio intrínseco del vector de velocidad, m/s.
$\langle \mathbf{v}_\beta \rangle_j^\beta$	promedio intrínseco del vector de velocidad en la región- $j$ ; $j = \omega, \eta$ , m/s.
$\langle \mathbf{v}_\beta \rangle_j$	promedio superficial del vector de velocidad en la región- $j$ ; $j = \omega, \eta$ , m/s.
$\langle v_\beta \rangle_j$	componente tangencial del promedio superficial del vector de velocidad en la región- $j$ ; $j = \omega, \eta$ , m/s.
$\mathbf{x}$	vector de posición que localiza el centroide del volumen de promediado, m.
$\mathbf{x}_0$	vector de posición que localiza la superficie del medio poroso, m.
$\mathbf{y}_j$	vector de posición relativo al centroide del volumen de promediado, $j = \beta, \sigma$ , m.

---

---

*Símbolos griegos*

$\alpha$	coeficiente ajustable en la condición de Beavers y Joseph (1967)
$\beta$	coeficiente de salto en la condición de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a)
$\varepsilon_j$	fracción volumétrica de la fase $-j$ dependiente de la posición, $j = \beta, \sigma$ .
$\varepsilon_{j\omega}$	fracción volumétrica de la fase $-j$ en la región $-\omega$ , $j = \beta, \sigma$ .
$\phi$	modulo de Thiele local.
$\gamma$	coeficiente ajustable que indica el modelo usado. $\gamma = \gamma_1, \gamma_2$
$\mu_\beta$	viscosidad de la fase $-\beta$ , $\text{Ns/m}^2$ .
$\psi_\gamma, \psi_\beta$	función arbitraria asociada con la fase $-\beta$ .
$\rho_\beta$	densidad de la fase $-\beta$ , $\text{kg/m}^3$ .

*Subíndices*

$A$	relativo a la especie $A$ .
$C$	relativo a la concentración.
$v$	relativo a la velocidad.
$\eta$	relativo a la región homogénea $-\eta$ .
$\omega$	relativo a la región homogénea $-\omega$ .

---

## Introducción

El estudio de los fenómenos de transporte en sistemas multifásicos, y en particular en medios porosos, ha sido un tema de interés en la comunidad científica desde el siglo XIX (una descripción detallada de la evolución de este tema hasta nuestros días se encuentra en la monografía de Kaviany, 1999). Sin embargo, la mayor parte de los estudios, teóricos y experimentales, se han centrado en el análisis en el seno del medio poroso; dejando en segundo plano el estudio de los fenómenos en la frontera entre medios de características promedio diferentes (por ejemplo un medio poroso y un fluido o dos medios porosos). Fue a partir del trabajo teórico-experimental de Beavers y Joseph (1967), que se despertó el interés en el estudio de los fenómenos de transporte en esta porción del sistema.

Por otro lado, en la actualidad, el desarrollo y aplicación de nuevos materiales a sistemas de transporte y reacción (Coppens, 1999), involucra condiciones bajo las cuales los fenómenos en la frontera adquieren especial importancia. Además, la transferencia de masa en la frontera entre sistemas multifásicos es crucial en el estudio de separaciones cromatográficas (DeVault, 1943; Reis y col., 1979; Raghavan y Ruthven, 1985; Dalvie y col., 1990; Goto y McCoy, 2000). Los resultados de este trabajo pueden además ayudar en el modelado de transporte (difusivo y/o convectivo) de solutos en acuíferos (Pickens y Grisak, 1981; Brusseau y col., 1991), o bien en sistemas de tres fases (como son las emulsiones dobles) así como en biopelículas, entre otros. A su vez, el estudio de fenómenos de transporte en sistemas a escalas meso- y microscópicas, como el flujo de fluidos en microcanales, involucran el uso de condiciones de salto de calor y cantidad de movimiento (Kakac y col., 2005; Karniadakis y Beskok, 2005) las cuales pueden derivarse a partir de la metodología aquí propuesta.

---

Actualmente, la metodología presentada por Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a) permite obtener en forma teórica las condiciones de frontera correspondientes; ya sea de transferencia de cantidad de movimiento, calor o masa. Estas condiciones, se encuentran expresadas en función de coeficientes ajustables, cuya dependencia con la microestructura de la frontera no ha sido reportada (condiciones no cerradas). Al respecto, Wood y col. (2000) propusieron una metodología para desarrollar condiciones de frontera en función de coeficientes efectivos, que pueden calcularse a partir de problemas de valor a la frontera locales (condiciones cerradas).

En este trabajo, se combina la metodología de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995) con la de Wood y col. (2000) para así obtener condiciones de frontera cerradas para el transporte de masa y cantidad de movimiento en la frontera medio poroso-fluido. Esta metodología permite obtener las ecuaciones que constituyen el modelo macroscópico completo de un sistema, es decir tanto las ecuaciones de medio efectivo como sus correspondientes condiciones de frontera cerradas.

El trabajo está organizado de la siguiente manera: en el Capítulo 1, se reporta una revisión bibliográfica de los trabajos que se encuentran directamente relacionados con los temas a desarrollar. En concreto, se comentan los trabajos dedicados a obtener condiciones de frontera empíricas y metodológicas. Además, se mencionan algunos de los trabajos recientes que se han dedicado a obtener estimaciones aproximadas del coeficiente ajustable en la condición de frontera de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a). En este capítulo se incluye, además, una revisión de algunos de los modelos reportados en la literatura para la estimación de la permeabilidad en medios porosos. Posteriormente, se presentan los objetivos generales y particulares del trabajo, donde se plantean los casos concretos a tratar. Estos, se orientan a tres situaciones: transferencia difusiva de masa, transferencia de cantidad de movimiento y transferencia convectiva de masa.

---

Con base en estos problemas, el resto del trabajo se presenta en las siguientes tres partes, las cuales se relacionan entre sí,

- Parte I (Capítulos 2, 3 y 4): En el Capítulo 2, se estudia el fenómeno de transferencia difusiva de masa con reacción de primer orden entre un medio microporoso y un fluido homogéneo. Siguiendo la metodología de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a), se obtiene una condición de frontera en términos de un coeficiente, cuya dependencia con la microestructura se determina en el Capítulo 3. Esto involucra el planteamiento y solución del problema de la variable de cerradura correspondiente, para lo cual se retoman varias etapas de la metodología de Wood y col. (2000). Los resultados muestran una fuerte dependencia del coeficiente efectivo de reacción con la porosidad y un módulo de Thiele local. Para concluir esta parte del trabajo, en el Capítulo 4 se presenta un método alternativo consistente en el desarrollo y uso de una ecuación de transferencia de masa generalizada cerrada para el transporte difusivo de masa entre un medio poroso y un fluido.
- Parte II (Capítulos 5 y 6): Con la metodología desarrollada en la Parte I, se procede a analizar el sistema estudiado por Beavers y Joseph (1967) para el fenómeno de transferencia de cantidad de movimiento. Esto lleva a revisar detalladamente el trabajo de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a). En el Capítulo 5, se propone que la causa de la discontinuidad del gradiente de velocidad se debe a la presencia de un tensor mixto de esfuerzos. Más adelante, en el Capítulo 6 se presenta el problema de cerradura que se debe resolver para calcular dicho término. Se propone además, una metodología alternativa para su estimación y se comparan los resultados con los de Goyeau y col. (2003).
- Parte III (Capítulo 7): Con los resultados obtenidos en las dos partes anteriores, se analiza, en el Capítulo 7, el fenómeno de transferencia convectiva de masa en la frontera medio poroso-fluido considerando además los fenómenos de adsorción y reacción. La forma en cómo estos fenómenos afectan el transporte del flux de masa en la frontera se debe determinar a partir de la solución del problema de cerradura que se plantea.

Por último, se presentan las conclusiones generales del trabajo, así como las referencias y apéndices que complementan al trabajo.

## Capítulo 1:

### Revisión Bibliográfica

Este capítulo está dedicado a la revisión de los antecedentes del presente trabajo. Para ello, primeramente se expone una breve revisión de los trabajos más relevantes relacionados con el desarrollo y análisis de condiciones de salto en sistemas multifásicos. En general, se clasifican las contribuciones en cuatro categorías: la primera concierne a la condición de salto empírica de Beavers y Joseph (1967) y los trabajos que de ella se derivaron; la segunda se refiere a la obtención de condiciones de salto mediante la aplicación de la metodología propuesta por Ochoa-Tapia y Whitaker (1995). Estos dos tipos de condiciones de frontera se clasificarán como no cerradas, dado que están en función de parámetros ajustables; la tercera categoría en que se dividen las contribuciones se refiere a aquellas dedicadas a predecir el coeficiente de salto obtenido mediante la metodología de Ochoa-Tapia y Whitaker, para así concluir con la revisión del trabajo de Wood y col. (2000) donde se desarrollan condiciones de salto cerradas, es decir, que no dependen de parámetros ajustables, las cuales involucran la solución de un problema de cerradura. El resto del capítulo está dedicado a la revisión de la cuarta categoría de trabajos, es decir, se revisarán algunas de las metodologías reportadas para la predicción de la permeabilidad de un medio poroso. Esta parte de la revisión es de gran importancia para el análisis del Capítulo 6. Los modelos se clasifican en dos clases, aquellos en los que se considera el flujo a través de conductos tortuosos y por otro lado, los que consideran el flujo alrededor de objetos sólidos inmersos en un fluido.

---

## 1.1.- Condición de salto empírica.

El estudio teórico de los fenómenos de transporte en sistemas multifásicos ha sido un tema de interés en el campo de la Ingeniería Química desde hace más de medio siglo. Sin embargo, como se mencionó en la Introducción, una buena parte de los trabajos se han dedicado al estudio en las regiones homogéneas de dichos sistemas, dejando en segundo plano el análisis en la inter-región.

En 1967, Beavers y Joseph (BJ, de aquí en adelante) realizaron experimentos para estudiar los efectos interfaciales que ocurren al hacer pasar un fluido sobre un medio poroso, saturado con el mismo fluido, mediante una caída de presión determinada. Consideraron dos tipos de materiales, uno granular (aloxita) y otro con una distribución uniforme de poros (espuma de metal). Además, propusieron que la velocidad en la frontera nominal (superficie geométrica suave donde se encuentran los perímetros externos de los poros superficiales) no necesariamente debía ser continua; por lo que propusieron la siguiente condición *ad hoc* para esta frontera

$$\left. \frac{dv_{\beta}}{dy} \right|_{y=0_{+}} = \frac{\alpha}{\sqrt{K_{\beta\omega}}} \left( v_{\beta} \Big|_{y=0_{+}} - v_{\omega} \right), \quad (1.1)$$

donde  $\alpha$  es un parámetro adimensional que se fijó de tal forma que se logren reproducir los resultados experimentales. Propusieron que este parámetro depende de la estructura del material en la vecindad con el fluido más no de la viscosidad del fluido; los valores reportados se encuentran entre 0.1 y 4. Cabe mencionar que en su modelo escogieron a la ley de Darcy y a la ecuación de Poiseuille como las ecuaciones gobernantes del transporte de cantidad de movimiento en el medio poroso y en el fluido, respectivamente. Propusieron además, que el espesor de la capa límite es del orden de la raíz cuadrada de la permeabilidad del medio poroso,  $K_{\beta\omega}$ . Relacionado con esto último, recientemente Goharzadeh y col. (2005) usando velocimetría de imágenes de partículas

---

determinaron experimentalmente que el espesor es más bien del orden del diámetro de grano.

El trabajo de BJ despertó el interés de un número considerable de investigadores que han tratado de dar una justificación teórica a la condición de frontera anteriormente mencionada. Entre los primeros tratamientos teóricos se encuentra el trabajo en dos partes de Taylor (1971) y Richardson (1971) quienes cuestionaron la afirmación de BJ de que el parámetro  $\alpha$  depende de las propiedades del medio poroso y no de la separación entre el medio poroso y el fluido. Para ello, propusieron un modelo matemático y realizaron experimentos sobre un medio poroso simplificado, a manera de rectángulos paralelos, con una caída de presión despreciable. De esta forma, fueron capaces de predecir el valor de  $\alpha$ , el cual se estimó entre 1.308 y 7 dependiendo de la relación de anchura entre el medio poroso y el fluido. Reportan además que  $\alpha$  disminuye al aumentar la altura de la cavidad hasta alcanzar asintóticamente un valor constante.

Más tarde, Saffman (1971) utilizó un análisis de capa límite para encontrar una expresión del parámetro  $\alpha$ ; en su trabajo lo considera como una constante de integración de una solución asintótica. Sin embargo, no considera la estructura del medio poroso, además no reporta datos que comparen su metodología con los resultados experimentales de BJ. Es de rescatarse, el haber considerado en su análisis que la permeabilidad debe depender de la posición en la región heterogénea y que no debe estar sujeta a restricciones de escala. Esta idea será retomada más adelante.

Por otro lado Jones (1973) sugirió agregar un término extra a la condición de BJ con el fin de tomar en cuenta efectos bidimensionales, obteniendo una expresión similar a un balance de esfuerzos en la frontera,

$$\left. \frac{dv_\beta}{dy} \right|_{y=0_+} + \left. \frac{dv_\beta}{dx} \right|_y = \frac{\alpha}{\sqrt{K_{\beta\omega}}} \left( v_\beta \Big|_{y=0_+} - v_\omega \right). \quad (1.2)$$

---

Por otro lado, Neale y Nader (1974) utilizando la ecuación de Darcy-Brinkman en lugar de la ley de Darcy para describir el flujo en el medio poroso, obtuvieron resultados análogos a los de BJ. La razón para este cambio recae en el argumento que la ley de Darcy es incompatible con la existencia de una capa límite en el medio poroso dado que no contiene el término de esfuerzos viscosos involucrado en la ecuación de Darcy-Brinkman. De esta forma, se concibe al coeficiente  $\alpha$  como un factor de corrección que debe incluirse al extrapolar la ley de Darcy a la frontera. Bajo esta línea de pensamiento, Neale y Nader impusieron condiciones de continuidad de la velocidad y su derivada en la frontera medio poroso-fluido. Al resolver la ecuación de Brinkman y comparar los resultados de la velocidad de flujo de masa propusieron que  $\alpha = \sqrt{\mu_{eff} / \mu_\beta}$ , donde  $\mu_{eff}$  es la viscosidad efectiva del modelo de Brinkman y  $\mu_\beta$  es la viscosidad del fluido. De hecho, de acuerdo a Whitaker (1999) la viscosidad efectiva está dada explícitamente por  $\mu_{eff} = \mu_\beta / \varepsilon_\beta$ , siendo  $\varepsilon_\beta$  la porosidad del medio poroso. Algunos autores (Kolodziej, 1988; Givler y Altobelli, 1994; Martys y col., 1994; Starov y Zhdanov, 2001) han propuesto ajustado  $\mu_{eff}$  para reproducir datos experimentales. De acuerdo a Givler y Altobelli (1994), la razón  $\mu_{eff} / \mu_\beta$  puede variar entre 5.1 y 10.9 dependiendo de  $\varepsilon_\beta$ . El uso de este tipo de modelo se recomienda para flujo, de bajo número de Reynolds, en medios porosos con valores elevados de porosidad (Goyeau y col., 2003).

Sobre lo anterior, Haber y Mauri (1983) usando ideas muy similares a las de Saffman (1971) demuestran la diferencia que existe entre usar la ecuación de Brinkman y la ley de Darcy en la frontera, sobretodo para el caso en que la permeabilidad del medio poroso es baja. Muestran que fuera de la capa límite la corrección de Brinkman se vuelve despreciable, recuperándose así la ley de Darcy. Entre sus conclusiones recalcan la necesidad de condiciones de frontera particulares, para cuya deducción se necesita

---

“algo más que la intuición física”, que permitan que los resultados obtenidos con la ley de Darcy sean análogos a los obtenidos con la ecuación de Brinkman.

A partir del trabajo de Whitaker (1969) sobre la deducción de la ley de Darcy; Ross (1983) aplicó la metodología del promedio volumétrico (Anderson y Jackson, 1967; Marle, 1967; Slattery, 1967; Whitaker, 1967, Bear, 1972) a la frontera medio poroso-fluido, obteniendo una ecuación general que es válida tanto en la inter-región como en las regiones homogéneas. Para el caso de un medio isótropo, obtiene una expresión del parámetro  $\alpha$ , dejándolo en función de un operador lineal con el que se lleva a cabo el mapeo de las propiedades locales a las promedio.

El trabajo de Ross (1983) es el primero donde se emplea la metodología del promedio volumétrico para estimar coeficientes en una condición de salto. La idea de desarrollar una ecuación que sea válida en todo el dominio fue usada posteriormente por otros autores y en este trabajo.

Por otro lado, Prat (1989, 1990, 1992) propuso una metodología para la determinación de las variables macroscópicas en las fronteras de un medio poroso para el proceso de transferencia de calor, usando condiciones estándar de tipo Neumann y Dirichlet. A grandes rasgos, el procedimiento seguido por Prat es el siguiente: primeramente se distingue entre la temperatura obtenida con el modelo de una sola ecuación, (físicamente, ésta se puede interpretar como la temperatura medida) y la que se obtiene de resolver la ecuación macroscópica de dicho modelo (esta temperatura tiene la propiedad de estar definida en todo el dominio incluida la frontera). Posteriormente, se expresan, a manera de problema de cerradura (Crapiste y col., 1986), las variables microscópicas en función de la temperatura que se obtiene de resolver el problema macroscópico. Una vez calculado el campo microscópico, se elige una celda representativa con la cual hace el promediado y de esta manera obtiene los valores en la frontera. Para probar la pertinencia del método, se calculan las desviaciones entre las

---

dos temperaturas macroscópicas, notando que en la frontera se obtienen las mayores desviaciones. En otras palabras, los resultados difieren al resolver la ecuación que es válida en todo el dominio de los que se obtienen al promediar el campo microscópico. El modelo de celda unitaria y otras de las ideas expresadas en sus trabajos serán retomadas en este trabajo.

Sobre la determinación del coeficiente de la condición de salto de BJ, Sahraoui y Kaviany (1992) simularon un medio poroso a partir de cilindros y resolvieron las ecuaciones de Navier-Stokes (incluso en el medio poroso) para estimar el efecto que tiene el flujo paralelo y perpendicular sobre el coeficiente  $\alpha$ . Observaron que, al cambiar la estructura del medio poroso (por medio de distintos arreglos de cilindros) los valores de  $\alpha$  cambiaron apreciablemente. De esta forma, estos autores afirman que  $\alpha = \alpha(\varepsilon, Re, h, y_i, \text{dirección del flujo, estructura de la superficie})$ , donde  $\varepsilon$  es la porosidad,  $Re$  es el número de Reynolds basado en la velocidad de Darcy,  $h$  es el tamaño del canal y  $y_i$  es la distancia respecto a la interfase donde se aplica la condición de frontera. A este trabajo le siguieron otros similares para la transferencia conductiva (Sahraoui y Kaviany, 1993) y convectiva (Sahraoui y Kaviany, 1994) de calor en la frontera medio poroso-fluido.

## **1.2.- Condición de salto metodológica.**

Motivado por el trabajo previo de Stone (1990), Whitaker (1992) desarrolló de manera simple (usando análisis vectorial) la condición de salto de masa entre medios homogéneos (Slattery y col., 2007). Su metodología incluyó el escribir condiciones de salto puntuales e integradas. De esta manera, pudo desarrollar la condición de salto a un nivel de escala puntual usando una metodología que puede extenderse para desarrollar condiciones de salto a otros niveles de escala. Entre las aplicaciones que tiene la

---

metodología presentada en este trabajo, se encuentra la posibilidad de utilizarla para desarrollar condiciones de salto cuando las ecuaciones promedio sean idénticas a las ecuaciones puntuales en las dos fases. Una discusión detallada de los fenómenos de transporte interfaciales se encuentra en la monografía de Slattery y col. (2007).

Posteriormente, Ochoa-Tapia y col. (1993), utilizando análisis vectorial, dedujeron el teorema del promediado superficial para un escalar y un vector para el proceso de difusión en un sistema de  $M$  fases. Para predecir el coeficiente efectivo plantearon y resolvieron, en forma analítica aproximada el problema de cerradura correspondiente usando la celda unitaria de Chang (1982, 1983).

Con estos antecedentes [Whitaker (1992) y Ochoa-Tapia y col. (1993)], Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a) desarrollaron una metodología para obtener la condición de salto de transferencia de momento para un sistema análogo al de BJ. A continuación se describirán los pasos clave de dicha metodología,

- Obtener, usando el método del promedio volumétrico, ecuaciones de medio efectivo sin introducir restricciones adicionales a las implícitas al adoptar las ecuaciones puntuales y que sean por tanto válidas en todo el sistema. Posteriormente, al imponer las restricciones de escala correspondientes a estas ecuaciones, se recuperan las ecuaciones válidas en las regiones homogéneas.
- Integrar las ecuaciones obtenidas en una región de promediado de volumen  $\mathcal{V}_\infty$ , que incluya porciones de ambas regiones y su frontera. Posteriormente, se restan las ecuaciones válidas en las partes homogéneas de la que es válida en todo el dominio.
- La estructura de la ecuación resultante sugiere definir propiedades de exceso (Gibbs, 1928) y representarlas en términos de propiedades medibles en las regiones homogéneas multiplicadas por un parámetro ajustable.

- 
- De ser posible, agrupar todos los parámetros ajustables en uno solo (en este caso  $\beta$ ) el cual debe determinarse experimentalmente.

Se estimó que dicho parámetro tiene orden de magnitud de la unidad. De esta forma, fijando este parámetro ( $\beta \in [-1, 1.47]$ ) fueron capaces de ajustar satisfactoriamente los datos experimentales obtenidos por BJ en su trabajo (Ochoa-Tapia y Whitaker, 1995b). Además, resolvieron un modelo con porosidad variable en la región que separa la superficie del medio poroso de la región homogénea porosa y suponiendo continuidad de la velocidad y del flux\*. Notaron que, en este caso, la comparación con datos experimentales deja mucho que desear a pesar de ser un modelo más complicado que el que utiliza la condición de salto. Para estimar los cambios de la porosidad con la posición se propusieron cinco funciones obteniendo, en general, los mismos resultados (ver Figura 11 en Ochoa-Tapia, 1994).

Por otro lado, Pérez-Córdova y Ochoa-Tapia (1995) realizaron estudios sobre el comportamiento de propiedades geométricas, como el área interfacial y la porosidad, en la frontera medio poroso-fluido. Encontraron que los cambios de dichas propiedades son relativamente suaves por lo que pudieron representarlos por medio de polinomios simples. Al lector interesado en los detalles de este estudio se le recomienda revisar el trabajo de Pérez-Córdova (1995). Los resultados de esta investigación son de gran utilidad en varias partes del trabajo.

Una versión del trabajo de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a) que incluye los efectos inerciales en la condición de salto fue presentada más tarde por los mismos autores (1998). En este caso, aparecen en la condición de salto dos coeficientes, el primero asociado con el exceso de los esfuerzos viscosos y el segundo con el exceso de esfuerzos inerciales.

---

\* A lo largo del texto se usará la palabra *flux* para denotar *densidad de flujo* de alguna propiedad.

---

Esta metodología fue aplicada más tarde para obtener la condición de salto de transferencia de masa en sistemas de emulsiones dobles sin (Ochoa-Tapia y Soria, 1995) y con reacción química (Soria y col., 1996). Los resultados obtenidos fueron similares a los del caso de transferencia de momento; es decir, se desarrollaron condiciones de salto para el flux de masa en términos de un parámetro indeterminado.

Como ejemplos de la aplicación de la condición de salto de momento desarrollada por Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a), se encuentran los trabajos de Kuznetsov (1996, 1997) quién la acopló con la ecuación de Brinkman y posteriormente de Forchheimer para el medio poroso y la ecuación de Stokes para el fluido. Notó que los perfiles de velocidad disminuyen cuando se incrementa el valor del parámetro ajustable  $\beta$  sobretodo cuando éste tiene valores negativos.

Otra aplicación de la condición de salto de cantidad de movimiento, la llevó a cabo Srivastava (1999), para el flujo en medios porosos inducido por un disco que gira cerca de la inter-región medio poroso-fluido. Notó que, debido a las oscilaciones se extrae fluido del medio poroso a lo largo de una capa límite, cuyo espesor depende de las propiedades del medio poroso y no del parámetro  $\beta$ . Por otro lado, recientemente Bhattacharyya y Sekhar (2005) y Partha y col. (2005) mostraron que el torque y el esfuerzo cortante en el flujo entre esferas no sólo se ven afectados por cambios en la permeabilidad sino que también el coeficiente de salto ejerce una influencia importante.

Un trabajo similar al de transferencia de momento (1995a) fue presentado posteriormente por Ochoa-Tapia y Whitaker (1997, 1998) para el proceso de transferencia de calor entre un medio poroso y un fluido homogéneo. En su análisis, consideraron el transporte convectivo de energía sólo en la fase fluida. En este caso, el exceso de intercambio de calor superficial fue expresado mediante un coeficiente de transferencia de calor que multiplica a una diferencia de temperaturas. Además,

---

presentaron la forma de la condición de salto bajo las suposiciones de equilibrio local del gradiente de temperatura y equilibrio local térmico.

Más adelante, Hager y Whitaker (2000), desarrollaron las condiciones de salto de masa y energía entre un medio poroso y dos fluidos. Debido a que la suposición de equilibrio local térmico falla en las fronteras entre estas tres fases, un frente de evaporación tuvo que ser considerado mediante un coeficiente, el cual es indeterminado.

Una comparación de los modelos existentes de condiciones de frontera de calor y momento entre un medio poroso y un fluido fue presentada por Alazmi y Vafai (2001). Para la transferencia de cantidad de movimiento, compararon los resultados que se obtienen al imponer en la frontera: 1) continuidad de la velocidad y su gradiente, 2) continuidad de las propiedades distinguiendo entre la viscosidad efectiva y molecular, 3) la condición de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a), 4) la condición de Ochoa-Tapia y Whitaker (1998) que considera los efectos inerciales y 5) la condición de BJ. Encontraron que los modelos 1 y 2 dan resultados similares a los del modelo 5 para valores altos de la porosidad, mientras que para valores bajos, el modelo 2 se aproxima a los modelos 3 y 4. Por lo que propusieron que los modelos 1 y 5 son muy parecidos, al igual que los modelos 3 y 4, mientras que el modelo 2 cae entre estos dos pares de modelos. En cuanto a la condición de salto de transferencia de calor, prácticamente todos los modelos utilizadas ofrecieron los mismos resultados.

La aplicación de la metodología desarrollada por Ochoa-Tapia y Whitaker (1995) al proceso de transferencia de masa fue llevada a cabo recientemente por Valencia-López y col. (2003) considerando los efectos de adsorción entre un medio poroso y un fluido. Al igual que en los casos anteriores, la condición está expresada en función de un parámetro ajustable, el cual debe ser determinado a partir de datos experimentales.

---

### 1.3.- Predicción del coeficiente de salto.

Dadas las bases físicas que sustentan la metodología de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a), algunos autores se han dado a la tarea de predecir el coeficiente ajustable ya sea por técnicas analíticas o numéricas. Entre ellos, cabe mencionar a Goyeau y col. (2003) quienes desarrollaron una metodología para obtener una expresión semi-analítica aproximada del parámetro  $\beta$ . Su método consiste en plantear el problema en uno y dos dominios, en el primero se utiliza una sola ecuación para describir el transporte en los dos medios y en el segundo se usan las ecuaciones de Brinkman y de Stokes, junto con la condición de salto para describir el proceso y de la comparación de ambas se obtiene la información suficiente para obtener una expresión analítica del parámetro ajustable.

Sin embargo, a pesar de que sus resultados son muy similares a los que se habían propuesto *ad hoc* para ajustar los datos experimentales, admiten que su trabajo es un paso intermedio hacia la estimación de dicho parámetro; ya que para ello es necesario plantear y resolver el problema de cerradura correspondiente. Los resultados de esta metodología se utilizan más adelante en el trabajo (Capítulo 6). Esta metodología fue aplicada recientemente por Goyeau y Ochoa-Tapia (2004) para estimar el parámetro ajustable de la condición de salto de masa propuesta por Valencia-López y col. (2003).

Recientemente Deng y Martínez (2005) presentaron una metodología aproximada para estimar el parámetro ajustable  $\beta$  de la condición de salto. Para ello, realizan un ajuste de curvas de las soluciones del problema en uno y dos dominios, sólo que para esto último utilizan el método de similaridad. Esto imposibilita el uso de ecuaciones como la de Forchheimer para el medio poroso, además reconocen que su metodología no es capaz de reproducir casos límite como  $Da \rightarrow 0$ .

Por otro lado, Min y Kim (2005) estudiaron los problemas de transferencia de momento y calor en la frontera medio poroso-fluido. En su metodología se resuelve analíticamente el problema local de transferencia momento y de calor en la región fluida

---

(considerando dos direcciones) con lo cual se determina la resta de los fluxes en la frontera. Posteriormente, a partir de la comparación con las condiciones de salto propuestas por Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a, 1998) se obtienen expresiones analíticas de los parámetros ajustables de la inter-región. Desafortunadamente, su metodología no considera los efectos de la geometría del medio poroso, por ejemplo, se obtendrían los mismos resultados si se usan rectángulos o cuadrados para modelar el medio poroso. Además, para las condiciones del experimento de BJ (1967), su metodología predice valores negativos y cercanos a cero del coeficiente de salto para porosidades mayores a 0.4 y sólo adquiere valores menores de  $-0.1$  si la porosidad es menor de 0.2. Estos resultados no concuerdan con los reportados por Ochoa-Tapia y Whitaker (1995b) donde los valores de dicho parámetro están entre  $-1$  y  $1.47$  para los datos de BJ donde las porosidades están entre 0.52 y 0.78.

Estas últimas referencias, junto con el hecho de que la condición de frontera desarrollada por Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a) ha sido empleada en más de 90 trabajos de investigación en diversos campos, son una muestra de que el tema de las condiciones de salto entre regiones heterogéneas es de interés en la literatura. A partir de lo anterior, son claros tanto el interés como la necesidad de contar con una metodología que permita estimar los coeficientes involucrados en la condición de salto de una manera rigurosa. Esto puede lograrse mediante el planteamiento y solución de problemas de cerradura, de manera similar a cómo lo describen Wood y col. (2000) y como lo enfatizan Goyeau y col. (2003) en su trabajo. En la siguiente sección, se comentan algunos detalles del trabajo de Wood y col. (2000), el cual permite desarrollar condiciones de salto en términos de coeficientes de transporte efectivos.

---

## **1.4.- Condiciones de salto cerradas.**

Una de las contribuciones más importantes para el presente trabajo es la de Wood y col. (2000); quienes desarrollaron una metodología para obtener condiciones de salto en la frontera superficie catalítica-fluido a partir de la introducción de un coeficiente efectivo. La dependencia de dicho coeficiente con las propiedades locales se determinó mediante la solución de un problema de cerradura de manera similar a los casos previamente estudiados en regiones homogéneas (Whitaker, 1999).

A continuación, se describen brevemente los principales pasos de esta metodología:

- Promediar la ecuación puntual que es válida en todo el dominio y con ella obtener las ecuaciones válidas en cada región.
- A partir de las ecuaciones obtenidas en el punto anterior, desarrollar la correspondiente condición de salto.
- Plantear el problema de cerradura restando las ecuaciones de transporte puntuales y promedio y las condiciones de salto. En este paso se usan la descomposición espacial de Gray (1975) para la propiedad a estudiar (concentración, velocidad, temperatura) y para el coeficiente que presente cambios espaciales.
- Resolver el problema de cerradura de manera análoga a la usada en la literatura relacionada con el promedio volumétrico (por ejemplo, Whitaker, 1999) y como consecuencia, definir el coeficiente efectivo para la inter-región que incluya la solución de dicho problema.
- Para obtener la forma cerrada de la condición de salto, sustituir la definición del coeficiente en la misma.

Este tipo de condición de frontera se clasificará como cerrada ya que no depende de parámetros ajustables. Esta metodología puede extenderse a sistemas más complicados;

---

por ejemplo, considerando una reacción química con cinética no lineal (Bletzacker y col., 2003), o bien entre un medio poroso y un fluido como se hará en este trabajo.

Por otro lado, Lichter y col. (2003) usando análisis estocástico determinaron la dependencia del coeficiente efectivo de velocidad de reacción, definido por Wood y col. (2000), con el tiempo en un reactor batch. Encontraron que los valores del coeficiente disminuyen conforme aumenta el tiempo hasta llegar a cero cuando el sistema se encuentra en equilibrio. En su análisis utilizaron cinéticas de primer y segundo orden.

Hasta este punto se llevará la revisión de trabajos relacionados con condiciones de salto, a continuación se expondrán algunas metodologías para la predicción de la permeabilidad de un medio poroso. Las cuales, como se había mencionado antes, servirán para proponer aproximaciones del coeficiente de salto en la condición de transferencia de cantidad de movimiento.

### 1.5.- Estimación de la permeabilidad en medios porosos homogéneos.

De acuerdo a la ley de Darcy, la velocidad en una región homogénea  $\omega$  está determinada por

$$\mu_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega = -\mathbf{K}_{\beta\omega} \cdot \nabla \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta, \quad (1.3)$$

Para el caso de flujo unidimensional en un medio poroso isótropo, se tiene que

$$\mu_\beta \langle v_\beta \rangle_\omega = -K_{\beta\omega} \frac{d \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta}{dx}, \quad (1.4)$$

donde la permeabilidad  $(K_{\beta\omega})$  es la medida de la conductividad de un medio poroso al flujo de fluidos. Sin embargo, dada la complejidad para modelar los fenómenos de transporte dentro de un medio poroso a escala puntual, se han reportado varias relaciones entre permeabilidad y la porosidad del medio. Los modelos existentes se clasifican en dos tipos, los *modelos capilares* donde el flujo a través de la matriz porosa es visto como el flujo a través de conductos tortuosos y los *modelos de arrastre* donde

se considera el flujo alrededor de objetos sólidos inmersos en un fluido. Para porosidades bajas e intermedias, los modelos capilares son más apropiados, mientras que para altas porosidades la mejor opción se considera que son los modelos de arrastre (Dullien, 1979). A continuación, se describirán algunas de las características de los modelos mencionados.

### 1.6.-Modelos capilares.

Estos modelos involucran la aplicación de la ecuación de Navier-Stokes al flujo en conductos de diámetro pequeño, se supone estado estacionario y flujo completamente desarrollado. De esta forma, suponiendo que el medio poroso está constituido por  $n$  tubos de diámetro  $\ell_\sigma$  y porosidad  $\varepsilon_{\beta\omega} = n\pi\ell_\sigma^2/4$ , se obtiene la velocidad promedio de acuerdo a la ecuación de Hagen-Poiseuille, como sigue

$$\langle v_\beta \rangle_{\omega,p} = -\frac{\ell_\sigma^2}{32\mu_\beta} \frac{d\langle p_\beta \rangle_\omega^\beta}{dx}. \quad (1.5)$$

A partir de esta ecuación se calcula la velocidad de Darcy como,

$$\langle v_\beta \rangle_\omega = \varepsilon_{\beta\omega} \langle v_\beta \rangle_{\omega,p} = -\frac{n\pi\ell_\sigma^4}{128\mu_\beta} \frac{d\langle p_\beta \rangle_\omega^\beta}{dx}. \quad (1.6)$$

Al comparar la ecuación anterior con la (1.4) se obtiene la siguiente definición de la permeabilidad (Scheidegger, 1974),

$$K_{\beta\omega} = \frac{n\pi\ell_\sigma^4}{128} = \frac{\varepsilon_{\beta\omega}\ell_\sigma^2}{32}. \quad (1.7)$$

Se han propuesto modificaciones a este modelo (Dullien, 1979), una de ellas es el considerar una distribución de tamaños de  $\ell_\sigma$  y usar el diámetro promedio de tubo. Es bajo esta idea que se utilizará la ecuación (1.7).

---

## 1.7.-Modelo basado en el radio hidráulico.

Este modelo corresponde a la teoría de Carman-Kozeny, y las ideas fundamentales son similares a las empleadas en el modelo de tubos capilares. El diámetro hidráulico ( $\ell_\beta$ ) (Carman, 1937) se define como la razón de cuatro veces el volumen vacío entre el área superficial, o bien

$$\ell_\beta = \frac{4\varepsilon_{\beta\omega}}{a_{v,\omega}}. \quad (1.8)$$

En este caso,

$$a_{v,\omega} = \frac{4}{d_c}(1 - \varepsilon_{\beta\omega}), \quad (1.9)$$

en la cual  $d_c$  es el diámetro promedio del cilindro.

La velocidad promedio dentro de los poros se modifica usando la tortuosidad ( $\tau$ ) y un factor de forma  $k_0$ ,

$$\langle v_\beta \rangle_{\omega,p} = -\frac{\ell_\beta^2}{16\tau k_0 \mu_\beta} \frac{d \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta}{dx}, \quad (1.10)$$

donde  $k_0 = 2$  para un capilar circular y de 2 a 2.5 para formas rectangulares y elípticas (Happel y Brenner, 1991). Además, se modifica la definición de la velocidad de Darcy como sigue,

$$\langle v_\beta \rangle_\omega = \frac{\varepsilon_{\beta\omega}}{\tau} \langle v_\beta \rangle_{\omega,p}. \quad (1.11)$$

De manera que la permeabilidad es ahora,

$$K_{\beta\omega} = \frac{\varepsilon_{\beta\omega} \ell_\beta^2}{16k_K} = \frac{\varepsilon_{\beta\omega}^3}{k_K a_{v,\omega}^2}, \quad (1.12)$$

donde  $k_K = \tau^2 k_0$  es la constante de Kozeny. Con el fin de extender los resultados a una geometría esférica se define un diámetro medio de partícula como,

$$\ell_{\sigma} = \frac{6(1 - \varepsilon_{\beta\omega})}{a_{v,\omega}}. \quad (1.13)$$

De manera que para el caso de cilindros  $\ell_{\sigma} = \frac{3}{2}d_c$  y para esferas  $\ell_{\sigma} = d_s$ , donde  $d_s$  es el diámetro de las esferas uniformes. Para estas condiciones, la ecuación (1.12) es modificada a,

$$K_{\beta\omega} = \frac{\varepsilon_{\beta\omega}^3 \ell_{\sigma}^2}{180(1 - \varepsilon_{\beta\omega})^2}. \quad (1.14)$$

En la ecuación anterior (la cual se conoce como la ecuación de Carman-Kozeny) se utilizó un valor aproximado de la tortuosidad de  $\sqrt{2}$  y se tomó  $k_0 = 2.5$ , de manera que la constante de Kozeny adquiere un valor de 5.

Para un lecho empacado con partículas esféricas con una baja distribución de tamaños, Rumpf y Gupte (1971) muestran que la permeabilidad se puede calcular por medio de,

$$K_{\beta\omega} = \frac{\varepsilon_{\beta\omega}^{5.5} \ell_{\sigma}^2}{5.6}, \quad (1.15)$$

la cual ofrece un buen ajuste con resultados experimentales para valores de porosidad entre 0.35 y 0.67.

### 1.8.-Modelos de arrastre para estructuras periódicas.

Las ideas detrás de estos modelos son muy parecidas a las empleadas en la solución del problema de cerradura (Eidsath y col., 1983; Barrère y col. 1992), es decir, se resuelven en una celda unitaria periódica las ecuaciones de Navier-Stokes para obtener de esta forma la velocidad promedio y con ella calcular la permeabilidad. En su texto, Whitaker (Cap. 4, 1999) muestra como, al hacer un cambio de variables en el planteamiento del problema de cerradura, a partir de la solución de un problema análogo al de Stokes (ver ecuaciones (4.2-42) a (4.2-44) en Whitaker, 1999) se puede calcular el tensor de permeabilidad usado en la ley de Darcy.

En su monografía, Happel y Brenner (1991) desarrollan con detalle este tipo de modelos. El más sencillo es aquel en el que el medio poroso se modela como un conjunto periódico de cilindros impermeables del mismo diámetro ( $\ell_\sigma$ ), la celda unitaria y el modelo de medio poroso se muestran en la Figura 1-1.

En este modelo se hace la suposición que la superficie de diámetro  $\ell_\sigma + \delta$  está libre de esfuerzos (superficie libre), a su vez, el modelo requiere suponer flujo paralelo o perpendicular a los cilindros. Note que  $\delta$  puede considerarse como el diámetro de poro. Al resolver la ecuación de Navier-Stokes e imponiendo la condición de no deslizamiento en la superficie del sólido y de flux nulo en la superficie libre, se obtiene el perfil de velocidad, con el que se puede obtener la velocidad de Darcy, de manera que la permeabilidad es (Happel y Brenner, 1991),

$$K_{\beta\omega} = \frac{\varepsilon_{\beta\omega}^3 \ell_\sigma^2}{16k_k (1 - \varepsilon_{\beta\omega})^2}, \quad (1.16)$$

en este caso la constante de Kozeny y la porosidad están dadas por,

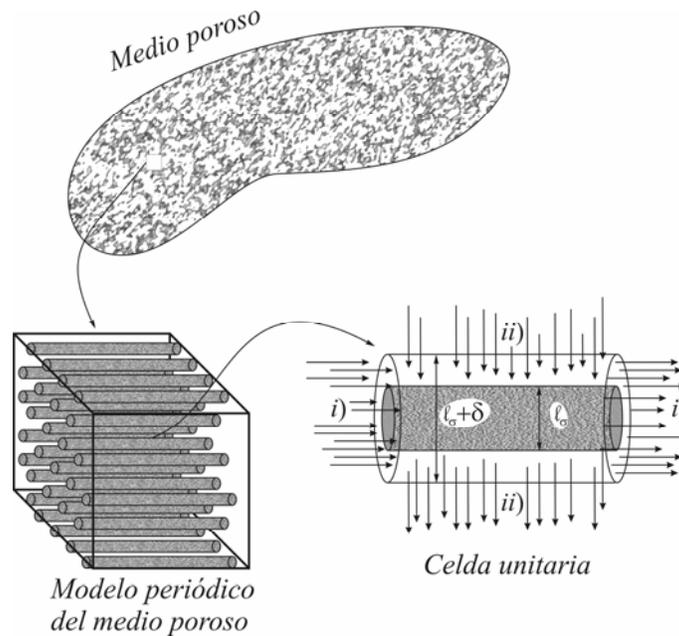
$$k_k = \frac{2\varepsilon_{\beta\omega}^3}{(1 - \varepsilon_{\beta\omega}) \left[ 2 \ln \left( \frac{1}{1 - \varepsilon_{\beta\omega}} \right) - 3 + 4(1 - \varepsilon_{\beta\omega}) - (1 - \varepsilon_{\beta\omega})^2 \right]}, \quad (1.17)$$

$$\varepsilon_{\beta\omega} = \frac{\delta^2 + 2\ell_\sigma \delta}{(\ell_\sigma + \delta)^2}. \quad (1.18)$$

Mientras que en el caso de flujo perpendicular la permeabilidad es

$$K_{\beta\omega} = \frac{(\ell_\sigma + \delta)^2}{16} \left[ \ln \left( \frac{\ell_\sigma + \delta}{\ell_\sigma} \right) - \frac{1}{2} \frac{(\ell_\sigma + \delta)^4 - \ell_\sigma^4}{(\ell_\sigma + \delta)^4 + \ell_\sigma^4} \right]. \quad (1.19)$$

Es importante mencionar que al usar otros arreglos de cilindros como los que propusieron Sparrow y Loeffler (1959) se obtienen resultados idénticos a los de Happel y Brenner (1991) para valores de porosidad superiores a 0.8.



**Figura 1-1:** Modelo periódico de medio poroso y celda unitaria usando cilindros paralelos y considerando; *i*) flujo paralelo y *ii*) flujo perpendicular.

Sin embargo, debido a la baja capacidad de estos modelos simplificados para reproducir datos experimentales su aplicación es limitada, esta dificultad es más evidente para valores bajos de porosidad. Por ello, se han resuelto numéricamente las ecuaciones de Navier-Stokes (Eidsath y col., 1983; Sahraoui y Kaviany, 1992), obteniendo excelentes ajustes con datos experimentales.

Por otro lado, Larson y Higdon (1989) consideraron un modelo de medio poroso constituido por esferas, el cual se muestra junto con la correspondiente celda unitaria en la Figura 1-2. En su estudio resolvieron el problema de Stokes usando el método de colocación y tres tipos de arreglos de esferas en la celda unitaria. En su texto, Kaviany (1999) propone la siguiente relación, basada en la ecuación de Carman-Kozeny, para aproximar los resultados de Larson y Higdon (1989),

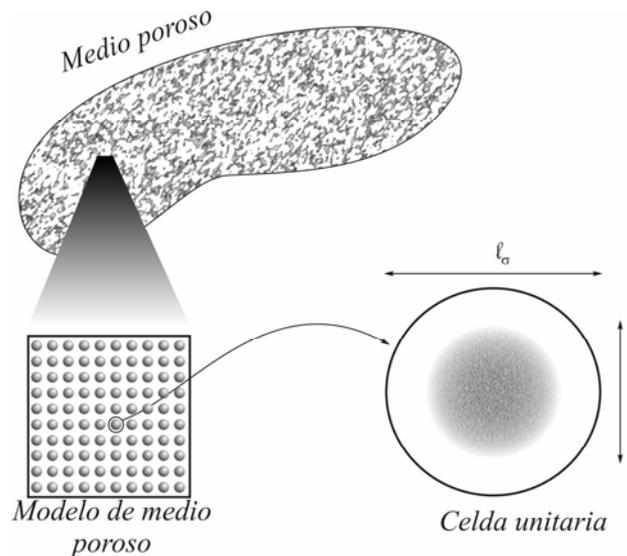
$$\frac{K_{\beta\omega}}{\ell^2} = A \frac{\varepsilon_{\beta\omega}^3}{(1 - \varepsilon_{\beta\omega})^2}, \quad (1.20)$$

donde  $A$  es un parámetro ajustable, el cual para reproducir los resultados de Larson y Higdon se tomó como  $A = 2 \times 10^{-6}$ . La relación entre el diámetro de la esfera de la celda unitaria ( $\ell$ ) y el diámetro de la esfera sólida contenida en la primera es,

$$\frac{\ell}{\ell_\sigma} = \frac{1}{(1 - \varepsilon_{\beta\omega})^{1/3}}. \quad (1.21)$$

Para finalizar este capítulo se presenta la siguiente expresión propuesta por Kaviany (1999) para ajustar los resultados numéricos de Sahraoui y Kaviany (1992) para arreglos de cilindros,

$$\frac{K_{\beta\omega}}{\ell_\sigma^2} = 0.0606 \frac{\pi}{4} \frac{\varepsilon_{\beta\omega}^{5.1}}{(1 - \varepsilon_{\beta\omega})}; \quad 0.4 \leq \varepsilon_{\beta\omega} \leq 0.8. \quad (1.22)$$



**Figura 1-2:** Modelo de medio poroso y celda unitaria usando esferas.

---

## Objetivos

*Objetivo general:*

Desarrollar condiciones de salto cerradas en sistemas multifásicos, a partir del planteamiento y solución de problemas de cerradura.

*Objetivos particulares:*

- Desarrollar condiciones de salto cerradas de transferencia difusiva de masa entre un fluido y un medio compuesto de microporos considerando una reacción de primer orden.
- Desarrollar una ecuación de transferencia de masa generalizada cerrada y comparar los resultados con los que se obtienen al usar una condición de salto para el fenómeno de transferencia de masa difusiva entre un medio poroso y un fluido.
- Desarrollar condiciones de salto cerradas de cantidad de movimiento para un sistema análogo al usado por Beavers y Joseph (1967).
- Comparar los resultados obtenidos con los de otras metodologías como la de Goyeau y col. (2003).
- Desarrollar condiciones de salto cerradas de transferencia convectiva y difusiva de masa entre un medio poroso y un fluido.

Parte I:

Transferencia de masa difusiva

---

## Capítulo 2:

### Deducción de la condición de salto de transferencia de masa en la inter-región microporo-fluido.

#### 2.1.- Planteamiento del problema.

En este capítulo se desarrollarán condiciones de salto cerradas (es decir, sin involucrar parámetros ajustables) para el problema de difusión y reacción entre un fluido y un medio poroso compuesto de microporos. Para ubicar el nivel de escala al que se dirige el análisis, en la Figura 2-1 se muestran cinco niveles que van desde la escala reactor (macroscópica) hasta el nivel de la superficie catalítica (puntual), previamente estudiada por Wood y col. (2000). De esta manera, el problema que se desea estudiar se ubica en el nivel de *Escala III*. Este capítulo está dedicado a la deducción de las condiciones de salto cerradas para este problema, mientras que en el Capítulo 3 se presenta y resuelve el problema de cerradura necesario para calcular el coeficiente de reacción efectivo resultante.

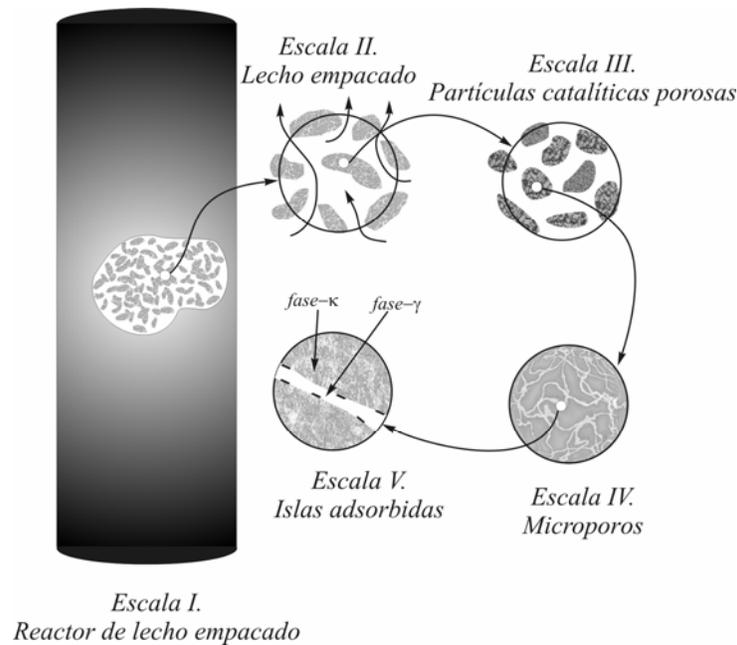
#### *Problema puntual.*

Las condiciones de salto puntual y promedio para la *Escala V* fueron reportadas por Wood y col. (2000) suponiendo que la reacción química sólo tiene lugar en la interfase sólido-fluido. Para este análisis, se referirá a la fase sólida como la fase  $-\kappa$  mientras que al fluido se le denotará como fase  $-\gamma$ . Es conveniente mencionar que, en este contexto, se maneja el concepto de fase desde un sentido termodinámico; es decir, es un fluido homogéneo que satisface la hipótesis de equilibrio local (Ochoa-Tapia y Soria, 1995). Bajo estas circunstancias, las ecuaciones promedio que describen el problema en la *Escala V* son

$$\frac{\partial c_{A\gamma}}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{D}_\gamma \nabla c_{A\gamma}), \quad \text{en la fase } -\gamma, \quad (2.1)$$

$$\text{C.F.} \quad -\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla c_{A\gamma} = kc_{A\gamma}, \quad \text{en la interfase } \gamma - \kappa, \quad (2.2)$$

donde  $k$  es el coeficiente de reacción definido en la ecuación (58) de Wood y col. (2000) y se obtiene de resolver el problema de cerradura correspondiente.



**Figura 2-1:** Niveles de escala de interés.

## 2.2.- Promedio volumétrico.

El primer paso en esta metodología consiste en definir una región (o espacio geométrico) de promediado ( $V$ ), de volumen  $\mathcal{V}^*$  (también conocido como Volumen Elemental Representativo o V.E.R.; Bear, 1972) en cada punto del sistema de la *Escala III*. Es decir, tanto en la región compuesta por microporos (región  $-\omega$ ), como en el

\* A lo largo de este documento, se usarán las fuentes Times New Roman cursiva y Shelley Allegro cursiva para referirse a espacios (o superficies) geométricos y sus volúmenes (o áreas), respectivamente.

fluido de los macroporos (región  $-\eta$ ) y en la inter-región ( $\omega-\eta$ ). Para este sistema bifásico, el volumen  $\mathcal{V}$  puede expresarse como sigue

$$\mathcal{V} = \mathcal{V}_\gamma(\mathbf{x}) + \mathcal{V}_\kappa(\mathbf{x}), \quad (2.3)$$

donde  $\mathcal{V}_i(\mathbf{x})$  denota el volumen del espacio geométrico ocupado por la fase- $i$  en  $V$ .

Por otro lado, en este trabajo se maneja el concepto de región homogénea de la misma forma que Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a); es decir, es una porción del sistema multifásico (cuya longitud característica está relacionada con el tamaño de  $V$ ) que no está influenciada por los rápidos cambios en la estructura que ocurren en la frontera. En otras palabras, una región homogénea es aquella porción del sistema donde las diferentes fracciones volumétricas y otras propiedades asociadas con la microestructura son independientes de la posición. Por otro lado, en adelante se maneja el concepto de inter-región o frontera macroscópica, como la porción del sistema que separa dos regiones homogéneas. Como se muestra en la Figura 2-2, la región- $\omega$  está compuesta por las fases  $-\kappa$  y  $-\gamma$ , siendo esta última la única fase presente en la región- $-\eta$ ; en otras palabras, la fase- $\gamma$  se encuentra fluyendo en los micro y macroporos de la partícula catalítica.

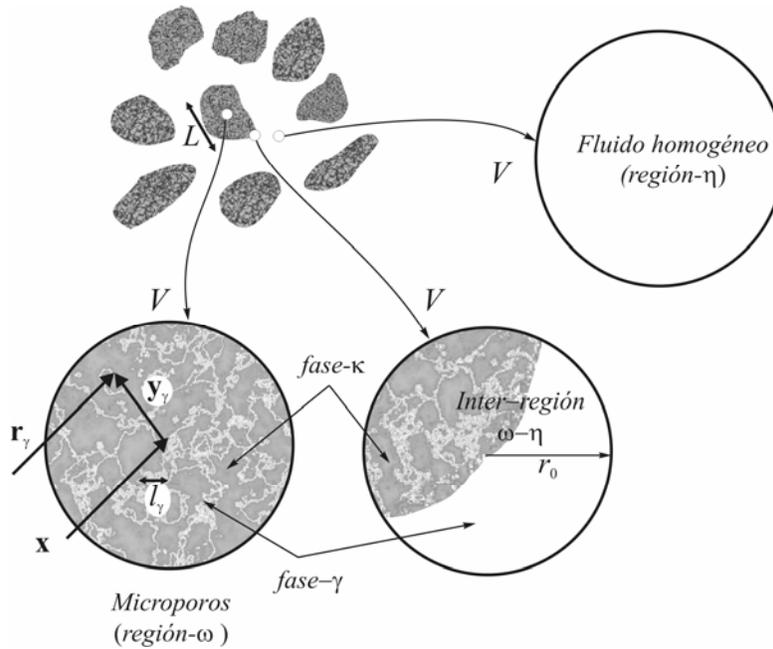
La región de promediado ( $V$ ) debe ser lo suficientemente grande para que las no-uniformidades en el medio poroso sean suavizadas en el espacio pero, al mismo tiempo, lo suficientemente pequeña para que no se pierda demasiada información de la microestructura en el proceso de promediado. Esta restricción se suele expresar como sigue,

$$l_\gamma \ll r_0 \ll L. \quad (2.4)$$

De esta forma, se define el operador de *promedio superficial* actuando sobre cualquier propiedad asociada con la fase- $-\gamma$  ( $\psi_\gamma$ ) como:

$$\langle \psi_\gamma \rangle_{\mathbf{x}} = \frac{1}{\mathcal{V}_{V_\gamma(\mathbf{x})}} \int_{V_\gamma(\mathbf{x})} \psi_\gamma|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} dV, \quad (2.5)$$

donde, como se ilustra en la Figura 2-2,  $\mathbf{x}$  es el vector de posición que localiza el centroide del espacio geométrico  $V$ ; el vector  $\mathbf{r}_\gamma$  localiza cualquier punto en la fase  $-\gamma$  y el vector  $\mathbf{y}_\gamma$  localiza puntos en la fase  $-\gamma$  relativos al centroide  $\mathbf{x}$ . Por último, en la ecuación (2.5)  $V_\gamma(\mathbf{x})$  denota el espacio geométrico ocupado por la fase  $-\gamma$  en  $V$ , el cual cambia de acuerdo a la posición del centroide.



**Figura 2-2:** Promediado para la Escala III.

Por el momento, resulta conveniente usar la siguiente nomenclatura simplificada,

$$\langle \psi_\gamma \rangle = \frac{1}{\mathcal{V}_{V_\gamma(\mathbf{x})}} \int_{V_\gamma(\mathbf{x})} \psi_\gamma dV. \quad (2.6)$$

Asimismo, se define el operador de promedio intrínseco como:

$$\langle \psi_\gamma \rangle^\gamma = \frac{1}{\mathcal{V}_\gamma(\mathbf{x})} \int_{V_\gamma(\mathbf{x})} \psi_\gamma dV, \quad (2.7)$$

dato que la integral en el lado derecho de las ecuaciones (2.6) y (2.7) es la misma, ambos operadores pueden relacionarse de acuerdo a,

$$\langle \psi_\gamma \rangle = \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \langle \psi_\gamma \rangle^\gamma, \quad (2.8)$$

donde  $\varepsilon_\gamma(\mathbf{x})$  es la fracción volumétrica (porosidad) de la fase  $\gamma$  en  $V$ , es decir

$$\varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{V_\gamma(\mathbf{x})} dV = \frac{\mathcal{V}_\gamma(\mathbf{x})}{\mathcal{V}}. \quad (2.9)$$

Dado que en este trabajo se estudian los cambios espaciales al pasar de una región homogénea a otra, resulta conveniente conservar la dependencia explícita de propiedades promedio (como la porosidad) con la posición  $(\mathbf{x})$ . De aquí en adelante, a menos que se exprese explícitamente, todas las cantidades promediadas intrínseca o superficialmente son funciones de  $\mathbf{x}$ .

### 2.3.- Ecuación de transferencia de masa generalizada.

De acuerdo a la metodología de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a), el siguiente paso consiste en obtener una ecuación de medio efectivo que sea válida en cualquier punto del sistema, es decir, en la región homogénea  $\omega$ , en la región homogénea  $\eta$  y en la inter-región  $\omega-\eta$ . Al aplicar el operador de (2.6) a la ecuación (2.1) se obtiene,

$$\left\langle \frac{\partial c_{A\gamma}}{\partial t} \right\rangle = \left\langle \nabla \cdot (\mathcal{D}_\gamma \nabla c_{A\gamma}) \right\rangle. \quad (2.10)$$

Debido a que  $V_\gamma(\mathbf{x})$  es independiente del tiempo, (y por tanto también lo es la fracción  $\varepsilon_\gamma(\mathbf{x})$ ), el lado izquierdo de la ecuación anterior se expresa, con ayuda de la relación de (2.8), como:

$$\left\langle \frac{\partial c_{A\gamma}}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle}{\partial t} = \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}{\partial t}. \quad (2.11)$$

Por otro lado, mediante el teorema del promediado espacial (Howes y Whitaker, 1985), el lado derecho de la ecuación (2.10) se puede escribir como,

$$\langle \nabla \cdot (\mathcal{D}_\gamma \nabla c_{A\gamma}) \rangle = \nabla \cdot \langle \mathcal{D}_\gamma \nabla c_{A\gamma} \rangle + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla c_{A\gamma} \, dA. \quad (2.12)$$

En la ecuación anterior,  $A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})$  representa la superficie interfacial contenida en  $V$ . Al despreciar los cambios espaciales de  $\mathcal{D}_\gamma$  en el dominio de integración, se puede expresar el primer término del lado derecho de la ecuación anterior, con una segunda aplicación del teorema del promediado espacial, como

$$\nabla \cdot \langle \mathcal{D}_\gamma \nabla c_{A\gamma} \rangle = \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_\gamma \left( \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} c_{A\gamma} \, dA \right) \right]. \quad (2.13)$$

Al sustituir la condición de frontera interfacial (2.2), así como el resultado de la ecuación anterior en la ecuación (2.12) resulta,

$$\langle \nabla \cdot (\mathcal{D}_\gamma \nabla c_{A\gamma}) \rangle = \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_\gamma \left( \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} c_{A\gamma} \, dA \right) \right] - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} k c_{A\gamma} \, dA. \quad (2.14)$$

Por otro lado, la descomposición espacial de la concentración se suele definir de la siguiente manera (Gray, 1975),

$$c_{A\gamma}|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} = \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} + \tilde{c}_{A\gamma}|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma}. \quad (2.15)$$

Al emplear la relación de (2.8), así como la descomposición espacial en el término difusivo de la ecuación (2.14) se obtiene,

$$\begin{aligned} \langle \nabla \cdot (\mathcal{D}_\gamma \nabla c_{A\gamma}) \rangle = & \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_\gamma \left( \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma|_{\mathbf{x}} + \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma|_{\mathbf{x}} \nabla \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} \, dA + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \tilde{c}_{A\gamma} \, dA \right) \right] - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} k c_{A\gamma} \, dA. \end{aligned} \quad (2.16)$$

En la cual se entiende que tanto  $c_{A\gamma}$  como  $\tilde{c}_{A\gamma}$  están evaluados en  $\mathbf{x} + \mathbf{y}_\gamma$ . Sin embargo, a partir del teorema del promediado espacial se puede demostrar que,

$$\left\langle c_{A\gamma} \right\rangle_{\mathbf{x}}^{\gamma} \nabla \varepsilon_{\gamma} = -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \left\langle c_{A\gamma} \right\rangle_{\mathbf{x}}^{\gamma} dA. \quad (2.17)$$

dado que  $\nabla \varepsilon_{\gamma} = -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} dA$ . Por lo que la ecuación (2.16) se escribe ahora como,

$$\left\langle \nabla \cdot (\mathcal{D}_{\gamma} \nabla c_{A\gamma}) \right\rangle = \nabla \cdot (\varepsilon_{\gamma}(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \left\langle c_{A\gamma} \right\rangle_{\mathbf{x}}^{\gamma}) - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} k c_{A\gamma} dA, \quad (2.18)$$

donde se utilizó la siguiente definición del flux de masa no-local

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \left\langle c_{A\gamma} \right\rangle_{\mathbf{x}}^{\gamma} = & \mathcal{D}_{\gamma} \left[ \nabla \left\langle c_{A\gamma} \right\rangle_{\mathbf{x}}^{\gamma} + \frac{1}{\mathcal{V}_{\gamma}(\mathbf{x})} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \left( \left\langle c_{A\gamma} \right\rangle_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_{\gamma}}^{\gamma} - \left\langle c_{A\gamma} \right\rangle_{\mathbf{x}}^{\gamma} \right) dA \right. \\ & \left. + \frac{1}{\mathcal{V}_{\gamma}(\mathbf{x})} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \tilde{c}_{A\gamma} dA \right]. \end{aligned} \quad (2.19)$$

El coeficiente  $\mathbf{D}(\mathbf{x})$  se denotará como el tensor de difusión dependiente de la posición.

Es oportuno mencionar que en las regiones homogéneas ( $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_h$ ), las siguientes restricciones de escala se satisfacen (Whitaker, 1999)

$$r_0 \ll L_C; \quad r_0^2 \ll L_C L_{C1}, \quad (2.20)$$

y como consecuencia

$$\nabla \left\langle c_{A\gamma} \right\rangle_{\mathbf{x}}^{\gamma} \gg \frac{1}{\mathcal{V}_{\gamma}(\mathbf{x}_h)} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x}_h)} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \left( \left\langle c_{A\gamma} \right\rangle_{\mathbf{x}_h+\mathbf{y}_{\gamma}}^{\gamma} - \left\langle c_{A\gamma} \right\rangle_{\mathbf{x}_h}^{\gamma} \right) dA, \quad (2.21)$$

en las regiones homogéneas,

lo cual, como se mostrará más adelante, permite simplificar la ecuación (2.19).

Por otro lado, debe remarcarse que el uso de las restricciones de escala dadas en la ecuación (2.20), está limitado a las regiones homogéneas dado que existe cierta inseguridad sobre su validez en la inter-región. Por ello, se ha preferido mantener explícita la dependencia del tensor de difusividad con  $\mathbf{x}$ . Esta dependencia toma en cuenta la transición de las propiedades del tensor desde el fluido homogéneo ( $\mathcal{D}_{\gamma} \mathbf{I}$ ) a aquellas en la región porosa homogénea ( $\mathbf{D}_o$ ). Como lo expresa la ecuación (2.19),

para estimar esta transición, se requiere conocer, entre otras propiedades, los cambios espaciales de la concentración en la inter-región. Este tema se explora más detalladamente en el Capítulo 4.

Por otro lado, al despreciar los cambios espaciales del coeficiente de reacción  $k$  en  $A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})$ , la ecuación (2.18) se reduce a,

$$\langle \nabla \cdot (\mathcal{D}_\gamma \nabla c_{A\gamma}) \rangle = \nabla \cdot (\varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma) - k a_v(\mathbf{x}) \langle c_{A\gamma} \rangle_{\gamma\kappa}, \quad (2.22)$$

en esta ecuación se utilizó la definición de la concentración promediada en el área,

$$\langle c_{A\gamma} \rangle_{\gamma\kappa} = \frac{1}{\mathcal{A}_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} c_{A\gamma} \, dA, \quad (2.23)$$

junto con la definición del área interfacial por unidad de volumen,

$$a_v(\mathbf{x}) = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} dA = \frac{\mathcal{A}_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})}{\mathcal{V}}. \quad (2.24)$$

En las ecuaciones (2.23) y (2.24),  $\mathcal{A}_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})$  es el área de la superficie  $A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})$ . Al sustituir ahora las ecuaciones (2.11) y (2.22) en la ecuación (2.10) resulta finalmente,

$$\varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma}{\partial t} = \nabla \cdot (\varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma) - k a_v(\mathbf{x}) \langle c_{A\gamma} \rangle_{\gamma\kappa}. \quad (2.25)$$

Esta es la *ecuación de transferencia de masa generalizada* (ETMG) para el problema estudiado en la *Escala III*, la cual carece de restricciones de escala y es, por lo tanto, válida en todo el dominio. A este tipo de modelos se les suele llamar *modelos de un solo dominio* (*one domain approach*) (Goyeau y col., 2003). Debe notarse que los coeficientes dependientes del vector  $\mathbf{x}$  tienen las siguientes propiedades,

$$\varepsilon_\gamma(\mathbf{x}); a_v(\mathbf{x}); \mathbf{D}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1; 0; \mathcal{D}_\gamma \mathbf{I} & \text{en la región homogénea } -\eta \\ \varepsilon_{\gamma\omega}; a_{v\omega}; \mathbf{D}_\omega & \text{en la región homogénea } -\omega \end{cases}, \quad (2.26)$$

donde  $\varepsilon_{\gamma\omega}$  y  $a_{v\omega}$  son los valores de la porosidad y el área superficial por unidad de volumen en la región homogénea  $-\omega$ , respectivamente. Mientras que  $\mathbf{D}_\omega$  es el tensor de

difusión efectivo en región homogénea -  $\omega$  (ver ecuación (1.4-62) en Whitaker, 1999 o bien la ecuación (2.31) más adelante).

No debe perderse de vista que la ecuación (2.25) no está cerrada y por lo tanto no es posible utilizarla para obtener el campo de  $\langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma$ . Esta dificultad puede superarse, ya sea estimando las propiedades necesarias para calcular los cambios espaciales de  $\mathbf{D}(\mathbf{x})$  (Capítulo 4) o bien, mediante las ecuaciones de medio efectivo en las regiones homogéneas. Sin embargo, las restricciones de escala necesarias para la obtención de dichas ecuaciones dejan de ser válidas en la inter-región, es por ello necesario desarrollar condiciones de salto. A continuación, se muestra cómo a partir de la ETMG (2.25) y del uso de determinadas restricciones de escala, se pueden obtener las ecuaciones de medio efectivo en las regiones homogéneas.

## 2.4.- Ecuaciones de transferencia de masa en cada región.

*Región homogénea-  $\omega$ .*

En esta región (donde  $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_\omega$ ) puede demostrarse que si se satisfacen las siguientes restricciones de escala (Whitaker Cap. 1, 1999)

$$l_\gamma \ll L_C, \quad (2.27)$$

$$l_\gamma \ll r_0, \quad (2.28)$$

se cumple que,

$$\tilde{c}_{A\gamma\omega} \ll \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma \Big|_{\mathbf{x}_\omega + \mathbf{y}_\gamma}. \quad (2.29)$$

En la ecuación (2.27)  $L_C$  es una longitud característica asociada con la concentración promedio. De acuerdo a la desigualdad (2.29), es posible reemplazar a  $\langle c_{A\gamma} \rangle_{\gamma\mathbf{x}}$  por  $\langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma$  (ver sección 1.3.3 en Whitaker,1999).

Como se mencionó anteriormente, en esta región la desigualdad de (2.21) se satisface, de manera que la ecuación (2.19) se reduce a,

$$\varepsilon_\gamma(\mathbf{x}_\omega)\mathbf{D}(\mathbf{x}_\omega)\cdot\nabla\langle c_{A\gamma}\rangle_\omega^y \Big|_{\mathbf{x}_\omega} = \varepsilon_{\gamma\omega}\mathbf{D}_\omega\cdot\nabla\langle c_{A\gamma}\rangle_\omega^y, \quad (2.30)$$

donde,

$$\mathbf{D}_\omega\cdot\nabla\langle c_{A\gamma}\rangle_\omega^y = \mathcal{D}_\gamma \left( \nabla\langle c_{A\gamma}\rangle_\omega^y + \frac{1}{\mathcal{V}_\gamma(\mathbf{x}_\omega)} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x}_\omega)} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \tilde{c}_{A\gamma\omega} dA \right). \quad (2.31)$$

La solución del problema de valor a la frontera de la variable de cerradura (problema de cerradura (Crapiste y col., 1986)) que permite expresar a  $\tilde{c}_{A\gamma\omega}$  en términos de  $\nabla\langle c_{A\gamma}\rangle_\omega^y$  fue llevada a cabo por Ryan y col. (1981), obteniendo un buen ajuste con datos experimentales.

De esta forma, la ecuación (2.25) se reduce, tomando en cuenta la expresión (2.26), a

$$\varepsilon_{\gamma\omega} \frac{\partial\langle c_{A\gamma}\rangle_\omega^y}{\partial t} = \nabla\cdot\left(\varepsilon_{\gamma\omega}\mathbf{D}_\omega\cdot\nabla\langle c_{A\gamma}\rangle_\omega^y\right) - a_{v\omega}k\langle c_{A\gamma}\rangle_\omega^y, \text{ en la región homogénea } -\omega. \quad (2.32)$$

*Región homogénea- $\eta$ .*

En este caso, ( $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_\eta$ ) las variables promedio son iguales a sus valores puntuales correspondientes y además la fracción volumétrica de fluido es la unidad; de esta manera, como lo muestran Valencia-López y col. (2003), cuando se satisfacen las restricciones de escala (2.20), se puede concluir que

$$\langle c_{A\gamma}\rangle_\eta^y = \langle c_{A\gamma}\rangle = c_{A\gamma}. \quad (2.33)$$

En otras palabras, las desviaciones espaciales de concentración son despreciables en esta región. Con estos argumentos, la ecuación (2.19) se reduce a,

$$\varepsilon_\gamma(\mathbf{x}_\eta)\mathbf{D}(\mathbf{x}_\eta)\cdot\nabla\langle c_{A\gamma}\rangle_\eta^y = \mathcal{D}_\gamma\nabla\langle c_{A\gamma}\rangle_\eta^y. \quad (2.34)$$

Por lo que la ecuación (2.25) se reduce, tomando en cuenta la ecuación (2.26), a

$$\frac{\partial \langle c_{Ay} \rangle_\eta^\gamma}{\partial t} = \nabla \cdot \left( \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{Ay} \rangle_\eta^\gamma \right), \text{ en la región homogénea } -\eta. \quad (2.35)$$

Cabe mencionar que las ecuaciones (2.32) y (2.35) son análogas a las ecuaciones (2-21) y (2-29) de Whitaker (1983); quien dedujo el modelo de una sola ecuación para un sistema idéntico al estudiado aquí y encontró además, que la región homogénea  $-\omega$  es isótropa con respecto a la difusión Knudsen, obteniendo,

$$\mathbf{D}_\omega = D_\omega \mathbf{I} = \frac{A}{a_{v\omega}} \sqrt{\frac{\pi RT}{8M_A}} \mathbf{I}, \quad (2.36)$$

donde A es cualquier componente de la diagonal principal de un tensor de segundo orden que depende sólo de la geometría del medio poroso. Los detalles que llevan a la ecuación anterior se pueden encontrar en el trabajo de Whitaker (1983).

Como se mencionó anteriormente, las restricciones de escala, bajo las cuales las ecuaciones (2.32) y (2.35) son válidas, pueden no ser satisfechas en la inter-región. Por ello, en la siguiente sección se desarrollan las condiciones de salto correspondientes. Con estas condiciones de frontera, se contará con un modelo completo para predecir el campo de concentración que consiste en dos ecuaciones de medio efectivo válidas en las regiones homogéneas y las condiciones de salto para la inter-región. A este tipo de modelos, algunos autores les llaman *modelos de dos dominios (two domain approach)* (Goyeau y col., 2003).

## 2.5.- Condición de salto.

Para desarrollar la condición de salto se seguirá, como hasta el momento, la metodología de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a); en la cual se integran las ecuaciones válidas en las regiones homogéneas  $-\omega$  (2.32) y  $\eta$  (2.35) y la ecuación de transferencia de masa generalizada (2.25) dentro de un espacio geométrico  $(V_\infty)$  de volumen  $\mathcal{V}_\infty$ , mostrado en la Figura 2-3 y definido como,

$$\mathcal{V}_\infty = \mathcal{V}_\omega + \mathcal{V}_\eta, \quad (2.37)$$

donde  $\mathcal{V}_\omega$  y  $\mathcal{V}_\eta$  son los volúmenes de las regiones- $\omega$  y  $-\eta$  ( $V_\omega$  y  $V_\eta$ ) contenidas en  $V_\infty$ , respectivamente. De la misma forma, el área que define a la superficie de  $V_\infty$  puede descomponerse en,

$$\mathcal{A}_\infty = \mathcal{A}_\omega + \mathcal{A}_\eta, \quad (2.38)$$

donde  $\mathcal{A}_\omega$  y  $\mathcal{A}_\eta$  son las áreas de las superficies externas de  $V_\omega$  y  $V_\eta$ , respectivamente, mientras que  $\mathcal{A}_{\omega\eta}^*$  representa el área de la porción de la superficie divisoria entre las dos regiones ( $A_{\omega\eta}^*$ ) asociada con  $V_\infty$ . Conviene remarcar el hecho de que se están despreciando los efectos convectivos en el análisis, por lo que no es necesario contar, por el momento, con las ecuaciones de transporte de cantidad de movimiento; sin embargo, existen otros casos donde el flujo del fluido debe considerarse (Ochoa-Tapia y Whitaker 1997, 1998; Valencia-López y col., 2003 y Capítulo 7).

Al integrar en  $V_\infty$  las ecuaciones de las regiones  $\omega$ ,  $\eta$  y la ETMG y usando el teorema de la divergencia en los términos difusivos, se obtienen,

$$\begin{aligned} \text{Región-}\omega: \int_{V_\omega} \varepsilon_{\gamma\omega} \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma}{\partial t} dV &= \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left( \varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma \right) dA \\ &+ \int_{A_{\omega\eta}^*} \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma \right) dA - \int_{V_\omega} a_{v\omega} k \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma dV, \end{aligned} \quad (2.39)$$

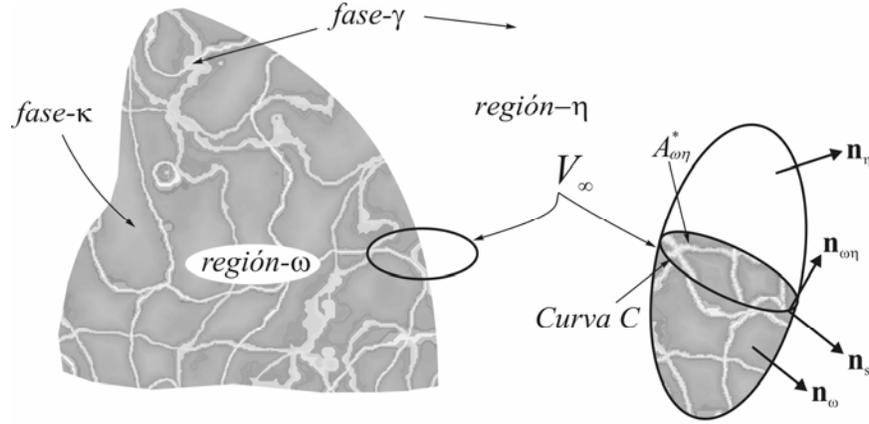
$$\text{Región-}\eta: \int_{V_\eta} \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma}{\partial t} dV = \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left( \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma \right) dA + \int_{A_{\omega\eta}^*} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left( \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma \right) dA, \quad (2.40)$$

Todo el dominio:

$$\begin{aligned} \int_{V_\omega} \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}{\partial t} dV + \int_{V_\eta} \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}{\partial t} dV &= \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left( \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \right) dA \\ &+ \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left( \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \right) dA - \int_{V_\omega} k a_v(\mathbf{x}) \langle c_{A\gamma} \rangle_{\gamma\kappa}^\gamma dV, \end{aligned} \quad (2.41)$$

Al sumar las ecuaciones (2.39) y (2.40) resulta,

$$\begin{aligned}
 & \int_{V_\omega} \varepsilon_{\gamma\omega} \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma}{\partial t} dV + \int_{V_\eta} \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma}{\partial t} dV \\
 &= \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left( \varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma \right) dA + \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left( \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma \right) dA \\
 &+ \int_{A_{\omega\eta}^*} \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma - \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma \right) dA - \int_{V_\omega} a_{v\omega} k \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma dV.
 \end{aligned} \tag{2.42}$$



**Figura 2-3:** Región de promediado  $V_\infty$  y vectores unitarios para la inter-región  $\omega - \eta$ .

Mientras que al restar a la ecuación (2.41) la ecuación anterior, se obtiene la siguiente expresión

$$\begin{aligned}
 & \int_{V_\omega} \left[ \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}{\partial t} - \varepsilon_{\gamma\omega} \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma}{\partial t} \right] dV + \int_{V_\eta} \left[ \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}{\partial t} - \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma}{\partial t} \right] dV \\
 &= \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left( \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma - \varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma \right) dA \\
 &+ \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left( \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma - \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma \right) dA \\
 &- \int_{A_{\omega\eta}^*} \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma - \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma \right) dA \\
 &- \int_{V_\omega} k a_v(\mathbf{x}) \langle c_{A\gamma} \rangle_{\gamma\kappa} dV + \int_{V_\omega} a_{v\omega} k \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma dV.
 \end{aligned} \tag{2.43}$$

La estructura de esta ecuación permite identificar las siguientes propiedades de exceso:

*Exceso de acumulación superficial:*

$$\int_{A_{\omega\eta}^*} \varepsilon_{\gamma s} \frac{\partial \langle c_{Ay} \rangle_s^\gamma}{\partial t} dA = \int_{V_\omega} \left[ \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{Ay} \rangle^\gamma}{\partial t} - \varepsilon_{\gamma\omega} \frac{\partial \langle c_{Ay} \rangle_\omega^\gamma}{\partial t} \right] dV + \int_{V_\eta} \left[ \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{Ay} \rangle^\gamma}{\partial t} - \frac{\partial \langle c_{Ay} \rangle_\eta^\gamma}{\partial t} \right] dV, \quad (2.44)$$

*Exceso de transporte difusivo superficial:*

$$\oint_C \mathbf{n}_s \cdot \varepsilon_{\gamma s} \mathbf{D}_s \cdot \nabla_s \langle c_{Ay} \rangle_s^\gamma d\sigma = \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left( \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{Ay} \rangle^\gamma - \varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{Ay} \rangle_\omega^\gamma \right) dA + \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left( \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{Ay} \rangle^\gamma - \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{Ay} \rangle_\eta^\gamma \right) dA, \quad (2.45)$$

donde  $C$  representa la curva cerrada que se encuentra sobre la superficie divisoria (Figura 2-3) y  $\mathbf{n}_s$  es el vector unitario normal que es tangente a la superficie divisoria y normal a la curva  $C$ . Al usar el teorema de la divergencia superficial (Deemer y Slattery, 1978; Slattery, 1980; Ochoa-Tapia y col., 1993; Slattery, 2007) en la ecuación (2.45) se obtiene que

$$\int_{A_{\omega\eta}^*} \nabla_s \cdot \varepsilon_{\gamma s} \mathbf{D}_s \cdot \nabla_s \langle c_{Ay} \rangle_s^\gamma dA = \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left( \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{Ay} \rangle^\gamma - \varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{Ay} \rangle_\omega^\gamma \right) dA + \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left( \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{Ay} \rangle^\gamma - \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{Ay} \rangle_\eta^\gamma \right) dA. \quad (2.46)$$

En este momento es conveniente introducir un tensor de proyección  $\mathbf{P}$  de acuerdo a (Whitaker, 1992),

$$\mathbf{P} = \mathbf{I} - \mathbf{n}_{\eta\omega} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \quad (2.47)$$

De esta forma, el operador gradiente superficial  $\nabla_s$  en la ecuación (2.46) está dado, en términos de  $\mathbf{P}$  y  $\nabla$ , como

$$\nabla_s = \mathbf{P} \cdot \nabla = (\mathbf{I} - \mathbf{n}_{\eta\omega} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot) \cdot \nabla. \quad (2.48)$$

Exceso de velocidad de reacción superficial:

$$\int_{A_{\omega\eta}^*} \langle R_A \rangle_s dA = \int_{V_\infty} a_v(\mathbf{x}) k \langle c_{A\gamma} \rangle_{\gamma\kappa} dV - \int_{V_\omega} a_{v\omega} k \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma dV. \quad (2.49)$$

En la siguiente sección se demostrará que cuando se cumple la restricción  $r_0 \ll r_c$ , entonces,

$$\langle R_A \rangle_s = \frac{1}{\mathcal{A}_{\eta\omega} A_{\eta\omega}} \int R_{As} dA = \langle R_{As} \rangle_{\eta\omega} = \langle kc_{A\gamma} \rangle_{\eta\omega}, \quad (2.50)$$

donde  $\mathcal{A}_{\eta\omega}$  representa el área de la superficie ocupada por  $V$  cuando su centroide se localiza en la frontera. De esta forma, al sustituir estas definiciones en la ecuación (2.43), se obtiene, tras agrupar todos los términos en una sola integral y tomando en cuenta que la superficie  $A_{\omega\eta}^*$  es arbitraria (lo que permite igualar a cero el integrando), la siguiente expresión

$$\underbrace{\varepsilon_{\gamma s} \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_s^\gamma}{\partial t}}_{\text{exceso de acumulación superficial}} - \underbrace{\nabla_s \cdot (\varepsilon_{\gamma s} \mathbf{D}_s \cdot \nabla_s \langle c_{A\gamma} \rangle_s^\gamma)}_{\text{exceso de transporte por difusión interna}} = \underbrace{-\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot (\varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla_\omega \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma - \mathcal{D}_\gamma \nabla_\gamma \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma)}_{\text{transporte difusivo neto hacia la inter-región}} - \underbrace{\langle kc_{A\gamma} \rangle_{\eta\omega}}_{\text{exceso en la tasa de reacción}}. \quad (2.51)$$

En este momento conviene notar que, si los cambios espaciales de los integrandos en los dos términos del lado derecho de la ecuación (2.46) se suponen despreciables en las superficies transversales de  $V_\eta$  y  $V_\omega$ , resulta que

$$\int_{A_{\omega\eta}^*} \nabla_s \cdot \varepsilon_{\gamma s} \mathbf{D}_s \cdot \nabla_s \langle c_{A\gamma} \rangle_s^\gamma dA = \int_{A_\omega(\mathbf{x}_\omega)} \mathbf{n}_\omega \cdot (\varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma - \varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma) dA + \int_{A_\eta(\mathbf{x}_\eta)} \mathbf{n}_\eta \cdot (\varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma - \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma) dA, \quad (2.52)$$

donde  $A_\eta(\mathbf{x}_\eta)$  y  $A_\omega(\mathbf{x}_\omega)$  son las superficies de  $V_\eta$  y  $V_\omega$  en las partes superior e inferior de  $V_\infty$ , respectivamente. Sin embargo, en dichas superficies, es razonable suponer que las restricciones de escala bajo las cuales la ETMG y las propiedades promedio

corresponden a sus valores en las regiones homogéneas se satisfacen. De esta forma, el lado derecho de la ecuación (2.52) se puede suponer que es mucho menor que la unidad y la condición de salto (2.51) se reduce a

$$\underbrace{\varepsilon_{\gamma s} \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_s}{\partial t}}_{\text{exceso de acumulación superficial}} = \underbrace{-\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega - \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta \right)}_{\text{transporte difusivo neto hacia la inter-región}} - \underbrace{\langle kc_{A\gamma} \rangle_{\eta\omega}}_{\text{exceso en la tasa de reacción}}. \quad (2.53)$$

Por otro lado, al llevar a cabo un análisis de orden de magnitud en la ecuación (2.44) se obtiene que

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\gamma s} \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_s}{\partial t} = \mathbf{O} \left[ \left( \varepsilon_\gamma \Delta_t \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma - \varepsilon_{\gamma\omega} \Delta_t \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega \right) \frac{V_\omega}{t^* A_{\omega\eta}^*} \right] \\ + \mathbf{O} \left[ \left( \varepsilon_\gamma \Delta_t \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma - \Delta_t \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta \right) \frac{V_\eta}{t^* A_{\omega\eta}^*} \right], \end{aligned} \quad (2.54)$$

donde  $\Delta_t \langle \psi_\gamma \rangle^\gamma$  representan los cambios en  $\langle \psi_\gamma \rangle^\gamma$  que ocurren durante un tiempo característico  $t^*$ , el cual, como se mostrará más adelante (Sección 3.2), está restringido a  $t^* = \mathbf{O}(L_C L_{C1} / \mathcal{D}_\gamma)$ . Por otro lado, de acuerdo a la Figura 2-3, se pueden proponer los siguientes estimados

$$\mathbf{O} \left( \frac{V_j}{A_{\omega\eta}^*} \right) = \mathbf{O} \left( \frac{B A_{\omega\eta}^*}{A_{\omega\eta}^*} \right) = \mathbf{O}(B), \quad j = \omega, \eta, \quad (2.55)$$

donde,  $B$  es la mitad del espesor de la zona de transición (Figura 2-4). De esta forma, la ecuación (2.54) puede expresarse de la siguiente manera simplificada

$$\varepsilon_{\gamma s} \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_s}{\partial t} = \mathbf{O} \left[ \varepsilon_\gamma \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma - \varepsilon_{\gamma\omega} \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega \right] \frac{B}{t^*} + \mathbf{O} \left[ \varepsilon_\gamma \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma - \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta \right] \frac{B}{t^*}. \quad (2.56)$$

Además, el estimado de orden de magnitud del término de transporte difusivo neto hacia la inter-región es

$$\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega - \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta \right) = \mathbf{O} \left( \frac{\varepsilon_{\gamma\omega} D_\omega}{\mathcal{D}_\gamma} \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega - \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta \right) \frac{\mathcal{D}_\gamma}{L_C}. \quad (2.57)$$

En base a los estimados en las ecuaciones (2.56) y (2.57), se puede proponer la siguiente restricción de escala,

$$\left( \frac{\mathbf{O}\left(\frac{\varepsilon_{\gamma\omega} D_{\omega}}{\mathcal{D}_{\gamma}} \langle c_{Ay} \rangle_{\omega}^{\gamma} - \langle c_{Ay} \rangle_{\eta}^{\gamma}\right)}{\mathbf{O}\left(\varepsilon_{\gamma} \langle c_{Ay} \rangle^{\gamma} - \varepsilon_{\gamma\omega} \langle c_{Ay} \rangle_{\omega}^{\gamma}\right) + \mathbf{O}\left(\varepsilon_{\gamma} \langle c_{Ay} \rangle^{\gamma} - \langle c_{Ay} \rangle_{\eta}^{\gamma}\right)} \right) \frac{\mathcal{D}_{\gamma} t^*}{BL_C} \gg 1, \quad (2.58)$$

Note que, para los casos en que

$$\frac{\mathbf{O}\left(\frac{\varepsilon_{\gamma\omega} D_{\omega}}{\mathcal{D}_{\gamma}} \langle c_{Ay} \rangle_{\omega}^{\gamma} - \langle c_{Ay} \rangle_{\eta}^{\gamma}\right)}{\mathbf{O}\left(\varepsilon_{\gamma} \langle c_{Ay} \rangle^{\gamma} - \varepsilon_{\gamma\omega} \langle c_{Ay} \rangle_{\omega}^{\gamma}\right) + \mathbf{O}\left(\varepsilon_{\gamma} \langle c_{Ay} \rangle^{\gamma} - \langle c_{Ay} \rangle_{\eta}^{\gamma}\right)} = \mathbf{O}(1), \quad (2.59)$$

la restricción de (2.58) puede expresarse, tomando en cuenta que  $\frac{\mathcal{D}_{\gamma} t^*}{BL_C} \gg 1$ , como

$$\frac{L_{C_1}}{B} \gg 1, \text{ proceso cuasiestacionario.} \quad (2.60)$$

La restricción anterior permite expresar que, cuando la distancia característica,  $L_{C_1}$ , asociada con los cambios de  $\nabla \langle c_{Ay} \rangle^{\gamma}$  (la cual puede suponerse del orden de la longitud característica del sistema macroscópico,  $L$ ) es mucho mayor que la distancia de la superficie divisoria a las regiones homogéneas, el exceso de acumulación superficial puede considerarse despreciable respecto a los términos del lado derecho de la ecuación (2.53). Por lo que la condición de salto se reduce finalmente a,

$$-\mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left( \mathcal{D}_{\gamma} \nabla \langle c_{Ay} \rangle_{\eta}^{\gamma} \right) + \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left( \varepsilon_{\gamma} \mathbf{D}_{\omega} \cdot \nabla \langle c_{Ay} \rangle_{\omega}^{\gamma} \right) = \langle kc_{Ay} \rangle_{\eta\omega}, \text{ en la superficie divisoria,} \quad (2.61)$$

la cual es válida para procesos cuasiestacionarios con exceso de transporte superficial despreciable. Note que esta ecuación establece una discontinuidad en el flux de concentración debido al término de reacción química en la superficie divisoria. Conviene remarcar que el uso de este resultado sólo puede considerarse aceptable cuando las restricciones y suposiciones adoptadas sean válidas.

Para definir completamente el problema es necesario especificar cuál es la condición que aplica para el campo de concentración. La cual, en principio puede deducirse en base a suposiciones y restricciones de escala similares a las presentadas previamente, sin embargo, este análisis aún requiere más discusión y se presentará en un trabajo futuro. Por el momento, se impondrá la siguiente condición de continuidad de los campos promedio intrínseco de la concentración,

$$\langle c_{Ay} \rangle_{\eta}^{\gamma} = \langle c_{Ay} \rangle_{\omega}^{\gamma}, \text{ en la superficie divisoria.} \quad (2.62)$$

Hasta este punto, la condición de salto dada por la ecuación (2.61) no está cerrada, pues el término de reacción no se encuentra expresado en función de parámetros que sean medibles en las regiones homogéneas. Para ello, es necesario el desarrollo del problema de cerradura correspondiente, este es el objetivo del siguiente capítulo.

## 2.6.- Relación entre $\langle R_A \rangle_s$ y $R_{As}$ .

En el desarrollo de la condición de salto se definió al exceso de velocidad de reacción superficial como,

$$\int_{A_{\omega\eta}^*} \langle R_A \rangle_s dA = \int_{V_{\omega}} \langle R_{Ay} \rangle_{\gamma\kappa} dV - \int_{V_{\omega}} \langle R_{Ay} \rangle_{\omega}^{\gamma} dV, \quad (2.63)$$

para simplificar la nomenclatura, en la ecuación anterior se usaron las siguientes definiciones,

$$\langle R_{Ay} \rangle_{\gamma\kappa} = a_v(\mathbf{x}) k \langle c_{Ay} \rangle_{\gamma\kappa}, \quad (2.64)$$

$$\text{y} \quad \langle R_{Ay} \rangle_{\omega}^{\gamma} = a_{v\omega} k \langle c_{Ay} \rangle_{\omega}^{\gamma}. \quad (2.65)$$

Al despreciar los efectos de curvatura de la inter-región, la ecuación (2.63) se reduce a,

$$\langle R_A \rangle_s = \int_{-B}^{+B} \langle R_{Ay} \rangle_{\gamma\kappa} dz - \int_{-B}^0 \langle R_{Ay} \rangle_{\omega}^{\gamma} dz. \quad (2.66)$$

Lo que implica que el tamaño del radio de la región de promediado ( $r_0$ ) es mucho menor que el radio de curvatura de la inter-región ( $r_c$ ), es decir,  $r_0 \ll r_c$ .

En la Figura 2-4, se muestran algunas de las longitudes características a utilizar en esta demostración. En dicha figura la coordenada  $z$  es la distancia desde la superficie del medio poroso hasta la posición del centroide del volumen de promediado donde se encuentra alguna región homogénea. Por simplicidad, esta distancia se supuso igual para ambas regiones, pero el análisis puede extenderse sin mayores problemas a situaciones cuando no lo son. A diferencia del caso estudiado por Wood y col. (2000), en este caso la reacción química tiene lugar tanto en la superficie divisoria como dentro del medio poroso. A la escala puntual, la reacción química tiene lugar (dondequiera que exista superficie catalítica) a lo largo de una distancia igual a  $2\Delta^*$  y, para el caso de la frontera, se incluye en la Figura 2-4 una comparación con las otras longitudes características del sistema. Cabe mencionar que la distancia  $2\Delta^*$  será igual a  $2\Delta$  (Wood y col., 2000) si los efectos de curvatura locales pueden suponerse despreciables, como en el caso en que el medio poroso esté compuesto de cuadrados.

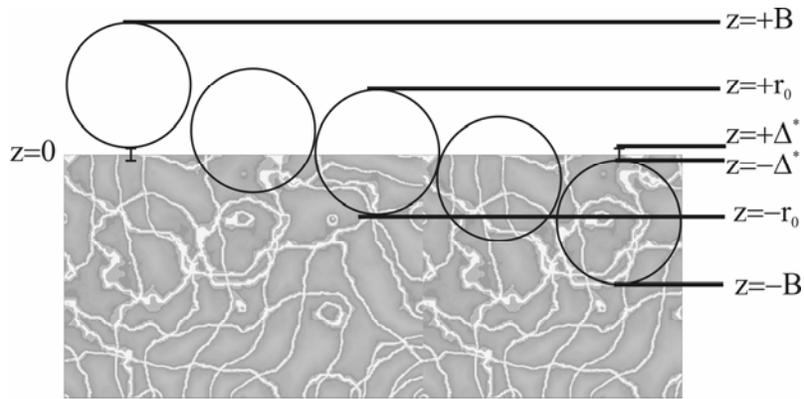
De acuerdo a la Figura 2-4, es posible descomponer el primer sumando del lado derecho de la ecuación (2.66) en tres integrales como se muestra a continuación,

$$\int_{-B}^{+B} \langle R_{Ay} \rangle^y dz = \int_{-B}^{-r_0} \langle R_{Ay} \rangle_{\gamma\kappa} dz + \int_{-r_0}^{+r_0} \langle R_{Ay} \rangle_{\gamma\kappa} dz + \int_{+r_0}^{+B} \langle R_{Ay} \rangle_{\gamma\kappa} dz . \quad (2.67)$$

Por otro lado, en la Figura 2-5a se muestra un esquema de la distribución de la reacción en la inter-región  $\omega - \eta$  para el caso de control por reacción en los microporos, mientras que en la Figura 2-5b se muestra el caso de control por difusión. De hecho, anteriormente Kramer (1966) sugiere que, en el límite cuando la reacción es extremadamente rápida respecto a la difusión, la contribución de la reacción en la superficie externa de un catalizador poroso adquiere importancia. Como puede notarse

de la Figura 2-5, en el intervalo  $z \in [+r_0, +B]$  la velocidad de reacción  $\langle R_{A\gamma} \rangle_{\gamma\kappa}$  es despreciable, mientras que en el intervalo  $z \in [-B, -r_0]$  adquiere valores cercanos a  $\langle R_{A\gamma} \rangle_{\omega}^{\gamma}$ , de manera que la ecuación (2.67) se reduce a,

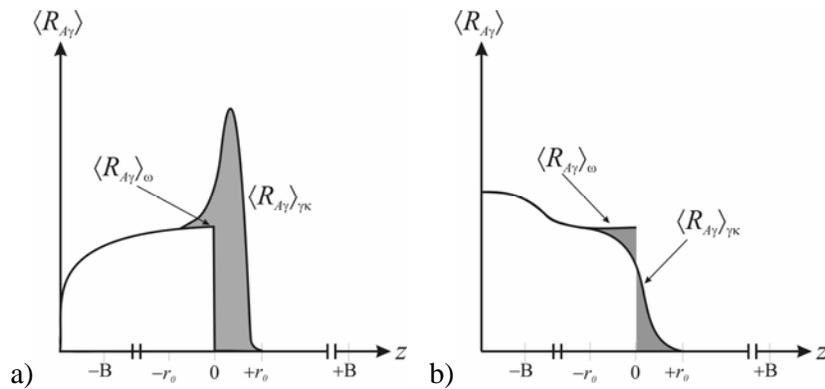
$$\int_{-B}^{+B} \langle R_{A\gamma} \rangle^{\gamma} dz = \int_{-B}^{-r_0} \langle R_{A\gamma} \rangle_{\omega}^{\gamma} dz + \int_{-r_0}^{+r_0} \langle R_{A\gamma} \rangle_{\gamma\kappa} dz . \quad (2.68)$$



**Figura 2-4:** Distancias características en la inter-región.

Por otro lado, el segundo sumando en la ecuación (2.66) puede descomponerse en,

$$\int_{-B}^0 \langle R_{A\gamma} \rangle_{\omega}^{\gamma} dz = \int_{-B}^{-r_0} \langle R_{A\gamma} \rangle_{\omega}^{\gamma} dz + \int_{-r_0}^0 \langle R_{A\gamma} \rangle_{\omega}^{\gamma} dz \quad (2.69)$$



**Figura 2-5:** Esquema de distribución de velocidad de reacción en la inter-región para el transporte dominado por a) reacción y b) difusión.

Al sustituir las ecuaciones (2.68) y (2.69) en la ecuación (2.66) se obtiene,

$$\begin{aligned} \langle R_A \rangle_s &= \int_{-r_0}^{+r_0} \langle R_A \rangle_{\gamma\kappa} dz - \int_{-r_0}^0 \langle R_{A\gamma} \rangle_{\omega}^{\gamma} dz \\ &= \int_{-r_0}^0 \left( \langle R_A \rangle_{\gamma\kappa} - \langle R_{A\gamma} \rangle_{\omega}^{\gamma} \right) dz + \int_0^{r_0} \langle R_{A\gamma} \rangle_{\omega}^{\gamma} dz . \end{aligned} \quad (2.70)$$

De acuerdo a la ecuación (2.70), el valor de  $\langle R_A \rangle_s$  corresponde al área sombreada en las gráficas de la Figura 2-5. De esta forma, el procedimiento de la Sección 4 de Wood y col. (2000) permite llegar a,

$$\langle R_A \rangle_s = \frac{1}{\mathcal{A}_{\eta\omega}} \int_{A_{\eta\omega}} R_{As} dA = \langle R_{As} \rangle_{\eta\omega} = \langle kc_{A\gamma} \rangle_{\eta\omega} , \quad (2.71)$$

lo cual concluye la demostración.

## Capítulo 3:

### Planteamiento y solución del problema de cerradura

#### 3.1.- Problemas puntual y promedio.

En el capítulo anterior se mostraron las ecuaciones que describen el problema puntual, mismas que fueron obtenidas por Wood y col. (2000),

$$\frac{\partial c_{A\gamma}}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{D}_\gamma \nabla c_{A\gamma}), \quad \text{en la fase } -\gamma, \quad (3.1)$$

$$\text{C.F.} \quad -\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla c_{A\gamma} = kc_{A\gamma}, \quad \text{en la interfase } \gamma - \kappa. \quad (3.2)$$

Por otro lado, al usar el método del promedio volumétrico (Whitaker, 1999) fue posible obtener la siguiente ecuación de transferencia de masa generalizada (ETMG) que no tiene restricciones de escala y es por tanto válida tanto en las regiones homogéneas como en la inter-región,

$$\varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}{\partial t} = \nabla \cdot (\varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma) - ka_v(\mathbf{x}) \langle c_{A\gamma} \rangle_{\gamma\kappa}, \quad (3.3)$$

donde se introdujeron algunos términos dependientes de la posición, los cuales en las regiones homogéneas se reducen a

$$\varepsilon_\gamma(\mathbf{x}); a_v(\mathbf{x}); \mathbf{D}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1; 0; \mathcal{D}_\gamma \mathbf{I} & \text{en la región homogénea } -\eta \\ \varepsilon_{\gamma\omega}; a_{v\omega}; \mathbf{D}_\omega & \text{en la región homogénea } -\omega \end{cases}. \quad (3.4)$$

A partir de la ecuación (3.3) fue posible obtener, al imponer las restricciones de escala correspondientes, las ecuaciones de medio efectivo en las regiones homogéneas,

$$\varepsilon_{\gamma\omega} \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma}{\partial t} = \nabla \cdot (\varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma) - a_{v\omega} k \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma, \quad \text{en la región homogénea } -\omega, \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma), \quad \text{en la región homogénea } -\eta. \quad (3.6)$$

Por otro lado, siguiendo la metodología de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a) fue posible desarrollar la siguiente condición de salto del flux de masa,

$$-\mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left( \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma \right) + \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left( \varepsilon_\gamma \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma \right) = \langle kc_{A\gamma} \rangle_{\eta\omega}, \text{ en la inter-región } \omega - \eta. \quad (3.7)$$

Y además se impuso la siguiente condición de continuidad para el campo de concentración,

$$\langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma = \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma, \quad \text{en la inter-región } \omega - \eta. \quad (3.8)$$

Debe mencionarse que una alternativa a este planteamiento consiste en imponer una condición de continuidad del flux de masa y desarrollar una condición de salto para la concentración. Sin embargo, la presencia de una reacción en la inter-región hace más atractiva la condición de un salto en el flux que en la concentración. De hecho, el imponer o no una condición de discontinuidad de masa, debe plantearse en términos de suposiciones y restricciones de escala, lo cual forma parte de un trabajo futuro.

Por otro lado, la condición de (3.7) no está cerrada, por lo que en este capítulo se obtendrá, siguiendo la metodología de Wood y col. (2000), su forma cerrada.

### 3.2.- Planteamiento del problema de cerradura.

El primer paso consiste en retomar las definiciones de las descomposiciones espaciales de la concentración (Gray, 1975) y del coeficiente de velocidad de reacción (Wood y col., 2000),

$$c_{A\gamma} = \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma + \tilde{c}_{A\gamma}, \quad (3.9)$$

$$k = \langle k \rangle_{\eta\omega} + \tilde{k}. \quad (3.10)$$

Al sustituir estas definiciones en el término del lado derecho de la condición (3.7) se obtiene,

$$\langle kc_{A\gamma} \rangle_{\eta\omega} = \left\langle \langle k \rangle_{\eta\omega} \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma + \tilde{c}_{A\gamma} \langle k \rangle_{\eta\omega} + \tilde{k} \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma + \tilde{k} \tilde{c}_{A\gamma} \right\rangle_{\eta\omega}. \quad (3.11)$$

Siguiendo un procedimiento similar al de Whitaker (Cap. 3, 1999), la ecuación anterior se reduce a,

$$\langle kc_{A\gamma} \rangle_{\eta\omega} = \langle k \rangle_{\eta\omega} \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma + \langle \tilde{k} \tilde{c}_{A\gamma} \rangle_{\eta\omega}. \quad (3.12)$$

Como se puede notar, lo que se necesita para cerrar esta última ecuación, es una expresión de las desviaciones espaciales de la concentración en la inter-región. Para ello, es necesario plantear el problema de valor a la frontera para estas desviaciones en la inter-región.

La ecuación diferencial para las desviaciones, válida en cualquier punto donde se encuentre presente la fase- $\gamma$ , se obtiene de restar las ecuaciones puntual y promedio.

Para lo cual, es conveniente expresar la ecuación (3.3) como

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}{\partial t} &= \mathcal{D}_\gamma \nabla^2 \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma + \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \cdot \left( \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \right) \\ &+ \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \left( \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} - \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \right) d\mathbf{A} \right] \\ &+ \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \tilde{c}_{A\gamma} d\mathbf{A} \right] - \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) k_{a_v}(\mathbf{x}) \langle c_{A\gamma} \rangle_{\gamma\kappa}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

De manera que, al restarle a la ecuación (3.1) la ecuación anterior se transforma en

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{c}_{A\gamma}}{\partial t} &= \mathcal{D}_\gamma \nabla^2 \tilde{c}_{A\gamma} - \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \cdot \left( \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \right) \\ &- \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \left( \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} - \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \right) d\mathbf{A} \right], \text{ en la fase } \gamma. \\ &- \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \tilde{c}_{A\gamma} d\mathbf{A} \right] + \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) k_{a_v}(\mathbf{x}) \langle c_{A\gamma} \rangle_{\gamma\kappa} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Sin embargo, se puede demostrar que si la siguiente restricción se satisface

$$\frac{t^* \mathcal{D}_\gamma}{l_\gamma^2} \gg 1, \quad (3.15)$$

la ecuación (3.14) puede considerarse en estado cuasiestacionario,

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_\gamma \nabla^2 \tilde{c}_{A\gamma} &= \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \cdot \left( \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \right) \\ &+ \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \left( \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} - \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \right) d\mathbf{A} \right] \\ &+ \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \tilde{c}_{A\gamma} d\mathbf{A} \right] - \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) k_{a_v}(\mathbf{x}) \langle c_{A\gamma} \rangle_{\gamma\kappa}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

En la restricción (3.15),  $t^*$  es un tiempo característico, el cual está restringido de acuerdo a (Whitaker, 1999),

$$\frac{\mathcal{D}_\gamma t^*}{L_C L_{C1}} = \mathbf{O}(1). \quad (3.17)$$

Es conveniente ahora deducir las condiciones a la frontera que debe satisfacer la ecuación (3.16). Para determinar la condición en la interfase sólido-fluido, se sustituye la descomposición espacial de la concentración, dada en la ecuación (3.9), en la condición de frontera local (2.2), obteniéndose,

$$-\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} - \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \tilde{c}_{A\gamma} = k \left( \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} + \tilde{c}_{A\gamma} \right). \quad (3.18)$$

Al hacer un análisis de órdenes de magnitud a esta ecuación, resulta (Whitaker, 1999),

$$\tilde{c}_{A\gamma} = \mathbf{O} \left[ \frac{kl_\gamma / \mathcal{D}_\gamma}{1 + \mathbf{O} \left( \frac{kl_\gamma}{\mathcal{D}_\gamma} \right)}, \frac{l_\gamma / L_C}{1 + \mathbf{O} \left( \frac{kl_\gamma}{\mathcal{D}_\gamma} \right)} \right] \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma}. \quad (3.19)$$

Aquí se supuso que la longitud característica asociada con los cambios de  $\langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma$  es  $L_C$ .

Este estimado indica que

$$\tilde{c}_{A\gamma} \ll \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma, \quad (3.20)$$

siempre que se cumplan las siguientes restricciones de escala,

$$\frac{kl_\gamma}{\mathcal{D}_\gamma} \ll 1, \quad (3.21)$$

$$\frac{l_\gamma}{L_C} \ll 1. \quad (3.22)$$

La restricción sobre el término de reacción se satisface, en general, debido a la disparidad de restricciones de escala y además porque el límite de aplicación práctica del módulo de Thiele (Whitaker, 1999) está dado por

$$\sqrt{\frac{ka_{\text{vd}} r_p^2}{\varepsilon_{\gamma\omega} D_\omega}} \leq 10. \quad (3.23)$$

Debido a la ecuación (3.20), la condición de frontera interfacial se reduce a,

$$-\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} - \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \tilde{c}_{A\gamma} = k \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma}, \quad \text{en la interfase } \gamma-\kappa. \quad (3.24)$$

También, como consecuencia de la ecuación (3.20) es posible expresar la concentración promedio en el área (ecuación (2.23)) como,

$$\langle c_{A\gamma} \rangle_{\gamma\kappa} = \frac{1}{\mathcal{A}_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} dA. \quad (3.25)$$

Además, la restricción de escala dada por la ecuación (3.22) permite afirmar que

$$\underbrace{\nabla^2 \tilde{c}_{A\gamma}}_{\text{difusión}} \gg \underbrace{\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \tilde{c}_{A\gamma} dA \right]}_{\text{difusión no-local}}. \quad (3.26)$$

Por lo que, la ecuación (3.16) es ahora,

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_\gamma \nabla^2 \tilde{c}_{A\gamma} = & \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \cdot \left( \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \right) - \frac{\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) k a_v(\mathbf{x})}{\mathcal{A}_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} dA \\ & + \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \left( \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} - \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \right) dA \right]. \end{aligned} \quad (3.27)$$

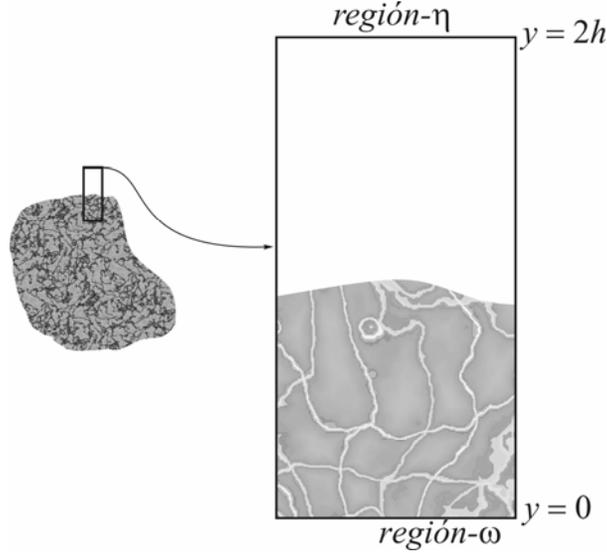
En este momento es conveniente establecer que el problema de valor a la frontera asociado con  $\tilde{c}_{A\gamma}$  se resolverá en una zona representativa (celda unitaria) de la inter-región como la que se muestra en la Figura 3-1. Dicha celda unitaria debe ser espacialmente periódica a lo largo de la inter-región. De esta forma,  $A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})$  se refiere ahora a la superficie interfacial contenida en la celda unitaria.

El problema de valor a la frontera es ahora el siguiente,

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_\gamma \nabla^2 \tilde{c}_{A\gamma} = & \underbrace{\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \cdot \left( \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \right)}_{\text{fuente difusiva volumétrica}} - \underbrace{\frac{\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) k a_v(\mathbf{x})}{\mathcal{A}_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} dA}_{\text{fuente reactiva no-local}} \\ & + \underbrace{\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \left( \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} - \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \right) dA \right]}_{\text{fuente difusiva volumétrica no-local}}, \quad \text{en la fase } -\gamma, \\ & \underbrace{-\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma}}_{\text{fuente difusiva superficial}} - \underbrace{-\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \tilde{c}_{A\gamma}}_{\text{fuente reactiva superficial}} = \underbrace{k \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma}}_{\text{fuente reactiva superficial}}, \quad \text{en la interfase } \gamma-\kappa. \end{aligned} \quad (3.28)$$

$$\text{Periodicidad: } \tilde{c}_{A\gamma}(\mathbf{r} + \zeta_i) = \tilde{c}_{A\gamma}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (3.30)$$

La condición (3.30) implica que la celda unitaria debe ser espacialmente periódica a lo largo de la inter-región, el vector  $\mathbf{r}$  localiza algún punto en la superficie divisoria y  $\zeta_i$  son los vectores tangentes de la celda unitaria.



**Figura 3-1:** Zona representativa de la inter-región.

En las ecuaciones (3.28) y (3.29) se han identificado diversas fuentes reactivas y difusivas, de las cuales cabe distinguir entre las fuentes difusivas *superficiales* y *volumétricas*, cuyos órdenes de magnitud pueden no ser los mismos. Si este es el caso, la ecuación (3.28) puede reducirse a partir de la comparación de los estimados de orden de magnitud de las dos fuentes difusivas por unidad de volumen,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{orden de magnitud} \\ \text{de la fuente} \\ \text{difusiva superficial} \end{array} \right\} = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \left| \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_{\gamma} \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^{\gamma} \right| dA = \mathbf{O} \left( \frac{\mathcal{D}_{\gamma}}{l_{\gamma}} \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^{\gamma} \right), \quad (3.31)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{orden de magnitud} \\ \text{de la fuente} \\ \text{difusiva volumétrica} \end{array} \right\} = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{V_{\gamma}(\mathbf{x})} \left| (\varepsilon_{\gamma}(\mathbf{x}))^{-1} \nabla \varepsilon_{\gamma}(\mathbf{x}) \cdot \left( \mathcal{D}_{\gamma} \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^{\gamma} \right) \right| dV$$

$$= \mathbf{O} \left( \frac{\Delta \varepsilon_{\gamma} \mathcal{D}_{\gamma}}{\varepsilon_{\gamma} r_0} \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^{\gamma} \right). \quad (3.32)$$

Las ecuaciones anteriores permiten hacer el estimado de la razón entre las fuentes volumétrica y superficial como sigue,

$$\frac{\text{fuente volumétrica}}{\text{fuente superficial}} = \mathbf{O} \left( \frac{\Delta \varepsilon_\gamma l_\gamma}{\varepsilon_\gamma r_0} \right). \quad (3.33)$$

Por lo que, si la restricción de escala,

$$\frac{\Delta \varepsilon_\gamma l_\gamma}{\varepsilon_\gamma r_0} \ll 1, \quad (3.34)$$

se satisface, el problema de valor a la frontera para  $\tilde{c}_{A\gamma}$  se simplifica a,

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_\gamma \nabla^2 \tilde{c}_{A\gamma} = & \underbrace{-\frac{\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) k a_v(\mathbf{x})}{\mathcal{D}_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} dA}_{\text{fuente reactiva volumétrica no-local}} \\ & + \underbrace{\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{\mathcal{D}_{\gamma\kappa}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \left( \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} - \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \right) dA \right]}_{\text{fuente difusiva volumétrica no-local}}, \text{ en la fase-} \gamma, \quad (3.35) \end{aligned}$$

$$\text{C.F.1} \quad \underbrace{-\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma}}_{\text{fuente difusiva superficial}} - \underbrace{\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \tilde{c}_{A\gamma}}_{\text{fuente reactiva superficial}} = k \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma}, \text{ en } A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x}), \quad (3.36)$$

$$\text{Periodicidad:} \quad \tilde{c}_{A\gamma}(\mathbf{r} + \ell_i) = \tilde{c}_{A\gamma}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (3.37)$$

Por otro lado, como se indica en la Figura 3-1, el alto de la celda unitaria debe ser tal que para  $y \leq 0$  las propiedades corresponden a las de la región homogénea  $-\omega$ , mientras que para  $y \geq 2h$ , las propiedades correspondan a las de la región homogénea  $-\eta$ . De esta manera, se pueden imponer las siguientes condiciones de frontera,

$$\text{C.F.2} \quad \tilde{c}_{A\gamma} = \tilde{c}_{A\gamma\eta}, \quad \text{en } y = 2h, \quad (3.38)$$

$$\text{C.F.3} \quad \tilde{c}_{A\gamma} = \tilde{c}_{A\gamma\omega}, \quad \text{en } y = 0. \quad (3.39)$$

Sin embargo, en el capítulo anterior se encontró que las desviaciones espaciales en la región homogénea  $-\eta$  son despreciables, por lo que el problema de valor a la frontera es ahora,

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_\gamma \nabla^2 \tilde{c}_{A\gamma} = & -\frac{\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) k a_v(\mathbf{x})}{\mathcal{A}_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} dA \\ & + \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{\mathcal{A}_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \left( \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} - \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \right) dA \right], \end{aligned} \quad \text{en la fase-}\gamma, \quad (3.40)$$

$$\text{C.F.1} \quad -\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} - \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \tilde{c}_{A\gamma} = k \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma}, \quad \text{en } A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x}), \quad (3.41)$$

$$\text{C.F.2} \quad \tilde{c}_{A\gamma} = 0, \quad \text{en } y = 2h, \quad (3.42)$$

$$\text{C.F.3} \quad \tilde{c}_{A\gamma} = \tilde{c}_{A\gamma w}, \quad \text{en } y = 0, \quad (3.43)$$

$$\text{Periodicidad:} \quad \tilde{c}_{A\gamma}(\mathbf{r} + \zeta_i) = \tilde{c}_{A\gamma}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (3.44)$$

En este punto es conveniente notar que, mientras que la geometría en la que está definido el problema de valor a la frontera es invariante a una transformación del tipo  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \zeta_i$ , el problema de valor a la frontera no lo será a menos que  $\langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma}$  y su gradiente puedan tratarse como constantes. Para ello se consideran las siguientes expansiones en series de Taylor

$$\langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} = \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} + \mathbf{y}_\gamma \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} + \frac{1}{2} \mathbf{y}_\gamma \mathbf{y}_\gamma : \nabla \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} + \dots, \quad (3.45)$$

$$\nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} = \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} + \mathbf{y}_\gamma \cdot \nabla \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} + \dots \quad (3.46)$$

Al sustituir estas expresiones en las ecuaciones (3.40) y (3.41) resultan

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_\gamma \nabla^2 \tilde{c}_{A\gamma} = & -\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) k a_v(\mathbf{x}) \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \\ & - \frac{\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) k a_v(\mathbf{x})}{\mathcal{A}_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \left[ \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{y}_\gamma dA \right] \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \\ & - \frac{\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) k a_v(\mathbf{x})}{\mathcal{A}_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \left[ \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \frac{1}{2} \mathbf{y}_\gamma \mathbf{y}_\gamma dA \right] : \nabla \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}}, \quad \text{en la fase-}\gamma, \quad (3.47) \\ & - \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{\mathcal{A}_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \nabla \langle \mathbf{y}_\gamma \rangle \right] \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \\ & - \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{2} \nabla \langle \mathbf{y}_\gamma \mathbf{y}_\gamma \rangle \right] : \nabla \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} + \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 -\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \tilde{c}_{A\gamma} &= k \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} + \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} + \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \mathbf{y}_\gamma \cdot \nabla \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \\
 &+ k \mathbf{y}_\gamma \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} + \frac{k}{2} \mathbf{y}_\gamma \mathbf{y}_\gamma : \nabla \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} + \dots, \text{ en } A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x}).
 \end{aligned} \tag{3.48}$$

En la ecuación (3.47) se utilizaron las siguientes relaciones obtenidas por Quintard y Whitaker (1994)

$$\frac{1}{\mathcal{A}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \mathbf{y}_\gamma \, dA = -\nabla \langle \mathbf{y}_\gamma \rangle, \tag{3.49}$$

$$\frac{1}{\mathcal{A}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \mathbf{y}_\gamma \mathbf{y}_\gamma \, dA = -\nabla \langle \mathbf{y}_\gamma \mathbf{y}_\gamma \rangle. \tag{3.50}$$

En este momento, es conveniente llevar a cabo un análisis de orden de magnitud en cada término del lado derecho de la ecuación (3.47) para obtener

$$\begin{aligned}
 &-\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) k a_v(\mathbf{x}) \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} - \frac{\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) k a_v(\mathbf{x})}{\mathcal{A}_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \left[ \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{y}_\gamma \, dA \right] \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \\
 &-\frac{\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) k a_v(\mathbf{x})}{\mathcal{A}_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \left[ \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \frac{1}{2} \mathbf{y}_\gamma \mathbf{y}_\gamma \, dA \right] : \nabla \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} - \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle \mathbf{y}_\gamma \rangle \right] \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \\
 &-\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{2} \nabla \langle \mathbf{y}_\gamma \mathbf{y}_\gamma \rangle \right] : \nabla \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} = \mathbf{O} \left( \frac{k a_v \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma}{\varepsilon_\gamma} \right) + \mathbf{O} \left( \frac{k a_v r_0 \Delta \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma}{L_C \varepsilon_\gamma} \right) \\
 &+ \mathbf{O} \left( \frac{k a_v r_0^2 \Delta \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma}{\varepsilon_\gamma L_C L_{C_1}} \right) + \mathbf{O} \left( \frac{\mathcal{D}_\gamma \Delta (\nabla \langle \mathbf{y}_\gamma \rangle) \Delta \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma}{\varepsilon_\gamma r_0 L_C} \right) + \mathbf{O} \left( \frac{\mathcal{D}_\gamma \Delta (\nabla \langle \mathbf{y}_\gamma \mathbf{y}_\gamma \rangle) \Delta \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma}{\varepsilon_\gamma r_0 L_C L_{C_1}} \right).
 \end{aligned} \tag{3.51}$$

En la ecuación anterior se usó  $\mathbf{O}(\mathbf{y}_\gamma) = r_0$ . De esta forma, note que si se satisfacen las

siguientes restricciones de escala,

$$\frac{r_0}{L_C} \ll 1, \quad \frac{r_0^2}{L_C L_{C_1}} \ll 1. \tag{3.52}$$

Se puede concluir que

$$\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) k a_v(\mathbf{x}) \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \gg \frac{\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) k a_v(\mathbf{x})}{\mathcal{A}_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \left[ \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{y}_\gamma \, dA \right] \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}}, \tag{3.53}$$

$$\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) k a_v(\mathbf{x}) \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \gg \frac{\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) k a_v(\mathbf{x})}{\mathcal{A}_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \left[ \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \frac{1}{2} \mathbf{y}_\gamma \mathbf{y}_\gamma \, dA \right] : \nabla \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}}. \tag{3.54}$$

Al usar estos resultados en la ecuación (3.47) permite expresarla como

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_\gamma \nabla^2 \tilde{c}_{A_\gamma} = & -\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) k a_\nu(\mathbf{x}) \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} - \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle \mathbf{y}_\gamma \rangle \right] \cdot \nabla \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \\ & - \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{2} \nabla \langle \mathbf{y}_\gamma \mathbf{y}_\gamma \rangle \right] : \nabla \nabla \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}}, \text{ en la fase } -\gamma. \end{aligned} \quad (3.55)$$

Nótese que los términos de orden superior no fueron incluidos en la ecuación anterior.

Por otro lado, el llevar a cabo un análisis de orden de magnitud en cada término en el lado derecho de la ecuación (3.48) da como resultado

$$\begin{aligned} & k \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} + \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} + \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \mathbf{y}_\gamma \cdot \nabla \nabla \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} + k \mathbf{y}_\gamma \cdot \nabla \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \\ & + \frac{k}{2} \mathbf{y}_\gamma \mathbf{y}_\gamma : \nabla \nabla \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} = \mathbf{O} \left( k \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma \right) + \mathbf{O} \left( \frac{\mathcal{D}_\gamma \Delta \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma}{L_C} \right) \\ & + \mathbf{O} \left( \frac{\mathcal{D}_\gamma \mathbf{r}_0 \Delta \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma}{L_C L_{C_1}} \right) + \mathbf{O} \left( \frac{k r_0 \Delta \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma}{L_C} \right) + \mathbf{O} \left( \frac{k r_0^2 \Delta \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma}{L_C L_{C_1}} \right). \end{aligned} \quad (3.56)$$

De esta forma, si se satisfacen las restricciones de escala en (3.52) y  $r_0 \ll L_{C_1}$ , las siguientes desigualdades son válidas

$$\begin{aligned} & k \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \gg k \mathbf{y}_\gamma \cdot \nabla \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} ; k \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \gg \frac{k}{2} \mathbf{y}_\gamma \mathbf{y}_\gamma : \nabla \nabla \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} ; \\ & \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \gg \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \mathbf{y}_\gamma \cdot \nabla \nabla \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}}. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Y como consecuencia, la ecuación (3.48) se simplifica a

$$-\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \tilde{c}_{A_\gamma} = k \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} + \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}}, \text{ at } A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x}). \quad (3.58)$$

Como se mostró anteriormente, es conveniente comparar los estimados de la fuente difusiva en la ecuación (3.58) con los dos últimos términos en la ecuación (3.55). Estos estimados están dados por

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}} \left| \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \right| dA = \mathbf{O} \left( \frac{\mathcal{D}_\gamma \Delta \langle c_{A_\gamma} \rangle_\gamma}{L_C l_\gamma} \right), \quad (3.59)$$

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{V_\gamma(\mathbf{x})} \left| \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle \mathbf{y}_\gamma \rangle \right] \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \right|_{\mathbf{x}} dV = \mathbf{O} \left( \frac{\mathcal{D}_\gamma \Delta (\nabla \langle \mathbf{y}_\gamma \rangle) \Delta \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}{\varepsilon_\gamma r_0 L_C} \right), \quad (3.60)$$

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{V_\gamma(\mathbf{x})} \left| \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{2} \nabla \langle \mathbf{y}_\gamma \mathbf{y}_\gamma \rangle \right] : \nabla \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \right|_{\mathbf{x}} dV = \mathbf{O} \left( \frac{\mathcal{D}_\gamma \Delta (\nabla \langle \mathbf{y}_\gamma \mathbf{y}_\gamma \rangle) \Delta \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}{\varepsilon_\gamma r_0 L_C L_{C_1}} \right). \quad (3.61)$$

Por otro lado, al usar los estimados desarrollados por Pérez-Córdova y Ochoa-Tapia (1995),

$$\mathbf{O}(\langle \mathbf{y}_\gamma \rangle) = \mathbf{O} \left( \frac{3}{32} r_0 (1 - \varepsilon_{\gamma w}) \right) \sim \mathbf{O} \left( \frac{1}{10} r_0 (1 - \varepsilon_{\gamma w}) \right), \quad (3.62)$$

$$\mathbf{O}(\langle \mathbf{y}_\gamma \mathbf{y}_\gamma \rangle) = \mathbf{O} \left( (1 + \varepsilon_{\gamma w}) \frac{r_0^2}{10} \right), \quad (3.63)$$

los estimados en las ecuaciones (3.60) y (3.61) pueden expresarse como

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{V_\gamma(\mathbf{x})} \left| \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle \mathbf{y}_\gamma \rangle \right] \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \right|_{\mathbf{x}} dV = \mathbf{O} \left( \frac{(1 - \varepsilon_{\gamma w}) \mathcal{D}_\gamma r_0 \Delta \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}{10 \varepsilon_\gamma L_\varepsilon^2 L_C} \right), \quad (3.64)$$

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{V_\gamma(\mathbf{x})} \left| \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{2} \nabla \langle \mathbf{y}_\gamma \mathbf{y}_\gamma \rangle \right] : \nabla \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \right|_{\mathbf{x}} dV = \mathbf{O} \left( \frac{(1 + \varepsilon_{\gamma w}) \mathcal{D}_\gamma r_0^2 \Delta \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}{10 \varepsilon_\gamma L_\varepsilon^2 L_C L_{C_1}} \right). \quad (3.65)$$

De manera que si se satisfacen las siguientes restricciones de escala,

$$\frac{10 \varepsilon_\gamma L_\varepsilon^2}{(1 - \varepsilon_{\gamma w}) l_\gamma r_0} \gg 1; \quad \frac{10 \varepsilon_\gamma L_\varepsilon^2 L_{C_1}}{(1 + \varepsilon_{\gamma w}) r_0^2 l_\gamma} \gg 1, \quad (3.66)$$

el problema de las desviaciones espaciales se expresa como

$$\mathcal{D}_\gamma \nabla^2 \tilde{c}_{A\gamma} = \underbrace{-\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) k a_v(\mathbf{x}) \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}_{\text{fuente reactiva volumétrica}} \Big|_{\mathbf{x}}, \quad \text{en la fase-} \gamma, \quad (3.67)$$

$$\text{C.F.1} \quad \underbrace{-\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}_{\text{fuente difusiva superficial}} \Big|_{\mathbf{x}} - \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \tilde{c}_{A\gamma} = \underbrace{k \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}_{\text{fuente reactiva superficial}} \Big|_{\mathbf{x}}, \quad \text{en } A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x}), \quad (3.68)$$

$$\text{C.F.2} \quad \tilde{c}_{A\gamma} = 0, \quad \text{en } y = 2h, \quad (3.69)$$

$$\text{C.F.3} \quad \tilde{c}_{A\gamma} = \tilde{c}_{A\gamma w}, \quad \text{en } y = 0, \quad (3.70)$$

---


$$\text{Periodicidad: } \tilde{c}_{A\gamma}(\mathbf{r} + \ell_i) = \tilde{c}_{A\gamma}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (3.71)$$

Dada la linealidad del problema de valor a la frontera, se propone una solución en función de las fuentes del tipo,

$$\tilde{c}_{A\gamma} = s_\gamma \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} + \mathbf{b}_\gamma \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}}, \quad (3.72)$$

donde  $s_\gamma$  y  $\mathbf{b}_\gamma$  son las variables de cerradura. La sustitución de la ecuación anterior en las ecuaciones (3.67)-(3.71) da lugar a los siguientes dos problemas de valor a la frontera,

*Problema I*

$$\mathcal{D}_\gamma \nabla^2 s_\gamma = -\frac{ka_v(\mathbf{x})}{\varepsilon_\gamma(\mathbf{x})}, \text{ en la fase- } \gamma, \quad (3.73)$$

$$-\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \nabla s_\gamma = \frac{k}{\mathcal{D}_\gamma}, \text{ en } A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x}), \quad (3.74)$$

$$s_\gamma = 0, \text{ en } y = 2h, \quad (3.75)$$

$$\text{Periodicidad } s_\gamma(\mathbf{r} + \ell_i) = s_\gamma(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (3.76)$$

*Problema II*

$$\nabla^2 \mathbf{b}_\gamma = 0, \text{ en la fase- } \gamma, \quad (3.77)$$

$$-\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \nabla \mathbf{b}_\gamma = \mathbf{n}_{\gamma\kappa}, \text{ en } A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x}), \quad (3.78)$$

$$\mathbf{b}_\gamma = 0, \text{ en } y = 2h, \quad (3.79)$$

$$\text{Periodicidad } \mathbf{b}_\gamma(\mathbf{r} + \ell_i) = \mathbf{b}_\gamma(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (3.80)$$

Junto con,

$$s_\gamma \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma + \mathbf{b}_\gamma \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma = \tilde{c}_{A\gamma w}, \text{ en } y = 0. \quad (3.81)$$

Antes de continuar en el desarrollo del problema de cerradura, es conveniente obtener la forma cerrada de la condición de salto, ya que de esa manera se estará en posición de determinar si es necesario resolver los dos problemas arriba presentados o sólo uno de ellos.

### 3.3.- Forma cerrada de la condición de salto.

Debe recordarse que el propósito de resolver el problema de cerradura es transferir información de la escala local a la promedio a través de un filtro, que en este caso es la integral en la superficie  $A_{\eta\omega}$  en el segundo término del lado derecho de la ecuación (3.12). En la sección anterior se obtuvo una propuesta para resolver el problema de cerradura [ecuación (3.72)], por lo que sustituyéndola en la ecuación (3.12) se obtiene,

$$\langle kc_{A\gamma} \rangle_{\eta\omega} = \langle k \rangle_{\eta\omega} \langle c_{A\gamma} \rangle_s^\gamma + \langle \tilde{k}s_\gamma \rangle_{\eta\omega} \langle c_{A\gamma} \rangle_s^\gamma + \langle \tilde{k}\mathbf{b}_\gamma \rangle_{\eta\omega} \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_s^\gamma. \quad (3.82)$$

Al hacer un análisis de orden de magnitud del último término en el lado derecho de la ecuación anterior se obtiene,

$$\langle \tilde{k}\mathbf{b}_\gamma \rangle_{\eta\omega} \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_s^\gamma = \mathbf{O} \left( \frac{l_\gamma}{L} k \langle c_{A\gamma} \rangle_s^\gamma \right). \quad (3.83)$$

En la ecuación anterior se supuso que  $\tilde{k} = \mathbf{O}(k)$  y, a partir del *Problema II* se tiene que  $\mathbf{b}_\gamma = \mathbf{O}(l_\gamma)$ . Por otro lado, el estimado de orden de magnitud del primer término del lado derecho de la ecuación (3.82) es,

$$\langle k \rangle_{\eta\omega} \langle c_{A\gamma} \rangle_s^\gamma = \mathbf{O} \left( k \langle c_{A\gamma} \rangle_s^\gamma \right). \quad (3.84)$$

De manera que, si se cumple la restricción  $l_\gamma / L \ll 1$  en la inter-región, la condición de salto se reduce a,

$$-\mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left( \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma \right) + \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left( \varepsilon_\gamma \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma \right) = K_{\text{eff}} \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma, \quad (3.85)$$

donde se definió un coeficiente de reacción efectivo como,

$$K_{\text{eff}} = \langle k \rangle_{\eta\omega} + \langle \tilde{k}s_\gamma \rangle_{\eta\omega}. \quad (3.86)$$

En la ecuación (3.85) se utilizó la condición de (3.8) la cual implica que

$$\langle c_{A\gamma} \rangle_s^\gamma = \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma = \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma, \text{ en la superficie divisoria.} \quad (3.87)$$

La ecuación (3.85) expresa que el flux de concentración es discontinuo debido a una reacción química en la frontera medio poroso-fluido, la cual se expresa, a diferencia de la ecuación (2.61), en términos de un coeficiente efectivo que se puede determinar a partir de la solución de un problema de cerradura (ecuación (3.86)). Es pertinente reconocer que la estructura de la condición de salto (3.85) fue reportada previamente por Aris (1975) a partir de la ponderación del flux en las bocas de los poros y la reacción química en la superficie catalítica externa.

Por otro lado, el salto en el flux en la ecuación (3.85) puede despreciarse cuando se cumple la siguiente desigualdad

$$\mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left( \varepsilon_\gamma \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma \right) \gg K_{eff} \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma \quad (3.88)$$

La expresión anterior puede ser resultado de suponer que la velocidad de reacción total que se lleva a cabo dentro de los microporos es mucho mayor que la velocidad total de reacción en la superficie externa del medio poroso (la inter-región),

$$\frac{1}{\mathcal{V}_\gamma} \int_{V_\gamma} a_{v\omega} k \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma dV \gg \frac{1}{\mathcal{V}_\gamma} \int_{A_{\eta\omega}} K_{eff} \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma dA. \quad (3.89)$$

Este es el caso en algunas aplicaciones prácticas en medios porosos (Aris, 1975). Bajo estas circunstancias, se obtiene la condición de continuidad del flux,

$$\mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left( \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma \right) = \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \left( \varepsilon_\gamma \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma \right). \quad (3.90)$$

Por último, como puede notarse de la ecuación (3.86), para obtener el coeficiente de reacción efectivo ( $K_{eff}$ ) es únicamente necesario resolver el *Problema I*, (ecuaciones (3.73)-(3.76)), lo cual se lleva a cabo en la siguiente sección.

### 3.4.- Solución del problema de cerradura.

Para llevar a cabo la solución del *Problema I*, se debe considerar la condición de (3.81), de donde se deduce la necesidad de conocer la solución del problema de cerradura en la

región homogénea  $-\omega$ . Para ello, conviene recordar que en la Sección 3.2 se obtuvo la ecuación (3.67) a partir de las ecuaciones válidas en la fase  $-\gamma$  y en todo el dominio, por lo que se puede aplicar en la región  $-\omega$ , debido a que las restricciones de escala necesarias para obtener esta ecuación son más fáciles de satisfacer en esta región. De esta forma, la ecuación diferencial que describe los cambios espaciales de la concentración en la región  $-\omega$  es,

$$\nabla^2 \tilde{c}_{A\gamma\omega} = -\frac{ka_{v\omega}}{\varepsilon_{\gamma\omega} \mathcal{D}_\gamma} \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma, \text{ en la fase } -\gamma. \quad (3.91)$$

Por otro lado, la condición de frontera (3.68) es válida dondequiera que exista una interfase sólido-fluido, por lo que se puede utilizar con seguridad en esta región,

$$-\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma - \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \nabla \tilde{c}_{A\gamma\omega} = \frac{k}{\mathcal{D}_\gamma} \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma, \text{ en } A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x}_\omega). \quad (3.92)$$

Para completar el planteamiento de este problema, se impone la condición de periodicidad,

$$\text{Periodicidad } \tilde{c}_{A\gamma\omega}(\mathbf{r} + \ell_i) = \tilde{c}_{A\gamma\omega}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3. \quad (3.93)$$

Este problema es idéntico al expresado en las ecuaciones (1.4-51) a (1.4-53) del texto de Whitaker (Cap. 1, 1999). Para resolver este problema se propone la siguiente solución,

$$\tilde{c}_{A\gamma\omega} = s_{\gamma\omega} \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma + \mathbf{b}_{\gamma\omega} \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma. \quad (3.94)$$

Al sustituir esta ecuación en el lado derecho de (3.81) se obtiene,

$$s_\gamma \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma + \mathbf{b}_\gamma \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma = s_{\gamma\omega} \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma + \mathbf{b}_{\gamma\omega} \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma, \quad \text{en } y = 0, \quad (3.95)$$

debe recordarse que en esta frontera es razonable suponer que  $\langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma = \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\omega$ , de manera que se extrae de esta última ecuación que,

$$s_\gamma = s_{\gamma\omega}, \quad \text{en } y = 0. \quad (3.96)$$

Por otro lado, dado que esta frontera es artificial, es aceptable imponer la condición,

$$\frac{\partial \tilde{c}_{A\gamma}}{\partial y} = \frac{\partial \tilde{c}_{A\gamma\omega}}{\partial y}, \quad \text{en } y = 0. \quad (3.97)$$

Lo que implica que en  $y=0$  no sólo se está suponiendo que el campo de las desviaciones espaciales es continuo, sino también su derivada. Al realizar un análisis similar al que nos llevó a la ecuación (3.96), resulta,

$$\frac{\partial s_\gamma}{\partial y} = \frac{\partial s_{\gamma\omega}}{\partial y}, \quad \text{en } y = 0. \quad (3.98)$$

Para obtener esta ecuación se utilizó implícitamente la restricción (3.22). Posteriormente se mostrará la ventaja que implica el considerar esta condición de frontera.

El problema de valor a la frontera para la variable  $s_{\gamma\omega}$  se obtiene al sustituir la ecuación (3.94) en las ecuaciones (3.91) a (3.93),

*Problema III,*

$$\nabla^2 s_{\gamma\omega} = -\frac{ka_{v\omega}}{\varepsilon_{\gamma\omega} \mathcal{D}_\gamma}, \quad \text{en la fase } -\gamma, \quad (3.99)$$

$$-\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \nabla s_{\gamma\omega} = \frac{k}{\mathcal{D}_\gamma}, \quad \text{en } A_{\gamma\kappa,\omega}, \quad (3.100)$$

$$\text{Periodicidad } s_{\gamma\omega}(\mathbf{r} + \ell_i) = s_{\gamma\omega}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3. \quad (3.101)$$

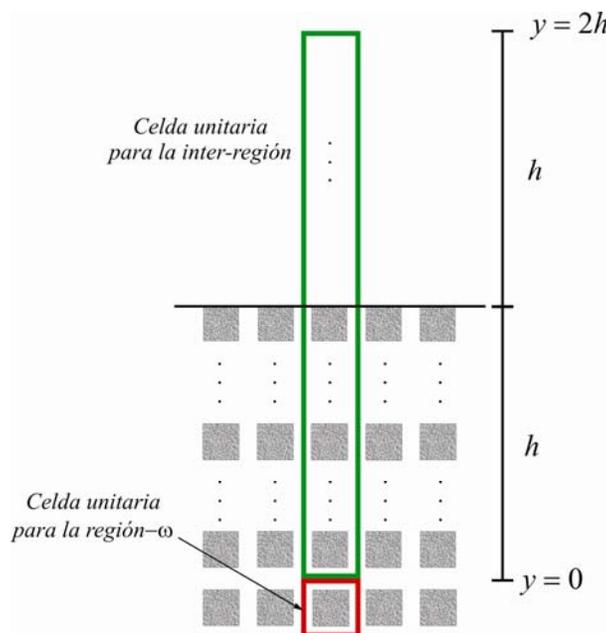
Los problemas *I* y *III* no están restringidos, hasta el momento, a algún tipo de geometría para el medio poroso. Además, es claro que el resolverlos en un modelo como el mostrado en la Figura 3-1 sería una labor por demás laboriosa y probablemente innecesaria. Por ello, se propone, como primera aproximación, el modelo simplificado mostrado en la Figura 3-2, donde además se identifican las celdas unitarias a utilizar para resolver los problemas de cerradura. En adelante se denotará a este modelo como *modelo de medio poroso centrado en las caras* y es similar al propuesto originalmente por Prat (1989, 1990, 1992).

Sin embargo, a partir de un análisis de simetría de los problemas de cerradura, se puede demostrar que es suficiente resolver un cuarto y la mitad de las celdas unitarias en la región homogénea  $-\omega$  y en la inter-región (ver Apéndice A-1), respectivamente. De dicho análisis, también se obtiene que,

$$\frac{\partial s_{y\omega}}{\partial y} = 0, \quad \text{en } y = 0. \quad (3.102)$$

Al sustituir este resultado en la ecuación (3.98), se obtiene,

$$\frac{\partial s_y}{\partial y} = 0, \quad \text{en } y = 0. \quad (3.103)$$



**Figura 3-2:** Modelo de medio poroso centrado en las caras y celdas unitarias para la inter-región y la región homogénea  $-\omega$ .

De esta forma, el *Problema I* está totalmente definido sin necesidad de resolver el *Problema III*, lo cual simplifica notablemente el análisis. A continuación, se presenta el planteamiento del *Problema I* para la mitad de la celda unitaria de la Figura 3-2 (las definiciones de las variables adimensionales se encuentran en el Apéndice A-1):

$$\frac{\partial^2 s_\gamma}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 s_\gamma}{\partial Y^2} = -\frac{f_1(Y_0)K_1}{f_2(Y_0)}\phi^2, \text{ en la fase fluida,} \quad (3.104)$$

$$\text{C.F.1} \quad \frac{\partial s_\gamma}{\partial X} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } X = \frac{A}{2}, Y_1(k) \leq Y \leq Y_2(k), \quad (3.105)$$

$$\frac{\partial s_\gamma}{\partial X} = 0, \text{ en } X = 0, Y_2(k-1) < Y \leq Y_1(k), k = 1, \dots, nc, Y_2(nc) \leq Y \leq 2H;$$

$$X = \frac{1}{2}, 0 \leq Y \leq 2H, \quad (3.106)$$

$$\frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } Y = H, 0 \leq X \leq \frac{A}{2}, \quad (3.107)$$

$$-\frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } Y = Y_1(k), 0 \leq X \leq \frac{A}{2}, \quad (3.108)$$

$$\text{C.F.2} \quad s_\gamma = 0, \text{ en } Y = 2H, 0 \leq X \leq \frac{1}{2}, \quad (3.109)$$

$$\text{C.F.3} \quad \frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} = 0, \text{ en } Y = 0, 0 \leq X \leq \frac{1}{2}, \quad (3.110)$$

donde  $nc$  es el número de cuadrados a usar en la celda unitaria;  $A$  es la relación del largo del lado de cada cuadrado de la celda unitaria entre el largo de la base de la misma y el parámetro  $\phi$  está definido como,

$$\phi^2 = \frac{\langle k \rangle_{\eta\omega} a_{v\omega} \ell^2}{\mathcal{D}_\gamma}. \quad (3.111)$$

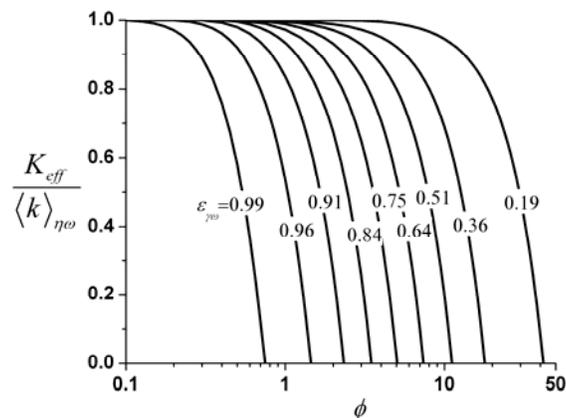
En la ecuación (3.104) el subíndice “0” indica que las propiedades están evaluadas en la superficie divisoria entre el medio microporoso y el fluido. Dicha superficie se define como el lugar donde la porosidad adquiere el valor del promedio de las porosidades de las regiones homogéneas. Esta discusión se retoma en el Capítulo 6.

### 3.5.- Resultados.

El problema de cerradura descrito por las ecuaciones (3.104) a (3.110) fue resuelto utilizando el método de diferencias finitas con inversión línea por línea (ver detalles en el Apéndice A-2) para la mitad de la celda unitaria bidimensional mostrada en la Figura

3-2. La solución se obtuvo de manera tal que no dependiera de parámetros numéricos ni del número de cuadrados dentro de la celda. Se obtuvieron resultados aceptables al usar una tolerancia de  $1 \times 10^{-4}$  y once cuadrados en la celda unitaria, es decir, once celdas unitarias computacionales (Apéndice A-2) y un número variable de puntos en las dos direcciones, de manera que se generen mallas computacionales autocontenidas y los resultados no dependan de la cantidad de nodos computacionales.

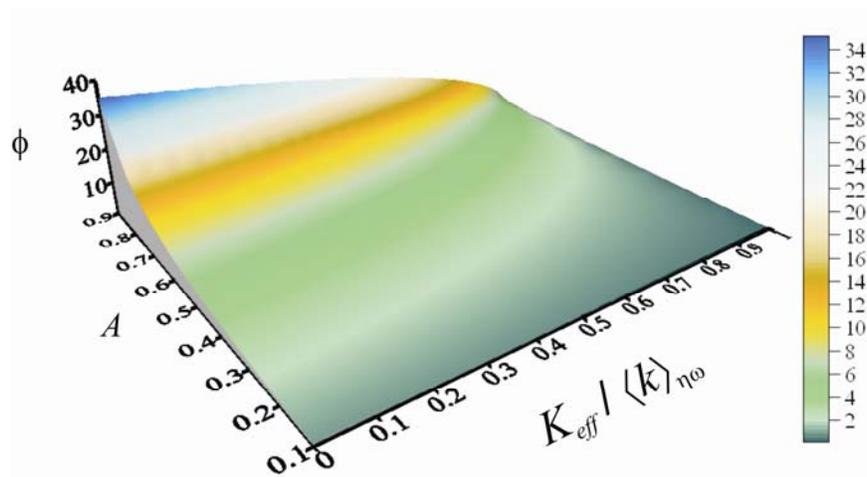
De esta forma se obtuvieron los resultados que se muestran en las Figuras 3-3 y 3-4. El comportamiento de los resultados es similar al de los obtenidos por Wood y col. (2000), es decir, el coeficiente efectivo depende fuertemente del valor de la porosidad ( $\varepsilon_{\gamma w} = 1 - A^2$ ) y del módulo de Thiele microscópico  $\phi$ . Se puede notar que, al aumentar la velocidad de reacción dentro de los microporos (aumento de  $\phi$ ) el coeficiente efectivo para la inter-región disminuye hasta llegar a cero; este efecto se ve retardado conforme se incrementa la fracción de sólido en la celda unitaria.



**Figura 3-3:** Coeficiente efectivo de reacción vs.  $\phi$  como función de la razón de aspecto  $A$ ; vista bidimensional.

Desde un punto de vista físico, los resultados ofrecen la posibilidad de analizar la importancia de la contribución de la velocidad de reacción en la condición de salto en la

inter-región entre un sistema formado por microporos y fluido. Con estos resultados, es posible evaluar los efectos que tiene la condición de salto sobre el flux interfacial partícula-fluido en un sistema macroscópico, ya que al no considerar los efectos de la convección, el sistema estudiado hasta este punto, puede tomarse como análogo al de partículas porosas, (es decir, sin microporos) inmersas en un reactor perfectamente mezclado. Esta analogía será válida únicamente cuando las restricciones de escala asociadas con los microporos pueden aplicarse a los poros de las partículas catalíticas.



**Figura 3-4:** Coeficiente efectivo de reacción vs.  $\phi$  como función de la razón de aspecto  $A$ ; vista tridimensional.

### 3.6.- Efectos de la microestructura.

Con el fin de aplicar la metodología desarrollada a modelos de medios porosos y fronteras más realistas y analizar su efecto en el coeficiente efectivo de reacción, se proponen dos modelos de celda unitaria, mostrados en las figuras 3-5 y 3-7, respectivamente. El primero, se obtiene de desplazar horizontalmente, una distancia  $\ell/2$ , una de cada dos filas de cuadrados del modelo de la Figura 3-2; mientras que el segundo, se obtiene de desplazar verticalmente, la misma distancia que en el caso

---

anterior, una de cada dos columnas de cuadrados del modelo de la Figura 3-2. De esta forma, el primer modelo consiste en un medio poroso centrado en el cuerpo horizontal, mientras que en el segundo caso corresponde a un medio poroso centrado en el cuerpo vertical.

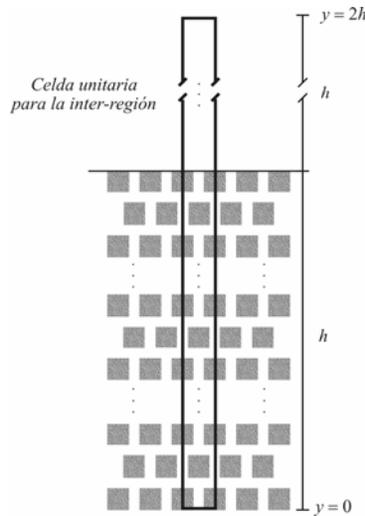
Como se mencionó anteriormente, los *Problemas I y III* no están restringidos a algún modelo de medio poroso o de geometría, por lo que se siguió un procedimiento similar al caso mostrado en la Figura 3-2 para resolver estos dos problemas; los detalles de las pruebas de simetría y antisimetría de estos problemas se encuentran en el Apéndice A-3. Las rutinas numéricas para resolverlos difieren de las del caso anterior, primordialmente en el tipo de celda unitaria computacional a utilizar para resolverlos.

Los resultados presentados en las figuras 3-6 y 3-8 se obtuvieron utilizando 6 y 11 celdas computacionales, es decir, 12 y 11 cuadrados en la dirección  $y$ ; la tolerancia se tomó de  $1 \times 10^{-5}$  sobre el coeficiente efectivo. Una comparación de los resultados que se obtienen con los tres tipos de modelos se incluye en el Apéndice A-4 para cada valor de  $A$ . En este apéndice, se incluye además un conjunto de gráficas tridimensionales de la variable de cerradura para los tres modelos de celda unitaria discutidos aquí. Las gráficas se obtuvieron usando mallas computacionales de 3200 y 5000 nodos. A continuación se presentan algunos comentarios sobre los resultados de las figuras 3-6 y 3-8

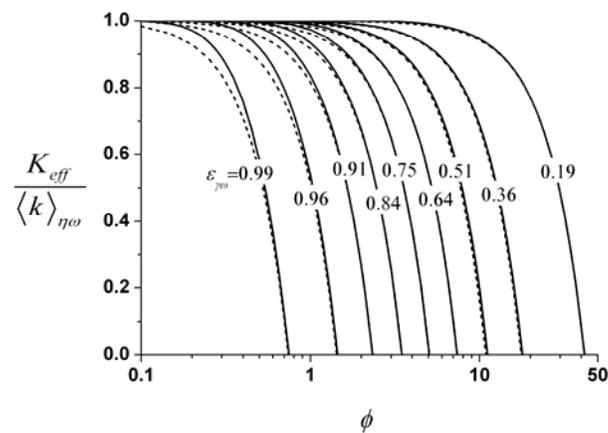
- El coeficiente efectivo de reacción química exhibe valores inferiores a los del caso anterior, sin embargo, este efecto no es muy significativo y disminuye conforme disminuye la porosidad.
- En el modelo centrado en cuerpo horizontal, la superficie divisoria es, como en el modelo centrado en el cuerpo, una línea; sin embargo, en el modelo centrado en el cuerpo vertical, la frontera se vuelve más irregular. Esto puede ser la razón del incremento en las diferencias en los resultados de este modelo.

Los resultados presentados en esta parte del trabajo confirman las observaciones efectuadas para el caso del coeficiente efectivo en las regiones homogéneas (Kim y col., 1987), es decir, que el efecto del tipo de microestructura no tiene un efecto significativo en el cálculo del coeficiente efectivo.

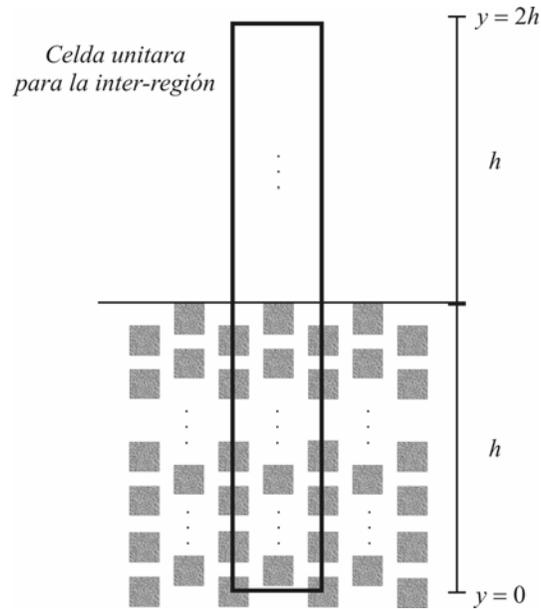
Por último, en el Apéndice A-4, se muestran gráficas tridimensionales del campo de la variable de cerradura para los tres modelos de medio poroso utilizados en esta parte del trabajo. Las gráficas se obtuvieron utilizando mallas computacionales de entre 3200 y 5000 puntos.



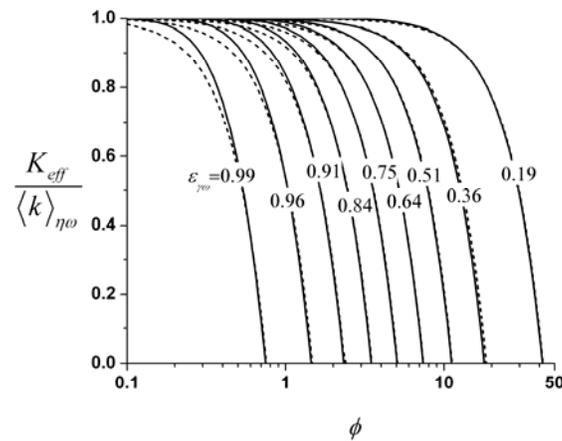
**Figura 3-5:** Modelo de medio poroso centrado en el cuerpo horizontal.



**Figura 3-6:** Comparación del coeficiente efectivo obtenido para un medio poroso centrado en el cuerpo horizontal ( $\text{---}$ ) y centrado en las caras ( $\text{—}$ ).



**Figura 3-7:** Modelo de medio poroso centrado en el cuerpo vertical.

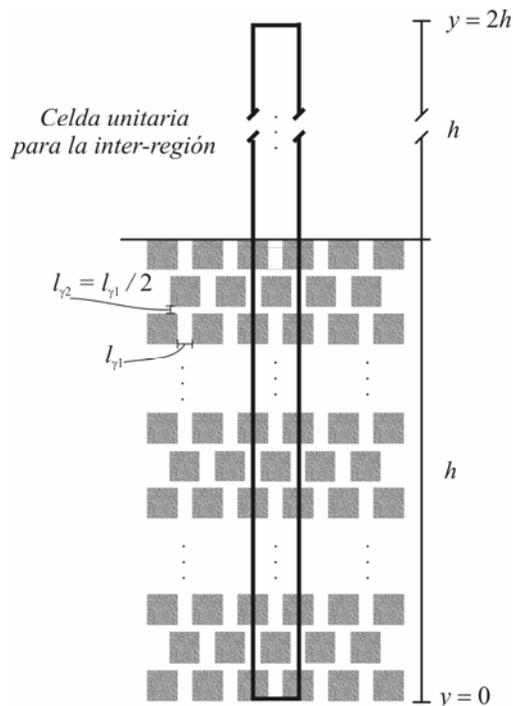


**Figura 3-8:** Comparación del coeficiente efectivo obtenido para un medio poroso centrado en el cuerpo vertical (---) y centrado en las caras (—).

Cabe mencionar que, aunque el campo difiere apreciablemente al cambiar la geometría, el coeficiente efectivo obtenido no difiere en esa misma proporción, esto se debe al paso de integración involucrado en el cálculo del mismo.

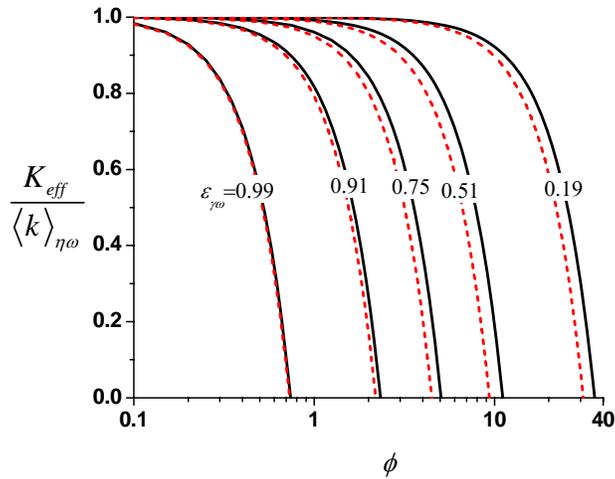
Para cerrar este capítulo, se presentan en la Figura 3-10, los resultados que se obtienen al tratar al medio microporoso como un medio bidisperso, es decir con dos distintos diámetros de microporo (ver Figura 3-9). Para elaborar este modelo de medio poroso, se tomó como base el modelo de la Figura 3-5, disminuyendo a la mitad la separación horizontal entre los cuadrados de medio sólido. Este modelo es similar al propuesto originalmente por Wakao y Smith (1962, 1964) y la idea de que el espaciamiento vertical entre los cuadrados sea distinto que el horizontal fue tomada del trabajo de Cunningham y Geankoplis (1968).

El efecto de reducir la distancia horizontal ( $l_{y2} = l_{y1} / 2$ , Figura 3-9), como es de suponerse, es más importante conforme aumenta la razón de aspecto  $A$ . Obteniéndose de esta forma una diferencia significativa con los resultados que se obtienen de usar el modelo de medio poroso consistente en un medio de frontera regular y, por ende, del modelo de medio poroso centrado en las caras.



**Figura 3-9:** Modelo de medio microporoso bidisperso, centrado en el cuerpo horizontal.

Esta es una muestra más de la versatilidad que ofrece el concepto de celda unitaria para el modelado de medios porosos. Resultados similares se pueden obtener realizando modificaciones análogas a los otros modelos de medio poroso arriba mencionados.



**Figura 3-10:** Coeficiente efectivo vs.  $\phi$  para un medio poroso centrado en el cuerpo horizontal con distribución bidispersa de diámetros de microporo (---) y su comparación con el caso monodisperso (—).

### 3.7.- Resumen de la metodología.

Para concluir estos dos capítulos, se presentan a continuación los pasos clave de la metodología utilizada:

1. Se utiliza el método del promedio volumétrico para obtener una ecuación de transferencia generalizada (ETMG), la cual no tiene restricciones de escala y por ello es válida en todo el dominio.
2. A partir de la ETMG se obtienen las ecuaciones de medio efectivo correspondientes a las regiones homogéneas al imponer las restricciones de escala apropiadas.

- 
3. Se define una región de promediado ( $V_\infty$ ) que contenga porciones de las regiones homogéneas y de la inter-región e integrar las ecuaciones obtenidas en los puntos anteriores en  $V_\infty$ .
  4. Se resta de la versión integrada de la ETMG las ecuaciones integradas de cada región.
  5. Se identifican las propiedades de exceso en la ecuación resultante.
  6. Se determina, donde sea necesario, la relación entre  $\langle \psi \rangle_s$  y  $\psi_s$ .
  7. Se usa la descomposición espacial de la variable de transporte (concentración, temperatura o velocidad) y del coeficiente local responsable del salto.
  8. Se plantea el problema de valor a la frontera de las desviaciones espaciales de la variable de transporte en la inter-región.
  9. Se propone (si la linealidad del problema lo permite) una solución del problema del punto anterior en términos de las fuentes de desviación y las variables de cerradura.
  10. Se sustituye la solución propuesta en el término que ocasiona el salto y se define, si es posible, un coeficiente efectivo que involucre la solución del problema de cerradura.
  11. Se resuelve(n) el (los) correspondiente(s) problema(s) de cerradura para predecir el coeficiente de salto.

Como puede notarse, los pasos 1-5 fueron originalmente propuestos por Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a). En su metodología el siguiente paso sería expresar a las propiedades de exceso en términos de las variables correspondientes a las regiones homogéneas mediante el uso de coeficientes ajustables. Es en este punto donde la metodología aquí propuesta se separa de la de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a) e incorpora la de Wood y

---

col. (2000) para completar el análisis a partir del planteamiento y solución del problema de cerradura correspondiente.

Los resultados de estos capítulos pueden extenderse a casos más complicados, como es el caso de la transferencia difusiva y convectiva de masa entre un medio poroso y un fluido (*Escala II*, Figura 2-1) esto se lleva a cabo en el Capítulo 7 incluyendo efectos de adsorción. Además, la idea de desarrollar condiciones de salto cerradas se extiende en la Parte II de este trabajo, al caso de transporte de cantidad de movimiento. De esta manera, la metodología propuesta en estos primeros capítulos constituye la base para el resto del análisis en este trabajo.

Antes de proseguir con el problema de transferencia de cantidad de movimiento, resulta pertinente obtener la forma cerrada de la ecuación de transferencia de masa generalizada, la cual es válida en todo el dominio. Este análisis es conveniente para comprender el efecto que tienen las suposiciones que permiten calcular los coeficientes efectivos dependientes de la posición.

---

## Capítulo 4:

### Ecuación de transferencia de masa generalizada cerrada para difusión pasiva en la frontera fluido-medio poroso.

En los dos capítulos anteriores se analizó el fenómeno de transferencia difusiva de masa con reacción de primer orden en la frontera medio microporoso-fluido. Para ello, se desarrolló la condición de salto correspondiente y se resolvió el problema de cerradura asociado. En la Sección 2.3, se introdujo además, una ecuación de transferencia de masa generalizada (la cual no está cerrada) que constituye una pieza clave en el desarrollo de la condición de salto. En este capítulo se obtiene la forma cerrada de la ecuación de transferencia generalizada, para posteriormente presentar los perfiles de concentración y los valores del flux de masa en la inter-región predichos con este modelo en la frontera entre un medio poroso y un fluido. Para ello, se plantean y resuelven los problemas de cerradura asociados para el proceso de transferencia de masa mediante difusión pasiva. Este tipo de modelo ha sido llamado por algunos autores (Arquis y Caltagirone, 1984; Beckermann y col., 1987, 1988; Gobin y col., 1998; Goyeau y col., 2003) como modelo de un solo dominio (*One domain approach*). Mientras que el modelo que involucra el uso de ecuaciones de medio efectivo en las regiones homogéneas y condiciones de salto en las fronteras se le ha llamado modelo de dos dominios (*Two domain approach*).

A pesar que el uso de modelos que implican una sola ecuación para describir el transporte en todo el dominio ha sido extenso, la mayoría de los trabajos emplean ecuaciones empíricas para describir los cambios espaciales de coeficientes efectivos (difusividad, conductividad, permeabilidad) y de carácter geométrico (porosidad, área interfacial). Por ello, en este capítulo se predicen dichos cambios a partir de la solución de los correspondientes problemas de cerradura.

#### 4.1.- Ecuación de transferencia de masa generalizada.

Con el fin de analizar el transporte difusivo de masa sin la influencia de algún mecanismo de consumo de materia (por ejemplo, adsorción o reacción química en la interfase sólido-fluido), se presentan las siguientes ecuaciones puntuales que describen el transporte difusivo de masa de la especie  $A$  desde el seno del fluido (fase  $-\gamma$ ) hacia un medio poroso

$$\frac{\partial c_{A\gamma}}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{D}_\gamma \nabla c_{A\gamma}), \text{ en la fase } -\gamma, \quad (4.1)$$

$$-\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla c_{A\gamma} = 0, \text{ en la interfase } \gamma - \kappa, \quad (4.2)$$

donde la fase sólida es referida como la fase  $-\kappa$ , la cual se supone impermeable de acuerdo a la ecuación (4.2). Al igual que en el caso anterior, se supondrá que el mismo fluido se encuentra dentro (región  $-\omega$ ) y fuera (región  $-\eta$ ) del medio poroso (Figura 4-1). Bajo esta suposición, la ecuación (4.1) es válida dondequiera que esté presente la fase  $-\gamma$ . Note que las ecuaciones (4.1) y (4.2) son idénticas a las ecuaciones (2.1) y (2.2) al fijar  $k = 0$  en la condición de frontera interfacial.

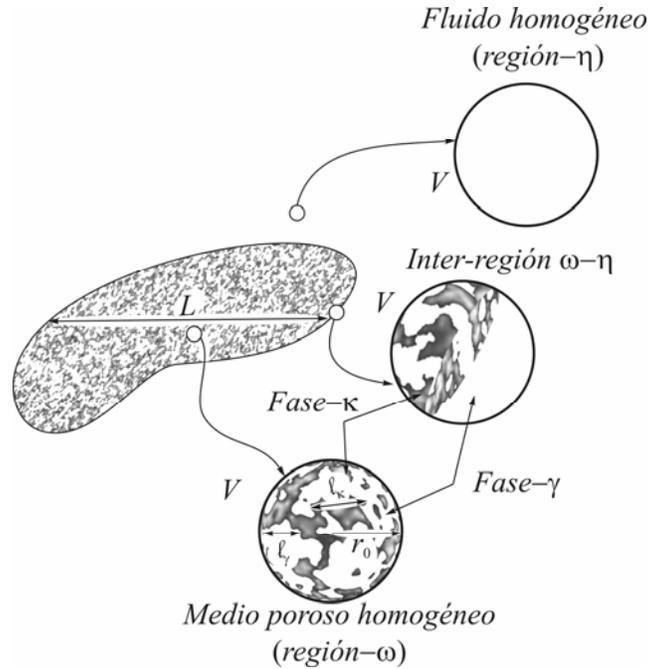
El siguiente paso en el análisis consiste en obtener la ecuación de transferencia de masa generalizada (ETMG), a partir de la aplicación del método del promedio volumétrico al problema local. Sin embargo, dado que este análisis es análogo al desarrollado en el Capítulo 2, se presenta aquí únicamente la ecuación (2.25) para  $k = 0$ ,

$$\varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}{\partial t} = \nabla \cdot \left[ \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \right]. \quad (4.3)$$

Cabe remarcar que para obtener la ecuación anterior no se impusieron restricciones de escala, por lo que es válida en todo el dominio. En la ecuación (4.3),  $\langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma$  es la concentración de la especie  $A$  promediada intrínsecamente (ver ecuación (2.7)) en el espacio geométrico ocupado por la fase- $\gamma$  ( $V_\gamma(\mathbf{x})$ );  $\varepsilon_\gamma(\mathbf{x})$  denota la fracción

volumétrica de la fase- $\gamma$  (porosidad) en la región de promediado ( $V$ ) de volumen  $\mathcal{V}$  (Figura 4-1), la cual depende de la posición del centroide  $\mathbf{x}$  de  $V$ . Por último,  $\mathbf{D}(\mathbf{x})$  es el tensor de difusión efectiva dependiente de la posición definido en la ecuación (2.19) como

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}{\mathcal{D}_\gamma} &= \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma + \frac{1}{\mathcal{V}_\gamma(\mathbf{x})} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \left( \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} - \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \right) dA \\ &+ \frac{1}{\mathcal{V}_\gamma(\mathbf{x})} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \tilde{c}_{A\gamma} dA. \end{aligned} \quad (4.4)$$



**Figura 4-1:** Región de promediado, longitudes y regiones (homogéneas y heterogéneas) características del sistema.

En la ecuación (4.4),  $A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})$  denota la superficie ocupada por la interfase  $\gamma - \kappa$  en  $V$ , mientras que  $\tilde{c}_A$  corresponde a las desviaciones espaciales de la concentración definidas previamente (ecuación (2.15)) como

$$c_{A\gamma} \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} = \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} + \tilde{c}_{A\gamma} \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma}. \quad (4.5)$$

En este momento, conviene retomar la ecuación (2.26), donde se presentan los valores constantes que adquieren la porosidad, el área interfacial y el coeficiente de difusión efectiva en las regiones homogéneas del sistema,

$$\varepsilon_\gamma(\mathbf{x}); \mathcal{A}_{\gamma\kappa}(\mathbf{x}); \mathbf{D}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1; 0; \mathcal{D}_\gamma \mathbf{I} & \text{en la región homogénea } -\eta \\ \varepsilon_{\gamma\omega}; \mathcal{A}_{\gamma\kappa,\omega}; \mathbf{D}_\omega & \text{en la región homogénea } -\omega \end{cases} \quad (4.6)$$

A la ecuación (4.3) también se le suele llamar *modelo de un solo dominio* (Arquis y Caltagirone, 1984; Beckermann y col., 1987, 1988; Gobin y col., 1998; Goyeau y col., 2003). De acuerdo a la ecuación (4.4), este modelo no está cerrado, pues se encuentra en función de las desviaciones espaciales de la concentración, así como de los cambios espaciales de la porosidad y el área interfacial. Para resolver este problema, Goyeau y col. (2003) propusieron usar relaciones tipo Heaviside, lineales, sinusoidales y basadas en funciones error para describir estos cambios espaciales. Sin embargo, no hay garantía de que dichos modelos heurísticos puedan ofrecer una descripción adecuada del transporte cerca de la frontera entre un medio poroso y un fluido. Por ello, en este trabajo se usan las relaciones desarrolladas por Pérez-Córdova y Ochoa-Tapia (1995) para describir los cambios espaciales de las propiedades geométricas (porosidad, área interfacial) y se resolverán los problemas de cerradura correspondientes para cerrar la ecuación (4.4). Esto se lleva a cabo en la siguiente sección.

## 4.2.- Problema de cerradura.

Como se mencionó en la sección anterior, para obtener una forma cerrada de la ecuación de transferencia de masa generalizada, es necesario plantear y resolver el problema de valor a la frontera asociado con el campo de las desviaciones espaciales de la concentración. Para ello, es conveniente escribir la ecuación (4.3) como sigue

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}{\partial t} &= \nabla \cdot \left( \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \right) + \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \cdot \left( \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \right) \\ &+ \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \left( \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} - \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \right) dA \right] \\ &+ \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \tilde{c}_{A\gamma} dA \right]. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Al restar a la ecuación (4.1) la ecuación anterior, se obtiene, al tomar en cuenta la descomposición espacial dada en la ecuación (4.5), la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{c}_{A\gamma}}{\partial t} &= \nabla \cdot \left( \mathcal{D}_\gamma \nabla \tilde{c}_{A\gamma} \right) \\ &- \underbrace{\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \cdot \left( \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \right)}_{\text{fuente difusiva volumétrica}}, \text{ en la fase } -\gamma, \quad (4.8) \\ &- \underbrace{\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \left( \Delta \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma + \tilde{c}_{A\gamma} \right) dA \right]}_{\text{fuente difusiva volumétrica no-local}} \end{aligned}$$

donde se usó  $\Delta \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma = \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} - \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}}$ .

Por otro lado, la condición de frontera correspondiente a la interfase sólido-fluido se obtiene de sustituir la descomposición espacial de la concentración (ecuación (4.5)) en la ecuación (4.2), de manera que

$$-\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \tilde{c}_{A\gamma} = \underbrace{\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma}}_{\text{fuente difusiva superficial}}, \text{ en la interfase } \gamma - \kappa. \quad (4.9)$$

Sin embargo, como se mostró en el Capítulo 3 (ver Sección 3.2), si se cumplen las siguientes restricciones de escala en la inter-región

$$\frac{\Delta \varepsilon_\gamma l_\gamma}{r_0 \varepsilon_\gamma} \ll 1; \quad \frac{(1 - \varepsilon_{\gamma w}) l_\gamma r_0}{10 \varepsilon_\gamma L_e^2} \ll 1; \quad \frac{(1 + \varepsilon_{\gamma w}) r_0^2 l_\gamma}{10 \varepsilon_\gamma L_e^2 L_{C_1}} \ll 1, \quad (4.10)$$

$\Delta \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma$  se puede considerar despreciable y como consecuencia

$\langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\gamma} - \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}} \ll \tilde{c}_{A\gamma}$ , de manera que el último término en el lado derecho de la

ecuación (4.8) se reduce a

$$\varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \left( \Delta \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma + \tilde{c}_{A\gamma} \right) dA \right] = \varepsilon_\gamma^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\gamma}{\mathcal{V}} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \tilde{c}_{A\gamma} dA \right]. \quad (4.11)$$

Además, el lado derecho de la ecuación (4.4) se simplifica como sigue

$$\frac{\mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}{\mathcal{D}_\gamma} = \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma + \frac{1}{\mathcal{V}_\gamma(\mathbf{x})} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \tilde{c}_{A\gamma} dA. \quad (4.12)$$

Por otro lado, si se acepta la siguiente restricción de escala

$$\frac{\Delta \varepsilon_\gamma l_\gamma}{\varepsilon_\gamma r_0} \ll 1, \quad (4.13)$$

las fuentes difusivas volumétricas se pueden considerar despreciables respecto a las fuentes difusivas superficiales. Además, debido a la restricción de  $l_\gamma \ll L_C$  el término del lado derecho de la ecuación (4.11) es despreciable respecto a  $\nabla \cdot (\mathcal{D}_\gamma \nabla \tilde{c}_{A\gamma})$ . En este momento conviene hacer notar que, de las restricciones de escala arriba impuestas, las más difíciles de satisfacer son las de primer orden. Esto puede restringir la validez de los resultados a un conjunto de valores no muy amplio, la discusión sobre ello se ampliará más adelante. Si por último se impone la siguiente restricción de escala,

$$\frac{t^* \mathcal{D}_\gamma}{l_\gamma^2} \gg 1, \quad (4.14)$$

el problema de las desviaciones espaciales de la concentración se puede expresar como

$$\mathcal{D}_\gamma \nabla^2 \tilde{c}_{A\gamma} = 0, \text{ en la fase } -\gamma, \quad (4.15)$$

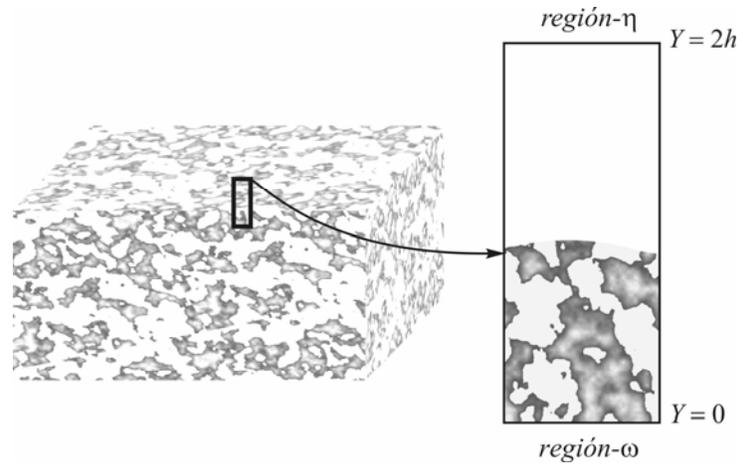
$$\text{C.F.1} \quad -\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \tilde{c}_{A\gamma} = \underbrace{\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}_{\text{fuente difusiva superficial}} \Big|_{\mathbf{x}}, \text{ en la interfase } \gamma - \kappa, \quad (4.16)$$

$$\text{C.F.2} \quad \tilde{c}_{A\gamma} = \tilde{c}_{A\gamma\eta} = 0; \text{ en } Y = 2h, \quad (4.17)$$

$$\text{C.F.3} \quad \tilde{c}_{A\gamma} = \tilde{c}_{A\gamma\omega}; \frac{\partial \tilde{c}_{A\gamma}}{\partial Y} = \frac{\partial \tilde{c}_{A\gamma\omega}}{\partial Y}, \text{ en } Y = 0, \quad (4.18)$$

$$\text{Periodicidad:} \quad \tilde{c}_{A\gamma}(\mathbf{r} + \ell_i) = \tilde{c}_{A\gamma}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (4.19)$$

El cual está referido a una celda unitaria como la mostrada en la Figura 4-2. En las condiciones de frontera (4.17) y (4.18) se supuso que el alto de la celda unitaria ( $2h$ ) es tal que las desviaciones espaciales corresponden a las de las regiones homogéneas. Cabe mencionar que en la parte inferior de la celda unitaria se supuso que tanto el campo de las desviaciones espaciales de la concentración como su derivada espacial son funciones continuas. Mientras que en la parte superior de la celda unitaria, se tomó en cuenta el hecho que las desviaciones espaciales de la concentración son despreciables en la región homogénea- $\eta$ . Además, se impuso la condición de periodicidad, donde  $\mathbf{r}$  representa el centro de la celda unitaria, representativa de la inter-región, y  $\zeta_i$  son los vectores que se requieren para generar un medio poroso espacialmente periódico.



**Figura 4-2:** Zona representativa de la inter-región.

Dada la linealidad del problema de valor a la frontera, definido por las ecuaciones (4.15)-(4.19), se puede proponer una solución en términos de la fuente difusiva superficial como sigue

$$\tilde{c}_{Ay} = \mathbf{b}_\gamma \cdot \nabla \langle c_{Ay} \rangle^\gamma. \quad (4.20)$$

El resultado de sustituir la ecuación anterior en las ecuaciones (4.15)-(4.19), es el siguiente problema de valor a la frontera

$$\nabla^2 \mathbf{b}_\gamma = 0, \text{ en la fase } -\gamma, \quad (4.21)$$

$$\text{C.F.1} \quad -\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \nabla \mathbf{b}_\gamma = \mathbf{n}_{\gamma\kappa}, \text{ en la interfase } \gamma - \kappa, \quad (4.22)$$

$$\text{C.F.2} \quad \mathbf{b}_\gamma = 0, \text{ en } Y = 2h, \quad (4.23)$$

$$\text{C.F.3} \quad \mathbf{b}_\gamma \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{Y=0} = \tilde{c}_{A\gamma\omega}; \quad \frac{\partial \mathbf{b}_\gamma}{\partial Y} \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{Y=0} = \frac{\partial \tilde{c}_{A\gamma\omega}}{\partial Y}, \text{ en } Y = 0, \quad (4.24)$$

$$\text{Periodicidad:} \quad \mathbf{b}_\gamma(\mathbf{r} + \ell_i) = \mathbf{b}_\gamma(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (4.25)$$

Por otro lado, a partir del trabajo de Ryan y col. (1981), en la región homogénea- $\omega$  se tiene que

$$\tilde{c}_{A\gamma\omega} = \mathbf{b}_{\gamma\omega} \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma. \quad (4.26)$$

De manera que, suponiendo que  $\nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{Y=0} = \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma$ , la condición de frontera (4.24)

se puede expresar como,

$$\text{C.F.3} \quad \mathbf{b}_\gamma = \mathbf{b}_{\gamma\omega}; \quad \frac{\partial \mathbf{b}_\gamma}{\partial Y} = \frac{\partial \mathbf{b}_{\gamma\omega}}{\partial Y}, \text{ en } Y = 0. \quad (4.27)$$

Además, puede demostrarse (a partir de un análisis de simetría y antisimetría) que las componentes tangencial y normal a la superficie divisoria (componentes  $X$  y  $Y$ , respectivamente) del vector  $\mathbf{b}_{\gamma\omega}$  satisfacen las siguientes condiciones de frontera,

$$\text{Componente } X \quad \frac{\partial b_{\gamma\omega X}}{\partial Y} = 0, \text{ en } Y = 0, \quad (4.28)$$

$$\text{Componente } Y \quad b_{\gamma\omega, Y} = 0, \text{ en } Y = 0. \quad (4.29)$$

Por lo que las componentes  $X$  y  $Y$  de la condición de frontera (4.27) son

$$\text{C.F.3a} \quad \frac{\partial b_{\gamma X}}{\partial Y} = 0, \text{ en } Y = 0, \quad (4.30)$$

$$\text{C.F.3b} \quad b_{\gamma, Y} = 0, \text{ en } Y = 0. \quad (4.31)$$

Note que, debido a las ecuaciones (4.30) y (4.31), no es necesario resolver los problemas de las variables de cerradura en la región homogénea- $\omega$ .

De esta forma, al sustituir la ecuación (4.20) en el segundo sumando del lado derecho de la ecuación (4.12), permite escribir el tensor de difusión dependiente de la posición como sigue

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon_\gamma(\mathbf{x})\mathbf{D}(\mathbf{x})}{\mathcal{D}_\gamma} &= \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \left[ \mathbf{I} + \frac{1}{\mathcal{V}_\gamma(\mathbf{x})} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \mathbf{b}_\gamma \, dA \right] \\ &= \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{I} + \frac{1}{\mathcal{V}_\gamma} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \mathbf{b}_\gamma \, dA. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Para obtener la ecuación anterior se tomó en cuenta la definición de la porosidad ( $\varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) = \mathcal{V}_\gamma(\mathbf{x}) / \mathcal{V}$ ). Conviene mencionar que, en la ecuación (4.32),  $A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x})$  denota la superficie ocupada por la interfase  $\gamma - \kappa$  en la celda unitaria representativa de la inter-región. En la siguiente sección se describe la solución del problema de las componentes  $X$  y  $Y$  de la variable de cerradura  $\mathbf{b}_\gamma$ .

### 4.3.- Solución del problema de cerradura.

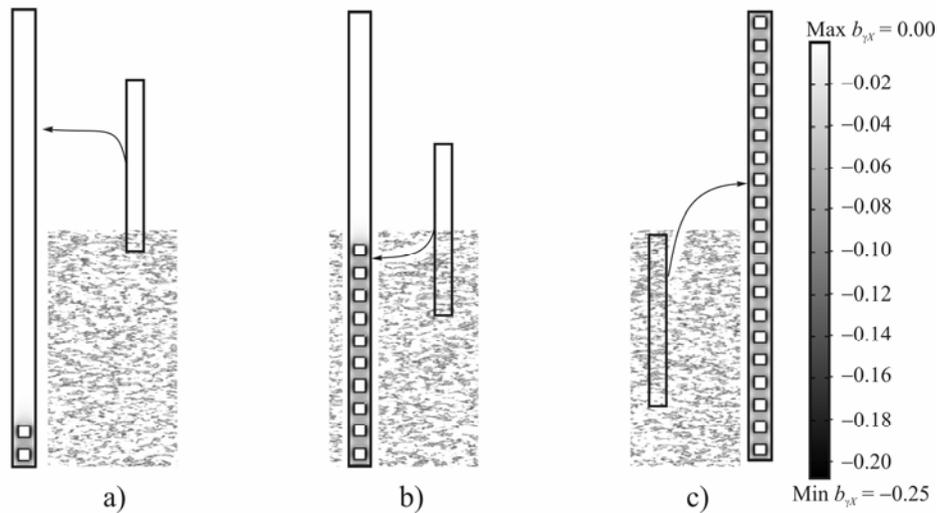
El problema de cerradura descrito en la sección anterior se resolvió numéricamente usando diferencias finitas con el método de inversión línea por línea. Al igual que en el caso anterior, los cálculos se hicieron usando diferentes tamaños de malla y valores de tolerancia para asegurar independencia de los parámetros numéricos.

El problema se resolvió para la celda bidimensional presentada previamente en la Figura 3-2. Sin embargo, dado que se desean calcular los cambios espaciales del coeficiente de difusión efectiva (ecuación (4.32)), se debe resolver el problema usando un número variable de cuadrados en la celda unitaria como se sugiere en la Figura 4-3. Para determinar el número de cuadrados a utilizar, se hicieron diversas pruebas para el cálculo del coeficiente de difusión en la superficie divisoria. Encontrándose que, usando diez cuadrados se obtienen resultados aceptables (es decir, con una desviación menor al 3% respecto al resultado obtenido usando un número infinito de cuadrados).

Para encontrar una relación de correspondencia entre el número de cuadrados contenidos en la celda unitaria ( $nc \in [0, 20]$ ) y la posición correspondiente del coeficiente de difusión efectiva, se introduce la siguiente relación

$$\frac{\xi}{2h} = \frac{20 - nc}{20} - 0.5, \forall nc \in [0, 20]. \quad (4.33)$$

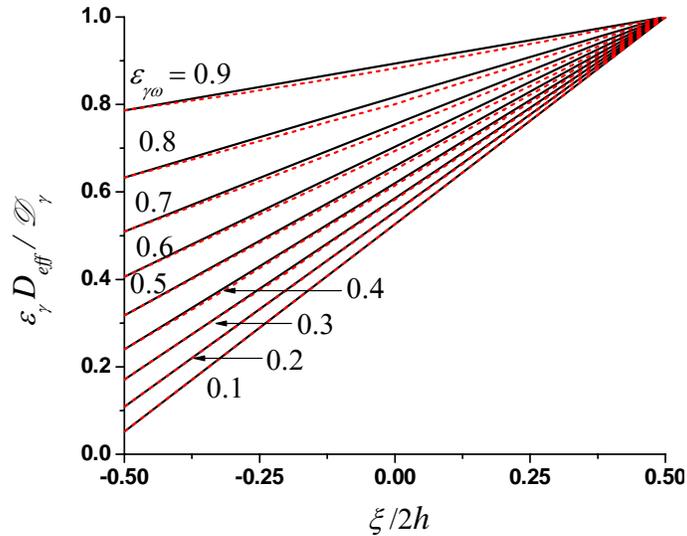
Así,  $\xi/2h \in [-0.5, 0.5]$  donde  $\xi/2h = -0.5$  corresponde al seno del medio poroso,  $\xi/2h = 0$  a la superficie divisoria y  $\xi/2h = 0.5$  al fluido homogéneo. En la Figura 4-3, se muestran tres ejemplos del campo de la componente X de la variable de cerradura para  $\xi/2h = 0.4, 0$  y  $-0.5$ . Como es de esperarse, los valores de  $b_{\gamma X}$  son mínimos en la zona ocupada por el fluido y máximos en las cercanías de la interfase sólido-fluido. De manera que al aumentar la cantidad de fluido en la celda unitaria, el segundo sumando en el lado derecho de la ecuación (4.32) adquiere valores cada vez menores respecto al primer sumando.



**Figura 4-3:** Campos de la componente X de la variable de cerradura para a)  $\xi/2h = 0.4$ , b)  $\xi/2h = 0.0$  y c)  $\xi/2h = -0.5$ .

De esta forma, se calcularon los cambios espaciales de las componentes tangencial y normal (componentes X y Y, respectivamente) a la superficie divisoria del tensor de difusión efectiva mostrados en la Figura 4-4 para diferentes valores de la porosidad de

la región homogénea- $\omega$ . Como se puede notar, conforme aumenta la porosidad, la magnitud de los cambios espaciales de  $\varepsilon_\gamma D_{\text{eff}} / \mathcal{D}_\gamma$  al pasar de una región a otra disminuye a la vez que aumenta la diferencia entre los valores de las componentes X y Y del coeficiente de difusión efectiva.



**Figura 4-4:** Dependencia espacial de las componentes tangencial (—) y normal (---) del tensor de difusión efectiva como función de  $\varepsilon_{\gamma\omega}$ .

Para tener una idea más clara de la magnitud de las diferencias de las componentes del tensor de difusión efectiva, en la Tabla 4-1 se presenta una comparación de los cambios espaciales de ambas componentes para  $\varepsilon_{\gamma\omega} = 0.2$  y  $0.8$ . Como puede notarse, para  $\varepsilon_{\gamma\omega} = 0.2$ , la diferencia en los resultados es inferior a 0.2%, mientras que para  $\varepsilon_{\gamma\omega} = 0.8$  el valor máximo de la diferencia es 1.63%. Dado que estas diferencias son menores al 5%, puede concluirse que el uso de las componentes normal o tangencial del tensor de difusión da lugar a predicciones similares de, por ejemplo, los perfiles de concentración (Sección 4.5).

**Tabla 4-1:** Comparación de los cambios espaciales de las componentes tangencial y normal del tensor de difusión efectiva para  $\varepsilon_{\gamma\omega} = 0.2$  y  $0.8$ .

$\frac{\xi}{2h}$	$\varepsilon_{\gamma\omega} = 0.2$			$\varepsilon_{\gamma\omega} = 0.8$		
	Componente tangencial	Componente normal	% Diferencia*	Componente tangencial	Componente normal	% Diferencia*
-0.5	0.10875	0.10875	0.00000	0.63324	0.63312	0.01200
-0.4	0.19789	0.19759	0.03000	0.67004	0.66591	0.41300
-0.3	0.28701	0.28643	0.05800	0.70683	0.69927	0.75600
-0.2	0.37614	0.37529	0.08500	0.74348	0.73332	1.01600
-0.1	0.46532	0.46416	0.11600	0.78017	0.76816	1.20100
0.0	0.55439	0.55306	0.13300	0.81684	0.80056	1.62800
0.1	0.64351	0.64200	0.15100	0.85351	0.84045	1.30600
0.2	0.73266	0.73100	0.16600	0.89019	0.87822	1.19700
0.3	0.82176	0.82013	0.16300	0.92686	0.91726	0.9600
0.4	0.91089	0.90956	0.13300	0.96353	0.95777	0.57600
0.5	1.00000	1.00000	0.00000	1.00000	1.00000	0.00000

\* % Diferencia =  $|\text{Componente normal} - \text{Componente tangencial}| \times 100\%$

Por otro lado, los resultados de la Figura 4-4 se pueden aproximar mediante las siguientes expresiones

$$\text{Componente tangencial, } \frac{\varepsilon_{\gamma} D_{\text{eff},X}}{\mathcal{D}_{\gamma}} = A_x + B_x \left( \frac{\xi}{2h} \right), \quad \forall \frac{\xi}{2h} \in [-0.5, 0.5], \quad (4.34)$$

$$\text{Componente normal, } \frac{\varepsilon_{\gamma} D_{\text{eff},Y}}{\mathcal{D}_{\gamma}} = A_y + B_y \left( \frac{\xi}{2h} \right), \quad \forall \frac{\xi}{2h} \in [-0.5, 0.5]. \quad (4.35)$$

En las ecuaciones (4.34) y (4.35), los coeficientes  $A_x$ ,  $B_x$ ,  $A_y$  y  $B_y$  dependen de la porosidad de la región homogénea- $\omega$  como se muestra en la Tabla 4-2. Cabe mencionar que en todos los ajustes el coeficiente de correlación fue siempre superior a 0.99.

Para propósitos de las comparaciones que se presentan en la Sección 4.5, se presenta a continuación la deducción de las ecuaciones de medio efectivo en las regiones homogéneas con su correspondiente condición de frontera.

**Tabla 4-2:** Dependencia de los coeficientes de las ecuaciones (4.34) y (4.35) con  $\varepsilon_{\gamma\omega}$ .

$\varepsilon_{\gamma\omega}$	$A_X$	$B_X$	$A_Y$	$B_Y$
0.1	0.52604	0.94791	0.52565	0.94762
0.2	0.55439	0.89125	0.55294	0.89038
0.3	0.58551	0.82900	0.58199	0.82800
0.4	0.61996	0.76014	0.61450	0.75998
0.5	0.65874	0.68200	0.65130	0.68041
0.6	0.70299	0.59422	0.69313	0.59184
0.7	0.75471	0.49087	0.74272	0.48865
0.8	0.81679	0.36679	0.80307	0.36530
0.9	0.89336	0.21350	0.88258	0.21294

#### 4.4.- Ecuaciones de medio efectivo y condición de salto.

Como se mostró en el Capítulo 2, al imponer las restricciones de escala correspondientes, se pueden obtener las ecuaciones de medio efectivo en cada región a partir de la ecuación de transferencia de masa generalizada. Dado que estas ecuaciones no son válidas en la frontera, se deben plantear las condiciones de salto correspondientes en la inter-región. A continuación, se presentan brevemente las ecuaciones que constituyen este modelo.

##### 4.4.1.- Ecuaciones de medio efectivo para las regiones homogéneas.

En las regiones homogéneas del sistema, las siguientes restricciones de escala se satisfacen por lo regular,

$$r_0 \ll L, r_0^2 \ll L_C^2. \quad (4.36)$$

Como consecuencia, en la región homogénea  $-\omega$  ( $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_\omega$ ) se cumple la siguiente desigualdad

$$\nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma \gg \frac{1}{\mathcal{V}_\gamma(\mathbf{x}_\omega)} \int_{A_{\gamma\kappa}(\mathbf{x}_\omega)} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \left( \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}_\omega + \mathbf{y}_\gamma} - \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \Big|_{\mathbf{x}_\omega} \right) dA. \quad (4.37)$$

Lo que permite simplificar la ecuación (4.4) a

$$\frac{\mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{Ay} \rangle_\omega^\gamma}{\mathcal{D}_\gamma} = \nabla \cdot \langle c_{Ay} \rangle_\omega^\gamma + \frac{1}{\mathcal{D}_\gamma(\mathbf{x}_\omega)} \int_{A_{\gamma k}(\mathbf{x}_\omega)} \mathbf{n}_{\gamma k} \tilde{c}_{Ay} dA, \quad (4.38)$$

y, por tanto, la ETMG (4.3) se expresa, en esta región, como

$$\varepsilon_{\gamma\omega} \frac{\partial \langle c_{Ay} \rangle_\omega^\gamma}{\partial t} = \nabla \cdot \left[ \varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{Ay} \rangle_\omega^\gamma \right], \text{ en la región homogénea } -\omega. \quad (4.39)$$

La cual es idéntica a la ecuación (2.32) al fijar  $k = 0$ .

Por otro lado, en la región ocupada por el fluido homogéneo (región homogénea  $-\eta$ ), la única fase presente es la fase  $-\gamma$ , por lo que si se satisfacen las restricciones de escala (4.36), la ecuación (4.4) se reduce a

$$\mathbf{D}_\eta \cdot \nabla \langle c_{Ay} \rangle_\eta^\gamma = \mathcal{D}_\gamma \nabla \cdot \langle c_{Ay} \rangle_\eta^\gamma. \quad (4.40)$$

De manera que, la ecuación de medio efectivo en esta región es,

$$\frac{\partial \langle c_{Ay} \rangle_\eta^\gamma}{\partial t} = \nabla \cdot \left( \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{Ay} \rangle_\eta^\gamma \right), \text{ en la región homogénea } -\eta. \quad (4.41)$$

#### 4.4.2.- Condición de salto.

Como se mencionó anteriormente, las suposiciones que conducen a las ecuaciones (4.39) y (4.41) pueden no ser válidas en la inter-región. Esto lleva a desarrollar condiciones de salto que acoplen los fenómenos de transferencia de masa en el fluido con la transferencia de masa en el medio poroso homogéneo.

De acuerdo a la metodología de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a), para desarrollar la condición de salto, es conveniente definir una región de promediado ( $V_\infty$ ) de volumen  $\mathcal{V}_\infty$ , como la mostrada en la Figura 4-5, la cual contiene porciones de ambas regiones, de manera que

$$\mathcal{V}_\infty = \mathcal{V}_\omega + \mathcal{V}_\eta. \quad (4.42)$$

Mientras que el área que define la superficie de  $V_\infty$  se puede descomponer en

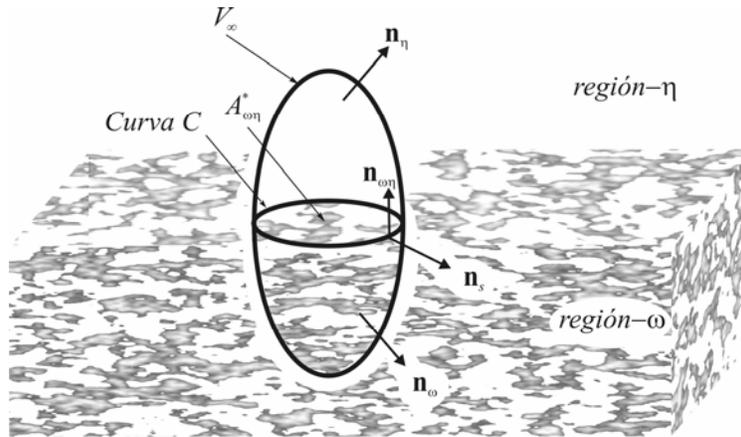
$$\mathcal{A}_\infty = \mathcal{A}_\omega + \mathcal{A}_\eta. \quad (4.43)$$

Al integrar la ecuación (4.3) y usando el teorema de la divergencia en los términos difusivos se obtiene,

$$\begin{aligned} & \int_{V_\omega} \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}{\partial t} dV + \int_{V_\eta} \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}{\partial t} dV \\ &= \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left[ \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \right] dA + \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left[ \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma \right] dA. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Al repetir esta operación para las ecuaciones de medio efectivo en las regiones homogéneas (ecuaciones (4.39) y (4.41)) y sumando las ecuaciones resultantes da lugar a la siguiente expresión

$$\begin{aligned} & \int_{V_\omega} \varepsilon_{\gamma\omega} \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma}{\partial t} dV + \int_{V_\eta} \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma}{\partial t} dV \\ &= \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left[ \varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma \right] dA + \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left( \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma \right) dA \\ &+ \int_{A_{\omega\eta}^*} \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left[ \varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma - \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma \right] dA. \end{aligned} \quad (4.45)$$



**Figura 4-5:** Región de promediado para la inter-región y vectores unitarios asociados.

En la ecuación anterior,  $A_{\omega\eta}^*$  representa la porción de la superficie divisoria entre las dos regiones asociada con  $V_\infty$ . Debe recalarse que el uso de las ecuaciones (4.39) y (4.41)

en la inter-región representa una aproximación, ya que están siendo usadas en la inter-región; este error se corrige mediante la introducción de la condición de salto. El resultado de restar las ecuaciones (4.44) y (4.45) es la siguiente expresión

$$\begin{aligned}
 & \int_{V_\omega} \left[ \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma}{\partial t} - \varepsilon_{\gamma\omega} \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega}{\partial t} \right] dV + \int_{V_\eta} \left[ \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma}{\partial t} - \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta}{\partial t} \right] dV \\
 &= \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left[ \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma - \varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega \right] dA \\
 &+ \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left[ \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma - \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta \right] dA \\
 &- \int_{A_{\omega\eta}^*} \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left[ \varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega - \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta \right] dA.
 \end{aligned} \tag{4.46}$$

En la ecuación anterior se pueden identificar las siguientes dos propiedades de exceso,

*Exceso de acumulación superficial*

$$\begin{aligned}
 \int_{A_{\omega\eta}^*} \varepsilon_{\gamma s} \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_s}{\partial t} dA &= \int_{V_\omega} \left[ \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma}{\partial t} - \varepsilon_{\gamma\omega} \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega}{\partial t} \right] dV \\
 &+ \int_{V_\eta} \left[ \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma}{\partial t} - \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta}{\partial t} \right] dV.
 \end{aligned} \tag{4.47}$$

*Exceso de transporte superficial*

$$\begin{aligned}
 \oint_C \mathbf{n}_s \cdot \varepsilon_{\gamma s} \mathbf{D}_s \cdot \nabla_s \langle c_{A\gamma} \rangle_s d\sigma &= \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left[ \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma - \varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega \right] dA \\
 &+ \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left[ \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\gamma - \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta \right] dA,
 \end{aligned} \tag{4.48}$$

donde  $C$  representa la curva cerrada que rodea la superficie divisoria (Figura 4-5) y  $\mathbf{n}_s$  es el vector unitario normal a la curva  $C$ . De esta forma, la ecuación (4.46) puede escribirse, haciendo uso del teorema de la divergencia superficial (Deemer y Slattery, 1978; Slattery, 1980; Ochoa-Tapia y col., 1993; Slattery, 2007), como

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{\varepsilon_{\gamma s} \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_s^\gamma}{\partial t}}_{\text{exceso de acumulación superficial}} - \underbrace{\nabla_s \cdot \varepsilon_{\gamma s} \mathbf{D}_s \cdot \nabla_s \langle c_{A\gamma} \rangle_s^\gamma}_{\text{exceso de transporte por difusión interna}} \\
 & = -\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \underbrace{\left[ \varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma - \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma \right]}_{\text{transporte difusivo neto hacia la inter-región}}, \text{ en la superficie divisoria.}
 \end{aligned} \tag{4.49}$$

A diferencia del caso presentado en el Capítulo 2, si el exceso de acumulación superficial y de transporte por difusión interna son despreciados respecto al transporte neto difusivo, el resultado no es una condición de salto, sino la condición de continuidad del flux de masa

$$\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma = \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma, \text{ en la superficie divisoria.} \tag{4.50}$$

Esto puede resultar en una simplificación excesiva del problema dado que, como se mencionó anteriormente, la introducción de condiciones de salto permite corregir los errores causados por usar las ecuaciones (4.39) y (4.41) fuera de las regiones homogéneas. Por ello, resulta más conveniente usar la ecuación (4.49) en lugar de la ecuación (4.50). Los términos de exceso de acumulación superficial y de transporte por difusión interna pueden calcularse usando las definiciones (4.47) y (4.48) suponiendo que la curvatura de la inter-región es despreciable de manera que,

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{\gamma s} \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_s^\gamma}{\partial t} &= \int_{\xi=-r_0}^{\xi=0} \left[ \varepsilon_\gamma(\xi) \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}{\partial t} - \varepsilon_{\gamma\omega} \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma}{\partial t} \right] d\xi \\
 &+ \int_{\xi=0}^{\xi=r_0} \left[ \varepsilon_\gamma(\xi) \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma}{\partial t} - \frac{\partial \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma}{\partial t} \right] d\xi,
 \end{aligned} \tag{4.51}$$

$$\begin{aligned}
 \nabla_s \cdot \varepsilon_{\gamma s} \mathbf{D}_s \cdot \nabla_s \langle c_{A\gamma} \rangle_s^\gamma &= \frac{1}{\mathcal{A}_{\omega\eta}^*} \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left[ \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma - \varepsilon_{\gamma\omega} \mathbf{D}_\omega \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\omega^\gamma \right] dA \\
 &+ \frac{1}{\mathcal{A}_{\omega\eta}^*} \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left[ \varepsilon_\gamma(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma - \mathcal{D}_\gamma \nabla \langle c_{A\gamma} \rangle_\eta^\gamma \right] dA.
 \end{aligned} \tag{4.52}$$

Debe notarse que para calcular estos términos se requiere de las soluciones tanto de la ecuación de transferencia de masa generalizada cerrada como de las ecuaciones de

medio efectivo de las regiones homogéneas. Dado que este es un proceso transitorio, para superar esta dificultad se desarrolló un esquema numérico en el que se discretizan las ecuaciones (4.51) y (4.52) en un instante previo al usado para discretizar las ecuaciones (4.39) y (4.41). Los resultados se muestran en la siguiente sección.

Por otro lado, como se expuso anteriormente, para propósitos de este trabajo se impondrá la siguiente condición de continuidad del campo de concentración,

$$\langle c_{A\gamma} \rangle_{\eta}^{\gamma} = \langle c_{A\gamma} \rangle_{\omega}^{\gamma}, \text{ en la superficie divisoria.} \quad (4.53)$$

lo cual implica, en principio, adoptar ciertas suposiciones y restricciones de escala lo cual se discutirá más a fondo en un trabajo futuro. De esta forma, este modelo está constituido por las ecuaciones (4.39), (4.41), (4.49) y (4.53).

#### 4.5.- Comparación cuantitativa.

En esta sección se resuelve numéricamente el problema de difusión unidireccional entre un medio poroso y un fluido usando los modelos desarrollados en este capítulo. Además, se analizan las consecuencias de no considerar los cambios espaciales de las propiedades promedio en la ETMG cerrada. Para esto se consideran los siguientes problemas de valor a la frontera:

- *Modelo-I.* Este modelo consiste en usar la ecuación (4.3) para describir el transporte de masa en todo el dominio. Para describir los cambios espaciales de la porosidad y el coeficiente de difusión efectiva se emplean los resultados de Pérez-Córdova y Ochoa-Tapia (1995) y la solución del problema de cerradura, respectivamente. El problema de valor a la frontera es el siguiente:

$$\varepsilon_{\gamma}(\zeta) \frac{\partial U}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \zeta} \left( D(\zeta) \frac{\partial U}{\partial \zeta} \right), \forall \zeta \in (-1,1), \quad (4.54)$$

$$\frac{\partial U}{\partial \zeta} = 0, \text{ en } \zeta = -H, \quad (4.55)$$

$$U = 1, \text{ en } \zeta = 1, \quad (4.56)$$

$$U = U_0, \text{ cuando } \tau = 0, \forall \zeta \in [-1, 1]. \quad (4.57)$$

Al escribir este problema se usaron las siguientes variables adimensionales:

$$U = \frac{\langle c_{Ay} \rangle^\gamma}{\langle c_{Ay} \rangle_\infty^\gamma}, U_0 = \frac{\langle c_{Ay} \rangle_0^\gamma}{\langle c_{Ay} \rangle_\infty^\gamma}, \zeta = \frac{\xi}{L/2}, \tau = \frac{t \mathcal{D}_\gamma}{(L/2)^2}, D(\zeta) = \frac{\varepsilon_\gamma(\zeta) D_{eff}(\zeta)}{\mathcal{D}_\gamma}, \quad (4.58)$$

donde  $\langle c_{Ay} \rangle_\infty^\gamma$  es el valor de la concentración lejos de la frontera en la fase fluida,

la cual se supone constante y  $\langle c_{Ay} \rangle_0^\gamma$  es el valor inicial de la concentración. En la

ecuación (4.55),  $H$  es una distancia relacionada con el largo del medio poroso, la

cual se fijó como tres veces la distancia adimensional desde la frontera hasta el

fluido homogéneo, sin embargo, se obtienen resultados análogos usando otros

valores de  $H$ .

Debe remarcarse que, para usar este modelo, se debe definir una región de

cambios espaciales ( $\delta$ ) de  $D(\zeta)$  y  $\varepsilon_\gamma(\zeta)$ , la cual se fija como

$$\delta = \frac{2h}{L/2} = \frac{20l_\kappa}{L/2\sqrt{1-\varepsilon_{\gamma w}}} = \frac{20}{\sqrt{1-\varepsilon_{\gamma w}}} \frac{l_\kappa}{r_0} \frac{r_0}{L/2} = \frac{1}{10\sqrt{1-\varepsilon_{\gamma w}}}. \quad (4.59)$$

Para obtener la ecuación anterior se supuso que  $2r_0 = 20l_\kappa$  y que

$L = 20(2r_0)$ . Cabe mencionar que los resultados de este modelo no cambian

apreciablemente al usar las componentes normal o tangencial del tensor de

difusión efectiva.

- *Modelo-I\**. En este caso, se resuelve el problema de valor a la frontera del modelo anterior sin considerar los cambios espaciales de  $D(\zeta)$  y  $\varepsilon_\gamma(\zeta)$  en la inter-región, sino simplemente al pasar de una región a otra, es decir se usan

$$\varepsilon_\gamma(\zeta) = \begin{cases} \varepsilon_{\gamma w}, & \zeta \leq 0 \\ 1, & \zeta > 0 \end{cases}, \quad (4.60)$$

$$D(\zeta) = \begin{cases} \frac{\varepsilon_{\gamma\omega} D_{eff\omega}}{\mathcal{D}_\gamma}, & \zeta \leq 0 \\ 1, & \zeta > 0 \end{cases}. \quad (4.61)$$

- *Modelo II.* Por último se considera el siguiente problema de valor a la frontera basado en las ecuaciones (4.39), (4.41), (4.49) y (4.53),

$$\varepsilon_{\gamma\omega} \frac{\partial U_\omega}{\partial \tau} = D_\omega \frac{\partial^2 U_\omega}{\partial \zeta^2}, \quad \forall \zeta \in (-1, 0), \quad (4.62)$$

$$\frac{\partial U_\eta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 U_\eta}{\partial \zeta^2}, \quad \forall \zeta \in (0, 1), \quad (4.63)$$

$$\frac{\partial U_\omega}{\partial \zeta} = 0, \quad \text{en } \zeta = -1, \quad (4.64)$$

$$\frac{\varepsilon_{\gamma s}}{L/2} \frac{\partial U_s}{\partial \tau} - \frac{1}{L/2} \frac{\partial}{\partial \zeta} \left( \frac{\varepsilon_{\gamma s} D_s}{\mathcal{D}_\gamma} \frac{\partial U_s}{\partial \zeta} \right) = -D_\omega \frac{\partial U_\omega}{\partial \zeta} + \frac{\partial U_\eta}{\partial \zeta}, \quad \text{en } \zeta = 0, \quad (4.65)$$

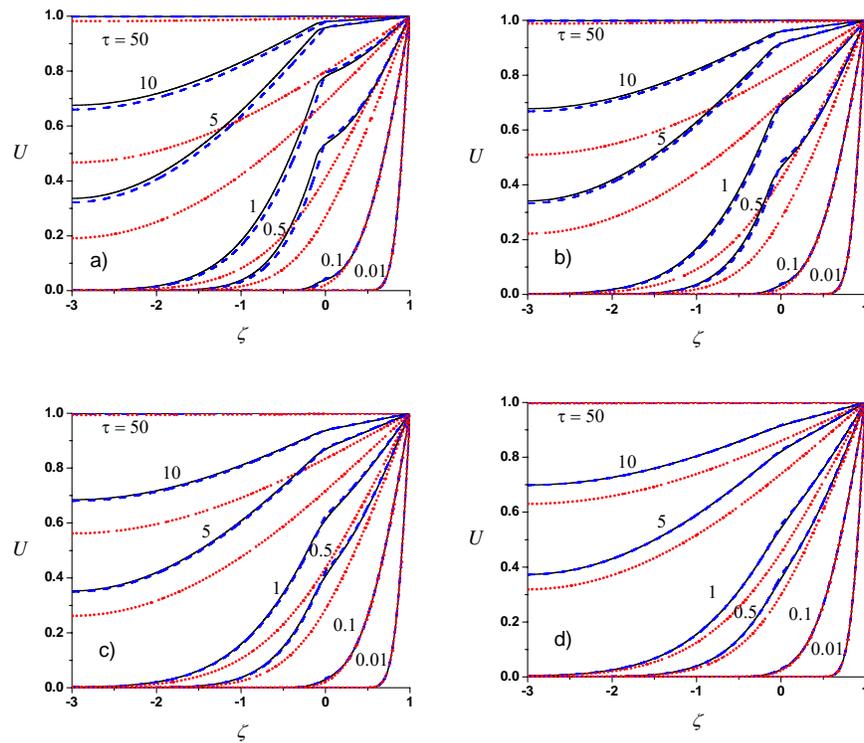
$$U_\eta = U_\omega, \quad \text{en } \zeta = 0, \quad (4.66)$$

$$U_\eta = 1, \quad \text{en } \zeta = 1, \quad (4.67)$$

$$U_\omega = U_\eta = U_0, \quad \text{cuando } \tau = 0. \quad (4.68)$$

La respuesta transitoria de los perfiles de concentración usando los diferentes modelos se muestra en la Figura 4-6. Como se puede notar, para valores bajos de la porosidad de la región homogénea  $-\omega$  ( $\varepsilon_{\gamma\omega} < 0.2$ ) se presentan las mayores diferencias en los perfiles de concentración entre los modelos, para determinados valores de  $\tau$ . Estas diferencias pueden atribuirse a una mayor resistencia que presenta el medio poroso, dado que para estos casos la fracción volumétrica de la fase  $-\kappa$  es elevada. Además, como se mencionó en la sección anterior, en la discretización usada en el *Modelo-II*, se introdujo un retardo para el cálculo de los términos del lado izquierdo de la ecuación (4.65). Por otro lado, para  $\tau > 0.5$  las predicciones obtenidas con el *Modelo-I\** son considerablemente distintas a las resultantes con los otros modelos. Cabe mencionar que, para valores extremos de  $\tau$  ( $\tau < 0.1$  y  $\tau \gg 50$ ) todos los modelos ofrecen los mismos resultados. Esto se debe a que, para valores de  $\tau$  cercanos a la condición

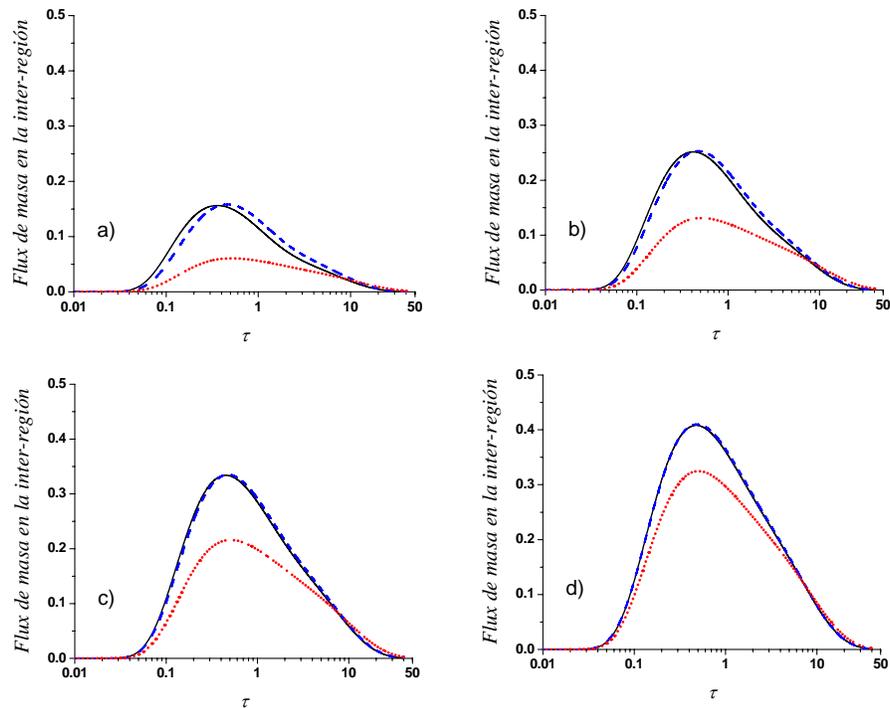
inicial, la transferencia de la especie A aún no alcanza la frontera del medio poroso. Mientras que, para valores de  $\tau$  cercanos al estado estacionario, no se presentan cambios espaciales apreciables de la concentración y los modelos convergen al valor en el seno del fluido. Note que, en todos los resultados, se puede observar una inflexión en los perfiles cerca de  $\zeta = 0$ , además, todos los modelos predicen perfiles semejantes cerca ( $\zeta > 0.75$ ) del seno del fluido.



**Figura 4-6:** Influencia de la porosidad en los perfiles de concentración como función del tiempo. a)  $\varepsilon_{\gamma_w} = 0.2$ , b)  $\varepsilon_{\gamma_w} = 0.4$ , c)  $\varepsilon_{\gamma_w} = 0.6$ , d)  $\varepsilon_{\gamma_w} = 0.8$ . (—) *Modelo-I*, (.....) *Modelo-I\** y (---) *Modelo-II*.

Por otro lado, en la Figura 4-7 se muestra la respuesta transitoria del flux de masa en  $\zeta = 0$  (es decir, en la superficie divisoria) para diferentes valores de la porosidad. En este caso, las predicciones del *Modelo I\** son inferiores a las obtenidas con los otros modelos. Al igual que en la Figura 4-6, al aumentar la porosidad las diferencias entre los modelos disminuyen. Además, para valores extremos del tiempo ( $\tau < 0.1$  y  $\tau \gg 10$ )

las predicciones de los modelos se asemejan entre ellas por las razones explicadas arriba.



**Figura 4-7:** Influencia de la porosidad en el flux de masa en la superficie divisoria como función del tiempo. a)  $\epsilon_{\gamma\omega} = 0.2$ , b)  $\epsilon_{\gamma\omega} = 0.4$ , c)  $\epsilon_{\gamma\omega} = 0.6$ , d)  $\epsilon_{\gamma\omega} = 0.8$ . (—) *Modelo-I*, (•••••) *Modelo-I\** y (---) *Modelo-II*.

Por último, debido a la aproximación adoptada en la solución del *Modelo II*, se observa el retraso en la predicción del flux, sobretodo a valores bajos de porosidad. Sin embargo, las áreas bajo las curvas resultantes de los modelos *I* y *II* son similares, por lo que la suposición de que en el *Modelo II* se satisface en promedio el *Modelo I* es válida. Para concluir este capítulo, es pertinente presentar los siguientes comentarios sobre los resultados obtenidos:

- Los modelos *I* y *II* ofrecen una descripción, en general, similar de los perfiles de concentración y del flux de masa en estado no estacionario. Sin embargo, a valores bajos de porosidad, se presentan algunas diferencias entre los resultados de estos modelos. De acuerdo a lo expuesto en este capítulo, dichas diferencias

---

se atribuyen a la aproximación adoptada en la solución del *Modelo II*. Sin embargo, se pueden proponer otras posibles fuentes de discrepancia. Una alternativa consiste en las restricciones de escala impuestas en el desarrollo del problema de cerradura. Las cuales, al menos las de primer orden, pueden traducirse en una sobre-simplificación del problema. Por otro lado, el imponer condiciones de continuidad del campo de concentración en el Modelo II puede ser también una fuente de discrepancia en los resultados. Esto puede deberse a que las restricciones y suposiciones detrás del uso de la condición de continuidad no sean satisfechas bajo determinadas circunstancias. En un trabajo futuro se explorará la pertinencia de usar condiciones de discontinuidad tanto en campo como en el flux de concentración.

Otra posibilidad de discrepancia es el efecto del espesor de la capa límite, el cual se fijo arbitrariamente y se supuso igual tanto para la porosidad como la difusión efectiva, lo cual no necesariamente es correcto. Por estas razones, los resultados obtenidos deben considerarse como un primer paso hacia un estudio más detallado de las suposiciones implícitas en la ETMG cerrada. Este análisis se llevará a cabo en un trabajo futuro. Además, como se discutirá en el Capítulo 6, la solución de este tipo de modelos constituye una alternativa para el cálculo del coeficiente de salto en la condición de salto de transferencia de cantidad de movimiento.

- Los resultados muestran además, que el no considerar los cambios espaciales de coeficientes efectivos y propiedades geométricas se traduce en predicciones erróneas tanto de los perfiles de concentración como del flux de masa en la frontera (para valores de  $\tau$  no cercanos a la condición inicial ni al estado estacionario). Esto debido a que, en principio, este tipo de propiedades depende fuertemente de las características de la microestructura del medio poroso. Esta información se obtiene a partir de la solución de problemas de cerradura.

## Parte II:

### Transferencia de cantidad de movimiento

---

## Capítulo 5:

### Condición de salto de transferencia de cantidad de movimiento en la inter-región medio poroso-fluido.

El estudio de la transferencia de cantidad de movimiento en la frontera medio poroso-fluido ha sido un tema de intensa investigación desde hace al menos tres décadas. Al igual que en el caso de transferencias de masa, actualmente existen dos corrientes para el análisis de este tipo de procesos de transporte. La primera se refiere a los modelos de un solo dominio (*one domain approach*) en el cual el dominio (medio poroso, fluido y frontera) se maneja como un continuo, es decir el medio poroso se considera un pseudofluido. La transición del fluido al medio poroso se logra a través de una transición continua de las propiedades efectivas. Para ello se requieren usar ecuaciones que sean por lo tanto válidas en todo el dominio (Arquis y Caltagirone, 1984; Beckermann y col., 1987, 1988; Gobin y col., 1998). La otra línea de análisis es el modelo de dos dominios (*two domain approach*) en donde se usan ecuaciones de medio efectivo en las regiones homogéneas las cuales se acoplan por medio de sus correspondientes condiciones de salto.

Sobre esta última, Beavers y Joseph (BJ) (1967) estudiaron teórica y experimentalmente el flujo en un canal parcialmente lleno de un medio poroso. En su análisis propusieron una condición de frontera semi-empírica para acoplar las ecuaciones de Stokes y de Darcy (en el Capítulo 1 se presenta una revisión detallada de la bibliografía relacionada con este tema). Posteriormente, Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a) propusieron la siguiente condición de frontera al estudiar el sistema de BJ usando el método de promedio volumétrico

$$\varepsilon_{\beta\omega}^{-1} \frac{\partial \langle v_{\beta} \rangle_{\omega}}{\partial y} - \frac{\partial \langle v_{\beta} \rangle_{\eta}}{\partial y} = \frac{\beta}{\sqrt{K_{\beta\omega}}} \langle v_{\beta} \rangle_{\omega}, \quad (5.1)$$

---

donde  $\beta$  es el llamado coeficiente de salto, el cual se determinó que es del orden de la unidad al ajustar los resultados experimentales de BJ (Ochoa-Tapia y Whitaker, 1995b). Recientemente se han dedicado algunos trabajos a la predicción teórica de este coeficiente (Goyeau y col., 2003; Deng y Martínez, 2005; Min y Kim, 2005; Chandesris y Jamet, 2006). De ellos cabe mencionar el de Goyeau y col. (2003) quienes combinaron los modelos de uno y dos dominios, obteniendo una expresión de  $\beta$  en función de la solución del problema en un solo dominio.

El objetivo de este capítulo es replantear la condición de salto de transferencia de cantidad de movimiento, originalmente propuesta por Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a), de manera que esté expresada en función de la solución de un coeficiente efectivo. El cual no sólo debe tener un significado físico claro, sino que además, sus valores se puedan obtener a partir del problema de cerradura correspondiente. Dado que una buena parte del planteamiento de la condición de salto está basada en el trabajo de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a), en las siguientes secciones se presentan algunos de los pasos más importantes.

### **5.1.- Problema puntual.**

El sistema físico, mostrado en la Figura 5-1, consiste en el flujo paralelo de fluido (región  $-\eta$ ) sobre un medio poroso homogéneo (región  $-\omega$ ) saturado por el mismo fluido. Se supone flujo estacionario e incompresible y que los efectos inerciales en ambas regiones son despreciables. Lo anterior se hace con el propósito de hacer el análisis más sencillo y contar con un problema idéntico al estudiado por BJ (1967) y Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a).

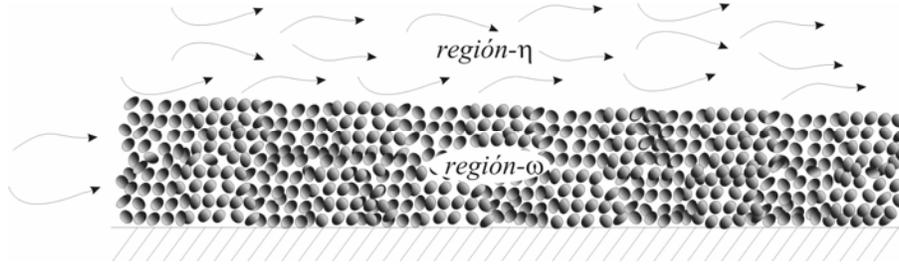
Por otro lado, en este contexto se denotará a la fase fluida, dentro y fuera del medio poroso, como la fase  $-\beta$ , mientras que la fase sólida será referida como la fase  $-\sigma$ . Las ecuaciones diferenciales que describen la transferencia local de cantidad de movimiento en ambas regiones son,

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\beta = 0, \quad \text{en la fase } -\beta \quad (5.2)$$

$$0 = -\nabla p_\beta + \rho_\beta \mathbf{g} + \mu_\beta \nabla^2 \mathbf{v}_\beta, \quad \text{en la fase } -\beta \quad (5.3)$$

junto con la condición de no deslizamiento en la interfase sólido-fluido,

$$\text{C.F.1} \quad \mathbf{v}_\beta = 0, \quad \text{en la interfase } \beta - \sigma \quad (5.4)$$



**Figura 5-1:** Flujo de un fluido sobre un medio poroso en un sistema tipo BJ.

## 5.2.- Promedio volumétrico.

Al igual que en los casos anteriores, el análisis se inicia definiendo una región de promediado ( $V$ ) de volumen  $\mathcal{V}$ , como la mostrada en la Figura 5-2, la cual puede localizarse tanto en las regiones homogéneas como en la inter-región  $\omega - \eta$ . Para promediar las ecuaciones (5.2) y (5.3) es necesario definir los operadores de promediado superficial e intrínseco para una propiedad  $\psi_\beta$  definida en la fase  $-\beta$ , respectivamente como,

$$\text{Promedio superficial} \quad \langle \psi_\beta \rangle_{\mathbf{x}} = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{V_\beta(\mathbf{x})} \psi_\beta|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} dV, \quad (5.5)$$

$$\text{Promedio intrínseco} \quad \langle \psi_\beta \rangle_{\mathbf{x}}^\beta = \frac{1}{\mathcal{V}_\beta(\mathbf{x})} \int_{V_\beta(\mathbf{x})} \psi_\beta|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} dV. \quad (5.6)$$

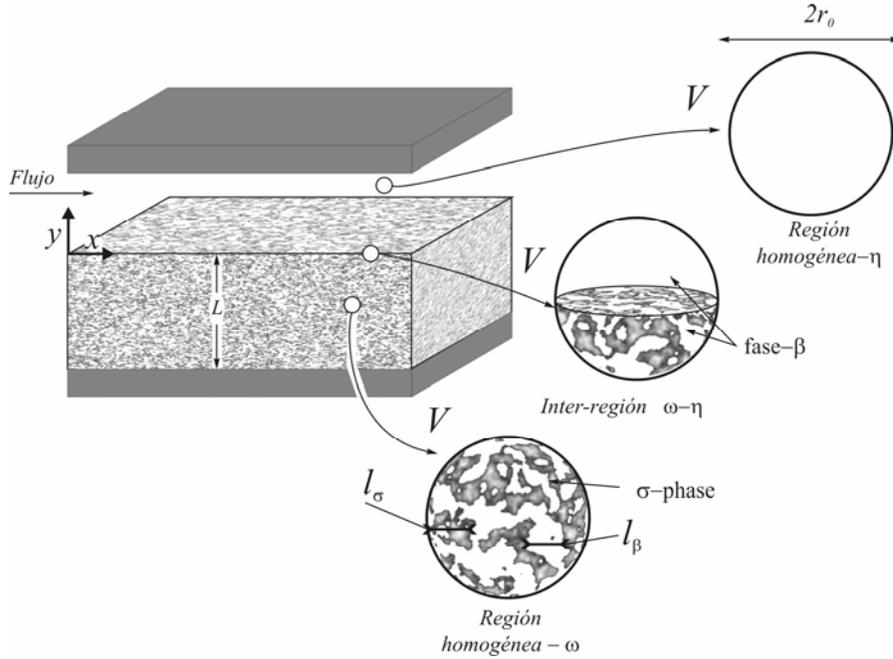
Estos operadores están relacionados por medio de,

$$\langle \psi_\beta \rangle = \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \langle \psi_\beta \rangle^\beta \quad (5.7)$$

donde  $\varepsilon_\beta(\mathbf{x})$  es la fracción volumétrica de fluido (porosidad), cuya dependencia con la posición  $\mathbf{x}$  del centroide de  $V$  se ha dejado explícita. Dado que  $\varepsilon_\beta(\mathbf{x}) = \mathcal{V}_\beta(\mathbf{x}) / \mathcal{V}$ , la fracción volumétrica se reduce en la regiones homogéneas a

$$\varepsilon_\beta(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{en la región homogénea } -\eta \\ \varepsilon_{\beta\omega}, & \text{en la región homogénea } -\omega \end{cases} \quad (5.8)$$

El siguiente paso consiste en obtener ecuaciones de transporte generalizadas las cuales carecen de restricciones de escala y son por lo tanto válidas en ambas regiones homogéneas así como en la inter-región.



**Figura 5-2:** Región de promediado en las regiones homogéneas y en la inter-región.

### 5.3.- Ecuaciones de transferencia generalizadas.

El resultado de aplicar el operador de promediado superficial a la ecuación (5.2) es

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{v}_\beta \rangle = 0. \quad (5.9)$$

Para intercambiar diferenciación e integración, se utiliza el teorema del promediado espacial (Howes y Whitaker, 1985) en la ecuación anterior, de manera que, al tomar en cuenta la condición de no deslizamiento (5.4), se obtiene

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle = 0. \quad (5.10)$$

Al aplicar ahora el operador de promediado superficial a la ecuación (5.3) resulta la siguiente expresión

$$0 = -\langle \nabla p_\beta \rangle + \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \rho_\beta \mathbf{g} + \mu_\beta \langle \nabla^2 \mathbf{v}_\beta \rangle, \quad (5.11)$$

donde se supusieron despreciables los cambios espaciales de la densidad y viscosidad dentro del volumen de promediado. El uso del teorema del promediado espacial en el primer término del lado derecho da lugar a

$$\langle \nabla p_\beta \rangle = \nabla \langle p_\beta \rangle + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} p_\beta \, dA. \quad (5.12)$$

Por otro lado, al usar la descomposición espacial (Gray, 1975) para la presión,

$$p_\beta = \langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} + \tilde{p}_\beta. \quad (5.13)$$

junto con la relación de (5.7), permite expresar a la ecuación (5.12) como,

$$\begin{aligned} \langle \nabla p_\beta \rangle &= \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \left( \langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} - \langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \right) dA \\ &\quad + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{p}_\beta \, dA, \end{aligned} \quad (5.14)$$

donde se empleó la siguiente relación

$$\langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) = -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \, dA. \quad (5.15)$$

Por otro lado, utilizando el teorema del promediado espacial en el último término de la ecuación (5.11) se obtiene

$$\langle \nabla^2 \mathbf{v}_\beta \rangle = \langle \nabla \cdot \nabla \mathbf{v}_\beta \rangle = \nabla \cdot \langle \nabla \mathbf{v}_\beta \rangle + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{v}_\beta \, dA. \quad (5.16)$$

Una segunda aplicación de este teorema, tomando en cuenta la condición de no deslizamiento, da como resultado

$$\langle \nabla^2 \mathbf{v}_\beta \rangle = \nabla^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle + \frac{1}{\mathcal{A}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{v}_\beta \, dA, \quad (5.17)$$

Por otro lado, al usar la descomposición espacial para la velocidad

$$\mathbf{v}_\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} = \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} + \tilde{\mathbf{v}}_\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta}, \quad (5.18)$$

en la ecuación (5.17), permite llegar a

$$\begin{aligned} \langle \nabla^2 \mathbf{v}_\beta \rangle = & \nabla^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle + \frac{1}{\mathcal{A}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \left( \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} - \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \right) dA \\ & - \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta + \frac{1}{\mathcal{A}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \tilde{\mathbf{v}}_\beta \, dA. \end{aligned} \quad (5.19)$$

De manera que, al sustituir las ecuaciones (5.14) y (5.19) en el lado derecho de la ecuación (5.11) resulta

$$\begin{aligned} 0 = & -\varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \rho_\beta \mathbf{g} + \mu_\beta \nabla^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \mu_\beta \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \\ & + \frac{1}{\mathcal{A}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \left[ -\mathbf{l} \Delta \langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} + \mu_\beta \nabla \left( \Delta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \right) \right] dA \\ & + \frac{1}{\mathcal{A}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \left( -\mathbf{l} \tilde{p}_\beta + \mu_\beta \nabla \tilde{\mathbf{v}}_\beta \right) dA, \end{aligned} \quad (5.20)$$

donde se usaron  $\Delta \langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} = \langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} - \langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}}$  y  $\Delta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} = \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}}$

Una forma más conveniente de expresar la ecuación anterior es la siguiente,

$$\begin{aligned} 0 = & -\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \rho_\beta \mathbf{g} + \mu_\beta \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \\ & - \mu_\beta \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \left( \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \right) - \mu_\beta \mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle, \end{aligned} \quad (5.21)$$

donde se introdujo un tensor de esfuerzos dependiente de la posición  $\mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x})$ , definido como

$$\begin{aligned} \mu_\beta \mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle = & \frac{1}{\mathcal{A}_\beta(\mathbf{x})} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \left( \mathbf{l} \tilde{p}_\beta - \mu_\beta \nabla \tilde{\mathbf{v}}_\beta \right) dA \\ & + \frac{1}{\mathcal{A}_\beta(\mathbf{x})} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \left[ \mathbf{l} \Delta \langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} - \mu_\beta \nabla \left( \Delta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \right) \right] dA. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Nótese que en la ecuación (5.21) se dio preferencia a la forma superficial del promediado de la velocidad.

Dado que, para la obtención de las ecuaciones (5.10) y (5.21) no se emplearon restricciones de escala, éstas son válidas en todo el dominio. Estas ecuaciones constituyen el modelo de un solo dominio (Goyeau y col., 2003). Para utilizar este modelo Goyeau y col. (2003) supusieron que los cambios espaciales de las propiedades efectivas pueden ser aproximados mediante relaciones heurísticas.

Por otro lado, conviene hacer notar que el término  $\mu_\beta \mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle$  corresponde al vector  $\mu_\beta \Phi_\beta$  en el trabajo de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a) (ver ecuación 36 de esta referencia), el cual es el componente clave del término de exceso global (ecuación 68, Ochoa-Tapia y Whitaker, 1995a). Para mantener la consistencia con la estructura reportada del modelo de un solo dominio, en este trabajo se prefiere denotar al vector  $\mu_\beta \Phi_\beta$  en términos de un tensor de esfuerzos dependiente de la posición. El cual, se reduce en las regiones homogéneas a

$$\mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \text{en la región homogénea } -\eta \\ \mathbf{K}_{\beta\omega}^{-1} & \text{en la región homogénea } -\omega \end{cases} \quad (5.23)$$

donde  $\mathbf{K}_{\beta\omega}^{-1}$  denota el tensor de esfuerzos en la región homogénea  $-\omega$ , cuya definición se presentará más adelante (ecuación (5.30)).

A continuación se muestra cómo, al imponer las restricciones de escala correspondientes, se pueden obtener las ecuaciones de Stokes y Darcy-Brinkman en las regiones homogéneas  $-\eta$  y  $\omega$ , respectivamente.

#### *Región homogénea $-\eta$*

En esta región ( $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_\eta$ ), como ya lo han mostrado previamente Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a), si se cumplen las siguientes restricciones de escala

$$r_0 \ll L_v, L_p, \quad (5.24)$$

$$r_0^2 \ll L_{v_1} L_v; r_0^2 \ll L_{p_1} L_p, \quad (5.25)$$

los valores de las variables promediadas corresponden a los de las variables puntuales, de manera que

$$\begin{aligned} \langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}_\eta} &= \langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}_\eta + \mathbf{y}_\beta} = p_\beta, \\ \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}_\eta} &= \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}_\eta + \mathbf{y}_\beta} = \mathbf{v}_\beta, \end{aligned} \quad (5.26)$$

y como consecuencia las desviaciones espaciales de la presión y la velocidad son despreciables, además la fracción volumétrica es constante e igual a la unidad, por lo que las ecuaciones (5.10) (5.21) se reducen a

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta^\beta = 0, \text{ en la región homogénea } -\eta, \quad (5.27)$$

$$0 = -\nabla \langle p_\beta \rangle_\eta^\beta + \rho_\beta \mathbf{g} + \mu_\beta \nabla^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta^\beta, \text{ en la región homogénea } -\eta. \quad (5.28)$$

Debe notarse que esta última es idéntica a la ecuación de Stokes (5.3), siempre que se cumpla que  $\langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta = \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta^\beta = \mathbf{v}_\beta$ , de la misma forma que la ecuación (5.27) es idéntica a la ecuación de continuidad (5.2).

#### Región homogénea- $\omega$

En esta región ( $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_\omega$ ), también se cumplen las restricciones de escala (5.24) y (5.25)

lo que permite satisfacer la siguiente desigualdad,

$$\int_{A_{\beta\sigma,\omega}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (-\mathbf{l}\tilde{p}_\beta + \mu_\beta \nabla \tilde{\mathbf{v}}_\beta) dA \gg \int_{A_{\beta\sigma,\omega}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \left[ -\mathbf{l}\Delta \langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}_\omega} + \mu_\beta \nabla \left( \Delta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}_\omega} \right) \right] dA. \quad (5.29)$$

Por lo que la ecuación (5.22) se reduce a,

$$\mu_\beta \mathbf{K}_{\beta\omega}^{-1} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega = -\frac{1}{\mathcal{V}_{\beta,\omega}} \int_{A_{\beta\sigma,\omega}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (-\mathbf{l}\tilde{p}_\beta + \mu_\beta \nabla \tilde{\mathbf{v}}_\beta) dA. \quad (5.30)$$

De esta forma, para obtener el tensor de permeabilidad es necesario plantear y resolver los problemas de cerradura para  $\tilde{p}_\beta$  y  $\tilde{\mathbf{v}}_\beta$  cuya solución se muestra en la monografía de Whitaker (Cap. 4, 1999).

Por otro lado, en esta región la porosidad se supone constante de manera que se satisface la siguiente desigualdad

$$\mathbf{O}\left(\nabla^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega\right) \gg \mathbf{O}\left(\nabla(\varepsilon_{\beta\omega}) \cdot \nabla(\varepsilon_{\beta\omega}^{-1} \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega)\right). \quad (5.31)$$

Por lo que las ecuaciones (5.10) y (5.21) se expresan como

$$\nabla \cdot \left( \varepsilon_{\beta\omega} \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega^\beta \right) = 0, \quad \text{en la región homogénea } -\omega, \quad (5.32)$$

$$\begin{aligned} 0 = & -\nabla \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta + \rho_\beta \mathbf{g} + \varepsilon_{\beta\omega}^{-1} \mu_\beta \nabla^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega \\ & - \mu_\beta \mathbf{K}_{\beta\omega}^{-1} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega, \quad \text{en la región homogénea } -\omega, \end{aligned} \quad (5.33)$$

esta última puede reacomodarse para obtener la ley de Darcy con la primera corrección de Brinkman,

$$\langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega = -\frac{\mathbf{K}_{\beta\omega}}{\mu_\beta} \cdot \left( \nabla \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta - \rho_\beta \mathbf{g} - \varepsilon_{\beta\omega}^{-1} \mu_\beta \nabla^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega \right), \quad \text{en la región homogénea } -\omega. \quad (5.34)$$

Sin embargo, debido a los rápidos cambios espaciales de la micro-estructura, las ecuaciones (5.27), (5.28), (5.32) y (5.33) no son válidas en la inter-región. Por lo que, para completar el planteamiento del problema se requieren imponer condiciones de frontera en la inter-región que acoplen estas ecuaciones. Lo cual se llevará a cabo en la siguiente sección.

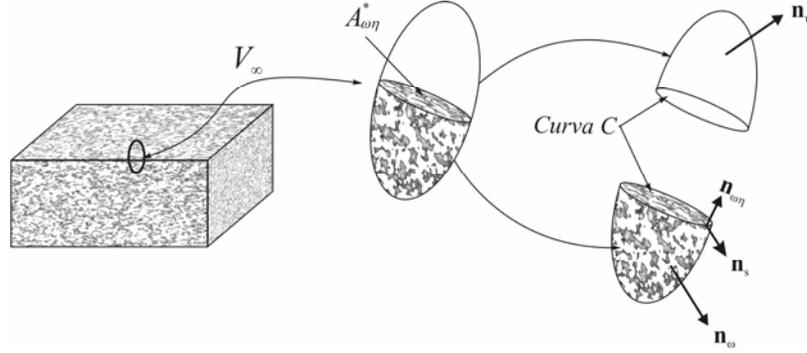
#### 5.4.- Condiciones de salto.

El siguiente paso consiste en definir una región de promediado ( $V_\infty$ ) de volumen  $\mathcal{V}_\infty$ , como la mostrada en la Figura 5-3, en la cual se integrarán las ecuaciones de medio efectivo obtenidas en la sección anterior y de la diferencia entre la suma de las ecuaciones de cada región y de la ecuación de transporte generalizada se obtendrá la condición de salto. De acuerdo a la Figura 5-3, el volumen  $\mathcal{V}_\infty$  puede descomponerse en

$$\mathcal{V}_\infty = \mathcal{V}_\omega + \mathcal{V}_\eta. \quad (5.35)$$

Mientras que el área de la superficie externa de  $V_\infty$  se define a su vez como

$$\mathcal{A}_\infty = \mathcal{A}_\omega + \mathcal{A}_\eta. \quad (5.36)$$



**Figura 5-3:** Región de promediado  $V_\infty$  y vectores unitarios para la inter-región.

### Ecuación de continuidad

Al integrar las ecuaciones (5.10), (5.27) y (5.32) en la región  $V_\infty$  y usando el teorema de la divergencia, se obtienen

$$\int_{V_\infty} \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle dV = \int_{A_\infty} \mathbf{n} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle dA = \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle dA + \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle dA = 0, \quad (5.37)$$

$$\int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta dA + \int_{A_{\eta\omega}^*} \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta dA = 0, \quad (5.38)$$

$$\int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega dA + \int_{A_{\omega\eta}^*} \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega dA = 0, \quad (5.39)$$

donde  $A_{\omega\eta}^*$  representa la porción de la superficie divisoria entre las dos regiones contenida en  $V_\infty$  (ver Figura 5-3). Al sumar las ecuaciones (5.38) y (5.39) y restando el resultado a la ecuación (5.37) se obtiene

$$\int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left( \langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega \right) dA + \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left( \langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta \right) dA = \int_{A_{\omega\eta}^*} \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta \right) dA. \quad (5.40)$$

De acuerdo con el trabajo de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a) es conveniente definir el exceso de velocidad superficial como

$$\oint_C \mathbf{n}_s \cdot \left( \delta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_s \right) d\sigma = \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left( \langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega \right) dA + \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left( \langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta \right) dA, \quad (5.41)$$

donde  $C$  representa una curva cerrada sobre la superficie divisoria (Figura 5-3); mientras que  $\mathbf{n}_s$  es el vector unitario tangente a la frontera y normal a la curva  $C$ . Al usar el teorema de la divergencia superficial (Deemer y Slattery, 1978; Slattery, 1980; Ochoa-Tapia y col., 1993; Slattery, 2007), la ecuación anterior se escribe como

$$\int_{A_{\omega\eta}^*} \nabla_s \cdot (\delta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_s) dA = \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega) dA + \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta) dA, \quad (5.42)$$

donde el operador gradiente superficial se ha definido previamente como  $\nabla_s = (\mathbf{I} - \mathbf{n}_{\eta\omega} \mathbf{n}_{\eta\omega}) \cdot \nabla$  y  $\delta$  se refiere al espesor de la frontera. De esta manera, las ecuaciones (5.40) y (5.42) dan lugar a la siguiente condición de frontera

$$\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta) = \nabla_s \cdot (\delta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_s) \quad \text{en la superficie divisoria.} \quad (5.43)$$

Por otro lado (como se mostró en el Capítulo 2), cabe mencionar que si los cambios espaciales de los integrandos en ambos términos en el lado derecho de la ecuación (5.42) pueden despreciarse dentro de las secciones transversales de  $V_\eta$  y  $V_\omega$ , la ecuación (5.42), puede expresarse como

$$\int_{A_{\omega\eta}^*} \nabla_s \cdot (\delta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_s) dA = \int_{A_\omega(\mathbf{x}_\omega)} \mathbf{n}_\omega \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega) dA + \int_{A_\eta(\mathbf{x}_\eta)} \mathbf{n}_\eta \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta) dA, \quad (5.44)$$

donde  $A_\eta(\mathbf{x}_\eta)$  y  $A_\omega(\mathbf{x}_\omega)$  son las superficies de  $V_\eta$  y  $V_\omega$  en los límites superior e inferior de  $V_\infty$ , respectivamente. En estas superficies es razonable suponer que se satisfacen las restricciones de escala, bajo las cuales las ecuaciones de transporte generalizadas y las propiedades promedio corresponden a sus valores en las regiones homogéneas. Bajo estas circunstancias, el lado derecho de la ecuación (5.44) puede suponerse mucho menor que la unidad y como consecuencia

$$\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta) \gg \nabla_s \cdot (\delta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_s). \quad (5.45)$$

De esta forma, la ecuación (5.43) se reduce a

$$\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta \right) = 0, \text{ en la superficie divisoria,} \quad (5.46)$$

la cual impone continuidad de las componentes normales de la velocidad. Además, con base en la continuidad del campo de la velocidad superficial  $\langle \mathbf{v}_\beta \rangle$  (ver Figura 3 en Ochoa-Tapia y Whitaker, 1995a) se impone la siguiente condición

$$\langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta = \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega = \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_{\eta\omega}, \text{ en la superficie divisoria.} \quad (5.47)$$

### Ecuación de movimiento

Para efectuar la integración de la ecuación de movimiento válida en cualquier punto, es conveniente expresar la resta entre los términos correspondientes a la primera y segunda corrección de Brinkman como

$$\begin{aligned} \nabla^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \left( \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \right) &= \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left( \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \right) \\ &+ \varepsilon_\beta^{-2}(\mathbf{x}) \left( \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \right) \langle \mathbf{v}_\beta \rangle. \end{aligned} \quad (5.48)$$

Por lo que la ecuación (5.21) toma la siguiente forma

$$\begin{aligned} 0 &= -\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \rho_\beta \mathbf{g} + \mu_\beta \nabla \cdot \left( \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \right) \\ &+ \mu_\beta \varepsilon_\beta^{-3}(\mathbf{x}) \left( \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \right) \langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \mu_\beta \mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle. \end{aligned} \quad (5.49)$$

De esta manera, al integrar las ecuaciones (5.49), (5.28) y (5.33) en la región  $V_\infty$  se obtienen, respectivamente

$$\begin{aligned} 0 &= -\int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \langle p_\beta \rangle^\beta dA - \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \langle p_\beta \rangle^\beta dA + \int_{V_\omega} \rho_\beta \mathbf{g} dV + \int_{V_\eta} \rho_\beta \mathbf{g} dV \\ &+ \int_{A_\omega} \mu_\beta \mathbf{n}_\omega \cdot \left( \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \right) dA + \int_{A_\eta} \mu_\beta \mathbf{n}_\eta \cdot \left( \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \right) dA \\ &+ \int_{V_\infty} \mu_\beta \varepsilon_\beta^{-3}(\mathbf{x}) \left( \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \right) \langle \mathbf{v}_\beta \rangle dV - \int_{V_\infty} \mu_\beta \mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle dV, \end{aligned} \quad (5.50)$$

$$\begin{aligned} 0 &= -\int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \langle p_\beta \rangle_\eta^\beta dA - \int_{A_{\eta\omega}^*} \mathbf{n}_{\eta\omega} \langle p_\beta \rangle_\eta^\beta dA + \int_{V_\eta} \rho_\beta \mathbf{g} dV \\ &+ \int_{A_\eta} \mu_\beta \mathbf{n}_\eta \cdot \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta dA + \int_{A_{\eta\omega}^*} \mu_\beta \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta dA, \end{aligned} \quad (5.51)$$

$$\begin{aligned}
 0 = & - \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta dA - \int_{A_{\omega\eta}^*} \mathbf{n}_{\omega\eta} \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta dA + \int_{V_\omega} \rho_\beta \mathbf{g} dV + \int_{A_\omega} \varepsilon_{\beta\omega}^{-1} \mu_\beta \mathbf{n}_\omega \cdot \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega dA \\
 & + \int_{A_{\omega\eta}^*} \varepsilon_{\beta\omega}^{-1} \mu_\beta \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega dA - \int_{V_\omega} \mu_\beta \mathbf{K}_{\beta\omega}^{-1} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega dV.
 \end{aligned} \tag{5.52}$$

El resultado de restar la suma de las ecuaciones (5.51) y (5.52) a la ecuación (5.50) es

$$\begin{aligned}
 & \int_{A_{\omega\eta}^*} \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left[ -\mathbf{l} \left( \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta - \langle p_\beta \rangle_\eta^\beta \right) + \mu_\beta \left( \varepsilon_{\beta\omega}^{-1} \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega - \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta \right) \right] dA \\
 & = - \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \left( \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta - \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta \right) dA - \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \left( \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta - \langle p_\beta \rangle_\eta^\beta \right) dA \\
 & \quad + \int_{A_\omega} \mu_\beta \mathbf{n}_\omega \cdot \left( \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \varepsilon_{\beta\omega}^{-1} \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega \right) dA \\
 & \quad + \int_{A_\eta} \mu_\beta \mathbf{n}_\eta \cdot \left( \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta \right) dA \\
 & \quad - \int_{V_\infty} \mu_\beta \mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle dV + \int_{V_\omega} \mu_\beta \mathbf{K}_{\beta\omega}^{-1} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega dV \\
 & \quad + \int_{V_\infty} \mu_\beta \varepsilon_\beta^{-3}(\mathbf{x}) \left( \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \right) \langle \mathbf{v}_\beta \rangle dV.
 \end{aligned} \tag{5.53}$$

La estructura del lado derecho de esta última ecuación sugiere la introducción de los siguientes términos de exceso

*Exceso de esfuerzo superficial:*

$$\begin{aligned}
 \oint_C \mathbf{n}_s \cdot (\delta \langle \mathbf{T} \rangle_s) d\sigma = & \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left[ -\mathbf{l} \left( \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta - \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta \right) + \mu_\beta \left( \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \varepsilon_{\beta\omega}^{-1} \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega \right) \right] dA \\
 & + \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left[ -\mathbf{l} \left( \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta - \langle p_\beta \rangle_\eta^\beta \right) + \mu_\beta \left( \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta \right) \right] dA,
 \end{aligned} \tag{5.54}$$

*Exceso de esfuerzo global:*

$$\int_{A_{\omega\eta}^*} \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \langle \mathbf{T}_\beta \rangle_s dA = \int_{V_\infty} \mu_\beta \mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle dV - \int_{V_\omega} \mu_\beta \mathbf{K}_{\beta\omega}^{-1} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega dV, \tag{5.55}$$

*Exceso de esfuerzo de Brinkman:*

$$\int_{A_{\omega\eta}^*} \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \langle \mathbf{T}_\beta \rangle_s dA = \int_{V_\infty} \mu_\beta \mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle dV - \int_{V_\omega} \mu_\beta \mathbf{K}_{\beta\omega}^{-1} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega dV. \tag{5.56}$$

Al usar las definiciones anteriores en la ecuación (5.53) da como resultado la siguiente condición de salto,

$$\begin{aligned}
 & -\mathbf{n}_{\omega\eta} \left( \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta - \langle p_\beta \rangle_\eta^\beta \right) + \mu_\beta \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \varepsilon_{\beta\omega}^{-1} \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega - \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta \right) = \nabla_s \cdot \delta \langle \mathbf{T} \rangle_s \\
 & + \left\langle \frac{\mu_\beta}{a_{vs}} \mathbf{K}_\beta^{-1} \Big|_{\eta\omega} \cdot \mathbf{v}_\beta \right\rangle_{\eta\omega} + \left\langle \frac{\mu_\beta}{a_{vs}} \varepsilon_\beta^{-3} (\nabla \varepsilon_\beta \cdot \nabla \varepsilon_\beta) \Big|_{\eta\omega} \mathbf{v}_\beta \right\rangle_{\eta\omega}, \text{ en la superficie divisoria.}
 \end{aligned} \tag{5.57}$$

En esta ecuación se usaron los siguientes resultados

$$\left\langle \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \langle \mathbf{T}_\beta \rangle_s \right\rangle_s = - \left\langle \frac{\mu_\beta}{a_{vs}} \mathbf{K}_\beta^{-1} \Big|_{\eta\omega} \cdot \mathbf{v}_\beta \right\rangle_{\eta\omega}, \tag{5.58}$$

$$\left\langle \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \langle \mathbf{B}_\beta \rangle_s \right\rangle_s = \left\langle \frac{\mu_\beta}{a_{vs}} \varepsilon_\beta^{-3} (\mathbf{x}) (\nabla \varepsilon_\beta (\mathbf{x}) \cdot \nabla \varepsilon_\beta (\mathbf{x})) \Big|_{\eta\omega} \mathbf{v}_\beta \right\rangle_{\eta\omega}. \tag{5.59}$$

cuya deducción se presenta en la Sección 5.5.

Es conveniente mencionar que la ecuación (5.57) es equivalente a la ecuación (70) de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a). Sin embargo, es de notarse la ausencia de parámetros ajustables, a diferencia de la ecuación (81) del mismo trabajo.

Por otro lado, al igual que en la definición de la velocidad superficial, la ecuación (5.54) puede expresarse, usando el teorema de la divergencia superficial y suponiendo que los cambios espaciales de los integrandos en el lado derecho de esta ecuación son despreciables dentro de las secciones transversales de  $V_\eta$  y  $V_\omega$ , como sigue

$$\begin{aligned}
 \int_{A_{\omega\eta}^*} \nabla_s \cdot (\delta \langle \mathbf{T} \rangle_s) dA &= \int_{A_\omega(\mathbf{x}_\omega)} \mathbf{n}_\omega \cdot \left[ -\mathbf{l} \left( \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta - \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta \right) + \mu_\beta \left( \varepsilon_\beta^{-1} (\mathbf{x}) \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \varepsilon_{\beta\omega}^{-1} \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega \right) \right] dA \\
 &+ \int_{A_\eta(\mathbf{x}_\eta)} \mathbf{n}_\eta \cdot \left[ -\mathbf{l} \left( \langle p_\beta \rangle_\eta^\beta - \langle p_\beta \rangle_\eta^\beta \right) + \mu_\beta \left( \varepsilon_\beta^{-1} (\mathbf{x}) \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta \right) \right] dA.
 \end{aligned} \tag{5.60}$$

Si en las superficies  $A_\eta(\mathbf{x}_\eta)$  y  $A_\omega(\mathbf{x}_\omega)$ , se satisfacen las restricciones de escala bajo las cuales los campos de presión y velocidad resultantes de las ecuaciones de transporte generalizadas corresponden a sus valores en las regiones homogéneas, el lado derecho de la ecuación (5.60) puede suponerse mucho menor que la unidad y como consecuencia

$$\mu_\beta \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \varepsilon_{\beta\omega}^{-1} \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega - \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta \right) \gg \nabla_s \cdot \delta \langle \mathbf{T} \rangle_s. \tag{5.61}$$

Por lo que la ecuación (5.57) se reduce a

$$-\mathbf{n}_{\omega\eta} \left( \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta - \langle p_\beta \rangle_\eta^\beta \right) + \mu_\beta \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \boldsymbol{\varepsilon}_{\beta\omega}^{-1} \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega - \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta \right) = \frac{\mu_\beta}{a_{vs}} \mathbf{K}^{-1} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega \quad (5.62)$$

en la superficie divisoria,

para obtener la ecuación anterior se despreciaron los cambios espaciales de la viscosidad y de  $a_{vs}$  en la región de integración. En esta última además, se introdujo un *tensor mixto de esfuerzos* ( $\mathbf{K}^{-1}$ ), el cual se define como

$$\mathbf{K}^{-1} = \underbrace{\mathbf{K}_\beta^{-1} \Big|_{\eta\omega}}_{\text{esfuerzos globales}} + \underbrace{\varepsilon_\beta^{-3} \left( \nabla \varepsilon_\beta \cdot \nabla \varepsilon_\beta \right) \Big|_{\eta\omega}}_{\text{esfuerzos de Brinkman}} \mathbf{I}. \quad (5.63)$$

Nótese que  $\mathbf{K}^{-1}$  es una combinación de los esfuerzos debidos a los cambios en la microestructura del medio poroso (de aquí en adelante se les denotará como esfuerzos de Brinkman) y globales. Dicha combinación de esfuerzos fue previamente usada por Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a) para definir el vector de arrastre  $\mathbf{d}$ , que aparece en la versión vectorial de la condición de salto (ecuación (84) en Ochoa-Tapia y Whitaker 1995a) y se transforma en el parámetro ajustable  $\beta$  en la versión escalar de la misma (ver ecuación (5.1)). Conviene remarcar que el término  $\mathbf{K}^{-1}$  involucra la combinación de cantidades promedio asociadas con cambios espaciales de propiedades macroscópicas. Además se supuso que el tensor mixto de esfuerzos puede considerarse como constante en el pequeño dominio de integración  $A_{\eta\omega}^*$  (ver Sección 5.5). La cual es la superficie de la región de promediado cuando su centroide se localiza en la superficie divisoria. No debe olvidarse que se está analizando el sistema estudiado por Beavers y Joseph (1967), donde la velocidad promedio está dada por

$$\langle v_\beta \rangle_\lambda = \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\lambda \cdot \mathbf{i}, \quad \lambda = \omega, \eta. \quad (5.64)$$

Por lo que se necesita la componente tangencial de la ecuación (5.62). La cual se obtiene al hacer el producto punto con el vector unitario tangente a la superficie  $\mathbf{i}$

$$\varepsilon_{\beta\omega}^{-1} \frac{\partial \langle v_\beta \rangle_\omega}{\partial y} - \frac{\partial \langle v_\beta \rangle_\eta}{\partial y} = \frac{K^{-1}}{a_{vs}} \langle v_\beta \rangle_\omega, \quad \text{en la superficie divisoria,} \quad (5.65)$$

donde la forma escalar de  $\mathbf{K}^{-1}$  es

$$K^{-1} = \mathbf{i} \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{i} = K_{\beta}^{-1} \Big|_{\eta\omega} + \varepsilon_{\beta}^{-3} \left( \frac{d\varepsilon_{\beta}}{dy} \right)^2 \Big|_{\eta\omega}. \quad (5.66)$$

La ecuación (5.65) representa una condición de salto similar a la propuesta originalmente por Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a), con la importante diferencia de no implicar el uso de parámetros ajustables. De hecho, al comparar las ecuaciones (5.1) y (5.65) se obtiene la siguiente relación entre  $\beta$  y  $K^{-1}$

$$\beta = \frac{\sqrt{K_{\beta,\omega} K^{-1}}}{a_{vs}}. \quad (5.67)$$

Como ya se mencionó, el tensor mixto de esfuerzos es la suma de las contribuciones de los esfuerzos globales y de Brinkman. De acuerdo a la ecuación (5.66), esta última puede obtenerse directamente a partir de una expresión que describa los cambios espaciales de la porosidad en la inter-región (Pérez-Córdova y Ochoa-Tapia, 1995). La dificultad en el cálculo de  $K^{-1}$  radica en la determinación de  $K_{\beta}^{-1} \Big|_{\eta\omega}$ , la cual puede llevarse a cabo a partir de la ecuación (5.22). Esto implica el conocer los campos de las desviaciones espaciales de presión y velocidad en la inter-región, para lo que se necesitan plantear y resolver los problemas de cerradura correspondientes. Este es el objetivo del siguiente capítulo. Por el momento se presentan los detalles que permiten llegar a las ecuaciones (5.58) y (5.59).

### 5.5.- Relación entre $\langle \psi \rangle_s$ y $\psi_s$ .

Relación entre  $\langle \mathbf{t}_\beta \rangle_s$  y  $\mathbf{t}_{\beta s}$ .

Para facilitar la nomenclatura, se definen las siguientes propiedades,

$$\langle \mathbf{t}_\beta \rangle_s = \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \langle \mathbf{T}_\beta \rangle_s; \langle \mathbf{t}_\beta \rangle = \mu_\beta \mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle; \langle \mathbf{t}_\beta \rangle_\omega = \mu_\beta \mathbf{K}_{\beta\omega}^{-1} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega. \quad (5.68)$$

En la sección anterior se definió al exceso de esfuerzo global como,

$$\int_{A_{\omega\eta}} \langle \mathbf{t}_\beta \rangle_s dA = \int_{V_\omega} \langle \mathbf{t}_\beta \rangle dV - \int_{V_\omega} \langle \mathbf{t}_\beta \rangle_\omega dV. \quad (5.69)$$

El objetivo aquí es encontrar la relación entre  $\langle \mathbf{t}_\beta \rangle_s$  y  $\mathbf{t}_{\beta s}$  definido como

$$\mathbf{t}_{\beta s} = \frac{\mu_\beta}{a_{vs}} \mathbf{K}_\beta^{-1} \Big|_s \cdot \mathbf{v}_\beta = \int_{y=-r_0}^{y=+r_0} \mathbf{t}_\beta dy. \quad (5.70)$$

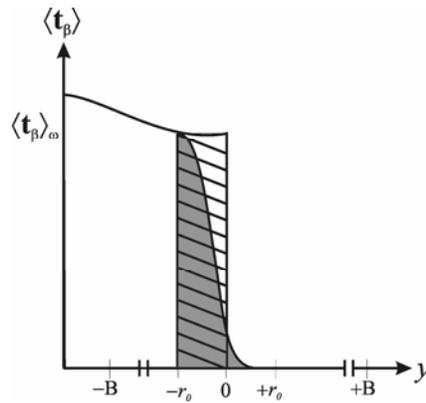
donde  $a_{vs}$  se refiere al valor del área interfacial por unidad de volumen ( $a_v = \mathcal{A}_{\beta\sigma} / \mathcal{V}$ )

evaluada en la superficie.

Para cumplir el objetivo es conveniente, para el caso en que los efectos de curvatura de la inter-región sean despreciables, expresar la ecuación (5.69) como

$$\langle \mathbf{t}_\beta \rangle_s = \int_{y=-B}^{y=+B} \langle \mathbf{t}_\beta \rangle dy - \int_{y=-B}^{y=0} \langle \mathbf{t}_\beta \rangle_\omega dy. \quad (5.71)$$

En la Figura 5-4, se muestra la distribución de  $\langle \mathbf{t}_\beta \rangle$  con la posición cerca de la frontera (las longitudes características asociadas con la inter-región son las mismas que en los casos anteriores).



**Figura 5-4:** Distribución de esfuerzos globales con la posición.  denota

$\int_{y=-r_0}^{y=0} \langle \mathbf{t}_\beta \rangle_\omega dy$  y  representa  $\int_{y=-r_0}^{y=+r_0} \langle \mathbf{t}_\beta \rangle dy$ .

De acuerdo a dicha figura, en el intervalo  $y \in [+r_0, +B]$  el esfuerzo  $\langle \mathbf{t}_\beta \rangle$  es despreciable, mientras que para  $y \in [-B, -r_0]$  el esfuerzo es prácticamente idéntico a  $\langle \mathbf{t}_\beta \rangle_\omega$ , de manera que la ecuación (5.71) se puede simplificar a

$$\langle \mathbf{t}_\beta \rangle_s = \int_{y=-r_0}^{y=+r_0} \langle \mathbf{t}_\beta \rangle dy - \int_{y=-r_0}^{y=0} \langle \mathbf{t}_\beta \rangle_\omega dy. \quad (5.72)$$

De aquí se puede seguir el procedimiento de la Sección 4 del trabajo de Wood y col. (2000) para llegar a

$$-\langle \mathbf{t}_\beta \rangle_s = \frac{1}{\mathcal{A}_{\eta\omega}^*} \int_{A_{\eta\omega}^*} \mathbf{t}_{\beta s} dA = \langle \mathbf{t}_{\beta s} \rangle_{\eta\omega} = \frac{\mu_\beta}{a_{vs}} \left\langle \mathbf{K}_\beta^{-1} \Big|_{\eta\omega} \cdot \mathbf{v}_\beta \right\rangle_{\eta\omega}. \quad (5.73)$$

donde  $\mathcal{A}_{\eta\omega}^*$  se refiere al área de la inter-región  $\eta-\omega$  ocupada por la región de promediado cuando su centroide se localiza en la superficie divisoria. En la ecuación (5.73) el signo de menos viene de suponer que la cantidad obtenida en la ecuación (5.72) es negativa (ver Figura 5-4). Cuando este no sea el caso, se debe cambiar el signo en el lado izquierdo de la ecuación (5.73).

*Relación entre  $\langle \mathbf{b}_\beta \rangle_s$  y  $\mathbf{b}_{\beta s}$ .*

En la ecuación (5.56) se definió al exceso del esfuerzo de Brinkman como,

$$\int_{A_{\omega\eta}} \langle \mathbf{b}_\beta \rangle_s dA = \int_{V_\omega} \langle \mathbf{b}_\beta \rangle dV, \quad (5.74)$$

donde se usaron las siguientes definiciones,

$$\langle \mathbf{b}_\beta \rangle_s = \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \langle \mathbf{B}_\beta \rangle_s; \quad \langle \mathbf{b}_\beta \rangle = \mu_\beta \mathcal{E}_\beta^{-3}(\mathbf{x}) (\nabla \mathcal{E}_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \mathcal{E}_\beta(\mathbf{x})) \langle \mathbf{v}_\beta \rangle. \quad (5.75)$$

Es importante mencionar que estos esfuerzos, a diferencia de los globales, sólo toman valores significativos en la frontera y no deben confundirse con los esfuerzos de la primera corrección de Brinkman  $(\mu_\beta \nabla^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle)$ .

Debe recordarse que el término  $\langle \mathbf{b}_\beta \rangle$  viene de una combinación de las dos correcciones de Brinkman como lo muestra la ecuación (5.48). De manera que, físicamente se pueden interpretar como esfuerzos generados por los cambios espaciales de la porosidad cerca de la frontera, esta situación se presenta gráficamente en la Figura 5-5.

Al igual que en el caso anterior, el primer paso consiste en obtener la forma simplificada de la ecuación (5.74) cuando los efectos de curvatura de la inter-región sean despreciables,

$$\langle \mathbf{b}_\beta \rangle_s = \int_{y=-B}^{y=+B} \langle \mathbf{b}_\beta \rangle dy . \quad (5.76)$$

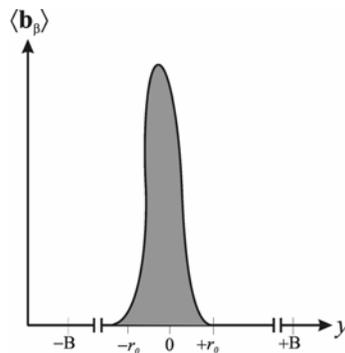
De acuerdo a la distribución de esfuerzos mostrada en la Figura 5-5, la ecuación anterior se puede simplificar a,

$$\langle \mathbf{b}_\beta \rangle_s = \int_{y=-r_0}^{y=+r_0} \langle \mathbf{b}_\beta \rangle dy . \quad (5.77)$$

Y de aquí se puede seguir la metodología de Wood y col. (2000) para obtener,

$$\langle \mathbf{b}_\beta \rangle_s = \frac{1}{\mathcal{A}_{\eta\omega}^* A_{\eta\omega}^*} \int \mathbf{b}_{\beta s} dA = \langle \mathbf{b}_{\beta s} \rangle_{\eta\omega} = \frac{\mu_\beta}{a_{vs}} \left\langle \varepsilon_\beta^{-3}(\mathbf{x}) (\nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x})) \Big|_{\eta\omega} \mathbf{v}_\beta \right\rangle_{\eta\omega} . \quad (5.78)$$

Esto concluye las demostraciones.



**Figura 5-5:** Distribución de esfuerzos de Brinkman con la posición.

---

## Capítulo 6:

### Estimación del tensor mixto de esfuerzos.

En el capítulo anterior se obtuvo una forma cerrada de la condición de salto de transferencia de cantidad de movimiento en la inter-región medio poroso-fluido. Dicha condición no implica el uso de parámetros ajustables, sino un tensor mixto de esfuerzos,  $\mathbf{K}^{-1}$ , el cual es una combinación de los esfuerzos globales y de Brinkman en la inter-región. Estos últimos pueden estimarse a partir de las expresiones desarrolladas por Pérez-Córdova y Ochoa-Tapia (1995). Sin embargo, no se ha reportado en la literatura una expresión que permita predecir los esfuerzos globales en la frontera. Para resolver este problema, conviene recordar que en el capítulo anterior se obtuvo una definición de los esfuerzos globales dependiente de la posición  $\mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x})$  que puede usarse para predecir el valor de la permeabilidad en la frontera. Dado que  $\mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x})$  es función de las desviaciones espaciales de la velocidad y la presión, es necesario plantear y resolver los problemas de cerradura correspondientes para calcular los esfuerzos globales.

El análisis se llevará hasta el planteamiento del problema de cerradura, dejando para un trabajo posterior su solución. Por ello se propone, como primera aproximación, extrapolar el uso de modelos, desarrollados para predecir la permeabilidad en la región homogénea  $-\omega$ , a la frontera. Esto da lugar a expresiones analíticas para el tensor mixto de esfuerzos, que a su vez permitirán la estimación del coeficiente de salto. De esta manera, se comprobará que el orden de magnitud del coeficiente de salto es la unidad, como originalmente lo habían propuesto Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a), además se compararán los resultados con los reportados por Goyeau y col. (2003).

## 6.1.- Problemas local y promedio.

En el capítulo anterior se partió de las ecuaciones que describen el problema local de transferencia de cantidad de movimiento en un sistema que consiste en el flujo de un fluido (fase  $-\beta$ ) a través de un medio poroso (compuesto por las fases fluida y sólida (fase  $-\sigma$ )),

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\beta = 0, \quad \text{en la fase } -\beta, \quad (6.1)$$

$$0 = -\nabla p_\beta + \rho_\beta \mathbf{g} + \mu_\beta \nabla^2 \mathbf{v}_\beta, \quad \text{en la fase } -\beta, \quad (6.2)$$

$$\mathbf{v}_\beta = 0, \quad \text{en la interfase } \beta - \sigma. \quad (6.3)$$

Mediante un proceso de promediado, sin involucrar restricciones de escala, se obtuvieron ecuaciones de transferencia generalizadas (ecuaciones (5.10) y (5.21)), las cuales son válidas en todo el dominio y pueden expresarse como sigue

$$\nabla \cdot (\varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) = 0, \quad (6.4)$$

$$0 = -\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \rho_\beta \mathbf{g} + \mu_\beta \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \mu_\beta \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla (\varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \langle \mathbf{v}_\beta \rangle) - \mu_\beta \mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle. \quad (6.5)$$

En la ecuación anterior se utilizó un tensor de esfuerzos dependiente de la posición

$$\begin{aligned} \mu_\beta \mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle &= \frac{1}{\mathcal{V}_\beta(\mathbf{x})} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\mathbf{l} \tilde{p}_\beta - \mu_\beta \nabla \tilde{\mathbf{v}}_\beta) dA \\ &+ \frac{1}{\mathcal{V}_\beta(\mathbf{x})} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \left[ \mathbf{l} \left( \langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} - \langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \right) + \mu_\beta \left( \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} - \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} \right) \right] dA, \end{aligned} \quad (6.6)$$

el cual tiene la siguiente propiedad

$$\mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0, & \text{en la región homogénea } -\eta \\ \mathbf{K}_{\beta\omega}^{-1}, & \text{en la región homogénea } -\omega \end{cases} \quad (6.7)$$

Al imponer las restricciones de escala correspondientes a las ecuaciones (6.4) y (6.5), se obtuvieron, las siguientes ecuaciones de medio efectivo para cada región,

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta^\beta = 0, \quad \text{en la región homogénea } -\eta, \quad (6.8)$$

$$0 = -\nabla \langle p_\beta \rangle_\eta^\beta + \rho_\beta \mathbf{g} + \mu_\beta \nabla^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta, \quad \text{en la región homogénea } -\eta, \quad (6.9)$$

$$\nabla \cdot \left( \varepsilon_{\beta\omega} \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega^\beta \right) = 0, \quad \text{en la región homogénea } -\omega, \quad (6.10)$$

$$0 = -\nabla \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta + \rho_\beta \mathbf{g} + \varepsilon_{\beta\omega}^{-1} \mu_\beta \nabla^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega - \mu_\beta \mathbf{K}_{\beta\omega}^{-1} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega, \quad \text{en la región homogénea } -\omega. \quad (6.11)$$

Por otro lado, al usar la metodología de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a) junto con la de Wood y col. (2000) se obtuvieron las siguientes condiciones a la frontera,

$$\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta \right) = 0 \quad \text{en la superficie divisoria}, \quad (6.12)$$

$$-\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta - \langle p_\beta \rangle_\eta^\beta \right) + \mu_\beta \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \varepsilon_{\beta\omega}^{-1} \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega - \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta \right) = \frac{\mu_\beta}{a_{vs}} \mathbf{K}^{-1} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega \quad (6.13)$$

en la superficie divisoria.

donde se definió un tensor mixto de esfuerzos  $\mathbf{K}^{-1}$ , como

$$\mathbf{K}^{-1} = \underbrace{\mathbf{K}_\beta^{-1} \Big|_{\eta\omega}}_{\text{esfuerzos globales}} + \underbrace{\varepsilon_\beta^{-3} \left( \nabla \varepsilon_\beta \cdot \nabla \varepsilon_\beta \right) \Big|_{\eta\omega}}_{\text{esfuerzos de Brinkman}} \mathbf{I}, \quad (6.14)$$

el cual es el resultado de combinar los esfuerzos globales y de Brinkman. Como se discutió en el Capítulo anterior, el mayor problema en el cálculo de  $\mathbf{K}^{-1}$  radica en obtener  $\mathbf{K}_\beta^{-1} \Big|_{\eta\omega}$ . El cual puede obtenerse a partir de la ecuación (6.6) al localizar el centroide en la superficie del medio poroso. De acuerdo a esta ecuación,  $\mathbf{K}_\beta^{-1} \Big|_{\eta\omega}$  es función de los campos de desviaciones espaciales de la presión y velocidad. Por ello en la siguiente sección se desarrollarán los problemas de valor a la frontera cuya solución permitirá la obtención de los esfuerzos globales en la frontera.

## 6.2.- Problema de cerradura.

Para obtener las ecuaciones gobernantes de  $\tilde{p}_\beta$  y  $\tilde{\mathbf{v}}_\beta$ , es necesario retomar las definiciones de las desviaciones espaciales de presión y velocidad,

$$\tilde{p}_\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} = p_\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} - \langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta}, \quad (6.15)$$

$$\tilde{\mathbf{v}}_\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} = \mathbf{v}_\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta}. \quad (6.16)$$

El uso de las ecuaciones anteriores en la resta de las ecuaciones (6.1) y (6.4) así como las ecuaciones (6.2) y (6.5), respectivamente, da como resultado

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}_\beta = \underbrace{\varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta}_{\text{fuente}}, \text{ en la fase } -\beta, \quad (6.17)$$

$$\begin{aligned} 0 = & -\nabla \tilde{p}_\beta + \mu_\beta \nabla^2 \tilde{\mathbf{v}}_\beta - \underbrace{\mu_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla^2 \varepsilon_\beta(\mathbf{x})}_{\text{fuente}} \\ & + \underbrace{\mu_\beta \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta}_{\text{fuente}} + \underbrace{\mu_\beta \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \mathbf{K}_{\beta\sigma}^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta}_{\text{fuente}}, \text{ en la fase } -\beta. \end{aligned} \quad (6.18)$$

La condición de frontera válida en la interfase fluido-sólido se obtiene de usar la descomposición espacial de la velocidad en la condición de frontera interfacial (6.3),

$$\text{C.F.1} \quad \tilde{\mathbf{v}}_\beta = - \underbrace{\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta}_{\text{fuente}}, \text{ en la interfase } \beta - \sigma. \quad (6.19)$$

En las ecuaciones (6.17)-(6.19) se han identificado cinco fuentes de desviaciones. A diferencia del problema de las desviaciones de la velocidad en la región homogénea  $-\omega$  (Whitaker, 1999), tanto la porosidad como la permeabilidad dependen de la posición del centroide del volumen de promediado.

Debe ser claro que no se desea resolver el problema de valor a la frontera para las desviaciones de la velocidad en toda la superficie divisora, sino en una región representativa como la que se muestra en la Figura 6-1. Donde se puede notar que a una determinada distancia  $2h$ , las desviaciones espaciales corresponden a las de las regiones homogéneas. De esta forma es posible imponer las siguientes condiciones de frontera

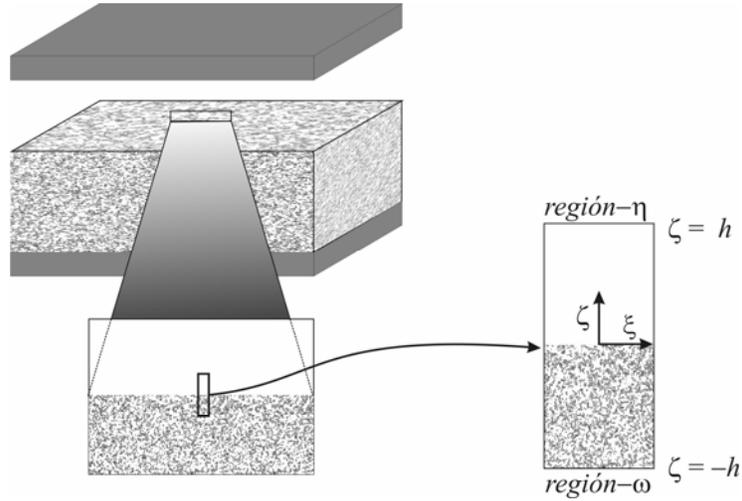
$$\text{C.F.2} \quad \text{En } \zeta = -h \quad \tilde{\mathbf{v}}_\beta = \tilde{\mathbf{v}}_\omega; \tilde{p}_\beta = \tilde{p}_{\beta,\omega}, \quad (6.20)$$

$$\text{C.F.3} \quad \text{En } \zeta = h \quad \tilde{\mathbf{v}}_\beta = \tilde{\mathbf{v}}_\eta = 0; \tilde{p}_\beta = \tilde{p}_{\beta,\eta} = 0. \quad (6.21)$$

En esta última ecuación se aprovechó el hecho que las ecuaciones de medio efectivo en la región  $-\eta$  son idénticas a las ecuaciones locales para la fase  $-\beta$ .

Para completar el planteamiento del problema de valor a la frontera para las desviaciones espaciales, se imponen condiciones de periodicidad en las direcciones tangentes a la superficie del medio poroso

$$\text{Periodicidad: } \tilde{p}_\beta(\mathbf{r} + \ell_i) = \tilde{p}_\beta(\mathbf{r}), \quad \tilde{\mathbf{v}}_\beta(\mathbf{r} + \ell_i) = \tilde{\mathbf{v}}_\beta(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (6.22)$$



**Figura 6-1:** Zona representativa de la inter-región.

En este momento es conveniente notar que el problema de valor a la frontera para las desviaciones espaciales no es invariante a una transformación de coordenadas del tipo  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \ell_i$ , a menos que  $\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$  y su gradiente puedan considerarse como constantes.

Para esto se consideran las siguientes expansiones en series de Taylor,

$$\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x} + \mathbf{y}_\beta} = \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} + \mathbf{y}_\beta \cdot \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} + \frac{1}{2} \mathbf{y}_\beta \mathbf{y}_\beta : \nabla \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} + \dots, \quad (6.23)$$

$$\nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} = \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} + \mathbf{y}_\beta \cdot \nabla \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} + \frac{1}{2} \mathbf{y}_\beta \mathbf{y}_\beta : \nabla \nabla \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} + \dots \quad (6.24)$$

Al sustituir estas expresiones en las ecuaciones (6.17)-(6.19), da como resultado

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}_\beta = \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} + \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{y}_\beta \cdot \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \quad (6.25)$$

$$\begin{aligned} 0 = & -\nabla \tilde{p}_\beta + \mu_\beta \nabla^2 \tilde{\mathbf{v}}_\beta - \mu_\beta \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla^2 \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \\ & - \mu_\beta \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla^2 \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \mathbf{y}_\beta \cdot \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \\ & + \mu_\beta \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \\ & + \mu_\beta \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{y}_\beta \cdot \nabla \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \\ & + \mu_\beta \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \\ & + \mu_\beta \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{y}_\beta \cdot \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}}, \end{aligned} \quad (6.26)$$

$$\text{C.F.1} \quad \tilde{\mathbf{v}}_\beta = -\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} - \mathbf{y}_\beta \cdot \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}}. \quad (6.27)$$

Las ecuaciones anteriores pueden simplificarse si se aceptan las siguientes restricciones de escala,

$$\frac{r_0}{L_v} \ll 1, \quad \frac{r_0}{L_{v1}} \ll 1, \quad (6.28)$$

donde  $L_v$  es la longitud característica asociada con  $\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}}$ , mientras que  $L_{v1}$  es la

longitud característica correspondiente a  $\nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}}$ . Bajo estas condiciones, el problema

de valor a la frontera para las desviaciones espaciales de presión y velocidad es

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}_\beta = \underbrace{\varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}}}_{\text{fuente}}, \text{ en la fase } -\beta, \quad (6.29)$$

$$\begin{aligned} 0 = & -\nabla \tilde{p}_\beta + \mu_\beta \nabla^2 \tilde{\mathbf{v}}_\beta - \underbrace{\mu_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla^2 \varepsilon_\beta(\mathbf{x})}_{\text{fuente}} \\ & + \underbrace{\mu_\beta \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}}}_{\text{fuente}} + \underbrace{\mu_\beta \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}}}_{\text{fuente}}, \text{ en la fase } -\beta, \end{aligned} \quad (6.30)$$

---


$$\text{C.F.1} \quad \tilde{\mathbf{v}}_\beta = - \underbrace{\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta}_{\text{fuente}} \Big|_{\mathbf{x}}, \quad \text{en la interfase } \beta - \sigma, \quad (6.31)$$

$$\text{C.F.2} \quad \text{En } \zeta = -h \quad \tilde{\mathbf{v}}_\beta = \tilde{\mathbf{v}}_\omega, \quad (6.32)$$

$$\text{C.F.3} \quad \text{En } \zeta = h \quad \tilde{\mathbf{v}}_\beta = \tilde{\mathbf{v}}_\eta = 0, \quad (6.33)$$

$$\text{Periodicidad:} \quad \tilde{p}_\beta(\mathbf{r} + \zeta_i) = \tilde{p}_\beta(\mathbf{r}), \quad \tilde{\mathbf{v}}_\beta(\mathbf{r} + \zeta_i) = \tilde{\mathbf{v}}_\beta(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (6.34)$$

La estructura lineal de este problema de valor a la frontera sugiere proponer las siguientes expresiones para los campos de desviaciones

$$\tilde{\mathbf{v}}_\beta = \mathbf{C}_\beta : \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta + \mathbf{B}_\beta \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta, \quad (6.35)$$

$$\tilde{P}_\beta = \mu_\beta \mathbf{A}_\beta : \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta + \mu_\beta \mathbf{b}_\beta \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta, \quad (6.36)$$

donde los coeficientes que multiplican a las fuentes son las variables de cerradura.

Al sustituir estas últimas superposiciones en las ecuaciones (6.29)-(6.34), se obtienen los siguientes problemas de valor a la frontera

*Problema I:*

$$\nabla \cdot \mathbf{B}_\beta = \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}_0) \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}_0), \quad \text{en la fase } -\beta, \quad (6.37)$$

$$\mathbf{0} = -\nabla \mathbf{b}_\beta + \nabla^2 \mathbf{B}_\beta - \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}_0) \nabla^2 \varepsilon_\beta(\mathbf{x}_0) \mathbf{I} + \varepsilon_\beta(\mathbf{x}_0) \mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}_0), \quad \text{en la fase } -\beta, \quad (6.38)$$

$$\text{C.F.1} \quad \mathbf{B}_\beta = -\mathbf{I}, \quad \text{en la interfase } \beta - \sigma, \quad (6.39)$$

$$\text{C.F.2} \quad \text{En } \zeta = h \quad \mathbf{B}_\beta = \mathbf{0}, \quad (6.40)$$

$$\text{C.F.3} \quad \text{En } \zeta = -h \quad \mathbf{B}_\beta = \mathbf{B}_\omega, \quad (6.41)$$

$$\text{Periodicidad:} \quad \mathbf{b}_\beta(\mathbf{r} + \zeta_i) = \mathbf{b}_\beta(\mathbf{r}), \quad \mathbf{B}_\beta(\mathbf{r} + \zeta_i) = \mathbf{B}_\beta(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (6.42)$$

*Problema II:*

$$\nabla \cdot \mathbf{C}_\beta = \mathbf{0}, \quad \text{en la fase } -\beta, \quad (6.43)$$

$$\mathbf{0} = -\nabla \mathbf{A}_\beta + \nabla^2 \mathbf{C}_\beta + \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}_0) \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}_0) \mathbf{I}, \quad \text{en la fase } -\beta, \quad (6.44)$$

$$\text{C.F.1} \quad \mathbf{C}_\beta = \mathbf{0}, \quad \text{en la interfase } \beta - \sigma, \quad (6.45)$$


---

$$\text{C.F.2} \quad \text{En } \zeta = h \quad \mathbf{C}_\beta = \mathbf{0}, \quad (6.46)$$

$$\text{C.F.3} \quad \text{En } \zeta = -h \quad \mathbf{C}_\beta = \mathbf{0}, \quad (6.47)$$

$$\text{Periodicidad: } \mathbf{A}_\beta(\mathbf{r} + \ell_i) = \mathbf{A}_\beta(\mathbf{r}), \quad \mathbf{C}_\beta(\mathbf{r} + \ell_i) = \mathbf{C}_\beta(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (6.48)$$

En las ecuaciones (6.41) y (6.47) se supuso que en  $\zeta = -h$ ,  $\langle v_\beta \rangle^\beta - \langle v_\beta \rangle_\omega^\beta \ll 1$ . Además,

las desviaciones espaciales en la región homogénea  $-\omega$  están dadas por

$$\tilde{\mathbf{v}}_\omega = \mathbf{B}_\omega \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega^\beta, \quad (6.49)$$

$$\tilde{P}_{\beta,\omega} = \mu_\beta \mathbf{b}_\omega \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega^\beta, \quad (6.50)$$

donde las variables de cerradura  $\mathbf{B}_\omega$  y  $\mathbf{b}_\omega$  se obtienen de resolver el problema de cerradura correspondiente (ecuaciones 4.2-27, en Whitaker, 1999). Nótese que este problema de cerradura puede obtenerse a partir del *Problema I* fijando el centroide en la región homogénea  $-\omega$  (es decir,  $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_\omega$ ) y considerando que, en esta región, los cambios espaciales de la porosidad son despreciables.

Por otro lado, en su trabajo Eidsath y col. (1983) propusieron imponer condiciones de simetría en las posiciones de la celda unitaria (representativa del seno del medio poroso) paralelas a la dirección del flujo, de manera que

$$\text{En } \zeta = -h \quad \frac{\partial \mathbf{B}_\omega}{\partial \zeta} = 0. \quad (6.51)$$

De esta forma, al suponer continuidad de las derivadas del campo de las desviaciones espaciales de la velocidad en esta frontera, la condición de (6.41) se puede reemplazar por,

$$\text{En } \zeta = -h \quad \frac{\partial \mathbf{B}_\beta}{\partial \zeta} = 0. \quad (6.52)$$

Con esta condición se evita resolver el problema de cerradura en la región homogénea  $-\omega$ .

Para explorar la pertinencia de resolver estos dos problemas, es conveniente realizar un análisis de orden de magnitud en los dos problemas arriba planteados.

A partir de la ecuación (6.39) se obtiene que

$$\mathbf{B}_\beta = \mathbf{O}(1). \quad (6.53)$$

Al usar este estimado en la ecuación (6.38) permite llegar a

$$\mathbf{b}_\beta = \mathbf{O}\left(\frac{1}{l_\beta}\right). \quad (6.54)$$

Por último, un análisis de orden de magnitud en la ecuación (6.44) da como resultados

$$\mathbf{C}_\beta = \mathbf{O}\left(\frac{l_\beta^2 \Delta \varepsilon_\beta}{r_0 \varepsilon_\beta}\right); \quad \mathbf{A}_\beta = \mathbf{O}\left(\frac{l_\beta \Delta \varepsilon_\beta}{r_0 \varepsilon_\beta}\right). \quad (6.55)$$

Aquí se supuso que la longitud característica asociada con la fracción volumétrica es  $r_0$  en la inter-región. De esta forma, haciendo un análisis de orden de magnitud de las ecuaciones (6.35) y (6.36) se obtiene lo siguiente

$$\mathbf{O}(\tilde{\mathbf{v}}_\beta) = \mathbf{O}\left[1, \frac{l_\beta^2 \Delta \varepsilon_\beta}{r_0 L \varepsilon_\beta}\right] \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta, \quad (6.56)$$

$$\mathbf{O}(\tilde{p}_\beta) = \mathbf{O}\left[1, \frac{l_\beta^2 \Delta \varepsilon_\beta}{r_0 L \varepsilon_\beta}\right] \frac{\mu_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta}{l_\beta}. \quad (6.57)$$

Por lo que si en la inter-región se cumple la restricción de escala

$$\frac{l_\beta^2 \Delta \varepsilon_\beta}{r_0 L \varepsilon_\beta} \ll 1, \quad (6.58)$$

sólo es necesario resolver el *Problema I* para tener una estimación de los campos de desviaciones espaciales de la velocidad y la presión, los cuales se pueden expresar como

$$\tilde{\mathbf{v}}_\beta = \mathbf{B}_\beta \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta, \quad (6.59)$$

$$\tilde{p}_\beta = \mu_\beta \mathbf{b}_\beta \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta. \quad (6.60)$$

Cuando este no sea el caso, la definición del esfuerzo global y, por tanto, la estructura de la condición de salto se modifican notablemente debido a la incorporación de un término extra relacionado con el gradiente de la velocidad.

Hasta este punto se ha conservado cierto grado de generalidad al no fijar la posición del centroide en el planteamiento del problema de cerradura. Esto es conveniente si se desea resolver este problema en cada posición de la inter-región y, de esta forma, calcular los cambios espaciales del tensor de esfuerzos. De hecho, como se mostró en el Capítulo 4, este es el procedimiento a seguir para obtener una versión cerrada de la ecuación generalizada de transferencia de cantidad de movimiento, la cual constituye el modelo de un solo dominio (Goyeau y col., 2003). Sin embargo, para obtener una forma cerrada de la condición de salto, sólo se necesita resolver el problema de cerradura en la superficie divisoria entre el medio poroso y el fluido (ver Sección 5.5). En este contexto, cuando el medio poroso es homogéneo, la superficie divisoria se localiza en el lugar donde  $\varepsilon_\beta = \frac{1}{2}(1 + \varepsilon_{\beta\omega})$  y será referida, de aquí en adelante, como la posición donde el centroide está ubicado en  $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ .

### 6.3.- Forma cerrada del tensor de esfuerzos globales.

No debe olvidarse que el propósito de estimar los campos de las variables de cerradura es estimar el valor del tensor de permeabilidad en la inter-región, para así calcular el coeficiente de salto. De esta forma, al sustituir las ecuaciones (6.59) y (6.60) en el tensor de permeabilidad dependiente de la posición (ecuación (6.6)) evaluado en  $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ , se obtiene

$$\begin{aligned} \mu_\beta \mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}_0) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \Big|_{\mathbf{x}_0} &= \frac{\mu_\beta}{\mathcal{V}_\beta(\mathbf{x}_0)} \left[ \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x}_0)} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\mathbf{l}b_\beta - \nabla \mathbf{B}_\beta) dA \right] \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}_0} \\ &+ \frac{1}{\mathcal{V}_\beta(\mathbf{x}_0)} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x}_0)} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \left[ \mathbf{l} \Delta \langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}_0} - \mu_\beta \nabla \left( \Delta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}_0} \right) \right] dA. \end{aligned} \quad (6.61)$$

Con el fin de simplificar la ecuación anterior, se sustituyen las series de Taylor para  $\langle p_\beta \rangle^\beta$  y  $\nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$  alrededor de  $\mathbf{x}_0$  en el último término de la ecuación (6.61) para obtener,

$$\begin{aligned}
 \mu_\beta \mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}_0) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \Big|_{\mathbf{x}_0} &= -\frac{\mu_\beta}{\mathcal{V}_\beta(\mathbf{x}_0)} \left[ \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x}_0)} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (-\mathbf{l}\mathbf{b}_\beta + \nabla \mathbf{B}_\beta) dA \right] \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}_0} \\
 &+ \frac{\varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}_0)}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x}_0)} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \left[ \mathbf{l} \left( \mathbf{y}_\beta \cdot \nabla \langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}_0} \right) - \mu_\beta \left( \mathbf{y}_\beta \cdot \nabla \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}_0} \right) \right] dA \\
 &+ \frac{\varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}_0)}{2\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x}_0)} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \left[ \mathbf{l} \left( \mathbf{y}_\beta \mathbf{y}_\beta : \nabla \nabla \langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}_0} \right) - \mu_\beta \left( \mathbf{y}_\beta \mathbf{y}_\beta : \nabla \nabla \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}_0} \right) \right] dA + \dots
 \end{aligned} \tag{6.62}$$

Al sustituir en la ecuación anterior las siguientes relaciones geométricas desarrolladas por Quintard y Whitaker (1994)

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{y}_\beta dA = -\nabla \langle \mathbf{y}_\beta \rangle, \tag{6.63}$$

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{y}_\beta \mathbf{y}_\beta dA = -\nabla \langle \mathbf{y}_\beta \mathbf{y}_\beta \rangle. \tag{6.64}$$

resulta que

$$\begin{aligned}
 \mu_\beta \mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}_0) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \Big|_{\mathbf{x}_0} &= -\frac{\mu_\beta}{\mathcal{V}_\beta(\mathbf{x}_0)} \left[ \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x}_0)} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (-\mathbf{l}\mathbf{b}_\beta + \nabla \mathbf{B}_\beta) dA \right] \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}_0} \\
 &- \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}_0) \nabla \langle \mathbf{y}_\beta \rangle : \left[ \mathbf{l} \nabla \langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}_0} - \mu_\beta \nabla \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \right] \\
 &- \frac{\varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}_0)}{2} \nabla \langle \mathbf{y}_\beta \mathbf{y}_\beta \rangle : \left[ \mathbf{l} \nabla \nabla \langle p_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}_0} - \mu_\beta \nabla \nabla \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \right] + \dots
 \end{aligned} \tag{6.65}$$

Por otro lado, Pérez-Córdova y Ochoa-Tapia (1995) encontraron que en la inter-región medio poroso-fluido, se cumplen los siguientes estimados de orden de magnitud,

$$\mathbf{j} \cdot \nabla \langle \mathbf{y}_\beta \rangle \cdot \mathbf{j} \Big|_{\eta\omega} = \mathbf{O} \left( \frac{3}{32} \frac{r_0}{L_e} (\varepsilon_{\beta\eta} - \varepsilon_{\beta\omega}) \right) \sim \mathbf{O} \left( \frac{1}{10} \frac{r_0}{L_e} (1 - \varepsilon_{\beta\omega}) \right), \tag{6.66}$$

$$\mathbf{j} \cdot \nabla \left( \mathbf{j} \cdot \langle \mathbf{y}_\beta \mathbf{y}_\beta \rangle \cdot \mathbf{j} \right) \Big|_{\eta\omega} = \mathbf{O} \left( (1 + \varepsilon_{\beta\omega}) \frac{r_0^2}{10L_e} \right). \tag{6.67}$$

De manera que los estimados de orden de magnitud de los tres términos del lado derecho de la ecuación (6.65) son

$$\frac{\mu_\beta}{\mathcal{V}_\beta(\mathbf{x}_0)} \left[ \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x}_0)} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (-\mathbf{l}\mathbf{b}_\beta + \nabla \mathbf{B}_\beta) dA \right] \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}_0} = \mathbf{O} \left[ \frac{1}{L_e^2} \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}_0) \mu_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \right], \tag{6.68}$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\beta}^{-1}(\mathbf{x}_0) \nabla \langle \mathbf{y}_{\beta} \rangle : \left[ \mathbf{I} \nabla \langle p_{\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}_0} - \mu_{\beta} \nabla \nabla \langle \mathbf{v}_{\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}} \right] \\ = \mathbf{O} \left[ \frac{(1 - \varepsilon_{\beta\omega})}{10L_v L_{v1}} \frac{r_0}{L_{\varepsilon}} \varepsilon_{\beta}^{-1}(\mathbf{x}_0) \mu_{\beta} \langle \mathbf{v}_{\beta} \rangle^{\beta} \right], \end{aligned} \quad (6.69)$$

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon_{\beta}^{-1}(\mathbf{x}_0)}{2} \nabla \langle \mathbf{y}_{\beta} \mathbf{y}_{\beta} \rangle : \left[ \mathbf{I} \nabla \nabla \langle p_{\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}_0} - \mu_{\beta} \nabla \nabla \nabla \langle \mathbf{v}_{\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}} \right] \\ = \mathbf{O} \left[ \left( \frac{r_0^2}{L_{\varepsilon} L} \right) \frac{(1 + \varepsilon_{\beta\omega})}{20L_v L_{v1}} \varepsilon_{\beta}^{-1}(\mathbf{x}_0) \mu_{\beta} \langle \mathbf{v}_{\beta} \rangle^{\beta} \right]. \end{aligned} \quad (6.70)$$

Por lo que si se cumplen en la inter-región las siguientes restricciones de escala

$$\frac{(1 - \varepsilon_{\beta\omega}) l_{\beta}^2}{10L_v L_{v1}} \frac{r_0}{L_{\varepsilon}} \ll 1; \quad \left( \frac{r_0^2}{L_{\varepsilon} L} \right) \frac{(1 + \varepsilon_{\beta\omega}) l_{\beta}^2}{20L_v L_{v1}} \ll 1, \quad (6.71)$$

las cuales son más fáciles de cumplir que la ecuación (6.58). Entonces, la ecuación (6.65) puede simplificarse a,

$$\varepsilon_{\beta}(\mathbf{x}_0) \mathbf{K}_{\beta}^{-1}(\mathbf{x}_0) = \frac{-1}{\mathcal{A}_{\beta}(\mathbf{x}_0)} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x}_0)} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \left( -\mathbf{l} b_{\beta} + \nabla \mathbf{B}_{\beta} \right) \Big|_{\eta\omega} dA, \quad (6.72)$$

Con la cual se puede calcular el tensor de esfuerzos globales en la superficie divisoria. Para completar esta parte del análisis, en la siguiente sección se presenta el problema bidimensional de valor ala frontera a resolver para calcular la forma escalar de este coeficiente.

#### 6.4.- Problema de cerradura bidimensional.

Dado que el objetivo es estimar los cambios espaciales de la componente de la velocidad que es tangente a la superficie del medio poroso; se necesita la forma escalar del tensor de esfuerzos globales, la cual se obtiene a partir de la ecuación (6.72) como

$$\varepsilon_{\beta}(\mathbf{x}_0) K_{\beta}^{-1}(\mathbf{x}_0) = - \frac{1}{\mathcal{A}_{\beta}(\mathbf{x}_0)} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x}_0)} \left( -(\mathbf{i} \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma}) b_{\beta,\xi} + \frac{\partial B_{\beta,\xi\xi}}{\partial \mathbf{n}_{\beta\sigma}} \right) \Big|_{\eta\omega} dA, \quad (6.73)$$

donde

$$K_{\beta}^{-1} = \mathbf{i} \cdot \mathbf{K}_{\beta}^{-1}(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{i}, \quad (6.74)$$

$$B_{\beta, \xi\xi} = \mathbf{i} \cdot \mathbf{B}_{\beta} \cdot \mathbf{i}, \quad (6.75)$$

$$b_{\beta, \xi} = \mathbf{b}_{\beta} \cdot \mathbf{i}, \quad (6.76)$$

y la forma escalar del tensor mixto de esfuerzos ( $K^{-1} = \mathbf{i} \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{i}$ ) que se requiere en la condición de salto es

$$K^{-1} = K_{\beta}^{-1} \Big|_{\eta\omega} + \varepsilon_{\beta}^{-3} \left( \frac{d\varepsilon_{\beta}}{dy} \right) \Big|_{\eta\omega}^2. \quad (6.77)$$

Como se mostró en el capítulo anterior, a partir de la ecuación anterior es posible obtener el coeficiente de salto mediante la siguiente expresión

$$\beta = \frac{\sqrt{K_{\beta, \omega} K^{-1}}}{a_{vs}}. \quad (6.78)$$

La ecuación (6.73) está expresada en función de variables de cerradura que se obtienen de resolver la forma escalar del *Problema I* para una celda unitaria bidimensional

$$\frac{\partial B_{\beta, \xi\xi}}{\partial \xi} + \frac{\partial B_{\beta, \zeta\xi}}{\partial \zeta} = 0, \quad \text{en la fase } -\beta, \quad (6.79)$$

$$0 = -\frac{\partial b_{\beta, \xi}}{\partial \xi} + \frac{\partial^2 B_{\beta, \xi\xi}}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 B_{\beta, \xi\xi}}{\partial \zeta^2} - \varepsilon_{\beta}^{-1}(0) \frac{d^2 \varepsilon_{\beta}}{dy^2} \Big|_{y=0} + \varepsilon_{\beta}(0) K_{\beta}^{-1}, \text{ en la fase } -\beta, \quad (6.80)$$

$$0 = -\frac{\partial b_{\beta, \xi}}{\partial \zeta} + \frac{\partial^2 B_{\beta, \zeta\xi}}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 B_{\beta, \zeta\xi}}{\partial \zeta^2} + \varepsilon_{\beta}(0) K_{\zeta\xi}^{-1}, \quad \text{en la fase } -\beta, \quad (6.81)$$

$$\text{C.F.1} \quad B_{\beta, \xi\xi} = -1; B_{\beta, \zeta\xi} = 0, \quad \text{en la interfase } \beta - \sigma, \quad (6.82)$$

$$\text{C.F.2} \quad \text{En } \zeta = h \quad B_{\beta, \xi\xi} = 0; B_{\beta, \zeta\xi} = 0; b_{\beta, \xi} = 0, \quad (6.83)$$

$$\text{C.F.3} \quad \text{En } \zeta = -h \quad \frac{\partial B_{\beta, \xi\xi}}{\partial \zeta} = 0; \frac{\partial B_{\beta, \zeta\xi}}{\partial \zeta} = 0; \frac{\partial b_{\beta, \xi}}{\partial \zeta} = 0, \quad (6.84)$$

$$\text{Periodicidad: } \phi(\mathbf{r} + \ell_i) = \phi(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2; \quad \phi = b_{\beta, \xi}, B_{\beta, \xi\xi}, B_{\beta, \zeta\xi}. \quad (6.85)$$

donde se usaron las siguientes definiciones,

$$B_{\beta, \zeta \xi} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{B}_{\beta} \cdot \mathbf{i}; \quad K_{\zeta \xi}^{-1} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{K}_{\beta}^{-1}(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{i}. \quad (6.86)$$

De esta forma, la componente tangencial de la condición de salto es

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle v_{\beta} \rangle_{\omega}}{\partial y} - \varepsilon_{\beta \omega} \frac{\partial \langle v_{\beta} \rangle_{\eta}}{\partial y} = & \left[ -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta \sigma}(\mathbf{x}_0)} \left( -(\mathbf{i} \cdot \mathbf{n}_{\beta \sigma}) b_{\beta, \xi} + \frac{\partial B_{\beta, \zeta \xi}}{\partial \mathbf{n}_{\beta \sigma}} \right) \right]_{\mathbf{x}_0} dA \\ & + \varepsilon_{\beta}^{-2} \left( \frac{d\varepsilon_{\beta}}{dy} \right) \bigg|_{\eta \omega} \left[ \frac{\varepsilon_{\beta \omega}}{\varepsilon_{\beta}(\mathbf{x}_0) a_{vs}} \langle v_{\beta} \rangle_{\omega} \right], \text{ en la superficie divisoria.} \end{aligned} \quad (6.87)$$

Para resolver el problema de valor a la frontera arriba planteado se pueden usar modelos simples de medios porosos como los mostrados en el Capítulo 3 (ver Figuras 3-2, 3-5, 3-7 y 3-9). El problema de las variables de cerradura tiene una estructura similar al problema de Stokes. Sin embargo, los últimos términos en las ecuaciones (6.80) y (6.81) requieren conocer el campo de la variable de cerradura en  $\zeta = 0$ . Este tipo de dificultad se puede superar, siguiendo las ideas de Barrère y col. (1992), mediante una redefinición de variables. Una metodología alternativa para tratar con este problema consiste en obtener la forma cerrada de las ecuaciones de transporte generalizadas y calcular, como se hizo en el Capítulo 4, los coeficientes de exceso a partir de sus definiciones correspondientes. Sin embargo, es de mencionarse que la solución numérica del problema de cerradura está más allá de los objetivos de este trabajo y será objeto de futuras investigaciones.

No debe perderse de vista que el propósito de resolver el problema de cerradura consiste, en este caso, en calcular el tensor de esfuerzos globales, el cual puede reducirse al inverso de la permeabilidad del medio poroso homogéneo (cuando el centroide se localiza en dicha región). Bajo esta idea es que, en la siguientes secciones se explora la posibilidad de extrapolar el uso de modelos para predecir la permeabilidad del medio poroso homogéneo (revisados en el Capítulo 1) en la frontera medio poroso-

fluido. La cual, junto con la evaluación de las contribuciones de los esfuerzos de Brinkman en la inter-región permitirá la evaluación del tensor mixto de esfuerzos y, a su vez, del coeficiente de salto  $\beta$ . A continuación se estudiarán los esfuerzos de Brinkman y posteriormente se presentará el modelo aproximado para predecir los esfuerzos globales.

### 6.5.- Cambios de propiedades geométricas con la posición.

Para estimar los cambios de propiedades geométricas, como la porosidad y el área interfacial por unidad de volumen, Pérez-Córdova y Ochoa-Tapia (1995) propusieron los siguientes polinomios

$$\varepsilon_{\beta}(y) = \frac{1}{2}(\varepsilon_{\beta\omega} + 1) + \frac{1}{4}(\varepsilon_{\beta\omega} - 1) \left( \frac{y}{r_0} \right) \left[ \left( \frac{y}{r_0} \right)^2 - 3 \right], \text{ para } -r_0 \leq y \leq +r_0, \quad (6.88)$$

$$\frac{a_v(y)}{a_{v,\omega}} = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \left( \frac{y}{r_0} \right) \left[ \left( \frac{y}{r_0} \right)^2 - 3 \right], \text{ para } -r_0 \leq y \leq +r_0, \quad (6.89)$$

los cuales se obtuvieron suponiendo que el medio poroso está compuesto de esferas o cilindros, de diámetro  $\ell_{\sigma}$ , igualmente espaciados. Además, mostraron que para obtener cambios espaciales suaves de las propiedades promedio, la siguiente relación de longitudes de escala debe satisfacerse

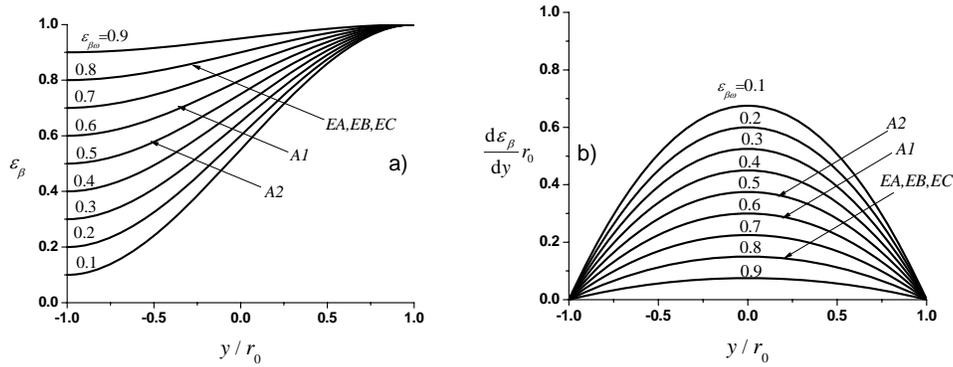
$$r_0 = 20\ell_{\sigma}. \quad (6.90)$$

Para estimar la contribución de los esfuerzos de Brinkman al tensor de permeabilidad mixto, es necesario el gradiente de la ecuación (6.88), el cual está dado por,

$$\frac{d\varepsilon_{\beta}(y)}{dy} = \frac{3}{4r_0}(\varepsilon_{\beta\omega} - 1) \left[ \left( \frac{y}{r_0} \right)^2 - 1 \right], \text{ para } -r_0 \leq y \leq +r_0. \quad (6.91)$$

De esta forma, es posible calcular los cambios espaciales de la porosidad y su derivada a partir del valor de la porosidad en la región homogénea  $-\omega$ . En la Figura 6-2 se

muestran los resultados obtenidos a partir de las ecuaciones (6.88) y (6.91) para diferentes valores de  $\varepsilon_{\beta\omega}$ . En ambas gráficas se identifican las curvas correspondientes a los materiales estudiados por BJ (1967) cuyas propiedades se resumen en la Tabla 6-1. En todos los casos se supuso que la fracción volumétrica en la región homogénea  $-\eta$  es la unidad. De la Figura 6-2a se observa que al aumentar  $\varepsilon_{\beta\omega}$  también lo hace  $\varepsilon_{\beta}(y)$ , mientras que lo inverso se muestra en la Figura 6-2b para  $d\varepsilon_{\beta}/dy$ . Debe notarse que esta derivada presenta un máximo en  $y = 0$ , es decir, cuando el centroide se localiza en la superficie del medio poroso.



**Figura 6-2:** Cambios espaciales de a) la porosidad y b) su derivada respecto a  $y$ . En ambos casos se identifican las curvas correspondientes a los materiales estudiados por BJ (1967).

De esta forma, a partir de las ecuaciones (6.88) y (6.91) se obtiene la siguiente expresión para los esfuerzos de Brinkman ( $B(y)$ )

$$B(y) = \varepsilon_{\beta}^{-3}(y) \left( \frac{d\varepsilon_{\beta}}{dy} \right)^2 = \varepsilon_{\beta}^{-3}(y) \left[ \frac{3(\varepsilon_{\beta\omega} - 1)}{4 r_0} \left( \frac{y^2}{r_0^2} - 1 \right) \right]^2, \quad (6.92)$$

la cual está restringida a las suposiciones hechas para obtener la ecuación (6.88). La ecuación anterior evaluada en  $y = 0$  se reduce a

$$B(0) = \frac{9(\varepsilon_{\beta\omega} - 1)^2}{2r_0^2(\varepsilon_{\beta\omega} + 1)^3}. \quad (6.93)$$

**Tabla 6-1:** Datos de los materiales estudiados por Beavers y Joseph (BJ)

Material	Diámetro de poro (m)	Porosidad ( $\varepsilon_{\beta\omega}$ )	Permeabilidad ( $m^2$ )
1. Espuma de metal A (EA)	$4.06 \times 10^{-4}$	0.78	$9.7 \times 10^{-9}$
2. Espuma de metal B (EB)	$8.64 \times 10^{-4}$	0.78	$3.94 \times 10^{-8}$
3. Espuma de metal C (EC)	$1.14 \times 10^{-3}$	0.79	$8.2 \times 10^{-8}$
4. Aloxita 1 (A1)	$3.3 \times 10^{-4}$	0.58	$6.45 \times 10^{-10}$
5. Aloxita 2 (A2)	$6.86 \times 10^{-4}$	0.52	$1.6 \times 10^{-9}$

La dependencia de los esfuerzos de Brinkman con la posición y  $\varepsilon_{\beta\omega}$  se muestra en la Figura 6-3. Puede notarse que, al aumentar la fracción porosa de la región  $-\omega$ , los esfuerzos disminuyen, generando curvas cada vez más simétricas alrededor de  $y = 0$ . Los resultados se presentan normalizados con el valor del esfuerzo en la frontera; de esta forma, se aprecia que sólo para  $\varepsilon_{\beta\omega} \geq 0.9$  el valor del esfuerzo es menor o igual al esfuerzo en la superficie.

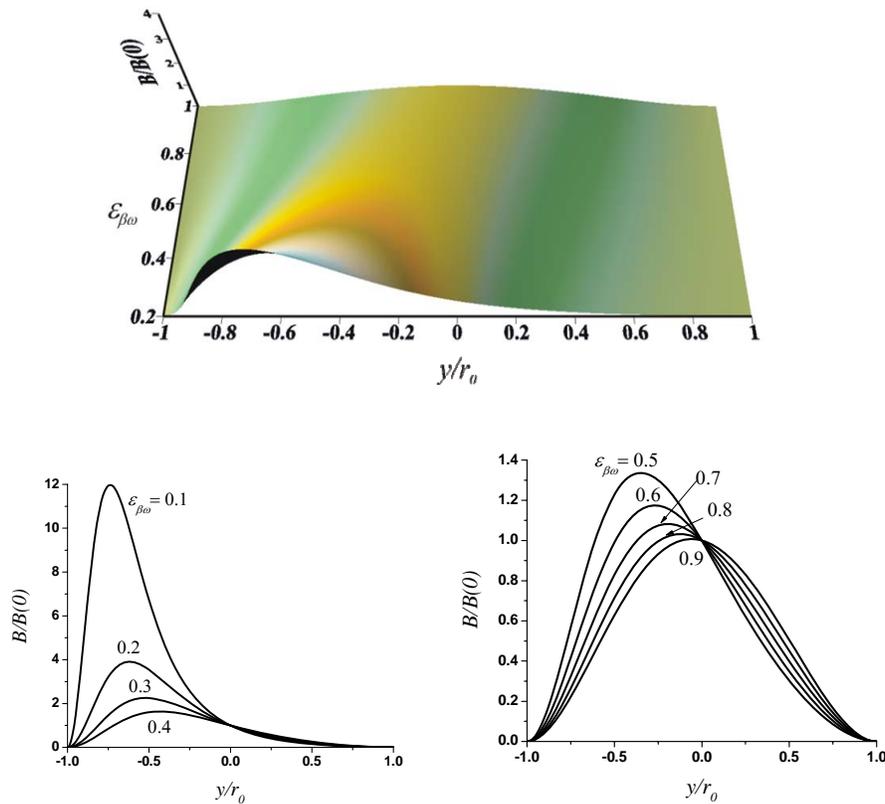
En la Figura 6-4 se muestran los resultados para el caso particular de los materiales empleados por BJ. En este caso se puede apreciar la gran sensibilidad de los resultados ante cambios en la porosidad, ya que al incrementarse ésta en sólo 6 centésimas el valor máximo del esfuerzo disminuyó de la unidad a 0.62 aproximadamente.

Es conveniente recordar que en la condición de salto desarrollada en el capítulo anterior, se necesita conocer el valor del área interfacial en la superficie ( $a_{vs}$ ), el cual se puede obtener a partir de la ecuación (6.89) al sustituir  $y = 0$

$$a_{vs} = a_v(0) = \frac{a_{v,\omega}}{2}, \quad (6.94)$$

donde, el área interfacial por unidad de volumen en la región homogénea  $-\omega$  ( $a_{v,\omega}$ ), puede expresarse como función de la porosidad y el diámetro de las esferas o cilindros que componen el medio poroso de acuerdo a

$$a_{v,\omega} = \frac{6}{\ell_\sigma} (1 - \varepsilon_{\beta\omega}). \quad (6.95)$$



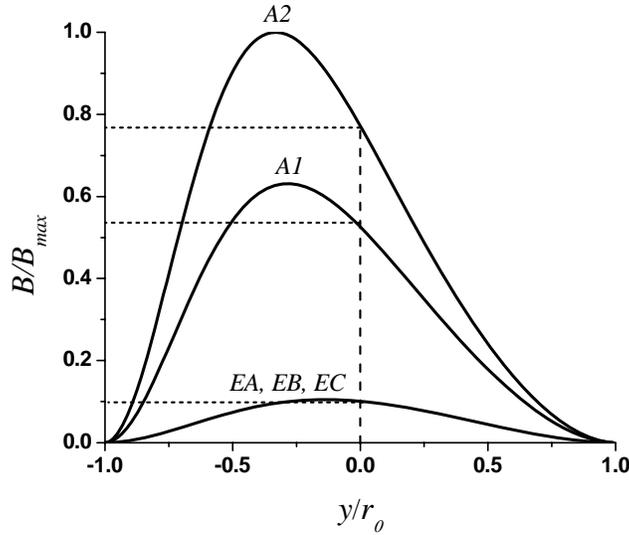
**Figura 6-3:** Vistas tri- y bi-dimensionales de la dependencia de los esfuerzos de Brinkman con la posición y  $\varepsilon_{\beta\omega}$ .

Al sustituir esta expresión en la ecuación (6.94) se obtiene

$$a_{vs} = \frac{3}{\ell_\sigma} (1 - \varepsilon_{\beta\omega}). \quad (6.96)$$

A continuación se presenta la metodología aproximada para la estimación de los esfuerzos globales en la frontera. Para ello, primero se comparan varios modelos para el cálculo de la permeabilidad en la región homogénea  $-\omega$  disponibles en la literatura, de

acuerdo a su capacidad para reproducir los datos reportados por BJ. Y posteriormente se extrapolarán a la inter-región los modelos que mejor ajusten los datos.



**Figura 6-4:** Dependencia espacial de los esfuerzos de Brinkman para los materiales usados por BJ. La línea punteada horizontal indica el valor de  $B(0)/B_{\max}$  para cada material.  $B_{\max} = \max(B)_{A2}$ .

### 6.6.-Comparación de modelos de permeabilidad.

Los modelos revisados en el Capítulo 1 para estimar la permeabilidad son los siguientes,

- *Tubos capilares*

$$K_{\beta\omega} = \frac{\varepsilon_{\beta\omega} \rho_{\sigma}^2}{32}. \quad (6.97)$$

- *Radio hidráulico (Carman-Kozeny)*

$$K_{\beta\omega} = \frac{\varepsilon_{\beta\omega}^3 \rho_{\sigma}^2}{180(1 - \varepsilon_{\beta\omega})^2}. \quad (6.98)$$

- Rumpf y Gupte (1971)

$$K_{\beta\omega} = \frac{\varepsilon_{\beta\omega}^{5.5} \ell_\sigma^2}{5.6}. \quad (6.99)$$

- Happel y Brenner, (1991)

- Flujo paralelo 
$$K_{\beta\omega} = \frac{\varepsilon_{\beta\omega}^3 \ell_\sigma^2}{16k_k (1 - \varepsilon_{\beta\omega})^2}. \quad (6.100)$$

- Flujo perpendicular

$$K_{\beta\omega} = \frac{(\ell_\sigma + \delta)^2}{16} \left[ \ln \left( \frac{\ell_\sigma + \delta}{\ell_\sigma} \right) - \frac{1}{2} \frac{(\ell_\sigma + \delta)^4 - \ell_\sigma^4}{(\ell_\sigma + \delta)^4 + \ell_\sigma^4} \right], \quad (6.101)$$

donde,

$$k_k = \frac{2\varepsilon_{\beta\omega}^3}{(1 - \varepsilon_{\beta\omega}) \left[ 2 \ln \left( \frac{1}{1 - \varepsilon_{\beta\omega}} \right) - 3 + 4(1 - \varepsilon_{\beta\omega}) - (1 - \varepsilon_{\beta\omega})^2 \right]}. \quad (6.102)$$

- Larson y Higdon (1989),

$$\frac{K_{\beta\omega}}{\ell^2} = A \frac{\varepsilon_{\beta\omega}^3}{(1 - \varepsilon_{\beta\omega})^2}, \quad \frac{\ell}{\ell_\sigma} = \frac{1}{\sqrt[3]{1 - \varepsilon_{\beta\omega}}}. \quad (6.103)$$

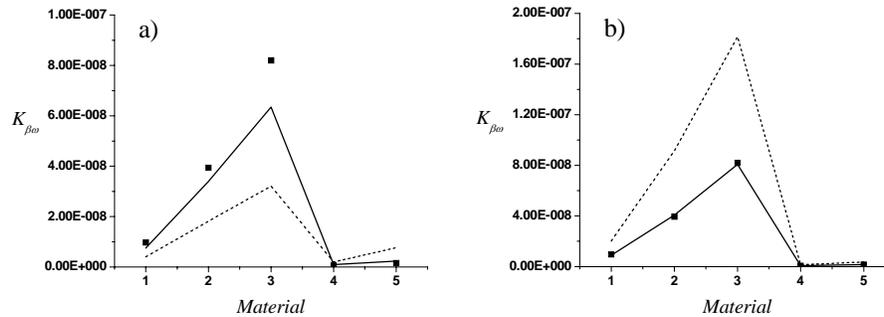
- Sahraoui y Kaviany (1992)

$$\frac{K_{\beta\omega}}{\ell_\sigma^2} = 0.0606 \varepsilon_{\beta\omega}^{5.1}; \quad 0.4 \leq \varepsilon_{\beta\omega} \leq 0.8. \quad (6.104)$$

Como criterio de selección entre estos modelos, se decidió que sólo aquellos modelos que reproduzcan satisfactoriamente los datos de permeabilidad de la Tabla 6-1, serán los que se usarán para predecir la permeabilidad en la inter-región. Los resultados se muestran en las figuras 6-5 y 6-6, las observaciones para los modelos capilares son las siguientes:

- Con el modelo de tubos capilares no es posible predecir satisfactoriamente los datos experimentales.

- El modelo de Rumpf y Gupte sólo describe satisfactoriamente los datos de las dos especies de aloxita.

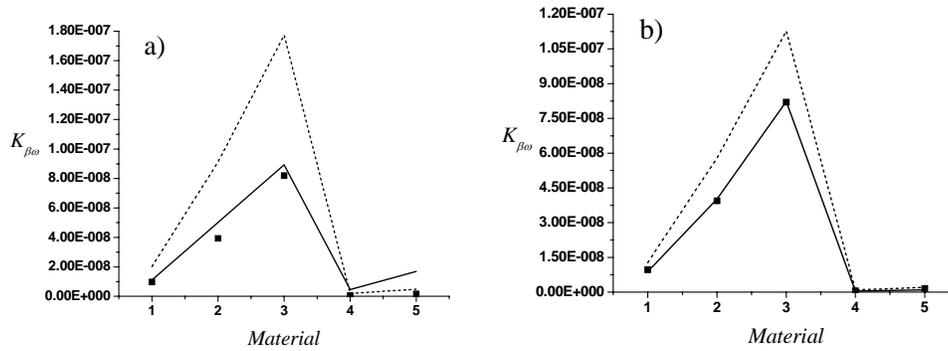


**Figura 6-5:** Estimación del coeficiente de permeabilidad para los datos de BJ usando los modelos de a) (—) Rumpf y Gupte (---) tubos capilares, b) Ecuación de Carman-Kozeny para (—) esferas y (---) cilindros.

- Usando la ecuación de Carman-Kozeny para esferas es posible describir satisfactoriamente todos los datos, mientras que su versión para cilindros sólo es útil para los datos de aloxita.

Por otro lado, para los modelos de arrastre se observa que

- Las ecuaciones aproximadas de Happel y Brenner para flujo perpendicular reproducen mejor los datos que para flujo paralelo, sin embargo los resultados sólo son aceptables para las tres especies de espuma de metal.
- El modelo de Larson y Higdon con  $A = 2 \times 10^{-3}$  reproduce satisfactoriamente todos los datos de BJ, sin embargo en el caso de las dos especies de aloxita, el modelo de Sahraoui y Kaviany ofrece mejores predicciones que el modelo de Larson y Higdon no siendo éste el caso para las tres especies de espuma de metal.



**Figura 6-6:** Estimación del coeficiente de permeabilidad para los datos de BJ usando los modelos de a) Happel y Brenner para flujo perpendicular (—) y paralelo(---), b) Larson y Higdon (—)  $A = 2 \times 10^{-3}$ ; Sahraoui y Kaviany (---).

A partir de estas observaciones se deduce que únicamente la ecuación de Carman-Kozeny para esferas y el modelo de Larson y Higdon con  $A = 2 \times 10^{-3}$  reproducen satisfactoriamente los datos experimentales de permeabilidad para todas las especies; para las tres especies de espuma de metal es recomendable usar el modelo de Happel y Brenner para flujo perpendicular y para las dos especies de aloxita el modelo de Rumpf y Gupte o bien el de Sahraoui y Kaviany.

## 6.7.- Esfuerzos globales.

En el Capítulo 1 se expusieron diversos modelos para estimar la permeabilidad de un medio poroso en su región homogénea. Sin embargo, no se encontró una relación que describa los cambios espaciales de la permeabilidad al pasar de la región homogénea a la inter-región y de ahí a otra región homogénea. Ante este problema, Ochoa-Tapia y Whitaker (1995b) propusieron sustituir directamente la dependencia de la porosidad en la ecuación de Carman-Kozeny. El que hayan elegido esta ecuación incluye el hecho que permite reducir los esfuerzos a cero en el límite cuando  $\varepsilon_{\beta} \rightarrow 1$ . Esta propiedad la

comparten sólo algunos de los modelos presentados en la sección anterior. Como ya se mencionó, los únicos modelos (de los que se discutieron aquí) que reproducen satisfactoriamente todos los datos de BJ son los de Carman-Kozeny y el de Larson-Higdon. Ambos permiten una transición suave en los esfuerzos al pasar de una región homogénea a otra, recuperando los valores extremos físicamente esperados. La estructura de ambos modelos permite que se puedan resumir en la siguiente expresión

$$\frac{K_{\beta\omega}}{\ell_\sigma^2} = \frac{\gamma \varepsilon_{\beta\omega}^3}{(1 - \varepsilon_{\beta\omega})^2}, \quad (6.105)$$

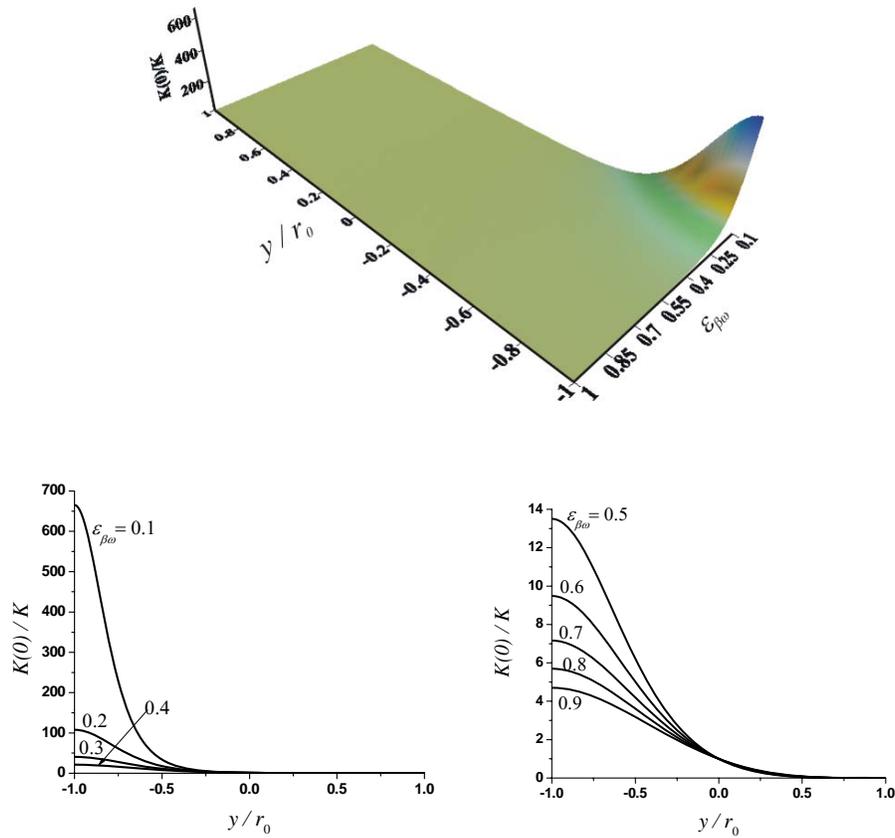
donde  $\gamma = \gamma_1 = (180)^{-1}$  lleva a la ecuación (6.98), mientras que si  $\gamma = \gamma_2 = 2 \times 10^{-3} / (1 - \varepsilon_{\beta\omega})^{2/3}$ , se obtiene la ecuación (6.103). Siguiendo las ideas de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995b), la ecuación (6.105) puede usarse en la inter-región sustituyendo  $\varepsilon_\beta(y)$ , dado por la ecuación (6.88), en lugar de  $\varepsilon_{\beta\omega}$ . De esta forma, la ecuación (6.105) dependiente de la posición, toma la siguiente forma

$$\frac{K_\beta(y)}{\ell_\sigma^2} = \frac{\gamma \varepsilon_\beta^3(y)}{(1 - \varepsilon_\beta(y))^2}, \quad (6.106)$$

la cual, en la frontera, se reduce a

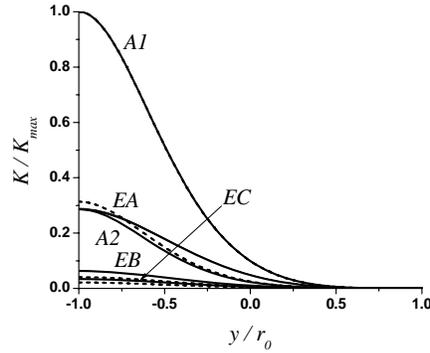
$$K_\beta \Big|_{\eta\omega} = K_\beta(0) = \frac{\gamma \ell_\sigma^2 (1 + \varepsilon_{\beta\omega})^3}{2(1 - \varepsilon_{\beta\omega})^2}. \quad (6.107)$$

De esta forma, al normalizar los esfuerzos globales dependientes de la posición con su valor en la superficie del medio poroso, se obtuvieron los resultados de la Figura 6-7. Al igual que en el caso de los esfuerzos de Brinkman, al disminuir la porosidad, el valor máximo de los esfuerzos globales crece y llega a ser hasta 660 veces su valor en la superficie, (para  $\varepsilon_{\beta\omega} = 0.1$ ). Por otro lado, su valor se vuelve despreciable para  $y \geq 0.5r_0$ .



**Figura 6-7:** Vistas tri- y bi-dimensionales de la dependencia de los esfuerzos de globales con la posición y  $\varepsilon_{\beta\omega}$ .

Para los materiales empleados por BJ, los resultados se muestran en la Figura 6-8. La ecuación (6.106) muestra que los esfuerzos globales son función tanto de la fracción porosa como del diámetro de la esfera (o cilindro) que componen el medio poroso. El máximo esfuerzo lo presentó la aloxita 1, por lo que los resultados se presentan normalizados de acuerdo a este valor. Al igual que en la Figura 6-4, los resultados son bastante sensibles a cambios en las propiedades de los materiales. Cabe mencionar que con los modelos de Carman-Kozeny ( $\gamma_1$ ) y de Larson y Higdon ( $\gamma_2$ ) se obtienen resultados muy similares.



**Figura 6-8:** Dependencia de los esfuerzos de globales con la posición para los materiales estudiados por BJ  $\gamma_1$  (—) y  $\gamma_2$  (---).

### 6.8.- Tensor mixto de esfuerzos.

Con los resultados obtenidos en las dos secciones anteriores, se puede obtener la componente tangencial del tensor de esfuerzos, al sustituir las ecuaciones (6.93) y (6.107) en la ecuación (6.77)

$$K^{-1} = \frac{2(1 - \varepsilon_{\beta\omega})^2}{\gamma l_\sigma^2 (1 + \varepsilon_{\beta\omega})^3} + \frac{9}{800 l_\sigma^2} \frac{(\varepsilon_{\beta\omega} - 1)^2}{(\varepsilon_{\beta\omega} + 1)^3}, \quad (6.108)$$

donde se usó la relación de (6.90). Debe ser claro, de la ecuación anterior, que los esfuerzos de Brinkman pueden despreciarse respecto a los globales. Bajo estas circunstancias, la ecuación (6.108) se simplifica a

$$K^{-1} = \frac{2(1 - \varepsilon_{\beta\omega})^2}{\gamma l_\sigma^2 (1 + \varepsilon_{\beta\omega})^3}. \quad (6.109)$$

Por otro lado, de acuerdo a la ecuación (6.78), el coeficiente de salto puede determinarse a partir de la ecuación (6.109) como

$$\beta = \frac{2\varepsilon_{\beta\omega}^{3/2}}{3\sqrt{\gamma} (1 + \varepsilon_{\beta\omega})^3}, \quad (6.110)$$

donde se usaron además las ecuaciones (6.96) y (6.105).

La estimación del coeficiente de salto, para los materiales estudiados por BJ, se presenta en la Tabla 6-2. Donde se muestran los resultados que se obtienen al usar los modelos de Carman-Kozeny ( $\gamma_1$ ), Larson-Higdon ( $\gamma_2$ ) y de Goyeau y col. (2003). Es de notarse que los tres modelos ofrecen estimaciones del orden de la unidad para el coeficiente de salto, lo cual corresponde con lo expuesto previamente por Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a,b). Sin embargo, los resultados del modelo  $\gamma_2$  se acercan más a los reportados por Goyeau y col. (2003) para A1 y A2. Para los materiales EA, EB y EC los modelos  $\gamma_1$  y  $\gamma_2$  dan prácticamente el mismo resultado, el cual difiere en aproximadamente 6% del reportado por Goyeau y col. (2003).

**Tabla 6-2:** Estimación del coeficiente de salto para los materiales usados por BJ

Material	$\beta(\gamma_1)$	$\beta(\gamma_2)$	Goyeau y col. (2003)
1. Espuma de metal A	1.093	1.099	1.03
2. Espuma de metal B	1.093	1.099	1.03
3. Espuma de metal C	1.095	1.085	1.02
4. Aloxita 1	1.002	1.250	1.230
5. Aloxita 2	0.955	1.246	1.300

Estas observaciones se corroboran en la Figura 6-9, donde se muestra la dependencia del coeficiente de salto con la porosidad y además la intersección de las curvas de los tres modelos corresponde a  $\varepsilon_{\beta\omega} \approx 0.79$ , la cual es la porosidad de las espumas de metal. Cabe mencionar que, los modelos  $\gamma_1$  y  $\gamma_2$  exhiben el mismo comportamiento en el límite cuando  $\varepsilon_{\beta\omega} \rightarrow 0$ ; no siendo este el caso del modelo de Goyeau y col. (2003), en el cual  $\beta$  alcanza valores superiores a la unidad. Sin embargo, en el límite cuando  $\varepsilon_{\beta\omega} \rightarrow 1$ , tanto los resultados que se obtienen con el método de Goyeau y col. (2003), como  $\beta(\gamma_1)$  llegan a un valor constante mientras que  $\beta(\gamma_2)$  tiende a cero. Respecto a

esto último, debe notarse que en este límite  $K_{\beta,\omega}|_{\varepsilon_{\beta\omega}=1} \rightarrow \infty$  y la condición de salto de

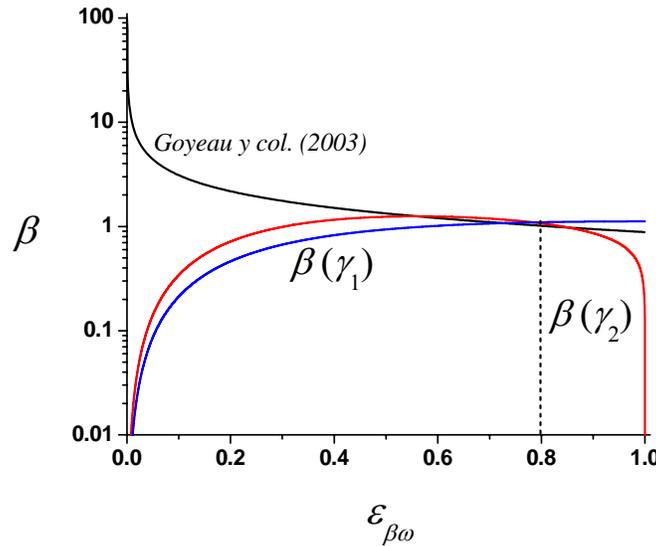
Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a) se reduce a la continuidad de las derivadas de la velocidad.

Por último, a partir de la componente tangencial de la condición de salto

$$\frac{\partial \langle v_\beta \rangle_\omega}{\partial y} - \varepsilon_{\beta\omega} \frac{\partial \langle v_\beta \rangle_\eta}{\partial y} = \frac{K^{-1}}{a_{vs}} \varepsilon_{\beta\omega} \langle v_\beta \rangle_\omega, \quad \text{en la inter-región } \eta - \omega.$$

se aprecia que el término responsable del salto es  $K^{-1} \varepsilon_{\beta\omega} / a_{vs}$ , el cual puede expresarse, de acuerdo a las ecuaciones (6.94) y (6.109) como

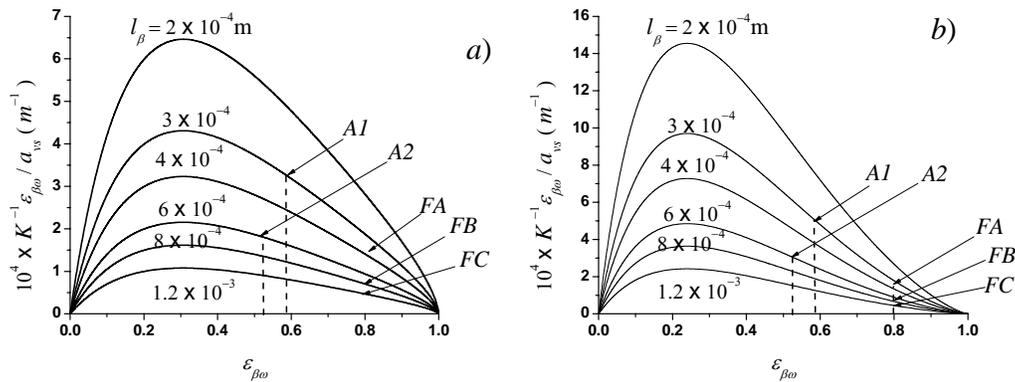
$$\frac{K^{-1} \varepsilon_{\beta\omega}}{a_{vs}} \approx \frac{2(1 - \varepsilon_{\beta\omega}) \varepsilon_{\beta\omega}}{3\gamma l_\sigma (1 + \varepsilon_{\beta\omega})^3}. \quad (6.111)$$



**Figura 6-9:** Dependencia del coeficiente de salto con la porosidad usando  $\gamma = \gamma_1, \gamma_2$  y la metodología de Goyeau y col. (2003).

A diferencia de la ecuación (6.110),  $K^{-1} \varepsilon_{\beta\omega} / a_{vs}$  es función de la porosidad y del diámetro de las esferas (o cilindros) que componen el medio poroso. Esta última,

también puede expresarse en función del tamaño de poro ( $\ell_\beta$ ). La dependencia de  $K^{-1}\varepsilon_{\beta\omega}/a_{vs}$  con la porosidad y  $\ell_\beta$  se muestra en la Figura 6-10 para los resultados obtenidos con los modelos  $\gamma_1$  y  $\gamma_2$ . Donde se muestra que el salto en el esfuerzo en la frontera aumenta con  $\ell_\beta$ . Además, la comparación de las Figuras 6-10a y 6-10b muestra que la forma de las curvas difiere para  $\varepsilon_{\beta\omega} > 0.3$ . Como puede observarse, para un tamaño de poro dado, los modelos  $\gamma_1$  y  $\gamma_2$  predicen valores máximos de  $K^{-1}\varepsilon_{\beta\omega}/a_{vs}$  notablemente diferentes. Lo anterior claramente enfatiza el efecto de algunas características de la microestructura del medio poroso en la determinación del esfuerzo en la inter-región. Esta información se pierde en el coeficiente de salto dado por la ecuación (6.110). No está de más remarcar que estas observaciones están basadas en estimaciones y que la solución del problema de cerradura aquí planteado es la mejor forma de determinar qué tanta información de la microestructura se verá reflejada en el coeficiente de salto, lo cual será realizado en futuros trabajos.



**Figura 6-10:** Dependencia del coeficiente  $K^{-1}\varepsilon_{\beta\omega}/a_{vs}$  con  $\varepsilon_{\beta\omega}$  y el tamaño de poro.

Usando a)  $\gamma = \gamma_1$  y b)  $\gamma = \gamma_2$ .

A partir de lo desarrollado en estas secciones se puede concluir que no existe una forma única de determinar el coeficiente de salto a partir de los modelos revisados de la

---

literatura ya que no se cuenta con una expresión general que relacione la permeabilidad con la porosidad. Sin embargo, es posible confirmar que el coeficiente de salto tiene orden de magnitud de la unidad, lo cual es consistente con la expuesto por Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a,b).

## 6.9.- Resumen de resultados.

Como conclusión de este capítulo, es pertinente comentar los resultados obtenidos:

- Siguiendo la metodología planteada en este trabajo, para el caso de difusión y reacción, se obtuvo una condición de salto cerrada de transferencia de cantidad de movimiento en la frontera medio poroso-fluido. Sin embargo, existe una diferencia importante en el término causante del salto, el cual, en este caso es un tensor mixto de esfuerzos. Dicha diferencia radica en la naturaleza promedio de  $\mathbf{K}^{-1}$ , lo que hace innecesario el uso de una descomposición espacial de dicho término.
- El tensor mixto de esfuerzos es el resultado de la combinación de los esfuerzos globales y de Brinkman en la frontera. Estos últimos se pudieron calcular a partir de expresiones disponibles en la literatura. Mientras que, para los esfuerzos globales, se plantearon las versiones vectorial y escalar del problema de cerradura que se debe resolver.
- Se confirmó, mediante el uso de las ecuaciones de Carman-Kozeny y de Larson-Higdon, que el orden de magnitud del coeficiente de salto es de la unidad, como lo habían anticipado Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a,b). Asimismo, se analizó la dependencia de  $K^{-1} \varepsilon_{\beta\omega} / a_{vs}$  con el diámetro de poro y la porosidad.

Con los resultados obtenidos, el siguiente paso en este trabajo consiste en estudiar el transporte convectivo de masa en la frontera medio poroso-fluido. Esto se lleva a cabo en el siguiente capítulo.

Parte III:  
Transferencia convectiva de masa

---

## Capítulo 7:

### Condición de salto de transferencia difusiva y convectiva de masa entre un medio poroso y un fluido.

En este capítulo se aborda el tema de la transferencia de masa en la inter-región medio poroso fluido, tomando en cuenta los efectos difusivos y convectivos; además, se consideran los fenómenos de adsorción y reacción de primer orden tanto en el seno como en la frontera del medio poroso. Un estudio similar a este ya ha sido reportado por Valencia-López y col. (2003), el cual no incluye el fenómeno de reacción de primer orden y su resultado es una condición de salto no cerrada, es decir, en términos de coeficientes indeterminados. Mientras que, en este capítulo se desarrolla la condición de salto en términos de las variables del problema de cerradura correspondiente. Sin embargo, varios de los pasos del desarrollo de la condición de salto se harán siguiendo las propuestas de Valencia-López y col. (2003). Por otro lado, el estudio de este problema en el seno del medio poroso, empleando el método del promedio volumétrico, fue llevado a cabo previamente por Whitaker (1986) y varias de las ideas de ese trabajo serán retomadas en este capítulo. Asimismo, una buena parte de los desarrollos expuestos en capítulos previos serán retomados para el análisis de este sistema.

El capítulo está organizado de la siguiente forma: se comienza el análisis con el proceso de promediado de las ecuaciones locales para obtener, mediante la aplicación del método del promedio volumétrico, las ecuaciones de transferencia generalizadas. A partir del uso de estas ecuaciones, y las correspondientes a las regiones homogéneas, en la inter-región se plantea la condición de salto para este caso. Posteriormente, se plantean los problemas de las variables de cerradura que permiten obtener la forma cerrada de la condición de salto. El capítulo concluye con una breve discusión de los resultados.

## 7.1.- Problema puntual.

El problema físico que se desea analizar, consiste en el flujo convectivo de un fluido dentro y fuera de un medio poroso. Al igual que en los dos capítulos anteriores, se denota a la fase fluida como la fase  $-\beta$ , mientras que la fase sólida es la fase  $-\sigma$ . La ecuación que gobierna la transferencia de masa puntual de la especie  $A$  en una solución diluida ( $X_A \ll 1$ ) es

$$\frac{\partial c_{AB}}{\partial t} + \nabla \cdot (c_{AB} \mathbf{v}_\beta) = \nabla \cdot (\mathcal{D}_\beta \nabla c_{AB}), \text{ en la fase } -\beta. \quad (7.1)$$

En la ecuación anterior,  $\mathcal{D}_\beta$  es la difusividad de la mezcla. La condición de frontera en la interfase sólido-fluido se expresa como sigue

$$\frac{\partial c_{As}}{\partial t} = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\mathcal{D}_\beta \nabla c_{AB}) - k_s c_{As}, \text{ en la interfase } \beta - \sigma. \quad (7.2)$$

donde  $c_{As}$  es la concentración molar superficial de la especie  $A$  y  $k_s$  es el coeficiente de velocidad de reacción superficial. Para obtener una forma útil de la ecuación anterior, se requiere contar con más información sobre las concentraciones molares interfacial y la concentración en la fase  $-\beta$ . La relación más sencilla, para el flux de masa unidireccional de y hacia la superficie sólida, es la lineal,

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\mathcal{D}_\beta \nabla c_{AB}) = k_1 c_{AB} - k_{-1} c_{As}, \quad (7.3)$$

donde  $k_1$  y  $k_{-1}$  son las constantes de velocidad de adsorción y desorción, respectivamente y pueden determinarse a partir de la ecuación de Smoluchowski como lo muestran Wood y col. (2004). La sustitución de la ecuación (7.3) en la ecuación (7.2), llevó a Whitaker (1986) a proponer las siguientes restricciones

$$\varepsilon_{\beta\omega} \frac{(k_{-1} + k_s)^2}{a_{v\omega} k_{-1} k_1} \gg 1; \quad (k_{-1} + k_s) \frac{k_s}{k_{-1}} t^* \gg 1, \quad (7.4)$$

bajo las cuales es válida la suposición de equilibrio de adsorción local. De esta forma, la concentración superficial puede expresarse en términos de la concentración en el seno de la fase  $-\beta$  por medio de,

$$c_{As} = Kc_{A\beta}, \quad (7.5)$$

donde,  $K = \frac{K_{eq}}{1 + k_s / k_{-1}}$ ,  $K_{eq} = \frac{k_1}{k_{-1}}$ . Al sustituir la ecuación anterior en la ecuación (7.2)

resulta en

$$K \frac{\partial c_{A\beta}}{\partial t} = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\mathcal{D}_\beta \nabla c_{A\beta}) - k_r c_{A\beta}, \text{ en la interfase } \beta - \sigma, \quad (7.6)$$

en esta última,  $k_r = k_s K$ , es un coeficiente de pseudo-reacción (Whitaker, 1986). En este análisis se ha supuesto que la superficie catalítica es homogénea, cuando este no sea el caso, se debe considerar el trabajo de Wood y col. (2000). Adicionalmente, el flujo (dentro y fuera del medio poroso) se supone estacionario, incompresible y con efectos inerciales despreciables, de manera que las ecuaciones de conservación locales de continuidad y cantidad de movimiento, dondequiera que esté presente la fase  $-\beta$  son las siguientes

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\beta = 0, \text{ en la fase } -\beta, \quad (7.7)$$

$$0 = -\nabla p_\beta + \rho_\beta \mathbf{g} + \mu_\beta \nabla^2 \mathbf{v}_\beta, \text{ en la fase } -\beta. \quad (7.8)$$

En la interfase sólido-fluido se impone la condición de no deslizamiento

$$\mathbf{v}_\beta = 0, \text{ en la interfase } \beta - \sigma. \quad (7.9)$$

Con estas ecuaciones se completa la descripción del problema local. A continuación se lleva a cabo el proceso de promediado, sin imponer restricciones de escala, para obtener las ecuaciones de transferencia generalizadas.

## 7.2.- Ecuaciones de medio efectivo.

El suavizado espacial de la ecuación (7.1) se inicia al aplicarle el operador de promedio superficial,

$$\langle \psi_\beta \rangle_{\mathbf{x}} = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{V_\beta(\mathbf{x})} \psi_\beta |_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} dV, \quad (7.10)$$

donde  $\mathcal{V}$  es el volumen de la región de promediado  $V$ , el cual se puede ubicar tanto en las regiones homogéneas del sistema como en la inter-región (Figura 7-1); de esta manera se obtiene la siguiente expresión

$$\frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle}{\partial t} + \langle \nabla \cdot (c_{A\beta} \mathbf{v}_\beta) \rangle = \langle \nabla \cdot (\mathcal{D}_\beta \nabla c_{A\beta}) \rangle. \quad (7.11)$$

Para obtener esta ecuación se supuso que  $V_\beta(\mathbf{x})$  es independiente del tiempo. Como se ha explicado en otros capítulos de este trabajo, es conveniente conservar explícita la dependencia de ciertas cantidades de la posición  $\mathbf{x}$  del centroide de la región de promediado.

Una aplicación del teorema del promediado espacial (Howes y Whitaker, 1985), en los términos convectivo y difusivo, de la ecuación (7.11) da como resultado

$$\frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle c_{A\beta} \mathbf{v}_\beta \rangle = \nabla \cdot \langle \mathcal{D}_\beta \nabla c_{A\beta} \rangle + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\mathcal{D}_\beta \nabla c_{A\beta} - \mathbf{v}_\beta c_{A\beta}) dA. \quad (7.12)$$

Sin embargo, con base en las condiciones en la interfase sólido-fluido (7.6) y (7.9), la ecuación anterior puede simplificarse a

$$\frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle c_{A\beta} \mathbf{v}_\beta \rangle = \nabla \cdot \mathcal{D}_\beta \langle \nabla c_{A\beta} \rangle - k_r a_v(\mathbf{x}) \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma} - K a_v(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma}}{\partial t}, \quad (7.13)$$

donde se despreciaron los cambios espaciales de  $\mathcal{D}_\beta$ ,  $K$  y  $k_r$  en el volumen de promediado. Además, se usaron las definiciones de la concentración promedio en el área

$$\langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma} = \frac{1}{\mathcal{A}_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} c_{A\beta} dA, \quad (7.14)$$

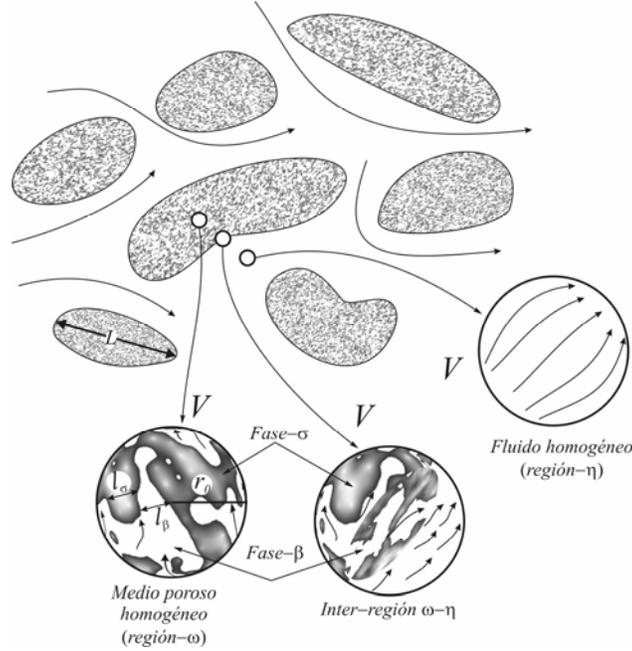
y del área interfacial por unidad de volumen,

$$a_v(\mathbf{x}) = \frac{\mathcal{A}_{\beta\sigma}(\mathbf{x})}{\mathcal{V}}. \quad (7.15)$$

Una segunda aplicación del teorema del promediado espacial, en el primer término del

lado derecho de la ecuación (7.13) permite obtener,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle c_{A\beta} \mathbf{v}_\beta \rangle = \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_\beta \left( \nabla \langle c_{A\beta} \rangle + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} c_{A\beta} dA \right) \right] \\ - k_r a_v(\mathbf{x}) \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma} - K a_v(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma}}{\partial t}. \end{aligned} \quad (7.16)$$



**Figura 7-1:** Región de promediado  $V$ , regiones y longitudes características del sistema.

En este punto conviene introducir el operador de promedio intrínseco

$$\langle \psi_\beta \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}} = \frac{1}{\mathcal{V}_\beta(\mathbf{x})} \int_{\mathcal{V}_\beta(\mathbf{x})} \psi_\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} dV, \quad (7.17)$$

el cual se relaciona con el promedio superficial mediante la porosidad  $\varepsilon_\beta(\mathbf{x})$ , de acuerdo a la siguiente relación,

$$\langle \psi_\beta \rangle = \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \langle \psi_\beta \rangle_\beta. \quad (7.18)$$

Conviene recordar, que en las regiones homogéneas, la fracción volumétrica se reduce a

$$\varepsilon_\beta(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{en la región homogénea } -\eta \\ \varepsilon_{\beta\omega}, & \text{en la región homogénea } -\omega \end{cases}. \quad (7.19)$$

Haciendo uso de la relación entre los operadores de promedio intrínseco y superficial, en la ecuación (7.16) da como resultado

$$\begin{aligned} \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \langle c_{A\beta} \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \right) = \nabla \cdot \left[ \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \right] \\ - k_r a_v(\mathbf{x}) \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma} - K a_v(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma}}{\partial t}, \end{aligned} \quad (7.20)$$

donde se introdujo el siguiente tensor de difusión dependiente de la posición,

$$\frac{\mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\mathcal{D}_\beta} = \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta + \frac{1}{\mathcal{V}'_\beta(\mathbf{x})} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \left( c_{A\beta} \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} - \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \right) dA, \quad (7.21)$$

el cual ya se ha obtenido en otras partes de este trabajo (ecuaciones (2.17) y (4.11)).

Dirigiendo la atención ahora al término convectivo en la ecuación (7.20), resulta conveniente utilizar las descomposiciones espaciales de la concentración y velocidad (Gray, 1975)

$$c_{A\beta} \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} = \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} + \tilde{c}_{A\beta} \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta}, \quad (7.22)$$

$$\mathbf{v}_\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} = \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} + \tilde{\mathbf{v}}_\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta}, \quad (7.23)$$

para poder expresar al término  $\langle c_{A\beta} \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$  como sigue,

$$\langle c_{A\beta} \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta = \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \langle c_{A\beta} \rangle^\beta + \langle \tilde{c}_{A\beta} \tilde{\mathbf{v}}_\beta \rangle^\beta + \langle c_{A\beta} \mathbf{v}_\beta \rangle_{ex}^\beta, \quad (7.24)$$

donde se definió la siguiente propiedad de exceso, (también denominada dispersión no-local, Valencia-López y col., 2003)

$$\begin{aligned} \langle c_{A\beta} \mathbf{v}_\beta \rangle_{ex}^\beta = \left\langle \left\langle c_{A\beta} \right\rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} \left\langle \mathbf{v}_\beta \right\rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} - \left\langle c_{A\beta} \right\rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \left\langle \mathbf{v}_\beta \right\rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \right\rangle \\ + \left\langle \tilde{c}_{A\beta} \left\langle \mathbf{v}_\beta \right\rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} \right\rangle + \left\langle \left\langle c_{A\beta} \right\rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} \tilde{\mathbf{v}}_\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} \right\rangle. \end{aligned} \quad (7.25)$$

Al sustituir el resultado de la ecuación anterior en el término convectivo de la ecuación (7.20) resulta,

$$\begin{aligned} \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \right) = \nabla \cdot \left[ \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) (\mathbf{D}(\mathbf{x}) + \mathbf{D}'_\beta(\mathbf{x})) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \right] \\ - k_r a_v(\mathbf{x}) \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma} - K a_v(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma}}{\partial t}, \end{aligned} \quad (7.26)$$

donde se introdujo el tensor de dispersión dependiente de la posición, definido como

$$\mathbf{D}_\beta^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta = - \langle \tilde{c}_{A\beta} \tilde{\mathbf{v}}_\beta \rangle^\beta - \langle c_{A\beta} \mathbf{v}_\beta \rangle_{ex}^\beta. \quad (7.27)$$

En este momento, conviene definir un tensor de dispersión total dependiente de la posición como sigue

$$\mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}) = \mathbf{D}(\mathbf{x}) + \mathbf{D}_\beta^*(\mathbf{x}). \quad (7.28)$$

De esta manera, la ecuación de transferencia de masa generalizada es,

$$\begin{aligned} \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \right) = \nabla \cdot \left[ \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \right] \\ - k_r a_v(\mathbf{x}) \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma} - K a_v(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma}}{\partial t}. \end{aligned} \quad (7.29)$$

Para la cual no se involucró el uso de restricciones de escala y es por tanto válida en todo el sistema (regiones homogéneas e inter-región). Para completar la presentación de las ecuaciones generalizadas, a continuación se muestran las ecuaciones de continuidad y movimiento promediadas, que se obtienen de seguir el procedimiento descrito en el Capítulo 5 (ver Sección 5.3),

$$\nabla \cdot \left( \varepsilon_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \right) = 0, \quad (7.30)$$

$$\begin{aligned} 0 = -\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \rho_\beta \mathbf{g} + \mu_\beta \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \\ - \mu_\beta \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \left( \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \right) - \mu_\beta \mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle, \end{aligned} \quad (7.31)$$

donde  $\mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x})$  es un tensor de esfuerzos dependiente de la posición (definido en la ecuación (5.22)). Conviene hacer notar que en la ecuación (7.31) se prefirió expresar al promedio de velocidad mediante el operador definido en la ecuación (7.10), mientras que, en la ecuación (7.29), se usó el promedio intrínseco.

El siguiente paso en el análisis consiste en obtener, a partir de la ecuación de transferencia de masa generalizada, las ecuaciones de medio efectivo válidas en las regiones homogéneas del sistema. Estas regiones serán identificadas mediante el

siguiente cambio de variable  $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_h$ , donde  $h = \omega, \eta$ . Como ya ha sido reportado (Carbonell y Whitaker, 1984; Whitaker, 1999), en estas regiones es factible satisfacer las siguientes restricciones de escala,

$$r_0 \ll L_C; r_0^2 \ll L_C, L_{C_1}, \quad (7.32)$$

y como consecuencia,

$$\nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \gg \frac{1}{\mathcal{V}_\beta(\mathbf{x}_h)} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x}_h)} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \left( \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}_h + \mathbf{y}_\beta} - \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}_h} \right) dA, \quad (7.33)$$

en las regiones homogéneas,

$$\langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \tilde{c}_{A\beta} \rangle^\beta \gg \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \rangle^\beta \langle c_{A\beta} \rangle^\beta, \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \langle \tilde{c}_{A\beta} \rangle^\beta, \text{ en las regiones homogéneas. } \quad (7.34)$$

### Región homogénea- $\omega$

En esta región ( $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_\omega$ ), puede demostrarse (Whitaker, 1999) que cuando se satisfacen las restricciones de escala

$$l_\beta \ll L_C, l_\beta \ll r_0, \quad (7.35)$$

la siguiente desigualdad es válida

$$\langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta \gg \tilde{c}_{A\beta, \omega}. \quad (7.36)$$

La cual permite reemplazar  $\langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma} \rightarrow \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta$  en la ecuación (7.29). Por otro lado, con base en las desigualdades expresadas en las ecuaciones (7.33) y (7.34), el tensor de dispersión total puede escribirse como,

$$\mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}_\omega) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta = \mathcal{D}_\beta \left[ \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta(\mathbf{x}_\omega)} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x}_\omega)} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{c}_{A\beta} dA \right] - \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \tilde{c}_{A\beta} \rangle_\omega^\beta. \quad (7.37)$$

Una comparación de las predicciones teóricas con datos experimentales de este coeficiente se puede encontrar en la monografía de Whitaker (1999). De esta forma, la ecuación (7.29) se puede simplificar a

$$\begin{aligned} & \varepsilon_{\beta, \omega} \left( 1 + \frac{Ka_{v, \omega}}{\varepsilon_{\beta, \omega}} \right) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \varepsilon_{\beta, \omega} \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega^\beta \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta \right) \\ & = \nabla \cdot \left[ \varepsilon_{\beta, \omega} \mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}_\omega) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta \right] - k_r a_{v, \omega} \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta, \text{ en la región homogénea } - \omega. \end{aligned} \quad (7.38)$$

---

*Región homogénea- $\eta$*

Dado que en esta región ( $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_\eta$ ) la única fase presente es la fase fluida (Figura 7-1), el tensor de dispersión total se reduce a la siguiente expresión,

$$\mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}_\eta) \cdot \nabla \langle c_{AB} \rangle_\eta^\beta = \mathcal{D}_\beta \nabla \langle c_{AB} \rangle_\eta^\beta, \quad (7.39)$$

y, tomando en cuenta las restricciones mencionadas anteriormente, la ecuación de medio efectivo es ahora,

$$\frac{\partial \langle c_{AB} \rangle_\eta^\beta}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta^\beta \langle c_{AB} \rangle_\eta^\beta \right) = \nabla \cdot \left( \mathcal{D}_\beta \nabla \langle c_{AB} \rangle_\eta^\beta \right), \text{ en la región homogénea } -\eta. \quad (7.40)$$

La cual tiene la misma estructura que la ecuación (7.1). El procedimiento para obtener, a partir de la ecuación de transferencia generalizada las ecuaciones de medio efectivo de continuidad y de transferencia de cantidad de movimiento en las regiones homogéneas, se llevó a cabo en el Capítulo 5. Con las ecuaciones desarrolladas hasta el momento se puede proceder al desarrollo de las condiciones de salto que acoplan las ecuaciones (7.38) y (7.40).

### 7.3.- Condición de salto.

Siguiendo la metodología de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a), para el desarrollo de la condición de salto, es conveniente definir una nueva región de promediado ( $V_\infty$ ) de volumen  $\mathcal{V}_\infty$ , como la mostrada en la Figura 7-2, la cual contiene porciones de ambas regiones homogéneas, de manera que

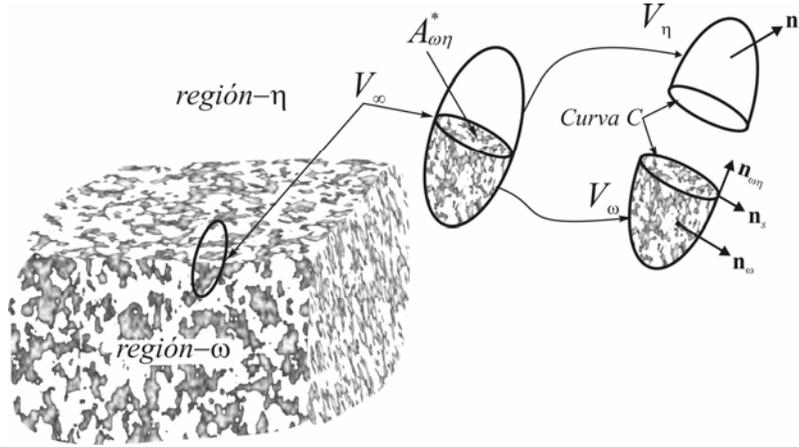
$$\mathcal{V}_\infty = \mathcal{V}_\eta + \mathcal{V}_\omega, \quad (7.41)$$

cuya área superficial se define de manera análoga

$$\mathcal{A}_\infty = \mathcal{A}_\eta + \mathcal{A}_\omega. \quad (7.42)$$

Al integrar en  $V_\infty$  la ecuación de transferencia generalizada, y haciendo uso del teorema de la divergencia en los términos difusivo y convectivo, resulta la siguiente expresión

$$\begin{aligned}
 & \int_{V_\omega} \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} dV + \int_{V_\eta} \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} dV \\
 & + \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left( \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \right) dA + \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left( \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \right) dA \\
 & = \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left[ \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \right] dA + \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left[ \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \right] dA \\
 & - \int_{V_\omega} k_r a_v(\mathbf{x}) \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma} dV - \int_{V_\infty} K a_v(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma}}{\partial t} dV.
 \end{aligned} \tag{7.43}$$



**Figura 7-2:** Región de promediado  $V_\infty$  y vectores unitarios asociados.

Al repetir este procedimiento en las ecuaciones de medio efectivo (7.38) y (7.40), y sumando las ecuaciones resultantes queda,

$$\begin{aligned}
 & \int_{V_\omega} \varepsilon_{\beta,\omega} \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta}{\partial t} dV + \int_{V_\eta} \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta}{\partial t} dV + \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left( \varepsilon_{\beta,\omega} \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega^\beta \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta \right) dA \\
 & + \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left( \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta^\beta \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta \right) dA + \int_{A_{\omega\eta}^*} \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \varepsilon_{\beta,\omega} \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega^\beta \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta^\beta \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta \right) dA \\
 & = \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left[ \varepsilon_{\beta,\omega} \mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}_\omega) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta \right] dA + \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left( \mathcal{D}_\beta \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta \right) dA \\
 & + \int_{A_{\omega\eta}^*} \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left[ \varepsilon_{\beta,\omega} \mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}_\omega) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta - \mathcal{D}_\beta \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta \right] dA \\
 & - \int_{V_\omega} k_r a_{v,\omega} \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta dV - \int_{V_\omega} K a_{v,\omega} \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta}{\partial t} dV.
 \end{aligned} \tag{7.44}$$

De la resta de estas dos últimas ecuaciones se obtiene la siguiente expresión

$$\begin{aligned}
 & \int_{V_\omega} \left( \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} - \varepsilon_{\beta,\omega} \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta}{\partial t} \right) dV + \int_{V_\eta} \left( \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} - \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta}{\partial t} \right) dV \\
 & + \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left( \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \langle c_{A\beta} \rangle^\beta - \varepsilon_{\beta,\omega} \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega^\beta \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta \right) dA \\
 & + \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left( \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \langle c_{A\beta} \rangle^\beta - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta^\beta \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta \right) dA \\
 & = \int_{A_{\omega\eta}^*} \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \varepsilon_{\beta,\omega} \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega^\beta \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta^\beta \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta \right) dA \\
 & + \int_{A_{\omega\eta}^*} \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \mathcal{D}_\beta \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta - \varepsilon_{\beta,\omega} \mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}_\omega) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta \right) dA \\
 & + \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left[ \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta - \varepsilon_{\beta,\omega} \mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}_\omega) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta \right] dA \\
 & + \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left[ \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta - \mathcal{D}_\beta \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta \right] dA \\
 & - \int_{V_\infty} k_r a_v(\mathbf{x}) \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma} dV + \int_{V_\omega} k_r a_{v,\omega} \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta dV \\
 & - \int_{V_\infty} K a_v(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma}}{\partial t} dV + \int_{V_\omega} K a_{v,\omega} \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta}{\partial t} dV.
 \end{aligned} \tag{7.45}$$

Cuya estructura sugiere proponer las siguientes propiedades de exceso (Valencia-López y col., 2003),

*Exceso de acumulación superficial*

$$\begin{aligned}
 \int_{A_{\omega\eta}^*} \varepsilon_{\beta s} \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_s^\beta}{\partial t} dA & = \int_{V_\omega} \left[ \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} - \varepsilon_{\beta,\omega} \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta}{\partial t} \right] dV \\
 & + \int_{V_\eta} \left[ \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} - \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta}{\partial t} \right] dV,
 \end{aligned} \tag{7.46}$$

*Exceso de transporte convectivo superficial*

$$\begin{aligned}
 \oint_C \mathbf{n}_s \cdot \left( \varepsilon_{\beta s} \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_s^\beta \langle c_{A\beta} \rangle_s^\beta \right) d\sigma & = \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left( \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \langle c_{A\beta} \rangle^\beta - \varepsilon_{\beta,\omega} \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega^\beta \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta \right) dA \\
 & + \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left( \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \langle c_{A\beta} \rangle^\beta - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta^\beta \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta \right) dA,
 \end{aligned} \tag{7.47}$$

---

*Exceso de transporte dispersivo superficial*

$$\begin{aligned} & \oint_C \mathbf{n}_s \cdot \left[ \varepsilon_{\beta s} \mathbf{D}_s \cdot \nabla_s \langle c_{A\beta} \rangle_s^\beta \right] d\sigma \\ &= \int_{A_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left[ \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta - \varepsilon_{\beta,\omega} \mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}_\omega) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta \right] dA \\ & \quad + \int_{A_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left[ \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta - \mathcal{D}_\beta \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta \right] dA, \end{aligned} \quad (7.48)$$

*Exceso de reacción superficial*

$$\int_{A_{\omega\eta}^*} \langle R_{Rx} \rangle_s dA = \int_{V_\infty} k a_v(\mathbf{x}) \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma} dV - \int_{V_\omega} k a_{v,\omega} \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta dV, \quad (7.49)$$

*Exceso de adsorción superficial*

$$\int_{A_{\omega\eta}^*} \langle R_{Ads} \rangle dA = \int_{V_\infty} K a_v(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma}}{\partial t} dV - \int_{V_\omega} K a_{v,\omega} \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta}{\partial t} dV. \quad (7.50)$$

En las definiciones anteriores,  $\mathbf{n}_s$  es el vector unitario normal a la Curva  $C$  (Figura 7-2) y  $\mathbf{D}_s$  es el tensor de exceso de dispersión total superficial. Por otro lado, a partir de las ideas expuestas en el Capítulo 2, se puede demostrar que (los detalles se encuentran en la Sección 2.6)

$$\langle R_{Rx} \rangle_s = \frac{1}{\mathcal{A}_{\omega\eta} A_{\omega\eta}} \int k_r c_{A\beta} \Big|_s dA = \langle k_r c_{A\beta} \rangle_{\eta\omega}, \quad (7.51)$$

$$\langle R_{Ads} \rangle_s = \frac{1}{\mathcal{A}_{\omega\eta} A_{\omega\eta}} \int K \frac{\partial c_{A\beta}}{\partial t} \Big|_s dA = \left\langle K \frac{\partial c_{A\beta}}{\partial t} \right\rangle_{\eta\omega}. \quad (7.52)$$

Para obtener las ecuaciones anteriores se supuso que el radio de la región de promediado es mucho menor que el radio de curvatura de la inter-región ( $r_0 \ll r_c$ ) y que se satisface la restricción de escala  $r_0 \gg l_\beta$ . El uso de las definiciones (7.46)-(7.52) en la ecuación (7.45), permite obtener, tras aplicar el teorema de la divergencia superficial (Deemer y Slattery, 1978; Slattery, 1980; Ochoa-Tapia y col., 1993; Slattery, 2007), la siguiente forma de la condición de salto,

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{\varepsilon_{\beta s} \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_s^\beta}{\partial t}}_{\text{acumulación superficial}} + \underbrace{\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \varepsilon_{\beta s} \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_s^\beta \langle c_{A\beta} \rangle_s^\beta - \varepsilon_{\beta s} \mathbf{D}_s \cdot \nabla_s \langle c_{A\beta} \rangle_s^\beta \right)}_{\text{exceso de transporte superficial}} \\
 & \underbrace{-\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \varepsilon_{\beta,\omega} \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega^\beta \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta^\beta \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta \right)}_{\text{transporte convectivo}} \\
 & = \underbrace{-\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left[ \varepsilon_{\beta,\omega} \mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}_\omega) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta - \mathcal{D}_\beta \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta \right]}_{\text{transporte difusivo}} \\
 & - \underbrace{\langle k_r c_{A\beta} \rangle_{\eta\omega}}_{\text{reacción superficial}} - \underbrace{\left\langle K \frac{\partial c_{A\beta}}{\partial t} \right\rangle_{\eta\omega}}_{\text{adsorción superficial}}, \text{ en la superficie divisoria.}
 \end{aligned} \tag{7.53}$$

Por otro lado, si se aceptan las suposiciones y restricciones de escala introducidas en los Capítulos 2 y 5, los términos de exceso de transporte superficial pueden considerarse despreciables respecto a los términos difusivos y convectivos en la ecuación (7.53).

Esto permite expresar la ecuación anterior en estado cuasiestacionario como

$$\begin{aligned}
 & -\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left[ \varepsilon_{\beta,\omega} \mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}_\omega) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta - \mathcal{D}_\beta \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta \right] \\
 & + \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \varepsilon_{\beta,\omega} \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega^\beta \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta^\beta \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta \right) \\
 & = \langle k_r c_{A\beta} \rangle_{\eta\omega} + \left\langle K \frac{\partial c_{A\beta}}{\partial t} \right\rangle_{\eta\omega}, \text{ en la superficie divisoria.}
 \end{aligned} \tag{7.54}$$

No está de más remarcar que, a diferencia del trabajo de Valencia-López y col. (2003), aquí se ha distinguido entre la acumulación superficial y el exceso de adsorción superficial. De esta forma, al despreciar el transporte superficial no se está, de ninguna forma, despreciando el término de adsorción superficial. Para completar el planteamiento del problema se impone la siguiente condición de continuidad del campo de concentraciones promedio,

$$\langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta = \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta = \langle c_{A\beta} \rangle_s^\beta, \text{ en la superficie divisoria.} \tag{7.55}$$

Por otro lado, en el Capítulo 5, se obtuvieron las siguientes condiciones para la velocidad y su gradiente (ver Sección 5.4),

$$\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta \right) = 0, \text{ en la superficie divisoria,} \quad (7.56)$$

$$-\mathbf{n}_{\omega\eta} \left( \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta - \langle p_\beta \rangle_\eta^\beta \right) + \mu_\beta \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \boldsymbol{\varepsilon}_{\beta\omega}^{-1} \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega - \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta \right) = \frac{\mu_\beta}{a_{vs}} \mathbf{K}^{-1} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega \quad (7.57)$$

en la superficie divisoria.

donde  $\mathbf{K}^{-1}$  es el tensor mixto de esfuerzos definido en la ecuación (5.59). El uso de las ecuaciones (7.55) y (7.56) en la condición de salto (7.54), permite que se cancelen los términos que constituyen el transporte convectivo, de esta forma la condición de salto se reduce a,

$$\left\langle \mathbf{K} \frac{\partial c_{AB}}{\partial t} \right\rangle_{\eta\omega} = -\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left[ \boldsymbol{\varepsilon}_{\beta,\omega} \mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}_\omega) \cdot \nabla \langle c_{AB} \rangle_\omega^\beta - \mathcal{D}_\beta \nabla \langle c_{AB} \rangle_\eta^\beta \right] - \langle k_r c_{AB} \rangle_{\eta\omega}, \text{ en la superficie divisoria.} \quad (7.58)$$

La cual, en estado estacionario, adquiere la misma estructura que la condición de salto obtenida en el Capítulo 2 para el caso de difusión y reacción (ver ecuación (2.47)). Sin embargo, en la ecuación (7.58),  $\mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}_\omega)$  es el tensor de dispersión total en la región homogénea  $-\omega$ , a diferencia de  $\mathbf{D}_\omega$  que es el tensor de difusión efectiva. El siguiente paso en el análisis es el planteamiento de los problemas de las variables de cerradura necesarios para obtener una forma cerrada de la ecuación (7.58).

#### 7.4.- Problema de cerradura.

El objetivo ahora, consiste en desarrollar expresiones que permitan escribir la ecuación (7.58) en términos de cantidades medibles en las regiones homogéneas. Para esto, se usan las descomposiciones espaciales de la concentración (ecuación (7.22)) y las siguientes descomposiciones (Wood y col., 2000)

$$k_r = \langle k_r \rangle_{\eta\omega} + \tilde{k}_r, \quad (7.59)$$

$$K = \langle K \rangle_{\eta\omega} + \tilde{K}, \quad (7.60)$$

que permiten descomponer los términos de reacción y adsorción superficial como sigue,

$$\langle kc_{AB} \rangle_{\eta\omega} = \left\langle \langle k \rangle_{\eta\omega} \langle c_{AB} \rangle^\beta + \langle k \rangle_{\eta\omega} \tilde{c}_{AB} + \tilde{k} \langle c_{AB} \rangle^\beta + \tilde{k} \tilde{c}_{AB} \right\rangle_{\eta\omega}, \quad (7.61)$$

$$\left\langle K \frac{\partial c_{AB}}{\partial t} \right\rangle_{\eta\omega} = \left\langle \langle K \rangle_{\eta\omega} \frac{\partial \langle c_{AB} \rangle^\beta}{\partial t} + \langle K \rangle_{\eta\omega} \frac{\partial \tilde{c}_{AB}}{\partial t} + \tilde{K} \frac{\partial \langle c_{AB} \rangle^\beta}{\partial t} + \tilde{K} \frac{\partial \tilde{c}_{AB}}{\partial t} \right\rangle_{\eta\omega}. \quad (7.62)$$

Las cuales pueden simplificarse a (Whitaker, 1999)

$$\langle k_r c_{AB} \rangle_{\eta\omega} = \langle k_r \rangle_{\eta\omega} \langle c_{AB} \rangle_s^\beta + \langle \tilde{k}_r \tilde{c}_{AB} \rangle_{\eta\omega}, \quad (7.63)$$

$$\left\langle K \frac{\partial c_{AB}}{\partial t} \right\rangle_{\eta\omega} = \langle K \rangle_{\eta\omega} \frac{\partial \langle c_{AB} \rangle^\beta}{\partial t} + \left\langle \tilde{K} \frac{\partial \tilde{c}_{AB}}{\partial t} \right\rangle_{\eta\omega}. \quad (7.64)$$

Estas dos ecuaciones se encuentran en función de las desviaciones espaciales de la concentración. Por lo que se debe obtener el problema de valor a la frontera, a partir del cual, se pueden expresar dichas desviaciones en función de variables macroscópicas.

Para ello, conviene escribir la ecuación (7.29) de la siguiente manera,

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \langle c_{AB} \rangle^\beta}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \nabla \cdot \langle c_{AB} \rangle^\beta \\ &= \nabla \cdot \left( \mathcal{D}_\beta \nabla \langle c_{AB} \rangle^\beta \right) + \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \left( \mathcal{D}_\beta \nabla \langle c_{AB} \rangle^\beta \right) \\ & - \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) k_r a_v(\mathbf{x}) \langle c_{AB} \rangle_{\beta\sigma} - \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) K a_v(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{AB} \rangle_{\beta\sigma}}{\partial t} \\ & + \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\beta}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \left( c_{AB} - \langle c_{AB} \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \right) dA \right] \\ & - \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \langle \tilde{c}_{AB} \tilde{\mathbf{v}}_\beta \rangle + \langle c_{AB} \mathbf{v}_\beta \rangle_{ex} \right]. \end{aligned} \quad (7.65)$$

Para obtener la ecuación anterior se tomó en cuenta la ecuación (7.30). Al restar a la ecuación (7.1) la ecuación (7.65), tomando en cuenta la descomposición espacial (7.22), resulta la siguiente expresión

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \tilde{c}_{AB}}{\partial t} + \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla c_{AB} - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \nabla \cdot \langle c_{AB} \rangle^\beta = \nabla \cdot \left( \mathcal{D}_\beta \nabla \tilde{c}_{AB} \right) \\ & = \nabla \cdot \left( \mathcal{D}_\beta \nabla \langle c_{AB} \rangle^\beta \right) - \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \left( \mathcal{D}_\beta \nabla \langle c_{AB} \rangle^\beta \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & +\varepsilon_{\beta}^{-1}(\mathbf{x})k_r a_v(\mathbf{x})\langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma} + \varepsilon_{\beta}^{-1}(\mathbf{x})Ka_v(\mathbf{x})\frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma}}{\partial t} \\
 & -\varepsilon_{\beta}^{-1}(\mathbf{x})\nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_{\beta}}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \left( c_{A\beta} - \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta}^{\Big|_{\mathbf{x}}} \right) dA \right] \\
 & +\varepsilon_{\beta}^{-1}(\mathbf{x})\nabla \cdot \left[ \langle \tilde{c}_{A\beta} \tilde{\mathbf{v}}_{\beta} \rangle + \langle c_{A\beta} \mathbf{v}_{\beta} \rangle_{ex} \right], \text{ en la fase } -\beta.
 \end{aligned} \tag{7.66}$$

Sin embargo, en muchas aplicaciones, la siguiente restricción es válida,

$$\frac{\mathcal{D}_{\beta} t^*}{\delta_{\beta}^2} \gg 1 \tag{7.67}$$

donde  $\delta_{\beta}$  es la longitud característica asociada con las desviaciones espaciales de la concentración en la frontera interfacial (Whitaker, 1999). Lo que permite escribir la ecuación (7.66) en estado cuasiestacionario,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{v}_{\beta} \cdot \nabla \tilde{c}_{A\beta} + \tilde{\mathbf{v}}_{\beta} \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta} & = \mathcal{D}_{\beta} \nabla^2 \tilde{c}_{A\beta} - \varepsilon_{\beta}^{-1}(\mathbf{x})\nabla \varepsilon_{\beta}(\mathbf{x}) \cdot \left( \mathcal{D}_{\beta} \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta}^{\beta} \right) \\
 & +\varepsilon_{\beta}^{-1}(\mathbf{x})k_r a_v(\mathbf{x})\langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma} + \varepsilon_{\beta}^{-1}(\mathbf{x})Ka_v(\mathbf{x})\frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta\sigma}}{\partial t} \\
 & -\varepsilon_{\beta}^{-1}(\mathbf{x})\nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_{\beta}}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{c}_{A\beta} dA \right] \\
 & -\varepsilon_{\beta}^{-1}(\mathbf{x})\nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_{\beta}}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \left( \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta}^{\Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_{\beta}}} - \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta}^{\Big|_{\mathbf{x}}} \right) dA \right] \\
 & +\varepsilon_{\beta}^{-1}(\mathbf{x})\nabla \cdot \left[ \langle \tilde{c}_{A\beta} \tilde{\mathbf{v}}_{\beta} \rangle + \langle c_{A\beta} \mathbf{v}_{\beta} \rangle_{ex} \right], \text{ en la fase } -\beta.
 \end{aligned} \tag{7.68}$$

La condición de frontera interfacial se obtiene de sustituir la descomposición espacial (7.22) en la ecuación (7.6)

$$\begin{aligned}
 K \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta}^{\beta}}{\partial t} & = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \left( \mathcal{D}_{\beta} \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta}^{\beta} \right) - \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \left( \mathcal{D}_{\beta} \nabla \tilde{c}_{A\beta} \right) \\
 & -k_r \langle c_{A\beta} \rangle_{\beta}^{\beta} - k_r \tilde{c}_{A\beta}, \text{ en la interfase } \beta - \sigma,
 \end{aligned} \tag{7.69}$$

donde se tomó en cuenta la restricción en la ecuación (7.67). Un análisis de orden de magnitud de la ecuación anterior lleva al siguiente resultado,

$$\tilde{c}_{A\beta} = \mathbf{O} \left[ \frac{k_r \delta_\beta / \mathcal{D}_\beta}{1 + \mathbf{O} \left( \frac{k_r \delta_\beta}{\mathcal{D}_\beta} \right)}, \frac{\delta_\beta / L_C}{1 + \mathbf{O} \left( \frac{k_r \delta_\beta}{\mathcal{D}_\beta} \right)}, \frac{K \delta_\beta / \mathcal{D}_\beta t^*}{1 + \mathbf{O} \left( \frac{k_r \delta_\beta}{\mathcal{D}_\beta} \right)} \right] \langle c_{A\beta} \rangle^\beta. \quad (7.70)$$

De donde se puede deducir que la siguiente desigualdad es válida

$$\tilde{c}_{A\beta} \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} \ll \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta}, \quad (7.71)$$

siempre y cuando se cumplan las siguientes restricciones de escala,

$$\frac{k_r \delta_\beta}{\mathcal{D}_\beta} \ll 1; \quad \frac{\delta_\beta}{L_C} \ll 1; \quad \frac{K \delta_\beta}{\mathcal{D}_\beta t^*} \ll 1. \quad (7.72)$$

Bajo estas suposiciones, la ecuación (7.69) se simplifica como sigue,

$$K \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \left( \mathcal{D}_\beta \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \right) - \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \left( \mathcal{D}_\beta \nabla \tilde{c}_{A\beta} \right) - k_r \langle c_{A\beta} \rangle^\beta, \text{ en la interfase } \beta - \sigma. \quad (7.73)$$

Además, las restricciones de escala  $\delta_\beta \ll L$  y  $\delta_\beta \ll r_0$ , permiten que se satisfagan las siguientes desigualdades

$$\nabla^2 \tilde{c}_{A\beta} \gg \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{c}_{A\beta} \, dA \right], \quad (7.74)$$

$$\int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \, dA \gg \int_{V_\beta(\mathbf{x})} \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \, dV, \quad (7.75)$$

$$\mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \tilde{c}_{A\beta} \gg \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \langle \tilde{c}_{A\beta} \tilde{\mathbf{v}}_\beta \rangle. \quad (7.76)$$

Para obtener esta última se tomó en cuenta la condición de no-deslizamiento, la cual permite que  $\tilde{\mathbf{v}}_\beta = \mathbf{O} \left( \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \right)$ . Por lo que, la ecuación (7.68) se reduce, al tomar en cuenta la desigualdad en (7.71), a

$$\begin{aligned}
 & \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \tilde{c}_{A\beta} + \tilde{\mathbf{v}}_\beta \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}} = \mathcal{D}_\beta \nabla^2 \tilde{c}_{A\beta} \\
 & + \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) a_v(\mathbf{x}) \left[ k_r \left\langle \langle c_{A\beta} \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} \right\rangle_{\beta\sigma} + K \frac{\partial}{\partial t} \left\langle \langle c_{A\beta} \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} \right\rangle_{\beta\sigma} \right] \\
 & - \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\beta}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \left( \langle c_{A\beta} \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} - \langle c_{A\beta} \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}} \right) dA \right] \\
 & + \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \langle c_{A\beta} \mathbf{v}_\beta \rangle_{ex}, \text{ en la fase } -\beta.
 \end{aligned} \tag{7.77}$$

En este punto, conviene encontrar qué tipo de restricciones de escala deben satisfacerse para que las propiedades  $\langle \psi_\beta \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta}$  puedan suponerse constantes en el volumen de promediado. Para esto, se considera la siguiente expansión en series de Taylor alrededor de  $\mathbf{x}$ ,

$$\langle \psi_\beta \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} = \langle \psi_\beta \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}} + \mathbf{y}_\beta \cdot \nabla \langle \psi_\beta \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}} + \frac{1}{2} \mathbf{y}_\beta \mathbf{y}_\beta : \nabla \nabla \langle \psi_\beta \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}} + \dots \tag{7.78}$$

El siguiente paso consiste en sustituir esta expansión en las ecuaciones (7.73) y (7.77); sin embargo, dada la complejidad de las ecuaciones resultantes, es más conveniente analizar término por término, de esta forma, los términos de reacción y adsorción se pueden expresar como,

$$\begin{aligned}
 & k_r \left\langle \langle c_{A\beta} \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} \right\rangle_{\beta\sigma} + K \frac{\partial}{\partial t} \left\langle \langle c_{A\beta} \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} \right\rangle_{\beta\sigma} \\
 & = k \langle c_{A\beta} \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}} + k \mathbf{y}_\beta \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}} + \frac{k}{2} \mathbf{y}_\beta \mathbf{y}_\beta : \nabla \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}} + K \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}}}{\partial t} \\
 & + K \frac{\partial}{\partial t} \left( \mathbf{y}_\beta \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}} \right) + K \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \mathbf{y}_\beta \mathbf{y}_\beta : \nabla \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}} \right) + \dots
 \end{aligned} \tag{7.79}$$

Mientras que el término de difusión no local toma la siguiente forma,

$$\begin{aligned}
 & \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\beta}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \left( \langle c_{A\beta} \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} - \langle c_{A\beta} \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}} \right) dA \right] = \\
 & - \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left( \mathcal{D}_\beta \nabla \langle \mathbf{y}_\beta \rangle \right) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}} \\
 & - \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \left[ \frac{\mathcal{D}_\beta}{2} \nabla \langle \mathbf{y}_\beta \mathbf{y}_\beta \rangle \right] : \nabla \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\beta \Big|_{\mathbf{x}} + \dots
 \end{aligned} \tag{7.80}$$

En la ecuación anterior se usaron las siguientes expresiones desarrolladas por Quintard y Whitaker (1994)

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{y}_{\beta} dA = -\nabla \langle \mathbf{y}_{\beta} \rangle, \quad (7.81)$$

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{y}_{\beta} \mathbf{y}_{\beta} dA = -\nabla \langle \mathbf{y}_{\beta} \mathbf{y}_{\beta} \rangle. \quad (7.82)$$

Por último, los términos que componen el término de transporte dispersivo no-local se pueden descomponer como sigue,

$$\left\langle \langle c_{A\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_{\beta}} \tilde{\mathbf{v}}_{\beta} \right\rangle = \langle \tilde{\mathbf{v}}_{\beta} \rangle \langle c_{A\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}} + \left\langle \tilde{\mathbf{v}}_{\beta} \left( \frac{1}{2} \mathbf{y}_{\beta} \mathbf{y}_{\beta} \right) \right\rangle : \nabla \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}} + \dots, \quad (7.83)$$

$$\left\langle \langle \mathbf{v}_{\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_{\beta}} \tilde{c}_{A\beta} \right\rangle = \langle \tilde{c}_{A\beta} \rangle \langle \mathbf{v}_{\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}} + \left\langle \tilde{c}_{A\beta} \left( \frac{1}{2} \mathbf{y}_{\beta} \mathbf{y}_{\beta} \right) \right\rangle : \nabla \nabla \langle \mathbf{v}_{\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}} + \dots, \quad (7.84)$$

$$\begin{aligned} \langle c_{A\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_{\beta}} \langle \mathbf{v}_{\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_{\beta}} &= \left( \langle c_{A\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}} + \mathbf{y}_{\beta} \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}} + \frac{1}{2} \mathbf{y}_{\beta} \mathbf{y}_{\beta} : \nabla \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}} \right) \langle \mathbf{v}_{\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}} \\ &+ \left( \langle c_{A\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}} + \mathbf{y}_{\beta} \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}} + \frac{1}{2} \mathbf{y}_{\beta} \mathbf{y}_{\beta} : \nabla \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}} \right) \left( \mathbf{y}_{\beta} \cdot \nabla \langle \mathbf{v}_{\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}} \right) \\ &+ \left( \langle c_{A\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}} + \mathbf{y}_{\beta} \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}} + \frac{1}{2} \mathbf{y}_{\beta} \mathbf{y}_{\beta} : \nabla \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}} \right) \left( \frac{1}{2} \mathbf{y}_{\beta} \mathbf{y}_{\beta} : \nabla \nabla \langle \mathbf{v}_{\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}} \right) + \dots \end{aligned} \quad (7.85)$$

De esta manera, de acuerdo al desarrollo del Capítulo 3, si se satisfacen las siguientes restricciones de escala,

$$r_0 \ll L, r_0^2 \ll L^2, \frac{10\varepsilon_{\beta} L_{\varepsilon}^2}{(1-\varepsilon_{\beta\omega})\delta_{\beta} r_0} \gg 1; \frac{10\varepsilon_{\beta}}{(1+\varepsilon_{\beta\omega})} \frac{L_{\varepsilon}^2 L_{c_1}}{r_0^2 \delta_{\beta}} \gg 1, \quad (7.86)$$

la ecuación (7.77) puede expresarse como

$$\begin{aligned} \underbrace{\mathbf{v}_{\beta} \cdot \nabla \tilde{c}_{A\beta} + \tilde{\mathbf{v}}_{\beta} \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}}}_{\text{fuente convectiva}} &= \underbrace{\mathcal{D}_{\beta} \nabla^2 \tilde{c}_{A\beta} + \varepsilon_{\beta}^{-1}(\mathbf{x}) k_r a_v(\mathbf{x}) \langle c_{A\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}}}_{\text{fuente de reacción volumétrica}} \\ &+ \underbrace{\varepsilon_{\beta}^{-1}(\mathbf{x}) K a_v(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^{\beta} \Big|_{\mathbf{x}}}{\partial t}}_{\text{fuente de adsorción volumétrica}}, \text{ en la fase } -\beta. \end{aligned} \quad (7.87)$$

Para obtener la ecuación anterior se impusieron las siguientes condiciones

$$\langle \tilde{\mathbf{v}}_{\beta} \rangle = 0, \langle \tilde{c}_{A\beta} \rangle = 0. \quad (7.88)$$

Al repetir el análisis para la condición de frontera interfacial resulta,

$$\begin{aligned}
 \text{C.F.1} \quad -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\mathcal{D}_\beta \nabla \tilde{c}_{A\beta}) &= \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \underbrace{\left( \mathcal{D}_\beta \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \right) \Big|_{\mathbf{x}}}_{\text{fuente difusiva superficial}} + \underbrace{K \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} \Big|_{\mathbf{x}}}_{\text{fuente de adsorción superficial}} \\
 &+ \underbrace{k_r \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}}}_{\text{fuente de reacción superficial}}, \text{ en la interfase } \beta - \sigma.
 \end{aligned} \quad (7.89)$$

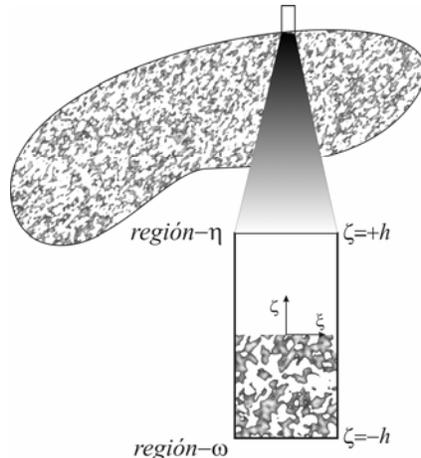
Debe ser claro que no se pretende resolver el problema de las desviaciones espaciales de la concentración en toda la superficie divisora entre las regiones, sino en una porción representativa como la mostrada en la Figura 7-3. Como en los casos anteriores, se debe seleccionar la altura  $h$  de la celda unitaria de manera tal que, en sus extremos, las desviaciones espaciales y sus derivadas, correspondan a las de las regiones homogéneas. Bajo estos argumentos, es permisible imponer las siguientes condiciones de frontera,

$$\text{C.F.2} \quad \text{En } \zeta = h, \quad \tilde{c}_{A\beta} = \tilde{c}_{A\eta} = 0, \quad \tilde{\mathbf{v}}_{\beta\eta} = \tilde{\mathbf{v}}_{\beta\eta} = 0, \quad (7.90)$$

$$\text{C.F.3} \quad \text{En } \zeta = -h, \quad \tilde{c}_{A\beta} = \tilde{c}_{A\omega}, \quad \tilde{\mathbf{v}}_{\beta\omega} = \tilde{\mathbf{v}}_{\beta\omega}; \quad \frac{\partial \tilde{c}_{A\beta}}{\partial \zeta} = \frac{\partial \tilde{c}_{A\omega}}{\partial \zeta}, \quad \frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}_\beta}{\partial \zeta} = \frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}_{\beta\omega}}{\partial \zeta}. \quad (7.91)$$

En la ecuación (7.90), se tomó en cuenta el hecho que las desviaciones espaciales en la región homogénea  $-\eta$  son despreciables. Para completar el planteamiento del problema de valor a la frontera, se impone la condición de periodicidad en las direcciones tangentes a la superficie divisora,

$$\text{Periodicidad:} \quad \tilde{c}_{A\beta}(\mathbf{r} + \zeta_i) = \tilde{c}_{A\beta}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (7.92)$$



**Figura 7-3:** Celda unitaria para la inter-región.

De esta forma, se puede proponer la siguiente expresión de  $\tilde{c}_{A\beta}$  en términos de las fuentes como,

$$\tilde{c}_{A\beta} = s_\beta \langle c_{A\beta} \rangle^\beta + \mathbf{b}_\beta \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta + d_\beta \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t}. \quad (7.93)$$

La cual, da lugar a los siguientes tres problemas de valor a la frontera para las variables de cerradura,

*Problema I*

$$\mathbf{v}_\beta \cdot \nabla s_\beta = \mathcal{D}_\beta \nabla^2 s_\beta + \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) k_{r,v}(\mathbf{x}), \text{ en la fase } -\beta, \quad (7.94)$$

$$\text{C.F.1} \quad -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla s_\beta = \frac{k_r}{\mathcal{D}_\beta}, \text{ en la interfase } \beta - \sigma, \quad (7.95)$$

$$\text{C.F.2} \quad \text{En } \zeta = h, \quad s_\beta = 0, \quad (7.96)$$

$$\text{C.F.3} \quad \text{En } \zeta = -h, \quad s_\beta = s_\omega, \quad \frac{\partial s_\beta}{\partial \zeta} = \frac{\partial s_\omega}{\partial \zeta}, \quad (7.97)$$

$$\text{Periodicidad:} \quad s_\beta(\mathbf{r} + \ell_i) = s_\beta(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (7.98)$$

*Problema II*

$$\mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta + \tilde{\mathbf{v}}_\beta = \mathcal{D}_\beta \nabla^2 \mathbf{b}_\beta, \text{ en la fase } -\beta, \quad (7.99)$$

$$\text{C.F.1} \quad -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta = \mathbf{n}_{\beta\sigma}, \text{ en la interfase } \beta - \sigma, \quad (7.100)$$

$$\text{C.F.2} \quad \text{En } \zeta = h, \quad \mathbf{b}_\beta = \mathbf{0}, \quad (7.101)$$

$$\text{C.F.3} \quad \text{En } \zeta = -h, \quad \mathbf{b}_\beta = \mathbf{b}_\omega, \quad \frac{\partial \mathbf{b}_\beta}{\partial \zeta} = \frac{\partial \mathbf{b}_\omega}{\partial \zeta}, \quad (7.102)$$

$$\text{Periodicidad:} \quad \mathbf{b}_\beta(\mathbf{r} + \ell_i) = \mathbf{b}_\beta(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (7.103)$$

*Problema III*

$$\mathbf{v}_\beta \cdot \nabla d_\beta = \mathcal{D}_\beta \nabla^2 d_\beta + \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) K a_v(\mathbf{x}), \text{ en la fase } -\beta, \quad (7.104)$$

$$\text{C.F.1} \quad -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla d_\beta = K / \mathcal{D}_\beta, \text{ en la interfase } \beta - \sigma, \quad (7.105)$$

$$\text{C.F.2} \quad \text{En } \zeta = h, \quad d_\beta = 0, \quad (7.106)$$

$$\text{C.F.3} \quad \text{En } \zeta = -h, \quad d_\beta = d_\omega, \quad \frac{\partial d_\beta}{\partial \zeta} = \frac{\partial d_\omega}{\partial \zeta}, \quad (7.107)$$

$$\text{Periodicidad:} \quad d_\beta(\mathbf{r} + \ell_i) = d_\beta(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (7.108)$$

Nótese que los problemas *I* y *III* tienen la misma estructura y que los tres problemas de valor a la frontera dependen del campo de velocidades. Para obtener las condiciones de frontera en  $\zeta = -h$ , se tomó en cuenta el hecho que  $\tilde{c}_{A\omega}$  puede expresarse en términos de las fuentes de desviaciones en la región homogénea  $-\omega$  como sigue,

$$\tilde{c}_{A\omega} = \mathbf{b}_{\beta\omega} \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta + s_{\beta\omega} \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta + d_\omega \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta}{\partial t}. \quad (7.109)$$

Así como la siguiente condición,

$$\text{En } \zeta = -h, \quad \langle c_{A\beta} \rangle^\beta = \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta; \quad \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} = \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta}{\partial t}; \quad \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta = \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta. \quad (7.110)$$

Para determinar la necesidad de resolver estos problemas de cerradura, es conveniente obtener la forma cerrada de la condición de salto, lo cual se lleva a cabo en la siguiente sección.

## 7.5.- Condición de salto cerrada.

En la sección anterior se obtuvo una ecuación que permite expresar el campo de las desviaciones espaciales de la concentración, en términos de la concentración promedio y sus derivadas. De esta forma, al sustituir la ecuación (7.93) en los términos de reacción y adsorción de la condición de salto (7.58) (ecuaciones (7.63) y (7.64), respectivamente), se obtienen las siguientes ecuaciones,

$$\begin{aligned} \langle k_r c_{A\beta} \rangle_{\eta\omega} &= \langle k_r \rangle_{\eta\omega} \langle c_{A\beta} \rangle_s^\beta + \langle \tilde{k}_r \mathbf{b}_\beta \rangle_{\eta\omega} \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_s^\beta \\ &+ \langle \tilde{k}_r s_\beta \rangle_{\eta\omega} \langle c_{A\beta} \rangle_s^\beta + \langle \tilde{k}_r d_\beta \rangle_{\eta\omega} \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_s^\beta}{\partial t}, \end{aligned} \quad (7.111)$$

$$\begin{aligned} \left\langle K \frac{\partial C_{A\beta}}{\partial t} \right\rangle_{\eta\omega} &= \langle K \rangle_{\eta\omega} \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_s^\beta}{\partial t} + \langle \tilde{K} \mathbf{b}_\beta \rangle_{\eta\omega} \cdot \frac{\partial (\nabla \langle c_{A\beta} \rangle_s^\beta)}{\partial t} \\ &+ \langle \tilde{K} d_\beta \rangle_{\eta\omega} \frac{\partial^2 \langle c_{A\beta} \rangle_s^\beta}{\partial t^2} + \langle \tilde{K} s_\beta \rangle_{\eta\omega} \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_s^\beta}{\partial t}. \end{aligned} \quad (7.112)$$

Sin embargo, a partir de los problemas *II* y *III* se pueden obtener los siguientes estimados de orden de magnitud,

$$\mathbf{b}_\beta = \mathbf{O}(\delta_\beta), \quad (7.113)$$

$$d_\beta = \mathbf{O}\left(\frac{K \delta_\beta}{\mathcal{D}_\beta}\right). \quad (7.114)$$

De manera que, si las restricciones de escala  $\delta_\beta \ll L$  y  $\frac{K \delta_\beta}{\mathcal{D}_\beta} \ll 1$  se satisfacen,

entonces, las ecuaciones (7.111) y (7.112) se simplifican, tomando en cuenta la ecuación (7.55), a lo siguiente

$$\langle k_r c_{A\beta} \rangle_{\eta\omega} = K_{eff}^{rx} \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta, \quad (7.115)$$

$$\left\langle K \frac{\partial C_{A\beta}}{\partial t} \right\rangle_{\eta\omega} = K_{eff}^{ads} \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta}{\partial t}, \quad (7.116)$$

donde se recuperó la definición del coeficiente efectivo de reacción introducido en el Capítulo 3 (la dependencia de este parámetro con la porosidad y el módulo de Thiele local se muestra en las Secciones 3.5 y 3.6 para el caso difusivo),

$$K_{eff}^{rx} = \langle k_r \rangle_{\eta\omega} + \langle \tilde{k}_r s_\beta \rangle_{\eta\omega}, \quad (7.117)$$

y se introdujo un coeficiente efectivo de adsorción  $K_{eff}^{ads}$ , definido como sigue

$$K_{eff}^{ads} = \langle K \rangle_{\eta\omega} + \langle \tilde{K} s_\beta \rangle_{\eta\omega}. \quad (7.118)$$

A partir de las ecuaciones (7.117) y (7.118) se deduce que sólo es necesario resolver el *Problema I* para calcular los coeficientes efectivos. Nótese que en el caso en que no se lleve a cabo una reacción química, el *Problema I* se vuelve homogéneo y  $s_\beta$  no pasará el filtro de integración en la ecuación (7.118), por lo que el coeficiente efectivo de adsorción es, en este caso

$$K_{eff}^{ads} = \langle K \rangle_{\eta\omega}, \text{ caso no reactivo.} \quad (7.119)$$

Por último, se presentan las ecuaciones que definen el problema macroscópico

*Región homogénea- $\omega$*

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\beta,\omega} \left( 1 + \frac{K a_{v,\omega}}{\varepsilon_{\beta,\omega}} \right) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta \right) \\ = \nabla \cdot \left[ \varepsilon_{\beta,\omega} \mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}_\omega) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta \right] - k_r a_{v,\omega} \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta, \end{aligned} \quad (7.120)$$

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega = 0, \quad (7.121)$$

$$\langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega = -\frac{\mathbf{K}_{\beta\omega}}{\mu_\beta} \cdot \left( \nabla \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta - \rho_\beta \mathbf{g} - \varepsilon_{\beta\omega}^{-1} \mu_\beta \nabla^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega \right). \quad (7.122)$$

*Región homogénea- $\eta$*

$$\frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta \right) = \mathcal{D}_\beta \nabla^2 \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta, \quad (7.123)$$

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta = 0, \quad (7.124)$$

$$0 = -\nabla \langle p_\beta \rangle_\eta^\beta + \rho_\beta \mathbf{g} + \mu_\beta \nabla^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta. \quad (7.125)$$

*Inter-región  $\omega$ - $\eta$*

$$\langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta = \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta, \quad (7.126)$$

$$K_{eff}^{ads} \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta}{\partial t} = -\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left[ \varepsilon_{\beta,\omega} \mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}_\omega) \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta - \mathcal{D}_\beta \nabla \langle c_{A\beta} \rangle_\eta^\beta \right] - K_{eff}^{rx} \langle c_{A\beta} \rangle_\omega^\beta, \quad (7.127)$$

$$\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta \right) = 0, \quad (7.128)$$

$$-\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \langle p_\beta \rangle_\omega^\beta - \langle p_\beta \rangle_\eta^\beta \right) + \mu_\beta \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left( \varepsilon_{\beta\omega}^{-1} \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega - \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\eta \right) = \frac{\mu_\beta}{a_{vs}} \mathbf{K}^{-1} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\omega. \quad (7.129)$$

---

Con esto se termina el análisis. No sin antes enfatizar que, a pesar que la estructura, en estado estacionario, de la condición de salto (7.127) es similar a la obtenida en el Capítulo 2, existen diferencias significativas. Como son: el coeficiente de dispersión total  $\mathbf{D}_\beta(\mathbf{x}_\omega)$ , incluye los efectos tanto difusivos como convectivos; además el coeficiente efectivo de reacción se obtiene mediante la solución del *Problema I*, el cual depende del campo de velocidad local. Estas diferencias dejarán de ser significativas sólo en el caso en que los efectos convectivos sean despreciables respecto a los difusivos (es decir, cuando el número de Péclet sea mucho menor que la unidad).

Para finalizar este capítulo, es oportuno comentar que este tipo de análisis puede extenderse a casos más complicados como son, el transporte de masa en un sistema de tres fases, o bien para el fenómeno de transferencia de calor en la inter-región medio poroso-fluido. El análisis de estos y otros sistemas, así como la solución del *Problema I*, se llevarán a cabo en investigaciones futuras.

---

## Conclusiones

En este trabajo, se desarrolló una metodología que permite obtener condiciones de salto en la frontera entre sistemas multifásicos. Se estudiaron los casos de transferencia difusiva y convectiva de masa en la frontera medio poroso-fluido, así como al fenómeno de transferencia de cantidad de movimiento en el sistema estudiado por Beavers y Joseph (1967).

La metodología propuesta es el resultado de combinar los trabajos de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a) y Wood y col. (2000). Los pasos más importantes que conforman esta metodología son los siguientes:

- i) Obtener las ecuaciones de medio efectivo en las regiones homogéneas del sistema junto con la ecuación de transporte generalizada, por medio de un suavizado espacial de las ecuaciones puntuales.
- ii) Definir propiedades de exceso a partir de la resta de las ecuaciones de medio efectivo y de transporte generalizada, previamente integradas en  $V_\infty$ .
- iii) Determinar la relación entre las propiedades de exceso y las locales, en este paso se suelen involucrar las condiciones de frontera puntuales.
- iv) A partir de descomposiciones espaciales de las propiedades puntuales y de la solución de los problemas de valor a la frontera asociados, expresar la condición de salto en términos de coeficientes efectivos de transporte y de propiedades asociadas con las regiones homogéneas.

El contar con esta metodología permite plantear, usando el método del promedio volumétrico, problemas macroscópicos completos de valor a la frontera. En otras palabras, se puede disponer ahora tanto de ecuaciones diferenciales como de condiciones de frontera cerradas.

---

Por otro lado, en cada capítulo se incluye una sección para conclusiones y discusión de resultados, sin embargo, resulta conveniente retomar aquí las conclusiones a las que se llegó en este trabajo,

- En el caso de la transferencia de masa difusiva con reacción de primer orden, se encontró un coeficiente efectivo de reacción (Capítulo 2), el cual se calculó numéricamente para cuatro modelos de celda unitaria, determinando su dependencia con la porosidad y un módulo de Thiele local (Capítulo 3).
- Se estudiaron las predicciones de variables macroscópicas que ofrecen las ecuaciones de transporte generalizada y de medio efectivo involucrando el uso de condiciones de salto para el caso de difusión pasiva en estado transitorio entre un medio poroso y un fluido (Capítulo 4). Los resultados muestran, en general, un comportamiento similar, en el caso de los perfiles de concentración y flux en la frontera. Las diferencias entre estos resultados y los obtenidos con un modelos heurístico fueron presentadas.
- Para el fenómeno de transferencia de cantidad de movimiento, en el sistema estudiado por Beavers y Joseph (1967), se propuso una modificación a la condición de salto propuesta por Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a). La cual consiste en introducir un tensor mixto de esfuerzos como el responsable de la discontinuidad del gradiente de velocidad, con esto se evita el uso de coeficientes ajustables (Capítulo 5). Posteriormente, se plantea el problema de las variables de cerradura que se debe resolver para estimar la componente tangencial del tensor de esfuerzos (Capítulo 6). Como primera aproximación, se extrapolaron los modelos de Carman-Kozeny y Larson-Higdon a la inter-región. Esto permitió comparar los resultados con los de Goyeau y col. (2003), obteniendo resultados similares para algunos de los materiales usados por

---

Beavers y Joseph (1967). De esta comparación, se comprobó además que el orden de magnitud del coeficiente de salto es de la unidad.

- En el caso de la transferencia convectiva de masa en la frontera medio poroso-fluido (considerando además los fenómenos de adsorción y reacción) la metodología aquí propuesta permitió obtener una condición de salto en términos de coeficientes efectivos de reacción y adsorción. Estos coeficientes se pueden calcular mediante la solución del problema de cerradura planteado en el Capítulo 7. El cual, se reduce, en el caso plenamente difusivo al problema resuelto en el Capítulo 3.

Con los resultados obtenidos, es posible extender la aplicación de la metodología a otro tipo de sistemas como son, el flujo de fluidos en microcanales, sistemas microelectrónicos, transporte de masa y cantidad de movimiento en biopelículas, columnas cromatográficas, sistemas de tres fases, entre otras. Esto se llevará a cabo en trabajos futuros.

---

## Bibliografía

- Alazmi, B., Vafai, K., 2001. "Analysis of fluid flow and heat transfer interfacial conditions between a porous medium and a fluid layer" *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 44, 1735-1749.
- Anderson, T.B.; Jackson, R., 1967. "A fluid mechanical description of fluidized beds" *Industrial and Engineering Fundamentals*, Vol. 6, No.4, 527-539.
- Aris, R. 1975. *The Mathematical Theory of Diffusion and Reaction in Permeable Catalysts*; Clarendon Press: Oxford; Vol. 1.
- Arquis, E., Caltagirone, J.P., 1984. "Sur les conditions hydrodynamiques au voisinage d'une interface milieu fluide milieu poreux : application à la convection naturelle" *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences Série II b*, Vol. 299, 1-4.
- Barrère, J., Gipouloux, O., Whitaker, S. 1992. "On the closure problem for Darcy's law" *Transport in Porous Media*, Vol. 7, 209-222.
- Bear, J. 1972. *Dynamics of fluids in porous media*. Elsevier, New York.
- Beavers, G.S., Joseph, D.D., 1967. "Boundary conditions at a naturally permeable wall" *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 30, part 1, 197-207.
- Beckermann, C., Ramadhyani, S., Viskanta, R., 1987. "Natural convection flow and heat transfer between a fluid and a porous layer inside a rectangular enclosure" *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 109, 363-370.
- Beckermann, C., Viskanta, R., Ramadhyani, S., 1988. "Natural convection in vertical enclosures containing simultaneously fluid and porous layers" *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 186, 257-284.
- Bhattacharyya, A., Sekhar, G.P.R., 2005. "Stokes flow inside a porous spherical shell: Stress jump boundary condition" *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik*, Vol. 56, 475-496.

- 
- Bletzacker, L.; Prat, M.; Quintard, M. 2003., “Transport réactif en milieux poreux: surface effective” *16ème Congrès Français de Mécanique*.
- Brusseau, M.L., Larsen, T., Christensen, T.H., 1991. “Rate-limited sorption and non-equilibrium transport of organic chemicals in low organic carbon aquifer materials” *Water Resources Research*, Vol. 27 1137-1145.
- Carman, P.C., 1937. “The determination of the specific surface area of powder I” *Journal of the Society of Chemical Industry*, Vol. 57, 225-234.
- Chang, H.C., 1982. “Multi-scale analysis of effective transport in periodic heterogeneous media” *Chemical Engineering Communications*, Vol. 15, 83-91.
- Chang, H.C., 1983, “Effective diffusion and conduction in two-phase media: a unified approach” *AIChE Journal*, Vol. 29, No. 5, 846-852.
- Coppens, M.O. (1999). “The effect of fractal surface roughness on diffusion and reaction in porous catalysts – from fundamentals to practical applications” *Catalysis Today*, Vol. 53, 225-243.
- Crapiste, G.H., Rotstein, E., Whitaker, S., 1986. “A general closure scheme for the method of volume averaging” *Chemical Engineering Science*, Vol. 41, No. 2, 227-235.
- Cunningham, R.S., Geankoplis, C.J., 1968. “Effects of different structures of porous solids on diffusion of gases in the transition region” *Industrial Engineering Fundamentals*, Vol. 7, No. 4, 535-542.
- Dalvie, S.K., Gajiwala, K.S., Baltus, R.E., 1990. “Mathematical model of a rotating annular continuous size exclusion chromatograph” *American Chemical Society Symposium Series*, Chap. 14, 268-284.
- Deemer, A.R., Slattery, J.C., 1978. “Balance equations and structural models for phase interfaces” *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 4, 171-192.

- 
- Deng, C., Martinez, D.M., 2005. "Viscous flow in a channel partially filled with a porous medium and with wall suction" *Chemical Engineering Science*, Vol. 60, 329-336.
- DeVault, D., 1943. "The theory of chromatography" *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 65, 532-540.
- Dullien, F. A. L., 1979, *Porous media: Fluid transport and pore structure*. Academic press.
- Eidsath, A.B., Carbonell, R.G., Whitaker, S., Herrmann, L.R., 1983, "Dispersion in pulsed systems III: Comparison between theory and experiments for packed beds" *Chemical Engineering Science*, Vol. 38, 1803-1816.
- Fletcher, C.A.J., 1991. *Computational Techniques for Fluid Dynamics*, second edition, Vols. 1 and 2, Springer-Verlag.
- Gibbs, J.W., 1928. *The Collected works of J. Willard Gibbs*, vol. 1, Yale University Press, New Haven, CT.
- Givler, R.C., Altobelli, S.A., 1994. "A determination of the effective viscosity for the Brinkman-Forchheimer flow model" *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 258, 355-370.
- Gobin, D., Goyeau, B., Songbe, J.-P., 1998. "Double diffusive natural convection in a composite fluid-porous layer" *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 120, 234-242.
- Goto, M., McCoy, B.J. 2000. "Inverse size-exclusion chromatography for distributed pore and solute sizes" *Chemical Engineering Science*, Vol. 55 723-732.
- Goyeau, B., Lhuillier, D., Gobin, D., Velarde, M.G., 2003. "Momentum transport at a fluid-porous interface" *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 46, 4071-4081.

- 
- Goyeau, B., Ochoa-Tapia, J.A., 2004. "Sobre la condición de salto de transferencia de masa entre un fluido y un medio poroso" *Memorias del XXV Encuentro nacional de la AMIDIQ*.
- Goharzadeh, A., Saidi, A., Khalili, A., 2005. "Small scale measurement and theoretical characterization of the flow at a flat and wavy water-sediment interface" *Geophysical Research Abstracts*, Vol. 7, 08002.
- Gray, W.G., 1975. "A derivation of the equations for multiphase transport" *Chemical Engineering Science*, Vol. 30, 229-233.
- Haber, S., Mauri, R., 1983. "Boundary conditions for Darcy's flow through porous media" *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 9, No. 5, 561-574.
- Hager, J., Whitaker, S., 2000. "Vapor-liquid jump condition within a porous medium: results for mass and energy" *Transport in Porous Media*, Vol. 40, 73-111.
- Happel, J., Brenner, H., 1991. *Low Reynolds number hydrodynamics*. Kluwer academic publishers.
- Howes, F.A., Whitaker, S., 1985. "The spatial averaging theorem revisited" *Chemical Engineering Science*, Vol. 40, No. 8, 1387-1392.
- Jones, I.P., 1973. "Low Reynolds number flow past a porous spherical shell" *Proceedings of Cambridge Philosophical Society*, Vol. 73, 231-238.
- Kakac, S., Vasiliev, L. L., Yener, Y., 2005. *Microscale heat transfer. Fundamentals and applications*, Springer, New York.
- Karniadakis, G.E., Beskok, A., 2005. *Microflows and Nanoflows: fundamentals and simulation*. Springer, New York.
- Kaviany, M., 1999. *Principles of heat transfer in porous media*, 2<sup>nd</sup> edition, Springer-New York.
- Kim, J.H., Ochoa-Tapia, J.A., Whitaker, S., 1987. "Diffusion in anisotropic porous media" *Transport in Porous Media*, Vol. 2, 327-356.

- 
- Kolodziej, J. A., 1988. "Influence of the porosity of a porous medium on the effective viscosity in Brinkman's filtration equation" *Acta Mechanica*, Vol. 75 678-689.
- Kuznetsov, A.V., 1996. "Analytical investigation of the fluid flow in the interface region between a porous medium and a clear fluid in channels partially filled with a porous medium" *Applied Scientific Research*, Vol. 56, 53-67.
- Kuznetsov, A.V., 1997. "Influence of the stress jump condition at the porous-medium/clear-fluid interface on a flow at a porous wall" *International Communications of Heat and Mass Transfer*, Vol. 24, No. 3, 401-410.
- Lichtner, P.C., Tartakovsky, D.M., 2003. "Stochastic analysis of effective rate constant for heterogeneous reactions" *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, Vol. 17, 419-429.
- Marle, C.M., 1967. "Écoulements monophasiques en milieu poreux" *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, Vol. 22, No. 10, 1471-1509.
- Martys, N., Bentz, D.P., Garboczi, E.J., (1994). "Computer simulation study of the effective viscosity in Brinkman's equation" *Physics of Fluids*, Vol. 6 1434-1439.
- Min, Y.J., Kim, S.J., 2005. "A novel methodology for thermal analysis of a composite system consisting of a porous medium and an adjacent fluid layer" *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 127, 648-656.
- Nakamura, S., 1992, *Métodos numéricos aplicados con software*, Pearson.
- Neale, G., Nader, W., 1974. "Practical significance of Brinkman's extension of Darcy's law: Coupled parallel flows within a channel and a bounding porous medium" *Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol. 52, 475-478.
- Ochoa-Tapia, J.A., Del Río, J.A., Whitaker, S., 1993. "Bulk and surface diffusion in porous media: an application of the surface-averaging theorem" *Chemical Engineering Science*, Vol. 48, No. 11, 2061-2082.

- 
- Ochoa-Tapia, J.A., 1994. "Un estudio comparativo de dos modelos para el transporte de momentum entre un fluido y un medio poroso" *Avances en Ingeniería Química*, 101-106.
- Ochoa-Tapia J.A., Whitaker, S., 1995a. "Momentum transfer at the boundary between a porous medium and a homogeneous fluid-I. Theoretical development" *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 38, No. 14, 2635-2646.
- Ochoa-Tapia, J.A., Whitaker, S., 1995b. "Momentum transfer at the boundary between a porous medium and a homogeneous fluid-II. Comparison with experiment" *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 38, No. 14, 2647-2655.
- Ochoa-Tapia, J.A., Soria, A., 1995. "Emulsiones dobles: condiciones de salto para el transporte de masa entre la región membrana y la región externa" *Avances en Ingeniería Química*, Vol. 5, No. 1, 37-42.
- Ochoa-Tapia, J.A., Whitaker, S. 1997. "Heat transfer at the boundary between a porous medium and a homogeneous fluid" *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 40, No. 11, 2691-2707.
- Ochoa-Tapia, J.A., Whitaker, S. 1998. "Heat transfer at the boundary between a porous medium and a homogeneous fluid. The one-equation model" *Journal of Porous Media*, Vol. 1, 31-46.
- Ochoa-Tapia, J.A., Whitaker, S. 1998. "Momentum jump condition at the boundary between a porous medium and a homogeneous fluid: Inertial effects" *Journal of Porous Media*, Vol. 1, No. 3, 201-217.
- Partha, M.K., Murthy, P.S.V.N., Sekhar, R. 2005. "Viscous flow past a porous spherical shell-effect of stress jump boundary condition" *Journal of Engineering Mechanics*, Vol. 131, No. 12, 1291-1301.

- 
- Pérez-Córdova, H., 1995. "Cálculo de variables y propiedades promedio en la interregión entre un fluido y un medio poroso" Tesis de maestría, Instituto Tecnológico de Celaya.
- Pérez-Córdova, H., Ochoa-Tapia, J.A., 1995. "Cálculo de variables y propiedades promedio en la región entre un fluido y un medio poroso a partir de valores puntuales" *Avances en Ingeniería Química*, Vol. 5, 43-49.
- Pickens, J.F., Grisak, G.E., 1981. "Scale-dependent dispersion in stratified granular aquifer" *Water Resources Research*, Vol. 17, 1191-1211.
- Prat, M., 1989. "On the boundary conditions at the macroscopic level" *Transport in Porous Media*. Vol. 4, 259-280.
- Prat, M., 1990. "Modeling of heat transfer by conduction in a transition region between a porous medium and an external fluid" *Transport in Porous Media*, Vol. 5, 71-95
- Prat, M., 1992. "Some refinements concerning the boundary conditions at the macroscopic level" *Transport in Porous Media*, Vol. 7, 147-161.
- Quintard, M., Whitaker, S., 1994. "Transport in ordered and disordered porous media II: Generalized volume averaging" *Transport in Porous Media*, Vol. 14, 179-206.
- Raghavan, N.S., Ruthven, D.M., 1985. "Simulation of chromatographic response in columns packed with bidisperse structured particles" *Chemical Engineering Science* Vol. 40 699-706.
- Reis, J.F.G., Lightfoot, E.N., Noble, P.T., Chiang, A.S., 1979. "Chromatography in a bed of spheres" *Separation Science and Technology* Vol. 14, 367-394.
- Richardson, S., 1971. "A model for the boundary condition of a porous material. Part 2" *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 49, 327-336.
- Ross, S.M., 1983. "Theoretical model of the boundary condition at a fluid-porous interface" *AIChE Journal*, Vol. 29, No. 5, 840-846.

- 
- Ryan, D., Carbonell, R.G., Whitaker, S., 1981. "A theory of diffusion and reaction in porous media" *AIChE Symposium Series* #202, Vol. 71, 46-62.
- Saffman, P.G., 1971. "On the boundary condition at the surface of a porous medium" *MIT*, Vol. 1, No. 2, 93-101.
- Sahraoui, M., Kaviany, M., 1992. "Slip and no-slip velocity boundary conditions at the interface of porous, plain media" *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 35, 927-943.
- Sahraoui, M., Kaviany, M., 1993. "Slip and no-slip temperature boundary conditions at the interface of porous plain media: conduction" *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 36, 1019-1033.
- Sahraoui, M., Kaviany, M., 1994. "Slip and no-slip temperature boundary conditions at the interface of porous plain media: convection" *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 37, 1029-1044.
- Scheidegger, A.E., 1974. *The physics of flow through porous media*. 3<sup>rd</sup> edition. Univ. of Toronto Press, Toronto.
- Slattery, J.C., 1967. "Flow of viscoelastic fluids through porous media" *AIChE Journal*, Vol. 13, 1066-1071.
- Slattery, J.C., 1980. "Interfacial transport phenomena", *Chemical Engineering Communications*, Vol. 4, 149-166.
- Slattery, J.C., Sagis, L., Oh, E.-S., 2007. *Interfacial transport phenomena*. 2<sup>nd</sup> edition. Springer-Verlag.
- Soria-López, A., Whitaker, S., Ochoa-Tapia, J.A., 1997. "The mass transfer jump condition at the boundary between the liquid membrane and the external regions of double emulsion systems" *ECCE 1*, May 4-7, Florence Italy.
- Sparrow, E.M., Loeffler, A.L., 1959. "Longitudinal laminar flow between cylinders arranged in regular array" *AIChE Journal*, Vol. 20, 974-980.

- 
- Srivastava, A.C., 1999. "Flow in a porous medium induced by torsional oscillation of a disk near its surface" *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik*, Vol. 50, 529-545.
- Starov V.M.; Zhdanov V.G. (2001). "Effective viscosity and permeability of porous media" *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, Vol. 192, 363-375.
- Stone, H.A., 1990. "A simple derivation of the time-dependent convective-diffusion equation for surfactant transport along a deforming interface" *Physics of Fluids*, A2, 111-112.
- Taylor, G.I., 1971. "A model for the boundary condition of a porous material. Part 1". *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 49, 319-326.
- Valencia-López, J.J., Espinosa-Paredes, G., Ochoa-Tapia, J.A., 2003. "Mass transfer jump condition at the boundary between a porous medium and a homogeneous fluid" *Journal of Porous Media*, Vol. 6, No. 1, 33-49.
- Wakao, N., Smith, J.M., 1964. "Diffusion and reaction in porous catalysts". *Industrial and Engineering Fundamentals*, Vol. 3, No. 2, 123-127.
- Whitaker, S., 1967. "Diffusion and dispersion in porous media". *AIChE Journal*, Vol. 13, 420-427.
- Whitaker, S., 1969. "Advances in Theory of Fluid Motion in Porous Media" *Industrial and Engineering Chemistry*, Vol. 61, No. 12, 14-28.
- Whitaker, S., 1983. "Diffusion and reaction in a micropore-macropore model of a porous medium" *Latin American Journal of Chemical Engineering and Applied Chemistry*, Vol. 13, 143-183.
- Whitaker, S., 1986. "Transient diffusion, adsorption and reaction in porous catalysts: The reaction controlled, quasi-steady catalytic surface" *Chemical Engineering Science*, Vol. 41, No. 12, 3015-3022.

---

Whitaker, S., 1991. "Improved constraints for the principle of local thermal equilibrium" *Industrial and Engineering Chemistry*, Vol. 30, 983-997.

Whitaker, S. 1992. "The species mass jump condition at a singular surface" *Chemical Engineering Science*, Vol. 47, No. 7, 1677-1685.

Whitaker S., 1999. *The method of volume averaging*, Kluwer academic publishers.

Wood B.D., Quintard M., Whitaker S. 2000. "Jump condition at non-uniform boundaries: the catalytic surface" *Chemical Engineering Science*, Vol. 55, 5231-5245.

---

## Apéndice A-1:

### Prueba de simetría y antisimetría de los problemas de cerradura

#### A-1.1. Problema bidimensional para la inter-región.

El problema de la variable de cerradura  $s_\gamma$ , escrito en coordenadas cartesianas en un dominio bidimensional, es

*Problema I*

$$\frac{\partial^2 s_\gamma}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 s_\gamma}{\partial y^2} = -\frac{a_v(y)k}{\mathcal{D}_\gamma \varepsilon_\gamma(y)}, \text{ en la fase fluida,} \quad (\text{A-1.1})$$

$$\text{C.F. 1} \quad \frac{\partial s_\gamma}{\partial x} = \frac{k}{\mathcal{D}_\gamma}, \text{ en } x = \frac{1}{2}a; \quad y_1(k) \leq y \leq y_2(k), \quad k = 1, \dots, nc, \quad (\text{A-1.2})$$

$$-\frac{\partial s_\gamma}{\partial x} = \frac{k}{\mathcal{D}_\gamma}, \text{ en } x = -\frac{1}{2}a; \quad y_1(k) \leq y \leq y_2(k), \quad k = 1, \dots, nc, \quad (\text{A-1.3})$$

$$\frac{\partial s_\gamma}{\partial y} = \frac{k}{\mathcal{D}_\gamma}, \text{ en } y = y_2(k), \quad -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}, \quad k = 1, \dots, nc, \quad (\text{A-1.4})$$

$$-\frac{\partial s_\gamma}{\partial y} = \frac{k}{\mathcal{D}_\gamma}, \text{ en } y = y_1(k), \quad -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}, \quad k = 1, \dots, nc, \quad (\text{A-1.5})$$

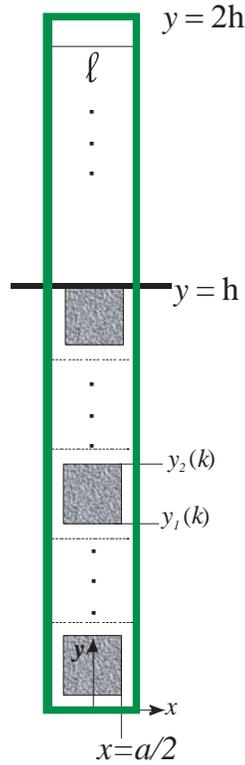
$$\text{C.F.2} \quad s_\gamma = 0, \text{ en } y = 2h, \quad (\text{A-1.6})$$

$$\text{C.F.3} \quad \frac{\partial s_\gamma}{\partial y} = 0, \text{ en } y = 0, \quad (\text{A-1.7})$$

$$\text{Periodicidad:} \quad s_\gamma(\mathbf{r} + \zeta_i) = s_\gamma(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (\text{A-1.8})$$

Las condiciones de frontera están referidas a la posición de los ejes de acuerdo a la Figura A-1.1 y  $nc$  denota el número de cuadrados contenidos en la celda unitaria. Como se puede notar, se tienen suficientes condiciones de frontera en las dos direcciones, sin embargo, para  $x = \pm \ell/2$  debe usarse la condición de periodicidad. La implementación

de este tipo de condiciones de frontera puede resultar poco conveniente en un esquema numérico. Por ello, para analizar la posibilidad de modificar estas últimas condiciones de frontera por otras de tipo Dirichlet o Neumann, se lleva a cabo un análisis de simetría o antisimetría alrededor de  $x=0$ . Para esto, conviene escribir el *Problema I* para las variables  $\bar{s}_\gamma$ ,  $\bar{x}$  y  $\bar{y}$  como sigue



**Figura A-1.1:** Celda unitaria para la inter-región.

*Problema  $\bar{I}$*

$$\frac{\partial^2 \bar{s}_\gamma}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{s}_\gamma}{\partial \bar{y}^2} = -\frac{a_v(\bar{y})k}{\mathcal{D}_\gamma \varepsilon_\gamma(\bar{y})}, \text{ en la fase fluida,} \quad (\text{A-1.9})$$

$$\text{C.F. 1} \quad \frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial \bar{x}} = \frac{k}{\mathcal{D}_\gamma}, \text{ en } \bar{x} = \frac{1}{2}a; \bar{y}_1(k) \leq \bar{y} \leq \bar{y}_2(k), k=1, \dots, nc, \quad (\text{A-1.10})$$

$$-\frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial \bar{x}} = \frac{k}{\mathcal{D}_\gamma}, \text{ en } \bar{x} = -\frac{1}{2}a; \bar{y}_1(k) \leq \bar{y} \leq \bar{y}_2(k), k=1, \dots, nc, \quad (\text{A-1.11})$$

$$\frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial \bar{y}} = \frac{k}{\mathcal{D}_\gamma}, \text{ en } \bar{y} = \bar{y}_2(k), \quad -\frac{a}{2} \leq \bar{x} \leq \frac{a}{2}, \quad k=1, \dots, nc, \quad (\text{A-1.12})$$

$$-\frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial \bar{y}} = \frac{k}{\mathcal{D}_\gamma}, \text{ en } \bar{y} = \bar{y}_1(k), \quad -\frac{a}{2} \leq \bar{x} \leq \frac{a}{2}, \quad k=1, \dots, nc, \quad (\text{A-1.13})$$

$$\text{C.F.2} \quad \bar{s}_\gamma = 0, \text{ en } \bar{y} = 2h, \quad (\text{A-1.14})$$

$$\text{C.F.3} \quad \frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial \bar{y}} = 0, \text{ en } \bar{y} = 0, \quad (\text{A-1.15})$$

$$\text{Periodicidad:} \quad \bar{s}_\gamma(\mathbf{r} + \ell_i) = \bar{s}_\gamma(\mathbf{r}), \quad i=1, 2. \quad (\text{A-1.16})$$

Al hacer ahora los siguientes cambios de variables en el problema anterior,

$$\bar{x} \rightarrow -x, \quad (\text{A-1.17})$$

$$\bar{y} \rightarrow y, \quad (\text{A-1.18})$$

se obtiene,

$$\frac{\partial^2 \bar{s}_\gamma}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{s}_\gamma}{\partial y^2} = -\frac{a_\nu(y)k}{\mathcal{D}_\gamma \varepsilon_\gamma(y)}, \text{ en la fase fluida,} \quad (\text{A-1.19})$$

$$\text{C.F. 1} \quad -\frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial x} = \frac{k}{\mathcal{D}_\gamma}, \text{ en } x = -\frac{1}{2}a; \quad y_1(k) \leq y \leq y_2(k), \quad k=1, \dots, nc, \quad (\text{A-1.20})$$

$$\frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial x} = \frac{k}{\mathcal{D}_\gamma}, \text{ en } x = \frac{1}{2}a; \quad y_1(k) \leq y \leq y_2(k), \quad k=1, \dots, nc, \quad (\text{A-1.21})$$

$$\frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial y} = \frac{k}{\mathcal{D}_\gamma}, \text{ en } y = y_2(k), \quad -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}, \quad k=1, \dots, nc, \quad (\text{A-1.22})$$

$$-\frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial y} = \frac{k}{\mathcal{D}_\gamma}, \text{ en } y = y_1(k), \quad -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}, \quad k=1, \dots, nc, \quad (\text{A-1.23})$$

$$\text{C.F.2} \quad \bar{s}_\gamma = 0, \text{ en } y = 2h, \quad (\text{A-1.24})$$

$$\text{C.F.3} \quad \frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial y} = 0, \text{ en } y = 0, \quad (\text{A-1.25})$$

$$\text{Periodicidad:} \quad \bar{s}_\gamma(\mathbf{r} + \ell_i) = \bar{s}_\gamma(\mathbf{r}), \quad i=1, 2. \quad (\text{A-1.26})$$

Como se puede notar, para que el problema anterior sea idéntico al *Problema I* basta con hacer el siguiente cambio

$$\bar{s}_\gamma(-x, y) = s_\gamma(x, y). \quad (\text{A-1.27})$$

Por lo que, se puede concluir que  $s_\gamma$  es simétrico alrededor de  $x=0$ , lo cual permite imponer la siguiente condición de frontera

$$\frac{\partial s_\gamma}{\partial x} = 0, \text{ en } x = 0. \quad (\text{A-1.28})$$

Esta condición se puede extender para  $x = \pm \frac{\ell}{2}$  gracias a la condición de periodicidad.

Además, la propiedad de que el campo sea simétrico alrededor de  $x=0$ , permite resolver el problema de cerradura en la mitad de la celda unitaria de la Figura A-1.1. De esta forma, el *Problema I* es ahora

$$\frac{\partial^2 s_\gamma}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 s_\gamma}{\partial y^2} = -\frac{a_v(y)k}{\mathcal{D}_\gamma \varepsilon_\gamma(y)}, \text{ en la fase fluida,} \quad (\text{A-1.29})$$

$$\text{C.F. 1} \quad \frac{\partial s_\gamma}{\partial x} = \frac{k}{\mathcal{D}_\gamma}, \text{ en } x = \frac{1}{2}a; \quad y_1(k) \leq y \leq y_2(k), \quad k = 1, \dots, nc, \quad (\text{A-1.30})$$

$$\frac{\partial s_\gamma}{\partial y} = \frac{k}{\mathcal{D}_\gamma}, \text{ en } y = y_2(k), \quad -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}, \quad k = 1, \dots, nc, \quad (\text{A-1.31})$$

$$-\frac{\partial s_\gamma}{\partial y} = \frac{k}{\mathcal{D}_\gamma}, \text{ en } y = y_1(k), \quad -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}, \quad k = 1, \dots, nc, \quad (\text{A-1.32})$$

$$\text{C.F.2} \quad s_\gamma = 0, \text{ en } y = 2h, \quad (\text{A-1.33})$$

$$\text{C.F.3} \quad \frac{\partial s_\gamma}{\partial y} = 0, \text{ en } y = 0, \quad (\text{A-1.34})$$

$$\text{C.F.4} \quad \frac{\partial s_\gamma}{\partial x} = 0, \text{ en } x = 0, \quad (\text{A-1.35})$$

$$\text{C.F.5} \quad \frac{\partial s_\gamma}{\partial x} = 0, \text{ en } x = \frac{\ell}{2}. \quad (\text{A-1.36})$$

Para concluir este apéndice, se muestra a continuación la forma adimensional de este problema de valor a la frontera.

### A-1.2. Problema de cerradura adimensional.

Para escribir el problema de la variable de cerradura en forma adimensional, se definen las siguientes variables y parámetros adimensionales,

$$X = \frac{x}{\ell}, \quad Y = \frac{y}{\ell}, \quad H = \frac{h}{\ell}, \quad A = \frac{a}{\ell}, \quad a_{v\omega} = \frac{A_{\gamma\kappa}}{\mathcal{V}} = \frac{4a}{\ell^2},$$

$$K_1 = \frac{k}{\langle k \rangle_{\eta\omega}}, \quad \tilde{K}_1 = \frac{\tilde{k}}{\langle \tilde{k} \rangle_{\eta\omega}}, \quad \phi^2 = \frac{\langle k \rangle_{\eta\omega} a_{v\omega} \ell^2}{\mathcal{D}_\gamma}. \quad (\text{A-1.37})$$

Por otro lado, los cambios espaciales de la porosidad y el área interfacial serán descritos por medio de las siguientes expresiones propuestas por Pérez Córdova y Ochoa-Tapia (1995)

$$\frac{a_v(y)}{a_{v\omega}} = 1 + \frac{1}{4} \left( \frac{Y}{20A} \right)^2 \left[ \left( \frac{Y}{20A} \right) - 3 \right] = f_1(Y), \quad 0 \leq Y \leq 40A, \quad (\text{A-1.38})$$

$$\varepsilon_\gamma(y) = \varepsilon_{\gamma\omega} + \frac{1}{4} (\varepsilon_{\gamma\omega} - 1) \left( \frac{Y}{20A} \right)^2 \left[ \left( \frac{Y}{20A} \right) - 3 \right] = f_2(Y), \quad 0 \leq Y \leq 40A. \quad (\text{A-1.39})$$

Por lo que, el problema de cerradura se puede escribir acorde con la Figura A-1.2, como

$$\frac{\partial^2 s_\gamma}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 s_\gamma}{\partial Y^2} = - \frac{f_1(Y) K_1}{f_2(Y)} \phi^2, \quad \text{en la fase fluida}, \quad (\text{A-1.40})$$

$$\text{C.F.1} \quad \frac{\partial s_\gamma}{\partial X} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \quad \text{en } X = \frac{A}{2}, \quad Y_1(k) \leq Y \leq Y_2(k), \quad (\text{A-1.41})$$

$$\frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \quad \text{en } Y = Y_2(k), \quad 0 \leq X \leq \frac{A}{2}, \quad (\text{A-1.42})$$

$$-\frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \quad \text{en } Y = Y_1(k), \quad 0 \leq X \leq \frac{A}{2}, \quad (\text{A-1.43})$$

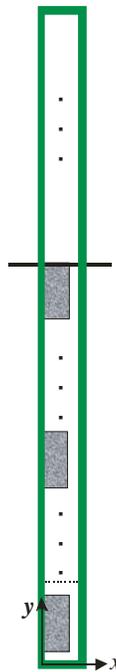
---


$$\text{C.F.2} \quad s_\gamma = 0, \text{ en } Y = 2H, 0 \leq X \leq \frac{1}{2}, \quad (\text{A-1.44})$$

$$\text{C.F.3} \quad \frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} = 0, \text{ en } Y = 0, 0 \leq X \leq \frac{1}{2}, \quad (\text{A-1.45})$$

$$\text{C.F.4} \quad \frac{\partial s_\gamma}{\partial X} = 0, \text{ en } X = 0, Y_2(k-1) < Y \leq Y_1(k), Y_2(nc) \leq Y \leq 2H; \quad (\text{A-1.46})$$

$$\text{C.F.5} \quad \frac{\partial s_\gamma}{\partial X} = 0, \text{ en } X = \frac{1}{2}, 0 \leq Y \leq 2H. \quad (\text{A-1.47})$$



**Figura A-1.2:** Celda unitaria simplificada para el problema de cerradura en la inter-región.

---

## Apéndice A-2:

### Solución numérica del problema de cerradura

#### A-2.1.- Planteamiento del problema.

Es conveniente comenzar el análisis con el planteamiento adimensional del problema de cerradura del Apéndice A-1, referido a un dominio discreto

$$\left. \frac{\partial^2 s_\gamma}{\partial X^2} \right|_{i,j} + \left. \frac{\partial^2 s_\gamma}{\partial Y^2} \right|_{i,j} = - \frac{f_1(Y_{NX/2}) K_1}{f_2(Y_{NX/2})} \phi^2, \text{ en la fase fluida,} \quad (\text{A-2.1})$$

$$\text{C.F.1} \quad \left. \frac{\partial s_\gamma}{\partial X} \right|_{MX,j} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } i = MX, OY(k) \leq j \leq MY(k), k = 1, \dots, nc, \quad (\text{A-2.2})$$

$$\left. \frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} \right|_{i,j} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } j = MY(nc), 1 \leq i \leq MX, \quad (\text{A-2.3})$$

$$-\left. \frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} \right|_{i,j} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } j = OY(k), 1 \leq i \leq MX, \quad (\text{A-2.4})$$

$$\text{C.F.2} \quad s_\gamma \Big|_{i,NY} = 0, \text{ en } j = NY, 1 \leq i \leq NX, \quad (\text{A-2.5})$$

$$\text{C.F.3} \quad \left. \frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} \right|_{i,1} = 0, \text{ en } j = 1, 1 \leq i \leq NX, \quad (\text{A-2.6})$$

$$\text{C.F.4} \quad \left. \frac{\partial s_\gamma}{\partial X} \right|_{i,j} = 0, \text{ en } i = 1, MY(k-1) \leq j \leq OY(k), MY(nc) \leq j \leq NY; \quad (\text{A-2.7})$$

$$\text{C.F.5} \quad \left. \frac{\partial s_\gamma}{\partial X} \right|_{i,j} = 0, \text{ en } i = NX, 1 \leq j \leq NY, \quad (\text{A-2.8})$$

donde se hicieron las siguientes equivalencias,

$$X = 0 \equiv i = 1; X = \frac{A}{2} \equiv i = MX; X = \frac{1}{2} \equiv i = NX, \quad (\text{A-2.9})$$

$$Y = 0 \equiv j = MY(0) = 1; Y_2(k) = (k-1) + \frac{1+A}{2} \equiv j = MY(k); k = 1, \dots, nc;$$

$$Y_1(k) = (k-1) + \frac{1-A}{2} \equiv j = OY(k); k = 1, \dots, nc;$$

$$Y = H \equiv j = MY(nc), Y = 2H \equiv j = NY. \quad (A-2.10)$$

### A-2.2.- Discretización de las ecuaciones diferenciales.

Para resolver el problema se usará el método de diferencias finitas con inversión línea por línea, realizando el barrido en la dirección  $Y$ . Para ello, es necesario discretizar la ecuación válida en la fase fluida y las condiciones de frontera. La ecuación (A-2.1) se puede escribir, en un dominio discreto  $i, j$ ; como,

$$s_\gamma|_{i-1,j} - 2(1+r)s_\gamma|_{i,j} + s_\gamma|_{i+1,j} = -\frac{f_1(Y_{NX/2})K_1}{f_2(Y_{NX/2})}(\Delta X)^2 \phi^2 - r(s_\gamma|_{i,j-1} + s_\gamma|_{i,j+1}), \quad (A-2.11)$$

donde,

$$r = \left( \frac{\Delta X}{\Delta Y} \right)^2. \quad (A-2.12)$$

La ecuación (A-2.11) puede expresarse en forma tridiagonal como,

$$A_i s_\gamma|_{i-1,j} + B_i s_\gamma|_{i,j} + C_i s_\gamma|_{i+1,j} = D_i, \quad (A-2.13)$$

donde,

$$A_i = 1, B_i = -2(1+r), C_i = 1, D_i = -\frac{f_1(Y_{NX/2})K_1}{f_2(Y_{NX/2})}(\Delta X)^2 \phi^2 - r(s_\gamma|_{i,j-1} + s_\gamma|_{i,j+1}). \quad (A-2.14)$$

Para discretizar las condiciones de frontera se usarán diferencias hacia delante o hacia atrás según convenga.

A continuación se describe el esquema numérico para resolver el problema, para una celda unitaria que contenga un número  $nc$  de cuadrados internos.

### A-2.3.- Esquema numérico.

La dirección del barrido se es de arriba hacia abajo, como se indica en la Figura A-2.1; de esta forma se puede notar que se comienza por fijar en  $j = NY$

$$s_\gamma \Big|_{i,NY} = 0, \text{ para } 1 \leq i \leq NX. \quad (\text{A-2.15})$$

Posteriormente se barre toda la sección ocupada por el fluido que se encuentra por encima del medio poroso, es decir,  $MY(nc)+1 \leq j \leq NY-1$ , de acuerdo a las posiciones mostradas en la Figura A-2.1.

Para  $i = 1$ , la ecuación correspondiente es

$$A_1 s_\gamma \Big|_{0,j} + B_1 s_\gamma \Big|_{1,j} + C_1 s_\gamma \Big|_{2,j} = D_1, \quad (\text{A-2.16})$$

donde,

$$A_1 = 0, B_1 = -1, C_1 = 1, D_1 = 0. \quad (\text{A-2.17})$$

Mientras que, para  $2 \leq i \leq NX-1$ , se tiene

$$A_i s_\gamma \Big|_{i-1,j} + B_i s_\gamma \Big|_{i,j} + C_i s_\gamma \Big|_{i+1,j} = D_i, \quad (\text{A-2.18})$$

donde,

$$A_i = 1, B_i = -2(1+r), C_i = 1, D_i = -\frac{f_1(Y_{NX/2})K_1}{f_2(Y_{NX/2})}(\Delta X)^2 \phi^2 - r(s_\gamma \Big|_{i,j-1} + s_\gamma \Big|_{i,j+1}). \quad (\text{A-2.19})$$

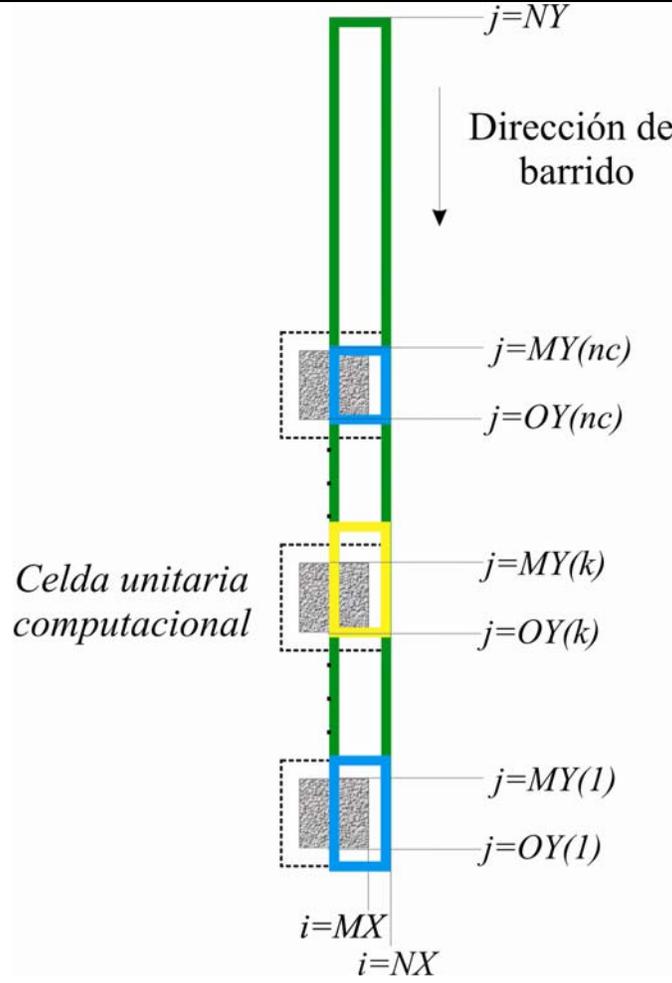
Por último, para  $i = NX$  la ecuación es

$$A_{NX} s_\gamma \Big|_{NX-1,j} + B_{NX} s_\gamma \Big|_{NX,j} + C_{NX} s_\gamma \Big|_{NX+1,j} = D_{NX}, \quad (\text{A-2.20})$$

donde,

$$A_{NX} = -1, B_{NX} = 1, C_{NX} = 0, D_{NX} = 0. \quad (\text{A-2.21})$$

Para resolver las matrices tridiagonales que se generan con este esquema, se utiliza el algoritmo de Thomas (el cual está disponible en monografías como la de Fletcher, Cap. 6, 1991).



**Figura A-2.1:** Celda unitaria en función de puntos discretos.

Como se puede notar, en la Figura A-2.1 se eligió una celda con la que se pueden calcular tantos cuadrados como se desee. La primera parte de la celda barre desde  $MY(k)+1 \leq j \leq OY(k+1)-1$  utilizando las ecuaciones (A-2.16) a (A-2.21).

Posteriormente, se calcula el campo en  $j = OY(k+1)$ ,

Para  $1 \leq i \leq MX$ , la ecuación es

$$A_i s_\gamma \Big|_{i-1, OY(k+1)} + B_i s_\gamma \Big|_{i, OY(k+1)} + C_i s_\gamma \Big|_{i+1, OY(k+1)} = D_i, \quad (\text{A-2.22})$$

donde,

$$A_i = 0, \quad B_i = 1, \quad C_i = 0, \quad D_i = s_\gamma \Big|_{i, OY(k+1)-1} - K_1 \Delta Y \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}. \quad (\text{A-2.23})$$

Mientras que, para  $MX + 1 \leq i \leq NX - 1$  se tiene

$$A_i s_\gamma \Big|_{i-1, OY(k+1)} + B_i s_\gamma \Big|_{i, OY(k+1)} + C_i s_\gamma \Big|_{i+1, OY(k+1)} = D_i, \quad (\text{A-2.24})$$

donde,

$$A_i = 1, \quad B_i = -2(1+r), \quad C_i = 1, \\ D_i = -\frac{f_1(Y_{NX/2})K_1}{f_2(Y_{NX/2})}(\Delta X)^2 \phi^2 - r \left( s_\gamma \Big|_{i, OY(k+1)-1} + s_\gamma \Big|_{i, OY(k+1)+1} \right). \quad (\text{A-2.25})$$

Finalmente, para  $i = NX$  la ecuación es

$$A_{NX} s_\gamma \Big|_{NX-1, OY(k+1)} + B_{NX} s_\gamma \Big|_{NX, OY(k+1)} + C_{NX} s_\gamma \Big|_{NX+1, OY(k+1)} = D_{NX}, \quad (\text{A-2.26})$$

donde,

$$A_{NX} = -1, \quad B_{NX} = 1, \quad C_{NX} = 0, \quad D_{NX} = 0. \quad (\text{A-2.27})$$

A continuación se calcula el campo que rodea al  $k$ -ésimo cuadrado, empezando por  $j = MY(k)$ , de  $1 \leq i \leq MX$ ,

$$A_i s_\gamma \Big|_{i-1, MY(k)} + B_i s_\gamma \Big|_{i, MY(k)} + C_i s_\gamma \Big|_{i+1, MY(k)} = D_i, \quad (\text{A-2.28})$$

donde,

$$A_i = 0, \quad B_i = 1, \quad C_i = 0, \quad D_i = s_\gamma \Big|_{i, MY(k)+1} - \Delta Y K_1 \frac{\phi^2}{a_{\nu\omega}^\ell}. \quad (\text{A-2.29})$$

Mientras que, para  $MX + 1 \leq i \leq NX - 1$ , se tiene

$$A_i s_\gamma \Big|_{i-1, MY(k)} + B_i s_\gamma \Big|_{i, MY(k)} + C_i s_\gamma \Big|_{i+1, MY(k)} = D_i, \quad (\text{A-2.30})$$

donde,

$$A_i = 1, \quad B_i = -2(1+r), \quad C_i = 1, \\ D_i = -\frac{f_1(Y_{NX/2})K_1}{f_2(Y_{NX/2})}(\Delta X)^2 \phi^2 - r \left( s_\gamma \Big|_{i, MY(k)-1} + s_\gamma \Big|_{i, MY(k)+1} \right). \quad (\text{A-2.31})$$

Por último, en  $i = NX$  la ecuación es

$$A_{NX} s_\gamma \Big|_{NX-1, MY(k)} + B_{NX} s_\gamma \Big|_{NX, MY(k)} + C_{NX} s_\gamma \Big|_{NX+1, MY(k)} = D_{NX}, \quad (\text{A-2.32})$$

donde,

$$A_{NX} = -1, B_{NX} = 1, C_{NX} = 0, D_{NX} = 0. \quad (\text{A-2.33})$$

Ahora se barrerá el resto del cuadrado, es decir en  $OY(k)+1 \leq j \leq MY(k)-1$ .

Para  $i = MX$  la ecuación es

$$A_{MX} s_\gamma|_{MX-1,j} + B_{MX} s_\gamma|_{MX,j} + C_{MX} s_\gamma|_{MX+1,j} = D_{MX}, \quad (\text{A-2.34})$$

donde,

$$A_{MX} = 0, B_{MX} = -1, C_{MX} = 1, D_{MX} = K_1 \Delta X \frac{\phi^2}{a_{v\omega}^\ell}. \quad (\text{A-2.35})$$

Mientras que, para  $MX+1 \leq i \leq NX-1$  se tiene

$$A_i s_\gamma|_{i-1,j} + B_i s_\gamma|_{i,j} + C_i s_\gamma|_{i+1,j} = D_i, \quad (\text{A-2.36})$$

donde,

$$A_i = 1, B_i = -2(1+r), C_i = 1, D_i = -\frac{f_1(Y_{NX/2})K_1}{f_2(Y_{NX/2})} (\Delta X)^2 \phi^2 - r(s_\gamma|_{i,j-1} + s_\gamma|_{i,j+1}). \quad (\text{A-2.37})$$

Finalmente, para  $i = NX$ , la ecuación es

$$A_{NX} s_\gamma|_{NX-1,j} + B_{NX} s_\gamma|_{NX,j} + C_{NX} s_\gamma|_{NX+1,j} = D_{NX}, \quad (\text{A-2.38})$$

donde,

$$A_{NX} = -1, B_{NX} = 1, C_{NX} = 0, D_{NX} = 0. \quad (\text{A-2.39})$$

Es de notarse que para el cuadrado número  $nc$ , no se emplearán las ecuaciones (A-2.22)

a (A-2.27) ni se barrerá de  $MY(nc)+1 \leq j \leq OY(nc+1)-1$ . Por último se calcula el

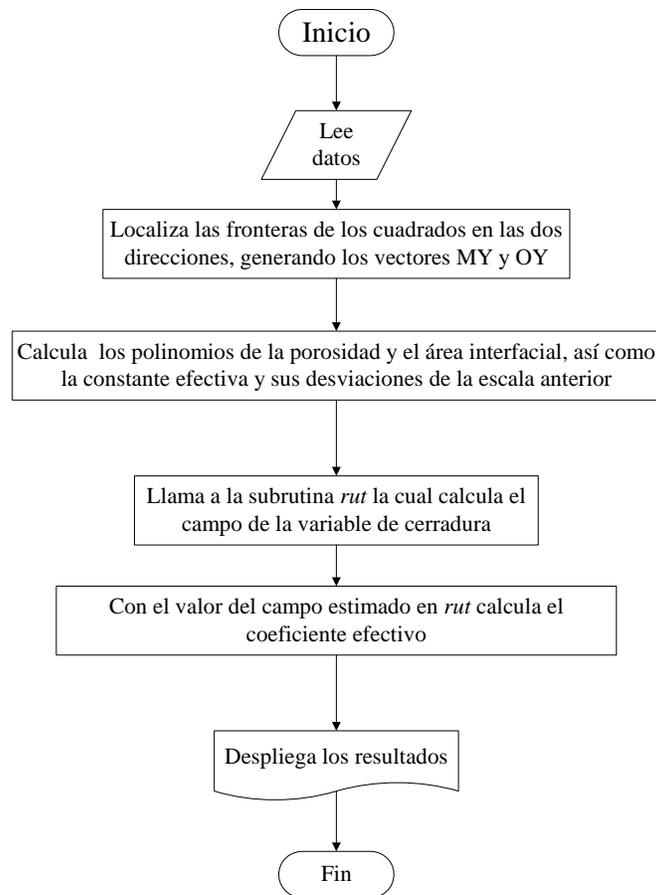
campo en  $j = 1$ , para  $1 \leq i \leq NX$ , la condición de frontera (A-2.6) implica que

$$s_\gamma|_{i,1} = s_\gamma|_{i,2}. \quad (\text{A-2.40})$$

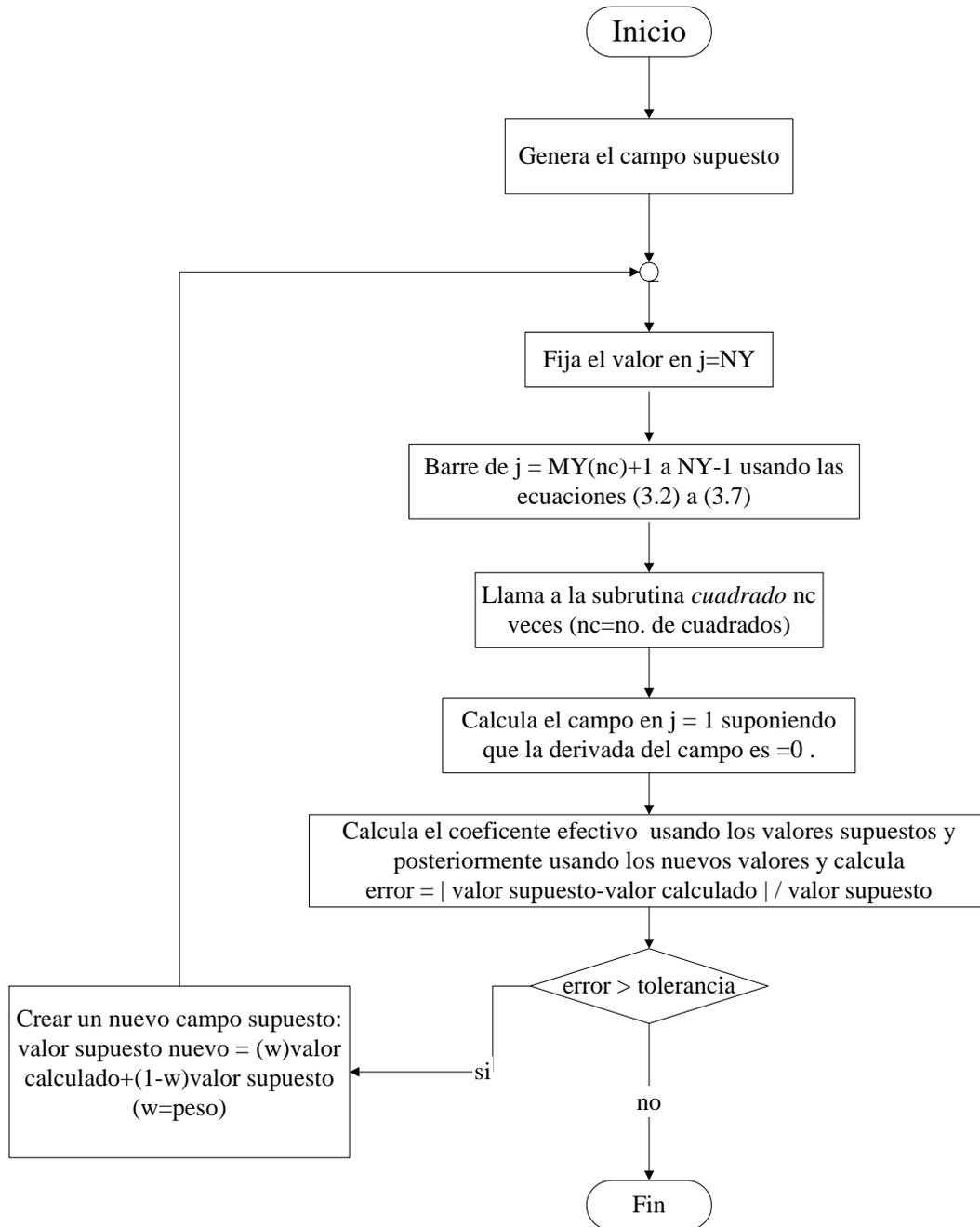
Con esto se completa el barrido. El programa repetirá las operaciones mostradas en esta sección hasta que se satisfaga una determinada tolerancia sobre el coeficiente efectivo, definida como,

$$Tolerancia = \left| \frac{K_{eff} - K_{eff}^{supuesta}}{K_{eff}^{supuesta}} \right|, \quad (A-2.41)$$

donde  $K_{eff}^{supuesta}$  se refiere al valor obtenido con el campo que de la iteración anterior y para la primera iteración es el obtenido con el campo supuesto para iniciar el programa. El coeficiente efectivo se calculará usando integración numérica extendida de Simpson 3/8 (ver por ejemplo, Nakamura 1992). A continuación (Figuras A-2.2-4) se muestran los diagramas de flujo del programa y sus principales subrutinas. No se incluye el diagrama de la subrutina con la que se resuelven las matrices tridiagonales ya que está disponible en la literatura (Fletcher, 1991).



**Figura A-2.2:** Diagrama de flujo del programa principal.



**Figura A-2.3:** Diagrama de flujo de la subrutina *rut*.

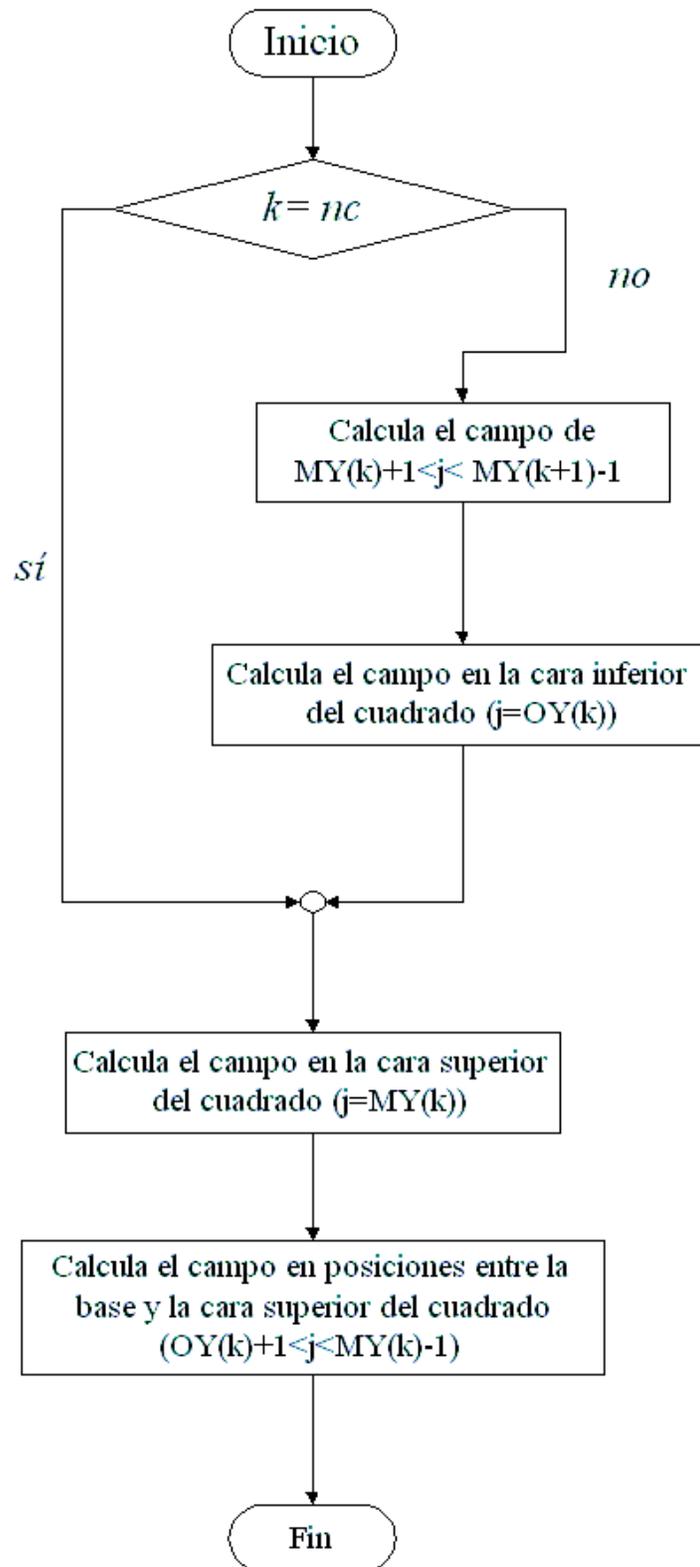


Figura A-2.4: Diagrama de flujo de la subrutina *cuadrado*.

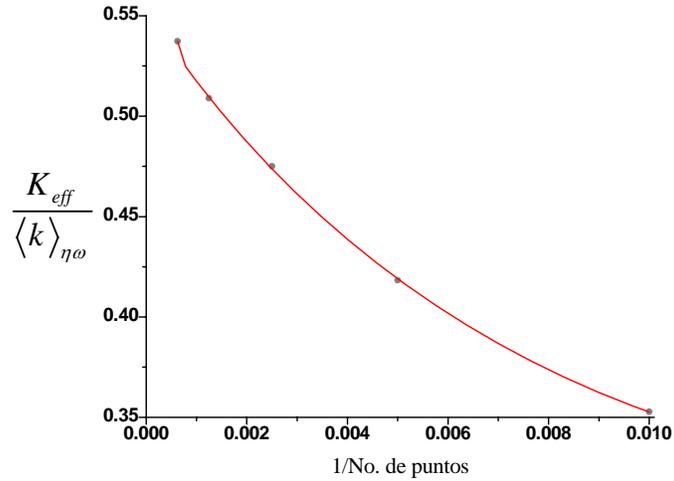
## A-2.4.- Independencia de parámetros numéricos y del número de cuadrados.

Una vez alcanzada la convergencia del coeficiente efectivo con el esquema numérico presentado anteriormente, es necesario hacer que la solución no dependa de los parámetros numéricos como son la tolerancia y el número de puntos. Respecto a lo primero, en la Tabla A-2.1 se muestran los resultados para  $A = a/l = 0.2$ ,  $\phi = 1$  y once cuadrados en la celda, para diferentes valores de tolerancia, encontrando satisfactorio el resultado usando  $1 \times 10^{-4}$ , ya que su porcentaje de error con respecto a la ordenada al origen (0.54242), obtenida a partir de la función que ajusta a la gráfica de tolerancia contra coeficiente efectivo, es inferior al 5%.

**Tabla A-2.1:** Dependencia del coeficiente efectivo con la tolerancia escogida

Tolerancia	$K_{eff} / \langle k \rangle_{\eta\omega}$	$\left  K_{eff} / \langle k \rangle_{\eta\omega} - 0.54242 \right  \left( \frac{100\%}{0.54242} \right)$
$1 \times 10^{-2}$	1	84.36
$1 \times 10^{-3}$	0.6710	23.72
$1 \times 10^{-4}$	0.5592	3.09
$1 \times 10^{-5}$	0.5441	0.315

Respecto al número de puntos, lo que se hizo fue correr el programa con diferentes números de puntos de manera tal que se usen celdas autocontenidas. Por ejemplo, al usar 100, 200, 400, 800 y 1600 puntos para  $A = 0.2$ ,  $\phi = 1$  y once cuadrados, a partir de la obtención de la función que ajuste a una gráfica del inverso de número de puntos contra  $K_{eff} / \langle k \rangle_{\eta\omega}$  se calcula la ordenada al origen (en este caso de 0.56), como se muestra en la Figura A-2.5. Cabe mencionar que si sólo se hubieran tomado los últimos tres puntos el resultado no habría cambiado significativamente (0.563). Los resultados que se muestran en la Tabla A-2.1 se obtuvieron usando este procedimiento.

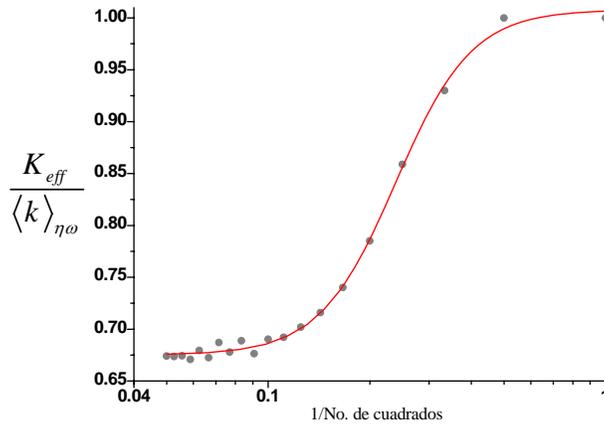


**Figura A-2.5:** Coeficiente efectivo contra el inverso del número de puntos para  $A = 0.2$ ,  $\phi = 1$  y once cuadrados.

De esta manera, el siguiente punto a discutir es el número de cuadrados a emplear en la celda unitaria, para ello se resolvió el problema para  $A = 0.5$  y  $\phi = 3$  usando desde uno hasta veinte cuadrados en la celda y posteriormente, al graficar el inverso del número de cuadrados contra  $K_{eff} / \langle k \rangle_{\eta\omega}$ , como se muestra en la Figura A-2.6, se obtuvo la función que ajuste adecuadamente (con un coeficiente de correlación superior a 0.95) los datos como,

$$\frac{K_{eff}}{\langle k \rangle_{\eta\omega}} = 1.0079 - \frac{0.33298}{1 + \left( \frac{(\text{No. de cuadrados})^{-1}}{0.23883} \right)^{3.84764}}, \quad (\text{A-2.42})$$

y se determinó la ordenada al origen, que en este caso fue 0.67492. Posteriormente, se calculó el porcentaje de error absoluto de cada uno de los resultados con respecto a este valor, obteniendo los resultados presentados en la Tabla A-2.2, donde se puede observar que con once cuadrados es suficiente para obtener un error inferior al 0.5%.



**Figura A-2.6:** Coeficiente efectivo vs. inverso del número de cuadrados para  $A = 0.5$  y  $\phi = 3$ .

**Tabla A-2.2:** No. de cuadrados y % error absoluto respecto a la ordenada al origen.

No. de cuadrados	$\left  \frac{K_{eff}}{\langle k \rangle_{\eta\omega}} - 0.67492 \right  \frac{(100\%)}{0.67492}$
1	48.16571
2	43.72074
3	37.79411
4	27.2536
5	16.33823
6	9.67522
7	6.04812
8	4.01233
9	2.53067
10	2.27434
11	0.20891
12	2.06099
13	0.42375
14	1.79577
15	0.36597
16	0.65637
17	0.60007
18	0.10223
19	0.19113
20	0.15261

En resumen, el procedimiento a seguir para estimar el coeficiente efectivo es el siguiente.

- 
1. Llevar a cabo el esquema numérico detallado en la Sección A-2.3, hasta que se obtenga convergencia en los valores supuestos de la variable de cerradura en las iteraciones con respecto al coeficiente efectivo, con una tolerancia de  $1 \times 10^{-4}$  y usando once cuadrados.
  2. Repetir el paso anterior usando distintos números de nodos computacionales de manera que se generen mallas autocontenidas.
  3. Obtener la función que describa los resultados obtenidos en el paso anterior y estimar la ordenada al origen, la cual se tomará como el resultado.

---

## Apéndice A-3:

### Prueba de simetría y antisimetría para el modelo de medio poroso centrado en el cuerpo

Al igual que en el caso del modelo de medio poroso centrado en las caras, es conveniente hacer un análisis de simetría y antisimetría, para los otros modelos de medio poroso, con el fin de reemplazar las condiciones de periodicidad por condiciones equivalentes de tipo Dirichlet o Neumann. En este apéndice se centra la atención, primeramente en el modelo de medio poroso centrado en cuerpo horizontal y posteriormente en el vertical. Además, se incluyen algunos comentarios sobre cómo se modifica el esquema numérico, planteado en el Apéndice A-2, para estos casos.

#### A-3.1.- Medio poroso centrado en el cuerpo horizontal.

El problema de valor a la frontera (escrito en términos de variables y parámetros adimensionales), referido a las posiciones de la celda unitaria bidimensional dibujada en la Figura A-3.1, es en este caso

*Problema Ih*

$$\frac{\partial^2 s_\gamma}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 s_\gamma}{\partial Y^2} = -\frac{f_1(Y)K_1}{f_2(Y)}\phi^2, \text{ en la fase fluida,} \quad (\text{A-3.1})$$

$$\text{C.F.1} \quad -\frac{\partial s_\gamma}{\partial X} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega}l}, \text{ en } X = X_1, Y_1(k) \leq Y \leq Y_2(k), Y_5(k) \leq Y \leq Y_6(k);$$

$$X = -X_2, Y_3(k) \leq Y \leq Y_4(k), \quad (\text{A-3.2})$$

$$\frac{\partial s_\gamma}{\partial X} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega}l}, \text{ en } X = -X_1, Y_1(k) \leq Y \leq Y_2(k), Y_5(k) \leq Y \leq Y_6(k);$$

$$X = X_2, Y_3(k) \leq Y \leq Y_4(k), \quad (\text{A-3.3})$$

$$\frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } Y = Y_4(k), -X_2 \leq X \leq X_2; Y = Y_2(k), \pm X_1 \leq X \leq \pm \frac{1}{2}, \quad (\text{A-3.4})$$

$$-\frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } Y = Y_3(k); -X_2 \leq X \leq X_2; Y = Y_5(k), \pm X_1 \leq X \leq \pm \frac{1}{2}, \quad (\text{A-3.5})$$

$$\text{C.F.2} \quad s_\gamma = 0, \text{ en } Y = 2H, \quad (\text{A-3.6})$$

$$\text{C.F.3} \quad \frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} = 0, \text{ en } Y = 0, \quad (\text{A-3.7})$$

$$\text{Periodicidad:} \quad s_\gamma(\mathbf{r} + \zeta_i) = s_\gamma(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (\text{A-3.8})$$

Para llegar a la condición de frontera (A-3.7) se hicieron las mismas suposiciones que en el caso del medio poroso centrado en las caras y, además, se tomó en cuenta que aún para este modelo de medio poroso se cumple que

$$\frac{\partial s_{\gamma,\omega}}{\partial Y} = 0, \text{ en } Y = 0. \quad (\text{A-3.9})$$

Estas mismas observaciones aplican para el modelo de celda unitaria centrada en el cuerpo vertical, por lo que en la Sección A-3.2 se utilizará la condición de frontera (A-3.7) sin mayor discusión.

De acuerdo al procedimiento del Apéndice A-1, conviene escribir el *Problema Ih* en términos de las variables  $\bar{s}_\gamma$ ,  $\bar{X}$  y  $\bar{Y}$  como

*Problema  $\bar{Ih}$*

$$\frac{\partial^2 \bar{s}_\gamma}{\partial \bar{X}^2} + \frac{\partial^2 \bar{s}_\gamma}{\partial \bar{Y}^2} = -\frac{f_1(\bar{Y})K_1}{f_2(\bar{Y})}\phi^2, \text{ en la fase fluida,} \quad (\text{A-3.10})$$

$$\text{C.F.1} \quad -\frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial \bar{X}} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } \bar{X} = X_1, Y_1(k) \leq \bar{Y} \leq Y_2(k), Y_5(k) \leq \bar{Y} \leq Y_6(k);$$

$$\bar{X} = -X_2, Y_3(k) \leq \bar{Y} \leq Y_4(k), \quad (\text{A-3.11})$$

$$\frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial \bar{X}} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } \bar{X} = -X_1, Y_1(k) \leq \bar{Y} \leq Y_2(k), Y_5(k) \leq \bar{Y} \leq Y_6(k);$$



---


$$\text{Periodicidad: } \quad \bar{s}_\gamma(\mathbf{r} + \zeta_i) = \bar{s}_\gamma(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (\text{A-3.17})$$

Haciendo, ahora los siguientes cambios de variables,

$$\bar{X} \rightarrow -X, \quad (\text{A-3.18})$$

$$\bar{Y} \rightarrow Y. \quad (\text{A-3.19})$$

Lo que da lugar al siguiente problema de valor a la frontera,

$$\frac{\partial^2 \bar{s}_\gamma}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \bar{s}_\gamma}{\partial Y^2} = -\frac{f_1(Y) K_1}{f_2(Y)} \phi^2, \text{ en la fase fluida,} \quad (\text{A-3.20})$$

$$\text{C.F.1} \quad \frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial X} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{\text{vo}} \ell}, \text{ en } -X = X_1, Y_1(k) \leq Y \leq Y_2(k), Y_5(k) \leq Y \leq Y_6(k);$$

$$X = X_2, Y_3(k) \leq Y \leq Y_4(k), \quad (\text{A-3.21})$$

$$-\frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial X} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{\text{vo}} \ell}, \text{ en } X = X_1, Y_1(k) \leq Y \leq Y_2(k), Y_5(k) \leq Y \leq Y_6(k);$$

$$-X = X_2, Y_3(k) \leq Y \leq Y_4(k), \quad (\text{A-3.22})$$

$$\frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial Y} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{\text{vo}} \ell}, \text{ en } Y = Y_4(k), -X_2 \leq X \leq X_2; Y = Y_2(k), \pm X_1 \leq X \leq \pm \frac{1}{2}, \quad (\text{A-3.23})$$

$$-\frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial Y} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{\text{vo}} \ell}, \text{ en } Y = Y_3(k); -X_2 \leq X \leq X_2; Y = Y_5(k), \pm X_1 \leq X \leq \pm \frac{1}{2}, \quad (\text{A-3.24})$$

$$\text{C.F.2} \quad \bar{s}_\gamma = 0, \text{ en } Y = 2H, \quad (\text{A-3.25})$$

$$\text{C.F.3} \quad \frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial Y} = 0, \text{ en } Y = 0, \quad (\text{A-3.26})$$

$$\text{Periodicidad: } \quad \bar{s}_\gamma(\mathbf{r} + \zeta_i) = \bar{s}_\gamma(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (\text{A-3.27})$$

Como se puede notar, para que el problema anterior sea idéntico al *Problema 1h* se debe cumplir que,

$$s_\gamma(-X, Y) = s_\gamma(X, Y). \quad (\text{A-3.28})$$

Por lo que se puede concluir que  $s_\gamma$  es simétrico alrededor de  $X=0$ . Y, con ayuda de las condiciones de periodicidad, este resultado se puede extender a  $X = \pm \frac{1}{2}$ . De esta forma, el problema de cerradura para la inter-región puede resolverse en la celda unitaria de la Figura A-3.2 (la cual corresponde a la mitad de la celda unitaria de la Figura A-3.1) y se expresa a continuación,

$$\frac{\partial^2 s_\gamma}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 s_\gamma}{\partial Y^2} = -\frac{f_1(Y)K_1}{f_2(Y)}\phi^2, \text{ en la fase fluida,} \quad (\text{A-3.29})$$

$$\text{C.F.1} \quad -\frac{\partial s_\gamma}{\partial X} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } X = X_1, Y_1(k) \leq Y \leq Y_2(k), Y_5(k) \leq Y \leq Y_6(k); \quad (\text{A-3.30})$$

$$\frac{\partial s_\gamma}{\partial X} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } X = X_2, Y_3(k) \leq Y \leq Y_4(k); \quad (\text{A-3.31})$$

$$\frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } Y = Y_4(k), 0 \leq X \leq X_2; Y = Y_2(k), X_1 \leq X \leq \frac{1}{2}, \quad (\text{A-3.32})$$

$$-\frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } Y = Y_3(k); 0 \leq X \leq X_2; Y = Y_5(k), X_1 \leq X \leq \frac{1}{2}, \quad (\text{A-3.33})$$

$$\text{C.F.2} \quad s_\gamma = 0, \text{ en } Y = 2H, \quad (\text{A-3.34})$$

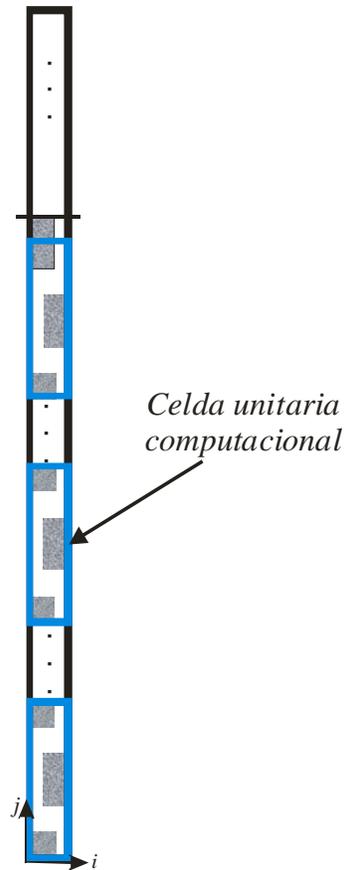
$$\text{C.F.3} \quad \frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} = 0, \text{ en } Y = 0, \quad (\text{A-3.35})$$

$$\text{C.F.4} \quad \frac{\partial s_\gamma}{\partial X} = 0, \text{ en } X = 0, 0 \leq Y \leq 2H, \quad (\text{A-3.36})$$

$$\text{C.F.5} \quad \frac{\partial s_\gamma}{\partial X} = 0, \text{ en } X = \frac{1}{2}, 0 \leq Y \leq 2H. \quad (\text{A-3.37})$$

Por otro lado, el esquema computacional a seguir para resolver este problema es similar al caso anterior. Es decir, se inicia el barrido de arriba hacia abajo; una vez que se llega a  $Y = H$  se barre hasta  $Y_6(nc)$  y posteriormente se utilizan cada una de las celdas unitarias computacionales hasta llegar a  $nc = 1$ . La diferencia entre el programa

computacional usado para este problema comparado con el caso del medio poroso centrado en las caras radica en el tipo de celda unitaria computacional a usar.



**Figura A-3.2:** Celda unitaria simplificada para la inter-región.

En este caso, se obtuvieron resultados aceptables usando 6 celdas computacionales y una tolerancia de  $1 \times 10^{-5}$ . Es decir, se usaron prácticamente la mitad de las celdas usadas en el modelo de medio poroso anterior.

### **A-3.2.- Medio poroso centrado en el cuerpo vertical.**

El problema de valor a la frontera, (expresado en términos de variables y parámetros adimensionales) es, de acuerdo a la Figura A-3.3,

*Problema Iv*

$$\frac{\partial^2 s_\gamma}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 s_\gamma}{\partial Y^2} = -\frac{f_1(Y)K_1}{f_2(Y)}\phi^2, \text{ en la fase fluida,} \quad (\text{A-3.38})$$

$$\text{C.F.1} \quad -\frac{\partial s_\gamma}{\partial X} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } X = X_2, Y_1(k) \leq Y \leq Y_2(k), Y_5(k) \leq Y \leq Y_6(k);$$

$$X = -X_1, Y_3(k) \leq Y \leq Y_4(k), \quad (\text{A-3.39})$$

$$\frac{\partial s_\gamma}{\partial X} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } X = -X_2, Y_1(k) \leq Y \leq Y_2(k), Y_5(k) \leq Y \leq Y_6(k);$$

$$X = X_1, Y_3(k) \leq Y \leq Y_4(k), \quad (\text{A-3.40})$$

$$\frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } Y = Y_4(k), -X_1 \leq X \leq X_1; Y = Y_2(k), \pm X_2 \leq X \leq \pm 1, \quad (\text{A-3.41})$$

$$-\frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } Y = Y_3(k); -X_1 \leq X \leq X_1; Y = Y_5(k), \pm X_2 \leq X \leq \pm 1, \quad (\text{A-3.42})$$

$$\text{C.F.2} \quad s_\gamma = 0, \text{ en } Y = 2H, \quad (\text{A-3.43})$$

$$\text{C.F.3} \quad \frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} = 0, \text{ en } Y = 0, \quad (\text{A-3.44})$$

$$\text{Periodicidad:} \quad s_\gamma(\mathbf{r} + \ell_i) = s_\gamma(\mathbf{r}), i = 1, 2. \quad (\text{A-3.45})$$

De acuerdo al procedimiento de los dos casos anteriores, el siguiente paso consiste en escribir el problema anterior, en términos de  $\bar{s}_\gamma$ ,  $\bar{X}$  y  $\bar{Y}$ , como sigue

*Problema  $\bar{Iv}$*

$$\frac{\partial^2 \bar{s}_\gamma}{\partial \bar{X}^2} + \frac{\partial^2 \bar{s}_\gamma}{\partial \bar{Y}^2} = -\frac{f_1(\bar{Y})K_1}{f_2(\bar{Y})}\phi^2, \text{ en la fase fluida,} \quad (\text{A-3.46})$$

$$\text{C.F.1} \quad -\frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial \bar{X}} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } \bar{X} = X_2, Y_1(k) \leq \bar{Y} \leq Y_2(k), Y_5(k) \leq \bar{Y} \leq Y_6(k);$$

$$\bar{X} = -X_1, Y_3(k) \leq \bar{Y} \leq Y_4(k), \quad (\text{A-3.47})$$

$$\frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial \bar{X}} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } \bar{X} = -X_2, Y_1(k) \leq \bar{Y} \leq Y_2(k), Y_5(k) \leq \bar{Y} \leq Y_6(k);$$

$$\bar{X} = X_1, Y_3(k) \leq \bar{Y} \leq Y_4(k), \quad (\text{A-3.48})$$

$$\frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial \bar{Y}} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } \bar{Y} = Y_4(k), -X_1 \leq \bar{X} \leq X_1; \bar{Y} = Y_2(k), \pm X_2 \leq \bar{X} \leq \pm 1, \quad (\text{A-3.49})$$

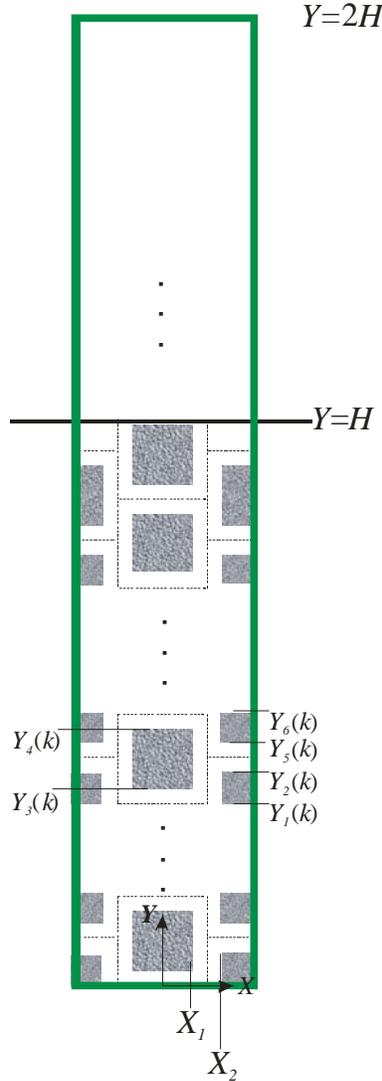


Figura A-3.3: Celda unitaria para el problema en la inter-región.

$$-\frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial \bar{Y}} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } \bar{Y} = Y_3(k); -X_1 \leq \bar{X} \leq X_1; \bar{Y} = Y_5(k), \pm X_2 \leq \bar{X} \leq \pm 1, \quad (\text{A-3.50})$$

C.F.2  $\bar{s}_\gamma = 0, \text{ en } \bar{Y} = 2H, \quad (\text{A-3.51})$

---


$$\text{C.F.3} \quad \frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial \bar{Y}} = 0, \text{ en } \bar{Y} = 0, \quad (\text{A-3.52})$$

$$\text{Periodicidad:} \quad \bar{s}_\gamma(\mathbf{r} + \ell_i) = \bar{s}_\gamma(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (\text{A-3.53})$$

Al tomar en cuenta los cambios de variables siguientes

$$\bar{X} \rightarrow -X, \quad (\text{A-3.54})$$

$$\bar{Y} \rightarrow Y, \quad (\text{A-3.55})$$

se obtiene el siguiente problema de valor a la frontera,

$$\frac{\partial^2 \bar{s}_\gamma}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \bar{s}_\gamma}{\partial Y^2} = -\frac{f_1(Y) K_1}{f_2(Y)} \phi^2, \text{ en la fase fluida,} \quad (\text{A-3.56})$$

$$\text{C.F.1} \quad \frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial X} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } -X = X_2, \quad Y_1(k) \leq Y \leq Y_2(k), \quad Y_5(k) \leq Y \leq Y_6(k);$$

$$X = X_1, \quad Y_3(k) \leq Y \leq Y_4(k), \quad (\text{A-3.57})$$

$$-\frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial X} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } X = X_2, \quad Y_1(k) \leq Y \leq Y_2(k), \quad Y_5(k) \leq Y \leq Y_6(k);$$

$$-X = X_1, \quad Y_3(k) \leq Y \leq Y_4(k), \quad (\text{A-3.58})$$

$$\frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial Y} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } Y = Y_4(k), \quad -X_1 \leq X \leq X_1; \quad Y = Y_2(k), \quad \pm X_2 \leq X \leq \pm 1, \quad (\text{A-3.59})$$

$$-\frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial Y} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} \ell}, \text{ en } Y = Y_3(k); \quad -X_1 \leq X \leq X_1; \quad Y = Y_5(k), \quad \pm X_2 \leq X \leq \pm 1, \quad (\text{A-3.60})$$

$$\text{C.F.2} \quad \bar{s}_\gamma = 0, \text{ en } Y = 2H, \quad (\text{A-3.61})$$

$$\text{C.F.3} \quad \frac{\partial \bar{s}_\gamma}{\partial Y} = 0, \text{ en } Y = 0, \quad (\text{A-3.62})$$

$$\text{Periodicidad:} \quad s_\gamma(\mathbf{r} + \ell_i) = s_\gamma(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2. \quad (\text{A-3.63})$$

Al comparar el problema anterior con el *Problema Iv*, se puede notar que basta con proponer la siguiente igualdad

$$s_\gamma(-X, Y) = s_\gamma(X, Y), \quad (\text{A-3.64})$$

para que ambos problemas sean idénticos. De lo anterior se concluye que  $s_\gamma$  es simétrico alrededor de  $X = 0$ . Al igual que en los casos anteriores, con ayuda de la propiedad de periodicidad, esta condición de frontera se puede extender a  $X = \pm 1$ . De esta forma, el problema de cerradura para la inter-región se puede resolver para la celda unitaria presentada en la Figura A-3.4 y se expresa como

$$\frac{\partial^2 s_\gamma}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 s_\gamma}{\partial Y^2} = -\frac{f_1(Y) K_1}{f_2(Y)} \phi^2, \text{ en la fase fluida,} \quad (\text{A-3.65})$$

$$\text{C.F.1} \quad -\frac{\partial s_\gamma}{\partial X} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} l}, \text{ en } X = X_2, Y_1(k) \leq Y \leq Y_2(k), Y_5(k) \leq Y \leq Y_6(k); \quad (\text{A-3.66})$$

$$\frac{\partial s_\gamma}{\partial X} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} l}, \text{ en } X = X_1, Y_3(k) \leq Y \leq Y_4(k), \quad (\text{A-3.67})$$

$$\frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} l}, \text{ en } Y = Y_4(k), 0 \leq X \leq X_1; Y = Y_2(k), X_2 \leq X \leq 1, \quad (\text{A-3.68})$$

$$-\frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} = K_1 \frac{\phi^2}{a_{v\omega} l}, \text{ en } Y = Y_3(k); 0 \leq X \leq X_1; Y = Y_5(k), X_2 \leq X \leq 1, \quad (\text{A-3.69})$$

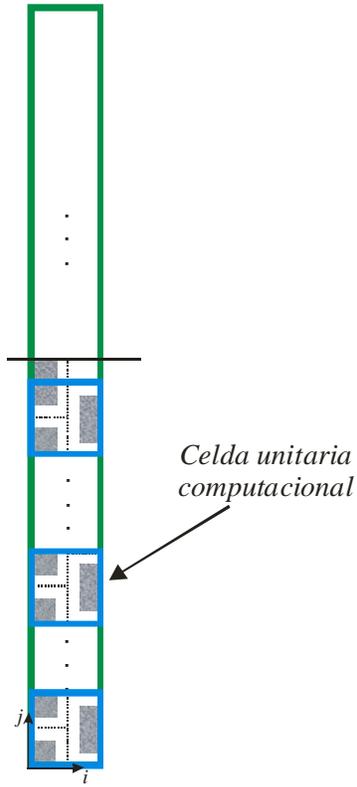
$$\text{C.F.2} \quad s_\gamma = 0, \text{ en } Y = 2H, \quad (\text{A-3.70})$$

$$\text{C.F.3} \quad \frac{\partial s_\gamma}{\partial Y} = 0, \text{ en } Y = 0, \quad (\text{A-3.71})$$

$$\text{C.F.4} \quad \frac{\partial s_\gamma}{\partial X} = 0, \text{ en } X = 0, \quad (\text{A-3.72})$$

$$\text{C.F.5} \quad \frac{\partial s_\gamma}{\partial X} = 0, \text{ en } X = 1. \quad (\text{A-3.73})$$

El esquema numérico es similar al de los dos casos anteriores, de nuevo el cambio radica en el tipo de celda unitaria computacional a usar, la cual es más complicada que las anteriores. Nótese que, a diferencia de los casos anteriores, el ancho de la celda unitaria computacional es de la unidad. Por último, al igual que en el caso del medio poroso centrado en las caras, al considerar once celdas y una tolerancia de  $1 \times 10^{-5}$  se obtuvieron resultados satisfactorios.

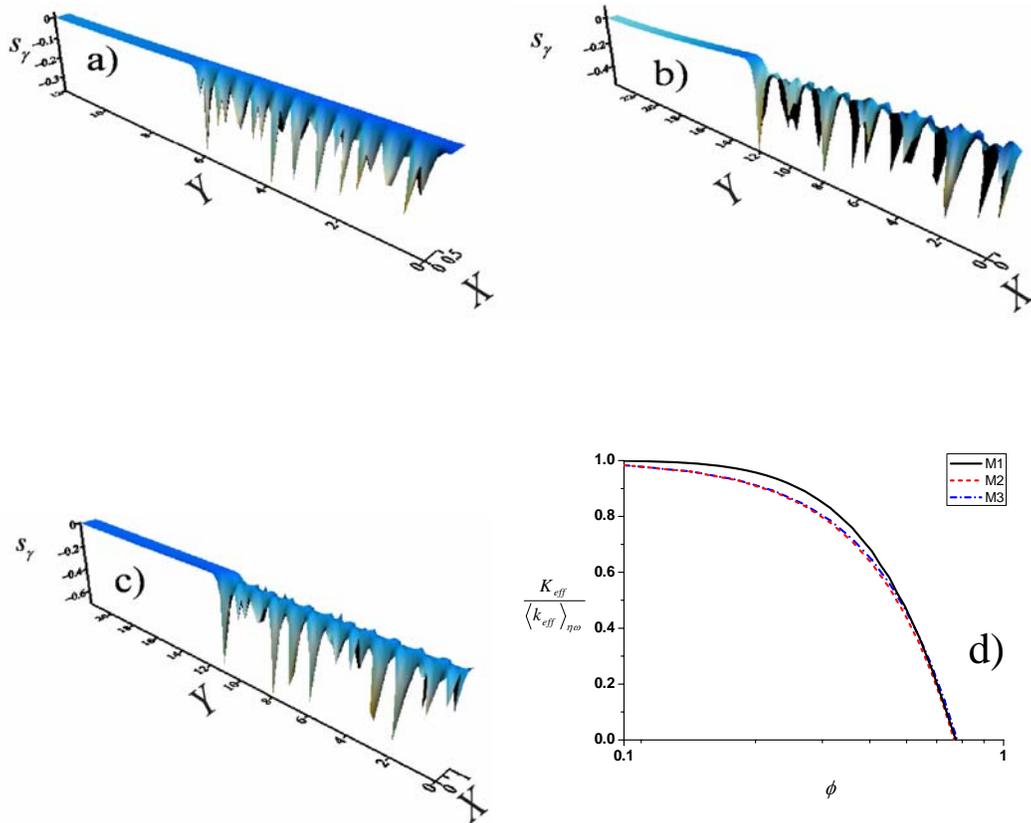


**Figura A-3.4:** Celda unitaria simplificada para la inter-región.

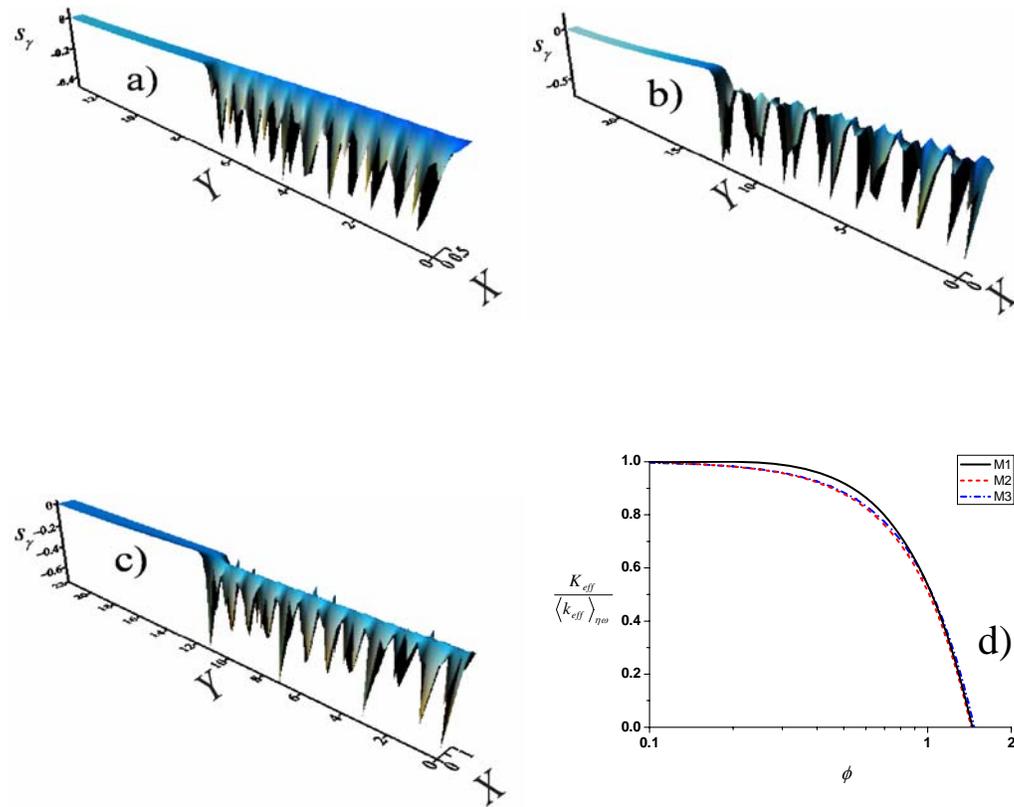
---

## Apéndice A-4:

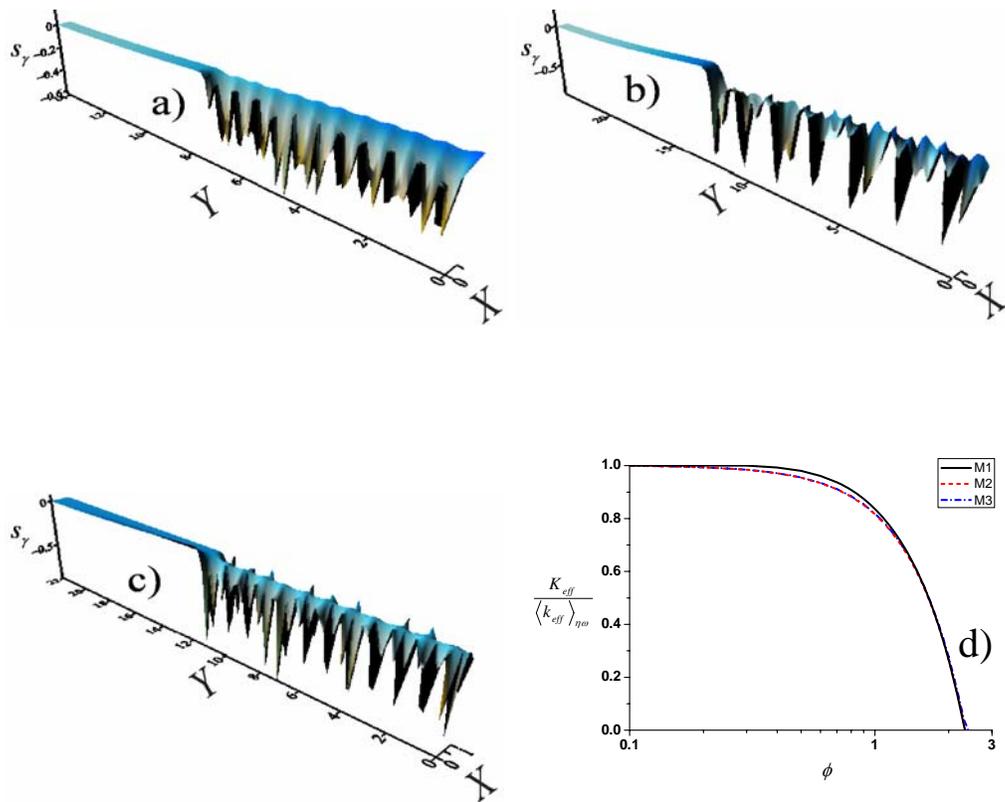
### Gráficos de la variable de cerradura $s_\gamma$



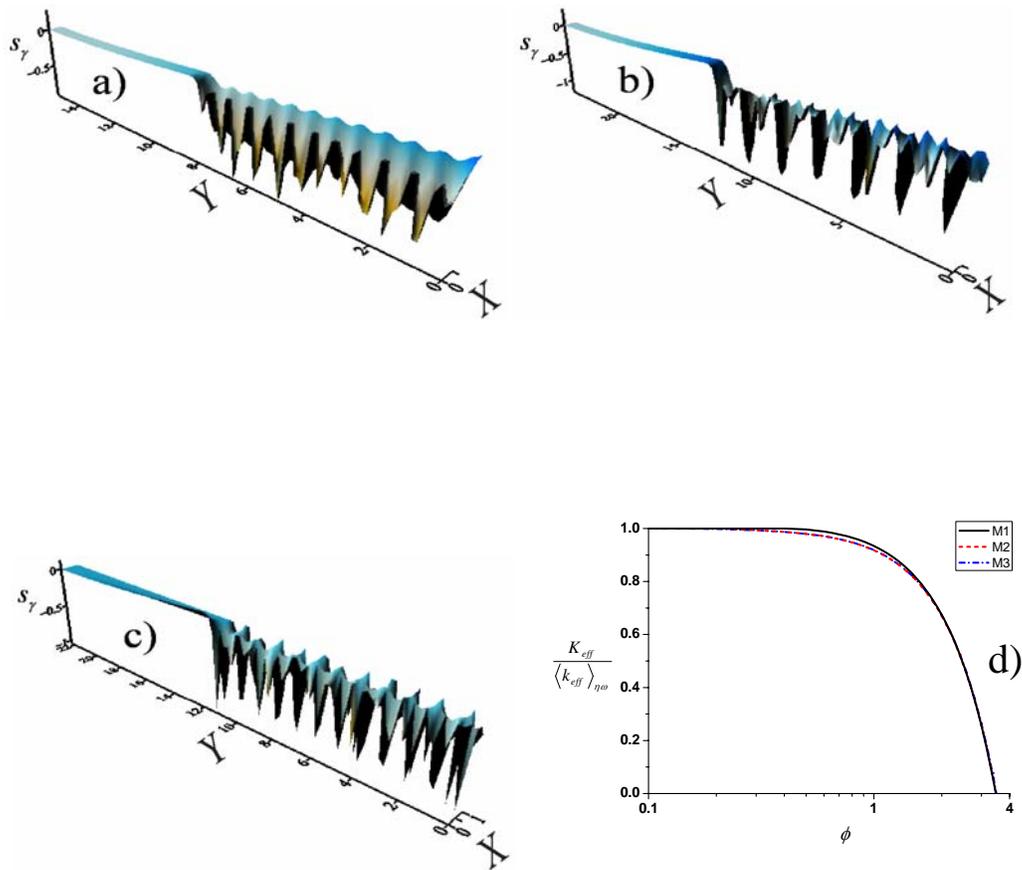
**Figura A-4.1:** Campo de la variable de cerradura  $s_\gamma$  para  $A = 0.1, \phi = 0.5$  obtenidos con los modelos del medio poroso, a) centrado en las caras (M1), b) centrado en el cuerpo horizontal (M2), c) centrado en el cuerpo vertical (M3). Comparación del coeficiente efectivo obtenido a partir de estos tres modelos para  $A = 0.1$ .



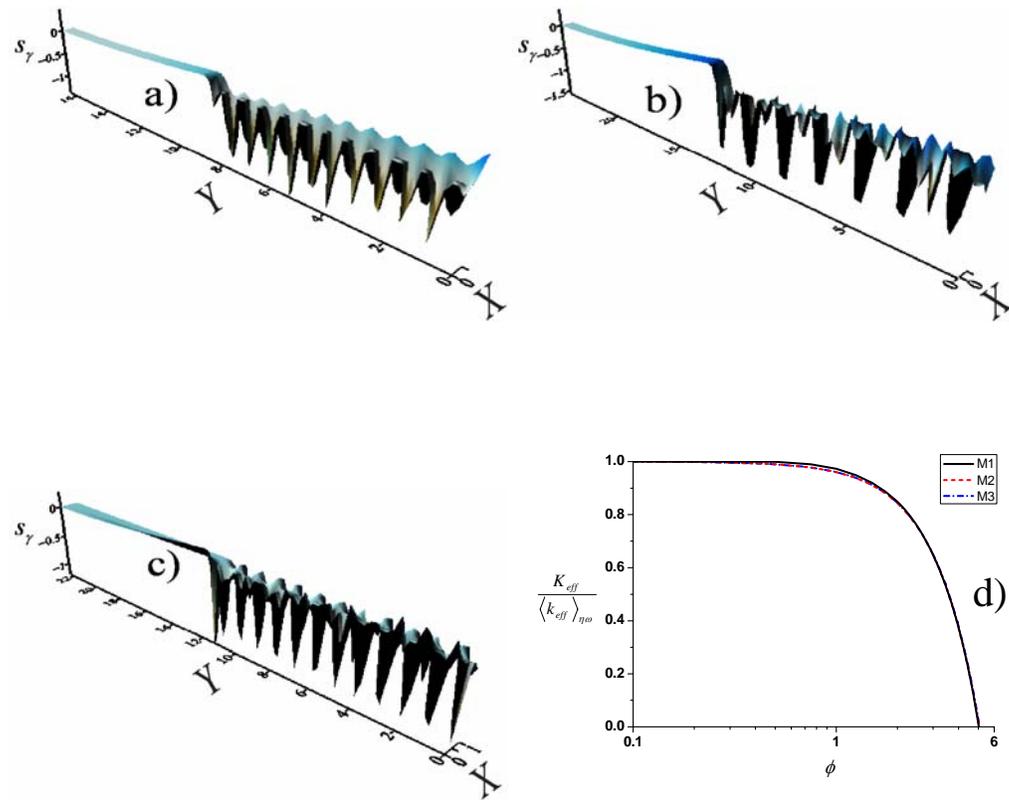
**Figura A-4.2:** Campo de la variable de cerradura  $s_\gamma$  para  $A = 0.2$ ,  $\phi = 0.95$  obtenidos los modelos del medio poroso, a) centrado en las caras (M1), b) centrado en el cuerpo horizontal (M2), c) centrado en el cuerpo vertical (M3). Comparación del coeficiente efectivo obtenido a partir de estos tres modelos para  $A = 0.2$ .



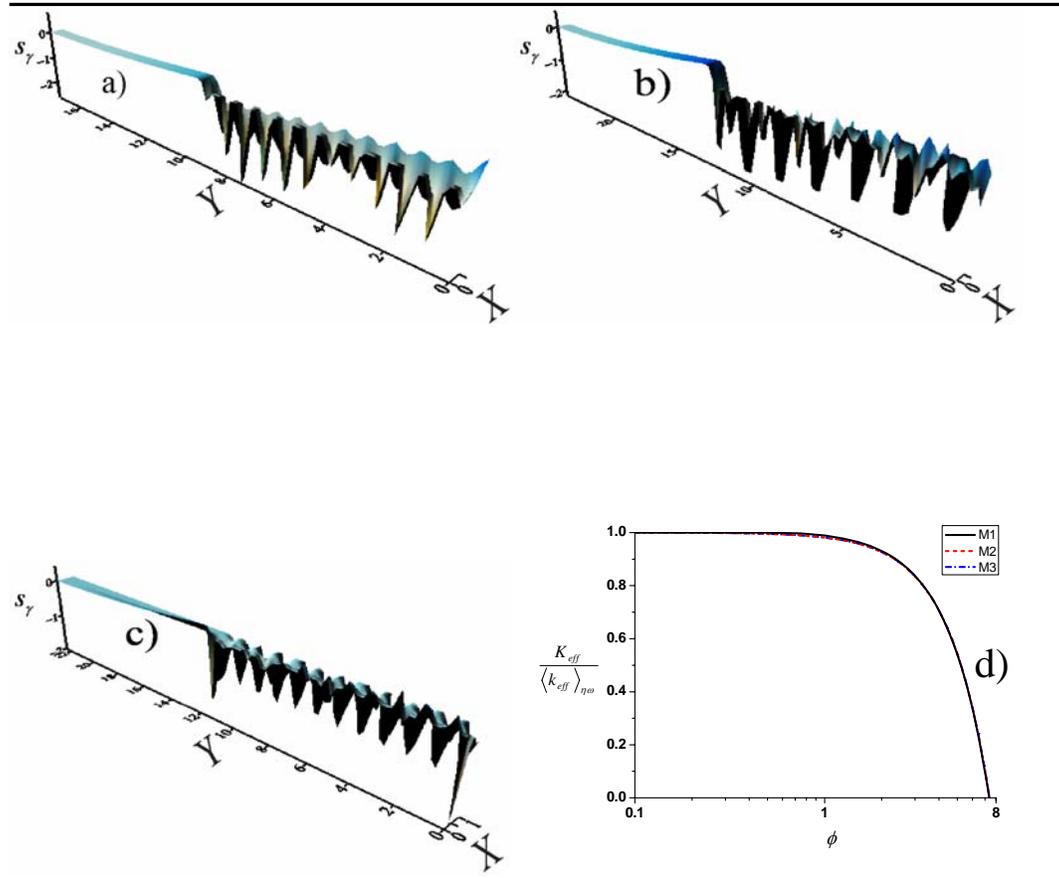
**Figura A-4.3:** Campo de la variable de cerradura  $s_\gamma$  para  $A = 0.3, \phi = 1.5$  obtenidos con los modelos del medio poroso, a) centrado en las caras (M1), b) centrado en el cuerpo horizontal (M2), c) centrado en el cuerpo vertical (M3). Comparación del coeficiente efectivo obtenido a partir de estos tres modelos para  $A = 0.3$ .



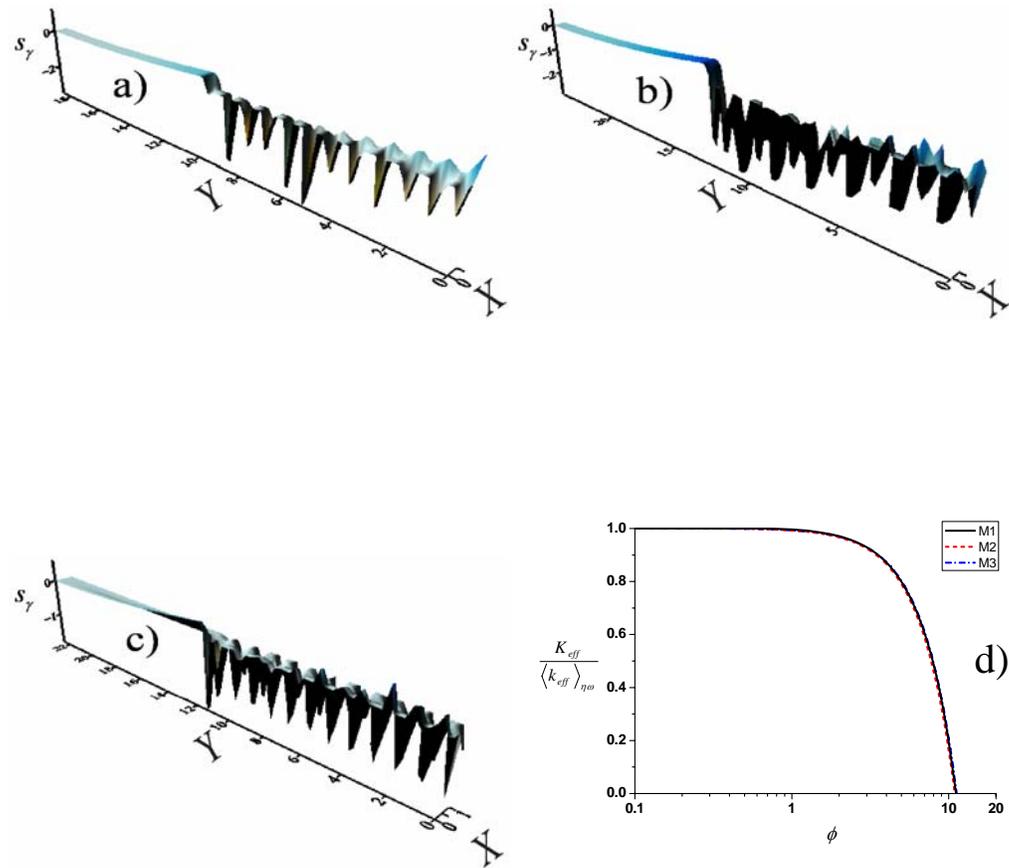
**Figura A-4.4:** Campo de la variable de cerradura  $s_\gamma$  para  $A = 0.4$ ,  $\phi = 2.25$  obtenidos los modelos del medio poroso, a) centrado en las caras (M1), b) centrado en el cuerpo horizontal (M2), c) centrado en el cuerpo vertical (M3). Comparación del coeficiente efectivo obtenido a partir de estos tres modelos para  $A = 0.4$ .



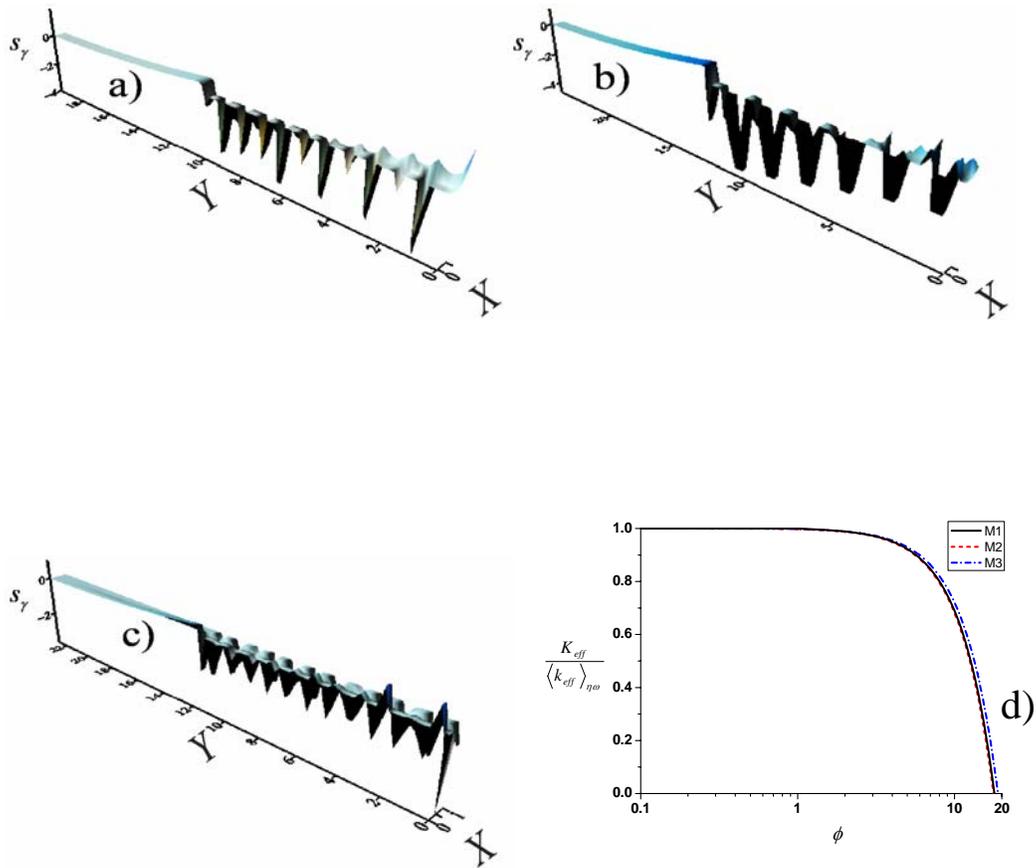
**Figura A-4.5:** Campo de la variable de cerradura  $s_\gamma$  para  $A = 0.5, \phi = 3.25$  obtenidos los modelos del medio poroso, a) centrado en las caras (M1), b) centrado en el cuerpo horizontal (M2), c) centrado en el cuerpo vertical (M3). Comparación del coeficiente efectivo obtenido a partir de estos tres modelos para  $A = 0.5$ .



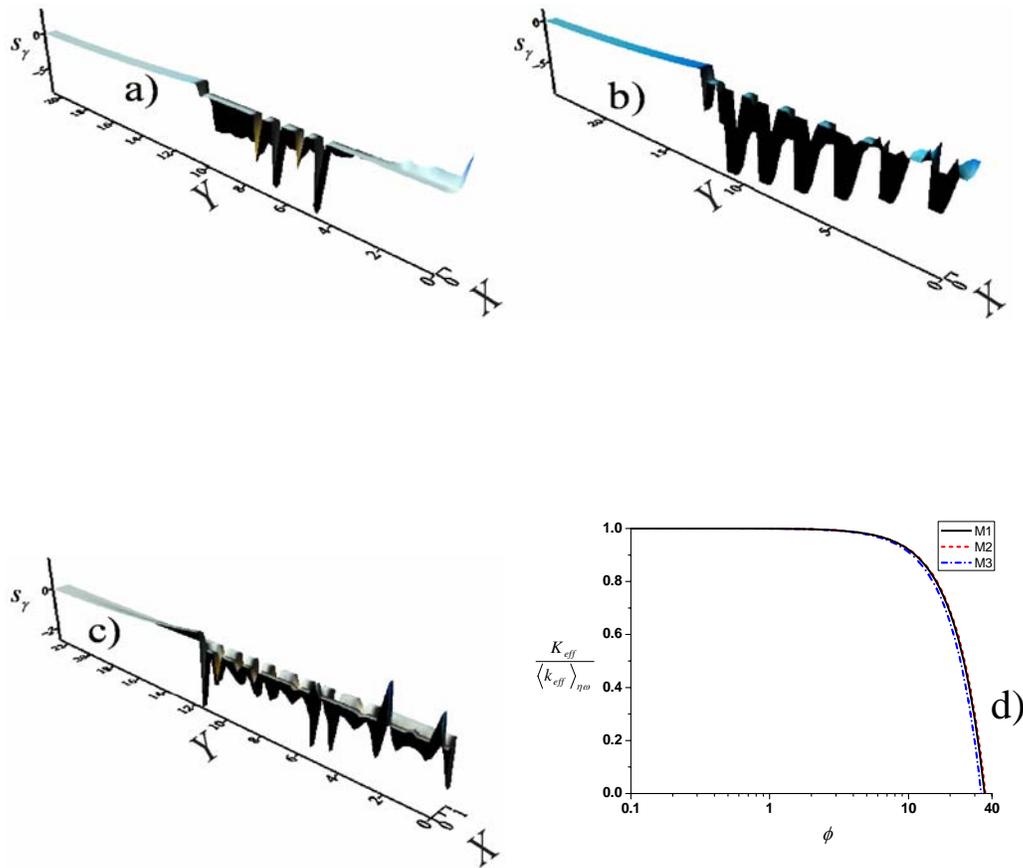
**Figura A-4.6:** Campo de la variable de cerradura  $s_\gamma$  para  $A = 0.6$ ,  $\phi = 4.75$  obtenidos los modelos del medio poroso, a) centrado en las caras (M1), b) centrado en el cuerpo horizontal (M2), c) centrado en el cuerpo vertical (M3). Comparación del coeficiente efectivo obtenido a partir de estos tres modelos para  $A = 0.6$ .



**Figura A-4.7:** Campo de la variable de cerradura  $s_\gamma$  para  $A = 0.7$ ,  $\phi = 7$  obtenidos con los modelos del medio poroso, a) centrado en las caras (M1), b) centrado en el cuerpo horizontal (M2), c) centrado en el cuerpo vertical (M3). Comparación del coeficiente efectivo obtenido a partir de estos tres modelos para  $A = 0.7$ .



**Figura A-4.8:** Campo de la variable de cerradura  $s_\gamma$  para  $A = 0.8, \phi = 11.5$  obtenidos los modelos del medio poroso, a) centrado en las caras (M1), b) centrado en el cuerpo horizontal (M2), c) centrado en el cuerpo vertical (M3). Comparación del coeficiente efectivo obtenido a partir de estos tres modelos para  $A = 0.8$ .



**Figura A-4.9:** Campo de la variable de cerradura  $s_\gamma$  para  $A = 0.9, \phi = 23$  obtenidos con los modelos del medio poroso, a) centrado en las caras (M1), b) centrado en el cuerpo horizontal (M2), c) centrado en el cuerpo vertical (M3). Comparación del coeficiente efectivo obtenido a partir de estos tres modelos para  $A = 0.9$ .



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

# ACTA DE DISERTACIÓN PÚBLICA

No. 00010

CONDICIONES DE FRONTERA PARA EL TRANSPORTE ENTRE MEDIOS MULTIFASICOS

En México, D.F., se presentaron a las 15:00 horas del día 9 del mes de mayo del año 2007 en la Unidad Iztapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana, los suscritos miembros del jurado:

- DR. STEPHEN WHITAKER
- DR. HECTOR FELIPE LOPEZ ISUNZA
- DR. ALBERTO SORIA LOPEZ
- DR. JESUS ANTONIO DEL RIO PORTILLA
- DR. JESUS ALBERTO OCHOA TAPIA

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el último, se reunieron a la presentación de la Disertación Pública cuya denominación aparece al margen, obtención del grado de:

DOCTOR EN CIENCIAS (INGENIERIA QUIMICA)

DE: FRANCISCO JOSE VALDES PARADA



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA  
DIRECCIÓN DE SISTEMAS ESCOLARES

Casa abierta al tiempo

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

*Aprobar*

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

FRANCISCO JOSE VALDES PARADA  
FIRMA DEL ALUMNO

REVISÓ

LIC. JULIO CESAR DE LARA ISASSI  
DIRECTOR DE SISTEMAS ESCOLARES

DIRECTORA DE LA DIVISIÓN DE CBI

DRA. VERONICA MEDINA BAÑUELOS

PRESIDENTE

DR. STEPHEN WHITAKER

VOCAL

DR. HECTOR FELIPE LOPEZ ISUNZA

VOCAL

DR. ALBERTO SORIA LOPEZ

VOCAL

DR. JESUS ANTONIO DEL RIO PORTILLA

SECRETARIO

DR. JESUS ALBERTO OCHOA TAPIA