



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE QUÍMICA

**DISTRIBUCIÓN DE CONCENTRACIONES EN SISTEMAS DE FLUJOS
CORTANTES CON REACCIÓN AUTOCATALÍTICA**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

INGENIERO QUÍMICO

PRESENTA:

ALDO JAVIER GUADARRAMA MENDOZA



MÉXICO D.F.

2014



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE: MANUEL VAZQUEZ ISLAS

VOCAL: RAFAEL HERRERA NAJERA

SECRETARIO: ANGEL ENRIQUE CHAVEZ CASTELLANOS

1er. SUPLENTE: LETICIA VALLE ARIZMENDI

2° SUPLENTE: JUAN PABLO AGUAYO VALLEJO

CIUDAD UNIVERSITARIA, MÉXICO, D.F.:

ASESOR DEL TEMA:

X

Ángel Enrique Chávez Castellanos

SUSTENTANTE:

X

Aldo Javier Guadarrama Mendoza

Nomenclatura

A_1	Argumento de la exponencial dentro de la ecuación III.B.28
A_2	Primer componente de la suma del argumento de la función error complemento dentro de la ecuación III.B.28
A_3	Segundo componente de la suma del argumento de la función error complemento dentro de la ecuación III.B.29
b	Simplificación de constantes definido en la ecuación III.B.24c
C_A	Concentración de la especie A
C_B	Concentración de la especie B
C_{B0}	Concentración inicial de la especie B en la placa inferior
D_{AB}	Coefficiente de difusividad de A en B
Da_I	Primer Número de Damköhler (número adimensional)
Da_{II}	Segundo Número de Damköhler (número adimensional)
D_{BA}	Coefficiente de difusividad de B en A
$erfc$	Función error complemento
f	Concentración adimensional de la especie B
F_0	Simplificación de constantes definido en la ecuación III.B.24d
f_i	Término de fuerza externa de la ecuación de Navier-Stokes
f_x	Término de la fuerza externa para el eje x
f_y	Término de la fuerza externa para el eje y
f_z	Término de la fuerza externa para el eje z
H	Distancia entre placas
h	Simplificación de constantes definido en la ecuación III.B.24a
i	Índice de notación de cualquier vector.
k	Simplificación de constantes definido en la ecuación III.B.24b
k_1	Constante de reacción
n	Número total de componentes
P	Presión del sistema
Pe_M	Péclet de Masa (número adimensional)
R_B	Rapidez de reacción de la especie B
R_{B0}	Rapidez de reacción inicial de la especie B
s	Variable transformada al espacio de Laplace
t	Tiempo
v	Velocidad de la placa superior
v_x	Componente en el eje x del perfil de velocidades
x	Variable asociada con el eje de coordenadas horizontal
y	Variable asociada con el eje de coordenadas vertical
z	Variable asociada con el eje de coordenadas de profundidad
β	Simplificación de constantes definido en la ecuación III.B.7
γ	Variable adimensional asociada con el eje de coordenadas vertical

Γ	Función Gamma
η	Variable de similitud
λ	Término que asocia el fenómeno de reacción química y el cambio en el espacio para el método numérico de diferencias finitas
ξ	Variable adimensional asociada con el eje de coordenadas horizontal
ρ	Densidad del sistema
τ	Variable auxiliar para expresar la integral de la ecuación II.B.56 como función Gamma
Ω	Término que asocia el fenómeno difusivo y el cambio en el espacio para el método numérico de diferencias finitas

Índice

I	Introducción	1
II	Transporte de masa por convección-difusión sin reacción química.....	4
II.A	Obtención del perfil de velocidades	5
II.B	Obtención del Perfil de Concentración del sistema considerando el perfil de velocidades completo.	10
II.C	Obtención del perfil de concentraciones del sistema considerando una velocidad característica constante	21
III	Transporte de masa por convección-difusión con reacción química de primer orden	26
III.A	Obtención del perfil de concentraciones de la especie B considerando el perfil de velocidades completo	26
III.B	Obtención del perfil de concentraciones de la especie B considerando una velocidad constante característica constante.	33
IV	Transporte de masa por convección-difusión con reacción química autocatalítica.....	40
IV.A	Obtención del perfil de concentraciones de la especie B considerando el perfil de velocidades completo	40
IV.B	Obtención del perfil de concentraciones de la especie B considerando una velocidad constante característica constante	43
V	Análisis de resultados.....	45
V.A	Comparación entre Sistemas sin reacción y con reacción química.....	46
V.B	Comparación entre reacción química autocatalítica y reacción de primer orden.....	60
V.C	Influencia de los efectos difusivos y convectivos considerando reacción autocatalítica.	71
V.D	Influencia del perfil de velocidades completo en comparación a los modelos donde sólo se considera una velocidad característica constante.	78
VI	Conclusiones	92
VII	Referencias.....	94
VIII	Anexos.....	96
VIII.A	Anexo 1 Códigos de programas de MATLAB para dar solución numérica con el planteamiento de diferencias finitas	96
VIII.A.1	Resolución de Integral de la ecuación II.B.68.....	96
VIII.A.2	Código de diferencias finitas para el caso de reacción química de primer orden y perfil completo de velocidades	97
VIII.A.3	Código de diferencias finitas para el caso de reacción autocatalítica y considerando el perfil de completo de velocidades.....	102

VIII.A.4	Código de diferencias finitas para el caso de reacción autocatalítica y una velocidad característica constante.	107
VIII.A.5	Código de diferencias finitas para el caso sin reacción química y perfil completo de velocidades.....	112
VIII.B	Anexo 2 Tabla de transformadas de Laplace	117
VIII.C	Anexo 3 Método de Diferencias Finitas	118

I Introducción

Los fenómenos de transporte es el estudio sistemático y unificado de la transferencia de momentum, energía y masa a través de un medio continuo. Para la ingeniería contemporánea, en especial para la Ingeniería Química, es importante el estudio de estos para lograr analizar y comprender el funcionamiento de los distintos equipos que se utilizan en la industria o en los laboratorios.

Dentro de la disciplina de la Ingeniería Química, los fenómenos de transporte son utilizados para el diseño, análisis y la comprensión del mecanismo de operación de diversos equipos de transferencia de energía (como intercambiadores de calor de coraza y tubos, intercambiadores de placas, aletas, etc.), equipos de separación (torres de absorción, torres de destilación, membranas de intercambio iónico, etc.), equipos de bombeo (bombas y compresores) y el más importante para la disciplina, que son los equipos de transformación química (reactores de lecho empacado, reactores tubulares, reactores de tanque agitado, etc.).

En los equipos de transformación química, además del fenómeno químico que ocurre que es la reacción, se presenta un proceso de transferencia de masa, ya sea por los mecanismos de difusión o convección. A partir de un estudio detallado de los mecanismos de transferencia de masa se puede determinar el perfil de concentraciones de una especie química dentro del reactor.

Las propiedades físicas del sistema van a jugar en papel importante como parámetros dentro de la determinación del perfil de concentraciones como son el coeficiente de difusión, la velocidad característica del sistema, la longitud característica del sistema; así como también influye el que se esté llevando una reacción química. La rapidez de reacción dependerá del tipo de mecanismo en el cual se lleve a cabo la reacción química, la constante de reacción, la temperatura en la que se esté llevando a cabo la reacción, etc. Para este trabajo en especial será de mayor interés las reacciones químicas autocatalíticas.

Las reacciones autocatalíticas son aquellas en las que el propio producto actúa como reactivo (Izquierdo, Cunill, Ibarra, Trejo, & Fité, 2004). En un caso general en donde se tiene a la especie A reaccionando con la especie B, pero el producto de estas es la especie B, tenemos una reacción autocatalítica como se muestra en la ecuación I.1. La velocidad de reacción de forma general para la reacción mencionada en la ecuación I.1, se muestra en la ecuación I.2. (Allen, Brindley, & Merkin, 1996)



$$R_B = k_1 C_A C_B^n \quad (I.2)$$

Se encuentran como ejemplos de reacciones autocatalíticas dentro de mecanismos de los siguientes casos:

- Reacción de Belousv-Zhabotinskii (Epstein & Showalter, 1996).
- Reacciones de fermentación debidas a la acción de algún microorganismo (Levenspiel, Ingeniería de las Reacciones Químicas, 2004).
- Hidrólisis de esteres catalizadas por un ácido (Ballesteros-García, Claramunt-Vallespi, Sanz del Castillo, & Teso-Vilar, 2001).
- Oxidación de hidrógeno (Allen, Brindley, & Merkin, 1996) (Gray, Griffiths, & Scott, 1984).
- Reacción yodato-arsenito (Allen, Brindley, & Merkin, 1996) (Karayannis, Tzouwara-Karayanni, & Hadjiioannou, 1974).

El objetivo principal de este trabajo es plantear, analizar, resolver y comparar de forma teórica la distribución de concentraciones en un sistema de flujos cortantes para los siguientes 3 casos: transferencia de masa sin reacción química, transferencia de masa con reacción química de primer orden y transferencia de masa con reacción autocatalítica. Los objetivos secundarios son los siguientes puntos:

- Aplicar métodos analíticos de solución de ecuaciones diferenciales parciales para obtención del perfil de concentraciones en los casos en que sean posibles.
- Aplicar el método numérico de diferencias finitas para la obtención del perfil de concentraciones en los casos en que no se pueda utilizar un método analítico o se complique, apoyado de rutinas o códigos programados en MATLAB.
- Analizar y comparar las soluciones obtenidas para los casos en donde se considera un perfil de concentraciones contra el caso en donde sólo se considera una velocidad característica constante.

Se desarrollará, para cada uno de los casos, dos propuestas de solución, una en donde se tomará en cuenta el perfil de velocidades que se obtendrá del sistema y una segunda propuesta de solución en donde sólo se tomará en cuenta una velocidad constante característica del sistema. Por la naturaleza matemática de la ecuación de conservación de masa por especie química para este caso, se podrá proponer en algunos casos una solución analítica, pero también se proponen soluciones numéricas basadas en el método numérico de diferencias finitas. Estas propuestas de solución se distribuyen a lo largo de los capítulos de esta tesis como se indica:

- Capítulo II. Difusión sin reacción química, propuestas de solución considerando el perfil de velocidades y una velocidad característica constante.
- Capítulo III. Difusión con reacción química con cinética de primer orden, propuestas de solución considerando el perfil de velocidades y una velocidad característica constante.
- Capítulo IV. Difusión con reacción química autocatalítica, propuestas de solución considerando el perfil de velocidades y una velocidad característica constante.

Una vez planteadas las propuestas de solución para todos los casos, se partirá a hacer un análisis comparativo entre ellos. El objetivo principal es observar la influencia de una reacción química autocatalítica en el sistema y observar la diferencia en el comportamiento con respecto a los otros casos.

Para realizar este análisis, se tiene que plantear las soluciones de forma adimensional a partir de variables características o representativas que estén asociadas al sistema en estudio. Planteando los problemas de esta forma se podrá hacer un análisis más general sin importar que no se trate de un caso de reacción específico. Variando el valor de los números adimensionales resultantes en los problemas, se cambiará la influencia de efectos difusivos, convectivos y de la reacción química.

La hipótesis que se plantea es que cuando el valor del primero y segundo números de Damköhler, que es son los números que comparan el efecto de la reacción química contra el efecto difusivo y el convectivo respectivamente, sean menor a uno el efecto de la reacción química autocatalítica será mínimo por lo que a estos valores se podrá desprestigiar la reacción química. Y en contraste se piensa que cuando la reacción química domina sobre los efectos convectivos y difusivos, es decir cuando tanto el primero y segundo números de Damköhler son mayores a uno, las diferencias entre los tres casos serán notorias y vale la pena el tomar en cuenta el término de reacción química.

En segundo plano se analizará si la simplificación que se hace en la propuesta de solución en donde sólo se considera una velocidad característica constante difiere de forma drástica de la solución que considera el perfil de velocidades o si esta simplificación se puede considerar como aceptable.

II Transporte de masa por convección-difusión sin reacción química

El objetivo de este capítulo es plantear el sistema, así como las ecuaciones, en donde se efectuará el fenómeno de difusión, descartando el efecto de una reacción química. El sistema físico en donde se está desarrollando el fenómeno consiste en dos placas paralelas horizontales, separadas una de la otra una distancia H . La placa inferior se encuentra fija, y en ella se sabe que la concentración de la especie B es constante e igual a C_{B0} . La placa superior se encuentra en movimiento a una velocidad constante que se le nombrará v y es impermeable al fluido. En la Figura II.1 se muestra de forma gráfica la ejemplificación del sistema. Entre ambas placas se encuentra un fluido que está compuesta exclusivamente de la especie A y tiene una concentración de C_A .

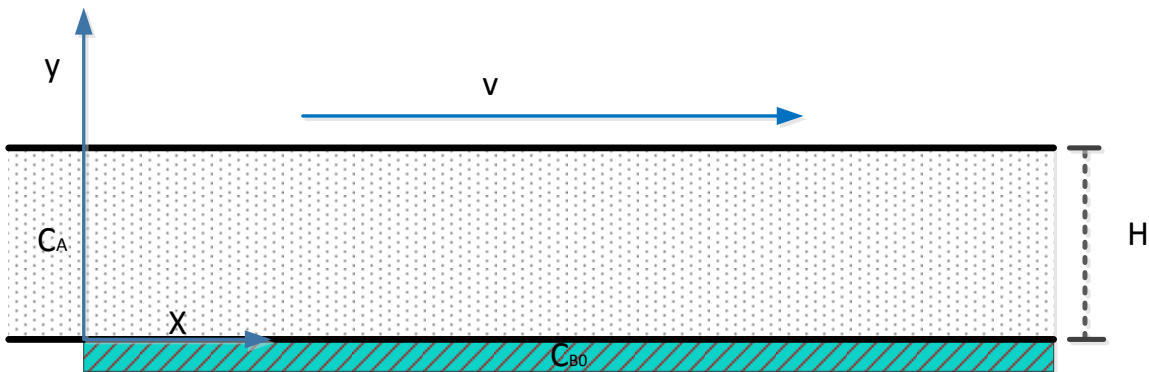


Figura II.1 Sistema con una sola placa en movimiento

Se deben tomar en cuenta las siguientes consideraciones para la resolución del problema:

- Al fluido entre las placas se le debe considerar fluido newtoniano e incompresible.
- Se trata de un problema en estado estacionario, por lo que no es objeto de este trabajo analizar la dependencia del fenómeno con respecto al tiempo.
- Las propiedades físicas de la fase fluida se mantienen constantes, incluyendo también al coeficiente de difusión D_{AB} .
- Se considera que el flujo es laminar.

II.A Obtención del perfil de velocidades

En primera instancia, antes de resolver el problema de transferencia de masa, se obtendrá el perfil de velocidades del sistema. Por el movimiento que se plantea, el perfil de velocidades sólo tendrá su componente en el eje x , en la ecuación II.A.1 se describe cómo es la distribución de velocidades.

$$\vec{v} = (v_x, 0, 0) \quad (\text{II.A.1})$$

La ecuación II.A.2 es la ecuación general de conservación de masa, de esta obtenemos la información útil para la obtención del perfil de velocidades (Bird, Stewart, & Lightfoot, Fenómenos de Transporte, 1976).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_x}{\partial x} + \frac{\partial \rho v_y}{\partial y} + \frac{\partial \rho v_z}{\partial z} = 0 \quad (\text{II.A.2})$$

Partiendo de la ecuación II.A.2, hacemos las simplificaciones pertinentes de acuerdo a las consideraciones que se han planteado. Como el sistema se encuentra en estado estacionario y el fluido es incompresible, y como se describió previamente, no hay movimiento en las componentes de los ejes y y z . Por lo tanto la ecuación se reduce a la ecuación II.A.3. El producto ρv_x representa el flux de masa, por lo tanto el significado físico de la ecuación anterior es que todo el flujo de masa que entra por el eje x , sale.

$$\frac{\partial \rho v_x}{\partial x} = 0 \quad (\text{II.A.3})$$

La ecuación II.A.3 es la derivada parcial de dos funciones. Como la derivada es un operador lineal (Boyce & DiPrima, 2009), se hace uso de la propiedad donde la derivada de dos funciones es igual al producto de la primera función por la derivada de la segunda función más el producto de la segunda función por la derivada de la segunda función. De esta forma se desarrolla la expresión para obtener la ecuación II.A.4.

$$\frac{\partial \rho v_x}{\partial x} = \rho \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_x \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0 \quad (\text{II.A.4})$$

Como se trata de un fluido incompresible, la densidad no varía con la posición, por lo tanto el segundo término de la ecuación II.A.4 tiene un valor de cero. Se muestra esto en la ecuación II.A.5.

$$\frac{\partial \rho}{\partial x} = 0 \quad (\text{II.A.5})$$

Con la información de la ecuación anterior, se puede reducir la ecuación II.A.4 como se muestra la ecuación II.A.6.

$$\rho \frac{\partial v_x}{\partial x} = 0 \quad (\text{II.A.6})$$

En la ecuación II.A.6 se multiplica ambos miembros de la ecuación por el inverso de la densidad, dando como resultado la ecuación II.A.7.

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} = 0 \quad (\text{II.A.7})$$

La ecuación II.A.7 expresa que el componente de la distribución de velocidad en el eje x , no depende de la coordenada x , estas mismas palabras se pueden expresar de forma matemática como se expresa en la ecuación II.A.8.

$$v_x \neq v_x(x) \quad (\text{II.A.8})$$

Tratándose de un fluido newtoniano e incompresible podemos comenzar la propuesta de solución partir de la ecuación de Navier-Stokes que se muestra en la ecuación II.A.9 (Bird, Stewart, & Lightfoot, Fenómenos de Transporte, 1976).

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} + \rho v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_k \partial x_k} + \rho g_i \quad (\text{II.A.9})$$

Pasamos la ecuación II.A.9 de notación de índices a la forma desarrollada, obteniendo 3 ecuaciones para cada una de las coordenadas cartesianas como se indica en el conjunto de ecuaciones II.A.10.

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial v_x}{\partial t} + \rho \left(v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) & \quad (\text{II.A.10a}) \\ & = -\frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) + \rho g_x \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial v_y}{\partial t} + \rho \left(v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) & \quad (\text{II.A.10b}) \\ & = -\frac{\partial P}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right) + \rho g_y \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial v_z}{\partial t} + \rho \left(v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) & \quad (\text{II.A.10c}) \\ & = -\frac{\partial P}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) + \rho g_z \end{aligned}$$

Siendo que se trata de un problema en estado estacionario, la velocidad del sistema no depende del tiempo. Por lo tanto la derivada parcial de la velocidad con respecto al tiempo tiene un valor de cero, como se muestra en el conjunto de ecuaciones II.A.11.

$$\frac{\partial v_x}{\partial t} = 0 \quad (\text{II.A.11a})$$

$$\frac{\partial v_y}{\partial t} = 0 \quad (\text{II.A.11b})$$

$$\frac{\partial v_z}{\partial t} = 0 \quad (\text{II.A.11c})$$

Considerando lo enunciado en el conjunto de ecuaciones II.A.11, las ecuaciones de conservación de movimiento se reducen como se enuncia en el conjunto de ecuaciones II.A.12.

$$\rho \left(v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) + \rho g_x \quad (\text{II.A.12a})$$

$$\rho \left(v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right) + \rho g_y \quad (\text{II.A.12b})$$

$$\rho \left(v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) + \rho g_z \quad (\text{II.A.12c})$$

Para este sistema en particular, la aceleración de la gravedad se define como se muestra en el conjunto de ecuaciones II.A.13.

$$g_x = 0 \quad (\text{II.A.13a})$$

$$g_y = -g \quad (\text{II.A.13b})$$

$$g_z = 0 \quad (\text{II.A.13c})$$

Sustituyendo el valor de los componentes de la aceleración de la gravedad del conjunto de ecuaciones II.A.13 en su respectiva ecuación, se obtiene el conjunto de ecuaciones II.A.14.

$$\rho \left(v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) \quad (\text{II.A.14a})$$

$$\rho \left(v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right) - \rho g \quad (\text{II.A.14b})$$

$$\rho \left(v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) \quad (\text{II.A.14c})$$

La ecuación de interés para este caso es la ecuación II.A.14a, ya que describe el movimiento en dirección del eje x . De la ecuación II.A.1, se sabe que los componentes del perfil de velocidades en el eje y y en el eje z son igual a cero. De la ecuación de II.A.8, se sabe que la dependencia del componente v_x del perfil de velocidades no depende de x , por lo tanto la derivada parcial de la velocidad en el eje x con respecto a x es igual a cero por continuidad como se muestra en la ecuación II.A.15.

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} = 0 \quad (\text{II.A.15})$$

La ecuación II.A.14a, tomando en cuenta las consideraciones de las ecuaciones II.A.1, II.A.8 y II.A.15, se puede reducir a la ecuación II.A.16.

$$0 = -\frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) \quad (\text{II.A.16})$$

El movimiento del fluido dentro de las placas es consecuencia del movimiento de la placa superior, no existe ningún gradiente de presiones que mueva al fluido, por lo tanto este término es igual a cero, como se presenta en la ecuación II.A.17.

$$\frac{\partial P}{\partial x} = 0 \quad (\text{II.A.17})$$

Tomando en cuenta la ecuación anterior, la ecuación II.A.16 se puede reducir en la ecuación II.A.18. Multiplicando la ecuación II.A.18 en ambos lados por el inverso de la viscosidad, obteniendo como resultado la ecuación II.A.19.

$$\mu \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) = 0 \quad (\text{II.A.18})$$

$$\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} = 0 \quad (\text{II.A.19})$$

La componente de la velocidad en el eje x no depende de la coordenada x como se menciona en la ecuación II.A.8, además se desprecia la variación del movimiento de x con respecto al eje z . Por lo tanto la ecuación II.A.19 se reduce a la ecuación II.A.20.

$$\frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} = 0 \quad (\text{II.A.20})$$

De la figura II.1 y de la descripción del sistema, se puede obtener las condiciones de frontera. El conjunto de ecuaciones II.A.21 nos muestra las condiciones de frontera que debe de respetar en el modelo de conservación de movimiento:

$$v_x(x, 0) = 0 \quad (\text{II.A.21a})$$

$$v_x(x, H) = v \quad (\text{II.A.21b})$$

La ecuación II.A.20 ya solo depende de una variable, por lo tanto se puede expresar como una ecuación diferencial ordinaria como se muestra en la ecuación II.A.22. Se procederá a resolver la ecuación por medio del método de variable separable. La ecuación II.A.22, se pone en su forma diferencial como se muestra en la ecuación II.A.23. Se integra la ecuación de ambos lados, como se muestra en la ecuación II.A.24, y se obtiene el resultado que muestra la ecuación II.A.25. La ecuación anterior, de igual forma se pone en su forma diferencial como se muestra en la ecuación II.A.26, se integra como se muestra en la ecuación II.A.27 y la solución es la ecuación II.A.28

$$\frac{d^2 v_x}{dy^2} = 0 \quad (\text{II.A.22})$$

$$d\left(\frac{dv_x}{dy}\right) = c_1 \quad (\text{II.A.23})$$

$$\int d\left(\frac{dv_x}{dy}\right) = c_1 \quad (\text{II.A.24})$$

$$\frac{dv_x}{dy} = c_1 \quad (\text{II.A.25})$$

$$dv_x = c_1 dy \quad (\text{II.A.26})$$

$$\int dv_x = \int c_1 dy \quad (\text{II.A.27})$$

$$v_x = c_1 y + c_2 \quad (\text{II.A.28})$$

A la ecuación II.A.28 se le aplica la condición de frontera expresada en la ecuación II.A.21a, se sustituyen los valores como se muestra en la ecuación II.A.29, dando como resultado la ecuación II.A.30 que inmediatamente se le va a aplicar la condición de frontera expresada en la ecuación II.A.21b, sustituyendo como se indica en la ecuación II.A.31. El perfil de velocidades resultante esta expresada la ecuación II.A.32.

$$0 = c_1(0) + c_2 \Rightarrow c_2 = 0 \quad (\text{II.A.29})$$

$$v_x = c_1 y \quad (\text{II.A.30})$$

$$v = c_1 H \Rightarrow c_1 = \frac{v}{H} \quad (\text{II.A.31})$$

$$v_x = \frac{v}{H} y \quad (\text{II.A.32})$$

II.B Obtención del perfil de Concentración del sistema considerando el perfil de velocidades

El siguiente paso es encontrar el perfil de concentraciones de la especie B, partiendo de un balance de materia por componente. De acuerdo a la figura II.1, entre las placas del sistema hay un fluido que su composición consiste de la especie A, y en la placa inferior, en la coordenada cero del eje y y a partir de la coordenada cero del eje x , se encuentra una concentración constante de la especie B. La cantidad de B que se disuelve no altera las propiedades de A, y B es poco soluble en A.

Con las consideraciones tomadas en cuenta para la obtención del perfil de velocidades, se partirá de la ecuación de continuidad para coordenadas rectangulares con densidad y coeficiente de difusión constante mostrada en la Ecuación II.B.1. (Bird, Stewart, & Lightfoot, Fenómenos de Transporte, 1976)

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} + \left(v_x \frac{\partial C_B}{\partial x} + v_y \frac{\partial C_B}{\partial y} + v_z \frac{\partial C_B}{\partial z} \right) = D_{AB} \left(\frac{\partial^2 C_B}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_B}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_B}{\partial z^2} \right) + R_B \quad (\text{II.B.1})$$

En este capítulo se está tratando con un transporte de masa sin ninguna reacción química, mostrando la condición en la ecuación II.B.2. El sistema se encuentra en estado estacionario, como se muestra en la condición II.B.3. De la ecuación II.A.1 sabemos que el perfil de velocidades sólo tiene componente en x .

$$R_B = 0 \quad (\text{II.B.2})$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = 0 \quad (\text{II.B.3})$$

Con las condiciones mencionadas, se puede reducir la ecuación II.B.1 a la ecuación II.B.4.

$$v_x \frac{\partial C_B}{\partial x} = D_{AB} \left(\frac{\partial^2 C_B}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_B}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_B}{\partial z^2} \right) \quad (\text{II.B.4})$$

Observando la figura II.1, se puede deducir que el efecto de la difusión será mayor en el eje y con respecto al eje x . La razón principal es que el eje x se encontrará mayormente influenciado por el efecto convectivo debido a que la velocidad del fluido se encuentra en esa dirección. Como se muestra en la expresión II.B.5, el efecto difusivo va a ser mucho mayor en el eje y . Por el otro lado, como se está estudiando el comportamiento del sistema en el plano, se ignorará el efecto sobre el eje z , como se muestra en la ecuación II.B.6.

$$\frac{\partial^2 C_B}{\partial x^2} \ll \frac{\partial^2 C_B}{\partial y^2} \quad (\text{II.B.5})$$

$$\frac{\partial^2 C_B}{\partial z^2} = 0 \quad (\text{II.B.6})$$

La ecuación II.B.4 queda reducida a la ecuación II.B.7. A partir de esta ecuación se proponen dos métodos de solución de la ecuación para obtener el perfil de concentraciones.

$$v_x \frac{\partial C_B}{\partial x} = D_{AB} \frac{\partial^2 C_B}{\partial y^2} \quad (\text{II.B.7})$$

El primer método de solución, comprende en un método de cambio de variable, tomando en cuenta el cambio de la velocidad con respecto a su posición en el eje y como se describe en el perfil de velocidades calculado en la sección, descrito en la ecuación II.A.32. El segundo método que se está presentando, se utilizará la transformada de Laplace para simplificar la ecuación de una ecuación diferencial parcial a una ecuación diferencial ordinaria en el espacio de Laplace, esto sólo lo podemos hacer suponiendo que la velocidad asociada al fenómeno convectivo es constante en el sistema.

Las condiciones de frontera, de acuerdo a la figura II.1, son las enunciadas en el conjunto de ecuaciones II.B.8 y la ecuación II.B.9.

$$C_B(x, 0) = C_{B0} \quad (\text{II.B.8a})$$

$$\frac{\partial C_B(x, H)}{\partial y} = 0 \quad (\text{II.B.8b})$$

$$C_B(0, y) = 0 \quad (\text{II.B.9})$$

Resolviendo por el primer método, el cambio de variable propuesto para este problema es pasar de un problema de tres variables a uno de dos, combinando dos de las variables originales en una sola. Estas variables propuestas son adimensionales, se enuncian en la ecuación II.B.10 y II.B.11 (Bird, Stewart, & Lightfoot, Transport Phenomena, 2002). La variable propuesta en la ecuación II.B.10 se trata de una variable de similitud que combina en una sola variable dos variables en una sola, y esto es posible gracias al principio de similitud que se deriva a partir de condiciones de similitud geométrica (Logan, 2008).

$$\eta = y \left(\frac{v}{9 H D_{AB} x} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{II.B.10})$$

$$f(\eta) = \frac{C_B}{C_{B0}} \quad (\text{II.B.11})$$

Por medio de la regla de la cadena, se cambian las variables de la ecuación II.B.7 a las propuestas, como se muestra en el conjunto de ecuaciones II.B.12.

$$\frac{\partial C_B}{\partial x} = \frac{dC_B}{df} \cdot \frac{df}{d\eta} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x} \quad (\text{II.B.12a})$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial y} = \frac{dC_B}{df} \cdot \frac{df}{d\eta} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} \quad (\text{II.B.12b})$$

$$\frac{\partial^2 C_B}{\partial y^2} = \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{dC_B}{df} \cdot \frac{df}{d\eta} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \quad (\text{II.B.12c})$$

Se obtienen las derivadas de las nuevas variables para después poder sustituirlas en la ecuación II.B.7. En el conjunto de ecuaciones II.B.12 se tiene el cálculo de las derivadas de la variable de similitud η con respecto a x y y como se muestra en las ecuaciones II.B.13 y II.B.14 respectivamente, así como de la variable de la concentración de B con respecto a la concentración adimensional, como se muestra en la ecuación II.B.15.

$$\frac{\partial \eta}{\partial x} = \left(\frac{v}{9 \cdot H \cdot D_{AB}} \right)^{\frac{1}{3}} y \left(-\frac{1}{3} x^{-\frac{4}{3}} \right) = -\frac{1}{3} \left(\frac{v}{9 \cdot H \cdot D_{AB} \cdot x} \right)^{\frac{1}{3}} y \frac{1}{x} \quad (\text{II.B.13})$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial y} = \left(\frac{v}{9 \cdot H \cdot D_{AB} \cdot x} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{II.B.14})$$

$$\frac{dC_B}{df} = C_{B0} \quad (\text{II.B.15})$$

En primera instancia se sustituyen las derivadas de las ecuaciones II.B.13, II.B.14 y II.B.15 en los términos diferenciales de la ecuación II.B.7 dando como resultado las ecuaciones II.B.16, II.B.17 y II.B.18 respectivamente.

$$\frac{\partial C_B}{\partial x} = -C_{B0} \frac{1}{3} \left(\frac{v}{9 \cdot H \cdot D_{AB} \cdot x} \right)^{\frac{1}{3}} y \frac{1}{x} \frac{df}{d\eta} \quad (\text{II.B.16})$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial y} = C_{B0} \left(\frac{v}{9 \cdot H \cdot D_{AB} \cdot x} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{df}{d\eta} \quad (\text{II.B.17})$$

$$\frac{\partial^2 C_B}{\partial y^2} = C_{B0} \left(\frac{v}{9 \cdot H \cdot D_{AB} \cdot x} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{d^2 f}{d\eta^2} \quad (\text{II.B.18})$$

Se sustituye los valores de las ecuaciones II.B.16 y II.B.18 en la ecuación II.B.7 dando como resultado la ecuación II.B.19.

$$-v_x C_{B0} \frac{1}{3} \left(\frac{v}{9 \cdot H \cdot D_{AB} \cdot x} \right)^{\frac{1}{3}} y \frac{1}{x} \frac{df}{d\eta} = D_{AB} C_{B0} \left(\frac{v}{9 \cdot H \cdot D_{AB} \cdot x} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{d^2 f}{d\eta^2} \quad (\text{II.B.19})$$

De la ecuación II.A.32 se sustituye el valor de la velocidad v_x para obtener la ecuación II.B.20. Se despeja la variable y de la expresión de la variable de similitud η , que se expresa en la ecuación II.B.21.

$$-\frac{v}{H} y C_{B0} \frac{1}{3} \left(\frac{v}{9 \cdot H \cdot D_{AB} \cdot x} \right)^{\frac{1}{3}} y \frac{1}{x} \frac{df}{d\eta} = D_{AB} C_{B0} \left(\frac{v}{9 \cdot H \cdot D_{AB} \cdot x} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{d^2 f}{d\eta^2} \quad (\text{II.B.20})$$

$$y = \eta \left(\frac{v}{9 H D_{AB} x} \right)^{-\frac{1}{3}} \quad (\text{II.B.21})$$

Se sustituye sólo una variable y de la ecuación, la otra se utilizará para completar una variable de similitud η . La ecuación resultante será la ecuación II.B.22. Se acomodan términos comunes y se divide la ecuación entre C_{B0} , el resultado se muestra en la ecuación II.B.23.

$$-\frac{v}{H} \eta \left(\frac{v}{9 H D_{AB} x} \right)^{-\frac{1}{3}} C_{B0} \frac{1}{3} \frac{1}{x} \eta \frac{df}{d\eta} = D_{AB} C_{B0} \left(\frac{v}{9 \cdot H \cdot D_{AB} \cdot x} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{d^2 f}{d\eta^2} \quad (\text{II.B.22})$$

$$-\frac{1}{3} \frac{v}{H} \eta^2 \left(\frac{v}{9 H D_{AB} x} \right)^{-\frac{1}{3}} \frac{1}{x} \frac{df}{d\eta} = D_{AB} \left(\frac{v}{9 \cdot H \cdot D_{AB} \cdot x} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{d^2 f}{d\eta^2} \quad (\text{II.B.23})$$

Se multiplica toda la ecuación por el término $\left(\frac{v}{9 H D_{AB} x} \right)^{\frac{1}{3}}$, obteniendo como resultado la ecuación II.B.24. Se multiplica nuevamente por nueve toda la ecuación anterior y también se eliminan

términos semejantes como D_{AB} , x , v , H ; el resultado se ve plasmado en la ecuación II.B.25. Y acomodando la ecuación de forma algebraica se obtiene la ecuación II.B.26, que es una ecuación diferencial ordinaria.

$$-\frac{1}{3} \frac{v}{H} \eta^2 \frac{1}{x} \frac{df}{d\eta} = D_{AB} \frac{v}{9 H D_{AB} x} \frac{d^2 f}{d\eta^2} \quad (\text{II.B.24})$$

$$-3 \eta^2 \frac{df}{d\eta} = \frac{d^2 f}{d\eta^2} \quad (\text{II.B.25})$$

$$\frac{d^2 f}{d\eta^2} + 3 \eta^2 \frac{df}{d\eta} = 0 \quad (\text{II.B.26})$$

Para resolver la ecuación II.B.26, se utiliza el método de reducción de orden. Para la reducción de orden, se propone una variable temporal como se muestra en la ecuación II.B.27. Como la variable ϕ es equivalente a la primera derivada de nuestra variable f , la derivada de ϕ es igual a la segunda derivada de f , tal como se expresa en la ecuación II.B.28.

$$\frac{df}{d\eta} = \phi \quad (\text{II.B.27})$$

$$\frac{d^2 f}{d\eta^2} = \frac{d\phi}{d\eta} \quad (\text{II.B.28})$$

Se sustituye la nueva variable ϕ en la ecuación II.B.26, el resultado se muestra en la ecuación II.B.29. Esta última se puede resolver mediante separación de variables. Se divide la ecuación II.B.29 entre ϕ y se resta de ambos lados de la ecuación el término de $3\eta^2$ como se muestra en la ecuación II.B.30. Y después se escribe la ecuación en su forma diferencial como se muestra en la ecuación II.B.31.

$$\frac{d\phi}{d\eta} + 3 \eta^2 \phi = 0 \quad (\text{II.B.29})$$

$$\frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{d\eta} = -3 \eta^2 \quad (\text{II.B.30})$$

$$\frac{1}{\phi} d\phi = -3 \eta^2 d\eta \quad (\text{II.B.31})$$

La ecuación II.B.31 se puede integrar de ambos lados como se muestra en la ecuación II.B.32, se resuelven las integrales y se obtiene la ecuación II.B.33. A la ecuación anterior se resta de ambos lados el logaritmo natural de la constante c_1 como se muestra en la ecuación II.B.34. Por las propiedades de los logaritmos donde la resta de los logaritmos de dos argumentos es igual

al logaritmo del cociente de los argumentos, concepto que se utiliza en la ecuación II.B.34, y da como resultado la ecuación II.B.35. Se utiliza la operación inversa del logaritmo natural, que es la función exponencial en ambos lados de la ecuación y se obtiene la ecuación II.B.36. Se multiplica toda la ecuación por la constante c_1 dando como resultado la ecuación II.B.37.

$$\int \frac{1}{\phi} d\phi = \int -3\eta^2 d\eta \quad (\text{II.B.32})$$

$$\ln\phi = -\eta^3 + \ln c_1 \quad (\text{II.B.33})$$

$$\ln\phi - \ln c_1 = -\eta^3 \quad (\text{II.B.34})$$

$$\ln \frac{\phi}{c_1} = -\eta^3 \quad (\text{II.B.35})$$

$$\frac{\phi}{c_1} = e^{-\eta^3} \quad (\text{II.B.36})$$

$$\phi = c_1 e^{-\eta^3} \quad (\text{II.B.37})$$

La ecuación II.B.37 es una solución parcial al problema, ya que se tiene que solucionar la ecuación diferencial original que es la ecuación II.B.26. Utilizando las igualdades plasmadas en las ecuaciones II.B.27 y II.B.28 se regresa a la ecuación II.B.37 a las variables requeridas para resolver el problema, como se muestra en la ecuación II.B.38. Se escribe la ecuación anterior en su forma diferencial para resolver la ecuación diferencial, y da como resultado la ecuación II.B.39. Se integra la ecuación anterior de ambos lados obteniendo la ecuación II.B.40, del lado izquierdo la integral es muy sencilla, sin embargo la integral del lado derecho no tiene una solución, por lo tanto esta solución general la expresamos como está en la ecuación II.B.41.

$$\frac{df}{d\eta} = c_1 e^{-\eta^3} \quad (\text{II.B.38})$$

$$df = c_1 e^{-\eta^3} d\eta \quad (\text{II.B.39})$$

$$\int df = c_1 \int e^{-\eta^3} d\eta \quad (\text{II.B.40})$$

$$f = c_1 \int_0^\eta e^{-\eta^3} d\eta + c_2 \quad (\text{II.B.41})$$

En las ecuaciones II.B.8 y II.B.9 se expresan las condiciones de frontera, a estas también se les tiene que aplicar el cambio de variable. La condición de frontera que se expresa en la ecuación II.B.8b, se puede interpretar que no hay cambio de concentración en el límite superior del sistema en donde la placa se encuentra en movimiento. Se puede expresar también, que mientras más lejos de la placa nos encontremos, como ya no va a existir variación, es decir, se tiene una concentración C_B constante. Para facilitar la combinación que mencionaremos a continuación, se establece que la concentración constante será de cero, por lo tanto se puede expresar este límite de frontera como se encuentra en la ecuación II.B.42.

$$C_B(x, y \rightarrow \infty) = 0 \quad (\text{II.B.42})$$

De esta forma se puede dar inicio a cambiar de variables las condiciones de frontera. La condición de frontera de la ecuación II.B.8a, al realizar el cambio de variable queda como está indicado en la ecuación II.B.43. De las condiciones de frontera en II.B.42 y II.B.9, al realizar el cambio de variable, se obtiene una sola condición de frontera, que es la que se plasma en la ecuación II.B.44.

$$f(0) = 1 \quad (\text{II.B.43})$$

$$f(\eta \rightarrow \infty) = 0 \quad (\text{II.B.44})$$

Evaluando la condición de frontera II.B.44 en la ecuación II.B.41, se tiene como resultado la ecuación II.B.45. De la ecuación anterior se resta de ambos lados c_2 y además multiplicamos la ecuación por uno negativo (-1), y se obtiene el valor de c_2 como se muestra en la ecuación II.B.46.

$$0 = c_1 \int_0^{\infty} e^{-\eta^3} d\eta + c_2 \quad (\text{II.B.45})$$

$$c_2 = -c_1 \int_0^{\infty} e^{-\eta^3} d\eta \quad (\text{II.B.46})$$

Se sustituye el valor de la constante c_2 de la ecuación II.B.46 en la ecuación de II.B.41, obteniendo la ecuación II.B.47. De la ecuación anterior se puede factorizar la constante c_1 del lado izquierdo de la ecuación, obteniendo la ecuación II.B.48; de esta ecuación también del lado izquierdo se factoriza un uno negativo (-1), obteniendo la ecuación II.B.49.

$$f = c_1 \int_0^{\eta} e^{-\eta^3} d\eta - c_1 \int_0^{\infty} e^{-\eta^3} d\eta \quad (\text{II.B.47})$$

$$f = c_1 \left(\int_0^{\eta} e^{-\eta^3} d\eta - \int_0^{\infty} e^{-\eta^3} d\eta \right) \quad (\text{II.B.48})$$

$$f = -c_1 \left(\int_0^{\infty} e^{-\eta^3} d\eta - \int_0^{\eta} e^{-\eta^3} d\eta \right) \quad (\text{II.B.49})$$

Ahora se evalúa la condición de frontera II.B.43 en la ecuación II.B.49, se obtiene la ecuación II.B.50. Cualquier integral evaluada tanto en límites superiores como inferiores en el mismo punto es cero, por eso es cero el valor de la segunda integral, obteniendo la ecuación II.B.51. Se divide la ecuación por la integral valuada de cero a infinito de la función exponencial elevada a menos η^3 , y multiplicamos toda la ecuación por uno negativo (-1), obteniendo el valor de la constante c_1 descrita en la ecuación II.B.52

$$1 = -c_1 \left(\int_0^{\infty} e^{-\eta^3} d\eta - \int_0^0 e^{-\eta^3} d\eta \right) \quad (\text{II.B.50})$$

$$1 = -c_1 \left(\int_0^{\infty} e^{-\eta^3} d\eta \right) \quad (\text{II.B.51})$$

$$c_1 = -\frac{1}{\int_0^{\infty} e^{-\eta^3} d\eta} \quad (\text{II.B.52})$$

Se sustituye el valor de la constante c_1 como se expresa en la ecuación II.B.52 en la ecuación II.B.49, obteniendo la ecuación II.B.53. Esta ecuación se puede simplificar más, al estarse restando integrales de la misma función pero de diferentes límites de valuación, se puede hacer de esta resta de integrales una misma integral. Viéndolo de forma geométrica, al restar las integrales, se está restando el área que va de cero a η del área de va de cero a infinito, por lo tanto solo se está sumando el área que va de η a infinito. La ecuación simplificada se puede observar en la ecuación II.B.54

$$f = -\left(-\frac{1}{\int_0^{\infty} e^{-\eta^3} d\eta} \right) \left(\int_0^{\infty} e^{-\eta^3} d\eta - \int_0^{\eta} e^{-\eta^3} d\eta \right) \quad (\text{II.B.53})$$

$$f = \frac{\int_{\eta}^{\infty} e^{-\eta^3} d\eta}{\int_0^{\infty} e^{-\eta^3} d\eta} \quad (\text{II.B.54})$$

La integral que se encuentra en el divisor de la ecuación II.B.54, se puede expresar en términos de la función Gamma. La definición de la función Gamma es la que se encuentra en la ecuación II.B.55 (Abramowitz & Stegun, 1972).

$$\Gamma(n) = \int_0^{\infty} \tau^{n-1} e^{-\tau} d\tau \quad (\text{II.B.55})$$

Bajo un cambio de variable se transforma la integral que se muestra en la ecuación II.B.56 a una integral en términos de la definición de la función Gamma. El cambio de variable propuesto es el que se muestra en la ecuación II.B.57. De la ecuación anterior se obtiene la diferencial de la nueva variable τ como se muestra en la ecuación II.B.58, se despeja la diferencial $d\eta$, como se muestra en la ecuación II.B.59. Para completar el cambio de variable, se debe sustituir el valor de η^2 en términos de la variable τ , para ello se eleva la ecuación II.B.57 al exponente $\frac{2}{3}$ y se obtiene la ecuación II.B.60. Se sustituye la ecuación II.B.60 en la ecuación II.B.59 y obtenemos la ecuación II.B.61.

$$\int_0^{\infty} e^{-\tau^3} d\eta \quad (\text{II.B.56})$$

$$\tau = \eta^3 \quad (\text{II.B.57})$$

$$d\tau = 3\eta^2 d\eta \quad (\text{II.B.58})$$

$$d\eta = \frac{d\tau}{3\eta^2} \quad (\text{II.B.59})$$

$$\eta^2 = \tau^{\frac{2}{3}} \quad (\text{II.B.60})$$

$$d\eta = \frac{d\tau}{3\tau^{\frac{2}{3}}} \quad (\text{II.B.61})$$

Se sustituyen las ecuaciones II.B.57 y II.B.61 a los términos correspondientes en la ecuación II.B.56, con un poco de algebra se acomoda la expresión para dar como resultado la ecuación II.B.62. Por la propiedad del operador lineal de la integral, que dice que la integral de una función multiplicada por una constante es igual a la constante multiplicada por la integral de la función, de tal forma que queda la ecuación II.B.63. Con la estructura parecida a la que tiene la ecuación II.B.55, se procede a calcular el valor de n , como se muestra en la ecuación II.B.64. Conociendo este valor se puede sustituir la ecuación II.B.63 por la ecuación II.B.65

$$\int_0^{\infty} \frac{1}{3} \tau^{-\frac{2}{3}} e^{-\tau} d\tau \quad (\text{II.B.62})$$

$$\frac{1}{3} \int_0^{\infty} \tau^{-\frac{2}{3}} e^{-\tau} d\tau \quad (\text{II.B.63})$$

$$n - 1 = -\frac{2}{3} \Rightarrow n = \frac{1}{3} \quad (\text{II.B.64})$$

$$\frac{1}{3} \Gamma\left(\frac{1}{3}\right) \quad (\text{II.B.65})$$

En la ecuación II.B.66 (Abramowitz & Stegun, 1972) muestra una relación general que podemos utilizar para simplificar la ecuación II.B.65, que al sustituirla da por resultado la ecuación II.B.67

$$n\Gamma(n) = \Gamma(n + 1) \quad (\text{II.B.66})$$

$$\int_0^{\infty} e^{-\eta^3} d\eta = \Gamma\left(\frac{4}{3}\right) \quad (\text{II.B.67})$$

Se sustituye la ecuación II.B.67 en la ecuación II.B.54, obteniendo así la ecuación II.B.68. El valor numérico de la función gamma de $\frac{4}{3}$ se conoce y se reporta con un valor aproximado de 0.892979511 (Abramowitz & Stegun, 1972).

$$f = \frac{\int_0^{\infty} e^{-\eta^3} d\eta}{\Gamma\left(\frac{4}{3}\right)} \quad (\text{II.B.68})$$

Para poder evaluar la ecuación II.B.68, se desarrolló un código de MATLAB en donde por medio del método de integración de Simpson $\frac{1}{3}$ (ver código de la sección VIII.A.1) para la integración de a integral del punto deseado a infinito la función $e^{-\eta^3}$. Siendo este método utilizado comúnmente para integrales con límites finitos, se realizaron varias pruebas y se determinó que con el límite igual a 9, se obtenía un resultado válido para el número de cifras significativas utilizadas. Para probar el código, se utilizó la integración de la función de cero a infinito como lo establece la igualdad de la función gamma de $\frac{4}{3}$ como se muestra en la ecuación II.B.67, y el valor que da como resultado es de 0.89298 por redondeo del programa. Para tener resultados congruentes se utilizará el valor del 0.89298, que coincide con el valor reportado redondeado a 5 cifras significativas.

Para poder facilitar el análisis numérico y físico, se propone escribir el cambio de variable de la ecuación II.B.10 en función de números adimensionales asociados con el fenómeno de transferencia de masa. Dentro de la raíz cúbica, multiplicamos por la unidad expresada en forma

del cociente $\frac{H^2}{H^2}$ como se muestra en la ecuación II.B.69 De la ecuación anterior se asocian las constantes H en el denominador en un sólo término, mientras que en el numerador se separa el término H y también se separa en otro cociente el término de x como está indicado en la ecuación II.B.70. En la ecuación anterior se puede notar que tenemos la estructura del número de Péclet de masa, que es el número adimensional donde se puede comparar la influencia entre el fenómeno difusivo y el fenómeno convectivo como se muestra en su definición en la ecuación II.B.70. En el numerador se compone del término asociado al fenómeno convectivo compuesto de una velocidad característica, que en este caso es la velocidad de la placa superior, y de una longitud característica, que en este caso es la distancia entre las placas; en el denominador se presenta el término asociado al fenómeno difusivo compuesto del coeficiente de difusión entre la especie A y B.

$$\eta = y \left(\frac{v}{9 H D_{AB} x} \frac{H^2}{H^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{II.B.69})$$

$$\eta = y \left(\frac{v H}{9 D_{AB}} \frac{H}{x H^3} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{II.B.70})$$

$$Pe_M = \frac{v H}{D_{AB}} \quad (\text{II.B.71})$$

Sustituyendo la ecuación II.B.71 en la ecuación II.B.70, se obtiene la ecuación II.B.72. De la ecuación anterior, sale de la raíz cubica el término $\frac{1}{H^3}$ solamente como $\frac{1}{H}$, obteniendo la ecuación II.B.73. Proponemos dos variables adimensionales asociadas a los ejes y y x , las cuales se plasman en las ecuaciones II.B.74 y II.B.75.

$$\eta = y \left(\frac{Pe_M}{9} \frac{H}{x H^3} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{II.B.72})$$

$$\eta = \frac{y}{H} \left(\frac{Pe_M}{9} \frac{H}{x} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{II.B.73})$$

$$\gamma = \frac{y}{H} \quad (\text{II.B.74})$$

$$\xi = \frac{x}{H} \quad (\text{II.B.75})$$

Finalmente se sustituyen las ecuaciones II.B.74 y II.B.75 en la ecuación II.B.73, para obtener la solución de forma adimensional, con la que se realizará el análisis del problema, esta solución se indica en la ecuación II.B.76

$$\eta = \gamma \left(\frac{Pe_M}{9} \frac{1}{\xi} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{II.B.76})$$

II.C Obtención del perfil de concentraciones del sistema considerando una velocidad característica constante

La segunda propuesta para dar solución a la ecuación diferencial requiere suponer que la velocidad del sistema es constante y está asociada al sistema. Partiendo de la ecuación II.B.7, sabiendo que v_x es constante e igual a la velocidad de la placa superior, como se muestra en la ecuación II.C.1, se elige resolverla a través del método de transformada de Laplace. Como es constante, a la ecuación II.B.7 la se multiplica por el inverso de v , dando como resultado la ecuación II.C.2. Para facilitar el álgebra el cociente del coeficiente de difusión entre la velocidad en x , lo se convierte en la variable alfa α como se indica en la ecuación II.C.3. Se sustituye el cociente por alfa en la ecuación II.C.2 y se resta de ambos lados la derivada de la concentración con respecto a la variable x de ambos lados de la ecuación, como resultado obtenemos la ecuación II.C.4.

$$v_x = v \quad (\text{II.C.1})$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial x} = \frac{D_{AB}}{v} \frac{\partial^2 C_B}{\partial y^2} \quad (\text{II.C.2})$$

$$\alpha = \frac{D_{AB}}{v} \quad (\text{II.C.3})$$

$$\alpha \frac{\partial^2 C_B}{\partial y^2} - \frac{\partial C_B}{\partial x} = 0 \quad (\text{II.C.4})$$

Se aplica la transformada de Laplace a la ecuación II.C.4, se tiene como resultado la ecuación II.C.5. Como se tienen dos variables para esta ecuación diferencial, la transformada sólo se aplicará para una de ellas que en este caso se selecciona la variable x . Con esta transformación lo que se pretende obtener es una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden. Alfa es una constante, por lo tanto, como la transformada de Laplace es un operador lineal (Boyce & DiPrima, 2009) se utiliza la propiedad donde se enuncia que la transformada de una función por una constante es igual a la constante por la transformada de la función, como se muestra en la ecuación II.C.6 (Grossman, 2007). Se obtienen las transformadas de las funciones en la ecuación diferencial, como se muestra en la ecuación II.C.7, con ayuda de la tabla 1 del anexo 2, para este caso en particular el renglón 1. Como se sabe que el valor de la condición de frontera enunciada anteriormente en la ecuación II.B.9 es cero, la ecuación se reduce a la II.C.8. Multiplicamos la ecuación anterior por el inverso de alfa, obteniendo la ecuación II.C.9.

$$\mathcal{L}\left(\alpha \frac{\partial^2 C_B}{\partial y^2}\right) - \mathcal{L}\left(\frac{\partial C_B}{\partial x}\right) = \mathcal{L}(0) \quad (\text{II.C.5})$$

$$\alpha \mathcal{L}\left(\frac{\partial^2 C_B}{\partial y^2}\right) - \mathcal{L}\left(\frac{\partial C_B}{\partial x}\right) = \mathcal{L}(0) \quad (\text{II.C.6})$$

$$\alpha \frac{d^2 \hat{C}_B}{dy^2} - (s \hat{C}_B - C_B(0, y)) = 0 \quad (\text{II.C.7})$$

$$\alpha \frac{d^2 \hat{C}_B}{dy^2} - s \hat{C}_B = 0 \quad (\text{II.C.8})$$

$$\frac{d^2 \hat{C}_B}{dy^2} - \frac{s}{\alpha} \hat{C}_B = 0 \quad (\text{II.C.9})$$

La ecuación II.C.9 es una ecuación ordinaria homogénea de segundo orden; obtener su solución es relativamente sencillo. Lo primero es obtener las raíces de su polinomio característico como se muestra en la ecuación II.C.10. Para este polinomio característico se obtienen dos raíces reales diferentes de sí mismas, que se muestran en la ecuación II.C.11, por lo que se propone que la solución general de la ecuación diferencial en II.C.9 tenga la forma que se muestra en la ecuación II.C.12.

$$m^2 - \frac{s}{\alpha} = 0 \quad (\text{II.C.10})$$

$$m_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{s}{\alpha}} \quad (\text{II.C.11})$$

$$\hat{C}_B = c_1 e^{y\sqrt{\frac{s}{\alpha}}} + c_2 e^{-y\sqrt{\frac{s}{\alpha}}} \quad (\text{II.C.12})$$

Las condiciones de frontera enunciadas en las ecuaciones II.B.8a y II.B.44, también deben de transformarse al espacio de Laplace, para poder encontrar la solución particular del problema. Al transformarse las condiciones de frontera, con ayuda de la Tabla VIII.1 de la sección VIII.B, quedan como se indica en el conjunto de ecuaciones II.C.13.

$$\hat{C}_B(s, 0) = \frac{C_{B0}}{s} \quad (\text{II.C.13a})$$

$$\hat{C}_B(s, y \rightarrow \infty) = C_B \text{ finita} \quad (\text{II.C.13b})$$

Primero se aplica la condición de frontera II.C.13b en la ecuación II.C.12 como se muestra en la ecuación II.C.14. Cuando la función exponencial, tiende a infinito por el lado negativo, esta función decrece hasta cero, por lo tanto se puede reducir la expresión a la ecuación II.C.15. Cuando el argumento de la función exponencial tiende a infinito, la función tiende a infinito por lo tanto para que se cumpla la condición de frontera el valor de la constante c_1 tiene que ser igual a cero como se muestra en la ecuación II.C.16. Sustituyendo el valor de la constante, la ecuación II.C.12 se transforma en la ecuación II.C.17.

$$0 = c_1 e^{\infty \sqrt{\frac{s}{\alpha}}} + c_2 e^{-\infty \sqrt{\frac{s}{\alpha}}} \quad (\text{II.C.14})$$

$$0 = c_1 e^{\infty \sqrt{\frac{s}{\alpha}}} \quad (\text{II.C.15})$$

$$c_1 = 0 \quad (\text{II.C.16})$$

$$\hat{C}_B = c_2 e^{-y \sqrt{\frac{s}{\alpha}}} \quad (\text{II.C.17})$$

Ahora se aplica la condición de frontera II.C.13a en la ecuación II.C.17 como se muestra en la ecuación II.C.18. Cuando el argumento de la función exponencial es igual a cero, el valor de la función es igual a uno, por lo tanto sabemos que el valor de c_2 es el que se muestra en la ecuación II.C.19. Ahora sólo se sustituye la ecuación anterior en la ecuación II.C.17, se obtiene la solución a la ecuación diferencial en la ecuación II.C.20, pero aún en el espacio de Laplace.

$$\frac{C_{B0}}{s} = c_2 e^{-0 \sqrt{\frac{s}{\alpha}}} \quad (\text{II.C.18})$$

$$c_2 = \frac{C_{B0}}{s} \quad (\text{II.C.19})$$

$$\hat{C}_B = \frac{C_{B0}}{s} e^{-y \sqrt{\frac{s}{\alpha}}} \quad (\text{II.C.20})$$

Sólo resta aplicar la transformada inversa de Laplace para obtener el resultado de la ecuación. En la Tabla VIII.1 de la sección VIII.B, se encuentra una la tabla que relaciona a la función y a su transformada, para terminar de resolver la ecuación diferencial.

Empezamos el proceso de antitransformación de la ecuación II.C.20, como se está indicado en la ecuación II.C.21. La antitransformada es una operación lineal, por lo tanto la antitransformada de una constante por una función es igual a la constante por la antitransformada de la función, aplicando este principio se puede expresar la ecuación como se muestra en la ecuación II.C.22. Para comparar la función con el renglón 2 de la Tabla VIII.1 de la sección VIII.B, con nuestra

ecuación II.C.22, se debe de conocer el valor de la constante a , ese valor está plasmado en la ecuación II.C.23.

$$\mathcal{L}^{-1}(\hat{C}_B) = \mathcal{L}^{-1}\left(\frac{C_{B0}}{s} e^{-y\sqrt{\frac{s}{\alpha}}}\right) \quad (\text{II.C.21})$$

$$\mathcal{L}^{-1}(\hat{C}_B) = C_{B0} \mathcal{L}^{-1}\left(\frac{1}{s} e^{-y\sqrt{\frac{s}{\alpha}}}\right) \quad (\text{II.C.22})$$

$$a = \frac{y}{\sqrt{\alpha}} \quad (\text{II.C.23})$$

De esta forma se puede antitransformar la ecuación II.C.22, y se tiene como resultado la ecuación II.C.24. Y se sustituye el valor de alfa (α) de la ecuación II.C.3, se obtiene la ecuación II.C.25.

$$C_B = C_{B0} \text{efrc}\left(\frac{y}{2\sqrt{\alpha} x}\right) \quad (\text{II.C.24})$$

$$C_B = C_{B0} \text{efrc}\left(\frac{y}{2\sqrt{\frac{D_{AB}}{v}} x}\right) \quad (\text{II.C.25})$$

La ecuación II.C.25 se reacomoda de tal manera que contenga el numero adimensional llamado Péclét de masa, que se define como se muestra en la ecuación II.B.71, número adimensional que está asociado al fenómeno de transferencia de masa. Se divide la ecuación anteriormente mencionada entre la concentración inicial de la especie B en la placa inferior C_{B0} , como se muestra en la ecuación II.C.26. Se propone una variable adimensional asociada a la concentración de la especie B en el sistema muy parecida a la que se muestra en la ecuación II.B.11, la nueva variable está definida en la ecuación II.C.27, sólo que ésta no será función de la variable adimensional η . Sustituyendo la ecuación anterior en la ecuación II.C.26 obtenemos la ecuación II.C.28.

$$\frac{C_B}{C_{B0}} = \text{efrc}\left(\frac{y}{2\sqrt{\frac{D_{AB}}{v}} x}\right) \quad (\text{II.C.26})$$

$$f = \frac{C_B}{C_{B0}} \quad (\text{II.C.27})$$

$$f = \operatorname{erfc} \left(\frac{y}{2 \sqrt{\frac{D_{AB}}{v} x}} \right) \quad (\text{II.C.28})$$

Ahora dentro del argumento del complemento de la función error, en el radicando, se multiplica por la unidad expresada en forma del cociente $\frac{H^2}{H^2}$ como se indica en la ecuación II.C.29. Se acomoda la ecuación de la forma que se muestra en la ecuación II.C.30. En la ecuación anterior se saca del radicando el término de H^2 , y se asocia con la variable y , se obtiene la ecuación II.C.31.

$$f = \operatorname{erfc} \left(\frac{y}{2 \sqrt{\frac{D_{AB}}{v} x \frac{H^2}{H^2}}} \right) \quad (\text{II.C.29})$$

$$f = \operatorname{erfc} \left(\frac{y}{2 \sqrt{\frac{D_{AB}}{vH} \frac{x}{H} H^2}} \right) \quad (\text{II.C.30})$$

$$f = \operatorname{erfc} \left(\frac{1}{2 \sqrt{\frac{D_{AB}}{vH} \frac{x}{H}}} \frac{y}{H} \right) \quad (\text{II.C.31})$$

De esta forma se sustituyen las variables adimensionales propuestas anteriormente en las ecuaciones II.B.74 y II.B.75, y se sustituye la ecuación II.B.71 en la ecuación II.C.31. Se obtiene así una ecuación solución en función de variables adimensionales y el número adimensional de Péclet de masa que servirá de parámetro para realizar el análisis numérico del problema. Esta ecuación solución se muestra en la ecuación II.C.32.

$$f = \operatorname{erfc} \left(\frac{y}{2 \sqrt{\frac{1}{Pe_M} \xi}} \right) \quad (\text{II.C.32})$$

III Transporte de masa por convección-difusión con reacción química de primer orden

En el capítulo anterior se muestra el desarrollo para obtener el perfil de concentraciones en el sistema presentado en la figura II.1, sin el efecto de alguna reacción química. Para este se hará algo similar, se obtendrá el desarrollo para obtener un perfil de concentraciones de la especie B, con la diferencia de que se propone que se efectuó una reacción química de primer orden entre la especie A y B para producir la especie P, como se muestra en la ecuación III.1.



La reacción que se muestra en la ecuación III.1 es una reacción irreversible, equimolar y, como ya se menciona anteriormente, con una cinética de primer orden. Las consideraciones del problema anterior se conservan y que son:

- Al fluido entre las placas se le debe considerar fluido newtoniano e incompresible.
- Se trata de un problema en estado estacionario, por lo que no es objeto de este trabajo analizar la dependencia del fenómeno con respecto al tiempo.
- Las propiedades físicas de la fase fluida se mantienen constantes, incluyendo también al coeficiente difusión D_{AB} .
- Se considera que el flujo es laminar.

Como en el capítulo anterior, se proponen dos métodos de solución, uno considerando el perfil de velocidades, que se muestra en la ecuación II.A.32 y el otro en donde se tome sólo en cuenta una velocidad característica constante del sistema.

III.A Obtención del perfil de concentraciones de la especie B considerando el perfil de velocidades

Recordando el planteamiento del capítulo anterior para llegar a la ecuación diferencial que describe la transferencia de masa, las consideraciones son las mismas a excepción de que, por tratarse de un problema que involucra reacción química, es importante incluir la expresión de velocidad de reacción.

Para la reacción química planteada en la ecuación III.1, su rapidez de reacción se expresa como se muestra en la ecuación III.A.1. En esta ecuación se puede observar que el orden de reacción con respecto a la especie A es de primer orden y el orden de reacción para la especie B también. Por lo tanto el orden global de la reacción es de segundo orden (Smith, 1986). Pero para este problema en particular se considera que la especie A se encuentra en exceso, por lo que no afecta considerablemente la reacción química la concentración C_A como se muestra en la ecuación III.A.2. Por este motivo la velocidad de reacción sólo dependerá de la concentración

de la especie B C_B , como se describe en la ecuación III.A.3 y por ello podemos considerarla reacción de primer orden.

$$R_B = -k_1 C_A C_B \quad (\text{III.A.1})$$

$$C_A \gg C_B \quad (\text{III.A.2})$$

$$R_B = -k_1 C_B \quad (\text{III.A.3})$$

Del capítulo anterior se retoma las consideraciones de las cuales dicen que el problema se considera en estado estacionario como indica en la ecuación II.B.3; también se retoma la consideración en donde se establecemos que la influencia del efecto convectivo es mayor sobre el eje x , por lo tanto el efecto difusivo será mucho menor en el eje x en comparación del eje y , como lo muestra la ecuación II.B.5 y que el efecto de la difusión lo ignoraremos en el eje z , como lo indica la ecuación II.B.6.

Ahora se sustituye las ecuaciones II.B.3, II.B.5, II.B.6 y III.A.3 en la ecuación II.B.1 con el fin de obtener la ecuación diferencial a resolver para obtener el perfil de concentraciones de la especie B, como lo indica la ecuación III.A.4.

$$v_x \frac{\partial C_B}{\partial x} = D_{AB} \frac{\partial^2 C_B}{\partial y^2} - k_1 C_B \quad (\text{III.A.4})$$

De forma parecida al capítulo anterior, se proponen dos métodos de solución. El primero es en donde se considera todo el perfil de velocidades descrito en la ecuación II.A.32. En el segundo método sólo se utiliza una velocidad característica constante.

Para el primer método se procede a sustituir la ecuación II.A.32 en la ecuación III.A.4 obteniendo como resultado la ecuación III.A.5.

$$\frac{v}{H} y \frac{\partial C_B}{\partial x} = D_{AB} \frac{\partial^2 C_B}{\partial y^2} - k_1 C_B \quad (\text{III.A.5})$$

Para ser consistentes, se retoman las variables adimensionales propuestas en el capítulo anterior que se encuentran en las ecuaciones II.B.74, II.B.75 y II.C.27 para transformar la ecuación III.A.5 a una ecuación adimensional, por medio de la regla de la cadena se empieza a realizar el cambio de variable como se muestra en el conjunto de ecuaciones III.A.6.

$$\frac{\partial C_B}{\partial x} = \frac{\partial C_B}{\partial f} \cdot \frac{\partial f}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial x} \quad (\text{III.A.6a})$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial y} = \frac{\partial C_B}{\partial f} \cdot \frac{\partial f}{\partial \gamma} \cdot \frac{\partial \gamma}{\partial y} \quad (\text{III.A.6b})$$

$$\frac{\partial^2 C_B}{\partial y^2} = \frac{\partial \gamma}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \gamma} \left(\frac{\partial C_B}{\partial f} \cdot \frac{\partial f}{\partial \gamma} \cdot \frac{\partial \gamma}{\partial y} \right) \quad (\text{III.A.6c})$$

Del conjunto de ecuaciones III.A.6 podemos obtener el valor de algunas de las derivadas como se muestra en las ecuaciones III.A.7, III.A.8 y III.A.9.

$$\frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{1}{H} \quad (\text{III.A.7})$$

$$\frac{\partial \gamma}{\partial y} = \frac{1}{H} \quad (\text{III.A.8})$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial f} = C_{B0} \quad (\text{III.A.9})$$

Se sustituyen las derivadas calculadas en el conjunto de ecuaciones III.A.6, como se muestra en el conjunto de ecuaciones III.A.10, para posteriormente sustituir estos valores en la ecuación III.A.5. El resultado es la ecuación III.A.11, que es la ecuación a resolver en función de variables adimensionales, aunque todavía cada termine tiene dimensiones.

$$\frac{\partial C_B}{\partial x} = C_{B0} \frac{1}{H} \frac{\partial f}{\partial \xi} \quad (\text{III.A.10a})$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial y} = C_{B0} \frac{1}{H} \frac{\partial f}{\partial \gamma} \quad (\text{III.A.10b})$$

$$\frac{\partial^2 C_B}{\partial y^2} = C_{B0} \frac{1}{H^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \gamma^2} \quad (\text{III.A.10c})$$

$$\frac{v}{H} H \gamma \left(C_{B0} \frac{1}{H} \frac{\partial f}{\partial \xi} \right) = D_{AB} C_{B0} \frac{1}{H^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \gamma^2} - k_1 C_{B0} f \quad (\text{III.A.11})$$

A la ecuación III.A.11 se le multiplica por el término $\frac{H}{v C_{B0}}$, para dar como resultado la ecuación III.A.12. Se eliminan los términos comunes en la ecuación anterior para obtener la ecuación III.A.13. Se puede notar que en el término asociado al fenómeno difusivo, se encuentra de nuevo al inverso del número adimensional llamado Péclet de masa, que se describe en la ecuación II.B.71. Pero en el término asociado con la reacción química se puede encontrar a otro número adimensional asociado con los procesos de transferencia de masa, se trata del primer número de Damköhler. Este primer número de Damköhler, compara el efecto de la reacción química con respecto al efecto convectivo y se define como se muestra en la ecuación III.A.15, donde R_{B0} es la velocidad inicial de reacción que se define en la ecuación III.A.14, H es la distancia

entre las placas, v es la velocidad con la que se mueve la placa superior. Sustituimos las ecuaciones II.B.71 y IIIA.14 en la ecuación III.A.13, obteniendo la ecuación III.A.16.

$$\gamma \frac{\partial f}{\partial \xi} = \frac{H}{vC_{B0}} D_{AB} C_{B0} \frac{1}{H^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \gamma^2} - \frac{H}{vC_{B0}} k_1 C_{B0} f \quad (\text{III.A.12})$$

$$\gamma \frac{\partial f}{\partial \xi} = \frac{D_{AB}}{vH} \frac{\partial^2 f}{\partial \gamma^2} - \frac{Hk_1 C_{B0}}{vC_{B0}} f \quad (\text{III.A.13})$$

$$R_{B0} = k_1 C_{B0} \quad (\text{III.A.14})$$

$$Da_I = \frac{R_0 H}{vC_{B0}} \quad (\text{III.A.15})$$

$$\gamma \frac{\partial f}{\partial \xi} = \frac{1}{Pe_M} \frac{\partial^2 f}{\partial \gamma^2} - Da_I f \quad (\text{III.A.16})$$

Antes de comenzar a describir la propuesta de solución de la ecuación de III.A.16, también se tienen que convertir a variables adimensionales las condiciones de frontera, que como no cambia el sistema son las mismas descritas en el capítulo anterior y se muestran en las ecuaciones II.B.8 y II.B.9. Las formas adimensionales de las condiciones de frontera e inicial se muestran en el conjunto de ecuaciones III.A.17 y en la ecuación III.A.18 respectivamente.

$$f(\xi, 0) = 1 \quad (\text{III.A.17a})$$

$$\frac{\partial f}{\partial \gamma}(\xi, 1) = 0 \quad (\text{III.A.17b})$$

$$f(0, \gamma) = 0 \quad (\text{III.A.18})$$

La ecuación III.A.16 se podría resolver a través de métodos analíticos, pero para este caso optaremos por utilizar un método numérico. Se utilizara el método numérico de diferencias finitas (Euler hacia adelante) que se describe en el anexo 3. El primer paso es expresar las derivadas en términos finitos.

$$\frac{\partial f}{\partial \xi} = \frac{f(\xi + \Delta\xi, \gamma) - f(\xi, \gamma)}{\Delta\xi} \quad (\text{III.A.19})$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \gamma^2} = \frac{f(\xi, \gamma + \Delta\gamma) - 2f(\xi, \gamma) + f(\xi, \gamma - \Delta\gamma)}{(\Delta\gamma)^2} \quad (\text{III.A.20})$$

Se sustituyen las ecuaciones III.A.19 y III.A.20 en la ecuación III.A.16, dando como resultado la ecuación III.A.21. Se multiplica toda la ecuación por el inverso de la variable gamma γ y por la separación especial constante $\Delta\xi$, dando como resultado la ecuación III.A.22. Dentro de la ecuación se tiene un término lambda λ , que se define como se muestra en la ecuación III.A.23. Se sustituye la ecuación anterior en la ecuación III.A.22 para dar como resultado la ecuación III.A.24.

$$\gamma \left(\frac{f(\xi + \Delta\xi, \gamma) - f(\xi, \gamma)}{\Delta\xi} \right) = \frac{1}{Pe_M} \left(\frac{f(\xi, \gamma + \Delta\gamma) - 2f(\xi, \gamma) + f(\xi, \gamma - \Delta\gamma)}{(\Delta\gamma)^2} \right) - Da_1 f(\xi, \gamma) \quad (III.A.21)$$

$$f(\xi + \Delta\xi, \gamma) - f(\xi, \gamma) = \frac{\Delta\xi}{\gamma Pe_M} \left(\frac{f(\xi, \gamma + \Delta\gamma) - 2f(\xi, \gamma) + f(\xi, \gamma - \Delta\gamma)}{(\Delta\gamma)^2} \right) - \frac{\Delta\xi}{\gamma} Da_1 f(\xi, \gamma) \quad (III.A.22)$$

$$\lambda = \frac{\Delta\xi}{Pe_M (\Delta\gamma)^2} \quad (III.A.23)$$

$$f(\xi + \Delta\xi, \gamma) - f(\xi, \gamma) = \frac{\lambda}{\gamma} (f(\xi, \gamma + \Delta\gamma) - 2f(\xi, \gamma) + f(\xi, \gamma - \Delta\gamma)) - \frac{\Delta\xi}{\gamma} Da_1 f(\xi, \gamma) \quad (III.A.24)$$

Otro término que se tiene dentro de la ecuación es el que se le llamará omega Ω , que se define como se muestra en la ecuación III.A.25. Se sustituye la ecuación anterior en la ecuación III.A.24, obteniendo la ecuación III.A.26.

$$\Omega = Da_1 \Delta\xi \quad (III.A.25)$$

$$f(\xi + \Delta\xi, \gamma) - f(\xi, \gamma) = \frac{\lambda}{\gamma} (f(\xi, \gamma + \Delta\gamma) - 2f(\xi, \gamma) + f(\xi, \gamma - \Delta\gamma)) - \frac{\Omega}{\gamma} f(\xi, \gamma) \quad (III.A.26)$$

Se simplifica la notación de la ecuación III.A.26, a manera de que se exprese con índices, con la guía de las ecuaciones en el conjunto VIII.C16, obteniendo así la ecuación III.A.27. A la ecuación anterior sumamos de ambos lados la ecuación la función $f_{i,j}$ y nos queda la ecuación III.A.28.

$$f_{j+1,i} - f_{j,i} = \frac{\lambda}{i} (f_{j,i+1} - 2f_{j,i} + f_{j,i-1}) - \frac{\Omega}{i} f_{j,i} \quad (III.A.27)$$

$$f_{j+1,i} = f_{j,i} + \frac{\lambda}{i} (f_{j,i+1} - 2f_{j,i} + f_{j,i-1}) - \frac{\Omega}{i} f_{j,i} \quad (III.A.28)$$

Se requiere también información de las condiciones de frontera. La condición de frontera de la ecuación III.A.17b, es una condición de frontera de Neumann, por lo tanto debemos de expresar también la derivada en términos finitos. Se tomará una aproximación central para la condición de frontera, como se muestra en la ecuación III.A.29. Multiplicando la ecuación anterior por la diferencia de gamma γ , y sumamos de ambos lados de la ecuación la función f valuada en $\gamma=1$,

dando como resultado la ecuación III.A.30, que es la condición de frontera que se va utilizar para aplicar el método numérico.

$$\frac{\partial f}{\partial \gamma}(\xi, 1) = \frac{f(\xi, 1 + \Delta\gamma) - f(\xi, 1 - \Delta\gamma)}{2\Delta\gamma} = 0 \quad (\text{III.A.29})$$

$$f(\xi, 1 + \Delta\gamma) = f(\xi, 1 - \Delta\gamma) \quad (\text{III.A.30})$$

También se utilizará la notación propuesta en la el conjunto de ecuaciones VIII.C.16, y convirtiendo las ecuaciones de condición de frontera III.A.17^a, III.A.30 y III.A.18, quedando como se muestran en el conjunto de ecuaciones III.A.31 y la ecuación III.A.32.

$$f_{j,1} = 1 \quad (\text{III.A.31a})$$

$$f_{j,n+1} = f_{j,n-1} \quad (\text{III.A.31b})$$

$$f_{1,i} = 0 \quad (\text{III.A.32})$$

Se calculará la solución a partir de los nodos, de los cuales ya se conoce su valor debido a que éste es el establecido en las condiciones de frontera que se muestran en las ecuaciones III.A.31a y b, y en la ecuación III.A.32. En la figura III.1 se puede observar de forma gráfica de donde se toma la información para calcular los nodos.

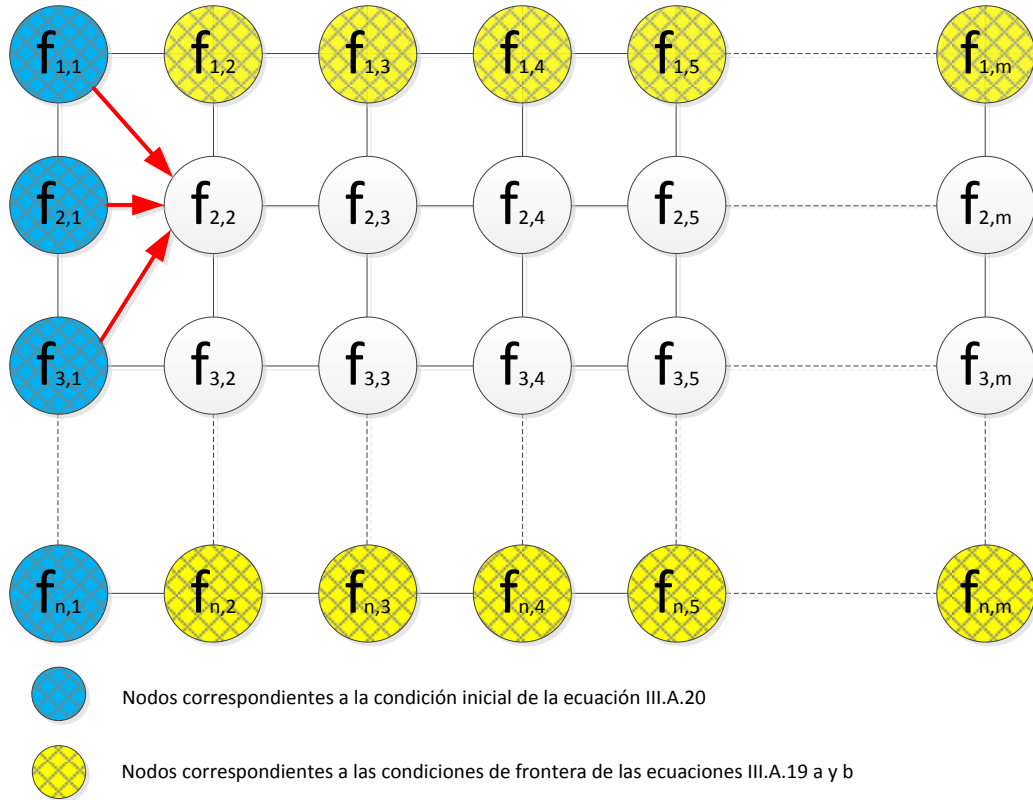


Figura III.1 Ilustración gráfica de cómo se van calculando el valor de cada nodo.

Para la placa inferior del sistema, por la condición ya planteada, el valor de la concentración adimensional siempre será de 1, pero para calcular la concentración a partir del siguiente nodo pegado a la placa inferior se utilizara la ecuación III.A.28. Para calcular el valor de la concentración adimensional en la placa superior (es decir donde $i=n$) necesitamos aplicar la condición de frontera de la ecuación III.A.31b, para ello de la ecuación III.A.28, sustituimos el nodo n como lo muestra la ecuación III.A.33. Aplicando la ecuación III.A.31b en la ecuación anterior obtenemos la ecuación III.A.34

$$f_{j+1,n} = f_{j,n} + \frac{\lambda}{n} (f_{j,n+1} - 2f_{j,n} + f_{j,n-1}) - \frac{\Omega}{n} f_{j,n} \quad (\text{III.A.33})$$

$$f_{j+1,n} = f_{j,n} + \frac{\lambda}{n} (2f_{j,n-1} - 2f_{j,n}) - \frac{\Omega}{n} f_{j,n} \quad (\text{III.A.34})$$

En base a la ecuación III.A.28 para $i=2 \dots n-1$, y la ecuación III.A.34 se construyó un código de MATLAB para que ejecutará el método numérico. Este código de MATLAB se encuentra en la sección VIII.A.2.

III.B Obtención del perfil de concentraciones de la especie B considerando una velocidad constante característica constante.

Ahora se continuará con la obtención del perfil de concentraciones mediante el segundo método de solución. A partir de la ecuación III.A.4, se comenzará el método de solución sabiendo que v_x es una velocidad característica del sistema y es constante, como se menciona en la ecuación II.C.1. Se partirá de la obtención de la transformada de Laplace a la ecuación III.A.4, como se muestra en la ecuación III.B.1. Como la transformada de Laplace es un operador lineal, por homogeneidad obtenemos la ecuación III.B.2 (Grossman, 2007).

$$\mathcal{L}\left(v \frac{\partial C_B}{\partial x}\right) = \mathcal{L}\left(D_{AB} \frac{\partial^2 C_B}{\partial y^2}\right) - \mathcal{L}(k_1 C_B) \quad (\text{III.B.1})$$

$$v \mathcal{L}\left(\frac{\partial C_B}{\partial x}\right) = D_{AB} \mathcal{L}\left(\frac{\partial^2 C_B}{\partial y^2}\right) - k_1 \mathcal{L}(C_B) \quad (\text{III.B.2})$$

Al igual que se realizó en el capítulo anterior en la sección II.C, se cambiará al espacio de Laplace a la variable x ; por lo tanto no se modificará la ecuación con respecto a la variable y . Dicho esto, se aplicará la transformada como se muestra en la ecuación III.B.3. Como ya sólo se está derivando sobre una variable, la ecuación anterior se vuelve una ecuación diferencial ordinaria. Ahora se sustituye el valor de la condición de frontera evaluada en cero que se muestra en la ecuación II.B.9, y se tiene como resultado la ecuación III.B.4

$$v \left(s\hat{C}_B - C_B(0, y)\right) = D_{AB} \frac{d^2 \hat{C}_B}{dy^2} - k_1 \hat{C}_B \quad (\text{III.B.3})$$

$$v \left(s\hat{C}_B\right) = D_{AB} \frac{d^2 \hat{C}_B}{dy^2} - k_1 \hat{C}_B \quad (\text{III.B.4})$$

Se restan de ambos lados de la ecuación III.B.4 el término que se encuentra del lado izquierdo de la igualdad, obteniendo la ecuación III.B.5. Se multiplica la ecuación anterior por el inverso de coeficiente de difusión dando como resultado la ecuación III.B.5. Se factorizan los términos comunes como lo muestra la ecuación III.B.6

$$D_{AB} \frac{d^2 \hat{C}_B}{dy^2} - k_1 \hat{C}_B - v s \hat{C}_B = 0 \quad (\text{III.B.4})$$

$$\frac{d^2 \hat{C}_B}{dy^2} - \frac{1}{D_{AB}} k_1 \hat{C}_B - \frac{1}{D_{AB}} v s \hat{C}_B = 0 \quad (\text{III.B.5})$$

$$\frac{d^2 \hat{C}_B}{dy^2} - \left(\frac{k_1 + v s}{D_{AB}}\right) \hat{C}_B = 0 \quad (\text{III.B.6})$$

Se resuelve la ecuación III.B.6, pero para facilitar el álgebra se utiliza la variable beta β que es equivalente a lo que nos muestra la ecuación III.B.7. Sustituyendo la ecuación anterior en la ecuación III.B.6, se obtiene la ecuación III.B.8.

$$\beta^2 = \frac{k_1 + v s}{D_{AB}} \quad (\text{III.B.7})$$

$$\frac{d^2 \hat{C}_B}{dy^2} - \beta^2 \hat{C}_B = 0 \quad (\text{III.B.8})$$

Siendo la ecuación III.B.8 una ecuación ordinaria de segundo orden con coeficientes constantes; se parte de establecer la ecuación característica asociada con la ecuación diferencial, que se muestra en la ecuación III.B.9. Se obtienen las raíces que se muestran en la ecuación III.B.10. Como se tienen dos raíces reales diferentes, se sabe que la solución general a la ecuación diferencial tiene la forma que se plantea en la ecuación III.B.11.

$$m^2 - \beta^2 = 0 \quad (\text{III.B.9})$$

$$m = \pm \beta \quad (\text{III.B.10})$$

$$\hat{C}_B = c_1 e^{-\beta y} + c_2 e^{\beta y} \quad (\text{III.B.11})$$

Antes de evaluar las condiciones de frontera, se deben de transformarlas también al espacio de Laplace, tal como se hizo en el capítulo anterior. Como el sistema no ha cambiado, las condiciones de frontera son las mismas, y se pueden utilizar las que están enunciadas en el conjunto de ecuaciones II.C.13.

Se aplica la condición de frontera enunciada en la ecuación II.C.13b, obteniendo la ecuación III.B.12. Siendo que como ya se ha explicado anteriormente, cuando el argumento de función exponencial tiende a infinito del lado de los negativos, la función tiende a cero, con este argumento se obtiene la ecuación III.B.13. Pero cuando el argumento tiende a infinito por el lado positivo la función también tiende a infinito. Como la concentración tiene que ser finita, el valor de c_2 tiene que ser de cero para que se pueda cumplir la condición de frontera, como se muestra en la ecuación III.B.14. Se sustituye la ecuación anterior en la ecuación III.B.11, obtenemos la ecuación III.B.15.

$$\hat{C}_{Bfinita} = c_1 e^{-\beta \infty} + c_2 e^{\beta \infty} \quad (\text{III.B.12})$$

$$\hat{C}_{Bfinita} = c_2 e^{\beta \infty} \quad (\text{III.B.13})$$

$$c_2 = 0 \quad (III.B.14)$$

$$\hat{C}_B = c_1 e^{-\beta y} \quad (III.B.15)$$

Ahora se aplica la condición de frontera mencionada en la ecuación II.C.13a en la ecuación III.B.15 y se obtiene como resultado la ecuación III.B.16. Como cuando el argumento de la función exponencial es cero, la función toma el valor de 1, así es como se conoce el valor de la constante c_1 como se muestra en la función III.B.17. Se sustituye la ecuación anterior en la ecuación III.B.15 obteniendo la ecuación III.B.18.

$$\frac{C_{B0}}{s} = c_1 e^{-\beta(0)} \quad (III.B.16)$$

$$c_1 = \frac{C_{B0}}{s} \quad (III.B.17)$$

$$\hat{C}_B = \frac{C_{B0}}{s} e^{-\beta y} \quad (III.B.18)$$

Anticipando un poco, se acomoda la ecuación III.B.7 de forma algebraica para posteriormente facilitar la obtención de la antitransformada del resultado. Primero se separa en la suma de dos cocientes, como se muestra en la ecuación III.B.19. Se reacomoda el segundo cociente como se muestra en la ecuación III.B.20. Se suman los dos cocientes de la ecuación anterior utilizando como denominador común $\frac{D_{AB}}{v_x}$, como lo muestra la ecuación III.B.21. Al reducir términos comunes en el numerador de la suma, se obtiene finalmente la ecuación III.B.22

$$\beta^2 = \frac{k_1 + v s}{D_{AB}} = \frac{k_1}{D_{AB}} + \frac{v s}{D_{AB}} \quad (III.B.19)$$

$$\beta^2 = \frac{k_1}{D_{AB}} + \frac{v s}{D_{AB}} = \frac{k_1}{D_{AB}} + \frac{s}{\frac{D_{AB}}{v}} \quad (III.B.20)$$

$$\beta^2 = \frac{k_1}{D_{AB}} + \frac{s}{\frac{D_{AB}}{v}} = \frac{\frac{D_{AB}}{v} \frac{k_1}{D_{AB}} + s}{\frac{D_{AB}}{v}} \quad (III.B.21)$$

$$\beta^2 = \frac{\frac{k_1}{v} + s}{\frac{D_{AB}}{v}} \quad (III.B.22)$$

Antes de seguir, se obtiene la raíz cuadrada de la ecuación III.B.22 para sustituirla en la ecuación III.B.18, se tiene como resultado la ecuación III.B.23. Al revisar la Tabla VIII.1. Transformadas de LaPlace en la sección VIII.B, se encuentra que hay una relación que nos puede servir en el elemento 4. Sólo se sustituyen los valores de los parámetros por los valores constantes como se muestra en el conjunto de ecuaciones III.B.24.

$$\hat{C}_B = \frac{C_{B0}}{s} e^{-y \sqrt{\frac{k_1 + s}{v} \frac{D_{AB}}{v}}} \quad (\text{III.B.23})$$

$$h = \frac{k_1}{v} \quad (\text{III.B.24a})$$

$$k = \frac{D_{AB}}{v} \quad (\text{III.B.24b})$$

$$b = \sqrt{\frac{h}{k}} = \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} \quad (\text{III.B.24c})$$

$$F_0 = C_{B0} \quad (\text{III.B.24d})$$

Se toma en cuenta las igualdades del conjunto de ecuaciones III.B.24, se obtiene la antitransformada de la ecuación III.B.23, como se muestra en la ecuación III.B.25. Se resuelve la ecuación III.B.25 obteniendo la ecuación III.B.26, guiándonos con la antitransformada anteriormente mencionada.

$$\mathcal{L}^{-1}(\hat{C}_B) = \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{C_{B0}}{s} e^{-y \sqrt{\frac{k_1 + s}{v} \frac{D_{AB}}{v}}} \right) \quad (\text{III.B.25})$$

$$C_B = \frac{C_{B0}}{2} \left[e^{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} y} \operatorname{erfc} \left(\frac{y}{2 \sqrt{\frac{D_{AB}}{v} x}} + \sqrt{\frac{k_1}{v}} x \right) + e^{-\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} y} \operatorname{erfc} \left(\frac{y}{2 \sqrt{k \frac{D_{AB}}{v} x t}} - \sqrt{\frac{k_1}{v}} x \right) \right] \quad (\text{III.B.26})$$

Ahora acomodaremos la ecuación III.B.26 de tal manera que todo quede en función de variables y números adimensionales. Primero multiplicamos toda la ecuación por el inverso de la concentración inicial de la especie B C_{B0} , obteniendo la ecuación III.B.27. Sustituimos en la ecuación anterior el valor que nos indica la ecuación II.C.27 para obtener la ecuación III.B.28.

$$\frac{C_B}{C_{B0}} = \frac{1}{2} \left[e^{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} y} \operatorname{erfc} \left(\frac{y}{2\sqrt{\frac{D_{AB}}{v}} x} + \sqrt{\frac{k_1}{v}} x \right) + e^{-\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} y} \operatorname{erfc} \left(\frac{y}{2\sqrt{\frac{D_{AB}}{v}} xt} - \sqrt{\frac{k_1}{v}} x \right) \right] \quad (\text{III.B.27})$$

$$f = \frac{1}{2} \left[e^{\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} y} \operatorname{erfc} \left(\frac{y}{2\sqrt{\frac{D_{AB}}{v}} x} + \sqrt{\frac{k_1}{v}} x \right) + e^{-\sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} y} \operatorname{erfc} \left(\frac{y}{2\sqrt{\frac{D_{AB}}{v}} xt} - \sqrt{\frac{k_1}{v}} x \right) \right] \quad (\text{III.B.28})$$

Restaría obtener los números adimensionales. Como en toda la ecuación III.B.28 se repiten los argumentos de las funciones exponenciales y de la función complemento error, solo habría en algunos casos cambiar los signos, por lo tanto se harán estos cambios de forma aislada.

Se tomará el argumento de las funciones exponenciales, como se muestra en la ecuación III.B.29, y se llamará A_1 . Primero multiplicamos por la unidad expresada como el cociente de $\frac{C_{B0}H^2}{C_{B0}H^2}$ dentro del radicando, como se muestra en la ecuación III.B.30. Se asocian términos y sacamos la raíz cuadrada del inverso de H^2 , y lo se acomodan como se muestra en la ecuación III.B.31. Se hará una la introducción a otro número adimensional, se trata del segundo número de Damköhler. Este número se define como se muestra en la ecuación III.B.32, y físicamente compara el efecto de la reacción química con respecto al efecto de la difusión; además cabe mencionar que este número adimensional también es el producto del primer número de Damköhler y el Péclet de masa como se indica en la ecuación III.B.33. Sabemos que la constante cinética por la concentración inicial es la rapidez de reacción inicial como se muestra en la ecuación III.A.14. Por lo tanto se puede sustituir la ecuación III.A.30 dentro del argumento del radicando y también sustituyendo la ecuación II.B.74, y se obtiene así la ecuación III.B.34.

$$A_1 = \sqrt{\frac{k_1}{D_{AB}}} y \quad (\text{III.B.29})$$

$$A_1 = \sqrt{\frac{k_1 C_{B0}H^2}{D_{AB} C_{B0}H^2}} y \quad (\text{III.B.30})$$

$$A_1 = \sqrt{\frac{k_1 C_{B0}H^2}{D_{AB} C_{B0}} \frac{y}{H}} \quad (\text{III.B.31})$$

$$Da_{II} = \frac{R_0H^2}{D_{AB}C_{B0}} \quad (\text{III.B.32})$$

$$Pe_M Da_I = \frac{vH}{D_{AB}} \frac{R_0H}{C_{B0}} = \frac{R_0H^2}{D_{AB}C_{B0}} = Da_{II} \quad (\text{III.B.33})$$

$$A_1 = \sqrt{Da_{II}} \gamma \quad (\text{III.B.34})$$

En la ecuación III.B.35, se presenta parte del argumento del complemento de la función error y momentáneamente la llamaremos A_2 . Dentro del argumento del radical, se multiplica por la unidad con forma de cociente de $\frac{H^2}{H^2}$, como se muestra en la ecuación III.B.36. Se acomoda la ecuación de tal forma que quede como se muestra en la ecuación III.B.37. De la ecuación anterior, se obtiene la raíz cuadrada de H^2 , y se acomoda como se muestra en la ecuación III.B.38. Para finalizar se sustituye las ecuaciones II.B.71, II.B.74 y II.B.75 en la ecuación III.B.38 y se obtiene la ecuación III.B.39.

$$A_2 = \frac{y}{2\sqrt{\frac{D_{AB}}{v} x}} \quad (\text{III.B.35})$$

$$A_2 = \frac{y}{2\sqrt{\frac{D_{AB}}{v} \frac{H^2}{H^2} x}} \quad (\text{III.B.36})$$

$$A_2 = \frac{y}{2\sqrt{\frac{D_{AB}}{vH} \frac{x}{H} H^2}} \quad (\text{III.B.37})$$

$$A_2 = \frac{1}{2\sqrt{\frac{D_{AB}}{vH} \frac{x}{H}}} \frac{y}{H} \quad (\text{III.B.38})$$

$$A_2 = \frac{\gamma}{2\sqrt{\frac{1}{Pe_M} \xi}} \quad (\text{III.B.39})$$

Ahora se toma la otra parte del argumento de la función error y se le llamará de forma temporal A_3 , plasmándola así en la ecuación III.B.40. La ecuación anterior, dentro del argumento del radicando se multiplica por la unidad con forma del cociente $\frac{C_{B_0H}}{C_{B_0H}}$, como se muestra en la ecuación III.B.41. Se acomoda de tal manera que quede como se indica en la ecuación III.B.42. Ahora sólo se sustituye en la ecuación anterior las ecuaciones II.B.75 y III.A.15, obteniendo así la ecuación III.B.43.

$$A_3 = \sqrt{\frac{k_1}{v} x} \quad (\text{III.B.40})$$

$$A_3 = \sqrt{\frac{k_1}{v} x \frac{C_{B_0H}}{C_{B_0H}}} \quad (\text{III.B.41})$$

$$A_3 = \sqrt{\frac{k_1 C_{B_0H} x}{v C_{B_0H} H}} \quad (\text{III.B.42})$$

$$A_3 = \sqrt{Da_1 \xi} \quad (\text{III.B.43})$$

Ahora se sustituyen las ecuaciones III.B.34, III.B.39 y III.B.43 en la ecuación III.B.28, para así obtener la ecuación III.B.44, que es la que se utilizará para realizar el análisis numérico.

$$f = \frac{1}{2} \left[e^{\sqrt{Da_{II}}\gamma} \operatorname{erfc} \left(\frac{\gamma}{2\sqrt{\frac{1}{Pe_M}}\xi} + \sqrt{Da_I\xi} \right) + e^{-\sqrt{Da_{II}}\gamma} \operatorname{erfc} \left(\frac{\gamma}{2\sqrt{\frac{1}{Pe_M}}\xi} - \sqrt{Da_I\xi} \right) \right] \quad (\text{III.B.44})$$

IV Transporte de masa por convección-difusión con reacción química autocatalítica

En los dos capítulos anteriores se determinó el perfil de concentraciones para el mismo sistema sin reacción química y con reacción química de primer orden. En este capítulo trataremos el mismo problema, pero introduciendo una reacción química autocatalítica cuadrática. Al decir cuadrática nos referimos a la ecuación I.1, donde se describe de forma general una reacción química autocatalítica, que el valor de n sea igual a uno. Considerando esto, obtenemos la ecuación IV.1 y IV.2 donde se describe la reacción y la rapidez de reacción.



$$R_B = k_1 C_A C_B \quad (\text{IV.2})$$

Se van a conservar las consideraciones del problema anterior, que son:

- Al fluido entre las placas se le debe considerar fluido newtoniano e incompresible.
- Se trata de un problema en estado estacionario, por lo que no es objeto de este trabajo analizar la dependencia del fenómeno con respecto al tiempo.
- Las propiedades físicas de la fase fluida se mantienen constantes, incluyendo también al coeficiente de difusión D_{AB} .
- Se considera que el flujo es laminar.

IV.A Obtención del perfil de concentraciones de la especie B considerando el perfil de velocidades

Teniendo como sistema el mismo que se plantea en la figura II.1, se partirá de la ecuación II.B.1. Del capítulo II Transporte de masa por convección-difusión sin reacción química se retomarán las consideraciones de las cuales dicen que el problema se considera en estado estacionario como indica en la ecuación II.B.3; también se retoma la consideración en donde se establece que la influencia del efecto convectivo es mayor sobre el eje x , por lo tanto el efecto difusivo será mucho menor en el eje x en comparación del eje y , como lo muestra la ecuación II.B.5; y que el efecto de la difusión lo ignoraremos en el eje z , como lo indica la ecuación II.B.6.

También se sustituye la rapidez de reacción mostrada en la ecuación IV.2, así como las ecuaciones II.B.3, II.B.5 y II.B.6 en la ecuación II.B.1 obteniendo así la ecuación IV.A.1

$$v_x \frac{\partial C_B}{\partial x} = D_{AB} \frac{\partial^2 C_B}{\partial y^2} + k_1 C_A C_B \quad (\text{IV.A.1})$$

Como una condición de frontera extra, se considera que en toda posición la concentración de la especie A y la concentración de la especie B se mantiene tomando en cuenta la relación que se muestra en la ecuación IV.A.2 (Allen, Brindley, & Merkin, 1996). Para dejar la ecuación IV.A.1 sólo en función de la concentración de la especie B, restamos de ambos lados de la ecuación IV.A.2, como se muestra en la ecuación IV.A.3. Ahora sustituimos esta última ecuación en la ecuación IV.A.1, obteniendo la ecuación IV.A.4.

$$C_A + C_B = 1 \quad (\text{IV.A.2})$$

$$C_A = 1 - C_B \quad (\text{IV.A.3})$$

$$v_x \frac{\partial C_B}{\partial x} = D_{AB} \frac{\partial^2 C_B}{\partial y^2} + k_1 C_B (1 - C_B) \quad (\text{IV.A.4})$$

De igual manera, como en los capítulos anteriores, se hará un análisis numérico considerando el perfil de velocidades y el otro donde se utiliza una velocidad característica constante. Independientemente de las diferencias entre ambos casos, esta ecuación diferencial parcial es no lineal, por lo tanto se tiene que resolver a través de un método numérico.

Se empieza por sustituir el perfil de velocidades descrito en la ecuación II.A.32 en la ecuación IV.A.4 como se muestra en la ecuación IV.A.5.

$$\frac{v}{H} y \frac{\partial C_B}{\partial x} = D_{AB} \frac{\partial^2 C_B}{\partial y^2} + k_1 C_B (1 - C_B) \quad (\text{IV.A.5})$$

De igual forma que en el capítulo anterior, se obtendrá una ecuación adimensional a través de las variables adimensionales descritas en las ecuaciones II.B.74, II.B.75 y II.C.27. Se sigue el mismo procedimiento donde por medio de la regla de la cadena se transforman las variables a adimensionales como se muestra en las ecuaciones III.A.6a, b y c. El conjunto de ecuaciones III.A.10, muestra las igualdades correspondientes de las derivadas de la ecuación con las derivadas adimensionales son las mismas para ambos casos, por lo tanto las se sustituyen en la ecuación IV.A.5, dando como resultado la ecuación IV.A.6.

$$\frac{v}{H} H\gamma \left(C_{B0} \frac{1}{H} \frac{\partial f}{\partial \xi} \right) = D_{AB} C_{B0} \frac{1}{H^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \gamma^2} + k_1 C_{B0}^2 f (1 - f) \quad (\text{IV.A.6})$$

Se multiplica la ecuación IV.A.6 por el término $\frac{H}{vC_{B0}}$, obteniendo así la ecuación IV.A.7. Se eliminan términos comunes en la ecuación anterior y se obtiene la ecuación IV.A.8. Se puede notar que en el término asociado al fenómeno difusivo se encuentra de nuevo el inverso del

número de Péclet de masa, que se describe en la ecuación II.B.71. También se encuentra en el término asociado a la reacción química el primer número de Damköhler, que se describe en la ecuación III.A.15. Por lo tanto se sustituyen las ecuaciones anteriormente mencionadas en la ecuación IV.A.7, dando como resultado la ecuación IV.A.9.

$$\gamma \frac{\partial f}{\partial \xi} = \frac{H}{vC_{B0}} D_{AB} C_{B0} \frac{1}{H^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \gamma^2} + \frac{H}{vC_{B0}} k_1 C_{B0}^2 f(1-f) \quad (IV.A.7)$$

$$\gamma \frac{\partial f}{\partial \xi} = \frac{D_{AB}}{vH} \frac{\partial^2 f}{\partial \gamma^2} + \frac{Hk_1 C_{B0}^2}{vC_{B0}} f(1-f) \quad (IV.A.8)$$

$$\gamma \frac{\partial f}{\partial \xi} = \frac{1}{Pe_M} \frac{\partial^2 f}{\partial \gamma^2} + Da_I f(1-f) \quad (IV.A.9)$$

A partir de la ecuación IV.A.9, se aplicará el método de diferencias finitas. Como se utilizarán los mismos términos diferenciales que en el capítulo anterior, utilizamos las ecuaciones III.A.19 y III.A.20 se empezara sustituyéndolas en la ecuación IV.A.10. Se multiplica toda la ecuación por el inverso de la variable gamma γ y por la separación especial constante $\Delta\xi$, dando como resultado la ecuación IV.A.11. Dentro de la ecuación anterior, se puede observar que se tiene el mismo término lambda λ que se describe en la ecuación III.A.23. De la misma forma se encuentra el término omega Ω que se describe en la ecuación III.A.25. Se sustituyen las ecuaciones III.A.23 y III.A.25 en la ecuación IV.A.11, para dar como resultado la ecuación IV.A.12. Por último se resta de ambos lados de la ecuación la función f , y se obtiene la ecuación IV.A.13.

$$\gamma \left(\frac{f(\xi + \Delta\xi, \gamma) - f(\xi, \gamma)}{\Delta\xi} \right) = \frac{1}{Pe_M} \left(\frac{f(\xi, \gamma + \Delta\gamma) - 2f(\xi, \gamma) + f(\xi, \gamma - \Delta\gamma)}{(\Delta\gamma)^2} \right) + Da_I f(\xi, \gamma)(1 - f(\xi, \gamma)) \quad (IV.A.10)$$

$$f(\xi + \Delta\xi, \gamma) - f(\xi, \gamma) = \frac{\Delta\xi}{\gamma Pe_M} \left(\frac{f(\xi, \gamma + \Delta\gamma) - 2f(\xi, \gamma) + f(\xi, \gamma - \Delta\gamma)}{(\Delta\gamma)^2} \right) - \frac{\Delta\xi}{\gamma} Da_I f(\xi, \gamma)(1 - f(\xi, \gamma)) \quad (IV.A.11)$$

$$f(\xi + \Delta\xi, \gamma) - f(\xi, \gamma) = \frac{\lambda}{\gamma} (f(\xi, \gamma + \Delta\gamma) - 2f(\xi, \gamma) + f(\xi, \gamma - \Delta\gamma)) + \frac{\Omega}{\gamma} f(\xi, \gamma)(1 - f(\xi, \gamma)) \quad (IV.A.12)$$

$$f(\xi + \Delta\xi, \gamma) = f(\xi, \gamma) + \frac{\lambda}{\gamma} (f(\xi, \gamma + \Delta\gamma) - 2f(\xi, \gamma) + f(\xi, \gamma - \Delta\gamma)) + \frac{\Omega}{\gamma} f(\xi, \gamma)(1 - f(\xi, \gamma)) \quad (IV.A.13)$$

Ahora solo resta utilizar la notación simplificada de forma de índices en la ecuación IV.A.13, como lo indica el conjunto de ecuaciones VIII.C.16, obteniendo así la ecuación IV.A.14.

$$f_{j+1,i} = f_{j,i} + \frac{\lambda}{i} (f_{j,i+1} - 2f_{j,i} + f_{j,i-1}) + \frac{\Omega}{i} f_{j,i} (1 - f_{j,i}) \quad (IV.A.14)$$

Las condiciones de frontera no cambian por que el sistema es el mismo, por lo tanto se utilizan las que están en las ecuaciones III.A.31a, b y III.A.32. Para $i=n$, se aplica la condición de frontera descrita en la ecuación III.A.31b, dando como resultado la ecuación IV.A.15.

$$f_{j+1,n} = f_{j,n} + \frac{\lambda}{n}(2f_{j,n-1} - 2f_{j,n}) + \frac{\Omega}{n}f_{j,n}(1 - f_{j,n}) \quad (\text{IV.A.15})$$

En base a la ecuación IV.A.14 para $i=2\dots n-1$, y la ecuación IV.A.15 se construyó un código de MATLAB para que ejecutará el método numérico. Este código de MATLAB se encuentra en la sección VIII.A.3.

IV.B Obtención del perfil de concentraciones de la especie B considerando una velocidad constante característica constante

Ahora se empezará a resolver el sistema tomando en cuenta una velocidad característica constante. Se retoma la ecuación IV.A.4, en donde se sabe que v_x es la velocidad característica del sistema, como se muestra en la ecuación II.C.1. Como en el caso anterior de este capítulo, se obtiene una ecuación adimensional a través de las variables adimensionales que se mencionan en las ecuaciones II.B.74, II.B.75 y II.C.27. Sigue el mismo procedimiento donde por medio de la regla de la cadena se transforman las variables a adimensionales como se muestra en las ecuaciones III.A.6a, b y c. Las ecuaciones III.A.10a, b y c, que muestran la igualdad correspondiente de las derivadas de las ecuaciones con las derivadas adimensionales son las mismas para ambos casos, por lo tanto se sustituyen en la ecuación IV.B.1.

$$v_x \left(C_{B0} \frac{1}{H} \frac{\partial f}{\partial \xi} \right) = D_{AB} C_{B0} \frac{1}{H^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \gamma^2} + k_1 C_{B0}^2 f(1 - f) \quad (\text{IV.B.1})$$

Se multiplica la ecuación IV.B.1 por el término $\frac{H}{v_x C_{B0}}$, obteniendo así la ecuación IV.B.2. Se eliminan términos comunes en la ecuación anterior y se obtiene la ecuación IV.B.3. De igual forma que el caso anterior de este capítulo, en la ecuación IV.B.3 se encuentran en los términos asociados al fenómeno difusivo al inverso del número de Péclet de masa, que se describe en la ecuación II.B.71, y en el término de reacción química al primer número de Damköhler, que se describe en la ecuación III.A.15. Al sustituir las ecuaciones II.B.71 y III.A.15 en la ecuación IV.B.3, se obtiene la ecuación IV.B.4.

$$\frac{\partial f}{\partial \xi} = D_{AB} C_{B0} \frac{H}{v_x C_{B0}} \frac{1}{H^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \gamma^2} + k_1 C_{B0}^2 \frac{H}{v_x C_{B0}} f(1 - f) \quad (\text{IV.B.2})$$

$$\frac{\partial f}{\partial \xi} = \frac{D_{AB}}{v_x H} \frac{\partial^2 f}{\partial \gamma^2} + k_1 C_{B0}^2 \frac{H}{v_x C_{B0}} f(1 - f) \quad (\text{IV.B.3})$$

$$\frac{\partial f}{\partial \xi} = \frac{1}{Pe_M} \frac{\partial^2 f}{\partial \gamma^2} + Da_I f(1 - f) \quad (\text{IV.B.4})$$

La ecuación IV.B.4 se asimila a lo que en la literatura se le conoce como ecuación de Fisher (Grinrod, 1996). En artículos complejos se han propuesto métodos analíticos para resolver esta ecuación (Wazwaz & Gorguis, 2004) (Olmos & Shizgal, 2006). Sin embargo, se opta por resolverla como en el caso anterior, por medio del método de diferencias finitas. De las ecuaciones III.A.19 y III.A.20 se parte para sustituirlas en la ecuación IV.B.4, se obtiene la ecuación IV.B.5. Se multiplica toda la ecuación por la separación especial constante $\Delta\xi$, dando como resultado la ecuación IV.B.6. Dentro de la ecuación anterior, se puede observar que se tiene el mismo término lambda λ que se describe en la ecuación III.A.23. De la misma forma se encuentra el término omega Ω que se describe en la ecuación III.A.25. Se sustituyen las ecuaciones III.A.23 y III.A.25 en la ecuación IV.B.6 para dar como resultado la ecuación IV.B.7. Se suman de ambos lados de la ecuación la función, obteniendo lo que se muestra en la ecuación IV.B.8

$$\frac{f(\xi + \Delta\xi, \gamma) - f(\xi, \gamma)}{\Delta\xi} = \frac{1}{Pe_M} \left(\frac{f(\xi, \gamma + \Delta\gamma) - 2f(\xi, \gamma) + f(\xi, \gamma - \Delta\gamma)}{(\Delta\gamma)^2} \right) + Da_1 f(\xi, \gamma) (1 - f(\xi, \gamma)) \quad (IV.B.5)$$

$$f(\xi + \Delta\xi, \gamma) - f(\xi, \gamma) = \frac{\Delta\xi}{Pe_M (\Delta\gamma)^2} (f(\xi, \gamma + \Delta\gamma) - 2f(\xi, \gamma) + f(\xi, \gamma - \Delta\gamma)) + \Delta\xi Da_1 f(\xi, \gamma) (1 - f(\xi, \gamma)) \quad (IV.B.6)$$

$$f(\xi + \Delta\xi, \gamma) - f(\xi, \gamma) = \lambda (f(\xi, \gamma + \Delta\gamma) - 2f(\xi, \gamma) + f(\xi, \gamma - \Delta\gamma)) + \Omega (f(\xi, \gamma) (1 - f(\xi, \gamma))) \quad (IV.B.7)$$

$$f(\xi + \Delta\xi, \gamma) = f(\xi, \gamma) + \lambda (f(\xi, \gamma + \Delta\gamma) - 2f(\xi, \gamma) + f(\xi, \gamma - \Delta\gamma)) + \Omega (f(\xi, \gamma) (1 - f(\xi, \gamma))) \quad (IV.B.8)$$

Se utiliza la notación simplificada para la ecuación IV.B.8, como sugiere el conjunto de ecuaciones VIII.C.16, y se obtiene así la ecuación IV.B.9.

$$f_{j+1,i} = f_{j,i} + \lambda (f_{j,i+1} - 2f_{j,i} + f_{j,i-1}) + \Omega f_{j,i} (1 - f_{j,i}) \quad (IV.B.9)$$

De igual manera que en el caso anterior se van a mantener las mismas condiciones de frontera plasmadas en las ecuaciones III.A.31a, b y III.A.32. Para $i=n$, aplicamos en la ecuación IV.B.9 la condición de frontera descrita en la ecuación III.A.31b, dando como resultado la ecuación IV.B.10.

$$f_{j+1,n} = f_{j,n} + \lambda (2f_{j,n-1} - 2f_{j,n}) + \Omega f_{j,n} (1 - f_{j,n}) \quad (IV.A.15)$$

En base a la ecuación IV.B.9 para $i=2 \dots n-1$, y la ecuación IV.B.10 también se construyó un código de MATLAB para que ejecutará el método numérico. Este código de MATLAB se encuentra en la sección VIII.A.4.

V Análisis de resultados

En los capítulos anteriores se plantearon los métodos analíticos o numéricos para obtener las soluciones del sistema para los casos de difusión sin reacción química, difusión con reacción química de primer orden y difusión con reacción química autocatalítica. Ahora toca el turno de comparar entre casos, realizando la sustitución numérica o método numérico según sea el caso.

Se obtuvieron los resultados para todos los casos a diferentes magnitudes de los números adimensionales Péclet de masa y del primer número de Damköhler, según sea el caso, y por consecuencia también se tiene para cada evento con reacción química al segundo número de Damköhler.

Se comparan los resultados obtenidos de los casos en los que no se involucra una reacción química con los que si involucra una reacción química, ya sea de primer orden o autocatalítica. También se hará una comparación entre las soluciones obtenidas con las dos propuestas de solución, en donde se considera el perfil de velocidades descrito en la ecuación II.A.31, y en donde se considera sólo una velocidad característica constante.

Para realizar el análisis, establecemos valores arbitrarios en escala logarítmica que son los que se muestran en la tabla V.1 para dar un rango amplio al dominio de los tres efectos que se presentan en la proceso de transferencia de masa, que son el efecto difusivo, convectivo y de reacción química. Con los valores de la tabla se evaluarán los números adimensionales al momento de hacer la sustitución numérica en los perfiles de concentraciones.

Tabla V.1 Tabla de valores arbitrarios para la sustitución de los números adimensionales

10^n	Valor para los números adimensionales Péclet de masa, primer y segundo número de Damköhler
-2	0.01
-1	0.1
0	1
1	10
2	100
3	1000

V.A Comparación entre sistemas sin reacción y con reacción química

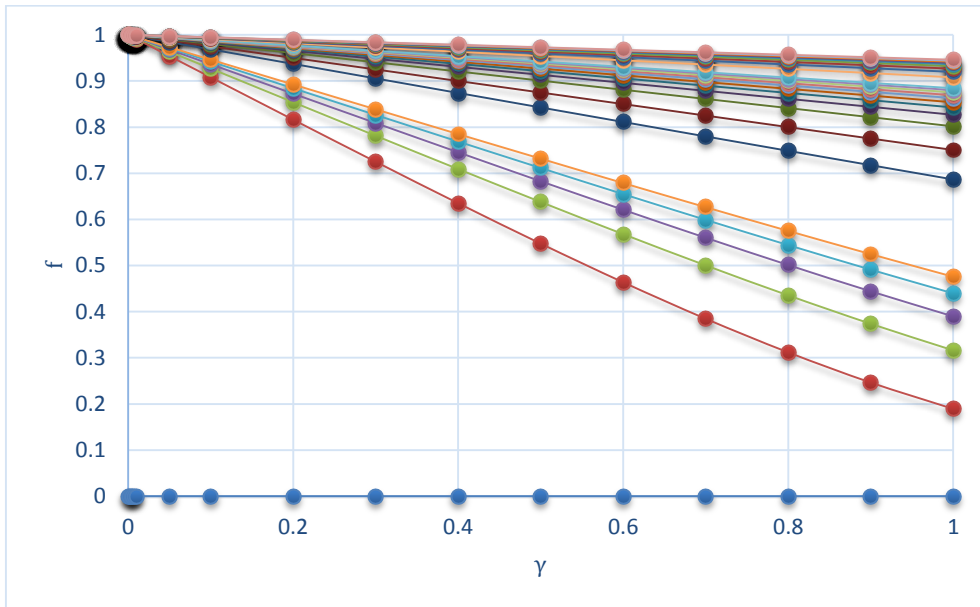
Se propone empezar el análisis con los casos en donde no se lleva a cabo la reacción química y compararlo con los casos donde hay reacción química, pero donde sea menor la influencia de la reacción química. Las soluciones propuestas en las secciones II.B, III.A y IV.A serán comparadas para distintos valores de Péclet de masa y un valor de 0.01 para el primer número de Damköhler.

Para cuando el Péclet de masa tiene un valor de 0.01 en el sistema sin reacción química y considerando el perfil de velocidades descrito en la II.A.32, obtenemos como resultado lo que se muestra en el compendio de gráficas V.A.1. En las gráficas se puede observar como inmediatamente que entra el fluido puro de especie A entre placas, a poca distancia recorrida en el sistema se “satura” de la especie B. Esto se puede explicar a que por el valor del número de Péclet menor a uno, el efecto difusivo domina en el sistema logrando difundir a la especie B a lo ancho de la placa.

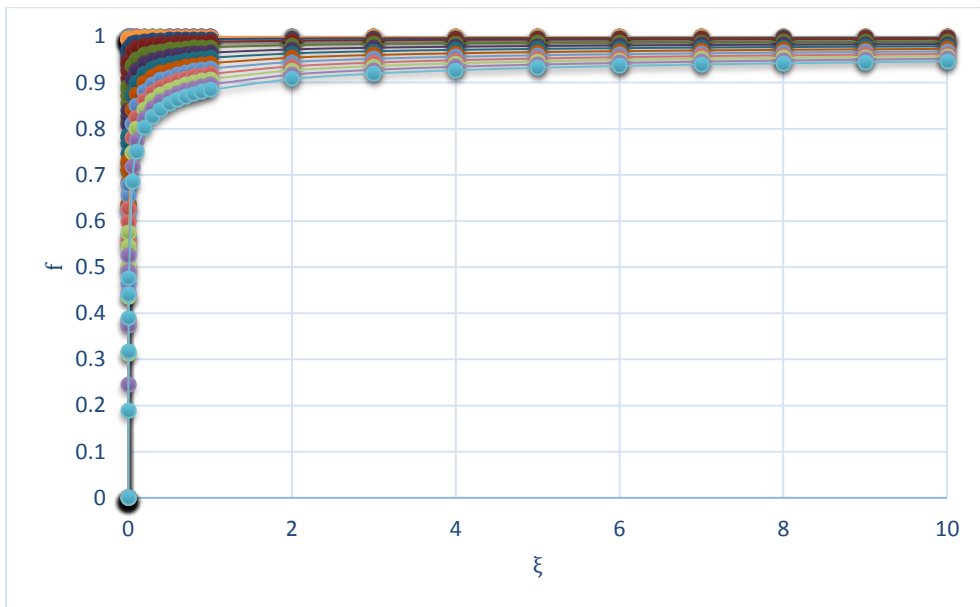
Sin embargo al comparar el compendio de gráficas V.A.1 con el compendio de gráficas V.A.2, correspondiente al caso de reacción química de primer orden, se puede notar también se “satura” el sistema debido a que el efecto difusivo domina, pero le toma más distancia a lo largo de la placa el hacerlo. Esto se puede explicar a que la especie B se encuentra en la reacción descrita en la ecuación III.1 y se va consumiendo un poco de la especie B, retrasando un poco la difusión de esta.

En el caso de la reacción química autocatalítica, que se muestra en el compendio de gráficas de V.A.3, muestra un comportamiento muy parecido a lo que se muestra en el caso de reacción química de primer orden.

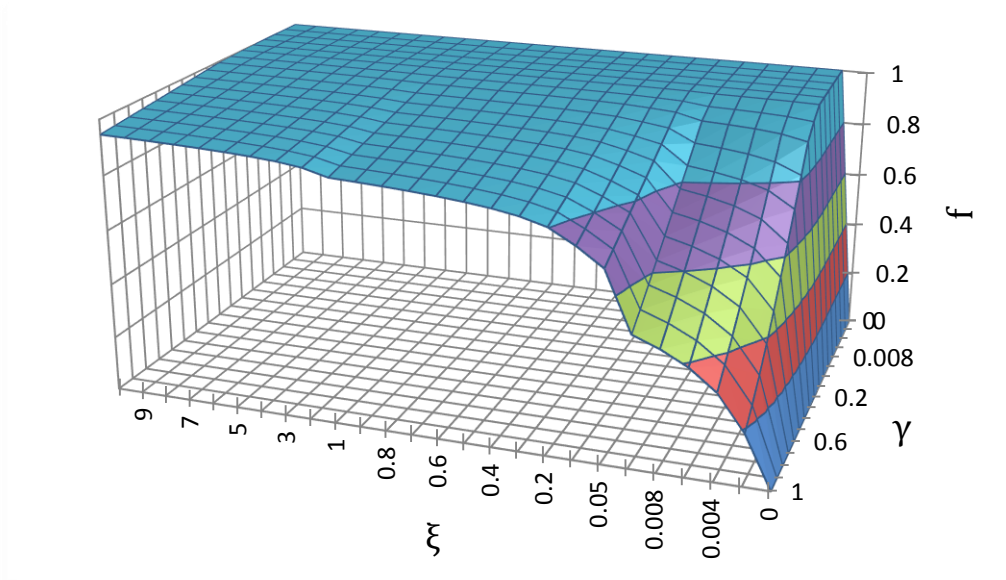
V.A.1 Caso sin reacción química, considerando el perfil de velocidades. $Pe_M = 0.01$



Gráfica V.A.1.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.

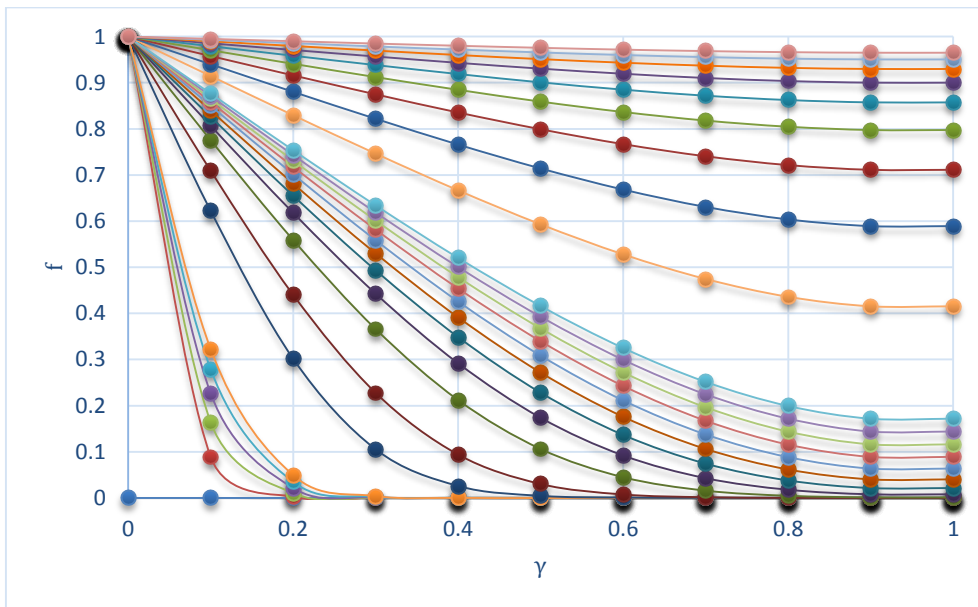


Gráfica V.A.1.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.

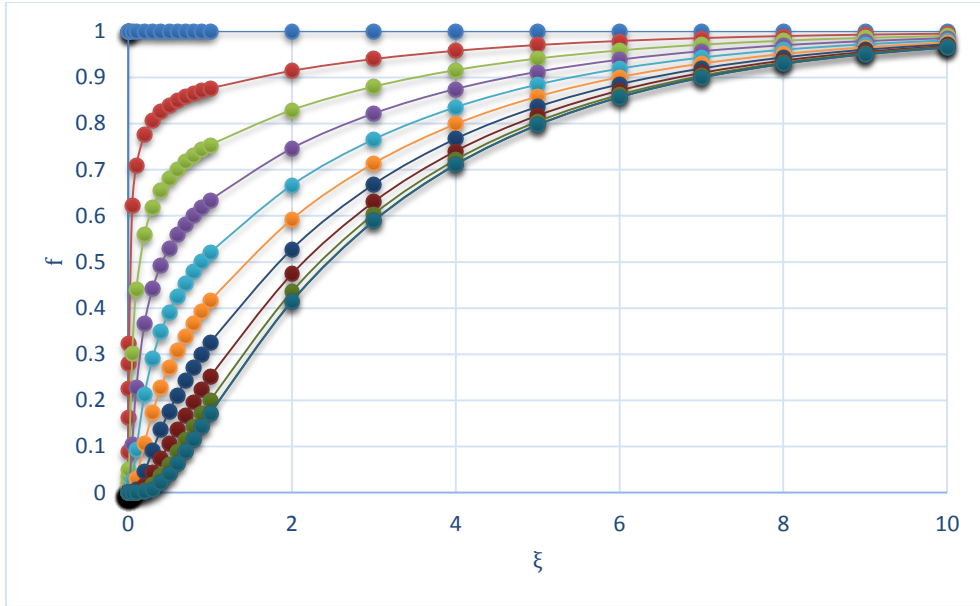


Gráfica V.A.1.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición.

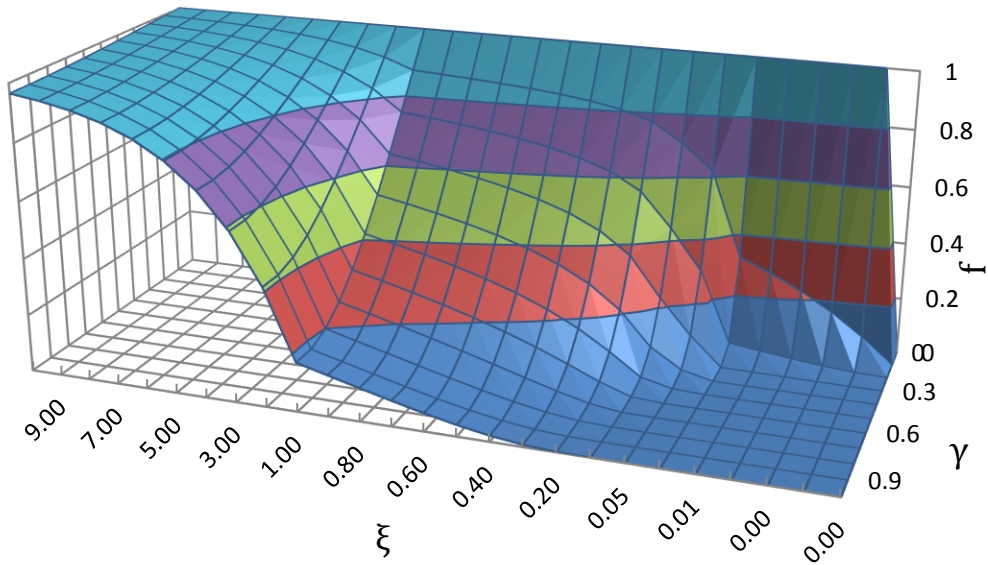
V.A.2 Caso con reacción química de primer orden, considerando el perfil de velocidades.
 $Pe_M = 0.01$, $Da_I = 0.01$ y $Da_{II} = 0.0001$



Gráfica V.A.2.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.

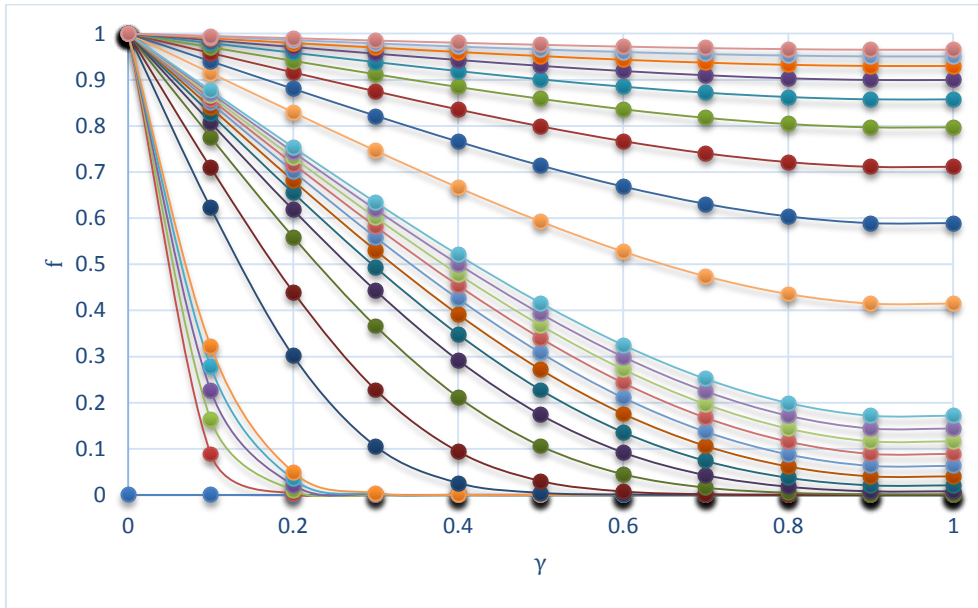


Gráfica V.A.2.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.

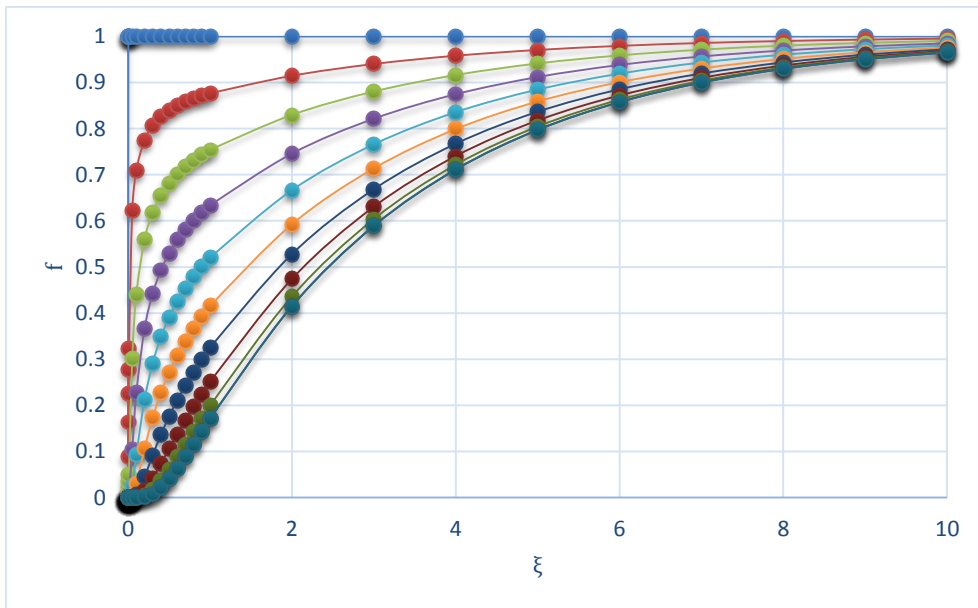


Gráfica V.A.2.c de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.

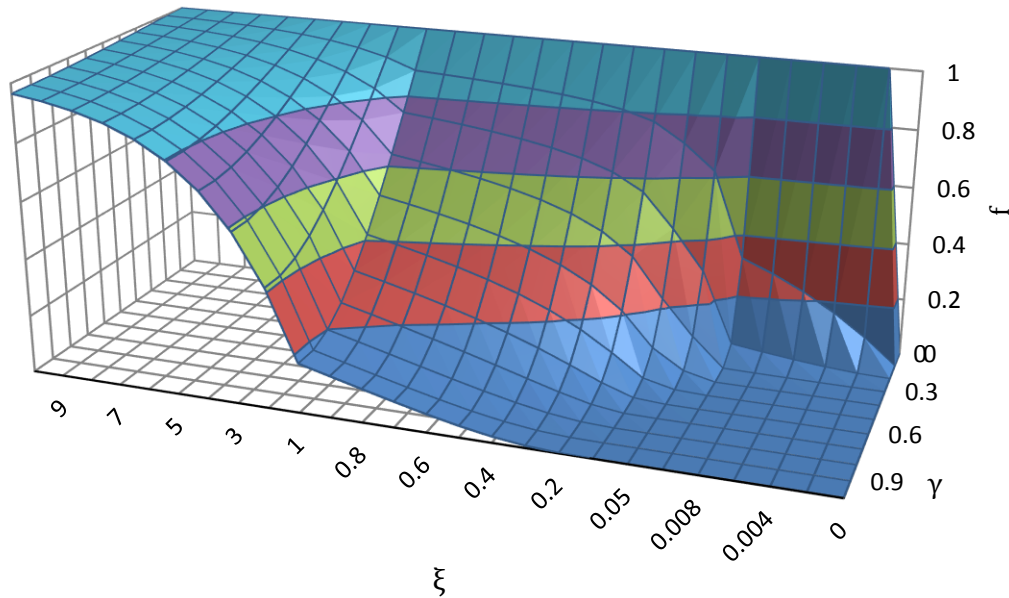
V.A.3 Caso con reacción química autocatalítica, considerando el perfil de velocidades.
 $Pe_M = 0.01$, $Da_I = 0.01$ y $Da_{II} = 0.0001$



Gráfica V.A.3.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.



Gráfica V.A.3.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.



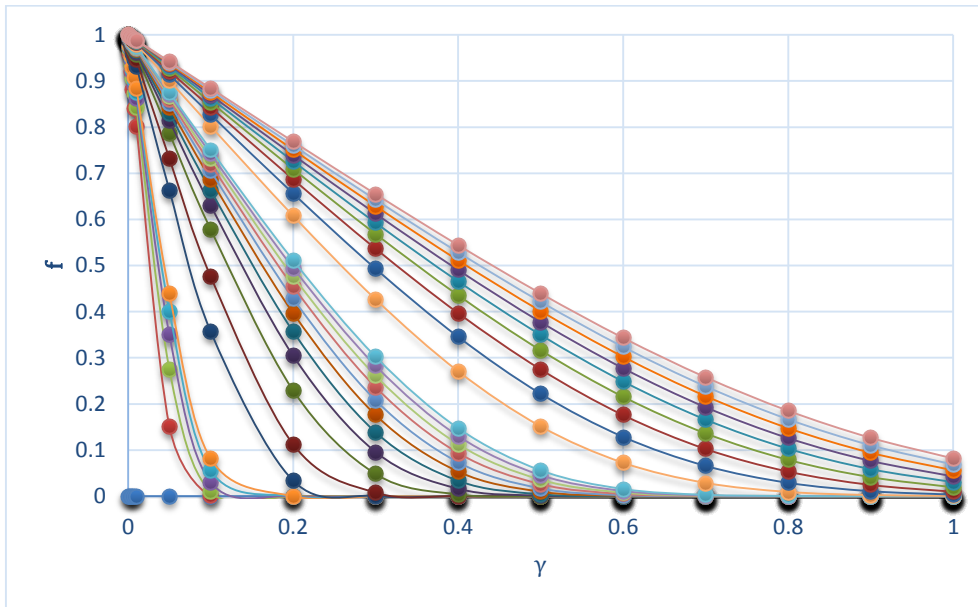
Gráfica V.A.3.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición.

Continuando con el análisis en donde la influencia de la reacción química es menor, se comparará el efecto de la reacción química pero cuando domina el efecto convectivo en el sistema, por ello tomaremos el valor de número de Péclet de masa de 100. El conjunto de gráficas V.A.4, muestra el caso del sistema sin reacción química considerando el perfil de velocidades. Se puede observar que en el sistema la concentración de la especie B va disminuyendo a lo largo de las placas, ya que la convección logra arrastrar la especie B por lo que a una distancia larga en la placa superior se tiene una concentración igualada a cero para la especie B.

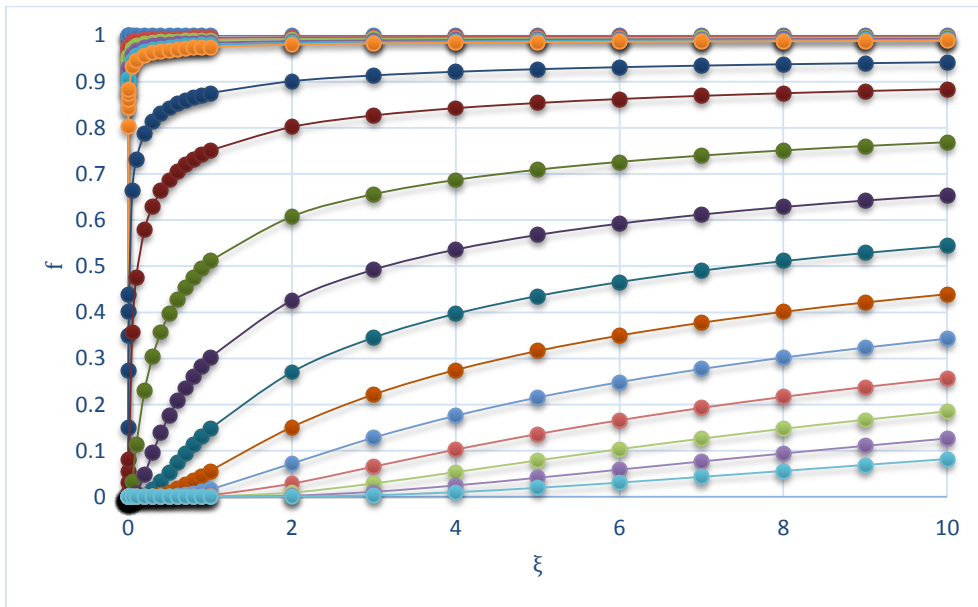
En el conjunto de gráficas V.A.5 se describe al sistema con reacción de primer orden, se puede observar el mismo fenómeno descrito anteriormente, con la diferencia de que en menos distancia a lo largo de la placa logra que la concentración de la especie B sea igual a cero.

Para el caso de reacción autocatalítica, que se encuentra descrito en el conjunto de gráficas V.A.6, podemos observar el mismo comportamiento que el que se muestra en el conjunto de gráficas V.A.5.

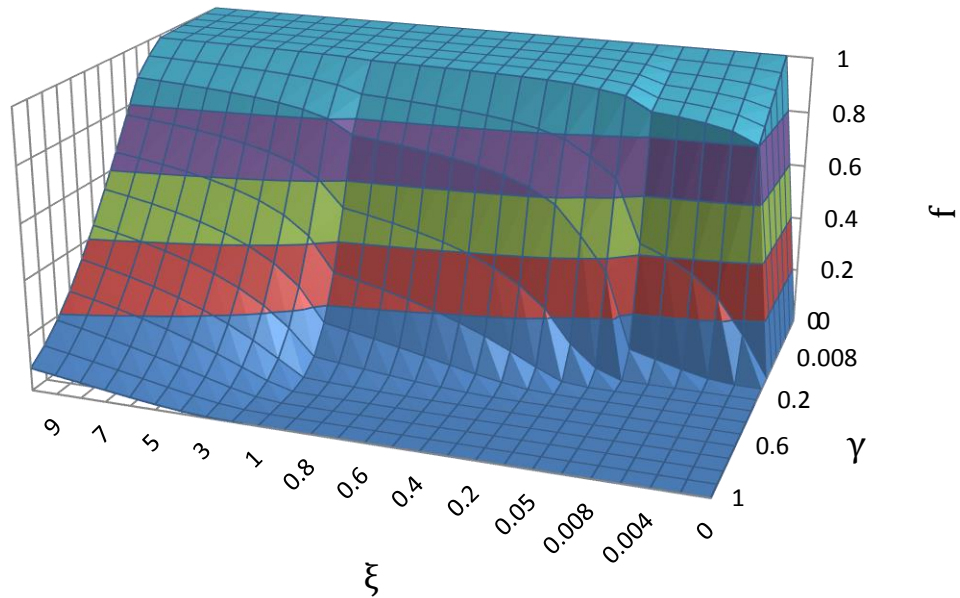
V.A.4 Caso sin reacción química, considerando el perfil de velocidades. $Pe_M = 100$



Gráfica V.A.4.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.



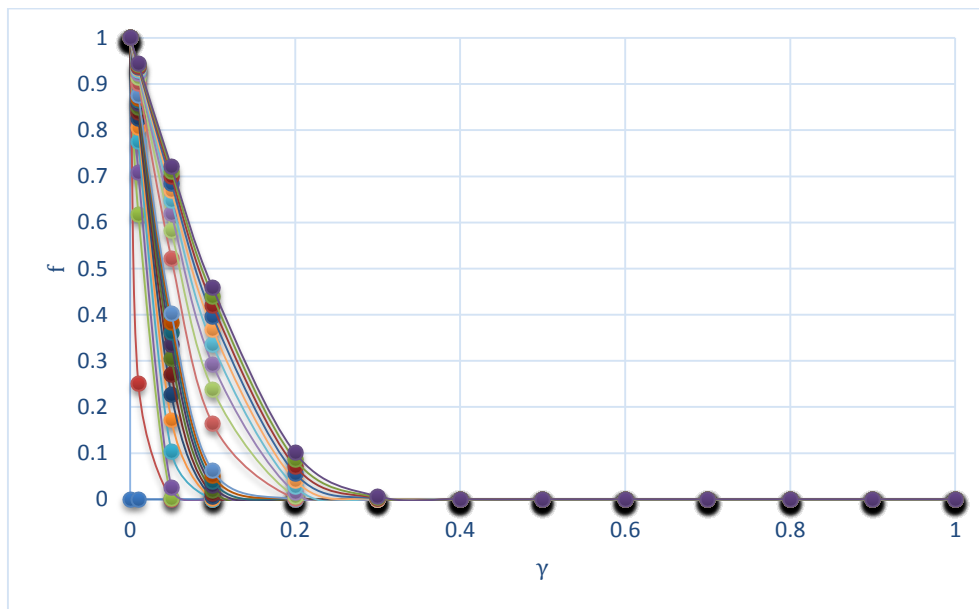
Gráfica V.A.4.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.



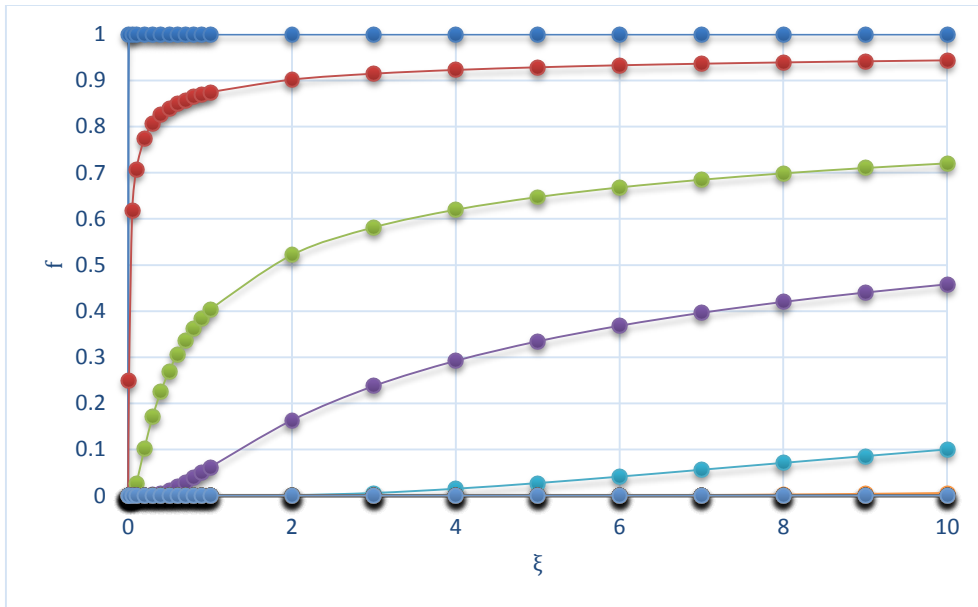
Gráfica V.A.4.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición.

V.A.5 Caso con reacción química de primer orden, considerando el perfil de velocidades.

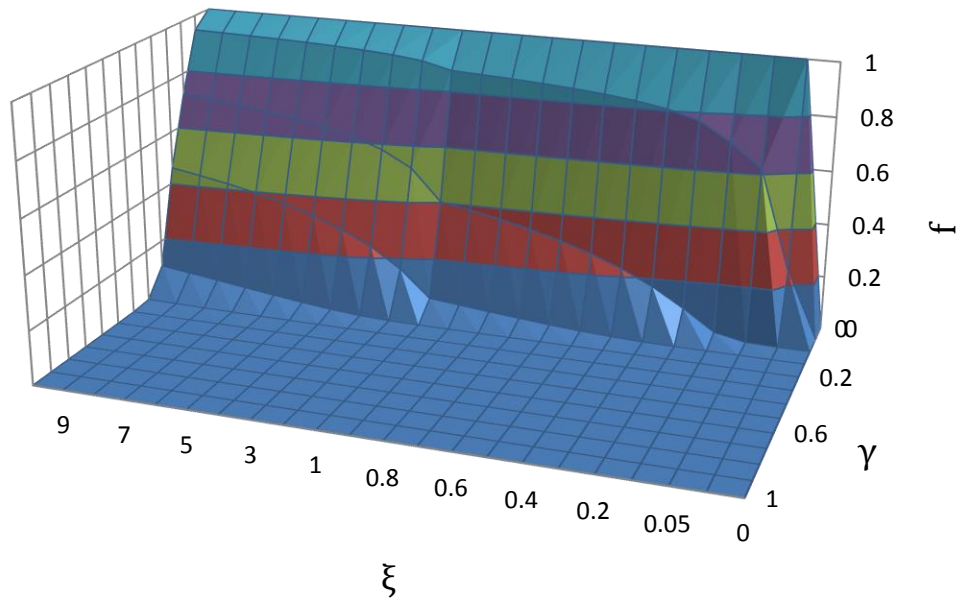
$Pe_M = 100, Da_I = 0.01$ y $Da_{II} = 1$



Gráfica V.A.5.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.

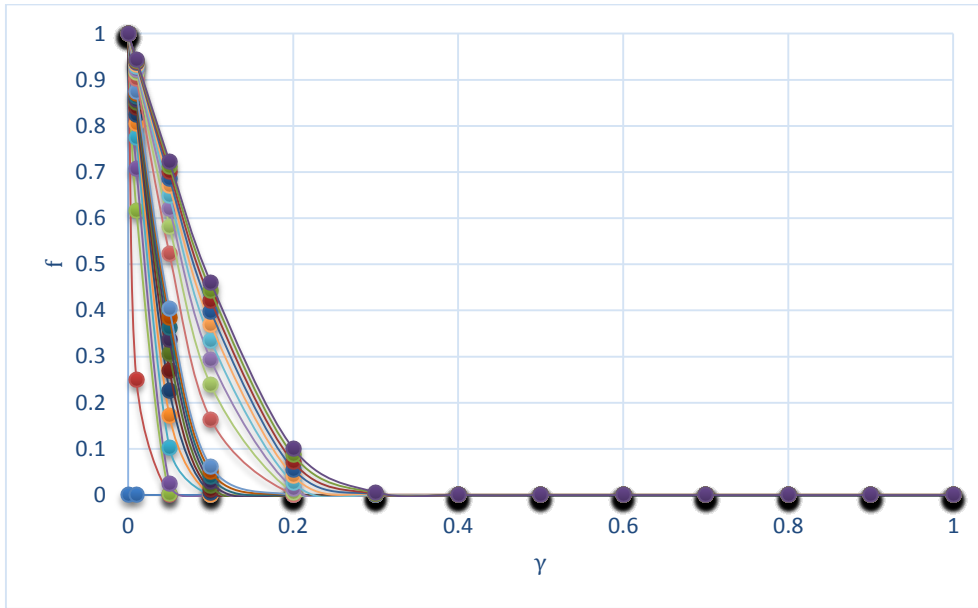


Gráfica V.A.5.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.

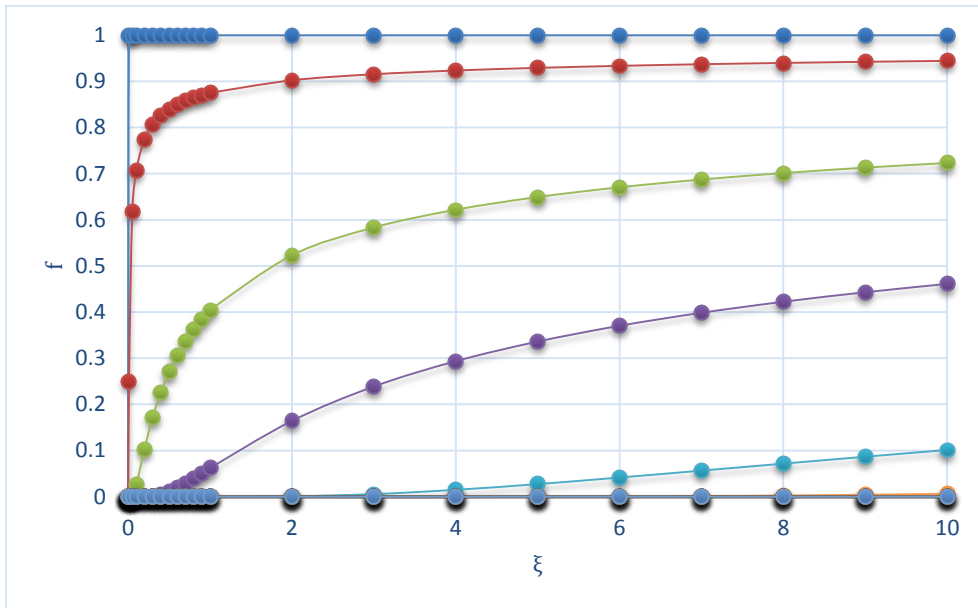


Gráfica V.A.5.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición.

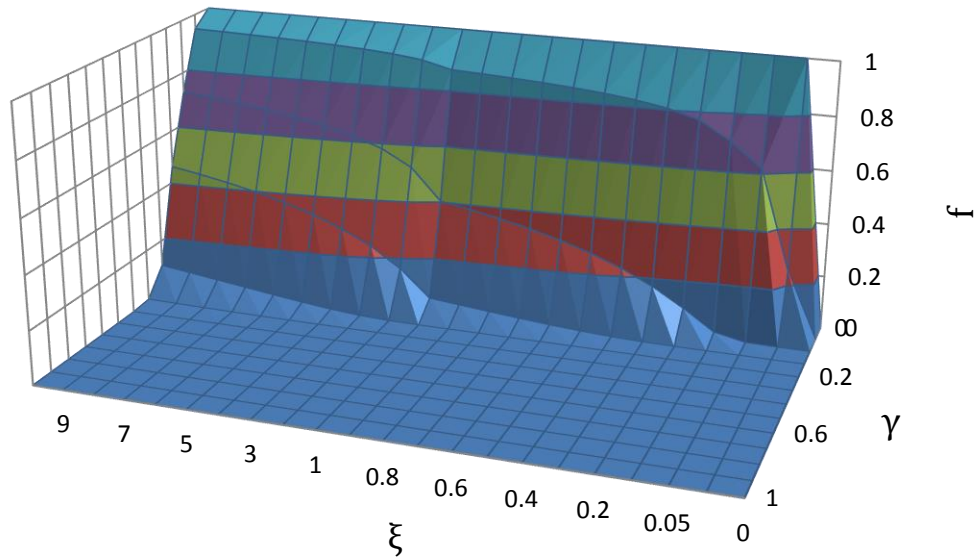
V.A.6 Caso con reacción química autocatalítica, considerando el perfil de velocidades.
 $Pe_M = 100, Da_I = 0.01$ y $Da_{II} = 1$



Gráfica V.A.6.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.



Gráfica V.A.6.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.



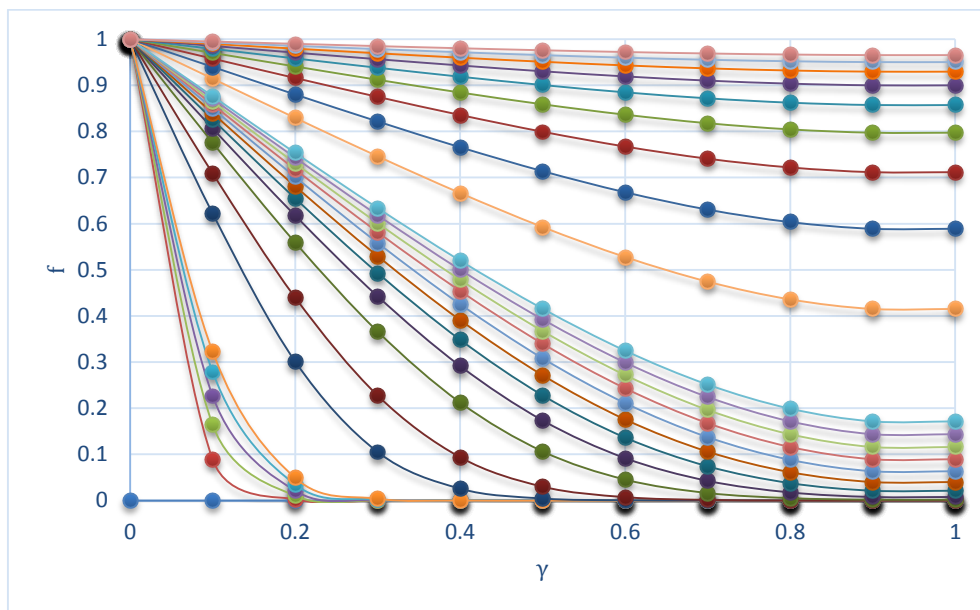
Gráfica V.A.6.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición.

Para los casos con reacción química mostrados anteriormente, en los cuales se fijó un valor del primer número de Damköhler de 0.01, valor con el cual existe una baja influencia de la reacción química al sistema. Conociendo esto, podemos observar la similitud de las gráficas de los conjuntos V.A.2 y V.A.3, y de V.A.5 con V.A.6, en las cuales se fijaron los valores 0.01 y 100 del número de Péclet de masa respectivamente. Aun teniendo una influencia pequeña, casi nula, del efecto de las reacciones químicas, los resultados mostrados en las gráficas en donde se está efectuando una reacción química comparados con los resultados en donde no hay reacción química difieren bastante de lo supuesto en la hipótesis inicial. Esto nos hace preguntar ¿por qué difieren los casos de reacción química con el que no la considera, cuando por la hipótesis planteada deberían ser muy similares los casos bajo la condición de un valor de número de Damköhler pequeño?

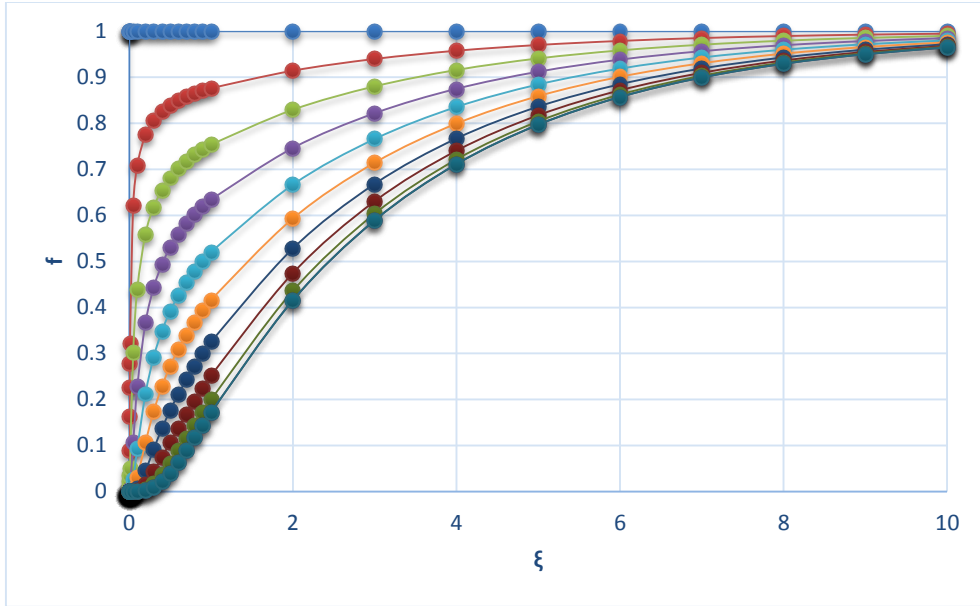
Para poder contestar la pregunta planteada, cabe mencionar que, por la naturaleza de la solución planteada en la sección II.B, no se puede comparar con las soluciones obtenidas a partir del método numérico de diferencias finitas, ya que el método utilizado de combinación de variables por similitud geométrica combina en una sola variable los términos de los efectos difusivos y convectivos con las coordenadas de la posición, haciendo que estén íntimamente relacionados. Mientras que en las soluciones a partir del método de diferencias finitas, los términos de los efectos difusivos y convectivos se encuentran de forma independiente de la posición.

Es por eso que se realizó el modelo de sistema sin reacción química a través del método de diferencias finitas, para ello se elaboró un código de MATLAB para ejecutar el método numérico que se encuentra en la sección VIII.A.5. En el conjunto de gráficas V.7 se pueden observar los resultados del caso en donde el número de Péclet tiene un valor de 0.01 y en el conjunto de gráficas V.8 se observan los resultados del caso para donde el número de Péclet tiene un valor de 100. Se puede observar que tienen un comportamiento idéntico a las gráficas en V.2 y V.3, y a las gráficas V.5 y V.6 respectivamente. Por esto podemos afirmar que a números menores a 1 del primer Damköhler el efecto de la reacción química no es significativo para el sistema, por lo tanto en estos casos se puede despreciar el efecto de la reacción química.

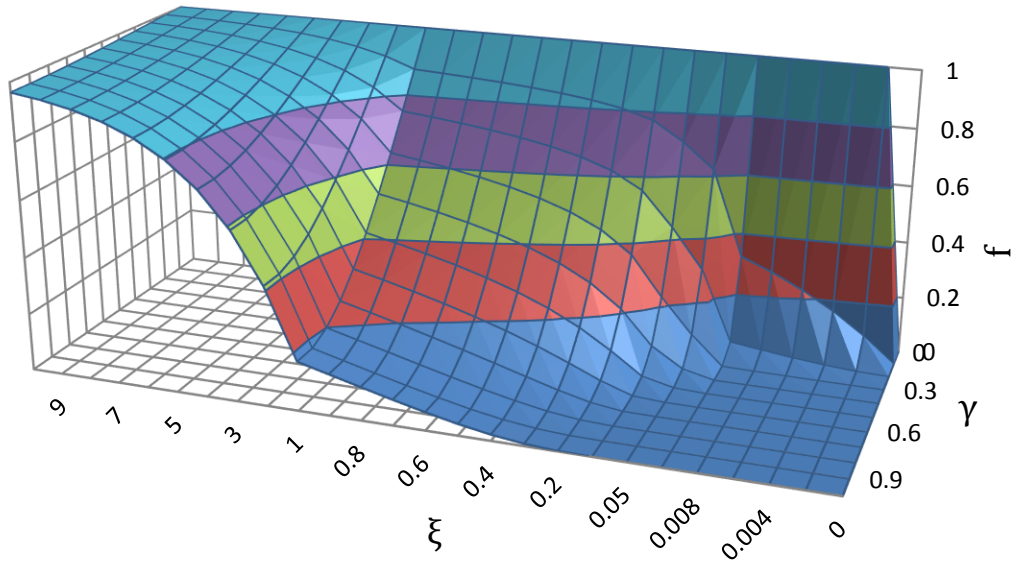
V.A.7 Caso sin reacción química, considerando el perfil de velocidades y resuelto por el método de diferencias finitas. $Pe_M = 0.001$



Gráfica V.A.7.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.

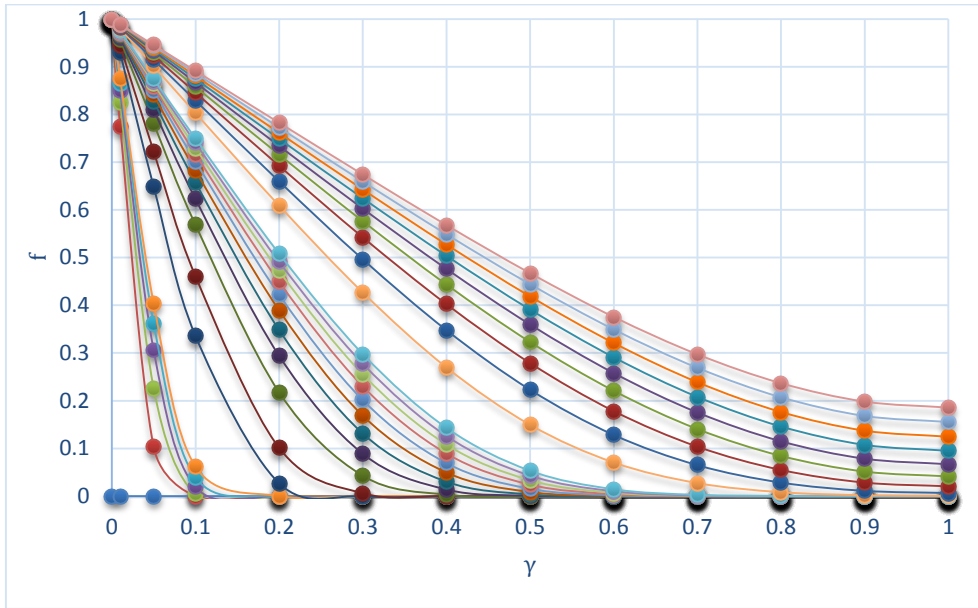


Gráfica V.A.7.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.

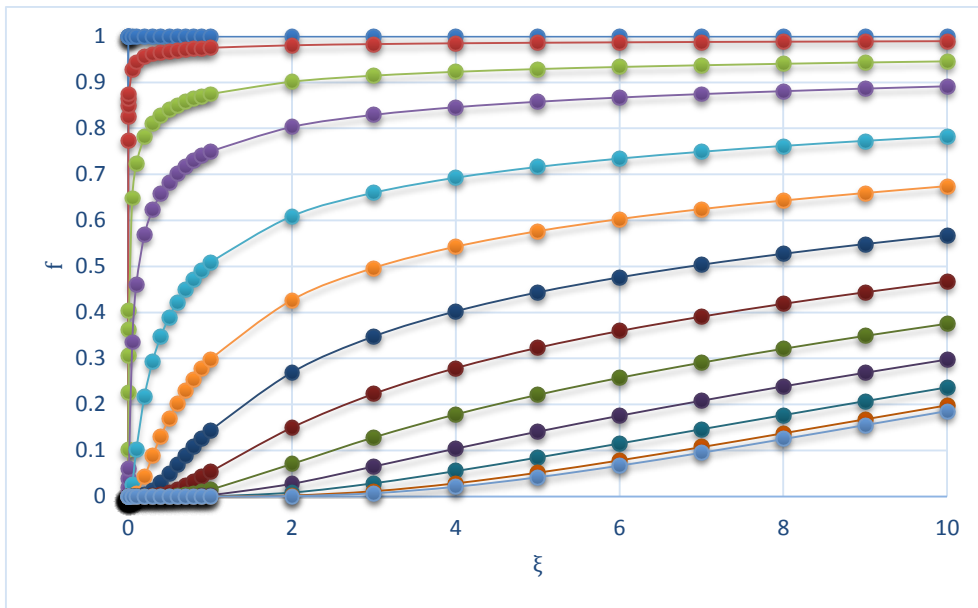


Gráfica V.A.7.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición.

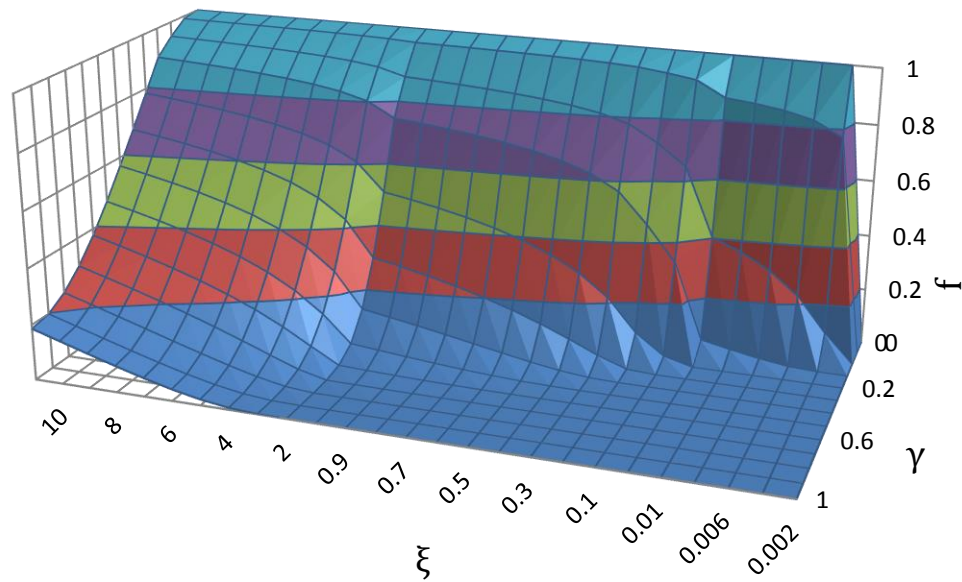
V.A.8 Caso sin reacción química, considerando el perfil de velocidades y resuelto por el método de diferencias finitas. $Pe_M = 100$



Gráfica V.A.8.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.



Gráfica V.A.8.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.



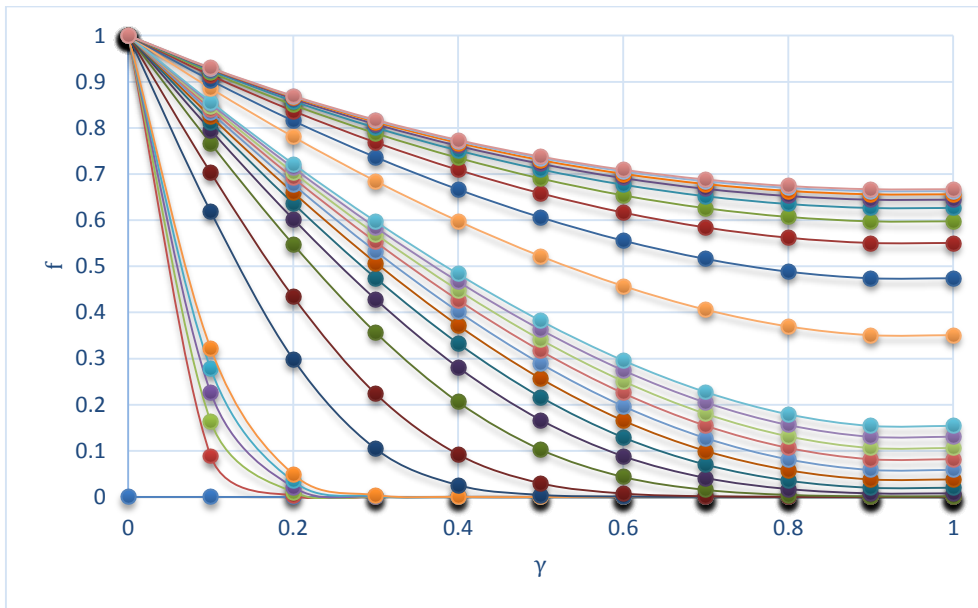
Gráfica V.A.8.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición.

V.B Comparación entre reacción química autocatalítica y reacción de primer orden

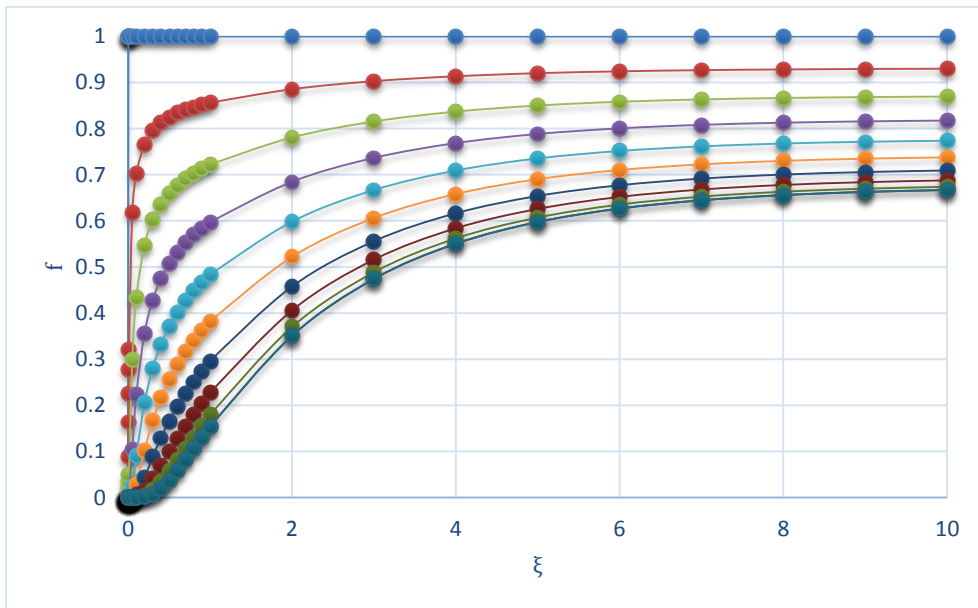
Ahora se realizará el análisis para cuando la influencia de la reacción es mayor en comparación al efecto convectivo. Para ello fijaremos el valor del primer número de Damköhler a un valor de 100. Con esto se pretende observar la diferencia del perfil de concentraciones cuando se considera una reacción química de primer orden y una reacción autocatalítica.

En el conjunto de gráficas V.B.1, se pueden observar los resultados del caso en donde considera reacción con cinética de primer orden, la influencia del perfil de velocidades y con un valor del número de Péclet de 0.01. Se puede observar de forma notable el efecto de la reacción química, ya que a pesar de que el efecto difusivo es mayor al convectivo, el sistema no llega a “saturarse” de la especie B, si no que tal parece que llega a una posición a lo largo de las placas en que la concentración va a aparentar permanecer constante para las posiciones a lo ancho de la placa. Para el caso de la reacción química autocatalítica, sus resultados se pueden observar en el conjunto de gráficas V.B.2. Se aprecia en las gráficas como a lo largo de la placa el sistema se satura después de un tramo de la placa, muy similar al caso que no considera reacción química resuelta por medio del método numérico de diferencias finitas (conjunto de gráficas V.A.7).

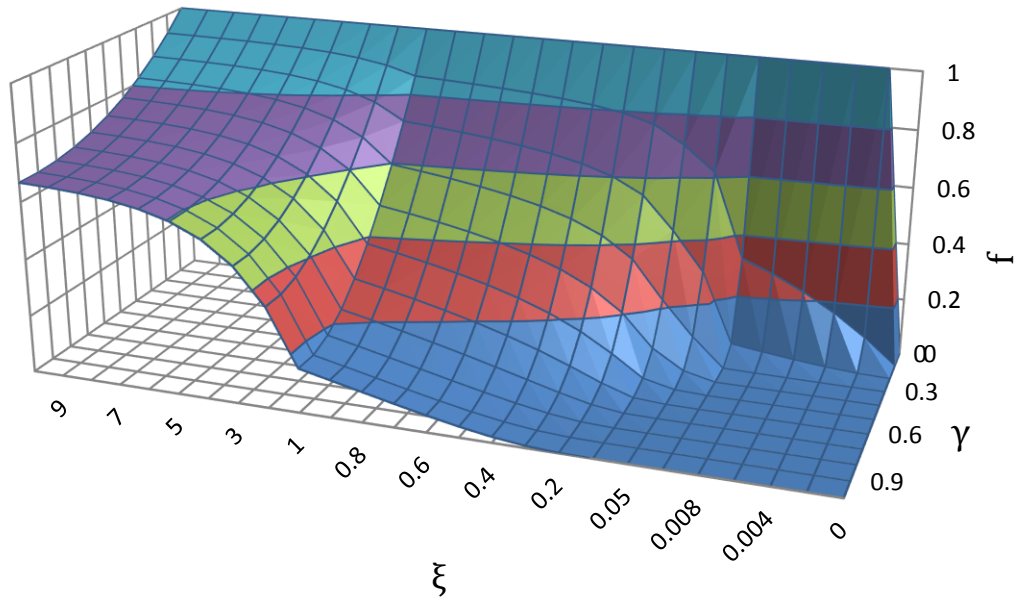
V.B.1 Caso con reacción química de primer orden, considerando el perfil de velocidades.
 $Pe_M = 0.01$, $Da_I = 100$ y $Da_{II} = 1$



Gráfica V.B.1.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.



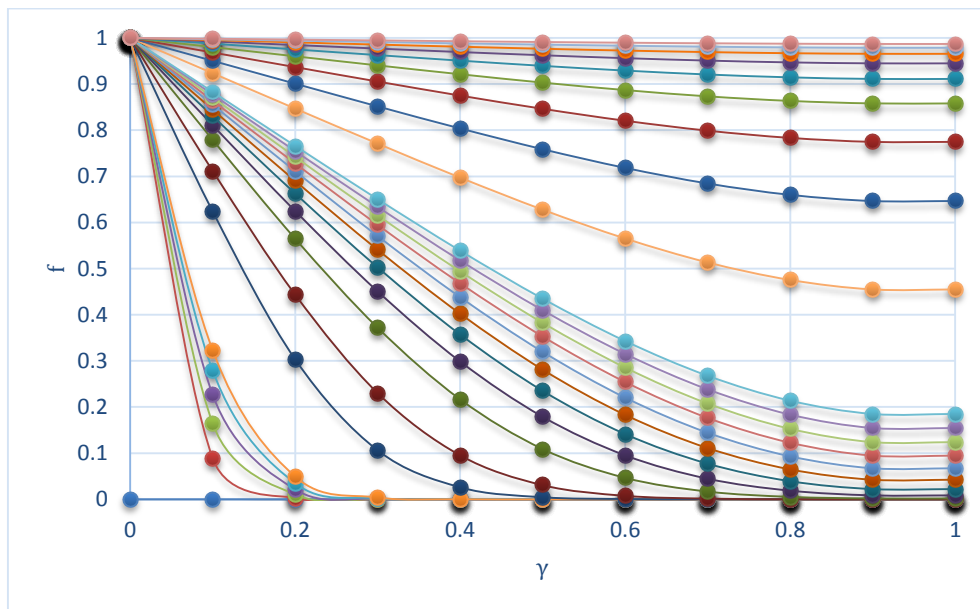
Gráfica V.B.1.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.



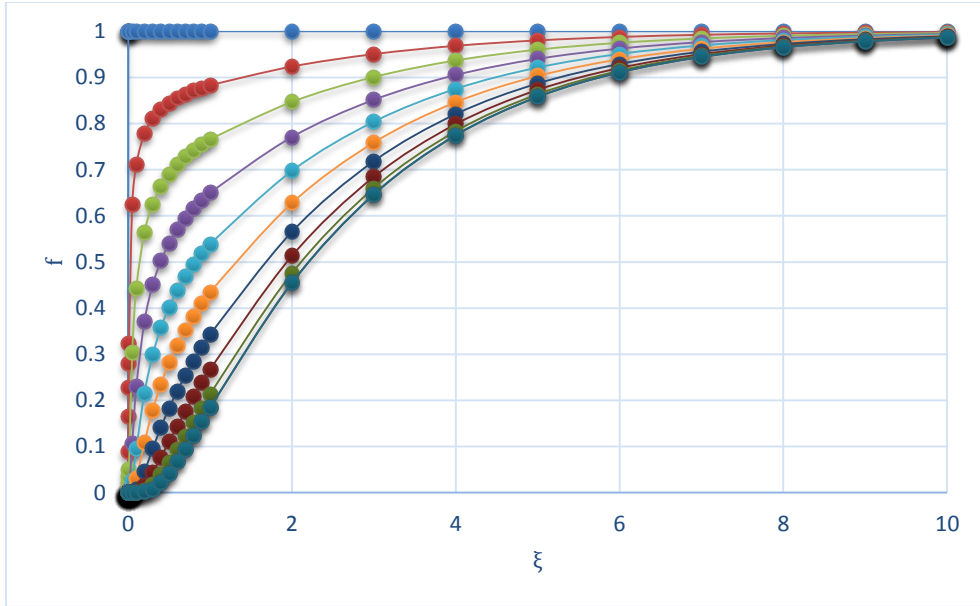
Gráfica V.B.1.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición.

V.B.2 Caso con reacción química autocatalítica, considerando el perfil de velocidades.

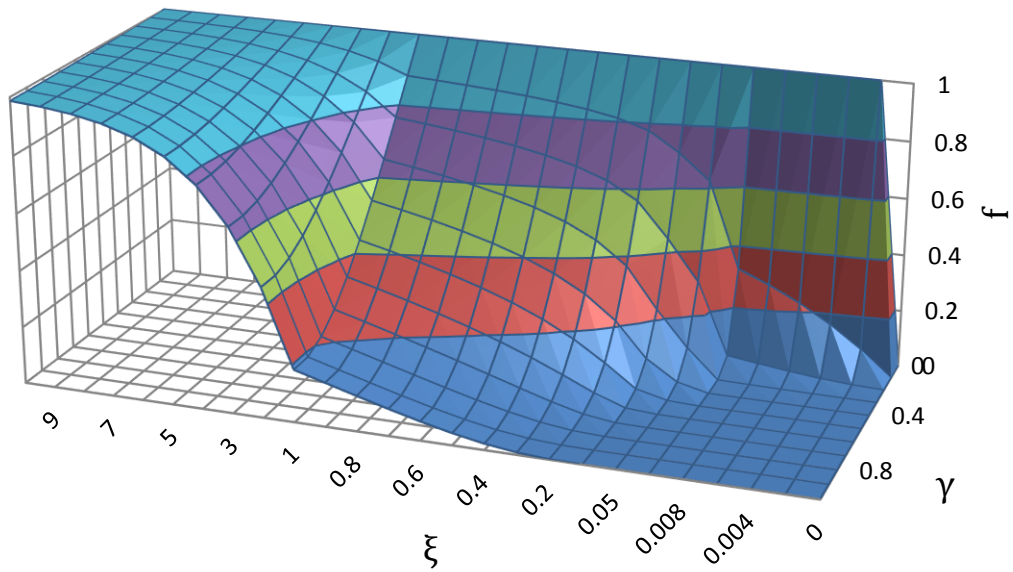
$Pe_M = 0.01$, $Da_I = 100$ y $Da_{II} = 1$



Gráfica V.B.2.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.



Gráfica V.B.2.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.

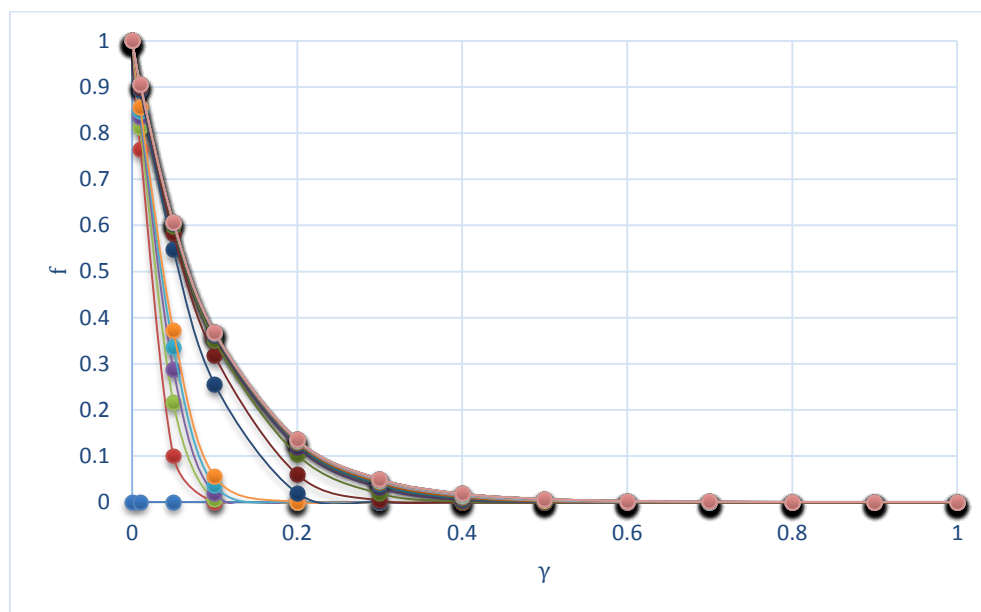


Gráfica V.B.2.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición.

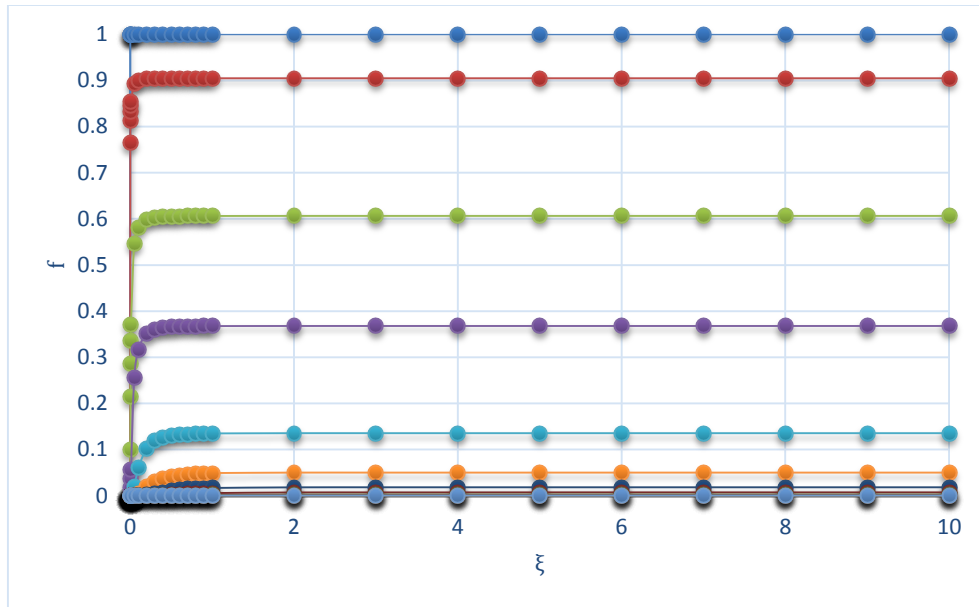
También se realizará el análisis para valores de número de Péclet de 1 y 10. En el caso de que el valor del Péclet es uno, se puede afirmar que los efectos convectivos y difusivos se encuentran compensados, pero como el Péclet es mayor, en este caso el efecto de la reacción química es la que domina en el sistema. Para el caso de reacción química con cinética de primer orden y perfil de velocidades, al igual que el caso anterior, se puede observar cómo se torna constante la concentración de la especie B a lo largo de la placas, para cada punto a lo ancho de las placas, pero tiende a que ser constante con más prontitud que el caso anterior. Para este caso en particular encontramos sus gráficas en el conjunto V.B.3.

V.B.3 Caso con reacción química primer orden, considerando el perfil de velocidades.

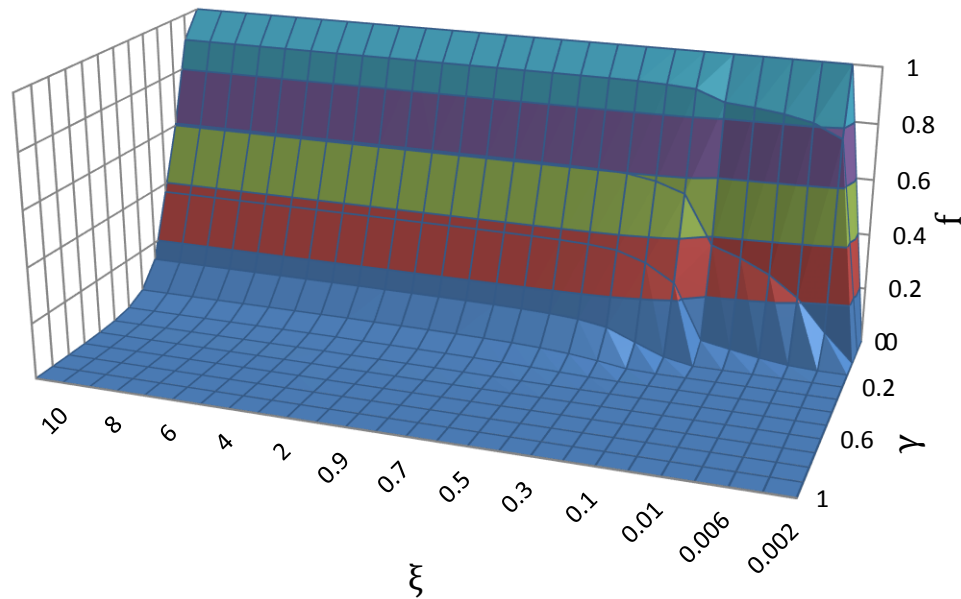
$Pe_M = 1, Da_I = 100$ y $Da_{II} = 100$



Gráfica V.B.3.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.



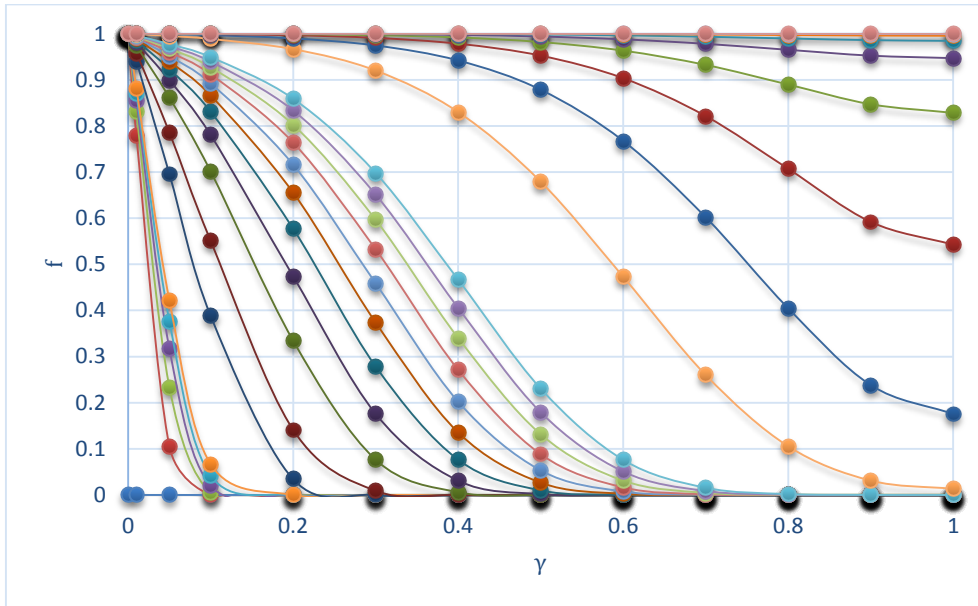
Gráfica V.B.3.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.



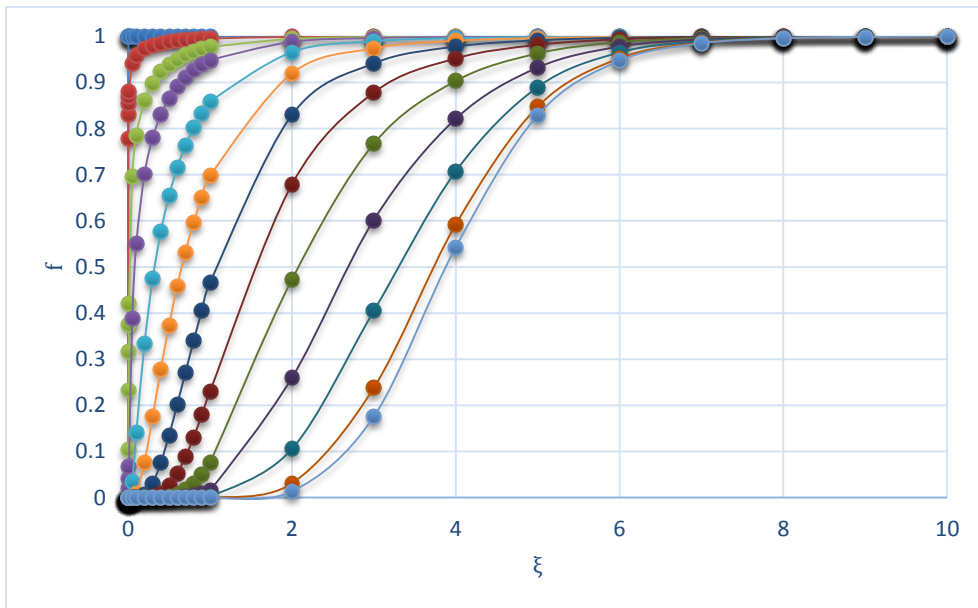
Gráfica V.B.3.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición.

Para el caso con reacción autocatalítica y considerando el perfil de velocidades, se puede observar que la concentración de la especie B llega a su máximo concentración en el sistema en cierta longitud de la placa. Este comportamiento se puede apreciar en el conjunto de gráficas V.B.4.

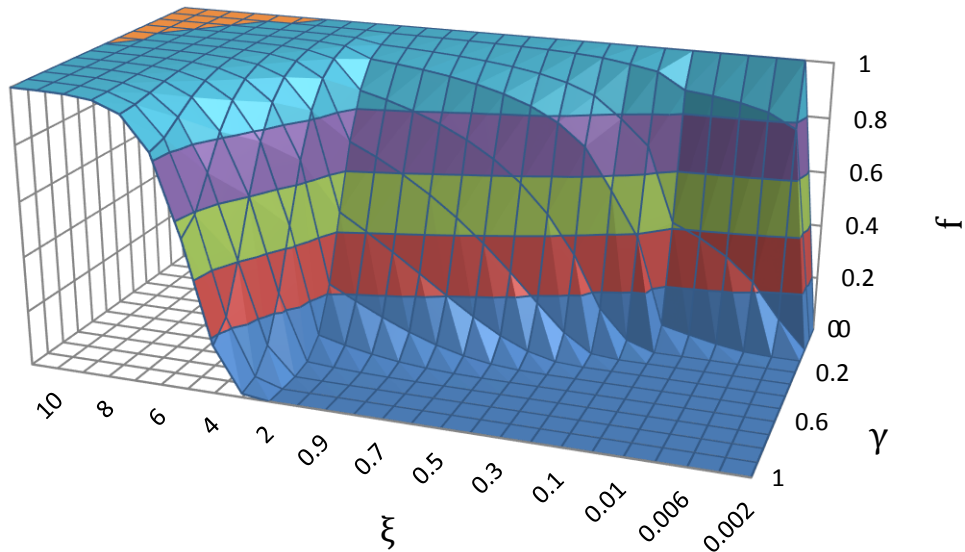
V.B.4 Caso con reacción química autocatalítica, considerando el perfil de velocidades.
 $Pe_M = 1, Da_I = 100$ y $Da_{II} = 100$



Gráfica V.B.4.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.



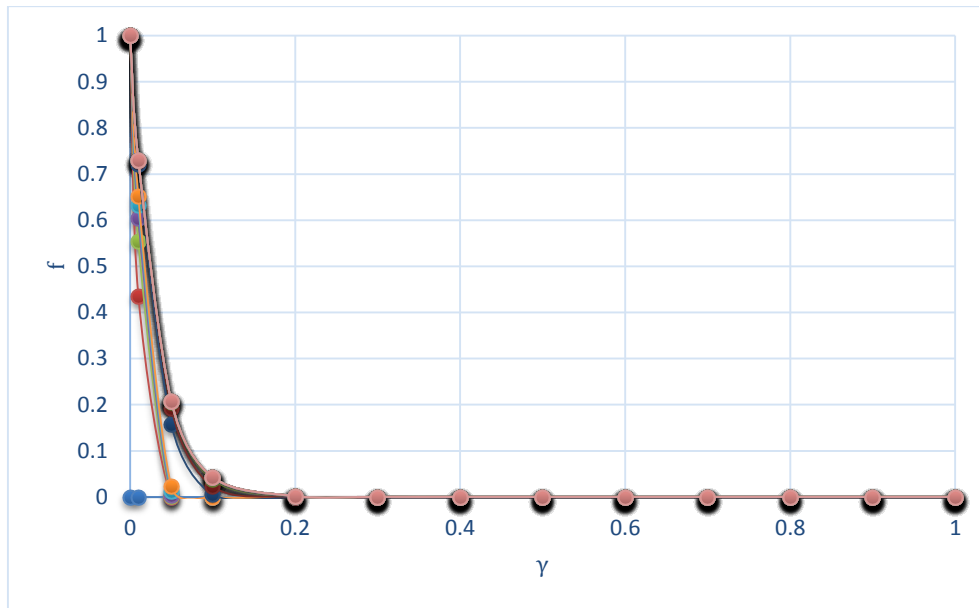
Gráfica V.B.4.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.



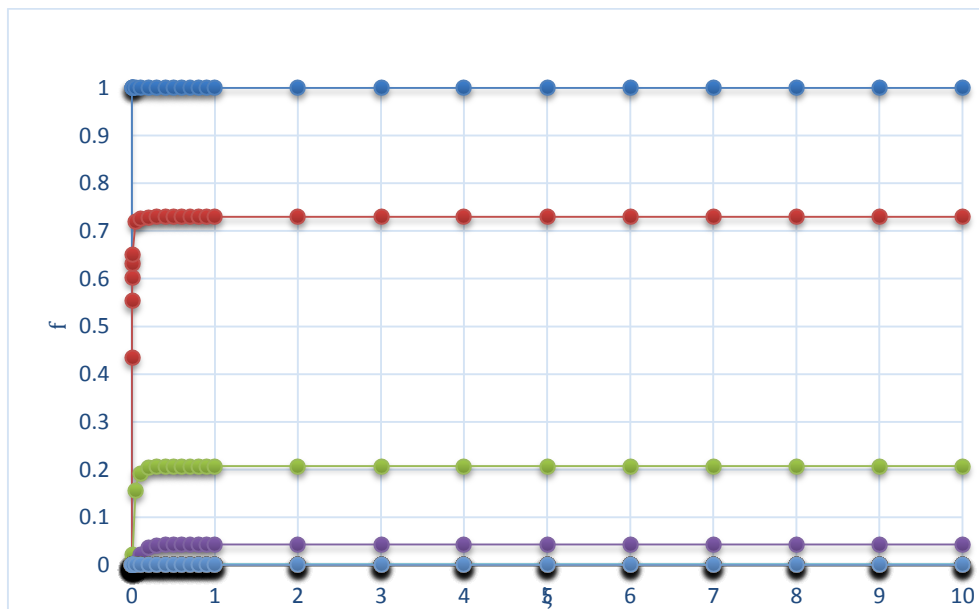
Gráfica V.B.4.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición.

Ahora se fija un valor para el número de Péclet de 10, se puede observar en los resultados en el conjunto de gráficas V.B.5, al caso de reacción química de primer orden. Prácticamente se observa una concentración constante a lo largo de las placas para cada punto a lo ancho entre las placas. El dominio del efecto convectivo, el consumo de la especie B y la concentración constante en la placa inferior es lo que le da a los casos mencionados de reacción química de primer orden la característica de que la concentración permanezca constante a lo largo de la placa para cada punto en la coordenada γ .

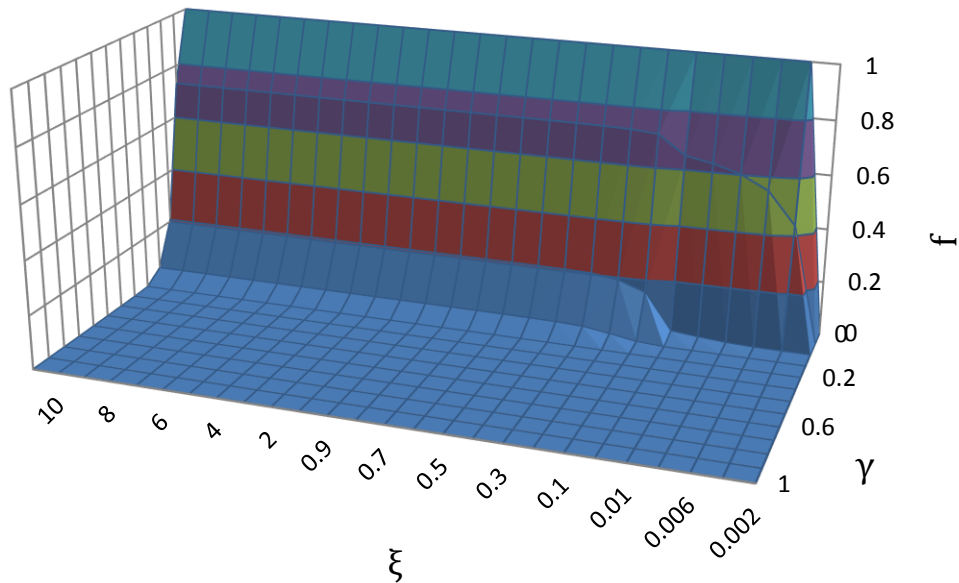
V.B.5 Caso con reacción química primer orden, considerando el perfil de velocidades.
 $Pe_M = 10$, $Da_I = 100$ y $Da_{II} = 100$



Gráfica V.B.5.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.



Gráfica V.B.5.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.

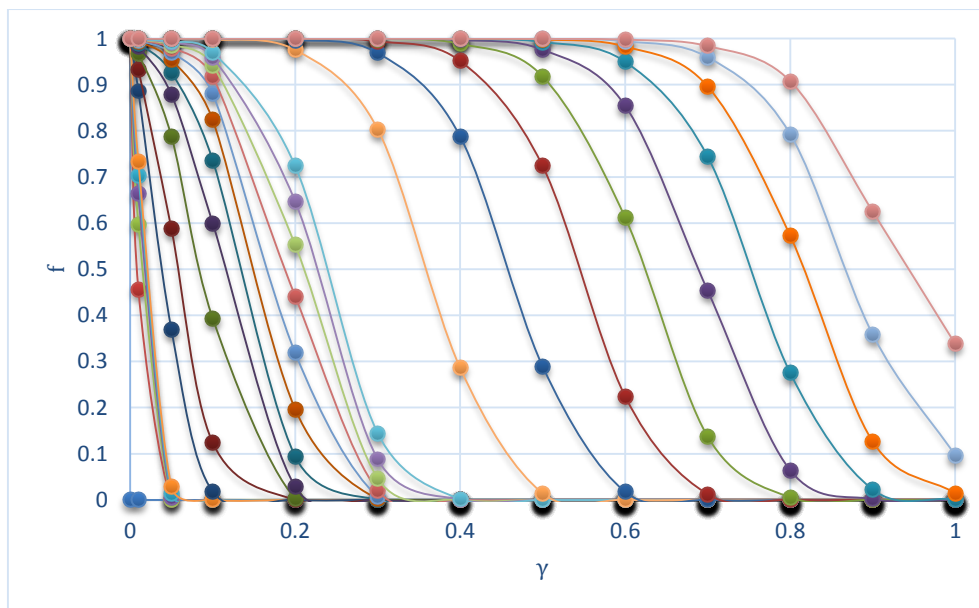


Gráfica V.B.5.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición.

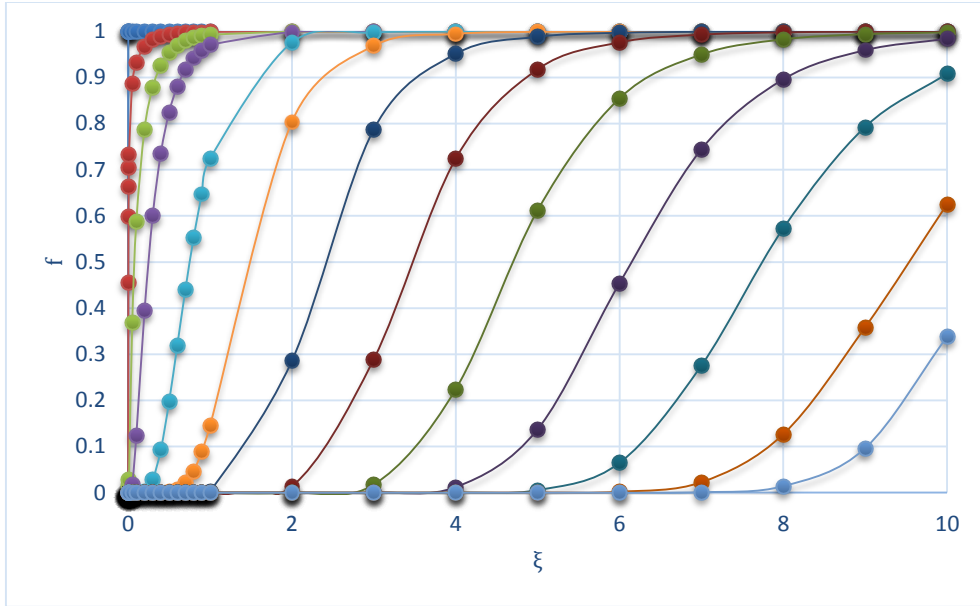
Por el lado del caso de la reacción autocatalítica, como se puede observar en el conjunto de gráficas V.B.6, que a pesar que la contribución del efecto convectivo influye en que el sistema no se sature, se puede notar la concentración máxima en varios puntos del sistema.

V.B.6 Caso con reacción química autocatalítica, considerando el perfil de velocidades.

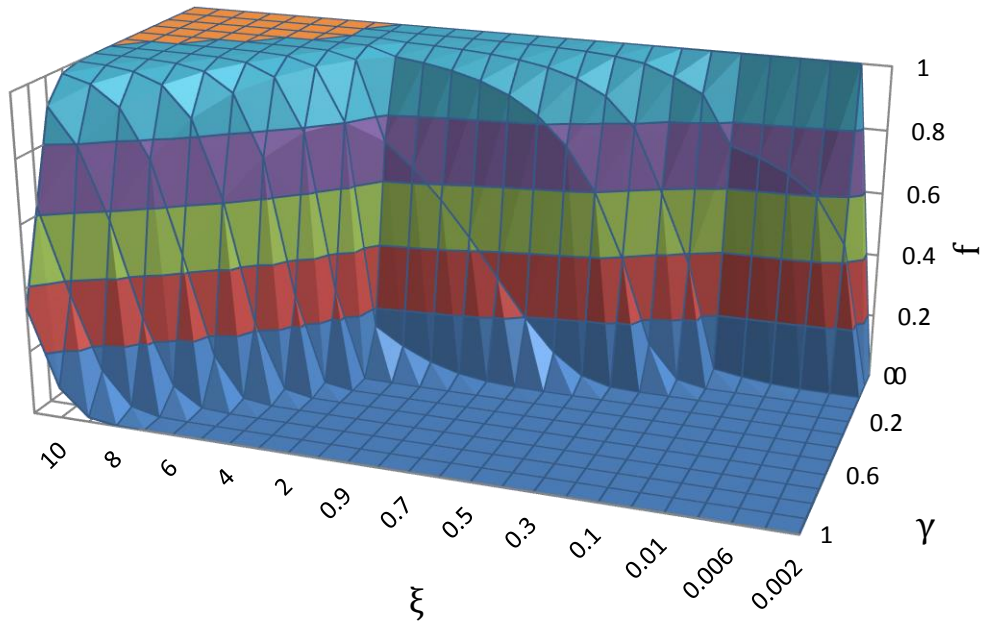
$Pe_M = 10$, $Da_I = 100$ y $Da_{II} = 100$



Gráfica V.B.6.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.



Gráfica V.B.6.b de $\xi (x/H)$ contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.



Gráfica V.B.6.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición.

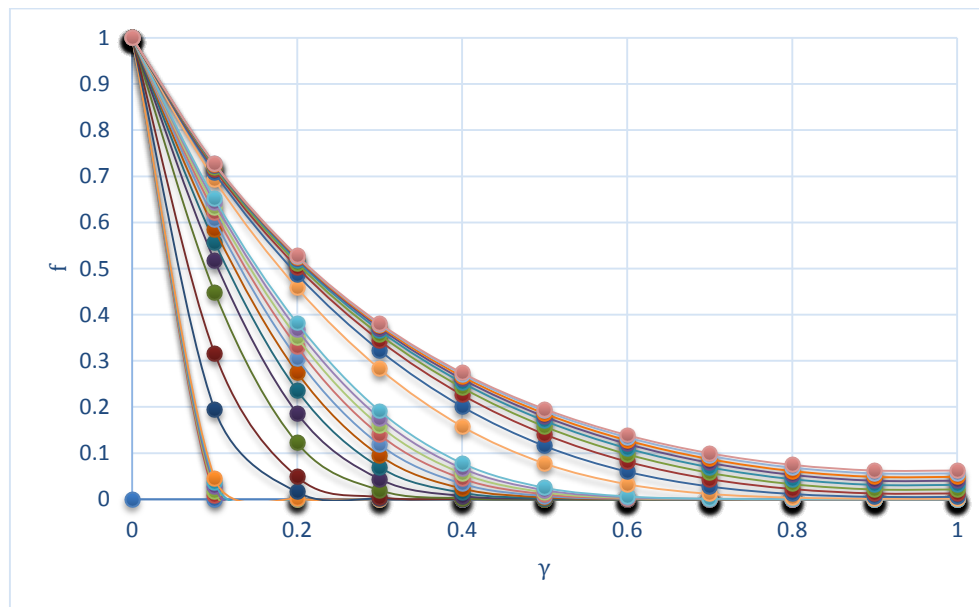
A pesar de que en ambas reacciones se involucra a la especie B como reactivo, por las características antes descritas de las reacciones autocatalíticas en donde el mismo producto funge como reactivo, se puede notar este efecto, en el cual en lugar de disminuir la concentración de la especie B en el sistema, aumenta la concentración, aunque no de forma lineal, si no que tiende a tener cierta curvatura, en esta curvatura podemos observar las oscilaciones características de una reacción autocatalítica (Horváth, Petrov, Scott, & Showalter, 1993).

V.C Influencia de los efectos difusivos y convectivos considerando reacción autocatalítica.

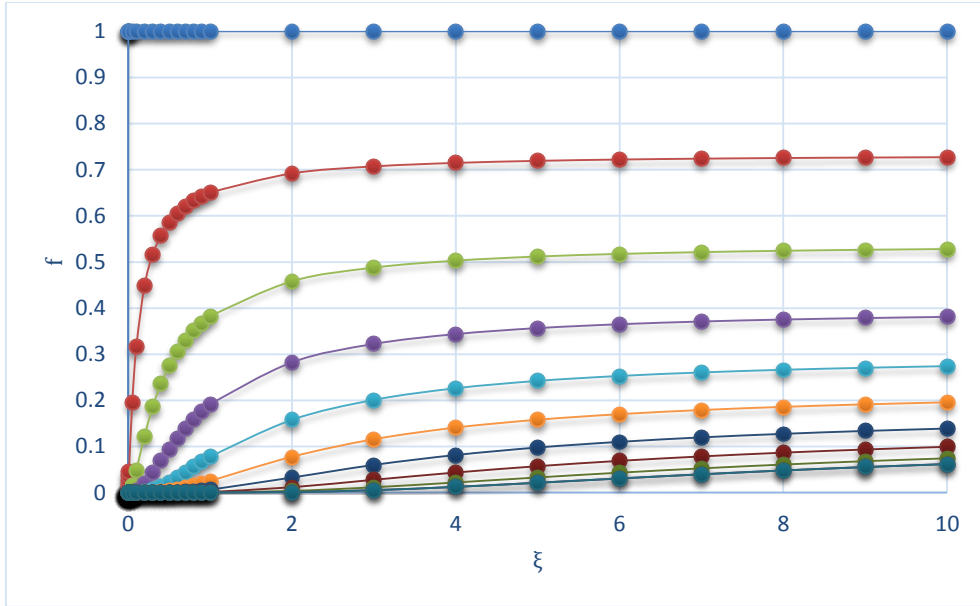
Ahora se analizará la influencia de los efectos difusivos y convectivos en la distribución de concentración de la especie B en el sistema. En la sección anterior, se encuentran los casos en donde se fijó el valor del primer número de Damköhler en 100 y el valor del Péclet de masa se fijó en los valores de 0.01, 1 y 100 para el caso con reacción química de primer orden como de reacción autocatalítica (conjunto de gráficas V.B.1, V.B.3 y V.B.5). Para completar el análisis añadimos dos casos más, uno donde se fija el valor de 0.1 para el Péclet de masa y el otro donde se fija el valor de 100, los resultados se muestran en el conjunto de gráficas V.C.1 y V.C.2.

V.C.1 Caso con reacción química primer orden, considerando el perfil de velocidades.

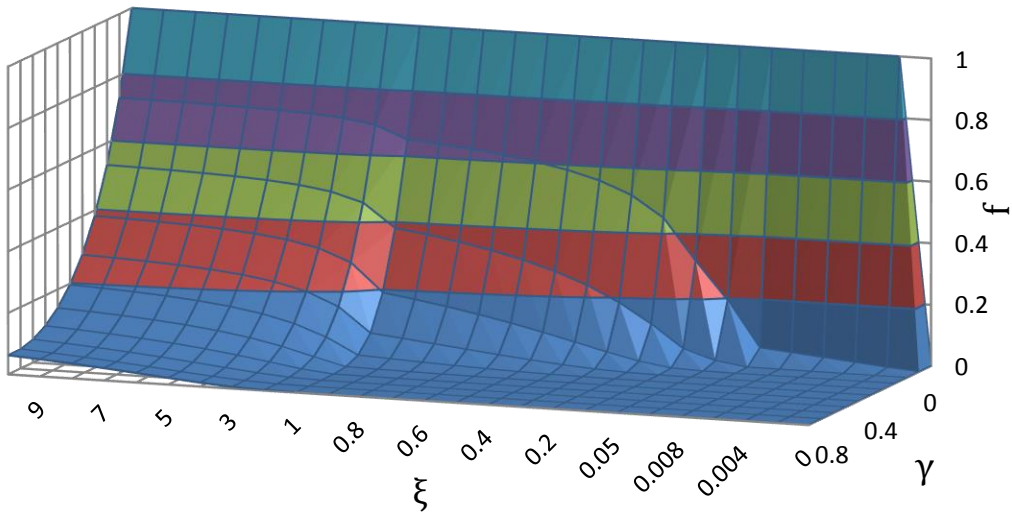
$$Pe_M = 0.1, Da_I = 100 \text{ y } Da_{II} = 10$$



Gráfica V.C.1.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.



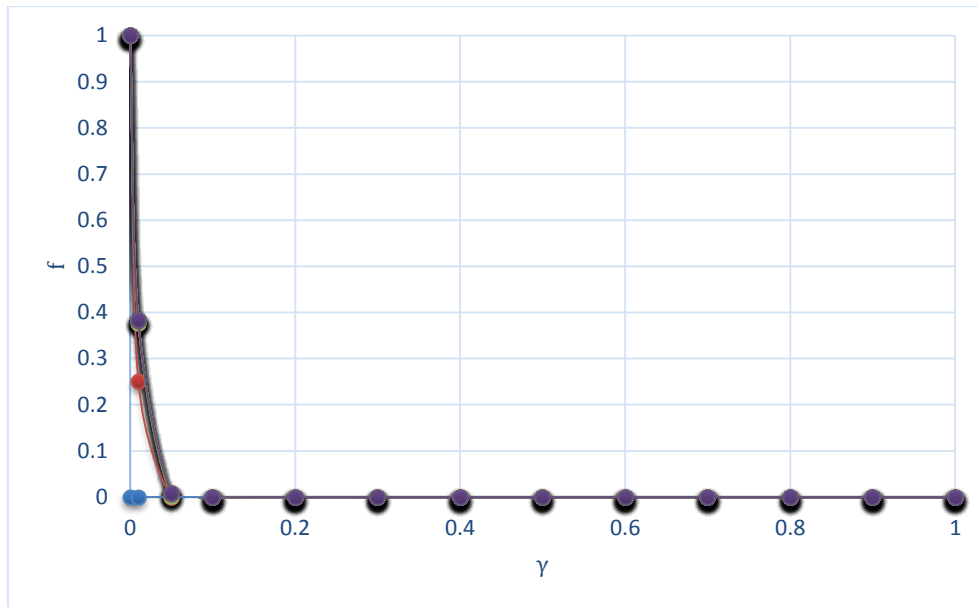
Gráfica V.C.1.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.



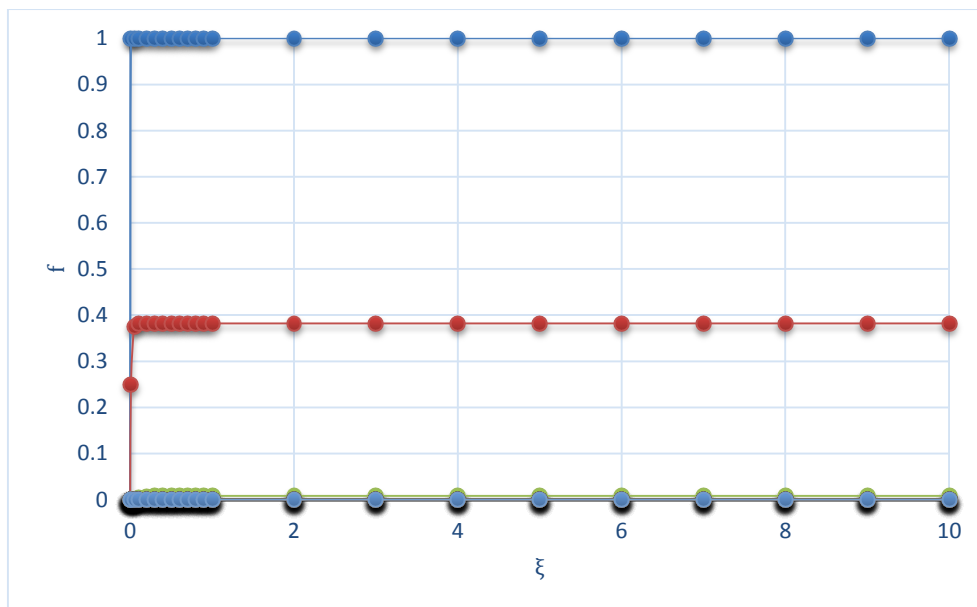
Gráfica V.C.1.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición.

V.C.2 Caso con reacción química primer orden, considerando el perfil de velocidades.

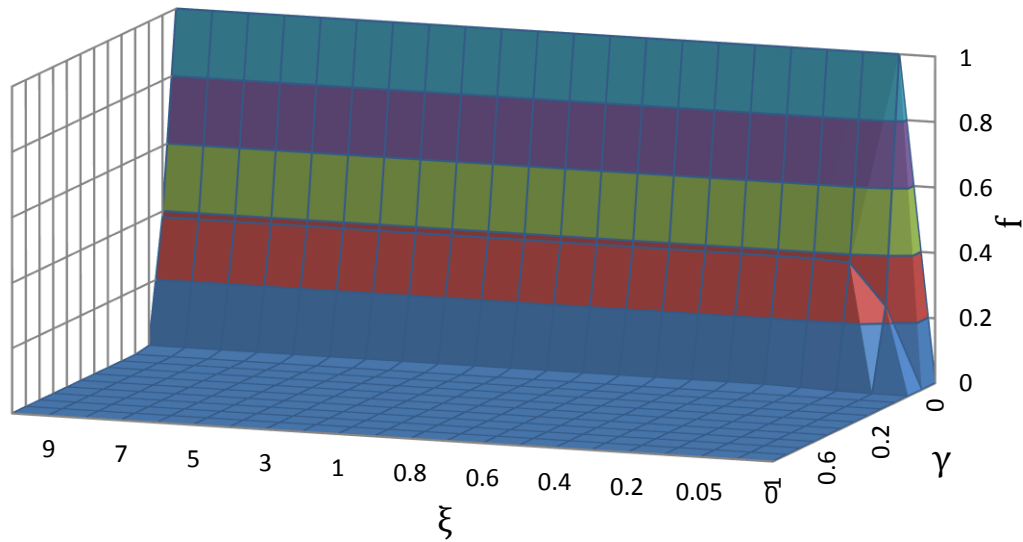
$Pe_M = 100, Da_I = 100$ y $Da_{II} = 10000$



Gráfica V.C.2.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.



Gráfica V.C.2.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.

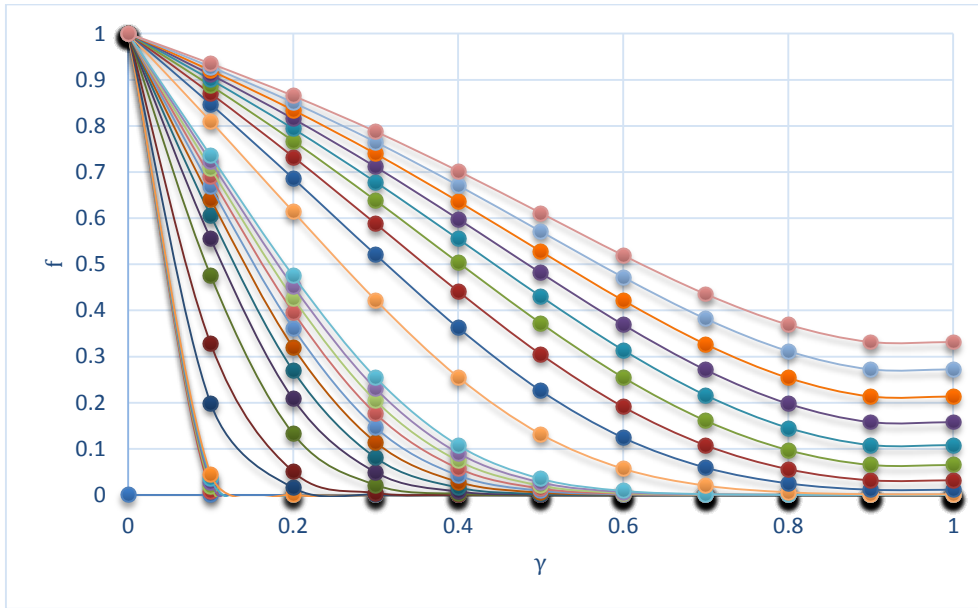


Gráfica V.C.2.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición.

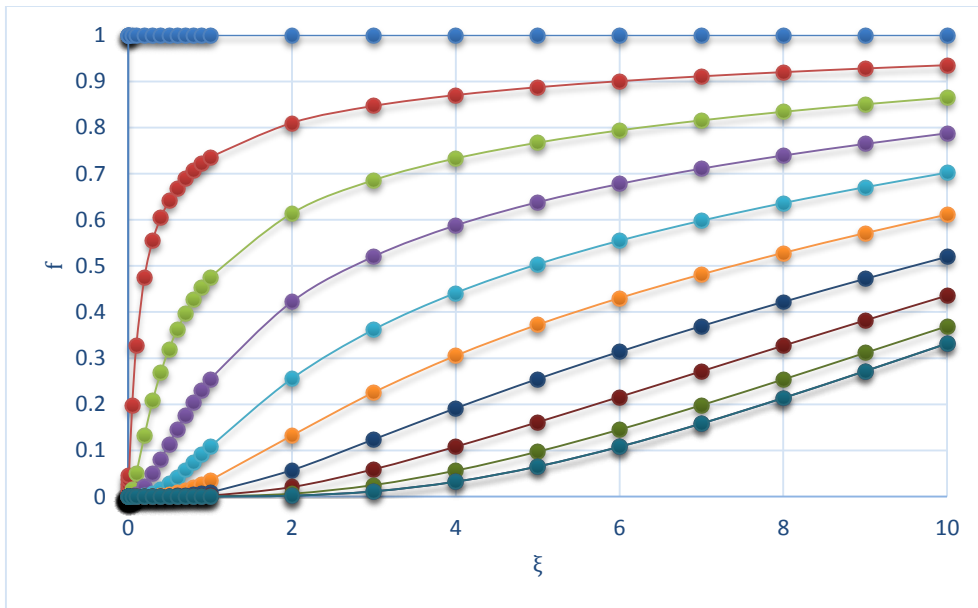
En el conjunto de gráficas mencionados anteriormente se puede observar que, mientras va aumentando el valor del número de Péclet, es decir, que el efecto difusivo va cediendo al convectivo, se puede notar que, cuando la difusión domina, la concentración a lo largo de la placa va aumentando, pero llega a una longitud en la cual la concentración permanece constante para cada punto a lo ancho de la placa. Este fenómeno en que la concentración permanece constante a lo largo de la placa sucede en los siguientes casos, pero alcanzan este punto a una distancia cada vez más corta del inicio de las placas mientras, aumenta el dominio del efecto convectivo.

Para el caso con reacción química autocatalítica considerando el perfil de velocidades, se tienen las gráficas en donde se fijó el valor de 100 para el primer número de Damköhler y valores de 0.01, 1 y 100 para Péclet de masa (conjunto de gráficas V.B.2, V.B.4 y V.B.6). Completaremos el análisis con el resultado de los casos en donde se fija el Péclet de masa con valores de 0.1 y 100, los resultados se muestran en las gráficas V.C.3 y V.C.4. Todo esto con el fin de cubrir los rangos de variación de los efectos de difusión y convección.

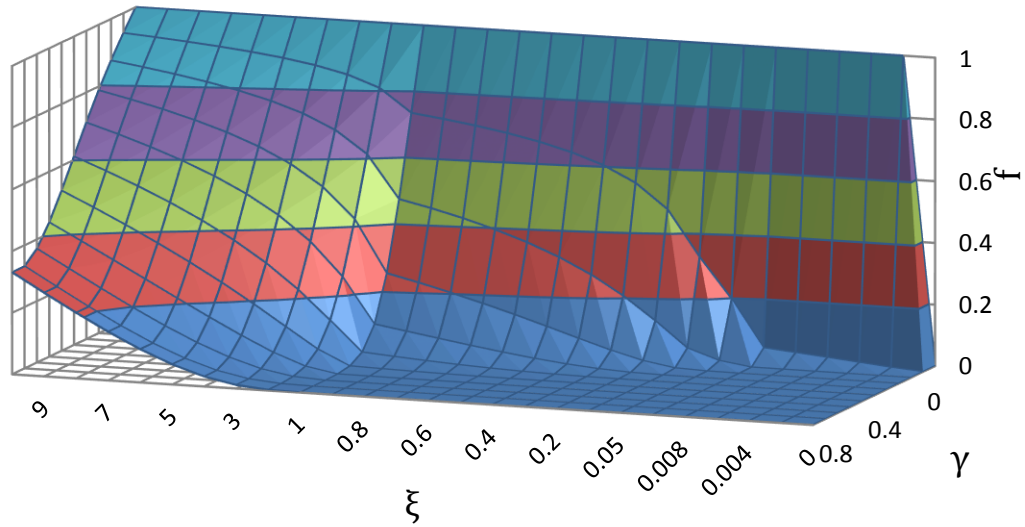
V.C.3 Caso con reacción química autocatalítica, considerando el perfil de velocidades.
 $Pe_M = 0.1$, $Da_I = 100$ y $Da_{II} = 10$



Gráfica V.C.3.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.



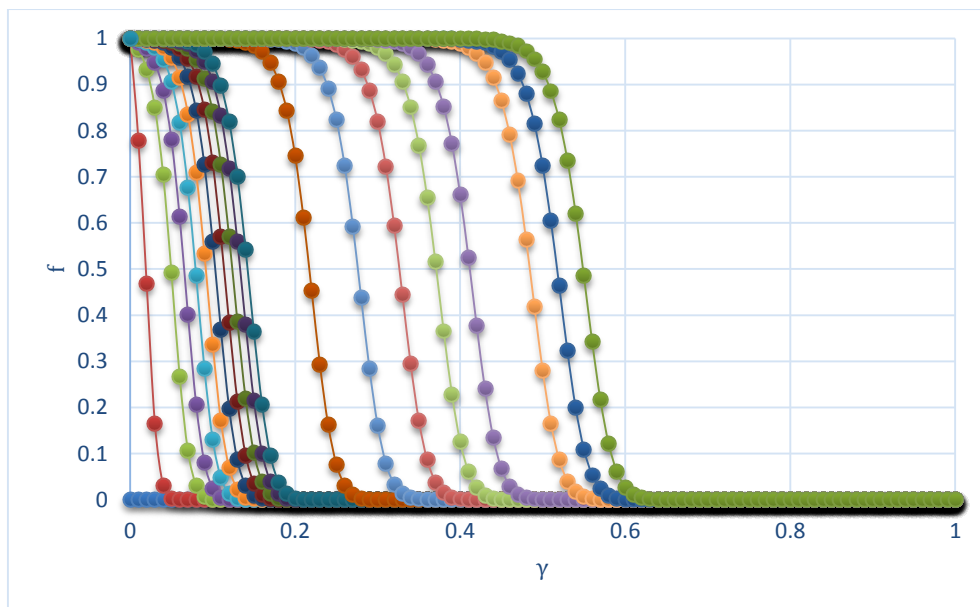
Gráfica V.C.3.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.



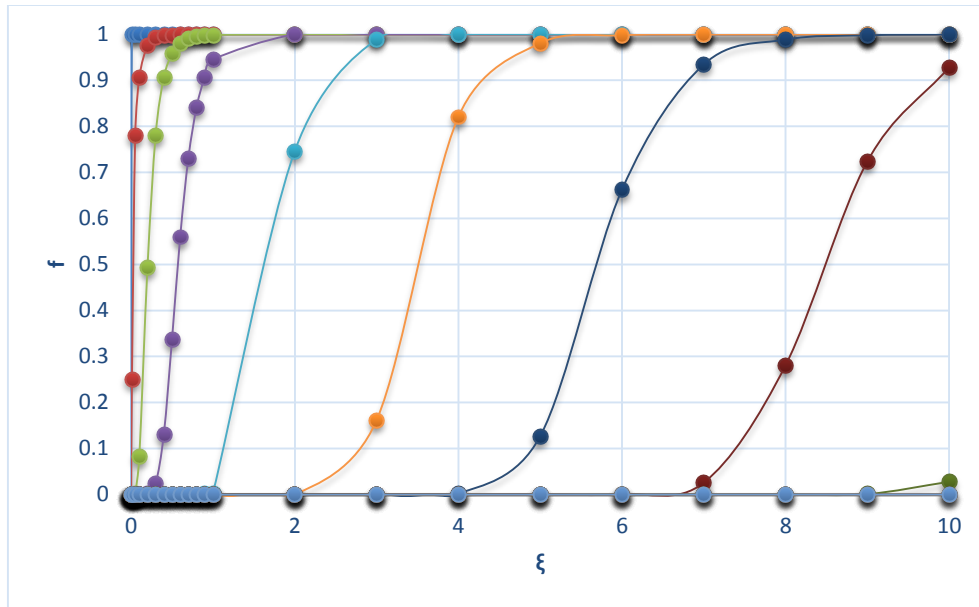
Gráfica V.C.3.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición.

V.C.4 Caso con reacción química autocatalítica, considerando el perfil de velocidades.

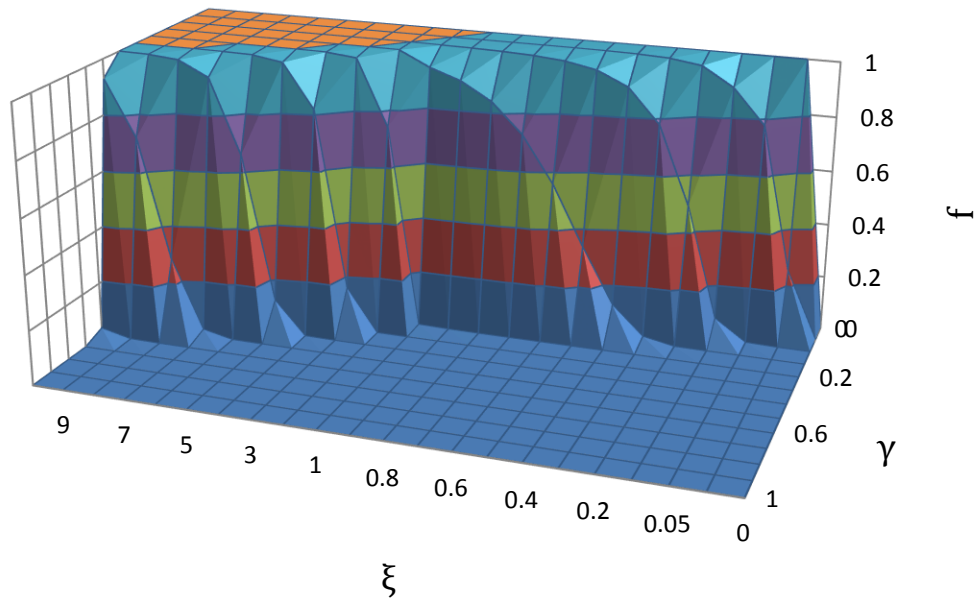
$Pe_M = 100, Da_I = 100$ y $Da_{II} = 10000$



Gráfica V.C.4.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.



Gráfica V.C.4.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.



Gráfica V.C.4.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición.

En el conjunto de gráficas antes mencionadas, se puede observar que entre cada una no hay una relación parecida a la que encontramos en el caso de reacción química de primer orden, ya como se puede observar en el conjunto de gráficas V.B.2, el sistema se satura de la especie B. Mientras que en el caso donde el valor del número de Péclet aumenta a 0.1, el sistema no se satura y se puede notar un perfil definido para cada punto a lo ancho del sistema, como se

puede notar en el conjunto de gráficas V.C.3. Una explicación prematura es que como aumenta el efecto convectivo, este arrastra a la especie B impidiendo difundirse. Pero al hacer un análisis para cuando el valor del número de Péclet es 1, como se muestra en el conjunto de gráficas V.B.4, se puede observar cómo el sistema nuevamente se vuelve a saturar de la especie B. En la gráfica V.B.4.b se observa como una ligera curvatura en la línea de la concentración al momento de ir avanzando a lo largo de la placa. Los casos restantes, para cuando el valor de Péclet es de 10 y 100 respectivamente, como se muestra en el conjunto de gráficas V.B.6 y V.C.3, la concentración de la especie llega a su máximo después de cierta distancia del inicio de las placas, mientras es más alto el valor del número de Péclet es mayor la distancia entre la distancia a la que se alcanza la concentración máxima de la especie B.

Se puede notar que el efecto conectivo/difusivo influye en el perfil de concentraciones, pero domina sobre todos estos efectos el de la reacción química. A pesar que en el caso de reacción de primer orden, cuando la convección es lo bastante influyente como para mantener la concentración constante, en el caso de reacción autocatalítica como se está produciendo especie B el perfil de concentraciones puede llegar a una concentración máxima.

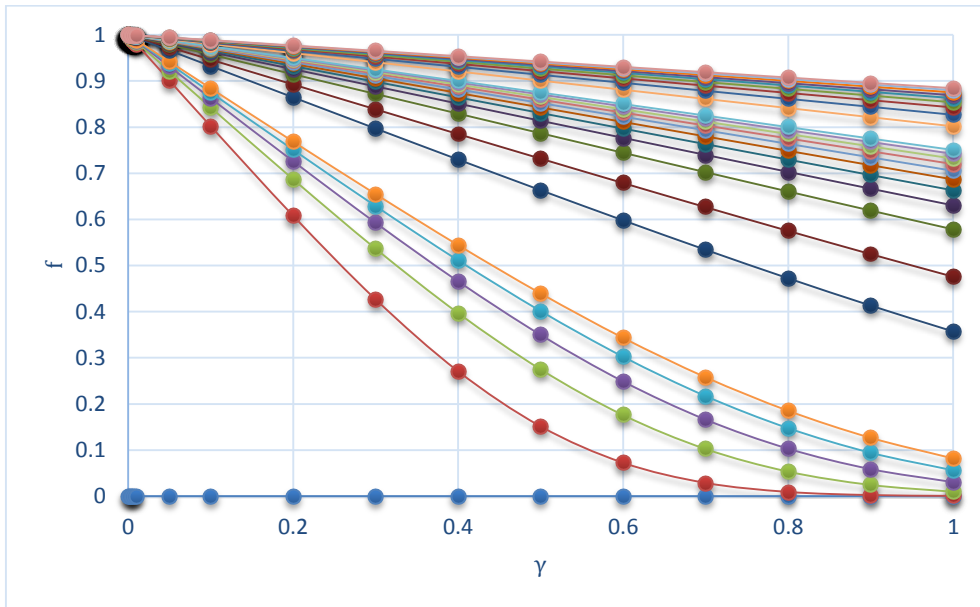
V.D Influencia del perfil de velocidades en comparación a los modelos donde sólo se considera una velocidad característica constante.

Como se ha mencionado anteriormente, realizaron dos tratamientos para resolver la ecuación diferencial que nos da el perfil de concentración de la especie B. Para ellos se utilizó el perfil de velocidades que se obtiene para el sistema (que se muestra en la ecuación II.A.31) y otra donde suponemos una velocidad característica constante.

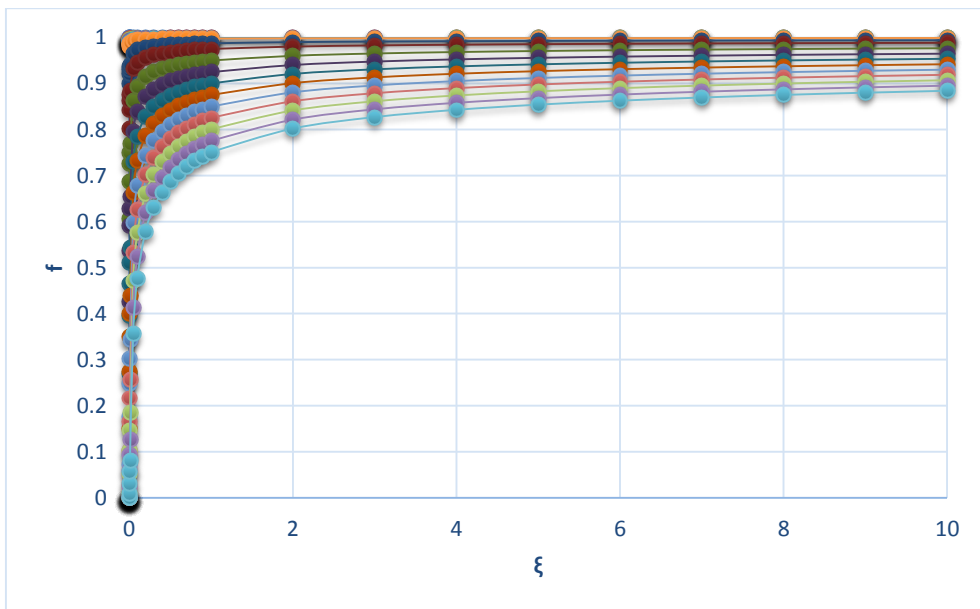
Primero, para el caso sin reacción química, se compararán los perfiles obtenidos con la solución mostrada en la ecuación II.B.68, para el caso donde se considera el perfil de velocidades, contra la solución mostrada en la ecuación II.C.32, para el caso de una velocidad constante.

Ilustraremos los casos para cuando el valor del Péclet de masa se fija en los siguientes valores de 0.01, 0.1, 1, 10 y 100. Para el caso del perfil de velocidades ya se tiene ilustrado en el conjunto de gráficas V.A.1 y V.A.5 en el caso de cuando el valor del Péclet es de 0.01 y de 100 respectivamente; para los demás casos se ilustrarán en el conjunto de gráficas V.D.1, V.D.2 y V.D.3. Cuando se considera una velocidad constante su comportamiento se ilustrará en los conjuntos de gráficas V.D.4, V.D.5, V.D.6, V.D.7 y V.D.8.

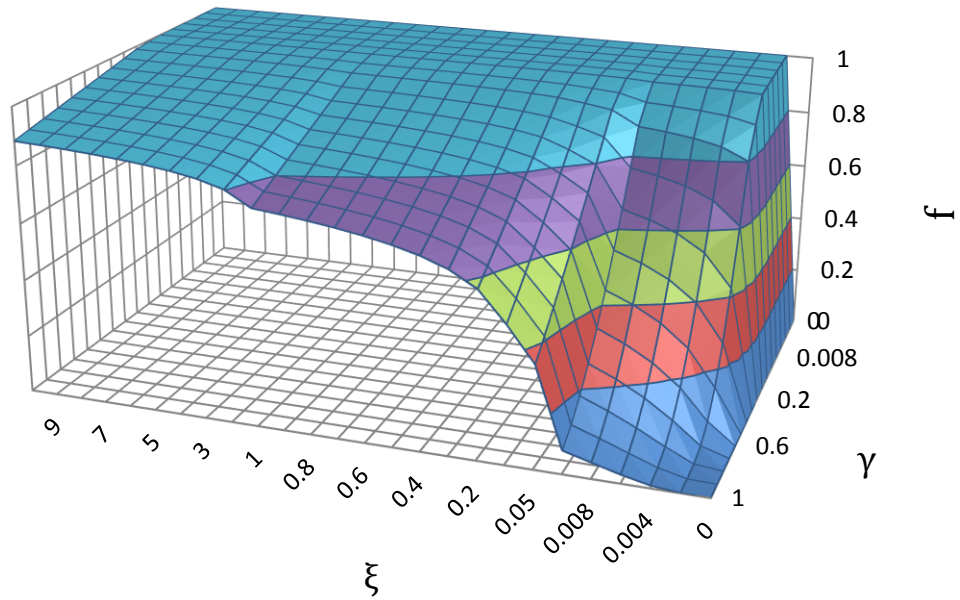
V.D.1 Caso sin reacción química, considerando el perfil de velocidades. $Pe_M = 0.1$



Gráfica V.D.1.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.

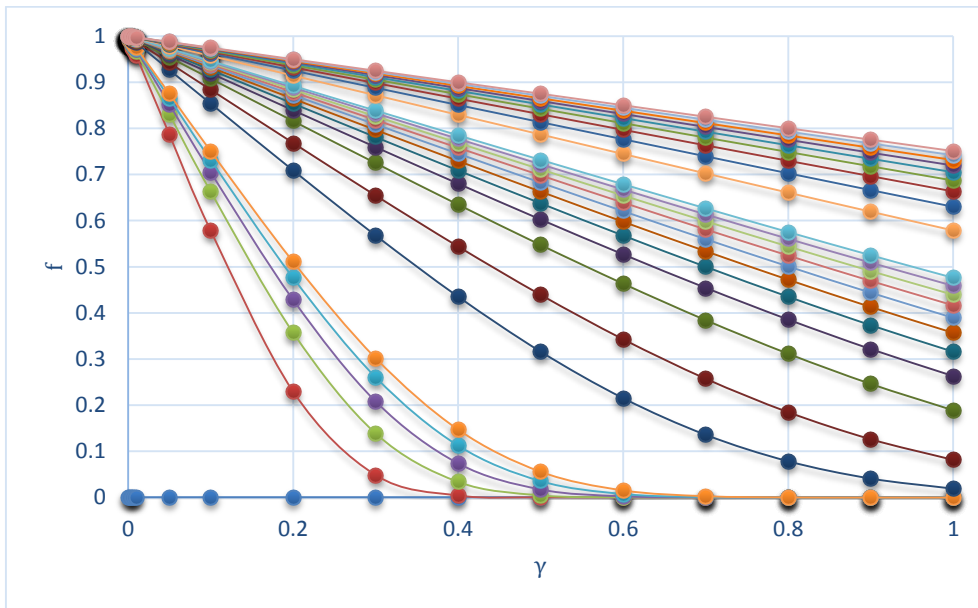


Gráfica V.D.1.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.

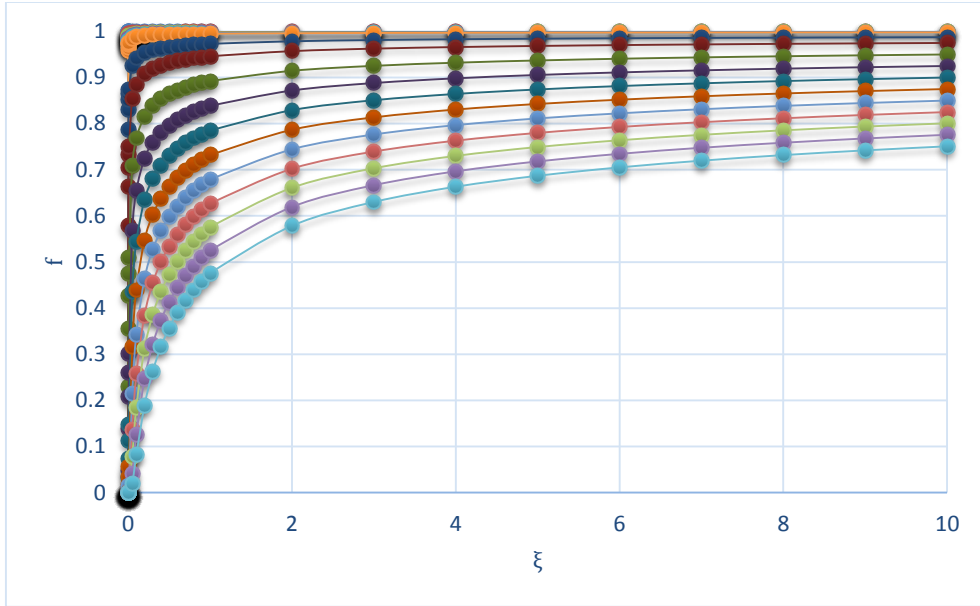


Gráfica V.D.1.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición.

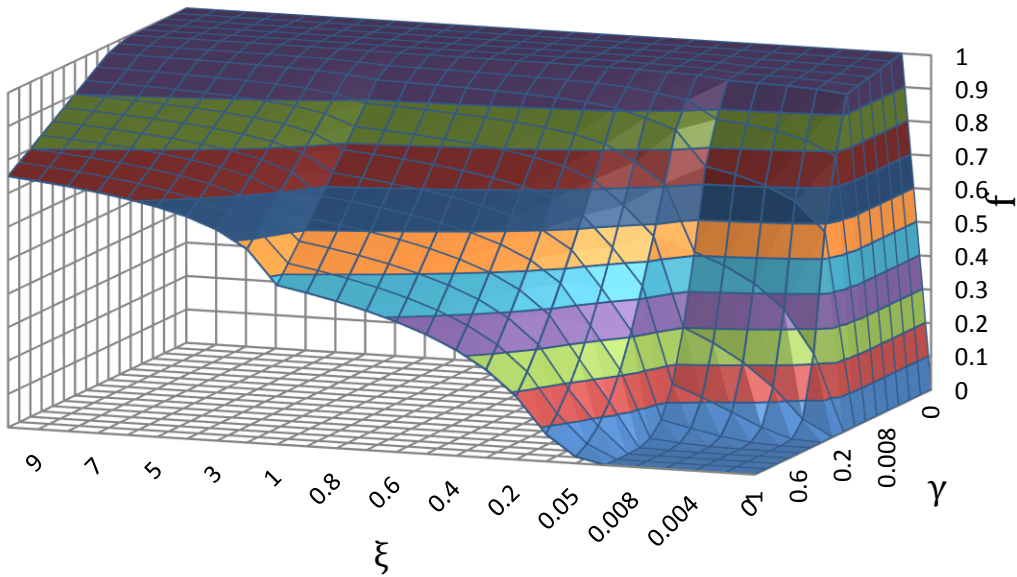
V.D.2 Caso sin reacción química, considerando el perfil de velocidades. $Pe_M = 1$



Gráfica V.D.2.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa

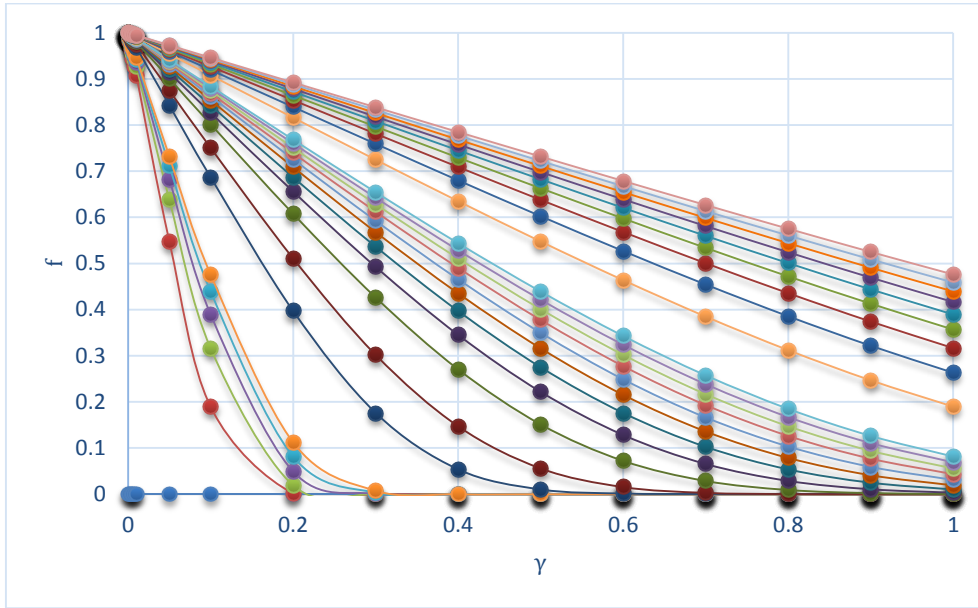


Gráfica V.D.2.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.

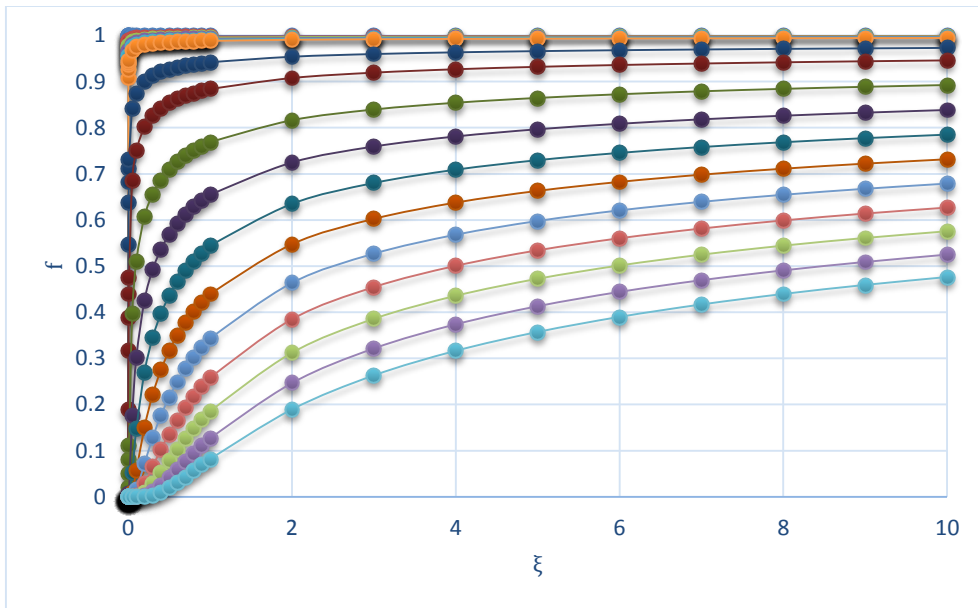


Gráfica V.D.2.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición.

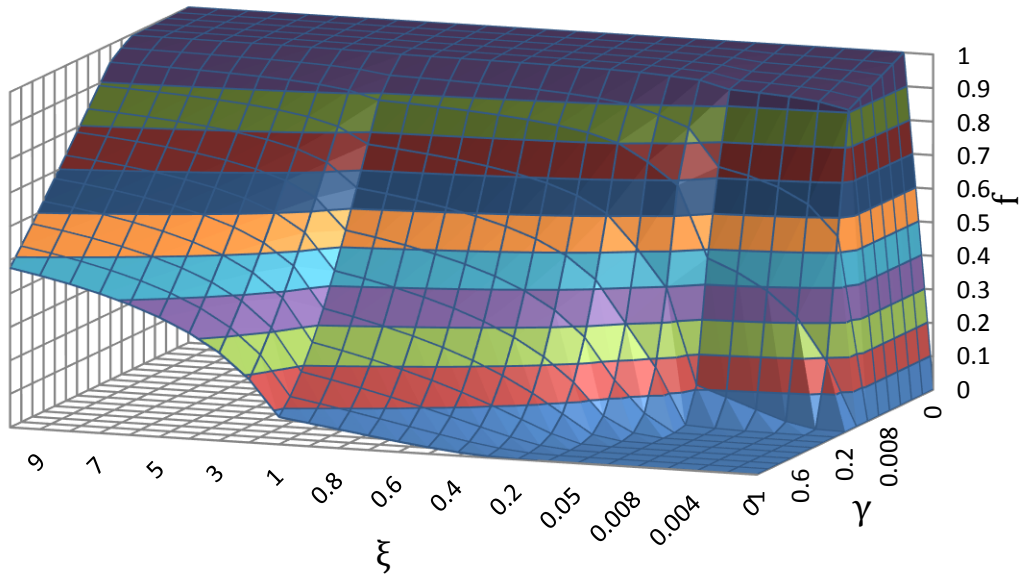
V.D.3 Caso sin reacción química, considerando el perfil de velocidades. $Pe_M = 10$



Gráfica V.D.3.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa

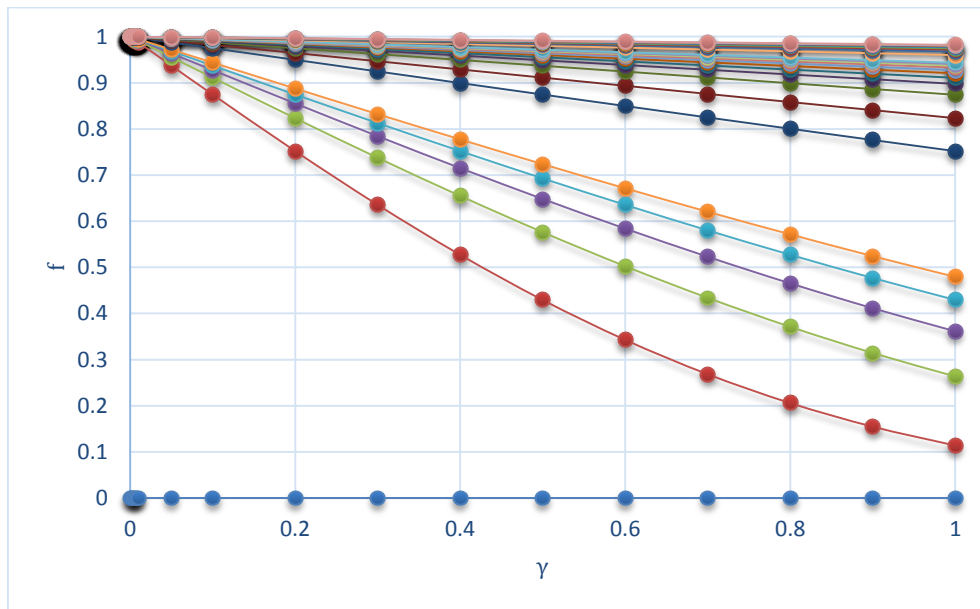


Gráfica V.D.3.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.

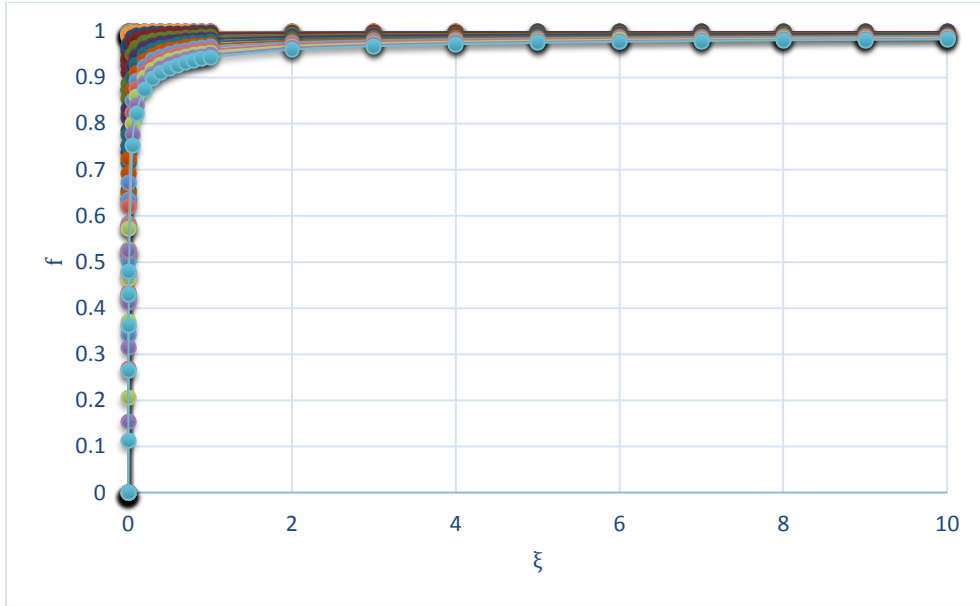


Gráfica V.D.3.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición.

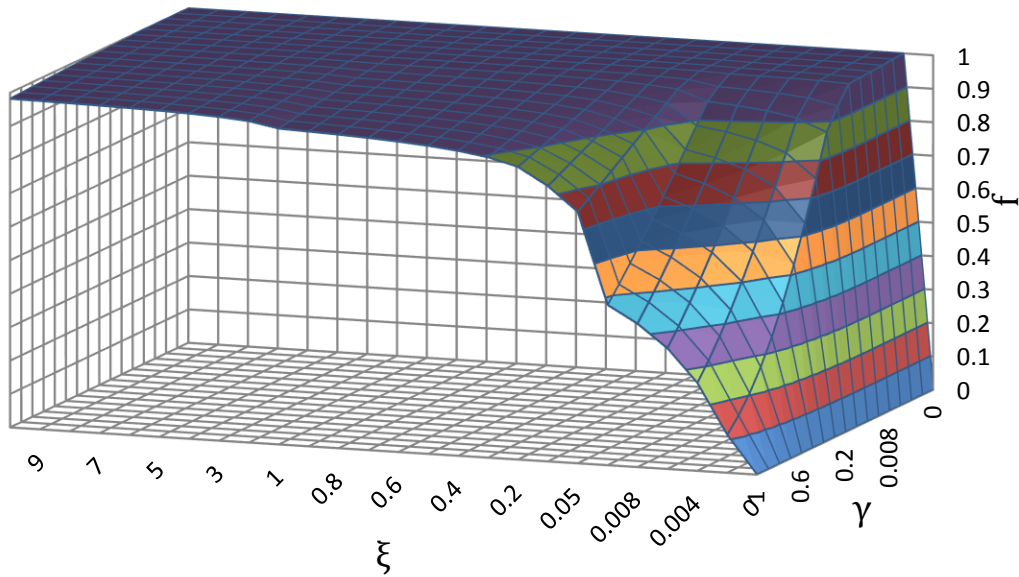
V.D.4 Caso sin reacción química, considerando una velocidad característica constante. $Pe_M = 0.01$



Gráfica V.D.4.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.

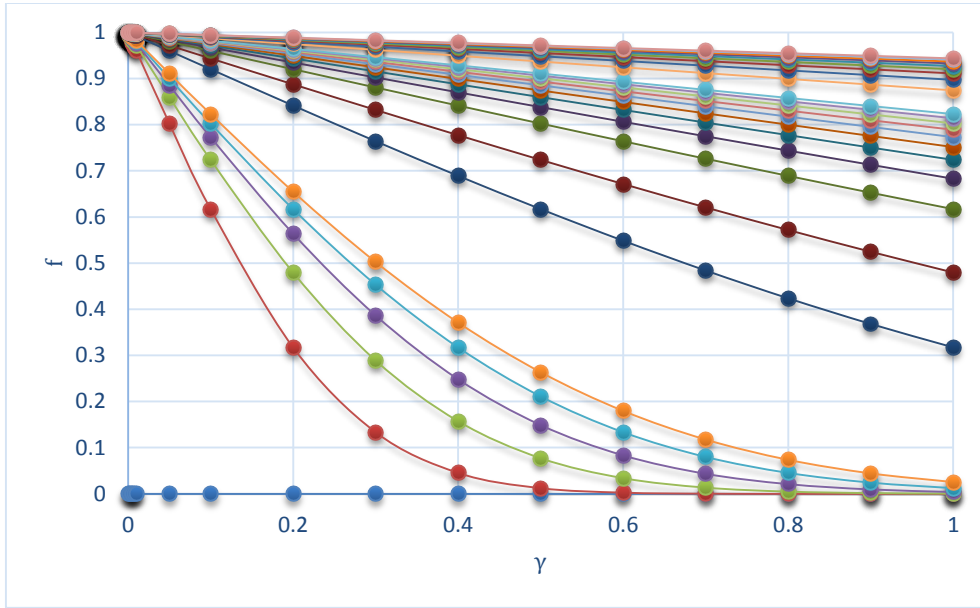


Gráfica V.D.4.b de $\xi (x/H)$ contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.

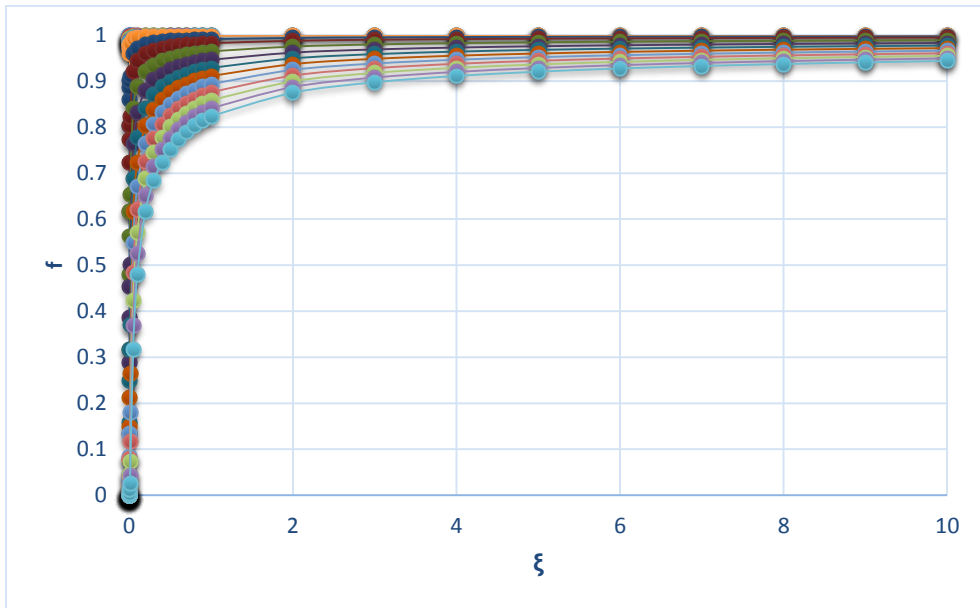


Gráfica V.D.4.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición

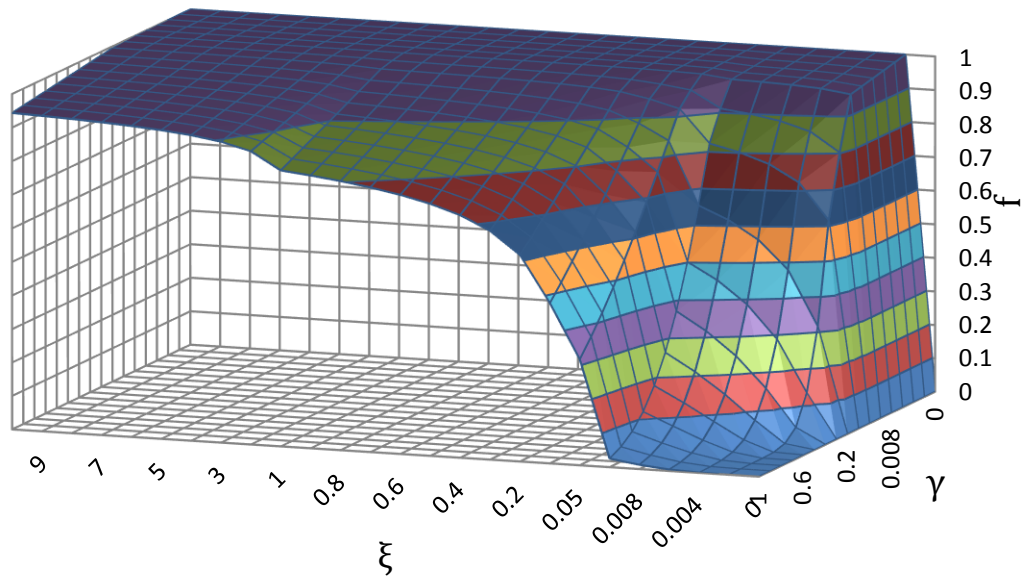
V.D.5 Caso sin reacción química, considerando una velocidad característica constante. $Pe_M = 0.1$



Gráfica V.D.5.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.

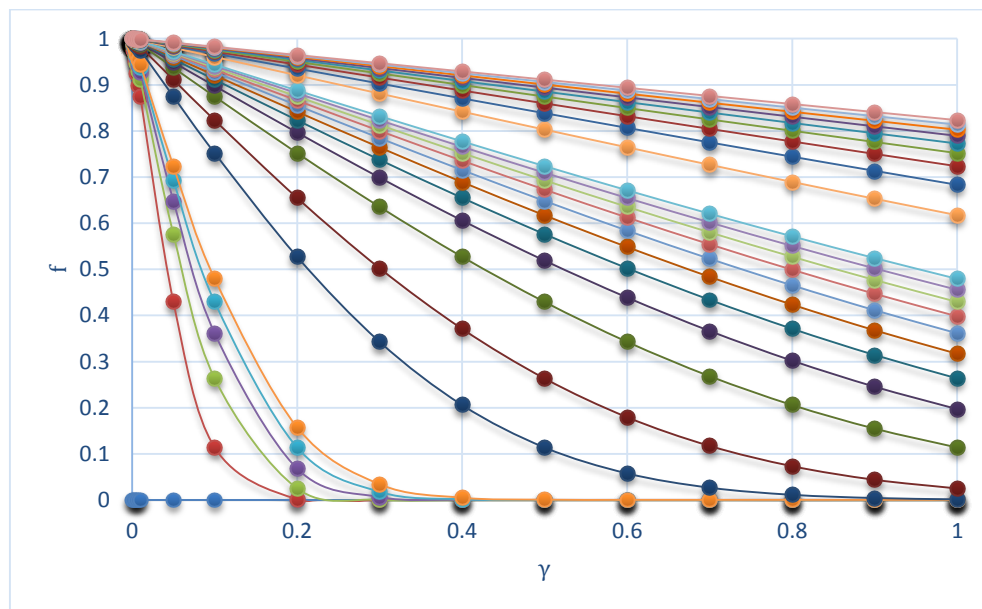


Gráfica V.D.5.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.

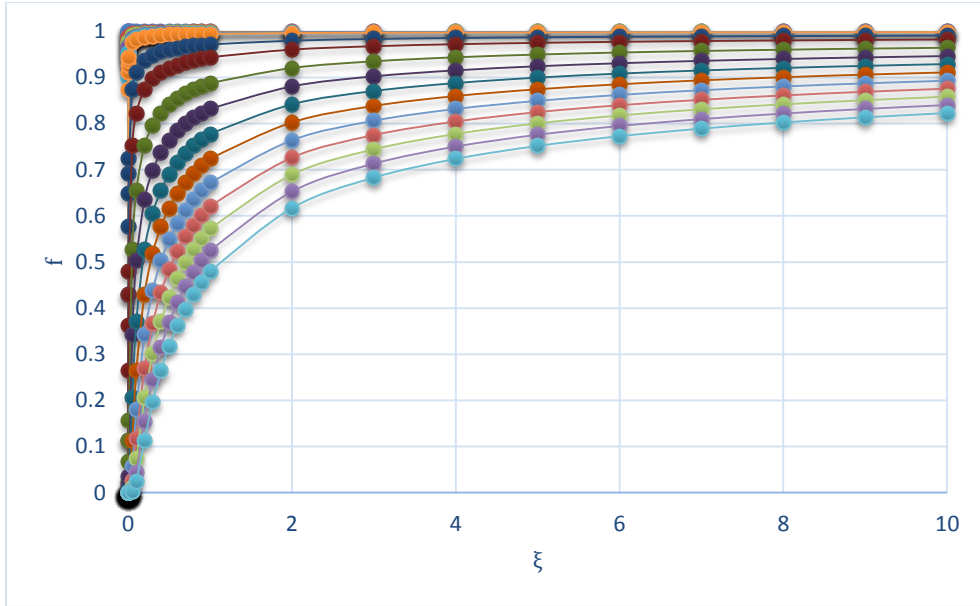


Gráfica V.D.5.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición

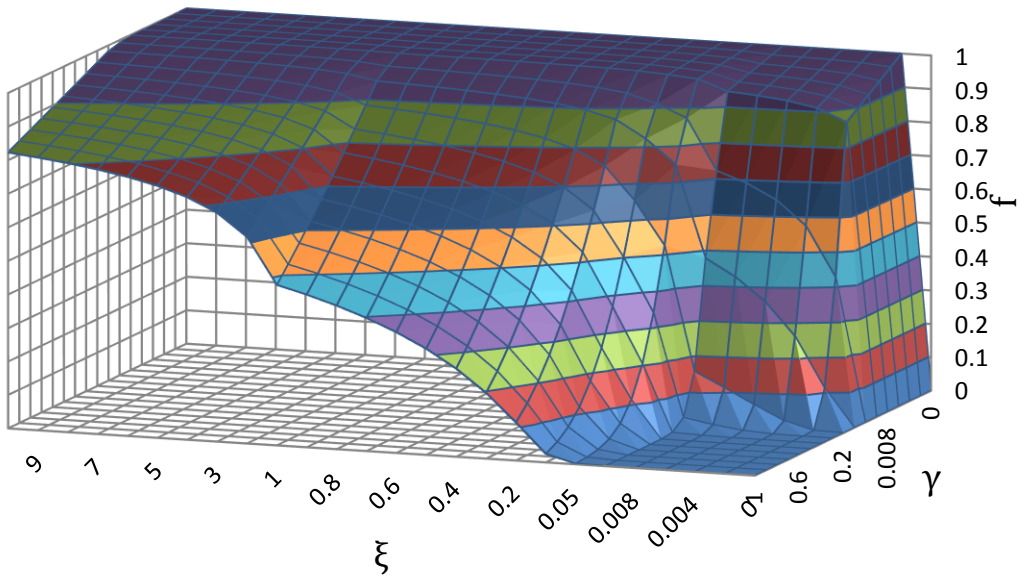
V.D.6 Caso sin reacción química, considerando una velocidad característica constante. $Pe_M = 1$



Gráfica V.D.6.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.

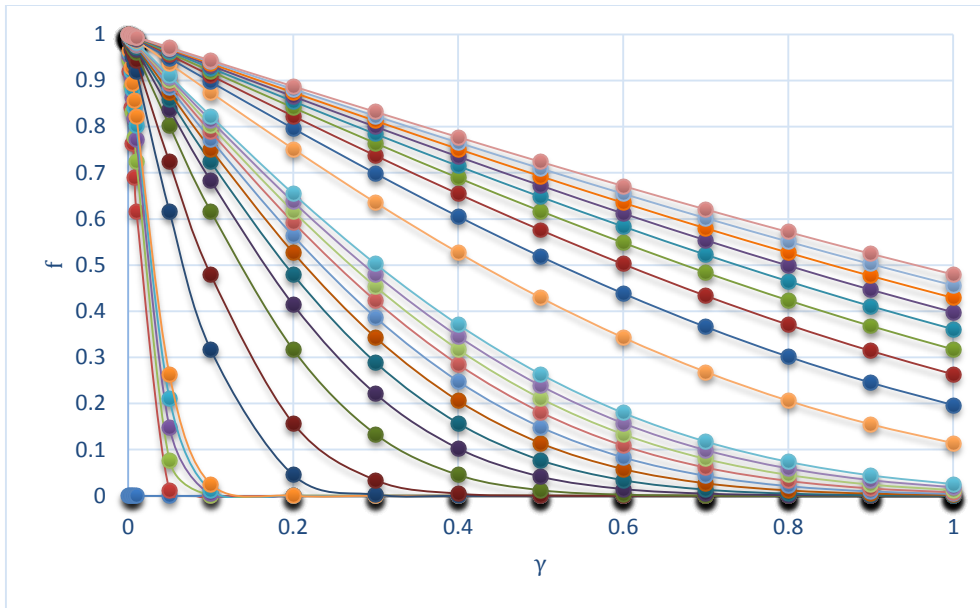


Gráfica V.D.6.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada y entre las dos placas.

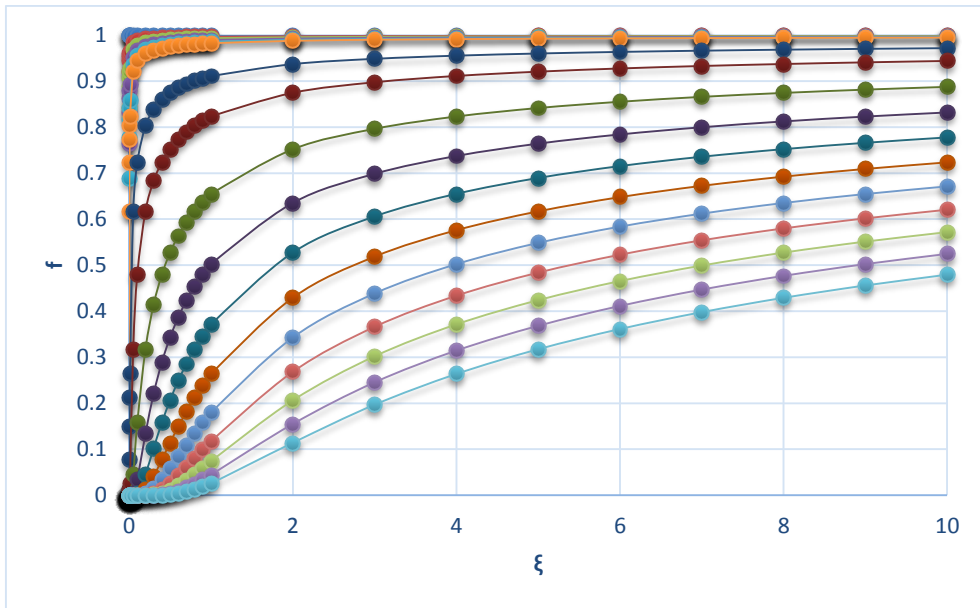


Gráfica V.D.6.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición

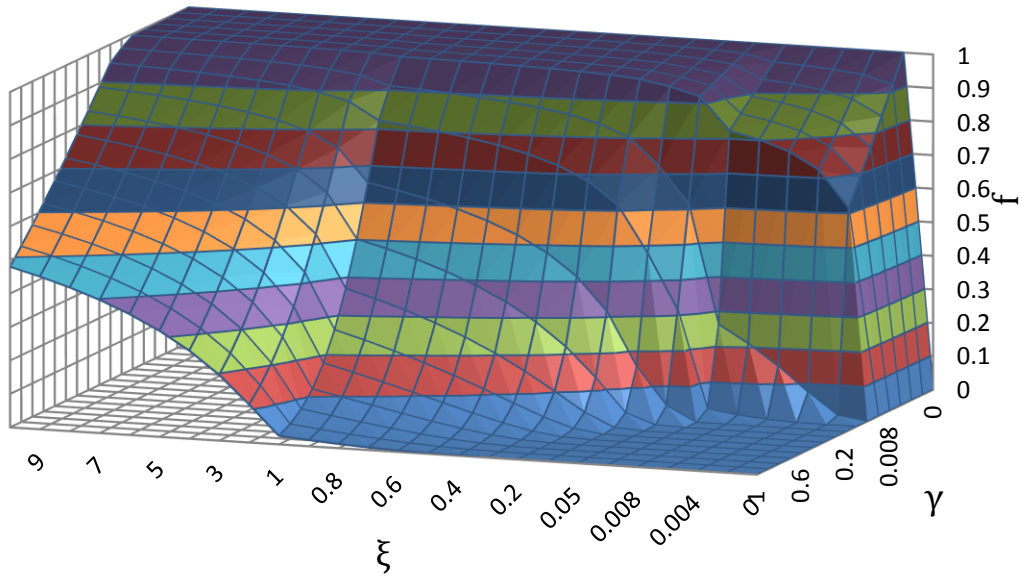
V.D.7 Caso sin reacción química, considerando una velocidad característica constante. $Pe_M = 10$



Gráfica V.D.7.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.

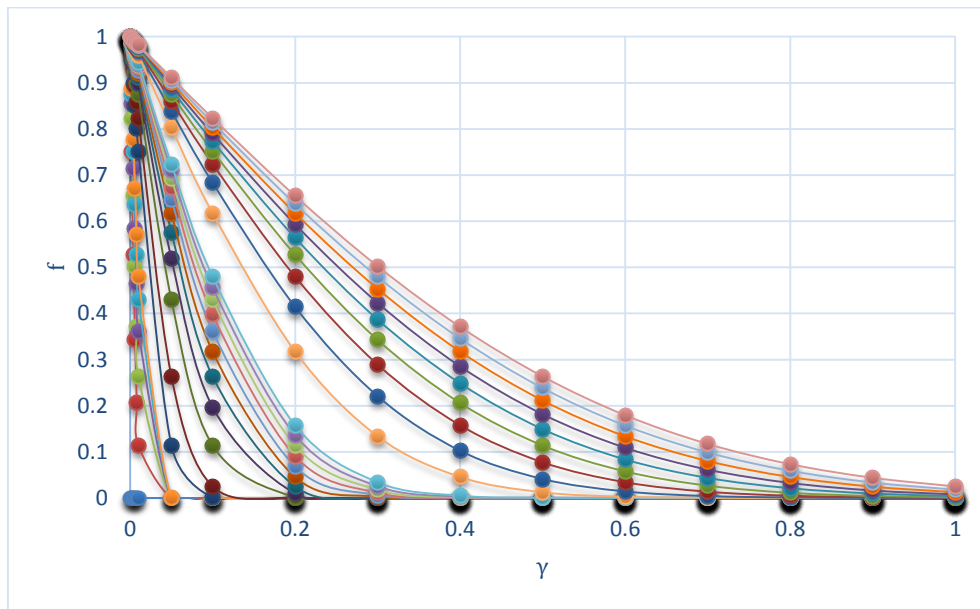


Gráfica V.D.7.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.

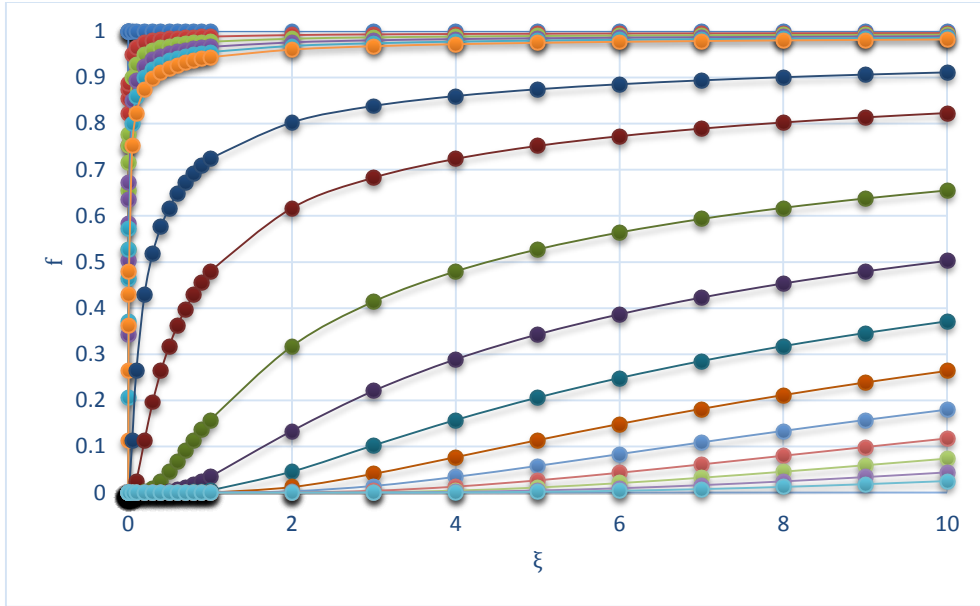


Gráfica V.D.7.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición

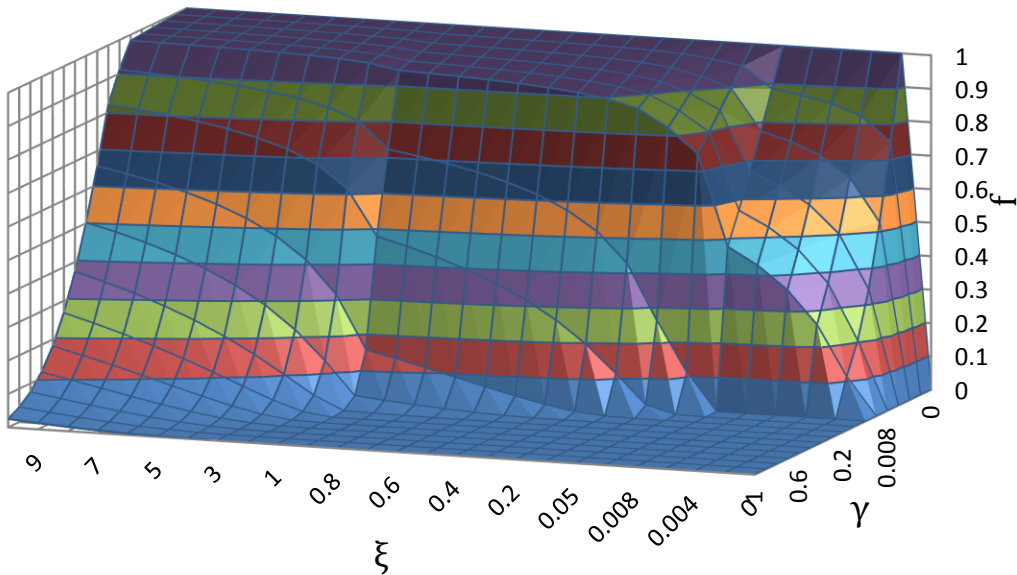
V.D.8 Caso sin reacción química, considerando una velocidad característica constante. $Pe_M = 100$



Gráfica V.D.8.a de γ (y/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada ξ a lo largo de la placa.



Gráfica V.D.8.b de ξ (x/H) contra la concentración adimensional. Se ilustra cómo una línea diferente para cada punto en la coordenada γ entre las dos placas.



Gráfica V.D.8.c Concentración adimensional f en función de las coordenadas de la posición

A grandes rasgos, cuando se comparan los conjuntos de gráficas V.A.1, VD.1, V.D.2, V.D.3 y V.A.4 con el V.D.4, V.D.5, V.D.6 V.D.7, y V.D.8, respectivamente, se puede observar una similitud en su comportamiento, ya que están emulando al mismo fenómeno. Pero se puede notar que mientras va aumentando el valor del número de Péclet, es decir, que el efecto dominante es el convectivo, los dos métodos empiezan a tener diferencias notables, como se

puede observar de manera precisa en el conjunto de gráficas V.D.3 y V.D.7, así como en el conjunto V.A.4 y V.D.8. Se nota como para el caso de una velocidad característica constante disminuye la concentración de la especie B de forma más pronta en las cercanías de la placa inferior, comparado con el caso donde se considera el perfil de velocidades.

Se puede decir que a medida que la influencia del efecto convectivo sea mayor, la propuesta aproximada de sólo considerar una velocidad constante se va haciendo inválida, es decir, a Péclet bajos se puede utilizar la solución propuesta en la ecuación II.C.29. Como un claro ejemplo tenemos la comparación del conjunto de gráficas V.A.1 y V.D.4, en donde para ambos el valor del número de Péclet es de 0.01.

VI Conclusiones

Cabe recordar que todas las propuestas de solución, ya sea analítica y numérica son soluciones aproximadas, aun así se puede considerar como soluciones correctas. Pero como ya lo habíamos explicado en el análisis, algunos resultados no se pueden comparar puntualmente por la naturaleza y características de la solución, como es el ejemplo de las propuestas de solución analíticas y de método de diferencias finitas en la comparación de los casos representados en el conjunto de gráficas V.A.1, V.A.2 y V.A.3.

Lo importante a rescatar es la influencia de los efectos de la reacción química, en especial de la autocatalítica. En este punto se hace aún más relevante la importancia de estructurar y resolver el problema de forma adimensional, ya que se trata de generalizar a cualquier sistema que cuente con estas condiciones. Como actores centrales dentro del análisis tuvimos al Péclet de masa y al primero y segundo números de Damköhler. Que como se ha recalcado a lo largo de este trabajo, compara los efectos difusivos, convectivos y de la reacción química.

De los análisis realizados, una de las conclusiones obtenidas es que cuando en el sistema se esté efectuando una reacción química, y los efectos convectivos y difusivos dominen frente a los efectos de la reacción química, es decir, que el valor del primer y/o segundo número de Damköhler sea menor a uno, se podrá desprestigiar el término de reacción química para facilitar el cálculo del perfil de concentraciones.

Tampoco influye el simple hecho que se efectúe una reacción química, también su cinética es de gran relevancia a la hora de obtener el perfil de concentraciones. En el caso en particular de este trabajo se trató de la cinética de una reacción autocatalítica, en donde se está consumiendo una de las especies y a su vez se está produciendo. Cuando los valores del primer y segundo números de Damköhler son mayores a 1, se puede decir que el efecto de la reacción química domina en el sistema, aun así, los efectos convectivo y difusivo influyen en el comportamiento del perfil de concentraciones de la especie B.

De una segunda hipótesis planteada, podemos concluir que ambos tratamientos de solución para cada caso, cuando se considera en el planteamiento de la solución el perfil de velocidades o sólo una velocidad característica constante, sus soluciones son equivalentes para cuando el efecto difusivo domina sobre el convectivo, es decir, el valor de número de Péclet de masa es menor a 1. Pero cuando se trata de casos cuando domina el efecto convectivo, es recomendable usar el tratamiento donde se considera el perfil de velocidades, ya que representa más a la realidad.

Las propuestas de solución y el análisis de este trabajo sientan la base para el tratamiento de casos específicos, e inclusive, con otras geometrías, sólo habría que sustituir las constantes físicas y químicas particulares, y las ecuaciones correspondientes a la geometría deseada, sólo restaría resolver de forma simultánea con la ecuación de conservación de energía

correspondiente. Un estudio previo similar al que se ha realizado, sería bastante útil para establecer criterios de diseño, por ejemplo diámetro de un reactor tubular y velocidad de flujo, conociendo previamente la constante de reacción y el coeficiente de difusividad. Cabe señalar que sería un ejercicio de aproximación, ya que en este trabajo, se tomaron consideraciones como que el fluido era newtoniano e incompresible, era un sistema isotérmico, y el coeficiente de difusión permanecían constantes, pero es un buen ejercicio para tomar conciencia del comportamiento de un sistema de reacción-difusión.

VII Referencias

- Abramowitz, M., & Stegun, I. A. (1972). *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs and mathematical tables* (10° ed.). Washington D.C.: U.S. Government Printing Office.
- Allen, M. A., Brindley, J., & Merkin, J. H. (1996). Autocatalysis in a shear flow. *54*(2), 54-56.
- Ames, W. F. (1992). *Numerical methods for partial differential equations* (3° ed.). Boston: Comput.Sci. Sci. Comput., Academic Press.
- Ballesteros-García, P., Claramunt-Vallespí, R. M., Sanz del Castillo, D., & Teso-Vilar, E. (2001). *Química Organica Avanzada*. Madrid: UNED.
- Bird, R. B., Stewart, W. E., & Lightfoot, E. N. (1976). *Fenómenos de Transporte* (1° ed.). Ciudad de México: Editorial Reverté.
- Bird, R. B., Stewart, W. E., & Lightfoot, E. N. (2002). *Transport Phenomena* (2° ed.). New York: John Wiley & Sons, Inc.
- Boyce, W. E., & DiPrima, R. C. (2009). *Ecuaciones diferenciales y problemas con valores en la frontera* (4° ed.). México D.F.: Limusa Wiley.
- Davis, M. E. (1984). *Numerical Methods and Modeling for Chemical Engineers*. New York: John Wiley & Sons, Inc.
- Epstein, R. I., & Showalter, K. (1996). Nonlinear Chemical Dynamics: Oscillations, Patterns, and Chaos. *Journal of Chemical Physics*, 13132-13147.
- Farlow, S. J. (1993). *Partial Differential Equations for Scientists and Engineers*. New York: Dover Publications.
- Fogelson, A. (2007). *Math 5120 Mathematical Biology Home Page Spring term 2007*. Recuperado el 10 de September de 2013, de The University of Utah, Department of Mathematics: http://www.math.utah.edu/~fogelson/5120_s07/
- García Cuevas, J. B. (2008). Aplicación del método de diferencia finita al modelado del proceso de transporte de masa con reacción química en una película de líquido descendente. *Tesis de maestría en Ingeniería Química*. Ciudad Universitaria: Facultad de Química, UNAM.
- Gray, P., Griffiths, J. F., & Scott, S. K. (January de 1984). Branched-chain reactions in open systems: theory of the oscillatory ignition limit for the hydrogen +oxygen reaction in a continuous-flow stirred-tank reactor. 243-258.
- Grinrod, P. (1996). *The Theory and Applications of Reaction Diffusion Equations : Patterns and Waves* (2° ed.). Oxford: Clarendon Press.
- Grossman, S. I. (2007). *Álgebra Lineal* (5° ed.). México D.F.: McGraw Hill.

- Horváth, D., Petrov, V., Scott, K. S., & Showalter, K. (1993). Instabilities in propagating reaction-diffusion fronts. *Journal of Chemical Physics*, 6332-6342.
- Izquierdo, J. F., Cunill, F., Ibarra, M., Trejo, J., & Fité, C. (2004). *Cinética de las reacciones químicas*. Barcelona: Universitat de Barcelona.
- Karayannis, M. I., Tzouwara-Karayanni, S. M., & Hadjiioannou, T. P. (1974). Kinetic study and analytical application of the iodate-arsenite reaction in strongly acid solutions. (70), 351-357.
- Levenspiel, O. (2004). *Ingeniería de las Reacciones Químicas* (3° ed.). Ciudad de México: Limusa Wiley.
- Levenspiel, O. (s.f.). *Ingeniería de las Reacciones Químicas* (3° ed.). Ciudad de México: Limusa Wiley.
- Logan, J. D. (2008). *An introduction to no linear partial differential equations* (2° ed.). Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, Inc.
- Moehlis, J. M. (24 de October de 2001). *Numerical Solution of the Diffusion Equation with No-Flux Boundary Conditions*. Recuperado el 10 de September de 2013, de UCSB College of Engineering, Department of Mechanical Engineering:
<http://www.me.ucsb.edu/~moehlis/APC591/tutorials/tutorial5/node6.html>
- Olmos, D., & Shizgal, B. D. (2006). A pseudospectral method of solution of Fisher's equation. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 193, 219–242.
- Smith, J. M. (1986). *Ingeniería de la cinética química* (3° ed.). Ciudad de México: Editorial Continental S.A. de C.V.
- Wazwaz, A.-M., & Gorguis, A. (2004). An analytic study of Fisher's equation by using Adomian decomposition method. *Applied Mathematics and Computation*, 154, 609–620.
- Zill, D. G., & Cullen, M. R. (2006). *Matemáticas Avanzadas para Ingeniería* (3° ed., Vol. Vol. 1 Ecuaciones Diferenciales). Ciudad de México: Mc Graw Hill.

VIII Anexos

VIII.A Anexo 1 Códigos de programas de MATLAB para dar solución numérica con el planteamiento de diferencias finitas

En este anexo se presentan los códigos que se elaboraron en el programa MATLAB para calcular de forma numérica, (ya sea en su totalidad o como un apoyo) el perfil de concentraciones de la especie B.

VIII.A.1 Resolución de Integral de la ecuación II.B.68.

Código de MATLAB para la resolución de la integral descrita en la ecuación II.B.68, para el cálculo del perfil de concentraciones sin reacción química considerando el perfil de velocidades.

```
f=inline('exp(-x^3)');
n=1;

while mod(n,2)~=0
    n=input('Ingrese el número de subintervalos: ');
    if mod(n,2)~=0
        disp('El número de subintervalos debe ser par, pulse una tecla para
continuar')
        pause
    end
end

A=input('Ingrese el límite inferior de la integral: ');

m=size(A,1);
mm=size(A,2);
B=9*ones(size(A));
H=zeros(m,mm);
sumai=zeros(m,mm);
sumap=zeros(m,mm);
int=zeros(m,mm);
for j=1:m;
    for k=1:mm;
H(j,k)=(B(j,k)-A(j,k))/n;
for i=1:2:n-1
    sumai(j,k)=sumai(j,k)+feval(f,H(j,k)*i+A(j,k));
end
for i=2:2:n-2
    sumap(j,k)=sumap(j,k)+feval(f,H(j,k)*i+A(j,k));
end

int(j,k)=(H(j,k)/3)*(feval(f,A(j,k))+4*sumai(j,k)+2*sumap(j,k)+feval(f,B(j,k)));
end
end
disp(['El resultado de la integral es '])
int
```

VIII.A.2 Código de diferencias finitas para el caso de reacción química de primer orden y perfil de velocidades

Programa en MATLAB para ejecutar el método numérico de diferencias finitas para obtener el perfil de concentraciones en el caso de difusión con reacción química de primer orden con el perfil de velocidades.

```
%Código para resolver por diferencias finitas en un método explícito la
%ecuación  $y''fx=(1/PeM)fyy-DaIf$ 
%tomando en cuenta todo el perfil de velocidades
%Autor: Aldo Javier Guadarrama Mendoza
clc, clear all, format compact
PeM=input('Ingrese el valor del Peclet de Masa ');
DaI=input('Ingrese el valor del Damköhler I ');
g0=1;
%numy=101;%número de particiones del enmallado en el eje y
if PeM<=0.01;
    dx=0.0000005;
    numx=200001;
    numy=11;
elseif PeM<=0.1 && PeM>0.01;
    dx=0.000005;
    numx=20001;
    numy=11;%número de particiones del enmallado en el eje y
elseif PeM<=1 && PeM>0.1;
    dx=0.00005;
    numx=200001;
    numy=101;%número de particiones del enmallado en el eje y
elseif PeM<=10 && PeM>1;
    dx=0.0005;
    numx=20001;
    numy=101;%número de particiones del enmallado en el eje y
elseif PeM<=100 && PeM>10;
    dx=0.005;
    numx=2001;
    numy=101;%número de particiones del enmallado en el eje y
elseif PeM<=1000 && PeM>100;
    dx=0.05;
    numx=201;
    numy=101;
end
dy=1/(numy-1);
D=1/PeM;
lambda=D*dx/dy^2;
w=dx*DaI;
y=0:dy:1;
f=zeros(numy,numx);
%condición inicial
x(1)=0;
for i=1:numy
    f(i,1)=0;
end
for j=1:numx
    x(j+1)=x(j)+dx;
```



```

for i=2:numy-1
    f(i,j+1)=f(i,j)+(1/i)*lambda*(f(i+1,j)-2*f(i,j)+f(i-1,j))-((1/i)*w*f(i,j));
end
f(1,j+1)=g0;
f(numy,j+1)=f(numy-1,j+1);
end
if PeM<=0.01;
    figure(1);
    xlabel('etha=x/H');
    ylabel('f=CB/CB0');
    hold on
    plot(y,f(:,1));
    plot(y,f(:,41));
    plot(y,f(:,81));
    plot(y,f(:,121));
    plot(y,f(:,161));
    plot(y,f(:,201));
    plot(y,f(:,1001));
    plot(y,f(:,2001));
    plot(y,f(:,4001));
    plot(y,f(:,6001));
    plot(y,f(:,8001));
    plot(y,f(:,10001));
    plot(y,f(:,12001));
    plot(y,f(:,14001));
    plot(y,f(:,16001));
    plot(y,f(:,18001));
    plot(y,f(:,20001));
    plot(y,f(:,40001));
    plot(y,f(:,60001));
    plot(y,f(:,80001));
    plot(y,f(:,100001));
    plot(y,f(:,120001));
    plot(y,f(:,140001));
    plot(y,f(:,160001));
    plot(y,f(:,180001));
    plot(y,f(:,200001));
    f(:,1),f(:,41),f(:,81),f(:,121),f(:,161),,f(:,201),f(:,1001)
    f(:,2001),f(:,4001),f(:,6001),f(:,8001),f(:,10001),f(:,12001)
    f(:,14001),f(:,16001),f(:,18001),f(:,20001),f(:,40001),f(:,60001),f(:,80001)
    f(:,100001),f(:,120001),f(:,140001),f(:,160001),f(:,180001),f(:,200001)
elseif PeM<=0.1;
    figure(1);
    hold on
    plot(y,f(:,1));
    plot(y,f(:,5));
    plot(y,f(:,9));
    plot(y,f(:,13));
    plot(y,f(:,17));
    plot(y,f(:,21));
    plot(y,f(:,101));
    plot(y,f(:,201));
    plot(y,f(:,401));
    plot(y,f(:,601));
    plot(y,f(:,801));
    plot(y,f(:,1001));
    plot(y,f(:,1201));

```

```

plot(y,f(:,1401));
plot(y,f(:,1601));
plot(y,f(:,1801));
plot(y,f(:,2001));
plot(y,f(:,4001));
plot(y,f(:,6001));
plot(y,f(:,8001));
plot(y,f(:,10001));
plot(y,f(:,12001));
plot(y,f(:,14001));
plot(y,f(:,16001));
plot(y,f(:,18001));
plot(y,f(:,20001));
f(:,1),f(:,5),f(:,9),f(:,13),f(:,17),f(:,21),f(:,101)
f(:,201),f(:,401),f(:,601),f(:,801),f(:,1001),f(:,1201)
f(:,1401),f(:,1601),f(:,1801),f(:,2001),f(:,4001),f(:,6001),f(:,8001)
f(:,10001),f(:,12001),f(:,14001),f(:,16001),f(:,18001),f(:,20001)
elseif PeM<=1 && PeM>0.1;
figure(1);
hold on
plot(y,f(:,1));
plot(y,f(:,41));
plot(y,f(:,81));
plot(y,f(:,121));
plot(y,f(:,161));
plot(y,f(:,201));
plot(y,f(:,1001));
plot(y,f(:,2001));
plot(y,f(:,4001));
plot(y,f(:,6001));
plot(y,f(:,8001));
plot(y,f(:,10001));
plot(y,f(:,12001));
plot(y,f(:,14001));
plot(y,f(:,16001));
plot(y,f(:,18001));
plot(y,f(:,20001));
plot(y,f(:,40001));
plot(y,f(:,60001));
plot(y,f(:,80001));
plot(y,f(:,100001));
plot(y,f(:,120001));
plot(y,f(:,140001));
plot(y,f(:,160001));
plot(y,f(:,180001));
plot(y,f(:,200001));
f(:,1),f(:,41),f(:,81),f(:,121),f(:,161),f(:,201),f(:,1001)
f(:,2001),f(:,4001),f(:,6001),f(:,8001),f(:,10001),f(:,12001)
f(:,14001),f(:,16001),f(:,18001),f(:,20001),f(:,40001),f(:,60001),f(:,80001)
f(:,100001),f(:,120001),f(:,140001),f(:,160001),f(:,180001),f(:,200001)
elseif PeM<=10 && PeM>1;
figure(1);
hold on
plot(y,f(:,1));
plot(y,f(:,5));
plot(y,f(:,9));

```

```

plot(y,f(:,13));
plot(y,f(:,17));
plot(y,f(:,21));
plot(y,f(:,101));
plot(y,f(:,201));
plot(y,f(:,401));
plot(y,f(:,601));
plot(y,f(:,801));
plot(y,f(:,1001));
plot(y,f(:,1201));
plot(y,f(:,1401));
plot(y,f(:,1601));
plot(y,f(:,1801));
plot(y,f(:,2001));
plot(y,f(:,4001));
plot(y,f(:,6001));
plot(y,f(:,8001));
plot(y,f(:,10001));
plot(y,f(:,12001));
plot(y,f(:,14001));
plot(y,f(:,16001));
plot(y,f(:,18001));
plot(y,f(:,20001));
f(:,1),f(:,5),f(:,9),f(:,13),f(:,17),f(:,21),f(:,101)
f(:,201),f(:,401),f(:,601),f(:,801),f(:,1001),f(:,1201)
f(:,1401),f(:,1601),f(:,1801),f(:,2001),f(:,4001),f(:,6001),f(:,8001)
f(:,10001),f(:,12001),f(:,14001),f(:,16001),f(:,18001),f(:,20001)
elseif PeM<=100 && PeM>10;
    figure(1);
    hold on
    plot(y,f(:,1));
    plot(y,f(:,11));
    plot(y,f(:,21));
    plot(y,f(:,41));
    plot(y,f(:,61));
    plot(y,f(:,81));
    plot(y,f(:,101));
    plot(y,f(:,121));
    plot(y,f(:,141));
    plot(y,f(:,161));
    plot(y,f(:,181));
    plot(y,f(:,201));
    plot(y,f(:,401));
    plot(y,f(:,601));
    plot(y,f(:,801));
    plot(y,f(:,1001));
    plot(y,f(:,1201));
    plot(y,f(:,1401));
    plot(y,f(:,1601));
    plot(y,f(:,1801));
    plot(y,f(:,2001));
    f(:,1),f(:,3),%f(:,5),f(:,9),f(:,13),f(:,17),f(:,21),f(:,101)%
    f(:,11),f(:,21),f(:,41),f(:,61),f(:,81),f(:,101),f(:,121)
    f(:,141),f(:,161),f(:,181),f(:,201),f(:,401),f(:,601),f(:,801)
    f(:,1001),f(:,1201),f(:,1401),f(:,1601),f(:,1801),f(:,2001)
elseif PeM<=1000 && PeM>100;
    figure(1);

```

```
hold on
plot(y,f(:,1));
plot(y,f(:,2));
plot(y,f(:,3));
plot(y,f(:,5));
plot(y,f(:,7));
plot(y,f(:,9));
plot(y,f(:,11));
plot(y,f(:,13));
plot(y,f(:,15));
plot(y,f(:,17));
plot(y,f(:,19));
plot(y,f(:,21));
plot(y,f(:,41));
plot(y,f(:,61));
plot(y,f(:,81));
plot(y,f(:,101));
plot(y,f(:,121));
plot(y,f(:,141));
plot(y,f(:,161));
plot(y,f(:,181));
plot(y,f(:,201));
f(:,1), f(:,2), f(:,3), f(:,5), f(:,7), f(:,9), f(:,11), f(:,13)
f(:,15), f(:,17), f(:,19), f(:,21), f(:,41), f(:,61), f(:,81)
f(:,101), f(:,121), f(:,141), f(:,161), f(:,181), f(:,201)
end
```

VIII.A.3 Código de diferencias finitas para el caso de reacción autocatalítica y considerando el perfil de velocidades.

Programa en MATLAB para ejecutar el método numérico de diferencias finitas para obtener el perfil de concentraciones en el caso de difusión con reacción química autocatalítica considerando el perfil de velocidades.

```
%Código para resolver por diferencias finitas en un método explícito la
%ecuación  $y''fx=(1/PeM)fy+DaI*f(1-f)$ 
%tomando en cuenta todo el perfil de velocidades
%Autor: Aldo Javier Guadarrama Mendoza
clc, clear all, format compact
PeM=input('Ingrese el valor del Peclet de Masa ');
DaI=input('Ingrese el valor del Damköhler I ');
g0=1;
%numy=101;%número de particiones del enmallado en el eje y
if PeM<=0.01;
    dx=0.0000005;
    numx=200001;
    numy=11;
elseif PeM<=0.1 && PeM>0.01;
    dx=0.000005;
    numx=20001;
    numy=11;%número de particiones del enmallado en el eje y
elseif PeM<=1 && PeM>0.1;
    dx=0.00005;
    numx=200001;
    numy=101;%número de particiones del enmallado en el eje y
elseif PeM<=10 && PeM>1;
    dx=0.0005;
    numx=20001;
    numy=101;%número de particiones del enmallado en el eje y
elseif PeM<=100 && PeM>10;
    dx=0.005;
    numx=2001;
    numy=101;%número de particiones del enmallado en el eje y
elseif PeM<=1000 && PeM>100;
    dx=0.05;
    numx=201;
    numy=101;
end
dy=1/(numy-1);
D=1/PeM;
lambda=D*dx/dy^2;
w=dx*DaI;
y=0:dy:1;
f=zeros(numy,numx);
%condición inicial
x(1)=0;
for i=1:numy
    f(i,1)=0;
end
for j=1:numx
    x(j+1)=x(j)+dx;
```

```

    for i=2:numy-1
        f(i,j+1)=f(i,j)+(1/i)*lambda*(f(i+1,j)-2*f(i,j)+f(i-1,j))+(1/i)*w*f(i,j)*(1-
f(i,j));
    end
    f(1,j+1)=g0;
    f(numy,j+1)=f(numy-1,j+1);
end
if PeM<=0.01;
    figure(1);
    xlabel('etha=x/H');
    ylabel('f=CB/CB0');
    hold on
    plot(y,f(:,1));
    plot(y,f(:,41));
    plot(y,f(:,81));
    plot(y,f(:,121));
    plot(y,f(:,161));
    plot(y,f(:,201));
    plot(y,f(:,1001));
    plot(y,f(:,2001));
    plot(y,f(:,4001));
    plot(y,f(:,6001));
    plot(y,f(:,8001));
    plot(y,f(:,10001));
    plot(y,f(:,12001));
    plot(y,f(:,14001));
    plot(y,f(:,16001));
    plot(y,f(:,18001));
    plot(y,f(:,20001));
    plot(y,f(:,40001));
    plot(y,f(:,60001));
    plot(y,f(:,80001));
    plot(y,f(:,100001));
    plot(y,f(:,120001));
    plot(y,f(:,140001));
    plot(y,f(:,160001));
    plot(y,f(:,180001));
    plot(y,f(:,200001));
    f(:,1),f(:,41),f(:,81),f(:,121),f(:,161),,f(:,201),f(:,1001)
f(:,2001),f(:,4001),f(:,6001),f(:,8001),f(:,10001),f(:,12001)
f(:,14001),f(:,16001),f(:,18001),f(:,20001),f(:,40001),f(:,60001),f(:,80001)
f(:,100001),f(:,120001),f(:,140001),f(:,160001),f(:,180001),f(:,200001)
elseif PeM<=0.1;
    figure(1);
    hold on
    plot(y,f(:,1));
    plot(y,f(:,5));
    plot(y,f(:,9));
    plot(y,f(:,13));
    plot(y,f(:,17));
    plot(y,f(:,21));
    plot(y,f(:,101));
    plot(y,f(:,201));
    plot(y,f(:,401));
    plot(y,f(:,601));
    plot(y,f(:,801));
    plot(y,f(:,1001));

```

```

plot(y,f(:,1201));
plot(y,f(:,1401));
plot(y,f(:,1601));
plot(y,f(:,1801));
plot(y,f(:,2001));
plot(y,f(:,4001));
plot(y,f(:,6001));
plot(y,f(:,8001));
plot(y,f(:,10001));
plot(y,f(:,12001));
plot(y,f(:,14001));
plot(y,f(:,16001));
plot(y,f(:,18001));
plot(y,f(:,20001));
f(:,1),f(:,5),f(:,9),f(:,13),f(:,17),f(:,21),f(:,101)
f(:,201),f(:,401),f(:,601),f(:,801),f(:,1001),f(:,1201)
f(:,1401),f(:,1601),f(:,1801),f(:,2001),f(:,4001),f(:,6001),f(:,8001)
f(:,10001),f(:,12001),f(:,14001),f(:,16001),f(:,18001),f(:,20001)
elseif PeM<=1 && PeM>0.1;
figure(1);
hold on
plot(y,f(:,1));
plot(y,f(:,41));
plot(y,f(:,81));
plot(y,f(:,121));
plot(y,f(:,161));
plot(y,f(:,201));
plot(y,f(:,1001));
plot(y,f(:,2001));
plot(y,f(:,4001));
plot(y,f(:,6001));
plot(y,f(:,8001));
plot(y,f(:,10001));
plot(y,f(:,12001));
plot(y,f(:,14001));
plot(y,f(:,16001));
plot(y,f(:,18001));
plot(y,f(:,20001));
plot(y,f(:,40001));
plot(y,f(:,60001));
plot(y,f(:,80001));
plot(y,f(:,100001));
plot(y,f(:,120001));
plot(y,f(:,140001));
plot(y,f(:,160001));
plot(y,f(:,180001));
plot(y,f(:,200001));
f(:,1),f(:,41),f(:,81),f(:,121),f(:,161),f(:,201),f(:,1001)
f(:,2001),f(:,4001),f(:,6001),f(:,8001),f(:,10001),f(:,12001)
f(:,14001),f(:,16001),f(:,18001),f(:,20001),f(:,40001),f(:,60001),f(:,80001)
f(:,100001),f(:,120001),f(:,140001),f(:,160001),f(:,180001),f(:,200001)

elseif PeM<=10 && PeM>1;
figure(1);
hold on
plot(y,f(:,1));
plot(y,f(:,5));

```

```

plot(y,f(:,9));
plot(y,f(:,13));
plot(y,f(:,17));
plot(y,f(:,21));
plot(y,f(:,101));
plot(y,f(:,201));
plot(y,f(:,401));
plot(y,f(:,601));
plot(y,f(:,801));
plot(y,f(:,1001));
plot(y,f(:,1201));
plot(y,f(:,1401));
plot(y,f(:,1601));
plot(y,f(:,1801));
plot(y,f(:,2001));
plot(y,f(:,4001));
plot(y,f(:,6001));
plot(y,f(:,8001));
plot(y,f(:,10001));
plot(y,f(:,12001));
plot(y,f(:,14001));
plot(y,f(:,16001));
plot(y,f(:,18001));
plot(y,f(:,20001));
f(:,1),f(:,5),f(:,9),f(:,13),f(:,17),f(:,21),f(:,101)
f(:,201),f(:,401),f(:,601),f(:,801),f(:,1001),f(:,1201)
f(:,1401),f(:,1601),f(:,1801),f(:,2001),f(:,4001),f(:,6001),f(:,8001)
f(:,10001),f(:,12001),f(:,14001),f(:,16001),f(:,18001),f(:,20001)
elseif PeM<=100 && PeM>10;
    figure(1);
    hold on
    plot(y,f(:,1));
    plot(y,f(:,11));
    plot(y,f(:,21));
    plot(y,f(:,41));
    plot(y,f(:,61));
    plot(y,f(:,81));
    plot(y,f(:,101));
    plot(y,f(:,121));
    plot(y,f(:,141));
    plot(y,f(:,161));
    plot(y,f(:,181));
    plot(y,f(:,201));
    plot(y,f(:,401));
    plot(y,f(:,601));
    plot(y,f(:,801));
    plot(y,f(:,1001));
    plot(y,f(:,1201));
    plot(y,f(:,1401));
    plot(y,f(:,1601));
    plot(y,f(:,1801));
    plot(y,f(:,2001));
    f(:,1),f(:,3),f(:,11),f(:,21),f(:,41),f(:,61),f(:,81),f(:,101),f(:,121)
    f(:,141),f(:,161),f(:,181),f(:,201),f(:,401),f(:,601),f(:,801)
    f(:,1001),f(:,1201),f(:,1401),f(:,1601),f(:,1801),f(:,2001)
elseif PeM<=1000 && PeM>100;
    figure(1);

```



```
hold on
plot(y,f(:,1));
plot(y,f(:,2));
plot(y,f(:,3));
plot(y,f(:,5));
plot(y,f(:,7));
plot(y,f(:,9));
plot(y,f(:,11));
plot(y,f(:,13));
plot(y,f(:,15));
plot(y,f(:,17));
plot(y,f(:,19));
plot(y,f(:,21));
plot(y,f(:,41));
plot(y,f(:,61));
plot(y,f(:,81));
plot(y,f(:,101));
plot(y,f(:,121));
plot(y,f(:,141));
plot(y,f(:,161));
plot(y,f(:,181));
plot(y,f(:,201));
f(:,1),f(:,2),f(:,3),f(:,5),f(:,7),f(:,9),f(:,11),f(:,13)
f(:,15),f(:,17),f(:,19),f(:,21),f(:,41),f(:,61),f(:,81)
f(:,101),f(:,121),f(:,141),f(:,161),f(:,181),f(:,201)
end
```

VIII.A.4 Código de diferencias finitas para el caso de reacción autocatalítica y una velocidad característica constante.

Programa en MATLAB para ejecutar el método numérico de diferencias finitas para obtener el perfil de concentraciones en el caso de difusión con reacción química autocatalítica considerando una velocidad característica constante.

```
%Código para resolver por diferencias finitas en un método explícito la
%ecuación  $fx=(1/PeM)fy+DaI*f(1-f)$ 
%Autor: Aldo Javier Guadarrama Mendoza
clc, clear all, format compact
PeM=input('Ingrese el valor del Peclet de Masa ');
DaI=input('Ingrese el valor del Damköhler I ');
g0=1;
%numy=101;%número de particiones del enmallado en el eje y
if PeM<=0.01;
    dx=0.0000005;
    numx=200001;
    numy=11;
elseif PeM<=0.1 && PeM>0.01;
    dx=0.000005;
    numx=20001;
    numy=11;%número de particiones del enmallado en el eje y
elseif PeM<=1 && PeM>0.1;
    dx=0.00005;
    numx=200001;
    numy=101;%número de particiones del enmallado en el eje y
elseif PeM<=10 && PeM>1;
    dx=0.0005;
    numx=20001;
    numy=101;%número de particiones del enmallado en el eje y
elseif PeM<=100 && PeM>10;
    dx=0.005;
    numx=2001;
    numy=101;%número de particiones del enmallado en el eje y
elseif PeM<=1000 && PeM>100;
    dx=0.05;
    numx=201;
    numy=101;
end
dy=1/(numy-1);
D=1/PeM;
lambda=D*dx/dy^2;
w=dx*DaI;
y=0:dy:1;
f=zeros(numy,numx);
%condición inicial
x(1)=0;
for i=1:numy
    f(i,1)=0;
end
for j=1:numx
    x(j+1)=x(j)+dx;
    for i=2:numy-1
```

```

        f(i,j+1)=f(i,j)+lambda*(f(i+1,j)-2*f(i,j)+f(i-1,j))+w*f(i,j)*(1-f(i,j));
    end
    f(1,j+1)=g0;
    f(numy,j+1)=f(numy-1,j+1);
end
if PeM<=0.01;
    figure(1);
    xlabel('etha=x/H');
    ylabel('f=CB/CB0');
    hold on
    plot(y,f(:,1));
    plot(y,f(:,41));
    plot(y,f(:,81));
    plot(y,f(:,121));
    plot(y,f(:,161));
    plot(y,f(:,201));
    plot(y,f(:,1001));
    plot(y,f(:,2001));
    plot(y,f(:,4001));
    plot(y,f(:,6001));
    plot(y,f(:,8001));
    plot(y,f(:,10001));
    plot(y,f(:,12001));
    plot(y,f(:,14001));
    plot(y,f(:,16001));
    plot(y,f(:,18001));
    plot(y,f(:,20001));
    plot(y,f(:,40001));
    plot(y,f(:,60001));
    plot(y,f(:,80001));
    plot(y,f(:,100001));
    plot(y,f(:,120001));
    plot(y,f(:,140001));
    plot(y,f(:,160001));
    plot(y,f(:,180001));
    plot(y,f(:,200001));
    f(:,1),f(:,41),f(:,81),f(:,121),f(:,161),,f(:,201),f(:,1001)
    f(:,2001),f(:,4001),f(:,6001),f(:,8001),f(:,10001),f(:,12001)
    f(:,14001),f(:,16001),f(:,18001),f(:,20001),f(:,40001),f(:,60001),f(:,80001)
    f(:,100001),f(:,120001),f(:,140001),f(:,160001),f(:,180001),f(:,200001)
elseif PeM<=0.1;
    figure(1);
    hold on
    plot(y,f(:,1));
    plot(y,f(:,5));
    plot(y,f(:,9));
    plot(y,f(:,13));
    plot(y,f(:,17));
    plot(y,f(:,21));
    plot(y,f(:,101));
    plot(y,f(:,201));
    plot(y,f(:,401));
    plot(y,f(:,601));
    plot(y,f(:,801));
    plot(y,f(:,1001));
    plot(y,f(:,1201));
    plot(y,f(:,1401));

```

```

plot(y,f(:,1601));
plot(y,f(:,1801));
plot(y,f(:,2001));
plot(y,f(:,4001));
plot(y,f(:,6001));
plot(y,f(:,8001));
plot(y,f(:,10001));
plot(y,f(:,12001));
plot(y,f(:,14001));
plot(y,f(:,16001));
plot(y,f(:,18001));
plot(y,f(:,20001));
f(:,1),f(:,5),f(:,9),f(:,13),f(:,17),f(:,21),f(:,101)
f(:,201),f(:,401),f(:,601),f(:,801),f(:,1001),f(:,1201)
f(:,1401),f(:,1601),f(:,1801),f(:,2001),f(:,4001),f(:,6001),f(:,8001)
f(:,10001),f(:,12001),f(:,14001),f(:,16001),f(:,18001),f(:,20001)
elseif PeM<=1 && PeM>0.1;
figure(1);
hold on
plot(y,f(:,1));
plot(y,f(:,41));
plot(y,f(:,81));
plot(y,f(:,121));
plot(y,f(:,161));
plot(y,f(:,201));
plot(y,f(:,1001));
plot(y,f(:,2001));
plot(y,f(:,4001));
plot(y,f(:,6001));
plot(y,f(:,8001));
plot(y,f(:,10001));
plot(y,f(:,12001));
plot(y,f(:,14001));
plot(y,f(:,16001));
plot(y,f(:,18001));
plot(y,f(:,20001));
plot(y,f(:,40001));
plot(y,f(:,60001));
plot(y,f(:,80001));
plot(y,f(:,100001));
plot(y,f(:,120001));
plot(y,f(:,140001));
plot(y,f(:,160001));
plot(y,f(:,180001));
plot(y,f(:,200001));
f(:,1),f(:,41),f(:,81),f(:,121),f(:,161),f(:,201),f(:,1001)
f(:,2001),f(:,4001),f(:,6001),f(:,8001),f(:,10001),f(:,12001)
f(:,14001),f(:,16001),f(:,18001),f(:,20001),f(:,40001),f(:,60001),f(:,80001)
f(:,100001),f(:,120001),f(:,140001),f(:,160001),f(:,180001),f(:,200001)

elseif PeM<=10 && PeM>1;
figure(1);
hold on
plot(y,f(:,1));
plot(y,f(:,5));
plot(y,f(:,9));
plot(y,f(:,13));

```

```

plot(y,f(:,17));
plot(y,f(:,21));
plot(y,f(:,101));
plot(y,f(:,201));
plot(y,f(:,401));
plot(y,f(:,601));
plot(y,f(:,801));
plot(y,f(:,1001));
plot(y,f(:,1201));
plot(y,f(:,1401));
plot(y,f(:,1601));
plot(y,f(:,1801));
plot(y,f(:,2001));
plot(y,f(:,4001));
plot(y,f(:,6001));
plot(y,f(:,8001));
plot(y,f(:,10001));
plot(y,f(:,12001));
plot(y,f(:,14001));
plot(y,f(:,16001));
plot(y,f(:,18001));
plot(y,f(:,20001));
f(:,1),f(:,5),f(:,9),f(:,13),f(:,17),f(:,21),f(:,101)
f(:,201),f(:,401),f(:,601),f(:,801),f(:,1001),f(:,1201)
f(:,1401),f(:,1601),f(:,1801),f(:,2001),f(:,4001),f(:,6001),f(:,8001)
f(:,10001),f(:,12001),f(:,14001),f(:,16001),f(:,18001),f(:,20001)
elseif PeM<=100 && PeM>10;
    figure(1);
    hold on
    plot(y,f(:,1));
    %plot(y,f(:,5));
    %plot(y,f(:,9));
    %plot(y,f(:,13));
    %plot(y,f(:,17));
    %plot(y,f(:,21));
    plot(y,f(:,11));
    plot(y,f(:,21));
    plot(y,f(:,41));
    plot(y,f(:,61));
    plot(y,f(:,81));
    plot(y,f(:,101));
    plot(y,f(:,121));
    plot(y,f(:,141));
    plot(y,f(:,161));
    plot(y,f(:,181));
    plot(y,f(:,201));
    plot(y,f(:,401));
    plot(y,f(:,601));
    plot(y,f(:,801));
    plot(y,f(:,1001));
    plot(y,f(:,1201));
    plot(y,f(:,1401));
    plot(y,f(:,1601));
    plot(y,f(:,1801));
    plot(y,f(:,2001));
    f(:,1),f(:,3),%f(:,5),f(:,9),f(:,13),f(:,17),f(:,21),f(:,101)%
    f(:,11),f(:,21),f(:,41),f(:,61),f(:,81),f(:,101),f(:,121)

```

```

f(:,141),f(:,161),f(:,181),f(:,201),f(:,401),f(:,601),f(:,801)
f(:,1001),f(:,1201),f(:,1401),f(:,1601),f(:,1801),f(:,2001)
elseif PeM<=1000 && PeM>100;
    figure(1);
    hold on
    plot(y,f(:,1));
    %plot(y,f(:,5));
    %plot(y,f(:,9));
    %plot(y,f(:,13));
    %plot(y,f(:,17));
    %plot(y,f(:,21));
    plot(y,f(:,2));
    plot(y,f(:,3));
    plot(y,f(:,5));
    plot(y,f(:,7));
    plot(y,f(:,9));
    plot(y,f(:,11));
    plot(y,f(:,13));
    plot(y,f(:,15));
    plot(y,f(:,17));
    plot(y,f(:,19));
    plot(y,f(:,21));
    plot(y,f(:,41));
    plot(y,f(:,61));
    plot(y,f(:,81));
    plot(y,f(:,101));
    plot(y,f(:,121));
    plot(y,f(:,141));
    plot(y,f(:,161));
    plot(y,f(:,181));
    plot(y,f(:,201));
    f(:,1),%f(:,5),f(:,9),f(:,13),f(:,17),f(:,21),f(:,101)%
    f(:,2),f(:,3),f(:,5),f(:,7),f(:,9),f(:,11),f(:,13)
    f(:,15),f(:,17),f(:,19),f(:,21),f(:,41),f(:,61),f(:,81)
    f(:,101),f(:,121),f(:,141),f(:,161),f(:,181),f(:,201)
end

```

VIII.A.5 Código de diferencias finitas para el caso sin reacción química y perfil de velocidades

Programa en MATLAB para ejecutar el método numérico de diferencias finitas para obtener el perfil de concentraciones en el caso de difusión sin reacción química considerando el perfil de velocidades.

```
%Código para resolver por diferencias finitas en un método explícito la
%ecuación  $y*fx=(1/PeM)fy$ 
%tomando en cuenta todo el perfil de velocidades
%Autor: Aldo Javier Guadarrama Mendoza
clc, clear all, format compact
PeM=input('Ingrese el valor del Peclet de Masa ');
DaI=input('Ingrese el valor del Damköhler I ');
g0=1;
%numy=101;%número de particiones del enmallado en el eje y
if PeM<=0.01;
    dx=0.0000005;
    numx=200001;
    numy=11;
elseif PeM<=0.1 && PeM>0.01;
    dx=0.000005;
    numx=20001;
    numy=11;%número de particiones del enmallado en el eje y
elseif PeM<=1 && PeM>0.1;
    dx=0.00005;
    numx=200001;
    numy=101;%número de particiones del enmallado en el eje y
elseif PeM<=10 && PeM>1;
    dx=0.0005;
    numx=20001;
    numy=101;%número de particiones del enmallado en el eje y
elseif PeM<=100 && PeM>10;
    dx=0.005;
    numx=2001;
    numy=101;%número de particiones del enmallado en el eje y
elseif PeM<=1000 && PeM>100;
    dx=0.05;
    numx=201;
    numy=101;
end
dy=1/(numy-1);
D=1/PeM;
lambda=D*dx/dy^2;
w=dx*DaI;
y=0:dy:1;
f=zeros(numy,numx);
%condición inicial
x(1)=0;
for i=1:numy
    f(i,1)=0;
end
for j=1:numx
    x(j+1)=x(j)+dx;
    for i=2:numy-1
```

```

        f(i,j+1)=f(i,j)+(1/i)*lambda*(f(i+1,j)-2*f(i,j)+f(i-1,j));
    end
    f(1,j+1)=g0;
    f(numy,j+1)=f(numy-1,j+1);
end
if PeM<=0.01;
    figure(1);
    xlabel('etha=x/H');
    ylabel('f=CB/CB0');
    hold on
    plot(y,f(:,1));
    plot(y,f(:,41));
    plot(y,f(:,81));
    plot(y,f(:,121));
    plot(y,f(:,161));
    plot(y,f(:,201));
    plot(y,f(:,1001));
    plot(y,f(:,2001));
    plot(y,f(:,4001));
    plot(y,f(:,6001));
    plot(y,f(:,8001));
    plot(y,f(:,10001));
    plot(y,f(:,12001));
    plot(y,f(:,14001));
    plot(y,f(:,16001));
    plot(y,f(:,18001));
    plot(y,f(:,20001));
    plot(y,f(:,40001));
    plot(y,f(:,60001));
    plot(y,f(:,80001));
    plot(y,f(:,100001));
    plot(y,f(:,120001));
    plot(y,f(:,140001));
    plot(y,f(:,160001));
    plot(y,f(:,180001));
    plot(y,f(:,200001));
    f(:,1),f(:,41),f(:,81),f(:,121),f(:,161),,f(:,201),f(:,1001)
    f(:,2001),f(:,4001),f(:,6001),f(:,8001),f(:,10001),f(:,12001)
    f(:,14001),f(:,16001),f(:,18001),f(:,20001),f(:,40001),f(:,60001),f(:,80001)
    f(:,100001),f(:,120001),f(:,140001),f(:,160001),f(:,180001),f(:,200001)
elseif PeM<=0.1;
    figure(1);
    hold on
    plot(y,f(:,1));
    plot(y,f(:,5));
    plot(y,f(:,9));
    plot(y,f(:,13));
    plot(y,f(:,17));
    plot(y,f(:,21));
    plot(y,f(:,101));
    plot(y,f(:,201));
    plot(y,f(:,401));
    plot(y,f(:,601));
    plot(y,f(:,801));
    plot(y,f(:,1001));
    plot(y,f(:,1201));
    plot(y,f(:,1401));

```



```

plot(y,f(:,1601));
plot(y,f(:,1801));
plot(y,f(:,2001));
plot(y,f(:,4001));
plot(y,f(:,6001));
plot(y,f(:,8001));
plot(y,f(:,10001));
plot(y,f(:,12001));
plot(y,f(:,14001));
plot(y,f(:,16001));
plot(y,f(:,18001));
plot(y,f(:,20001));
f(:,1),f(:,5),f(:,9),f(:,13),f(:,17),f(:,21),f(:,101)
f(:,201),f(:,401),f(:,601),f(:,801),f(:,1001),f(:,1201)
f(:,1401),f(:,1601),f(:,1801),f(:,2001),f(:,4001),f(:,6001),f(:,8001)
f(:,10001),f(:,12001),f(:,14001),f(:,16001),f(:,18001),f(:,20001)
elseif PeM<=1 && PeM>0.1;
figure(1);
hold on
plot(y,f(:,1));
plot(y,f(:,41));
plot(y,f(:,81));
plot(y,f(:,121));
plot(y,f(:,161));
plot(y,f(:,201));
plot(y,f(:,1001));
plot(y,f(:,2001));
plot(y,f(:,4001));
plot(y,f(:,6001));
plot(y,f(:,8001));
plot(y,f(:,10001));
plot(y,f(:,12001));
plot(y,f(:,14001));
plot(y,f(:,16001));
plot(y,f(:,18001));
plot(y,f(:,20001));
plot(y,f(:,40001));
plot(y,f(:,60001));
plot(y,f(:,80001));
plot(y,f(:,100001));
plot(y,f(:,120001));
plot(y,f(:,140001));
plot(y,f(:,160001));
plot(y,f(:,180001));
plot(y,f(:,200001));
f(:,1),f(:,41),f(:,81),f(:,121),f(:,161),f(:,201),f(:,1001)
f(:,2001),f(:,4001),f(:,6001),f(:,8001),f(:,10001),f(:,12001)
f(:,14001),f(:,16001),f(:,18001),f(:,20001),f(:,40001),f(:,60001),f(:,80001)
f(:,100001),f(:,120001),f(:,140001),f(:,160001),f(:,180001),f(:,200001)

elseif PeM<=10 && PeM>1;
figure(1);
hold on
plot(y,f(:,1));
plot(y,f(:,5));
plot(y,f(:,9));
plot(y,f(:,13));

```

```

plot(y, f(:, 17));
plot(y, f(:, 21));
plot(y, f(:, 101));
plot(y, f(:, 201));
plot(y, f(:, 401));
plot(y, f(:, 601));
plot(y, f(:, 801));
plot(y, f(:, 1001));
plot(y, f(:, 1201));
plot(y, f(:, 1401));
plot(y, f(:, 1601));
plot(y, f(:, 1801));
plot(y, f(:, 2001));
plot(y, f(:, 4001));
plot(y, f(:, 6001));
plot(y, f(:, 8001));
plot(y, f(:, 10001));
plot(y, f(:, 12001));
plot(y, f(:, 14001));
plot(y, f(:, 16001));
plot(y, f(:, 18001));
plot(y, f(:, 20001));
f(:, 1), f(:, 5), f(:, 9), f(:, 13), f(:, 17), f(:, 21), f(:, 101)
f(:, 201), f(:, 401), f(:, 601), f(:, 801), f(:, 1001), f(:, 1201)
f(:, 1401), f(:, 1601), f(:, 1801), f(:, 2001), f(:, 4001), f(:, 6001), f(:, 8001)
f(:, 10001), f(:, 12001), f(:, 14001), f(:, 16001), f(:, 18001), f(:, 20001)
elseif PeM<=100 && PeM>10;
    figure(1);
    hold on
    plot(y, f(:, 1));
    %plot(y, f(:, 5));
    %plot(y, f(:, 9));
    %plot(y, f(:, 13));
    %plot(y, f(:, 17));
    %plot(y, f(:, 21));
    plot(y, f(:, 11));
    plot(y, f(:, 21));
    plot(y, f(:, 41));
    plot(y, f(:, 61));
    plot(y, f(:, 81));
    plot(y, f(:, 101));
    plot(y, f(:, 121));
    plot(y, f(:, 141));
    plot(y, f(:, 161));
    plot(y, f(:, 181));
    plot(y, f(:, 201));
    plot(y, f(:, 401));
    plot(y, f(:, 601));
    plot(y, f(:, 801));
    plot(y, f(:, 1001));
    plot(y, f(:, 1201));
    plot(y, f(:, 1401));
    plot(y, f(:, 1601));
    plot(y, f(:, 1801));
    plot(y, f(:, 2001));
    f(:, 1), f(:, 3), %f(:, 5), f(:, 9), f(:, 13), f(:, 17), f(:, 21), f(:, 101)%
    f(:, 11), f(:, 21), f(:, 41), f(:, 61), f(:, 81), f(:, 101), f(:, 121)

```

```

f(:,141),f(:,161),f(:,181),f(:,201),f(:,401),f(:,601),f(:,801)
f(:,1001),f(:,1201),f(:,1401),f(:,1601),f(:,1801),f(:,2001)
elseif PeM<=1000 && PeM>100;
    figure(1);
    hold on
    plot(y,f(:,1));
    %plot(y,f(:,5));
    %plot(y,f(:,9));
    %plot(y,f(:,13));
    %plot(y,f(:,17));
    %plot(y,f(:,21));
    plot(y,f(:,2));
    plot(y,f(:,3));
    plot(y,f(:,5));
    plot(y,f(:,7));
    plot(y,f(:,9));
    plot(y,f(:,11));
    plot(y,f(:,13));
    plot(y,f(:,15));
    plot(y,f(:,17));
    plot(y,f(:,19));
    plot(y,f(:,21));
    plot(y,f(:,41));
    plot(y,f(:,61));
    plot(y,f(:,81));
    plot(y,f(:,101));
    plot(y,f(:,121));
    plot(y,f(:,141));
    plot(y,f(:,161));
    plot(y,f(:,181));
    plot(y,f(:,201));
    f(:,1),%f(:,5),f(:,9),f(:,13),f(:,17),f(:,21),f(:,101)%
    f(:,2),f(:,3),f(:,5),f(:,7),f(:,9),f(:,11),f(:,13)
    f(:,15),f(:,17),f(:,19),f(:,21),f(:,41),f(:,61),f(:,81)
    f(:,101),f(:,121),f(:,141),f(:,161),f(:,181),f(:,201)
end

```

VIII.B Anexo 2 Tabla de transformadas de Laplace

En este apartado encontramos las transformadas de Laplace que se necesitan en la resolución del perfil de velocidades en el capítulo II y III.

Tabla VIII.1. Transformadas de Laplace (Zill & Cullen, 2006)

#	f(t)	F(s)
1	$\frac{df(t)}{dt}$	$sF(s) - f(0)$
2	$erfc\left(\frac{a}{2\sqrt{t}}\right)$	$\frac{e^{-a\sqrt{s}}}{s}$
3	1	$\frac{1}{s}$
4	$f(x, t) = \frac{F_0}{2} \left[e^{bx} erfc\left(\frac{x}{2\sqrt{kt}} + \sqrt{ht}\right) + e^{-bx} erfc\left(\frac{x}{2\sqrt{kt}} - \sqrt{ht}\right) \right]$	$F(x, s) = \frac{F_0}{s} e^{-x\sqrt{\frac{s+h}{k}}}$

VIII.C Anexo 3 Método de Diferencias Finitas

El método de diferencias finitas consiste en aproximar las ecuaciones diferenciales por ecuaciones en diferencias obtenidas usualmente a partir del truncamiento de series de Taylor. El conjunto de ecuaciones en diferencias resultante constituye un sistema de ecuaciones lineales, el cual puede resolverse numéricamente con la ayuda de una computadora, obteniendo así una solución aproximada del problema original.

Si el problema carece de dependencia temporal el método se denomina simplemente método de diferencias finitas. Si el problema incluye una variable temporal se denomina método de diferencias finitas en el dominio temporal.

La resolución de un problema definido por una ecuación diferencial parcial y su conjunto de condiciones iniciales y de frontera, consiste en hallar una función, tal que sea continua en la región de interés, que sea derivable dos veces en esta misma región y que cumpla con las condiciones de iniciales y de frontera.

El primer paso del método de diferencias finitas consiste en seleccionar un conjunto de puntos discretos (nodos de malla) en la región de interés, un subdominio temporal de observación y un intervalo de muestreo temporal (Δt). El segundo paso consiste en aproximar la ecuación diferencial mediante una ecuación en diferencias. El tercer paso comprende evaluar la ecuación en diferencias en cada uno de los puntos de la malla y del subdominio temporal seleccionado. Finalmente se procede a resolver numéricamente el sistema de ecuaciones lineales que resulta.

El conjunto de puntos discretos x_i , se puede construir seleccionando una separación espacial Δx constante, lo cual no es restrictivo, de modo que siguiendo la ecuación VIII.C.1, para el caso unidimensional, como se muestra en la Figura VIII.1. En la Figura VIII.2 se extiende el razonamiento anterior al caso bidimensional. Para el caso tridimensional, como se muestra en la Figura VIII.3, se escoge un paso para cada dirección, de la forma que muestra la ecuación VIII.C.2

$$x_i = i\Delta x \quad (\text{VIII.C.1})$$

$$u(x_i, y_i, z_i) = u(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z) \quad (\text{VIII.C.2})$$

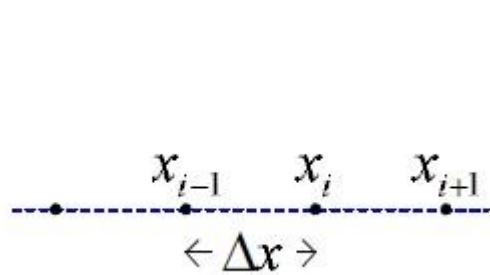


Figura VIII.1 Dominio espacial unidimensional

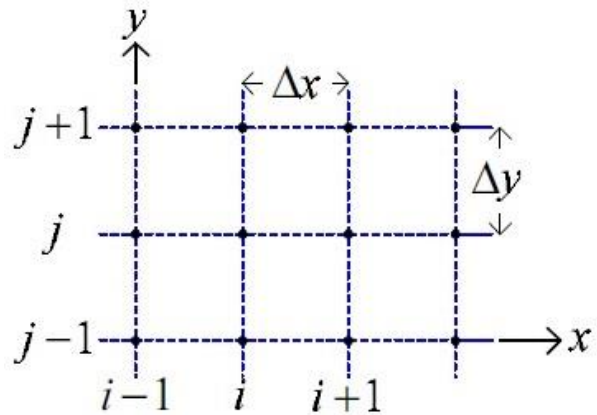


Figura VIII.2 Dominio espacial bidimensional

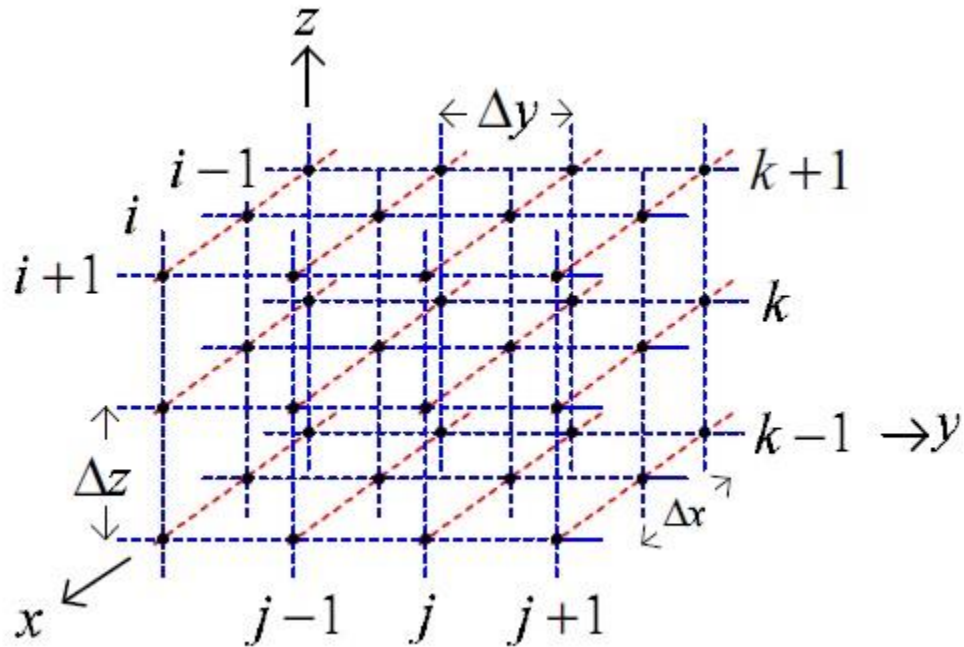


Figura VIII.3 Dominio espacial tridimensional

Tomando como referencia la Figura VIII.1, poniendo $\Delta x = h$, y garantizando que la función $u(x)$ posee derivadas de cualquier orden, es posible expandir $u(x_i + 1) \equiv u(x_i + h)$ y $u(x_i - 1) \equiv u(x_i - h)$ en sendas series de Taylor a partir del valor de la función $u(x)$ y sus derivadas en x_i , como se puede apreciar en las ecuaciones VIII.C.3 y VIII.C.5.

$$u(x_i + h) = u(x_i) + h \frac{du}{dx} \Big|_{x_i} + \frac{h^2}{2} \frac{d^2u}{dx^2} \Big|_{x_i} + \frac{h^3}{6} \frac{d^3u}{dx^3} \Big|_{x_i} + \sum_{n=4}^{\infty} \frac{h^n}{n!} \frac{d^n u}{dx^n} \Big|_{x_i} \quad (\text{VIII.C.3})$$

$$O(h^4) = \sum_{n=4}^{\infty} \frac{h^n}{n!} \frac{d^n u}{dx^n} \Big|_{x_i} \quad (\text{VIII.C.4})$$

$$u(x_i - h) = u(x_i) - h \frac{du}{dx} \Big|_{x_i} + \frac{h^2}{2} \frac{d^2u}{dx^2} \Big|_{x_i} - \frac{h^3}{6} \frac{d^3u}{dx^3} \Big|_{x_i} + \sum_{n=4}^{\infty} (-1)^n \frac{h^n}{n!} \frac{d^n u}{dx^n} \Big|_{x_i} \quad (\text{VIII.C.5})$$

$$O(h^4) = \sum_{n=4}^{\infty} (-1)^n \frac{h^n}{n!} \frac{d^n u}{dx^n} \Big|_{x_i} \quad (\text{VIII.C.6})$$

En donde $O(h^n)$, como se muestra en el ejemplo en las ecuaciones VIII.C.4 y VIII.C.6 para las ecuaciones VIII.C.3 y VIII.C.5 respectivamente, es la notación empleada para indicar el orden de error que se comete cuando el valor deseado, por ejemplo $u(x_i + h)$ en la ecuación VIII.C.3, es aproximado por una cantidad finita de elementos de la serie suprimiendo los términos a partir de n , inclusive asumiendo que h es muy pequeño. La potencia más pequeña de h de los términos suprimidos determina el orden de error, porque los términos siguientes son despreciables bajo la premisa de que $h \ll 1$. Si llamamos $e(h)$ al error, siendo el orden de error $O(h^n)$, se puede demostrar la ecuación VIII.C.7. En donde las condiciones para la ecuación VIII.C.3 se encuentra en la ecuación VIII.C.8, y las condiciones para la ecuación VIII.C.5 está en la ecuación VIII.C.9.

$$e(h) = \frac{h^n}{n!} \frac{d^n u}{dx^n} \Big|_{\xi} \quad (\text{VIII.C.7})$$

$$\xi \in [x, x + h] \quad \forall h > 0 \quad (\text{VIII.C.8})$$

$$\xi \in [x - |h|, x] \quad \forall h > 0 \quad (\text{VIII.C.9})$$

Una expresión más compacta de las ecuaciones VIII.C.3 y VIII.C.5 se obtienen poniendo a $x_i = x$, $\frac{du}{dx} = u'$ y $\frac{d^n u}{dx^n} = u^{(n)}$, obteniendo las ecuaciones VIII.C.10 y VIII.C.11.

$$\begin{aligned} u(x_i + h) &= u(x_i) + h \frac{du}{dx} \Big|_{x_i} + \frac{h^2}{2} \frac{d^2u}{dx^2} \Big|_{x_i} + \frac{h^3}{6} \frac{d^3u}{dx^3} \Big|_{x_i} + \sum_{n=4}^{\infty} \frac{h^n}{n!} \frac{d^n u}{dx^n} \Big|_{x_i} \\ &= u(x) + hu'(x) + \frac{h^2}{2} u''(x) + \frac{h^3}{6} u'''(x) + O(h^4) \end{aligned} \quad (\text{VIII.C.10})$$

$$\begin{aligned}
u(x_i - h) &= u(x_i) - h \left. \frac{du}{dx} \right|_{x_i} + \frac{h^2}{2} \left. \frac{d^2u}{dx^2} \right|_{x_i} - \frac{h^3}{6} \left. \frac{d^3u}{dx^3} \right|_{x_i} + \sum_{n=4}^{\infty} (-1)^n \frac{h^n}{n!} \left. \frac{d^n u}{dx^n} \right|_{x_i} \\
&= u(x) - hu'(x) + \frac{h^2}{2} u''(x) - \frac{h^3}{6} u'''(x) + O(h^4)
\end{aligned} \tag{VIII.C.11}$$

De las ecuaciones VIII.C.10 y VIII.C.11, y de su combinación obtenemos las aproximaciones de primer y segundo orden, respectivamente, para la primera derivada de la función $u(x)$ la obtenemos como se muestra en las ecuaciones VIII.C.12, VIII.C.13 y VIII.C.14.

$$\begin{aligned}
u'(x) &= \frac{u(x+h) - u(x)}{h} + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{h^{n-1}}{n!} u^{(n)}(x) = \frac{u(x+h) - u(x)}{h} + O(h) \\
&\approx \frac{u(x+h) - u(x)}{h}
\end{aligned} \tag{VIII.C.12}$$

$$\begin{aligned}
u'(x) &= \frac{u(x) - u(x-h)}{h} + \sum_{n=2}^{\infty} (-1)^n \frac{h^{n-1}}{n!} u^{(n)}(x) = \frac{u(x) - u(x-h)}{h} + O(h) \\
&\approx \frac{u(x) - u(x-h)}{h}
\end{aligned} \tag{VIII.C.13}$$

$$\begin{aligned}
u'(x) &= \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h} + \sum_{\substack{n=3 \\ n \text{ impar}}}^{\infty} \frac{h^{n-1}}{n!} u^{(n)}(x) \\
&= \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h} + O(h^2) \approx \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h}
\end{aligned} \tag{VIII.C.14}$$

Las ecuaciones VIII.C.12, VIII.C.13 y VIII.C.14 se conocen como fórmulas de aproximación en diferencias hacia adelante, hacia atrás y centrales de la primera derivada de $u(x)$, respectivamente.

De modo análogo, combinando las ecuaciones VIII.C.10 y VIII.C.11, se obtiene una aproximación en diferencias centrales de la segunda derivada de $u(x)$, como se muestra en la ecuación VIII.C.15.

$$\begin{aligned}
u''(x) &= \frac{u(x+h) - u(x-h) + 2u(x)}{h^2} + \sum_{\substack{n=4 \\ n \text{ par}}}^{\infty} \frac{2h^{n-2}}{n!} u^{(n)}(x) \\
&= \frac{u(x+h) - u(x-h) + 2u(x)}{h^2} + O(h^2) \\
&\approx \frac{u(x+h) - u(x-h) + 2u(x)}{h^2}
\end{aligned} \tag{VIII.C.15}$$

Para facilitar la nomenclatura se utilizará la notación de índices, y su relación se muestra en el conjunto de ecuaciones VIII.C.16.

$$f(x) = f_i \quad (\text{VIII.C.16a})$$

$$x = i \quad (\text{VIII.C.16b})$$