



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE QUÍMICA

ANÁLISIS DE PROCESOS DE TRANSPORTE
CON REACCIÓN QUÍMICA EN CONDICIONES ISOTÉRMICAS
Y CON GRADIENTE DE PRESIÓN

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERA QUÍMICA

Presenta

Mayra Lizeth Granados Becerril



Ciudad de México, 2019



Universidad Nacional
Autónoma de México



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	M. en C. Manuel Vázquez Islas
Vocal:	M. en I. Carlos Álvarez Maciel
Secretario:	Dr. Leonardo Damián Soria Rodríguez
1er Suplente:	Dra. Alejandra Mendoza Campos
2do Suplente:	Ing. Úrsula Manríquez Tolsá

Lugar donde se realizó la tesis:

Departamento de Ingeniería Química, Conjunto E, Edificio de Ingeniería Química, Anexo de la Facultad de Química, Ciudad Universitaria, Coyoacán 04510, Ciudad de México.

TUTOR DE LA TESIS

Dr. Leonardo Damián Soria Rodríguez

Firma

SUSTENTANTE

Mayra Lizeth Granados Becerril

Firma

Resumen

Por medio de esta tesis se estudia la reacción química, difusión y convección de masa de un sistema de recubrimiento en el cual una especie se encuentra en un fluido entre dos cilindros concéntricos, los diámetros de los cilindros para el caso de esta tesis se consideran muy grandes, y el diámetro del cilindro menor se aproxima al diámetro del cilindro mayor por lo que se puede considerar que el fluido se encuentra entre placas paralelas, el cilindro de menor diámetro presenta movimiento con dirección hacia las manecillas del reloj con velocidad constante.

Se presenta la ecuación que representa los fenómenos de transferencia de masa y reacción química de primer orden en forma adimensional del sistema, la cual es una ecuación diferencial parcial lineal de segundo orden y parabólica, su variable dependiente es el perfil de concentraciones. Aparece la función de perfil de velocidades la cual es una ecuación cuadrática a causa de la presión del sistema, que se sustituirá en la ecuación diferencial de difusión de masa. Posteriormente, se supone la solución al perfil de concentraciones de acuerdo al método de separación de variables, y al sustituirla en la ecuación diferencial de difusión de masa, se aplica el método de separación de variables resultando dos ecuaciones diferenciales más simples, una con respecto a la diferencia de diámetros la cual se resuelve y resulta una función cilíndrica parabólica, y otra ecuación con respecto a la circunferencia del sistema la cual se resuelve de acuerdo al teorema de Sturm-Leuville.

Índice

Resumen	2
Nomenclatura	5
Letras griegas	5
Lista de ilustraciones	6
Lista de tablas.....	6
Números adimensionales.....	7
Número de Reynolds.....	7
Número de Schmidt	8
Número de Peclet de masa	8
Número de Damköhler II.....	9
Introducción.....	10
Antecedentes	12
Objetivos	14
CAPÍTULO 1	15
Proceso de recubrimiento	16
Perfil de velocidades para un fluido laminar	16
Difusión de masa	17
Convección másica	19
Convección forzada	19
Convección natural.....	19
Tasa de convección	20
Difusión de masa y convección	21
Propiedades del sistema de estudio.....	22
CAPÍTULO 2	26
Ecuaciones diferenciales parciales	27
Propiedades de las Ecuaciones diferenciales parciales homogéneas	28
Ecuaciones diferenciales lineales de segundo orden.....	29
Separación de variables.....	30
Operadores diferenciales	31
Teorema de Sturm-Liouville	32
Funciones cilíndricas parabólicas	34
Presentación de casos	37

Función que depende de ε de la ecuación del perfil de concentraciones	39
Función que depende de η de la ecuación del perfil de concentraciones	41
Solución al perfil de concentraciones	42
CAPÍTULO 3	44
Condiciones a la frontera del sistema	45
CAPÍTULO 4	48
Análisis y conclusiones del sistema	49
Anexo	51
Trabajos citados	52

Nomenclatura

U: Velocidad característica del fluido

u_x : velocidad en la dirección x

C_{B0} : Concentración inicial de la especie B

C_B : Concentración de la especie B en cualquier punto del sistema

H_0 : Distancia total de la separación radial de ambos cilindros

y: Separación radial de ambos cilindros

L_0 : Diámetro promedio total de los cilindros.

X: Diámetro del promedio de los cilindros

D: Difusividad másica

k: Constante de reacción química

d: Diámetro de un tubo

D_{AB} : Coeficiente de difusión de masa

P: Presión dentro del sistema

P_{atm} : Presión atmosférica

t: Tiempo

Letras griegas

ρ : Densidad

μ : Viscosidad

Lista de ilustraciones

Ilustración 1.- Representación del perfil de concentraciones de un flujo laminar	17
Ilustración 2.- Representación del sistema de difusión	18
Ilustración 3.- Sistema que solo presenta convección.....	20
Ilustración 4.- Proceso de convección y difusión por separado.....	21
Ilustración 5.- Sistema con transferencia de masa y advección	22
Ilustración 6.- Sistema de estudio	23
Ilustración 7.- Consideración del sistema de estudio	¡Error! Marcador no definido.
Ilustración 8.- Gráfica de η con respecto al perfil de velocidades	24
Ilustración 9.- Perfil de concentraciones del sistema	25

Lista de tablas

Tabla 1.- Perfil de velocidades con respecto a la relación adimensional η de longitudes en x	51
Tabla 2.- Valores que toma la Ecuación 10 con diferentes constantes.....	51

Números adimensionales

Número de Reynolds

El número de Reynolds es un número adimensional utilizado en mecánica de fluidos, diseño de reactores y fenómenos de transporte que relaciona las fuerzas inerciales y fuerzas viscosas, por lo que con esta relación se puede deducir si el fluido es de tipo laminar o turbulento. Esto puede ser interpretado de la siguiente manera: cuando las fuerzas viscosas son dominantes (en el caso del flujo lento y bajo número de Reynolds) el fluido puede mantener todas las partículas alineadas, en este caso se trata de flujo laminar. También un bajo número de Reynolds indica que el fluido es muy viscoso, y sus efectos de inercia son insignificantes.

Cuando las fuerzas inerciales dominan sobre las fuerzas viscosas (cuando el fluido fluye muy rápido y tiene gran número de Reynolds) se trata de un flujo turbulento. La relación de fuerzas que representa el número de Reynolds se muestra a continuación.

$$Re = \frac{\text{fuerzas inerciales}}{\text{fuerzas viscosas}}$$

La relación que existe entre estas fuerzas se puede expresar por medio de los siguientes términos.

$$Re = \frac{\rho V d}{\mu}$$

Donde ρ representa la densidad, V la velocidad de flujo, d el diámetro del tubo, y finalmente μ la viscosidad.

(Schlichting Herrmann, 2000)

Número de Schmidt

El número de Schmidt es un número adimensional que relaciona la difusividad de momentum con la difusividad de masa, este número adimensional usualmente es usado en los análisis de sistemas con transferencia de masa.

Este número adimensional es útil para caracterizar fluidos en los cuales ocurren procesos en el cual interviene la transferencia de momentum, difusión de masa y convección

$$Sc = \frac{\text{tasa de difusión viscosa}}{\text{tasa de difusión masica}}$$

Puede expresarse por medio de los siguientes términos

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D}$$

Donde D representa la difusividad másica.

(Neutrium, 2014)

Número de Peclet de masa

El número de Peclet, fue llamado así por el físico francés Jean Claude Eugéne Péclet, existe un número de Péclet que considera fenómenos másicos y otro sobre fenómenos térmicos, el número de Péclet está definido como la relación de la tasa de difusión (de masa o energía) y un gradiente de velocidad.

En problemas de transferencia de masa, el número de Péclet es el producto del número de Reynolds el cual describe el régimen del flujo, y el número de Schmidt el cual es usado para caracterizar el flujo del fluido y sus procesos simultáneos de momentum, difusión de masa y convección. Con este número es posible deducir si en el sistema predominan los fenómenos convectivos o los procesos difusivos.

El número de Péclet se representa como se muestra a continuación

$$Pe_m = \frac{UH_0^2}{LD_{AB}}$$

(Glasstone & Sesonske, 1994)

Número de Damköhler II

El número de Damköhler es una proporción para determinar si las tasas de difusión o las tasas de reacción química predominan en el sistema, para definir una distribución química en estado estable en las escalas de longitud y tiempo de interés. Lo cual se expresa de la siguiente manera

$$Da_{II} = \frac{\text{tasa de reacción química}}{\text{tasa de difusión de masa}}$$

O lo que es lo mismo

$$Da_{II} = \frac{\text{tiempo de difusión de masa}}{\text{tiempo de reacción química}}$$

La ecuación que se muestra a continuación representa al número de Damköhler II en términos medibles del sistema.

$$Da_{II} = \frac{H_0^2 k}{D_{AB}}$$

(Fitzgerald, 2014)

Introducción

La aplicación de la reología ha sido esencial para el desarrollo de las siguientes áreas: aeronáutica, tratamiento de contaminantes, industria de los plásticos y cualquier área que necesite tratamiento de mecánica de fluidos y mecánica de sólidos.

En el caso de esta tesis, se estudia el proceso de recubrimiento en el cual se usa la reología para modelar al fluido que se encuentra en el proceso.

Existe una gran variedad de recubrimientos de acuerdo al material en el cual será aplicado o los propósitos de este proceso. Los recubrimientos más útiles y más usados en la industria son de polímeros, estos recubrimientos son líquidos cuando son formulados, pero cuando se plastifican se forma una película delgada sobre el material que se recubre.

Los recubrimientos tienen las siguientes funciones: proteger la superficie del material contra daños externos, mejorar el aspecto del producto, aumentar la resistencia al desgaste y reducir la fricción de la superficie. (Julia M. Irtiz Reyes, 2013)

Se ha estudiado a lo largo de los años las reacciones químicas entre polímeros, y se han clasificado de muchas formas, para el estudio de esta tesis se usa un tipo de reacción química sencilla, la cual solo considera la concentración de los reactivos y la constante cinética.

A través de la investigación del campo de la deformación de fluidos, en reología se desarrolla una relación consecutiva o un modelo matemático para obtener las funciones materiales o propiedades que caracterizan el material.

Las funciones materiales y relaciones consecutivas se usan de acuerdo al sistema de estudio y la información que tenemos sobre él.

Los objetivos principales del estudio de un sistema en mecánica de fluidos por medio de ambos métodos son:

- Predecir el comportamiento macroscópico del fluido en condiciones de proceso para lo cual se hace uso de las relaciones constitutivas y de las funciones materiales.
- Entender la microestructura del fluido y evaluar los efectos de varios factores, para esto se comparan las funciones materiales o propiedades reológicas.

Los fluidos son todos los líquidos, gases y otras sustancias de composición más compleja tales como emulsiones, suspensiones, pastas y polímeros fundidos. Los fluidos son capaces de deformarse continuamente cuando están expuestos a fuerzas externas.

Los fenómenos de transporte siempre tienen lugar en aquellos procesos conocidos como procesos de transferencia, en los que existe el movimiento de una propiedad ya sea de masa, momento o energía, en una o varias direcciones bajo la acción de una fuerza impulsora. Al movimiento de una de estas propiedades se le llama flujo.

Los fenómenos de transferencia de masa nos permiten estudiar la concentración de los reactivos del sistema dentro un proceso en el que haya un gradiente de concentraciones.

Para el modelamiento de algún proceso con fenómenos de transporte. Se estudia cada uno de los fenómenos en dos partes

1. Se calcula la solución de la ecuación diferencial que gobierna el proceso
2. Se simulan los fenómenos a partir de mecanismos básicos simples. La simulación nos permitirá explicar las facetas esenciales de la descripción matemática del fenómeno en cuestión.

(Abraham A., 1989) , (Barnes, Hutton, & Walters, 1989), (Darby, 1996)

Antecedentes

Este trabajo esta basado en la tesis de maestría *Recubrimiento de superficies con fluidos Newtonianos y no Newtonianos con reacción química* del Doctor Leonardo Soria, en la cual se estudió un sistema entre placas paralelas dentro de las cuales se encuentran dos fluidos A y B, donde A está en gran concentración dentro del sistema y B presenta una concentración mucho menor, supuso que A y B presentan la siguiente reacción química



Siendo la reacción anterior irreversible, considerando que la concentración de A es mucho mayor que la concentración B se obtiene que la rapidez de reacción es

$$R_B = -k_1 C_B$$

Se hizo uso de la ecuación de continuidad para coordenadas rectangulares con densidad y coeficiente de difusión constantes y dadas las propiedades del sistema se llegó a la siguiente ecuación

$$\frac{U}{H_0} y \frac{\partial C_B}{\partial x} = D_{AB} \frac{\partial^2 C_B}{\partial y^2} + R_B$$

Fue sustituida la ecuación de R_B en la ecuación anterior, y se aplicaron las siguientes relaciones adimensionales

$$\Omega = \frac{C_B}{C_{B_0}} \quad \eta = \frac{Y}{H_0} \quad \varepsilon = \frac{x}{L} \quad \varphi = \frac{u_x}{U}$$

Dando como resultado la siguiente ecuación

$$\varphi \frac{\partial \Omega}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{Pe_M} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \eta^2} - \Omega \frac{Da_{II}}{Pe_m}$$

El Doctor Soria supuso un perfil de velocidades φ constante para el caso de recubrimiento con reacción química, para el caso de esta tesis se usará la siguiente ecuación del perfil de concentraciones la cual tiene un comportamiento cuadrático causado por la presión del sistema, y la cual también se obtuvo por

medio de la tesis de maestría del Doctor Leonardo Soria para el caso de recubrimiento sin reacción química.

$$\varphi = \frac{P^*}{2} (\eta^2 - \eta) + 1$$

(Leonardo S. R., 2016)

Objetivos

- Modelar un sistema de recubrimiento entre placas paralelas con fenómenos de transporte de masa, reacción química de primer orden y con un perfil de concentraciones cuadrático.
- Resolver la ecuación diferencial del perfil de concentraciones que modela el recubrimiento de un fluido Newtoniano, y los fenómenos de transferencia de masa.

CAPÍTULO 1

RECUBRIMIENTO, REACCIÓN QUÍMICA Y
FENOMENOS DE TRANSPORTE DEL
SISTEMA

Proceso de recubrimiento

El proceso de recubrimiento es la aplicación de un espesor finito de un polímero sobre algún material. (Universidad Tecnológica de Pereira , 2015). Los recubrimientos son utilizados para modificar las propiedades de la superficie del material y así mismo obtener una mejora en algún proceso, o para realizar una función en específico *recubrimientos funcionales*, en muchas de las aplicaciones, la capa delgada de recubrimiento es suficiente para determinar las propiedades de todo el sistema.

Tipos de recubrimiento:

- Recubrimientos duros de piezas móviles del motor.
- Recubrimientos antirreflejantes y antihumedad para lentes, visores, espejos, ventanas, etc.
- Capas activas y funcionales de discos ópticos.
- Capas magnéticas para discos duros, etiquetas magnéticas, etc.
- Sensores (utilizado en diversos sectores industriales)

(Albella, 2003)

Perfil de velocidades para un fluido laminar

La Ilustración 1 muestra un sistema de un fluido contenido entre dos placas muy grandes y paralelas, separadas entre sí por una distancia muy pequeña Y , es un sistema en reposo en $t < 0$, y al $t = 0$ la lámina inferior se pone en movimiento en dirección del eje x dada por una fuerza constante, el sistema llega a estado estacionario y se establece un perfil de velocidades como se muestra en el último dibujo de la Ilustración 1.

(Bird, Stewart, & Lightfoot, 2013)

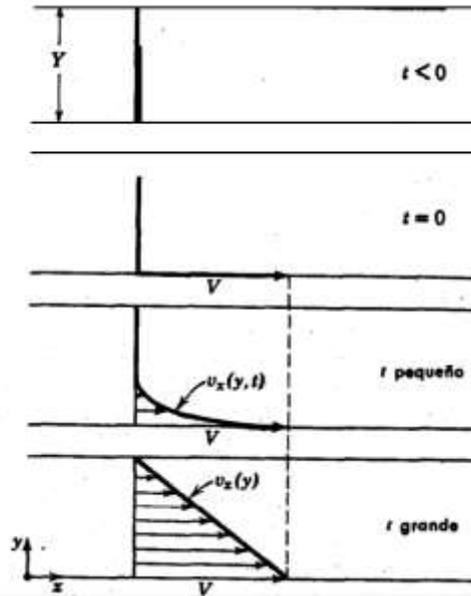


Ilustración 1.- Representación del perfil de concentraciones de un flujo laminar

Imagen extraída de (E.B. Bird; W.E Stewart; E.N Lightfoot 2013, Formación del perfil de velocidad en estado estacionario para un fluido contenido entre dos láminas [Figura 1.1-1] Recuperado de: fenómenos de transporte

Difusión de masa

La difusión másica es el movimiento de moléculas a través de un fluido por medio de los desplazamientos individuales y desordenados, debido a una diferencia de concentraciones. Las velocidades de los componentes individuales que se difunden en la mezcla son distintas, existen varios métodos adecuados para promediar las velocidades de todos los componentes con el fin de obtener la velocidad local de la mezcla. La difusión puede ocurrir en sistemas de fluidos estancados o en fluidos en movimiento, pueden ser líquidos, gases, o con menor frecuencia en sólidos.

Las moléculas de la sustancia disuelta en el medio se mueven de los puntos de mayor concentración hacia los de menor concentración.

En la Ilustración 2 se observa un ejemplo de difusión en la cual la trayectoria de la partícula A que se mueve al difundirse del punto 1 al punto 2 a través de las partículas B

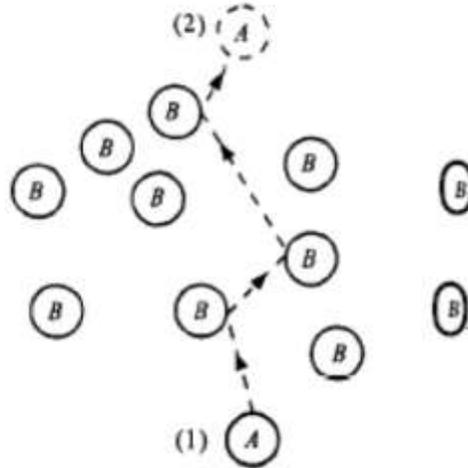


Ilustración 2.- Representación del sistema de difusión

Imagen extraída de (Masciarrelli Roque; Stancich Silvia; Stoppani Fernando, 2012, Diagrama esquemático del proceso de difusión molecular. Recuperado de: https://www.frro.utn.edu.ar/repositorio/catedras/quimica/4_anio/ingenieria_reacciones/Transferencia_de_Materia.pdf

El factor que más influye en este fenómeno es el gradiente de concentraciones de la especie que se está difundiendo en el medio, que la mayoría de las veces se representa como dc/dx , el cual representa la concentración de la especie que se está difundiendo en una dirección de interés definida por x , la difusión también puede ser originada por un gradiente de presión, de temperatura, o por la aplicación de una fuerza externa.

(Masciarelli, Stancich, & Fernando, 2012)

Convección másica

La convección es el arrastre de una especie química en un medio líquido, si un sistema solo presentará este proceso, la especie química viajaría a la misma velocidad del medio, y el perfil de concentraciones de la especie química sería constante.

La convección está presente en procesos tales como crecimiento de cristales, diseño de intercambiadores, procesos de destilación, sistemas de protección térmica, etc.

Existen dos tipos de convección la natural y la forzada

Convección forzada

En este tipo de convección, el fluido se mueve bajo la influencia de una fuerza externa (diferencia de presiones) es en el caso de transferencia de líquidos por bombas, o en el caso de gases por medio de compresores.

Convección natural

En este caso, la convección ocurre por el desarrollo de corrientes, si hay algún cambio de densidad dentro de la fase fluida. La variación de la densidad puede ser causada por diferencias de temperatura o por una gran diferencia de concentraciones.

Tasa de convección

La ecuación de la tasa de convección de transferencia de masa (natural o forzada) se presenta a continuación.

$$N_A = k_c \Delta C_A$$

Donde:

N_A : Flux molar o de masa de la especie A, promedio relativo.

K_c : Coeficiente de transferencia de masa convectivo

ΔC_A : Es la diferencia de concentraciones entre la concentración del límite de la superficie y la concentración promedio de la difusividad de las especies en movimiento por la corriente del fluido.

En la Ilustración 3 se muestra el fenómeno de convección másica.

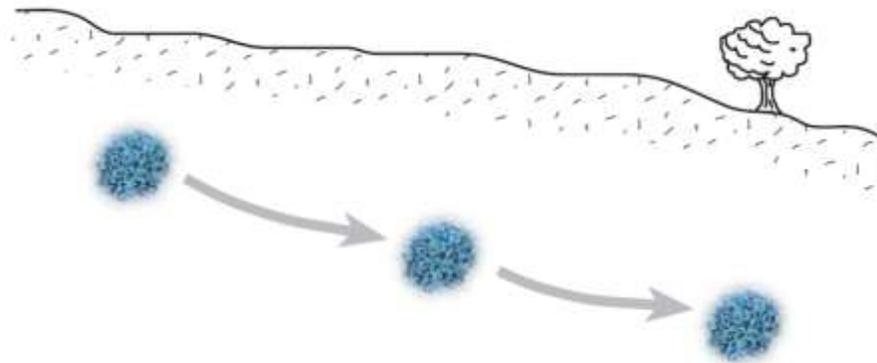


Ilustración 3.-Sistema que solo presenta convección

La Ilustración 3 representa como la especie representada de color azul es arrastrada por la corriente, presentando movilidad a lo largo del sistema hacia donde se dirige el flujo.

Difusión de masa y convección

Si en un punto de un medio sin flujo depositamos cierta cantidad de un fluido (tinta morada), después de algún tiempo se observará que el punto inicial se habrá ampliado y difuminado. Esto ocurre cuando los procesos de difusión de masa y convección de masa ocurren simultáneamente como es el caso de la Ilustración 5.

Es importante distinguir visualmente los fenómenos de difusión de masa y convección de masa, en la Ilustración 4 se muestra dos vasos los cuales se encuentran en reposo, y a ambos se les añadió una pequeña cantidad de tinta morada. En el vaso del lado derecho muestra la presencia de convección de masa, se observa como la tinta recorre una trayectoria sin casi expandirse la tinta. En el vaso del lado izquierdo la tinta morada se expande recorriendo menos trayectoria que en el caso del vaso derecho. Es evidente que ambos vasos presentan los dos fenómenos, pero en cada vaso predomina en mayor proporción solo el fenómeno de masa ya mencionado.



Ilustración 4.- Proceso de convección y difusión por separado

Ilustración 4 extraída de (María Cotto (2011) YouTube [Difusión de tinta y convección]
<https://www.pinterest.com.mx/pin/186617978295083402/>

En la Ilustración 5 se representa un sistema de dos componentes, A es el medio y B son las partículas representadas de color azul, en el cual se presentan los dos fenómenos (convección y difusión másica) en la misma proporción, se observa que la especie B recorre una trayectoria (convección de masa), y se va expandiendo a lo largo del camino recorrido (difusión de masa)

(Román, 2012)

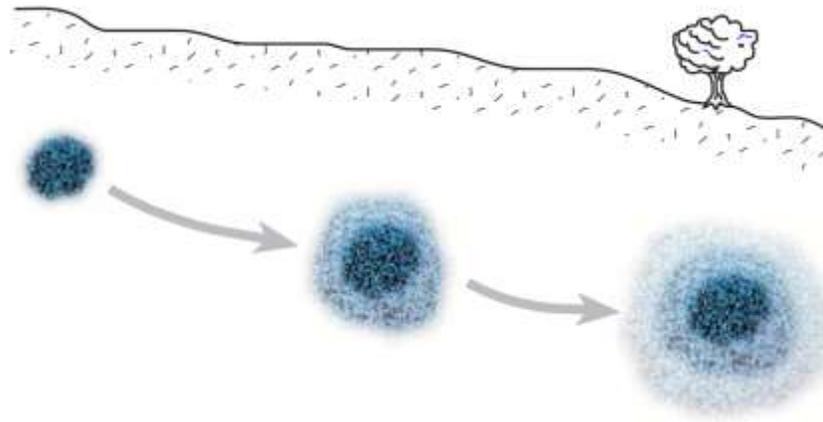


Ilustración 5.- Sistema con transferencia de masa y advección

Ilustraciones 3 y 5 extraídas de (Sánchez San Román Javier (2012) Transporte de contaminantes [Figura 1] http://hidrologia.usal.es/temas/Transporte_de_contaminantes.pdf

Propiedades del sistema de estudio

El sistema de estudio consta de un fluido entre dos cilindros concéntricos, el diámetro de los cilindros es muy grande, y el diámetro del cilindro menor se aproxima al diámetro del cilindro mayor, por lo que se puede considerar que el flujo se encuentra entre placas paralelas, y la placa de menor diámetro se encuentra en movimiento constante. La Ilustración 6 representa el sistema de estudio, y la Ilustración 7 representa el sistema de estudio considerándolo como placas paralelas.

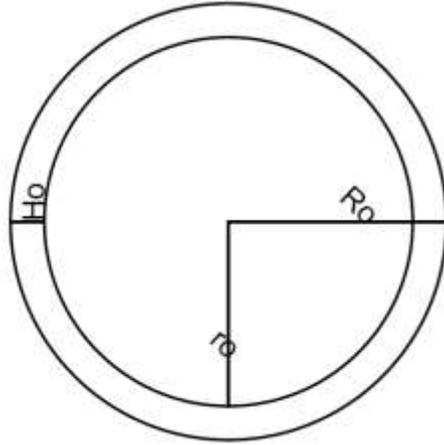


Ilustración 6.- Sistema de estudio

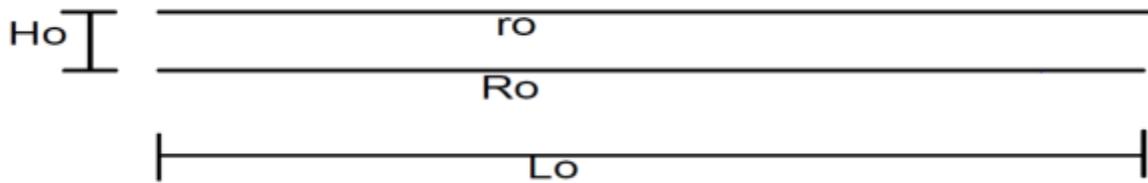


Ilustración 7.- Consideración del sistema de estudio

Imágenes 6, y 7 de dominio del autor de esta tesis

En un punto del sistema entre los cilindros, a la altura de $H_0/2$ y $x=0$ hay una especie B con concentración C_{B_0} que presenta difusión de masa, convección y reacción química de primer orden con el fluido que se encuentra disperso.

Por lo tanto, inicialmente en $t < 0$ cuando el cilindro inferior aún no está en movimiento se considera que la concentración en el sistema de la especie B es cero.

La especie B presenta movimiento a través del flujo del sistema dado por la especie A, por medio de los fenómenos de transporte

Se considera siempre que los medios en los que tienen lugar los fenómenos de transporte son continuos.

El perfil de velocidad de flujo que presenta el sistema tiene un comportamiento parabólico, y solo depende de η por lo que solo tiene dependencia con la diferencia de diámetros de los cilindros donde se encuentra el fluido, no depende directamente con la circunferencia del sistema, dicha ecuación se presenta a continuación

$$\varphi = \frac{P^*}{2} (\eta^2 - \eta) + 1$$

Ecuación 1

La ecuación anterior representa el perfil de velocidades de la sustancia B, este perfil de velocidades es causado por la presión del sistema que se aplica hacia la dirección de ε el cual es constante, y no repercute en η .

En la Ilustración 8 se muestra una gráfica en la que se observa la relación del perfil de velocidades con respecto a η , en η igual a cero es el límite entre la pared del cilindro de menor diámetro con el fluido, y cuando η es uno es el límite donde el fluido se encuentra en contacto con la placa superior, siendo η igual a 0.5 el flujo que se encuentra con la misma separación con la placa superior y la placa inferior.

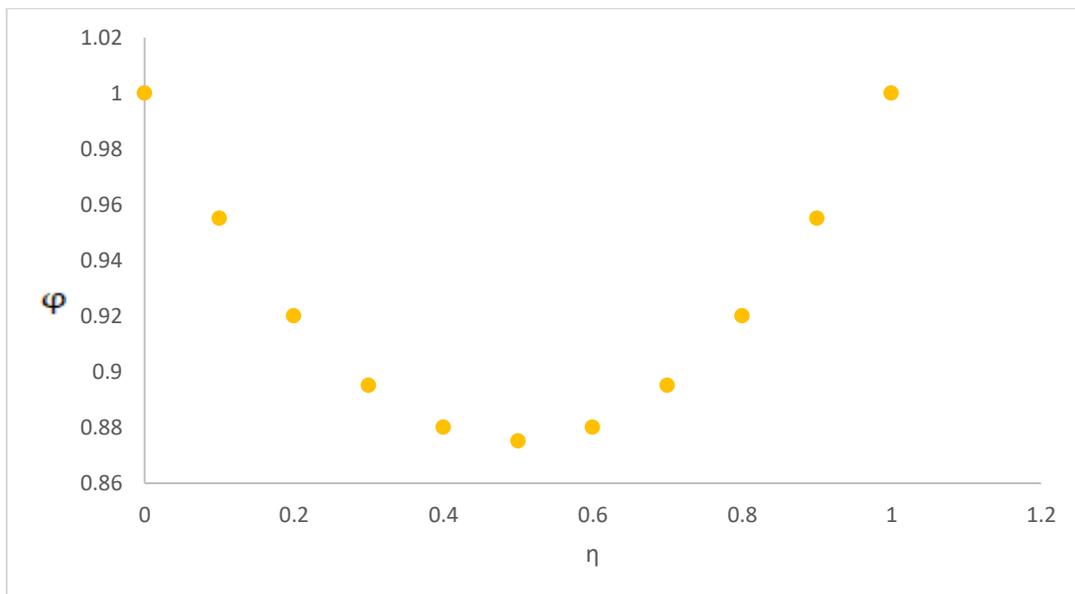


Ilustración 8.- Gráfica de η con respecto al perfil de velocidades

La Ilustración 9 es un dibujo que representa el perfil de concentraciones del sistema en $t > 0$, en la parte inferior del dibujo se observa la placa que está en movimiento, y en la parte superior la placa que se encuentra estática.

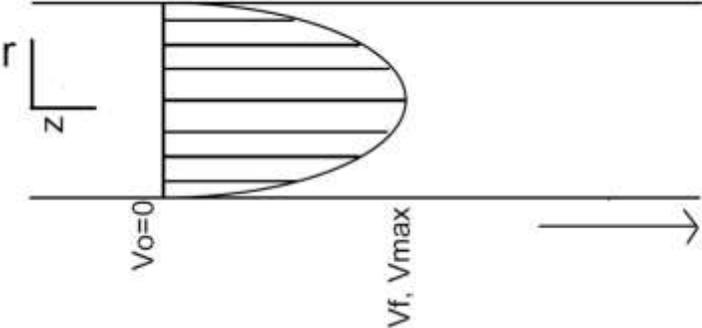


Ilustración 9.- Perfil de concentraciones del sistema

CAPÍTULO 2

Presentación de soluciones de ecuaciones
diferenciales

Ecuaciones diferenciales parciales

Una ecuación diferencial parcial es una relación donde aparece una función incógnita u con al menos una derivada parcial, ya que como su nombre lo indica aparecen parciales, entonces u depende de al menos dos variables independientes.

Las ecuaciones diferenciales parciales tienen la forma

$$F\left(x_1, x_2, \dots, x_n, u, \frac{\partial u}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial u}{\partial x_n}, \dots, \frac{\partial^{k_1} u}{\partial x_1^{k_1}}, \dots, \frac{\partial^{k_n} u}{\partial x_n^{k_n}}\right) = 0$$
$$x_i \forall_i = 1, 2, \dots, n$$

Se cumple que $k_i, \forall_i = 1, 2, \dots, n$ son enteros positivos

$$k_1 + k_2 + \dots + k_n = m$$

Por ejemplo, la siguiente ecuación es una ecuación diferencial parcial

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + e^{-x}$$

El orden de una ecuación diferencial parcial es el orden superior de las derivadas parciales que figuran en la ecuación.

Así si x y z son variables independientes, y $u=u(x,z)$ es la función buscada. Las soluciones de las ecuaciones diferenciales parciales dan como resultado familias de funciones. Existen ecuaciones diferenciales parciales que tienen conjuntos de soluciones muy pequeños y en algunos casos nulos.

Propiedades de las Ecuaciones diferenciales parciales homogéneas

Teorema 1

Si $u(x,y)$ es la solución de la ecuación diferencial homogénea $L[u]=0$, entonces $ku(x,y)$ es también solución de la ecuación homogénea para toda k que existe en los reales.

Teorema 2

Si $u_1(x,y)$ y $u_2(x,y)$ son soluciones de la ecuación diferencial homogénea $L[u]=0$ entonces $u_1(x,y) + u_2(x,y)$ es también solución de esta ecuación.

Teorema 3

Si cada una de las funciones $u_i(x,y)$, $i=1, 2, \dots, k$ es solución de $L[u]=0$, $\sum_{i=1}^k c_i u_i(x,y)$ es también solución de la ecuación homogénea

$$\forall c_i \in \mathbb{R} \text{ con } i = 1, 2, \dots, k$$

Teorema 4

Sea $L[u]=f(x,y)$

- Si $u(x,y)$ es solución de $L[u]=f$ y $v(x,y)$ es solución de $L[u]=0$, entonces $u(x,y)+v(x,y)$ es también solución de $L[u]=f$
- Si $u(x,y)$ es solución de $L[u]=f_1$ y $v(x,y)$ es solución de $L[u]=f_2$, entonces $u(x,y)+v(x,y)$ es solución de la ecuación $L[u]=f_1+f_2$ por principio de superposición.

(Soria, 2017)

Ecuaciones diferenciales lineales de segundo orden

Las ecuaciones en derivadas parciales son lineales si esta es lineal con respecto a la función buscada y todas sus derivadas que forman parte de la ecuación.

Sea la ecuación diferencial parcial de segundo orden

$$L[u]=f(x,y)$$

$$A(x,y)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B(x,y)\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y} + C(x,y)\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + a(x,y)\frac{\partial u}{\partial x} + b(x,y)\frac{\partial u}{\partial y} + c(x,y)u(x,y) = f(x,y)$$

En una cierta región del plano del sistema

Definición

Para una ecuación diferencial parcial lineal de segundo orden definimos el discriminante como

$$\Delta = B^2 - 4AC$$

Y la ecuación diferencial parcial se clasifica según el valor del discriminante

Elíptica $\Delta = B^2 - 4AC < 0$

Hiperbólica $\Delta = B^2 - 4AC > 0$

Parabólica $\Delta = B^2 - 4AC = 0$

(SPH, s.f.)

En esta tesis solo se mencionan las propiedades de las ecuaciones diferenciales parciales lineales parabólicas de segundo orden.

Se realiza un cambio no singular de los valores independientes

$$\zeta = \varphi(x, y) \quad \eta = \phi(x, y) \quad \zeta \quad \eta \quad \in \quad R$$

Se obtiene el tipo canónico más simple de la ecuación diferencial parcial

Si la ecuación diferencial parcial es de tipo parabólica $\Delta=0$ entonces toma la siguiente forma

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2} = \Phi \left(\varepsilon, \eta, u, \frac{\partial u}{\partial \varepsilon}, \frac{\partial u}{\partial \eta} \right)$$

Aquí Φ es una función que depende de la función buscada, sus primeras derivadas y las variables independientes las cuales son η y ε

(Garza & Ortiz, 2013)

(Soria, 2017)

Separación de variables

El método de separación de variables es uno de los métodos más antiguos para encontrar soluciones particulares de ecuaciones diferenciales lineales. Reduce la dificultad de una ecuación diferencial a problemas de resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias, constituye el elemento básico de los métodos de desarrollo en auto funciones para determinar soluciones de problemas de contorno y de condiciones iniciales.

En este procedimiento se supone que la función buscada $u(x,y)$ es de la forma

$$u(x, y) = F(x)G(y)$$

Con esta suposición se cumple

$$\frac{\partial u(x, y)}{\partial x} = F'(x)G(y)$$

$$\frac{\partial u(x, y)}{\partial y} = F(x)G'(y)$$

$$\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y \partial x} = F'(x)G'(y)$$

$$\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} = F''(x)G(y)$$

$$\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} = F(x)G''(y)$$

Y en general

$$u_{x\dots xy\dots y} = \frac{\partial^n u}{\partial x^n \partial y^{n-k}}(x, y) = F^{(k)}(x)G^{(n-k)}(y)$$

Sustituyendo estas expresiones en la Ecuación diferencial parcial es posible, obtener dos ecuaciones diferenciales de más fácil resolución que la función original.

Operadores diferenciales

Sea L un operador diferencial lineal actuando sobre funciones diferenciales en un conjunto ψ de \mathbb{R}^n

$$L = L\left(x_0, x_1, \dots, x_{n-1}; \frac{\partial}{\partial x_0}, \frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_{n-1}}\right)$$

La cual se puede expresar de la siguiente forma

$$Lu := \sum_{\alpha} a_{\alpha}(x) D^{\alpha} u$$

L efectúa derivaciones con respecto a las variables $(x_0, x_1, \dots, x_{n-1})$ y sus coeficientes $a_{\alpha} = a_{\alpha}(x)$ dependen de estas variables.

Definición

Se dice que L es un operador separable respecto de la variable x_0 si puede descomponerse en suma de dos operadores

$$L = A + B$$

De la forma

$$A = A\left(x_0; \frac{\partial}{\partial x_0}\right), \quad B = B\left(x_1, \dots, x_{n-1}; \frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_{n-1}}\right)$$

Es decir A solo efectúa derivaciones respecto de x_0 y sus coeficientes solo dependen de x_0 , mientras que B deriva respecto a las variables (x_1, \dots, x_{n-1}) .

Teorema de Sturm-Liouville

El método de separación de variables aplicado a la resolución de ecuaciones en derivadas parciales de segundo orden nos conduce al estudio de problemas de contorno para ecuaciones diferenciales ordinarias del tipo

$$a_0(x)u''(x) + a_1(x)u'(x) + a_2(x)u(x) = \lambda u(x)$$

$$a < x < b$$

Donde $a_0, a_1, a_2: [a, b]$ son funciones reales continuas. Suponiendo $a_0(x) < 0$ y llamando

$$p(x) = e^{\int_a^x \frac{a_1(t)}{a_0(t)} dt}$$

$$q(x) = -p(x) \frac{a_2(x)}{a_0(x)}$$

$$s(x) = \frac{-p(x)}{a_0(x)}$$

Sustituyendo las últimas tres relaciones a la ecuación inicial queda

$$-(pu')' + qu = \lambda su$$

Dado un sistema de Sturm-Liouville regular y casi coercivo, se tiene que el conjunto de sus valores propios es una sucesión creciente de números reales

$$\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$$

$$\exists \lim_{n \rightarrow \infty} \lambda_n = \infty$$

$$n \rightarrow \infty$$

Además existe una base ortonormal de $L^2([a,b])$ formada por funciones propias $\{e_n\}_{n=1}^{\infty}$

En el caso en que $u \in D_0 = \{u \in C^2([a,b]) \mid B_1(u)=B_2(u)=0\}$ la serie de Fourier

$$\sum_{n=1}^{\infty} \langle \varphi, e_n \rangle e_n$$

$B_1(u)=B_1(u)=0\}$ Son condiciones de frontera homogéneas

Converge uniformemente a u

En general los problemas de valores a la frontera en las ecuaciones

$$y''(x) + Ay(x) = 0 \quad y(x) = 0; \quad y(l) = 0$$

$$y''(x) + Ay(x) = 0 \quad y'(0) = 0; \quad y'(l) = 0$$

Son casos especiales del siguiente problema

Sea p, q, r y r' funciones de valor real continuas en $[a,b]$ y sea $r(x) > 0$ y $p(x) > 0$ para toda x que exista en el intervalo $[a,b]$

El valor a la frontera con dos puntos es

$$\frac{d}{dx}[r(x)y'(x)] + [q(x) + \lambda p(x)] = 0$$

La ecuación anterior puede presentarse de la siguiente manera

$$\alpha_1 y(a) + \beta_1 y'(a) = 0$$

$$\alpha_2 y(b) + \beta_2 y'(b) = 0$$

$$\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2 \in \{R - 0\}$$

En algunos casos se llega a la siguiente ecuación

$$y'(x) + ky(x) = 0$$

$$k \in R - \{0\}$$

Cuya solución es

$$y(x) = C_1 e^{-kx}$$

Y en otros casos se llega a la siguiente ecuación, dependiendo del modelo matemático de estudio

$$y''(x) + \lambda y(x) = 0$$

Cuyas soluciones dependen del valor de λ como se muestra a continuación

$$\lambda > 0 \quad y = c_1 \text{sen}(\sqrt{\lambda}x) + c_2 \text{cos}(\sqrt{\lambda}x)$$

$$\lambda = 0 \quad y = c_1 + c_2 x$$

$$\lambda < 0 \quad y = c_1 e^{\sqrt{-\lambda}x} + c_2 e^{-\sqrt{-\lambda}x}$$

Funciones cilíndricas parabólicas

Las coordenadas cilíndricas parabólicas son un sistema de coordenadas ortogonales tridimensionales que resultan de la proyección del sistema de coordenadas parabólicas bidimensional en la dirección perpendicular a z .

Las funciones cilíndricas parabólicas también son llamadas funciones de Weber

Whitaker y Watson definen las funciones parabólicas cilíndricas $D_\nu(z)$ como soluciones de la ecuación diferencial de Weber.

$$y''(x) + \left(\nu + \frac{1}{2} - \frac{1}{4}z^2 \right) y(x) = 0$$

La ecuación anterior tiene la siguiente forma

$$\frac{d^2 f}{dz^2} + (az^2 + bz + c)f(z) = 0$$

La ecuación anterior tiene dos formas estándar

La primera forma estándar es

$$\frac{d^2 f}{dz^2} - \left(\frac{1}{4}z^2 + a\right)f(z) = 0$$

Y la segunda forma estándar

$$\frac{d^2 f}{dz^2} + \left(\frac{1}{4}z^2 - a\right)f(z) = 0$$

Las soluciones par e impar para la primera ecuación estándar son

$$y_1(z) = e^{-\frac{z^2}{4}} F_1\left(\frac{1}{2}a + \frac{1}{4}; \frac{1}{2}; \frac{1}{2}z^2\right)$$

$$y_2(z) = ze^{-\frac{z^2}{4}} F_1\left(\frac{1}{2}a + \frac{3}{4}; \frac{3}{2}; \frac{1}{2}z^2\right)$$

Donde ambas ecuaciones tienen funciones hipergeométricas confluentes. Si son soluciones para la primera ecuación estándar, entonces la segunda ecuación estándar tiene la solución del tipo

$$y(\pm ia, ze^{\mp \frac{i\pi}{4}}), y(\pm ia, ze^{\mp \frac{i\pi}{4}})$$

Abramowitz y Stegun definen soluciones estándar para la primera ecuación estándar como

$$U(a, z) = \cos\left[\pi\left(\frac{1}{4} + \frac{1}{2}a\right)\right]Y_1 - \operatorname{sen}\left[\pi\left(\frac{1}{4} + \frac{1}{2}a\right)\right]Y_2$$

$$U(a, z) = \frac{\text{sen} \left[\pi \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{2} a \right) \right] Y_1 + \cos \left[\pi \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{2} a \right) \right] Y_2}{\Gamma \left(\frac{1}{2} - a \right)}$$

Donde

$$Y_1 \equiv \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{2} a \right)}{2^{\frac{a}{2} + \frac{1}{4}}} y_1$$

$$Y_2 \equiv \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma \left(\frac{3}{4} - \frac{1}{2} a \right)}{2^{\frac{a}{2} + \frac{1}{4}}} y_2$$

En términos de las funciones de Whittaker y Watson

$$U(a, z) = D_{-a-\frac{1}{2}}(z)$$

$$V(a, z) = \frac{\Gamma \left(\frac{1}{2} + a \right) \left[\text{sen}(\pi a) D_{-a-\frac{1}{2}}(z) + D_{-a-\frac{1}{2}}(-z) \right]}{\pi}$$

Para los enteros no negativos la solución se reduce a

$$D_n(z) = 2^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{z^2}{4}} H_n \left(\frac{z}{\sqrt{2}} \right) = e^{-\frac{z^2}{4}} He_n(z)$$

Donde $H_n(z)$ es un polinomio de Hermite y el He_n es un polinomio de Hermite modificado

Las funciones cilíndricas parabólicas D_v satisfacen las relaciones de recurrencia

$$D_{v+1}(z) - zD_v(z) + vD_{v-1}(z) = 0$$

$$D'_v(z) + \frac{1}{2} zD_v(z) - vD_{v-1}(z) = 0$$

Las funciones cilíndricas parabólicas para integral se pueden definir en términos de la siguiente función

$$D_n(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \text{sen}(n\theta - z \text{sen}\theta) d\theta$$

(Abramowitz, 1972), (Iyanaga, 1980), (Spanier, 1987)

Presentación de casos

La Ecuación 2 representa los fenómenos de transferencia de masa y reacción química de primer orden en forma adimensional del sistema, la cual es una ecuación diferencial lineal con respecto al perfil de concentraciones de segundo orden y parabólica, donde el perfil de concentraciones de la especie B depende de η y de ε .

$$\varphi \frac{\partial \Omega}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{Pe_M} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \eta^2} - \frac{Da_{II}}{Pe_M} \Omega$$

Ecuación 2

El primer término de la Ecuación 2 corresponde al perfil de velocidades de la especie B, el cual está expresado en la Ecuación 1, al sustituir la Ecuación 1 en la Ecuación 2, surge la siguiente ecuación.

$$\left(\frac{P^*}{2} (\eta^2 - \eta) + 1 \right) \frac{\partial \Omega}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{Pe_M} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \eta^2} - \frac{Da_{II}}{Pe_M} \Omega$$

Ecuación 3

De acuerdo a la Ecuación 2 la cual tiene una diferencial de primer orden del perfil de concentraciones Ω con respecto a ε , y una diferencial de segundo orden con respecto a η , se supone que la distribución de concentraciones Ω es función de ε y η de acuerdo al método de variables separables, con esta suposición la concentración del sistema de la especie B depende de dos distancias medibles, una con respecto a la diferencia de diámetros H_0 y la otra con la circunferencia del sistema L_0 , las cuales ya están expresadas con las relaciones adimensionales η y ε . Se supuso que el perfil de concentraciones tiene la forma de la Ecuación 4 de acuerdo a lo mencionado anteriormente.

$$\Omega(\varepsilon, \eta) = \varepsilon(\eta)\theta(\varepsilon)$$

Ecuación 4

Se sustituye la Ecuación 4 en la Ecuación 3.

$$\left(\frac{P^*}{2}(\eta^2 - \eta) + 1\right) \frac{\partial(\varepsilon(\eta)\theta(\varepsilon))}{\partial\varepsilon} = \frac{1}{Pe_M} \frac{\partial^2(\varepsilon(\eta)\theta(\varepsilon))}{\partial\eta^2} - \frac{Da_{II}}{Pe_M} (\varepsilon(\eta)\theta(\varepsilon))$$

Ecuación 5

De la Ecuación 5 se sacan las constantes de las derivadas, y solo quedan las funciones que dependan de sus respectivas derivadas.

$$\left(\frac{P^*}{2}(\eta^2 - \eta) + 1\right) \varepsilon(\eta) \frac{\partial(\theta(\varepsilon))}{\partial\varepsilon} = \frac{\theta(\varepsilon)}{Pe_M} \frac{\partial^2(\varepsilon(\eta))}{\partial\eta^2} - \frac{Da_{II}}{Pe_M} (\varepsilon(\eta)\theta(\varepsilon))$$

Ecuación 6

Se separa la Ecuación 6 en las variables ε y η por el método de variables separables

$$\left(\frac{P^*}{2}(\eta^2 - \eta) + 1\right) \varepsilon(\eta) \frac{\partial(\theta(\varepsilon))}{\partial\varepsilon} = \left(\frac{1}{Pe_M} \frac{\partial^2(\varepsilon(\eta))}{\partial\eta^2} - \frac{Da_{II}}{Pe_M} \varepsilon(\eta) \right) \theta(\varepsilon)$$

Ecuación 7

$$\frac{\partial(\theta(\varepsilon))}{\partial\varepsilon} \frac{1}{\theta(\varepsilon)} = \left(\frac{1}{Pe_M} \frac{\partial^2(\varepsilon(\eta))}{\partial\eta^2} - \frac{Da_{II}}{Pe_M} \varepsilon(\eta) \right) \frac{1}{\left(\frac{P^*}{2}(\eta^2 - \eta) + 1\right) \varepsilon(\eta)}$$

Ecuación 8

La Ecuación 8 ya está separada en las dos variables, ε del lado izquierdo de la ecuación y η del lado derecho de la ecuación. Se aplica el método de variables separables, y se iguala la Ecuación anterior a menos una constante, por el teorema del punto pozo que hace que tienda a la solución.

$$\frac{\partial(\theta(\varepsilon))}{\partial\varepsilon} \frac{1}{\theta(\varepsilon)} = \left(\frac{1}{Pe_M} \frac{\partial^2(\varepsilon(\eta))}{\partial\eta^2} - \frac{Da_{II}}{Pe_M} \varepsilon(\eta) \right) \frac{1}{\left(\frac{P^*}{2} (\eta^2 - \eta) + 1 \right) \varepsilon(\eta)} = -\phi^2$$

Ecuación 9

La Ecuación 9 se separa en dos ecuaciones de acuerdo al método de variables separables, una ecuación depende de ε y la otra ecuación de η .

Función que depende de ε de la ecuación del perfil de concentraciones

Una de las dos ecuaciones que sale de la Ecuación 9 es la Ecuación 10 que es función de ε .

$$\frac{\partial(\theta(\varepsilon))}{\partial\varepsilon} \frac{1}{\theta(\varepsilon)} = -\phi^2$$

Ecuación 10

La ecuación anterior es una ecuación diferencial ordinaria de primer orden que cumple con la Teoría de Sturm- Liouville.

La Ecuación 10 es reacomodada de la siguiente manera

$$\frac{\frac{\partial(\theta(\varepsilon))}{\partial\varepsilon}}{\theta(\varepsilon)} = -\phi^2$$

Ecuación 11

Se multiplica la Ecuación 11 por la diferencial $d\varepsilon$ en ambos lados de la ecuación.

$$\int \frac{\frac{\partial(\theta(\varepsilon))}{\partial\varepsilon}}{\theta(\varepsilon)} d\varepsilon = \int -\phi^2 d\varepsilon$$

Ecuación 12

Integrando ambos lados de la Ecuación 12

$$\ln(\theta(\varepsilon)) = -\varepsilon\phi^2 + c_1$$

Ecuación 13

Se despeja $\theta(\varepsilon)$ de la Ecuación 13

$$\theta(\varepsilon) = e^{-\varepsilon\phi^2 + c_1}$$

La constante de integración que apareció en la Ecuación 12 puede reacomodarse de acuerdo a las propiedades de las exponenciales, por lo que la Ecuación 14 toma la siguiente forma

$$\theta(\varepsilon) = d_1 e^{-\varepsilon\phi^2}$$

La Ecuación 15 es solución a la Ecuación diferencial 10, que expresa la parte de la Ecuación 9 que depende de ε .

Los valores de ε van desde 0 a 1 dada la relación adimensional que representa.

En la Tabla 2 del Anexo se muestra los valores que toma la función $\theta(\varepsilon)$ cuando la constante de separación toma diferentes valores, cuando la constante de separación es menor de uno el comportamiento de la función es similar a una línea recta decreciente, pero los valores son muy cercanos, y solo disminuye en centésimas. Cuando la constante de separación toma el valor de 1, el comportamiento de la función va en decremento, y a pesar de que el comportamiento es casi lineal, a partir del valor 0.5 de ε la función comienza a presentar un comportamiento ligeramente exponencial, y finalmente, cuando la constante de separación toma valores mayores a 1, la función decrece de forma exponencial, pero los valores decrecen en gran magnitud tendiendo a cero.

Función que depende de η de la ecuación del perfil de concentraciones

La otra parte de la Ecuación 9 la cual es función de η que salió del método de variables separables aparece a continuación

$$\left(\frac{1}{Pe_M} \frac{\partial^2(\mathcal{E}(\eta))}{\partial \eta^2} - \frac{Da_{II}}{Pe_M} \mathcal{E}(\eta) \right) \frac{1}{\left(\frac{P^*}{2} (\eta^2 - \eta) + 1 \right) \mathcal{E}(\eta)} = -\phi^2$$

Ecuación 16

Se reacomoda la Ecuación 16 para clasificar la ecuación diferencial

$$\left(\frac{1}{Pe_M} \frac{\partial^2(\mathcal{E}(\eta))}{\partial \eta^2} - \frac{Da_{II}}{Pe_M} \mathcal{E}(\eta) \right) = -\phi^2 \left(\frac{P^*}{2} (\eta^2 - \eta) + 1 \right) \mathcal{E}(\eta)$$

Ecuación 17

$$\frac{1}{Pe_M} \frac{\partial^2(\mathcal{E}(\eta))}{\partial \eta^2} - \frac{Da_{II}}{Pe_M} \mathcal{E}(\eta) + \phi^2 \left(\frac{P^*}{2} (\eta^2 - \eta) + 1 \right) \mathcal{E}(\eta) = 0$$

Ecuación 18

$$\frac{1}{Pe_M} \frac{\partial^2(\mathcal{E}(\eta))}{\partial \eta^2} + \left[\phi^2 \left(\frac{P^*}{2} (\eta^2 - \eta) + 1 \right) - \frac{Da_{II}}{Pe_M} \right] \mathcal{E}(\eta) = 0$$

Ecuación 19

La Ecuación anterior es una Ecuación diferencial ordinaria lineal de segundo orden que presenta la forma de la Ecuación de Weber, por lo que la solución de la Ecuación 19 es la función cilíndrica parabólica que se presenta a continuación.

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\eta) = & c_1 D \frac{1}{16} \left(\frac{8i\sqrt{2}Da}{\Phi\sqrt{Pe}\sqrt{P^*}} + \frac{i\sqrt{2}\Phi\sqrt{Pe}(P^*-8)}{\sqrt{P^*}} - 8 \right) \left(\frac{\sqrt[4]{-1}\sqrt[4]{\Phi^2}\sqrt[4]{Pe}\sqrt[4]{P^*}(2\eta-1)}{2^{\frac{3}{4}}} \right) \\ & + c_2 D \frac{1}{16} \left(\frac{8i\sqrt{2}Da}{\Phi\sqrt{Pe}\sqrt{P^*}} - \frac{i\sqrt{2}\Phi\sqrt{Pe}(P^*-8)}{\sqrt{P^*}} - 8 \right) \left(\frac{(-1)^{\frac{3}{4}}\sqrt[4]{\Phi^2}\sqrt[4]{Pe}\sqrt[4]{P^*}(2\eta-1)}{2^{\frac{3}{4}}} \right) \end{aligned}$$

Ecuación 20

La Ecuación 20 es una función que depende de η que representa como cambia la concentración de B a lo largo de H_0 . La repercusión de la constante de separación en la parte cilíndrica parabólica de la Ecuación 20 es insignificante ya que aparece en el denominador y numerador de dos divisiones en la parte cilíndrica parabólica, por lo que el valor de Φ afecta mínimamente la frecuencia de oscilaciones. Mientras que las funciones que están multiplicando a las partes cilíndricas parabólicas tienen el término Φ en el numerador, por lo que valores muy pequeños, disminuiría el rango en $\mathcal{E}(\eta)$, mientras que valores muy grandes aumentarían este rango.

Solución al perfil de concentraciones

Al sustituir la Ecuación 15 y la Ecuación 20 en la Ecuación 4 que representa el perfil de velocidades del sistema resulta la ecuación que se muestra a continuación

$$\begin{aligned} \Omega(\mathcal{E}, \eta) = & d_1 e^{-\mathcal{E}\Phi^2} \left[c_1 D \frac{1}{16} \left(\frac{8i\sqrt{2}Da}{\Phi\sqrt{Pe}\sqrt{P^*}} + \frac{i\sqrt{2}\Phi\sqrt{Pe}(P^*-8)}{\sqrt{P^*}} - 8 \right) \left(\frac{\sqrt[4]{-1}\sqrt[4]{\Phi^2}\sqrt[4]{Pe}\sqrt[4]{P^*}(2\eta-1)}{2^{\frac{3}{4}}} \right) \right. \\ & \left. + c_2 D \frac{1}{16} \left(\frac{8i\sqrt{2}Da}{\Phi\sqrt{Pe}\sqrt{P^*}} - \frac{i\sqrt{2}\Phi\sqrt{Pe}(P^*-8)}{\sqrt{P^*}} - 8 \right) \left(\frac{(-1)^{\frac{3}{4}}\sqrt[4]{\Phi^2}\sqrt[4]{Pe}\sqrt[4]{P^*}(2\eta-1)}{2^{\frac{3}{4}}} \right) \right] \end{aligned}$$

Ecuación 21

Se consideran las constantes C_1 y C_2 de la siguiente manera

$$C_1 = d_1 c_1$$

$$C_2 = d_1 c_2$$

Al sustituirlas en la Ecuación 21, resulta la siguiente ecuación

$$\Omega(\varepsilon, \eta) = e^{-\varepsilon\phi^2} \left[C_1 D \frac{1}{16} \left(\frac{8i\sqrt{2}Da}{\phi\sqrt{Pe}\sqrt{P^*}} + \frac{i\sqrt{2}\phi\sqrt{Pe}(P^*-8)}{\sqrt{P^*}} - 8 \right) \left(\frac{\sqrt[4]{-1}\sqrt[4]{\phi^2}\sqrt[4]{Pe}\sqrt[4]{P^*}(2\eta - 1)}{2^{\frac{3}{4}}} \right) \right. \\ \left. + C_2 D \frac{1}{16} \left(-\frac{8i\sqrt{2}Da}{\phi\sqrt{Pe}\sqrt{P^*}} - \frac{i\sqrt{2}\phi\sqrt{Pe}(P^*-8)}{\sqrt{P^*}} - 8 \right) \left(\frac{(-1)^{\frac{3}{4}}\sqrt[4]{\phi^2}\sqrt[4]{Pe}\sqrt[4]{P^*}(2\eta - 1)}{2^{\frac{3}{4}}} \right) \right]$$

Ecuación 22

CAPÍTULO 3

APLICACIÓN DE LAS CONDICIONES A LA FRONTERA

Condiciones a la frontera del sistema

Se consideran las siguientes condiciones a la frontera para conocer a las constantes C_1 y C_2

$$\Omega(\xi, 0) = 0$$

Ecuación 23

$$\Omega(\xi, 1) = 0$$

Ecuación 24

$$\Omega(0, \eta) = 1$$

Ecuación 25

De acuerdo a las condiciones de frontera dadas por las Ecuaciones 23 y 24, en la superficie de los rodillos de mayor y de menor diámetro la concentración de B es igual a cero, mientras que la Ecuación 25 nos indica que en el punto de la circunferencia del sistema en la cual se colocó la especie B, la concentración de B es C_{B0} y homogénea a lo largo de H_0 .

Recordando la ecuación 4

$$\Omega(\varepsilon, \eta) = \varepsilon(\eta)\theta(\varepsilon)$$

La multiplicación de las funciones $\varepsilon(\eta)$ y $\theta(\varepsilon)$ definidas en las condiciones de las Ecuaciones 23, 24 y 25 tienen que coincidir con los resultados de dichas condiciones al aplicarlas en la Ecuación 4.

A continuación, aparece la Ecuación 22 la cual es la solución de la Ecuación 4

$$\Omega(\varepsilon, \eta) = e^{-\varepsilon\phi^2} \left[c_1 D \frac{1}{16} \left(\frac{8i\sqrt{2}Da}{\phi\sqrt{Pe}\sqrt{P^*}} + \frac{i\sqrt{2}\phi\sqrt{Pe}(P^*-8)}{\sqrt{P^*}} - 8 \right) \left(\frac{\sqrt[4]{-1}^4 \sqrt[4]{\phi^2} \sqrt[4]{Pe} \sqrt[4]{P^*} (2\eta - 1)}{2^{\frac{3}{4}}} \right) \right. \\ \left. + c_2 D \frac{1}{16} \left(\frac{8i\sqrt{2}Da}{\phi\sqrt{Pe}\sqrt{P^*}} + \frac{i\sqrt{2}\phi\sqrt{Pe}(P^*-8)}{\sqrt{P^*}} - 8 \right) \left(\frac{(-1)^{\frac{3}{4}} \sqrt[4]{\phi^2} \sqrt[4]{Pe} \sqrt[4]{P^*} (2\eta - 1)}{2^{\frac{3}{4}}} \right) \right]$$

De acuerdo a la Ecuación 23, para que la Ecuación 22 evaluada en $\eta=0$ tenga un valor de cero, la parte algebraica representada por $\mathcal{E}(\eta)$ también tiene que ser cero, por lo que quedaría la siguiente expresión

$$c_1 D \frac{1}{16} \left(\frac{8i\sqrt{2}Da}{\phi\sqrt{Pe}\sqrt{P^*}} + \frac{i\sqrt{2}\phi\sqrt{Pe}(P^*-8)}{\sqrt{P^*}} - 8 \right) \left(\frac{\sqrt[4]{-1}\sqrt[4]{\phi^2}\sqrt[4]{Pe}\sqrt[4]{P^*}}{2^{\frac{3}{4}}} \right) \\ + c_2 D \frac{1}{16} \left(-\frac{8i\sqrt{2}Da}{\phi\sqrt{Pe}\sqrt{P^*}} - \frac{i\sqrt{2}\phi\sqrt{Pe}(P^*-8)}{\sqrt{P^*}} - 8 \right) \left(\frac{(-1)^{\frac{3}{4}}\sqrt[4]{\phi^2}\sqrt[4]{Pe}\sqrt[4]{P^*}}{2^{\frac{3}{4}}} \right) = 0$$

Ecuación 26

La segunda condición a la frontera dada por la Ecuación 24, al ser aplicada en la Ecuación 22 da como resultado la Ecuación 26, por lo que al aplicar la primera y segunda condición a la frontera ambas dan la misma ecuación.

$$c_1 D \frac{1}{16} \left(\frac{8i\sqrt{2}Da}{\phi\sqrt{Pe}\sqrt{P^*}} + \frac{i\sqrt{2}\phi\sqrt{Pe}(P^*-8)}{\sqrt{P^*}} - 8 \right) \left(\frac{\sqrt[4]{-1}\sqrt[4]{\phi^2}\sqrt[4]{Pe}\sqrt[4]{P^*}}{2^{\frac{3}{4}}} \right) \\ + c_2 D \frac{1}{16} \left(-\frac{8i\sqrt{2}Da}{\phi\sqrt{Pe}\sqrt{P^*}} - \frac{i\sqrt{2}\phi\sqrt{Pe}(P^*-8)}{\sqrt{P^*}} - 8 \right) \left(\frac{(-1)^{\frac{3}{4}}\sqrt[4]{\phi^2}\sqrt[4]{Pe}\sqrt[4]{P^*}}{2^{\frac{3}{4}}} \right) = 0$$

Y finalmente, en la última condición a la frontera del sistema de estudio Ω toma el valor de 1, de acuerdo a la Condición a la Frontera de la Ecuación 25 \mathcal{E} toma un valor de cero, y al aplicarlo a la exponencial de la ecuación que representa a $\theta(\mathcal{E})$ toma un valor de uno, por lo tanto la parte de la función que depende de $\mathcal{E}(\eta)$ tiene que ser uno es por ello que se llega a la siguiente ecuación.

$$c_1 D \frac{1}{16} \left(\frac{8i\sqrt{2}Da}{\phi\sqrt{Pe}\sqrt{P^*}} + \frac{i\sqrt{2}\phi\sqrt{Pe}(P^*-8)}{\sqrt{P^*}} - 8 \right) \left(\frac{\sqrt[4]{-1}\sqrt[4]{\phi^2}\sqrt[4]{Pe}\sqrt[4]{P^*}(2\eta - 1)}{2^{\frac{3}{4}}} \right) \\ + c_2 D \frac{1}{16} \left(-\frac{8i\sqrt{2}Da}{\phi\sqrt{Pe}\sqrt{P^*}} - \frac{i\sqrt{2}\phi\sqrt{Pe}(P^*-8)}{\sqrt{P^*}} - 8 \right) \left(\frac{(-1)^{\frac{3}{4}}\sqrt[4]{\phi^2}\sqrt[4]{Pe}\sqrt[4]{P^*}(2\eta - 1)}{2^{\frac{3}{4}}} \right) \\ = 1$$

Ecuación 27

Con las Ecuaciones 26 y 27 no es posible conocer a las constantes C_1 y C_2 es necesario usar otras herramientas con las que sea posible llegar a ellas. En el caso de esta tesis solo se dejarán expresadas las 2 ecuaciones que resultaron de sustituir las condiciones de frontera a la solución matemática del sistema

CAPÍTULO 4

Efecto de los números adimensionales y términos en la Solución del perfil de concentraciones.

Análisis y conclusiones del sistema

De acuerdo al método de variables separables la ecuación diferencial de segundo orden que representa el perfil de concentraciones de la especie B en la Ecuación 3 que depende de η y ε , se separa en dos ecuaciones que dependen de ambas variables ya mencionadas, se hace un análisis de ambas ecuaciones y posteriormente de la ecuación ya integrada con ambas soluciones.

La solución de $\theta(\varepsilon)$ es una exponencial cuyo argumento es ε y Φ , en la Tabla 2 del Anexo se muestra de forma numérica como cambian los valores de $\theta(\varepsilon)$ con respecto a ε y Φ , cuando el valor de Φ es menor a uno la convección hacia la circunferencia del sistema es muy grande ya que la concentración en todo el sistema es la máxima y es prácticamente uniforme, cuando la constante toma el valor de 1 la convección se da a lo largo del sistema pero no tan uniforme ni con altas concentraciones, y finalmente cuando la constante de separación toma valores mayores a 1 no existe convección en el sistema y prácticamente la concentración de B a lo largo de la circunferencia es igual a cero.

La solución de $\mathcal{E}(\eta)$ es una función cilíndrica parabólica la cual depende de la constante de separación, de los números adimensionales Peclet de masa y Damköhler II, y de la presión del sistema la cual se considera constante. Mientras mayores sean los valores del número de Peclet de masa y de la constante de separación mayor será la concentración de B a lo largo de H_0 , así mismo mientras mayor sea el número de Damköhler II mayor sería la frecuencia de oscilación de la especie B en H_0 presentando una mayor concentración de B en la difusión hacia H_0 . Para estudiar con mayor profundidad el efecto o de estos números adimensionales en el sistema se recurre al apartado de esta tesis *Números Adimensionales* en la que menciona que el Número de Damköhler II es una relación de la tasa de difusión de masa y la tasa de reacción química, mientras que el Número de Peclet de masa es una relación de la tasa de difusión química y de convección másica. El sistema al presentar altos valores de los números de Damköhler II y de Peclet de masa predomina la difusión y una alta concentración de la especie B se difumina hacia

H_0 , cuando el número de Damköhler II es pequeño y el número de Peclet es grande el sistema aparte de presentar una gran difusión presenta una alta reacción química disminuyendo la concentración de B, cuando el número de Damköhler II es grande y el número de Peclet es pequeño la convección y la difusión de masa están en competencia. Y finalmente, cuando ambos números son pequeños la difusión de masa es baja en el sistema y hay una mayor convección y reacción química de B con el flujo en el que se encuentra disperso.

Al integrarse las dos soluciones en la Ecuación 22, cuando la constante de separación toma valores menores a 1 la convección de masa predomina sobre la difusión de masa, mientras que a valores mayores a 1 la difusión hacia H_0 predomina en el sistema.

Las variables independientes de la Ecuación 22 η y ϵ toman valores de 0 a 1 dadas las relaciones adimensionales que presentan, la variable ϵ tiene mayor impacto en la ecuación ya que aparece en un término exponencial que está multiplicando a toda la ecuación, mientras que η aparece en dos términos de forma lineal.

Anexo

H	φ	H	φ
0	1	0.6	0.88
0.1	0.955	0.7	0.895
0.2	0.92	0.8	0.92
0.3	0.895	0.9	0.955
0.4	0.88	1	1
0.5	0.875		

Tabla 1.- Perfil de velocidades con respecto a la relación adimensional η de longitudes en x

E	Φ		
	<1	1	>1
0	1	1	1
0.1	0.9990005	0.90483742	4.54E-05
0.2	0.998002	0.81873075	2.0612E-09
0.3	0.9970045	0.74081822	9.3576E-14
0.4	0.99600799	0.67032005	4.2484E-18
0.5	0.99501248	0.60653066	1.9287E-22
0.6	0.99401796	0.54881164	8.7565E-27
0.7	0.99302444	0.4965853	3.9754E-31
0.8	0.99203191	0.44932896	1.8049E-35
0.9	0.99104038	0.40656966	8.194E-40
1	0.99004983	0.36787944	3.7201E-44

Tabla 2.- Valores que toma la Ecuación 10 con diferentes constantes

Se supusieron tres valores de Φ para encontrar el comportamiento de ε , 0.5, 1 y 5 para la columna de menor a uno, igual a uno y mayor a uno respectivamente, y con ello se puede deducir como cambia la convección hacia la circunferencia de los cilindros.

Trabajos citados

- Abraham A., B. C. (1989). *A simple method for measurement of the diffusion of vapors*. Am. J. Phys.
- Abramowitz, M. a. (1972). *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Nueva York: Dover.
- Barnes, H., Hutton, J., & Walters, K. (1989). *Introduction to Rheology*. Amsterdam: Elsevier.
- Bird, R. B., Stewart, W., & Lightfoot, E. (2013). *fenómenos de transporte*. Nueva York : Reverté S.A.
- Darby, R. (1996). *Chemical Engineering Fluid Mechanics*. Nueva York: Marcel Dekker.
- Fitzgerald, J. (09 de Enero de 2014). *Campos de Fuerzas y Flujos en Sistemas Biológicos*. Obtenido de Una palabra sobre los números de Damköhler:
<http://web.mit.edu/beh.430/www/BEH430/Extras/Week2/A%20word%20about%20Damkohler%20numbers3.htm>
- Garza, G. L., & Ortiz, .. H. (2013). *Ecuaciones Diferenciales*. Ciudad de México: Universidad Autónoma Metropolitana.
- Glasstone, S., & Sesonske, A. (1994). *Nuclear Reactor Engineering* . Springer .
- Iyanaga, S. a. (1980). *Encyclopedic Dictionary of Mathematics*. Massachusetts: Cambridge.
- Julia M. Irtiz Reyes, A. S. (2013). Recubrimientos polimericos. *CienciAcierta*, 44.
- Leonardo, S. (2017). *Notas del curso de matemáticas aplicadas II*. Facultad de Química : UNAM.
- Leonardo, S. R. (2016). *Recubrimiento de superficies con fluidos Newtonianos y no Newtonianos con reacción química* . Ciudad de México: UNAM.
- Masciarelli, R., Stancich, S., & Fernando, S. (2012). Transferencia de Materia. *Universidad Tecnológica Nacional*, 31.
- Neutrium. (14 de Octubre de 2014). *Neutrium*. Obtenido de https://neutrium.net/fluid_flow/schmidt-number/
- Román, J. S. (2012). Transporte de contaminantes . *Departamento de Geología, Universidad de Salamanca* , 13.
- Sclighting Herrmann, G. K. (2000). *Boundary Layer Theory*. Berlín : Springer .
- Spanier, J. a. (1987). *An Atlas of Functions*. . Washington, DC: Hemisphere.
- SPH. (s.f.). *DMAE* . Obtenido de Capítulo 4 Ecuaciones en Derivadas Parciales:
http://www.dmae.upct.es/~paredes/am_ti/apuntes/guia_edp.pdf
- Zill, D. G. (1997). *Ecuaciones Diferenciales con Aplicaciones de modelado*. Estados Unidos Americanos : Grupo Editorial Iberoamérica .

