



**DINÁMICA DE UN REACTOR DE SUSPENSIÓN CONSIDERANDO  
UNA CINÉTICA TIPO MICHAELIS-MENTEN**

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

PRESENTA

I.Q. CARLOS ALBERTO GONZÁLEZ RUGERIO

ASESOR:

DR. JESÚS ALBERTO OCHOA TAPIA

11 de Julio 2003

**DINÁMICA DE UN RECTOR DE SUSPENSIÓN  
CONSIDERANDO UNA CINÉTICA TIPO  
MICHAELIS-MENTEN**

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

PRESENTA

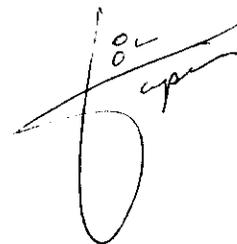
CARLOS ALBERTO GONZÁLEZ RUGERIO

ASESOR

DR. JESÚS ALBERTO OCHOA TAPIA

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA  
UNIDAD IZTAPALAPA  
DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERIA

MÉXICO D. F., JULIO DE 2003



# ÍNDICE

<b><i>Resumen</i></b>	I
<b><i>Lista de figuras</i></b>	II
<b><u>Capítulo 1</u></b>	
<i>Introducción</i>	1
<i>Antecedentes</i>	2
<i>Justificación</i>	9
<i>Objetivos</i>	9
<b><u>Capítulo 2</u></b>	
<i>Descripción del sistema</i>	10
<i>Consideraciones</i>	12
<i>Planteamiento del modelo</i>	12
<i>Comportamientos extremos de la cinética M-M</i>	14
<i>Cinética de orden cero</i>	15
<i>Metodología</i>	18
<b><u>Capítulo 3</u></b>	
<b><i>Resultados y discusión</i></b>	
<b><i>3.1 Orden cero</i></b>	
<b>Estado estacionario</b>	
<i>Reacción en toda la partícula</i>	20
<i>Fenómeno de agotamiento</i>	21
<i>Radio crítico</i>	23
<i>Condición para la existencia de reactivo en toda la partícula</i>	24
<i>¿Como usar las ecuaciones?</i>	26

<i>Comportamiento de la concentración con la variación del número de Biot</i>	26
<i>Perfiles de concentración</i>	28
<b>Estado pseudoestacionario</b>	
<i>Reacción en toda la partícula</i>	30
<i>Fenómeno de agotamiento</i>	31
<i>Radio crítico</i>	32
<i>Condición para la existencia de reactivo en toda la partícula</i>	34
<i>Perfiles de concentración</i>	35
<b>Estado transitorio</b>	
<u>Solución analítica</u>	
<i>Reacción en toda la partícula</i>	38
<i>Fenómeno de agotamiento</i>	40
<u>Solución numérica</u>	
<i>Perfiles de concentración</i>	42
<b>3.2 Cinética de Michaelis-Menten</b>	
<i>Solución en cuasiestado estacionario</i>	43
<i>Solución completa</i>	44
<b>3.3 Factores de efectividad</b>	
<i>Cinética de orden cero</i>	46
<i>Cinética M-M</i>	51
<b>3.4 Comparación</b>	
<i>Perfiles de concentración</i>	52
<i>Considerando tres cinéticas</i>	53

<b>Conclusiones</b>	56
<b><i>Nomenclatura</i></b>	58
<b><i>Bibliografía</i></b>	60
<b><i>Apéndices</i></b>	
<i>A. Adimensionalización</i>	<i>A.1</i>
<i>B. Solución a las ecuaciones diferenciales en estado estacionario</i>	<i>B.1</i>
<i>C. Solución a las ecuaciones diferenciales en estado pseudoestacionario</i>	<i>C.1</i>
<i>D. Solución a las ecuaciones diferenciales en estado transitorio</i>	<i>D.1</i>
<i>E. Discretización de ecuaciones</i>	<i>E.1</i>

## RESUMEN

En el presente trabajo se analiza el comportamiento dinámico de un reactor continuo de tanque agitado (RCTA) de dos fases e isotérmico en el cual ocurre una reacción que puede representarse por el modelo de Michaelis-Menten (M-M), considerando las resistencias a la transferencia de masa. La metodología de solución del modelo matemático para este sistema, se basa en el estudio de los comportamientos extremos que dicha cinética presenta; ya que dependiendo de la concentración del reactivo, puede obtenerse una reacción de primer orden ó una de orden cero.

Debido a que la cinética de primer orden ha sido analizada por Marroquín y col. (2002); se presenta el estudio de la reacción de orden cero; en la cual puede presentarse la existencia de una zona muerta en las partículas catalíticas cuando la concentración del reactivo es igual a cero en algún punto dentro de ellas. Por esta razón, se estudia tanto el caso en el que existe reactivo en toda la partícula, como aquel en el que se presenta dicha zona muerta, y se dan criterios mediante los cuales puede predecirse si el fenómeno anterior se presentará o no.

Por la complejidad matemática involucrada en el modelo, en el análisis se empieza considerando que el sistema se encuentra en estado estacionario, posteriormente se analiza en cuasiestacionario y finalmente en estado transitorio, presentando expresiones analíticas para determinar los comportamientos de la concentración y los factores de efectividad.

Por otra parte, para el caso de la cinética M-M se presentan los perfiles de concentración y el factor de efectividad obtenidos de forma numérica y se realiza una comparación con los resultados obtenidos para las cinéticas que representan sus casos límite. Los resultados presentados concuerdan con los comportamientos reportados en la literatura y muestran que es posible modelar reacciones complejas (tipo M-M) mediante cinéticas más sencillas (primer orden u orden cero).

## ÍNDICE DE FIGURAS

Fig.2.1 Reactor continuo de tanque agitado de dos fases.	10
Fig.2.2 Perfil de concentración para una reacción catalizada en un reactor de suspensión.	11
Fig.2.3 Perfil de concentración para una reacción de orden cero	17
Fig.2.4 Fenómeno de agotamiento para una cinética de orden cero en partículas catalíticas esféricas.	18
Fig.3.1 Aparición del radio crítico para diferentes valores del número de Biot en estado estacionario.	24
Fig.3.2 Semiplanos de existencia de reacción en toda la partícula y presencia de una zona muerta. $U_{in} = 1; \varphi_n = 10; \varphi_p = 0.1$	25
Fig.3.3 Valores de concentración como función del número de Biot para una cinética de orden cero en estado estacionario $U_{in} = 1; \varphi_n = 10; \varphi_p = 0.1; \Phi = 1$	27
Fig.3.4 Valores de concentración como función del número de Biot para una cinética de orden cero en estado estacionario. $U_{in} = 1; \varphi_n = 10; \varphi_p = 0.1; \Phi = 2$	27
Fig.3.5 Perfiles de concentración en estado estacionario $Bi = 1.0$	29
Fig.3.6 Perfiles de concentración en estado estacionario $Bi = 100$	29

Fig.3.7 Aparición del radio crítico para diferentes valores del número de Biot en estado cuasiestacionario $\tau = 0.001$	33
Fig.3.8 Aparición del radio crítico para diferentes valores del número de Biot en estado cuasiestacionario $\tau = 1.0$	33
Fig.3.9 Regiones de existencia de reacción en toda la partícula y fenómeno de agotamiento a diferentes tiempos.	34
Fig.3.10 Perfiles de concentración en estado cuasiestacionario como función del tiempo. Los valores de los parámetros son: $\varphi_n = 10, \varphi_p = 0.1, Bi = 1, \Phi = 1$	36
Fig.3.11 Perfiles de concentración en estado cuasiestacionario, como función del tiempo. Los valores de los parámetros son: $\varphi_n = 10, \varphi_p = 0.1, Bi = 100, \Phi = 3$	36
Fig.3.12 Perfiles de concentración en estado cuasiestacionario, como función de la posición $\tau = 0.01$	37
Fig.3.13 Perfiles de concentración en estado cuasiestacionario, como función de la posición $\tau = 1$	37
Fig.3.14 Perfiles de concentración en estado transitorio, como función del tiempo. Los valores de los parámetros son: $\varphi_n = 10, \varphi_p = 0.1, Bi = 1, \Phi = 1$	42
Fig.3.15 Perfiles de concentración en estado transitorio, como función del tiempo. Los valores de los parámetros son: $\varphi_n = 10, \varphi_p = 0.1, Bi = 1, \Phi = 1$	44

- Fig.3.16 Perfiles de concentración en estado transitorio, considerando una cinética M-M y una función de alimentación tipo escalón. Los valores de los parámetros son:  $Bi = 1; \Phi = 1; k_1 = 0.5$  45
- Fig.3.17 Perfiles de concentración en estado transitorio, considerando una cinética M-M y una función de alimentación tipo escalón. Los valores de los parámetros son:  $Bi = 1; \Phi = 1; k_1 = 0.01$  45
- Fig.3.18 Comportamiento del factor de efectividad con respecto a la variación del radio crítico 47
- Fig.3.19 Variación del factor de efectividad con respecto al módulo de Thiele en estado estacionario. 48
- Fig.3.20 Comportamiento del factor de efectividad con la aparición del radio crítico, Los valores de los parámetros usados son:  $\varphi_p = 0.1, \varphi_n = 10$ . 49
- Fig.3.21 Comportamiento del factor de efectividad con respecto a la variación del módulo de Thiele, para un  $\tau = 0.001$  50
- Fig.3.22 Comportamiento del factor de efectividad con respecto a la variación del módulo de Thiele, para un  $\tau = 1.0$  50
- Fig.3.23 Comportamiento del factor de efectividad con respecto a la variación del tiempo  $Bi = 1; \Phi = 1; k_1 = 0.01$  51
- Fig.3.24 Comparación de los perfiles de concentración en estado cuasiestacionario y transitorio, para una alimentación tipo escalón. Los valores de los parámetros usados son:  $\varphi_p = 0.1, \varphi_n = 10, Bi = 1, \Phi = 1$  52

Fig.3.25 Comparación de los perfiles de concentración en estado cuasiestacionario y transitorio, para una alimentación tipo escalón. Los valores de los parámetros usados son:  $\varphi_p = 0.1, \varphi_n = 10, Bi = 1, \Phi = 1, k_1 = 0.01$  53

Fig.3.26 Comparación de los perfiles de concentración en la superficie y promedio de la partícula considerando tres tipos de cinéticas diferentes y una alimentación tipo escalón. Los valores de los parámetros usados son:  $\varphi_p = 0.1, \varphi_n = 10, Bi = 1, \Phi = 1$  54

Fig.3.27 Comparación de los perfiles de concentración considerando tres tipos de cinéticas diferentes y una alimentación tipo escalón. Los valores de los parámetros usados son:  $\varphi_p = 0.1, \varphi_n = 10, Bi = 1, \Phi = 1$  55

## INTRODUCCIÓN

El diseño de reactores químicos requiere conocer la velocidad de reacción intrínseca (medida en la superficie del catalizador), pero la concentración y temperatura que puede medirse experimentalmente (en la salida del reactor), no corresponde a las existentes en donde se está llevando a cabo la reacción, ya que se ve afectada por procesos de transferencia de masa, que se dan entre el lugar de medición y el de reacción. En el camino de obtener modelos que permitan cuantificar los fenómenos enunciados anteriormente, y en la determinación de la velocidad de reacción global, se presenta el siguiente trabajo de investigación.

El trabajo está organizado de la siguiente manera: en la sección de antecedentes se hace una breve descripción de algunas publicaciones relacionadas con el sistema a analizar en el presente trabajo, para lo cual se han considerado en primera instancia los sistemas en estado transitorio, y como se verá tienen la característica de analizar (en su mayoría) procesos de reacción en los que la cinética es lineal. Posteriormente se describen trabajos en los que la velocidad de reacción es no lineal, pero los sistemas son considerados en estado estacionario. Los procesos de transporte involucrados en este tipo de sistemas, así como las consideraciones realizadas al modelo se presentan en el Capítulo II, para finalmente expresar las ecuaciones que representan el transporte del reactante tanto en el fluido como en la partícula. La metodología de solución se explica brevemente en esta sección.

Los perfiles obtenidos para el proceso de difusión-reacción se presentan en el Capítulo III, así como su análisis y comparación con los resultados reportados en literatura. Debido a lo extenso de la obtención de las soluciones analíticas y con el objetivo de no perder continuidad en la exposición, dichas soluciones se presentan en forma detallada en la sección de Apéndices al final de la tesis.

## ANTECEDENTES

Experimentalmente los reactores químicos de tanque agitado son probablemente los sistemas más usados en la determinación de constantes de velocidad de reacción. Para obtener información cinética, es necesario describir adecuadamente los pasos experimentales, esto debe incluir las resistencias a la transferencia de masa y calor, en el fluido y en los poros catalíticos (Marroquín y col., 2002).

Los experimentos dinámicos se usan para la evaluación de parámetros tales como la constante de velocidad de reacción, las constantes de equilibrio y los coeficientes de transporte, asimismo, permiten elucidar mecanismos de reacción; por medio del análisis de respuesta de los reactores catalíticos heterogeneos a cambios en la concentración de alimentación. Un procedimiento típico consiste en introducir una perturbación en la composición de la corriente de entrada y monitorear la respuesta en la corriente de salida (Datta y col. 1983). En este tipo de experimentos, la interpretación de los datos cinéticos puede ser incorrecta si las resistencias no son tomadas en cuenta, por lo tanto es necesario usar modelos que incluyan los efectos más importantes, para decidir cuales resistencias pueden ser despreciadas. El tratamiento de este problema se ha realizado considerando soluciones aproximadas, de tal forma que se pueden mencionar en primera instancia, aquellos que no consideran las resistencias externas al transporte de masa.

En esta línea, se encuentra el trabajo de Towler y Rice (1974), quienes analizaron un sistema de dos fases en un reactor continuo de tanque agitado (RCTA) . En su modelo consideran un sistema *dinámico e isotérmico, con resistencias a la transferencia de masa interna pero no consideran la externa*, debido a la suposición de que el sistema se encuentra bien mezclado. Mediante el uso del método de la transformada de Laplace resuelven las ecuaciones que describen el balance de masa para la partícula en donde ocurre una reacción de primer orden y para el fluido. Las expresiones resultantes pueden ser útiles para la determinación de difusividades efectivas y constantes de velocidad de reacción, a partir de la medición de la concentración en la salida del reactor.

Dichos autores presentan gráficas de concentración vs tiempo, en las cuales existe la presencia de un mínimo para ciertas combinaciones de los parámetros adimensionales que describen el sistema. En base a este comportamiento, sugieren que el mínimo puede ser usado para la determinación de parámetros cinéticos. Sin embargo, no dan las condiciones bajo las cuales puede obtenerse dicho punto.

Do y Rice (1982) presentan un estudio realizado a un sistema en el que se encuentran partículas catalíticas inmersas en un fluido en un RCTA. La reacción se considera de *primer orden y las resistencias a la transferencia de masa son consideradas*.

Basados en la técnica de perturbación determinan las condiciones para las cuales se presente el mínimo reportado por Towler y Rice (1974), concluyendo que una condición para que lo anterior ocurra, es que el tiempo de residencia en el tanque, sea mucho menor al tiempo de difusión en el pellet, es decir:

$$\frac{V}{Q} \ll \frac{r_p^2}{D_{ef}}$$

En donde:

V = Volumen del reactor

Q = Flujo volumétrico

r = Radio de la partícula

$D_{ef}$  = Difusividad efectiva

Debido a que tanto el volumen, como el flujo pueden controlarse experimentalmente, estos se pueden ajustar de tal forma que se cumpla la relación expresada anteriormente. Determinando el tiempo al cual ocurre el mínimo, se puede obtener la constante de velocidad de reacción.

Datta y Rinker (1983) reportan soluciones en el dominio del tiempo para las ecuaciones que modelan un sistema para un RCTA *isotérmico* en donde ocurre una

reacción química de *primer orden* irreversible junto con difusión tanto en partículas catalíticas como en un líquido estancado. Las soluciones son obtenidas en una forma general, es decir, no se especifica la forma de la partícula, y *el modelo incluye los efectos de las resistencias a la transferencia de masa intrapartícula y en la interfase fluido-partícula*. También reportan expresiones asintóticas para valores grandes del módulo de Thiele ( $\Phi \geq 3$ ) a tiempos pequeños, las cuales son particularmente convenientes cuando la serie presente en la solución converge lentamente, así como algunos casos límite como resistencias externas despreciables o el sistema en cuasiestado estacionario, y tanto las soluciones analíticas como las asintóticas son comparadas con la solución numérica obtenida mediante la aplicación del método numérico de colocación ortogonal. Para la solución de su modelo aplicaron el método de la transformada de Laplace

Szukiewics (2000) propone un método aproximado basado en la fórmula LDF (linear driving force) para un proceso de difusión-reacción. Dicha aproximación consiste en reemplazar la ecuación diferencial parcial del balance de masa en la partícula, por una ecuación diferencial ordinaria. Por lo tanto, la solución al modelo es simplificada y en muchos casos los resultados obtenidos son una muy buena aproximación al modelo riguroso.

El sistema es considerado en *estado transitorio y la reacción de primer orden*, por lo cual la ecuación que gobierna el transporte del reactante en la partícula (esférica) es:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( D_{ef,A} r^2 \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) - k_A C_A$$

La fórmula LDF consiste en reemplazar la ecuación anterior por la siguiente:

$$\frac{\partial C_{av}}{\partial \tau} = \alpha (C_s - C_{av}) - \Phi^2 C_{av}$$

En donde  $\alpha$  es un coeficiente por determinar, y en el análisis realizado por el autor, es considerado como independiente del tiempo. Después de un estudio realizado a dos tipos de concentraciones superficiales, encuentran la siguiente restricción:

$$\tau \geq \frac{5}{3\alpha + \Phi^2}$$

concluyendo que cuando la restricción dada anteriormente se cumple la solución aproximada da los mismos resultados que la exacta.

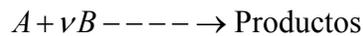
Marroquín y col. (2002) consideran un RCTA en el cual se encuentran partículas catalíticas suspendidas en un fluido perfectamente mezclado. Suponen un proceso *isotérmico* y que ocurre una reacción de primer orden, además de *considerar las resistencias a la transferencia de masa tanto internas como externas*. El proceso de difusión-reacción es modelado en términos de ecuaciones promedio; y para su resolución utilizan el método de la Transformada de Laplace. En este trabajo se evaluaron las soluciones obtenidas para tres tipos diferentes de alimentación al reactor, en las cuales muestran los efectos de las resistencias al transporte de masa.

Szukiewicks (2002) continua trabajando en métodos aproximados para problemas de difusión-reacción en *estado transitorio* mediante la aplicación de la formula LDF para *cualquier tipo de expresión cinética*. Para el caso en que las cinéticas son no lineales, es necesario linealizarlas mediante series de Taylor, tal como lo sugieren Marroquín y col. (1999). El método obtenido presenta buena concordancia con la solución exacta para valores bajos del módulo de Thiele.

Algunos estudios han tratado reacciones de diferentes ordenes y del tipo de Langmuir-Hinshelwood, pero los sistemas se suponen estacionarios. Entre este tipo de trabajos, se puede mencionar el realizado por Chaudhari y Ramachandran (1980) quienes presentan un análisis teórico para la predicción de velocidades de reacción globales en un

sistema de tres fases, *incorporando todos los efectos de transporte de masa* inherentes a este tipo de sistemas. En dicha revisión se presentan algunas correlaciones y métodos experimentales para la determinación de coeficientes de transferencia de masa gas-líquido y líquido-sólido, además para la determinación de difusividades efectivas. La información que presentan puede ser útil en la selección y en el diseño del reactor, así como en la evaluación experimental de los parámetros cinéticos.

En su trabajo consideran el siguiente esquema de reacción:



El cual puede ser escrito mediante la ley de potencias:

$$-r_A = k_{(m+n)} C_A^m C_B^n$$

en donde:  $r_A$  = Velocidad de reacción,  $C_A, C_B$  representan las concentraciones de los reactivos  $A$  y  $B$  respectivamente,  $\nu$  es el coeficiente estequiométrico y  $m, n$  son los ordenes de reacción.

El análisis es realizado para diferentes expresiones cinéticas, tales como pseudo primer orden ( cuando la concentración de alguno de los reactivos esta en exceso ), además de diferentes ordenes de reacción y modelos del tipo de Langmuir-Hinshelwood. Finalmente presentan un caso más general para reacciones de orden  $(m, n)^{th}$ .

El sistema se supone en *estado estacionario*, aunque consideran los cambios en la concentración con respecto al espacio del reactivo en forma gaseosa. El único estudio que hacen en estado transitorio se presenta al considerar un reactor batch.

Presentan expresiones para el cálculo de la velocidad de reacción global en la ausencia de difusión intrapartícula, así como para el cálculo del factor de efectividad global para diferentes ordenes de reacción intrínsecas

Chaudhari y Ramachandran (1980) presentan un análisis de un sistema de tres fases en el cual ocurre una *reacción de orden cero, considerando las resistencias*

*externas e internas a la transferencia de masa.* Su modelo es *isotérmico* y al igual que en la mayoría de los estudios reportados en la literatura en *estado estacionario*, aunque consideran la variación de la concentración del reactivo en fase gas con respecto al espacio.

En el trabajo mencionado se muestra que para este tipo de sistemas existe una concentración crítica de la fase gaseosa abajo de la cual los efectos difusivos son de amplia importancia, y en donde se presenta una zona sin reacción dentro de la partícula catalítica, debido a que la concentración del reactivo es igual a cero en algún punto dentro de ella.

Entre las expresiones analíticas que presentan se encuentra la expresión para determinar el valor del factor de efectividad:

$$\eta = 1 - \left( \frac{r}{r_p} \right)^3$$

siendo:

$\eta$  = Factor de efectividad

$r$  = Variable radial de la partícula

$r_p$  = Radio de la partícula

El radical indica la posición dentro de la partícula donde la concentración del reactivo es igual a cero. Finalmente se muestra la utilidad de sus expresiones en algunos sistemas reales como son: la oxidación de ciclohexano, etilación de formaldehído y la hidrogenación de dinitrotolueno.

Chang (1982) considera un problema de difusión-reacción *isotérmico en estado estacionario* en el que se presenta una cinética del tipo de *Michaelis-Menten*, considerando los efectos de las resistencias a la transferencia de masa tanto interna como externa. En dicho trabajo se propone un método de cálculo para la evaluación del

*factor de efectividad* a altos valores del módulo de Thiele, basados en la dificultad de evaluación de dicho factor en tales situaciones. Dicho método consiste en el uso de las expresiones analíticas para los perfiles de concentración obtenidas considerando una cinética de primer orden como aproximación a la región en la cual se presenta la dificultad numérica. Dicho método puede ser aplicable a cinéticas del tipo Langmuir-Hinshelwood. La técnica propuesta por estos autores resulta útil cuando un esquema numérico falla.

## **JUSTIFICACIÓN**

Como puede observarse, a pesar del gran número de soluciones aproximadas que se han desarrollado, el problema sigue siendo de gran interés, debido a que las soluciones propuestas están restringidas a casos particulares.

El interés fundamental para el desarrollo de la presente investigación, se basa en la falta de modelos que permitan:

- a) Determinar el comportamiento del factor de efectividad en estado transitorio
- b) Obtener un modelo que permita determinar cuales resistencias a la transferencia de masa pueden ser descartadas en el caso de experimentos dinámicos.

## **OBJETIVOS**

### **OBJETIVO GENERAL**

Describir el comportamiento dinámico de un reactor tipo tanque agitado heterogéneo e isotérmico, incluyendo las resistencias a la transferencia de masa; en el cual ocurre una reacción que puede ser descrita mediante el modelo de Michaelis-Menten.

### **OBJETIVOS PARTICULARES**

- a) Obtener las soluciones analíticas para las ecuaciones que describen los balances de materia del componente clave, considerando los comportamientos extremos de la cinética de Michaelis-Menten.
- b) Obtener la solución numérica completa del problema
- c) Obtener soluciones aproximadas para los perfiles de concentración en la partícula y en el fluido, de las ecuaciones que gobiernan el transporte del reactante
- c) Comparar las soluciones aproximadas con la solución numérica completa

## CAPÍTULO II

En este capítulo se describe el sistema a estudiar, mencionando en primera instancia los fenómenos inherentes a este tipo de reactores y se justifican las suposiciones realizadas. Posteriormente se presenta el modelo matemático que describe el proceso difusión-reacción para este sistema y, finalmente se describe brevemente la metodología desarrollada para la solución del modelo.

### DESCRIPCIÓN DEL SISTEMA

Se considera un reactor continuo de tanque agitado que contiene partículas catalíticas porosas, suspendidas por la acción de un fluido perfectamente mezclado (fig. 2.1). El reactivo A se alimenta en la fase líquida y se transporta hasta los poros del catalizador, en donde reacciona de acuerdo al modelo de Michaelis-Menten .

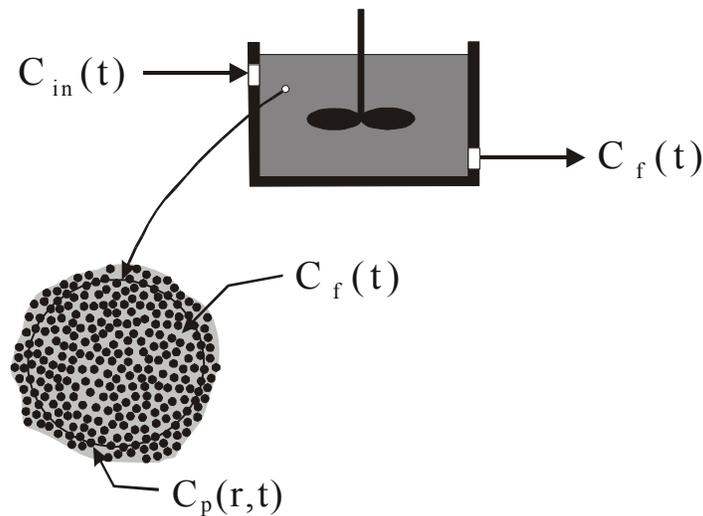


Fig. 2.1 Reactor continuo de tanque agitado de dos fases

Para que una especie alimentada en la fase líquida pueda reaccionar sobre la superficie activa del catalizador, debe ocurrir el siguiente conjunto de pasos:

- 1) Transporte de A desde el seno del líquido a la superficie catalítica
- 2) Difusión intrapartícula en los poros del catalizador

- 3) Adsorción de A en los sitios activos del catalizador
- 4) Reacción superficial de A para la conversión de productos

El perfil de concentración para una especie que presenta una reacción irreversible en un reactor continuo de tanque agitado, se muestra esquemáticamente en la figura (2.2).

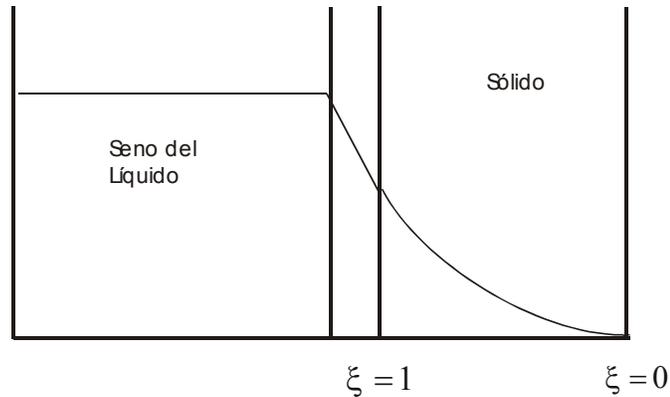


Fig. 2.2 Perfil de concentración para una reacción catalizada en un reactor de suspensión. La zona intermedia entre el seno del fluido y el sólido representa una película de líquido estancado.

Debido a que las partículas tienden a moverse con el líquido, existe poca velocidad relativa entre el sólido y el líquido presentes en la suspensión, originando una capa de líquido casi inmóvil alrededor de las partículas (capa límite). Dicha capa provoca que el reactante deba ser transferido principalmente por difusión a través de ella para llegar a la superficie del catalizador. Esta resistencia al transporte del reactivo resultará en una diferencia de concentración, entre el seno del fluido y la superficie catalítica, y puede retardar significativamente la velocidad global de reacción.

Por otra parte, debido a que la conductividad térmica de los líquidos es relativamente alta, incrementa el coeficiente de transferencia externo de calor. Esto, aunado al gran volumen de líquido presente en este tipo de sistemas, representa una ventaja para mantener condiciones isotérmicas. Por tanto, las diferencias externas de temperatura pueden despreciarse (Smith J. M., 1986).

Finalmente, debido a que el tiempo característico para el proceso de conducción es generalmente mucho menor que para el proceso de difusión, es posible considerar que el gradiente de temperatura intrapartícula es despreciable.

### Consideraciones

En base a lo mencionado anteriormente, se establecen las siguientes suposiciones a las cuales esta sujeto el modelo:

- Tamaño homogéneo de partícula
- Fluido perfectamente mezclado
- Proceso isotérmico
- La velocidad de desaparición del reactivo en las partículas porosas obedece a una cinética del tipo de Michaelis-Menten.
- No se consideran efectos debidos a la desactivación del catalizador.

### Modelo matemático

Debido a que el fluido está perfectamente mezclado, es razonable considerar que el transporte de masa en las partículas ocurre solo en la dirección radial. El proceso de difusión-reacción puede ser modelado en términos de ecuaciones de transporte promedio. De tal forma que las ecuaciones de balance de materia para el componente clave pueden escribirse como sigue:

Para la partícula:

$$\underbrace{\varepsilon \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t}}_{\text{Acumulación}} = \underbrace{\varepsilon D_{ef} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial r} \right)}_{\text{Difusión}} - \underbrace{a_v \frac{k \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{1 + K \langle C_\gamma \rangle^\gamma}}_{\text{Reacción}} \quad (2.1)$$

Para el fluido:

$$\underbrace{\varepsilon_\mu \frac{\partial \langle C_\mu \rangle^\mu}{\partial t}}_{\text{Acumulación}} = \underbrace{\frac{1}{\tau_R} \left( C_{in}(t) - \langle C_\mu \rangle^\mu \right)}_{\text{Entradas y salidas del reactor}} + \underbrace{\frac{A_{fp}}{V} k_f \left( \langle C_\mu \rangle^\mu \Big|_{r=r_p} - \langle C_\mu \rangle^\mu \right)}_{\text{Intercambio con la partícula}} \quad (2.2)$$

En la ecuación (2.1)  $\varepsilon$  es la fracción hueca en las partículas,  $D_{ef}$  es la difusividad efectiva,  $\langle C_\gamma \rangle^\gamma$  es la concentración intrínseca promedio en las partículas (definida por Whitaker, 1999). En la ecuación (2.2)  $\langle C_\mu \rangle^\mu$  es la concentración intrínseca promedio del fluido,  $V$  es el volumen ocupado por las partículas y el fluido, y  $\varepsilon_\mu$  es la fracción de  $V$  ocupada por el fluido. La concentración de entrada de los reactantes es indicada por  $C_{in}(t)$ , y será tratada como una función arbitraria del tiempo, durante el desarrollo matemático con el objetivo de tratar de ser general.

Las condiciones de frontera que permiten acoplar las ecuaciones anteriores son:

En la superficie de la partícula se presenta la igualdad de fluxes, es decir, el flux que llega a la superficie de la partícula es el que se difunde en los poros de la misma.

$$-\varepsilon D_{ef} \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial r} = k_f \left( \langle C_\mu \rangle^\mu \Big|_{r=r_p} - \langle C_\mu \rangle^\mu \right) \quad \text{en } r = r_p \quad (2.3)$$

$$\langle C_\mu \rangle^\mu = \langle C_\gamma \rangle^\gamma \quad \text{en } r = r_p \quad (2.4)$$

En la ecuación (2.3) se incluye la resistencia a la transferencia de masa externa. Por otra parte, en el centro de la partícula el flux es cero, lo cual puede escribirse matemáticamente en la siguiente forma:

$$\frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial r} = 0 \quad \text{en } r = 0 \quad (2.5)$$

Las condiciones iniciales son:

$$\begin{aligned} \langle C_\mu \rangle^\mu &= C_{\mu 0} & \text{en } t = 0 \\ \langle C_\gamma \rangle^\gamma &= C_{\gamma 0} & \text{para } 0 \leq r \leq r_p \quad t = 0 \end{aligned} \quad (2.6)$$

Definiendo las siguientes variables adimensionales:

$$U_f = \frac{\langle C_\mu \rangle^\mu}{C_\gamma^*}; \quad U_p = \frac{\langle C_\gamma \rangle^\gamma}{C_\gamma^*}; \quad \tau = t \frac{D_{ef}}{r_p^2}; \quad \xi = \frac{r}{r_p} \quad (2.7)$$

En la ecuación (2.7)  $U_f$ ,  $U_p$ ,  $\tau$  y  $\xi$  representan la concentración adimensional en el fluido, en la partícula, el tiempo y la posición adimensionales respectivamente. En la adimensionalización de  $U_f$  y  $U_p$  se usó  $C_\gamma^*$ , la cual es una concentración característica asociada con el fluido de la fase externa en el tiempo inicial. En la sección de nomenclatura puede consultarse la definición de los otros parámetros adimensionales.

Aplicando las variables adimensionales a las ecuaciones (2.1) a (2.6), las ecuaciones resultantes son (los detalles de la adimensionalización, pueden consultarse en el Apéndice A):

Para la partícula:

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) \right] - \Phi^2 \left( \frac{U_p}{1 + k_1 U_p} \right) \quad (2.8)$$

Para el fluido:

$$\frac{dU_f}{d\tau} = \varphi_n [U_{in} - U_f] + \varphi_p [U_p|_{\xi=1} - U_f] \quad (2.9)$$

Con las siguientes condiciones de frontera:

$$-\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = Bi (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad \text{en } \xi = 1 \quad (2.10)$$

$$U_p = \text{Finita} \quad \text{en } \xi = 0 \quad (2.11)$$

Y las condiciones iniciales son:

$$U_f = U_{f0} \quad \text{en } \tau = 0 \quad (2.12)$$

$$U_p = U_{p0} \quad \text{en } 0 \leq \xi \leq 1 \quad \tau = 0 \quad (2.13)$$

## COMPORTAMIENTOS EXTREMOS

Con el objetivo de tratar de una forma simplificada la cinética de Michaelis-Menten, se han propuesto algunas aproximaciones basadas en los casos limite que dicha cinética presenta. A continuación se mencionan dichos comportamientos.

Partiendo de la base de que en una reacción catalizada superficialmente la velocidad de reacción puede escribirse de la siguiente manera:

$$-r_A = k\theta_A \quad (2.14)$$

donde  $\theta_A$  es la fracción de la superficie catalítica cubierta por  $A$ . Langmuir sugirió (Carberry, 1976):

$$\theta_A = \frac{k_A C_A}{1 + K C_A} \quad (2.15)$$

siendo  $K$  la constante de adsorción y  $C_A$  la concentración del reactivo A.

Sustituyendo (2.15) en (2.14):

$$-r_A = \frac{k k_A C_A}{1 + K C_A} \quad (2.16)$$

Cuando la concentración de la especie es suficientemente grande, se cumple que:

$$K C_A \gg 1$$

y la ecuación (2.14) puede simplificarse a la siguiente expresión :

$$-r_A = k \quad (2.17)$$

obteniéndose una *cinética de orden cero*.

Por otro lado, si la concentración del reactivo es suficientemente pequeña, entonces:

$$K C_A \ll 1$$

y se obtiene:

$$-r_A = k_1 C_A \quad (2.18)$$

es decir, para este caso se obtiene una *cinética de primer orden* (Carberry, 1976).

### CINÉTICA DE ORDEN CERO

Cuando la velocidad de reacción es independiente de la concentración de una sustancia en particular, se dice que la velocidad es de orden cero con respecto a dicha especie, es decir:

$$-r_A = k \quad (2.19)$$

El orden cero puede significar tres cosas:

- a) La especie no participa en la reacción
- b) La concentración de la especie es tan abundante que permanece virtualmente sin cambio durante el transcurso de la reacción

c) Depende de la luz o algún otro factor.

Por regla general, las reacciones solamente son de orden cero en ciertos intervalos de concentración (el de las más altas concentraciones). Si la concentración desciende suficientemente, suele encontrarse que la tasa de reacción depende de la concentración, en cuyo caso la velocidad de reacción es diferente de cero .

En general, las reacciones de orden cero son aquellas cuyas velocidades están determinadas por algún factor diferente de la concentración de los reactivos, por ejemplo, la intensidad de radiación dentro de un recipiente en las reacciones fotoquímicas, o la superficie disponible en algunas reacciones en fase gaseosa catalizadas por sólidos. Por consiguiente, es importante definir la velocidad de reacción de orden cero, de tal modo que éste incluído adecuadamente este factor (Levenspiel, 2001).

El orden cero es impuesto implícitamente en experimentos cinéticos para determinar el orden de reacción de otro componente, es decir:

$$r_A = -kC_A^\alpha C_B^\beta \xrightarrow{C_B \gg C_A} -k'C_A \quad (2.20)$$

en donde aparentemente se obtiene orden cero con respecto a  $C_B$  (Carberry, 1976).

Como ejemplos de sistemas que presentan este tipo de cinética se puede mencionar la descomposición de  $\text{NH}_3$  en Pt y la descomposición de  $\text{N}_2\text{O}$  en la presencia del mismo catalizador y la fotosíntesis.

## PRESENCIA DE UNA ZONA MUERTA

La integración de la ecuación (2.19) permite obtener el siguiente resultado:

$$C_A = C_{A0} - kt \quad (2.21)$$

La gráfica de la ecuación (2.21) se presenta a continuación:

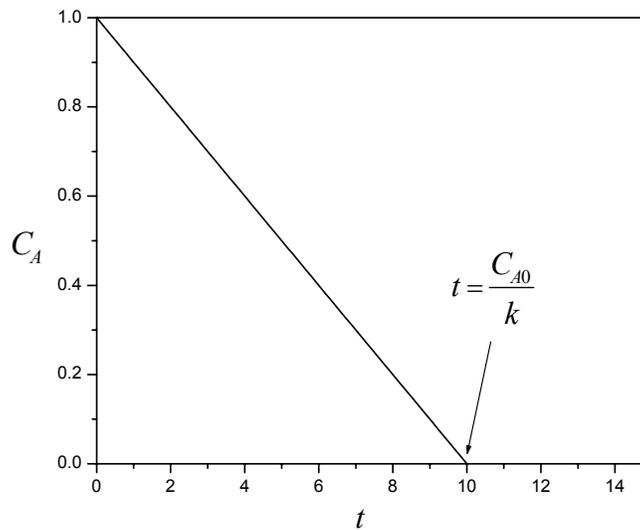


Fig. 2.3 Perfil de concentración para una reacción de orden cero

A partir de la fig. 2.3 puede notarse que existe un tiempo en el que la concentración del reactivo es igual a cero, el valor del tiempo al cual ocurre lo anterior depende principalmente del valor de la constante de reacción.

En el caso de partículas catalíticas esféricas en donde ocurre una cinética de orden cero, puede presentarse una zona sin reacción dentro de las partículas cuando la concentración del reactivo es igual a cero en alguna posición antes de llegar al centro de la misma. A la ubicación en la cual se presenta esto último se le denomina *radio crítico*, y el fenómeno es conocido como de *agotamiento* (fig. 2.4).

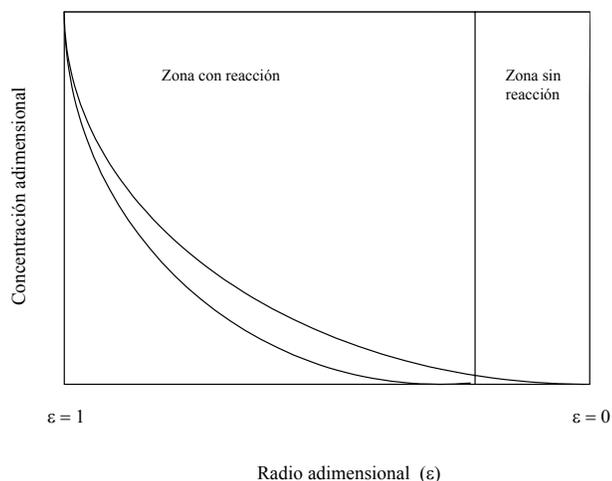


Fig. 3.2 Fenómeno de agotamiento para una cinética de orden cero en partículas catalíticas esféricas

Para propósitos de este trabajo se estudiará el orden cero, considerando que pueden ocurrir tanto reacción en toda la partícula, como la presencia de una zona muerta.

## METODOLOGÍA

La presente investigación se basa en la solución de los casos límite de la cinética de Michaelis Menten; es decir, el primer orden y el orden cero.

El problema de difusión-reacción considerando una cinética de primer orden, ha sido resuelto anteriormente (Marroquín y col, 2002), por lo tanto en este trabajo se presentan las soluciones analíticas obtenidas de la solución del problema, considerando una tasa de reacción de orden cero.

La presencia de una zona muerta en las partículas para la reacción de orden cero dificulta la solución del modelo, y hace necesario incluir una condición de frontera adicional para determinar la posición en las partículas, en donde se presenta dicho agotamiento (radio crítico).

Debido a la presencia del frente móvil de reacción en la partícula, se partirá de lo matemáticamente sencillo a lo complejo; de tal modo que inicialmente se considera que el sistema se encuentra en estado estacionario, pues de este modo el tratamiento

matemático se simplifica considerablemente. Una vez realizado este análisis se soluciona el modelo considerando pseudoestado estacionario para la partícula, es decir, se supone en un aparente estado estacionario. Finalmente se analiza el estado transitorio.

Tanto en el caso transitorio como en el pseudoestacionario, las soluciones son obtenidas mediante el método de la transformada de Laplace y debido a lo extenso del desarrollo principalmente en este último caso, la solución de las ecuaciones diferenciales se presenta en secciones separadas al final de la tesis (Apéndices)

Por otra parte, se obtiene la solución numérica (mediante el método de diferencias finitas) del modelo considerando una cinética M-M, en donde como primera aproximación se hace uso del cuasiestado estacionario, y finalmente se obtiene la solución completa (sin aproximación).

## CAPÍTULO III

### Resultados y discusión

En este capítulo se presentan las expresiones analíticas que describen los perfiles de concentración para el problema de difusión-reacción, considerando una cinética de orden cero, así como los perfiles obtenidos de forma numérica considerando la cinética M-M.

Para el caso del orden cero se analizan tres casos: cuando el sistema se encuentra en estado estacionario, pseudoestacionario y transitorio. Además se incluye el caso en el que puede presentarse una zona muerta en las partículas, y se establecen los criterios para determinar cuando se presentará dicho fenómeno.

Se presenta también el comportamiento del factor de efectividad, y la comparación de los perfiles de concentración para las diferentes cinéticas involucradas en este estudio.

### 3.1 Orden cero

#### ESTADO ESTACIONARIO

En esta sección se empieza considerando que existe reacción en toda la partícula, y posteriormente se analiza la presencia de una zona muerta, mediante un cambio en una de las condiciones de frontera.

#### *Reacción en toda la partícula*

Para el caso en el que hay reacción en toda la partícula, los balances de materia para un componente clave pueden ser escritos como:

Para la partícula:

$$\frac{1}{\xi^2} \left[ \frac{d}{d\xi} \left( \xi^2 \frac{dU_p}{d\xi} \right) \right] - \Phi^2 = 0 \quad (3.1)$$

Para el fluido:

$$\varphi_n [U_{in} - U_f] + \varphi_p [U_p|_{\xi=1} - U_f] = 0 \quad (3.2)$$

Condiciones de frontera:

$$-\frac{dU_p}{d\xi} = Bi \left( U_p \Big|_{\xi=1} - U_f \right) \quad \text{en } \xi = 1 \quad (3.3)$$

$$U_p = \text{finita} \quad \text{para } 0 \leq \xi \leq 1 \quad (3.4)$$

La solución de las ecuaciones diferenciales, esta dado por las siguientes expresiones (los detalles se pueden consultar en el Apéndice B):

$$U_p = U_{in} - \frac{\Phi^2}{3Bi} \left( 1 + \frac{\varphi_p}{\varphi_n} \right) + \frac{\Phi^2}{6} (\xi^2 - 1) \quad (3.5)$$

$$U_f = U_{in} - \frac{\Phi^2 \varphi_p}{3Bi \varphi_n} \quad (3.6)$$

La ecuación (3.5) permite conocer el valor puntual de la concentración en la partícula catalítica. Sin embargo, en términos prácticos es más útil considerar una concentración que sea representativa en toda la partícula. Debido a lo anterior se define una concentración promedio como:

$$\langle U_p \rangle = \frac{\int_0^1 U_p \xi^2 d\xi}{\int_0^1 \xi^2 d\xi} \quad (3.7)$$

La sustitución de la ecuación (3.5) en (3.7) permite obtener la siguiente expresión para la concentración promedio:

$$\langle U_p \rangle = U_{in} - \frac{\Phi^2}{3Bi} \left( 1 + \frac{\varphi_p}{\varphi_n} \right) - \frac{\Phi^2}{15} \quad (3.8)$$

### ***Presencia de una zona muerta.***

Cuando la velocidad de reacción es mucho más rápida que la velocidad de difusión, existe la posibilidad de que el reactivo se agote en alguna posición dentro de la partícula, por tal motivo es de amplia importancia la consideración de dicho caso, esto se logra cambiando la condición de frontera dada por la expresión (3.4), por la siguiente:

$$U_p = 0 \quad \text{en } \xi = \xi_c \quad (3.9)$$

La solución a este problema puede escribirse en la siguiente forma (Apéndice B):

$$U_p = \frac{\Phi^2}{6} (\xi^2 - \xi_c^2) + \frac{2\Phi^2 + \Phi^2 Bi - \Phi^2 Bi \xi_c^2 - 6BiU_f}{6(Bi\xi_c - \xi_c - Bi)} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_c} \right] \quad (3.10)$$

$$U_f = \frac{1}{1 + \omega} \left[ \frac{\varphi_n U_{in}}{(\varphi_n + \varphi_p)} + \frac{\varphi_p \Phi^2 (1 - \xi_c^2)}{6(\varphi_n + \varphi_p)} + \frac{\Phi^2 (2 + Bi - Bi \xi_c^2) \omega}{6Bi} \right] \quad (3.11)$$

en donde:

$$\omega = \frac{\varphi_p}{\varphi_p + \varphi_n} \left[ \frac{Bi(1 - \xi_c)}{Bi\xi_c - \xi_c - Bi} \right] \quad (3.12)$$

Ya que se presenta una zona sin reacción dentro de la partícula, no es posible usar la ecuación (3.7) para obtener la concentración promedio, ya que debe considerarse únicamente la zona en la cual hay presencia del reactivo. Lo anterior se consigue cambiando los límites de integración de la concentración puntual, desde la superficie de la partícula hasta el punto en donde dicha concentración es igual a cero. Por lo tanto, la concentración promedio debe ser calculada a partir de la siguiente ecuación:

$$\langle U_p \rangle = \frac{\int_{\xi_c}^1 U_p \xi^2 d\xi}{\int_0^1 \xi^2 d\xi} \quad (3.13)$$

La sustitución de la concentración puntual en la ecuación (3.13), permite obtener una expresión para la concentración promedio:

$$\langle U_p \rangle = \frac{\Phi^2}{10} (1 - \xi_c^5) + \frac{(1 - \xi_c^3)}{6} \left[ -\Phi^2 \xi_c^2 + \frac{\Phi^2 (2 + Bi - Bi \xi_c^2) - 6BiU_f}{Bi\xi_c - \xi_c - Bi} \right] - \frac{\Phi^2 (2 + Bi - Bi \xi_c^2) - 6BiU_f}{4(Bi\xi_c - \xi_c - Bi)} \xi_c (1 - \xi_c^2) \quad (3.14)$$

A partir de las ecuaciones (3.10, 3.11 y 3.14) es posible obtener los perfiles de concentración considerando que existe reacción en toda la partícula, haciendo que el valor del radio crítico sea igual a cero ( $\xi_c = 0$ ).

### **Radio crítico**

Para poder obtener una expresión que permita determinar el valor del radio crítico, es necesario introducir una condición de frontera adicional, y ella es:

$$\frac{dU_p}{d\xi} = 0 \quad \xi = \xi_c \quad (3.15)$$

Dicha condición de frontera se aplicó a la ecuación 3.10. La ecuación resultante es la siguiente:

$$\xi_c^4 + a\xi_c^3 + b\xi_c^2 + c\xi_c + d = 0 \quad (3.16)$$

En donde se han definido los siguientes coeficientes:

$$a = \frac{Bi[2\varphi_p - 5\varphi_n(Bi-1)]}{2(Bi-1)[\varphi_n(Bi-1) - \varphi_p]} \quad (3.17)$$

$$b = \frac{3Bi^2\varphi_n}{2(Bi-1)[\varphi_n(Bi-1) - \varphi_p]} \quad (3.18)$$

$$c = \frac{\Phi^2 [Bi^2\varphi_n + Bi(\varphi_n + 2\varphi_p) - 2(\varphi_n + \varphi_p)] - 6Bi\varphi_n U_{in} (Bi-1)}{2\Phi^2 (Bi-1)[\varphi_n(Bi-1) - \varphi_p]} \quad (3.19)$$

$$d = \frac{6Bi^2\varphi_n U_{in} - \Phi^2 Bi^2\varphi_n - 2\Phi^2 Bi(\varphi_n + \varphi_p)}{2\Phi^2 (Bi-1)[\varphi_n(Bi-1) - \varphi_p]} \quad (3.20)$$

Mediante la expresión (3.16) es posible obtener el valor del radio crítico, el cual esta limitado a existir físicamente en el siguiente intervalo  $0 \leq \xi_c \leq 1$  pues es adimensional. La solución de la ecuación (3.16) permite obtener el siguiente comportamiento para el radio crítico:

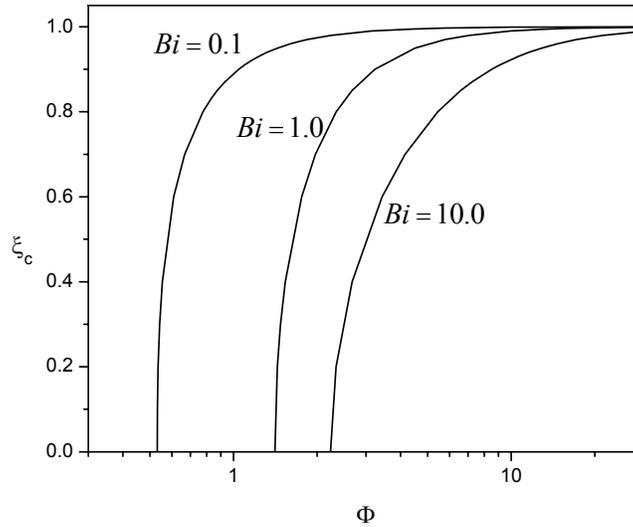


Fig. 3.1 Aparición del radio crítico para diferentes valores del número de Biot

En la figura 3.1 se muestra la aparición de una zona muerta ( $\xi_c > 0$ ) en la partícula para diferentes valores del número de Biot. Cuando la resistencia externa al transporte de masa es grande (Bi pequeños), la cantidad de reactivo que pasa del seno del fluido a la partícula es pequeña, por lo que el radio crítico aparecerá más rápidamente a medida que la velocidad de reacción aumenta ( $\Phi$  grandes), es decir que la reacción se lleva a cabo en la superficie de la partícula.

***Condición para la existencia de reactivo en toda la partícula***

Para garantizar la existencia de reacción en toda la partícula catalítica, el valor de la concentración debe ser mayor o igual a cero en el centro de la misma. Si lo anterior ocurre, el radio crítico se encuentra en el centro de la partícula, es decir,  $\xi = \xi_c = 0$  (Ruíz, 2001). Al realizar las consideraciones anteriores en la ecuación (3.5), se llegó al siguiente resultado:

$$U_{in} - \frac{\Phi^2}{6} - \frac{\Phi^2}{3Bi} \left( 1 + \frac{\varphi_p}{\varphi_n} \right) \geq 0 \tag{3.21}$$

La ecuación (3.21) puede ser reescrita en la siguiente forma:

$$U_{in} \left[ \frac{1}{6} + \frac{1}{3Bi} \left( 1 + \frac{\varphi_p}{\varphi_n} \right) \right]^{-1} \geq \Phi^2 \quad (3.22)$$

Para analizar el comportamiento de la expresión anterior, es necesario cambiar el signo de la desigualdad por una igualdad, a partir de la cual se obtuvo la siguiente gráfica (nótese que es para valores particulares de  $U_{in}$ ,  $\varphi_n$  y  $\varphi_p$ ):

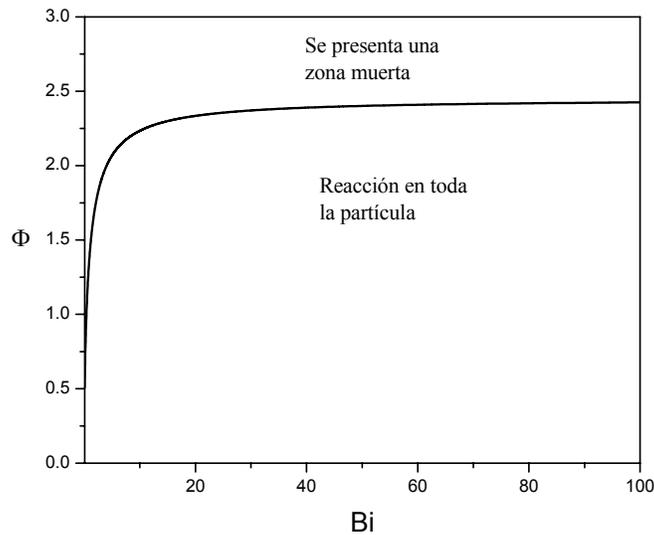


Fig. 3.2 Semiplanos de existencia de reacción en toda la partícula y fenómeno de agotamiento. Los valores de los parámetros son:  $U_{in} = 1$ ;  $\varphi_n = 10$ ;  $\varphi_p = 0.1$

Con el objetivo de poder encontrar las soluciones a la desigualdad expresada por (3.22), se eligieron los siguientes puntos de prueba:

<b>Biot</b>	<b>Thiele</b>	<b>Conclusión</b>
10	1	Verdadero
20	2	Verdadero
30	3	Falso
50	5	Falso

Tabla I. Puntos de prueba para la desigualdad dada por (3.22)

Ya que los valores del semiplano inferior cumplen con la desigualdad (3.22), se puede concluir que todo el par ordenado de valores del módulo de Thiele y número de Biot que se encuentren en el semiplano inferior garantizará que exista reacción en toda la partícula. En contraparte si el par ordenado se encuentra en el semiplano superior existirá un punto crítico dentro de la partícula catalítica ocasionando una zona sin reacción.

### *¿ Cómo usar las ecuaciones?*

En vista de tener una forma de conocer si existe o no fenómeno de agotamiento, a continuación se presenta el siguiente algoritmo:

- Establecer el número de Biot y el módulo de Thiele
- Sustituirlo en la desigualdad dada por la ecuación (3.22)
- Si la desigualdad se cumple, entonces existe reacción en toda la partícula y pueden usarse las ecuaciones (3.5)-(3.8)
- En caso contrario deben ser usadas las expresiones dadas por (3.10)-(3.14)

### *Comportamiento de la concentración con la variación del número de Biot*

Cuando las resistencias externas a la transferencia de masa son importantes ( $Bi$  pequeños), la diferencia entre la concentración de reactivo en la superficie de la partícula y en el seno del fluido es grande, ya que la cantidad de reactivo que se difunde en la película de líquido formada alrededor del sólido es pequeña. A medida que dicha resistencia disminuye ( $Bi$  grandes), la cantidad de reactivo que se transporta desde el seno del fluido a la superficie de la partícula es grande. Dicho comportamiento puede observarse en las figuras (3.3) y (3.4).

Una vez que se ha discutido el transporte externo en las partículas, es necesario hablar del fenómeno difusivo que ocurre en el interior de la partícula. Cuando la reacción es más rápida comparada con el proceso difusivo, el reactivo penetrará a los poros y reaccionará, ocasionando una diferencia pronunciada entre las concentraciones en la superficie y promedio en la partícula. En caso contrario, es decir, cuando la reacción es

mucho más lenta que la difusión, tal diferencia entre las concentraciones será menos pronunciada, y el flux que entra a la partícula será menor.

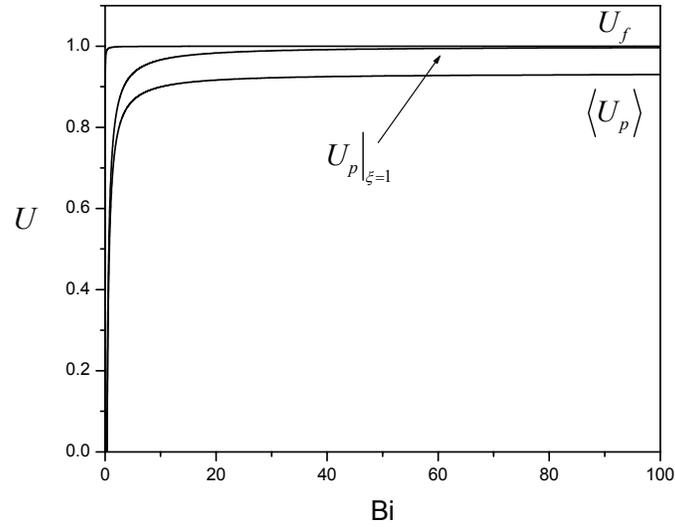


Fig.3.3 Valores de concentración como función del número de Biot para una cinética de orden cero en estado estacionario.  $U_{in} = 1; \varphi_n = 10; \varphi_p = 0.1; \Phi = 1$

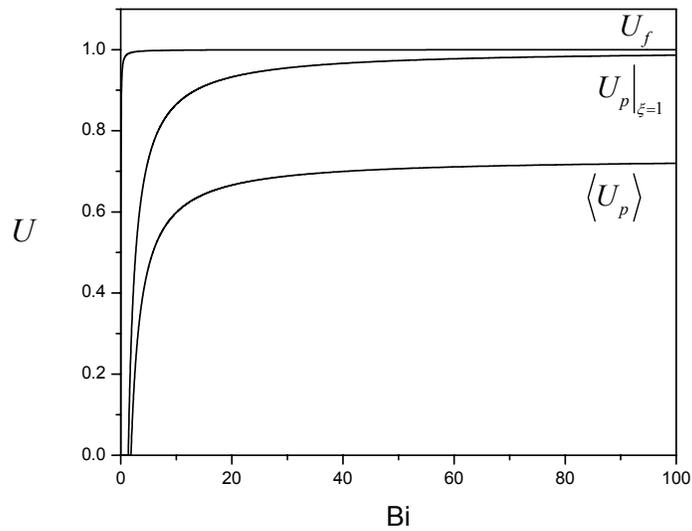


Fig. 3.4 Valores de concentración como función del número de Biot para una cinética de orden cero en estado estacionario.  $U_{in} = 1; \varphi_n = 10; \varphi_p = 0.1; \Phi = 2$

### ***Perfiles de concentración***

En las siguientes figuras se muestra el perfil de concentración considerando en primer lugar una resistencia externa a la transferencia de masa (fig. 3.5) y además se muestra el caso en que dicha resistencia es despreciable (fig. 3.6). En ambos casos puede notarse que a medida que la velocidad de reacción es mas rápida que la velocidad de difusión, se presenta una zona muerta en la partícula ( región en la que no hay presencia de reactivo).

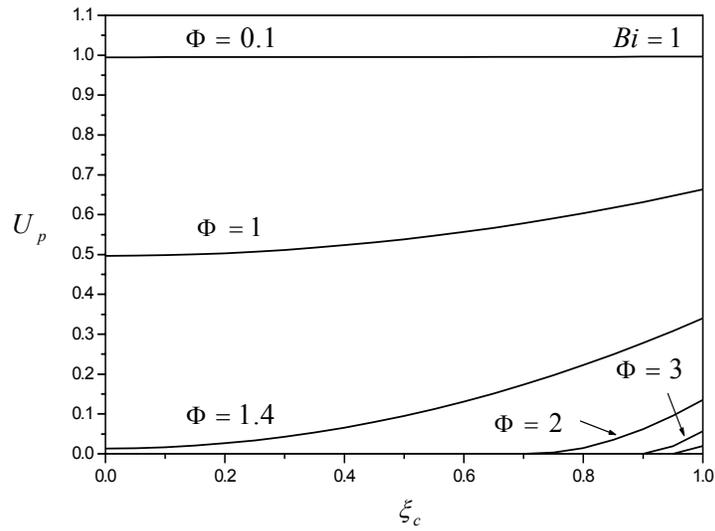


Fig. 3.5 Perfiles de concentración en estado estacionario ( $Bi = 1.0$ )

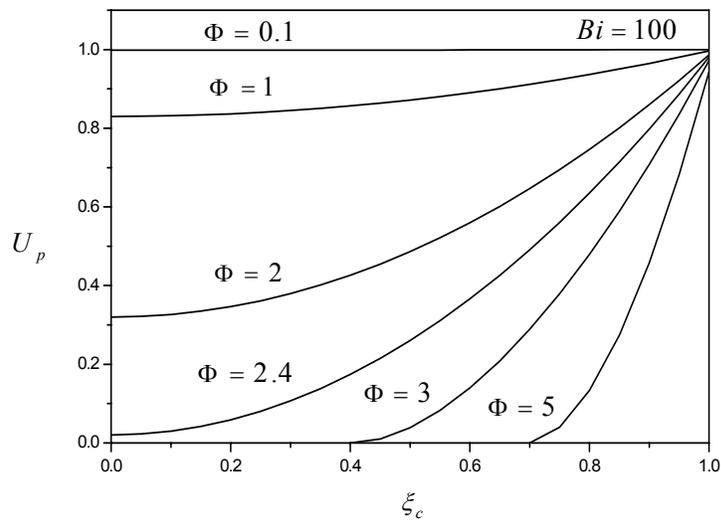


Fig. 3.6 Perfiles de concentración en estado estacionario considerando que la resistencia externa a la transferencia de masa es despreciable ( $Bi = 100$ )

### **ESTADO CUASI-ESTACIONARIO**

Como una aproximación al estado transitorio, se ha considerado el caso en el que el sistema se encuentra en estado cuasi-estacionario. Dicho caso se presenta cuando existe una diferencia importante en la escala característica de tiempos para dos variables, de tal modo que una de ellas puede considerarse en estado estacionario.

#### **Reacción en toda la partícula**

Para este caso, las ecuaciones que describen el sistema pueden escribirse de la siguiente forma:

Para la partícula:

$$\frac{1}{\xi^2} \left[ \frac{d}{d\xi} \left( \xi^2 \frac{dU_p}{d\xi} \right) \right] - \Phi^2 = 0 \quad (3.23)$$

Para el fluido:

$$\frac{dU_f}{d\tau} = \varphi_n [U_{in} - U_f] + \varphi_p [U_p|_{\xi=1} - U_f] \quad (3.24)$$

Condiciones de frontera:

$$-\frac{dU_p}{d\xi} = Bi (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad \text{en } \xi = 1 \quad (3.25)$$

$$U_p = \text{finita en } \xi = 0 \quad (3.26)$$

Y la condición inicial es:

$$U_f = U_{f0} \quad \text{en } \tau = 0 \quad (3.27)$$

En la ecuación 3.23 se ha impuesto la suposición del pseudoestado estacionario, de tal forma que el transporte del reactante adentro de la partícula puede modelarse por una EDO.

La solución a las ecuaciones diferenciales se presenta a continuación (ver detalles en el Apéndice C):

$$U_f = U_{f0} e^{-(\varphi_n)\tau} + \frac{\lambda}{\varphi_n} \left[ e^{-(\varphi_n)\tau} - 1 \right] + \varphi_n e^{-(\varphi_n)\tau} \int_0^\tau U_{in}(\beta) e^{(\varphi_n)\beta} d\beta \quad (3.28)$$

$$U_p = \frac{\Phi^2}{6}(\xi^2 - 1) - \frac{\lambda}{\varphi_p} + U_{f0}e^{-(\varphi_n)\tau} + \frac{\lambda}{\varphi_n} \left[ e^{-(\varphi_n)\tau} - 1 \right] + \varphi_n e^{-(\varphi_n)\tau} \int_0^\tau U_{in}(\beta) e^{(\varphi_n)\beta} d\beta \quad (3.29)$$

En las ecuaciones anteriores  $\lambda$  esta dada por:

$$\lambda = \frac{\Phi^2 \varphi_p}{3Bi} \quad (3.30)$$

Es importante mencionar que a pesar de que el balance de materia de la partícula (ecuación 3.23), indica –aparentemente- que la concentración no depende de la variable temporal; la solución a los balances muestra que tal dependencia si existe. Lo anterior se debe a la condición de frontera 3.25, en la cual se encuentran acoplados los balances en el fluido y en la partícula, originando que la concentración en la partícula dependa del tiempo por la dependencia de la concentración del fluido.

Para este caso, la concentración promedio se calcula a partir de la siguiente expresión:

$$\langle U_p \rangle = -\frac{\Phi^2}{15} - \frac{\lambda}{\varphi_p} + U_{f0}e^{-(\varphi_n)\tau} + \frac{\lambda}{\varphi_n} \left[ e^{-(\varphi_n)\tau} - 1 \right] + \varphi_n e^{-(\varphi_n)\tau} \int_0^\tau U_{in}(\beta) e^{(\varphi_n)\beta} d\beta \quad (3.31)$$

### Agotamiento del reactivo

Sustituyendo la condición de frontera (3.26) por:

$$U_p = 0 \quad \text{en } \xi = \xi_c \quad (3.32)$$

Las concentraciones en el fluido y en la partícula se expresan por:

$$U_p = \frac{\Phi^2}{6}(\xi^2 - \xi_c^2) + \frac{2\Phi^2 + \Phi^2 Bi - \Phi^2 Bi \xi_c^2 - 6Bi U_f}{6(Bi \xi_c - \xi_c - Bi)} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_c} \right] \quad (3.33)$$

$$U_f = I_{in} + U_{f0} e^{-(g+\varphi_n+\varphi_p)\tau} + \frac{\omega}{g + \varphi_n + \varphi_p} \left( 1 - e^{-(g+\varphi_n+\varphi_p)\tau} \right) \quad (3.34)$$

En donde se ha definido:

$$I_{in}(\tau) = \varphi_n \int_0^\tau e^{-(g+\varphi_n+\varphi_p)(\tau-\beta)} U_{in}(\beta) d\beta \quad (3.35)$$

La concentración promedio para la partícula se obtiene integrando (3.33) de acuerdo a la expresión (3.13):

$$\langle U_p \rangle = \frac{\Phi^2 (1 - \xi_c^5)}{10} - \frac{\Phi^2 \xi_c^2 (1 - \xi_c^3)}{6} + \frac{\Phi^2 (Bi + 2 - Bi \xi_c^2) - 6BiU_f}{Bi \xi_c - Bi - \xi_c} \left[ \frac{1 - \xi_c^3}{6} - \frac{\xi_c (1 - \xi_c^2)}{4} \right] \quad (3.36)$$

Cuando  $\xi_c = 0$  en las ecuaciones (3.33) y (3.34), se obtuvieron las expresiones para el caso en el cual hay presencia de reactivo en toda la partícula.

### **Radio crítico**

A partir de la condición de frontera (3.15), se obtuvo la siguiente expresión que permite determinar el valor del radio crítico:

$$2\Phi^2 (Bi - 1)\xi_c^3 - 3\Phi^2 Bi \xi_c^2 + \Phi^2 (Bi + 2) - 6BiU_f = 0 \quad (3.37)$$

Mediante la ecuación (3.37) se puede obtener el valor del radio crítico de forma numérica, para lo cual se necesita la expresión (3.34).

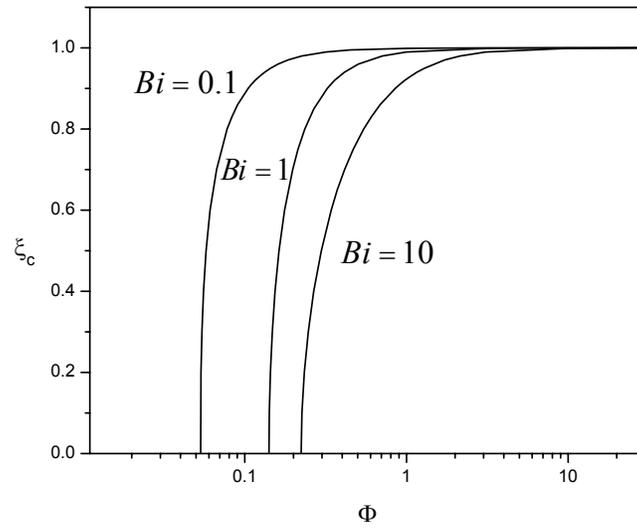


Fig. 3.7 Aparición del radio crítico para diferentes valores del número de Biot.  $\tau = 0.001$

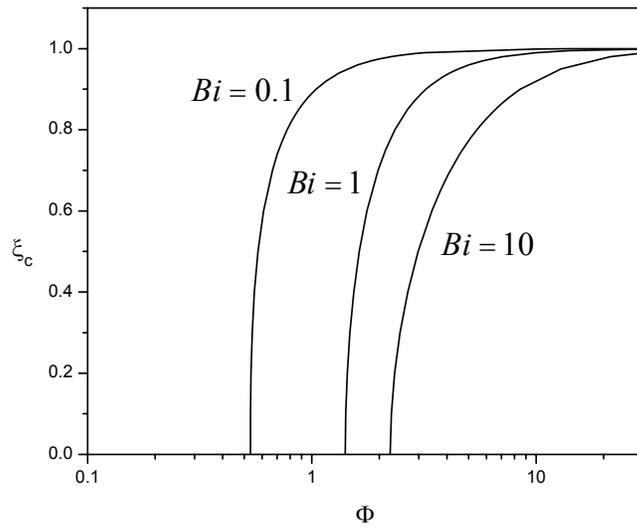


Fig. 3.8 Aparición del radio crítico para diferentes valores del número de Biot  $\tau = 1.0$

### Condición para la existencia de reactivo en toda la partícula

Para garantizar la existencia de reacción en toda la partícula, la concentración en el centro de la misma debe ser igual o mayor a cero. Si lo anterior ocurre el radio crítico es igual a cero. Al realizar las consideraciones anteriores a la ecuación (3.29) se llegó al siguiente resultado:

$$0 \leq -\frac{\Phi^2}{6} - \frac{\lambda}{\varphi_p} + U_{f0} e^{-(\varphi_n)\tau} + \frac{\lambda}{\varphi_n} [e^{-(\varphi_n)\tau} - 1] + \varphi_n e^{-(\varphi_n)\tau} \int_0^\tau U_{in}(\beta) e^{(\varphi_n)\beta} d\beta \quad (3.38)$$

Cambiando la desigualdad por una igualdad y reorganizando la ecuación anterior se obtiene:

$$\Phi^2 = \frac{(I_{in} + U_{f0} e^{-\varphi_n \tau}) 6Bi\varphi_n}{\varphi_n (Bi + 2) + 2\varphi_p (1 - e^{-\varphi_n \tau})} \quad (3.39)$$

Mediante la ecuación (3.39), se puede determinar para que conjunto de valores del módulo de Thiele y número de Biot, existe reacción en toda la partícula y para cuales se presenta un fenómeno de agotamiento del reactivo.

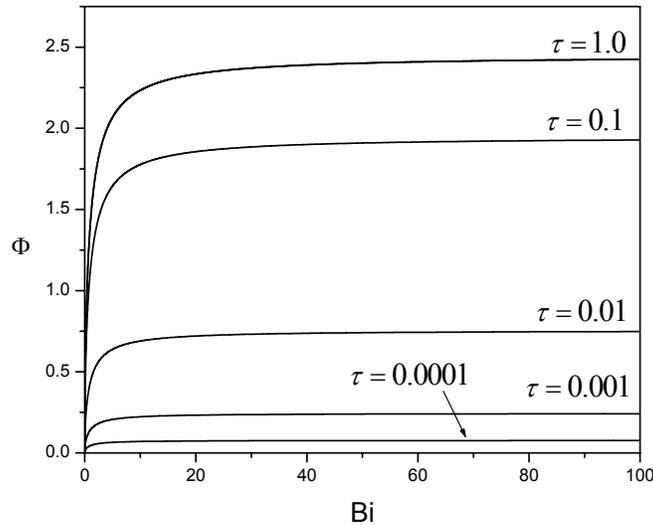


Fig. 3.9 Semiplanos de existencia de reacción en toda la partícula y presencia de una zona muerta en las partículas a diferentes tiempos. La región que se encuentra arriba de las curvas representa la aparición de una zona muerta, mientras que la que se encuentra abajo garantiza la reacción en toda la partícula.

A partir de la figura (3.9) se puede concluir que todo el par ordenado de números de Biot y módulos de Thiele que se encuentren por debajo de las curvas garantizan la presencia de reactivo en toda la partícula, por otra parte, el conjunto de valores de los parámetros mencionados que se encuentren por encima de las curvas originan la presencia de una zona muerta.

### **Función de alimentación**

Considerando una función escalón para la concentración de alimentación, el valor de la integral en la ecuación 3.35 se escribe como:

$$I_{in}(\tau) = \frac{\varphi_n}{g + \varphi_n + \varphi_p} \left[ 1 - A_1 e^{-(g + \varphi_n + \varphi_p)(\tau - \tau_0)} \right] \quad (3.40)$$

en donde:

$$A_1 = \begin{cases} 1 & \tau > \tau_0 \\ 0 & \tau \leq \tau_0 \end{cases} \quad (3.41)$$

### **Perfiles de concentración**

Los perfiles de concentración obtenidos, se muestran en las siguientes figuras (3.10) - (3.13). En las dos primeras, se muestran las variaciones con respecto al tiempo, mientras que en las dos últimas se presenta la variación de la concentración con respecto al espacio.

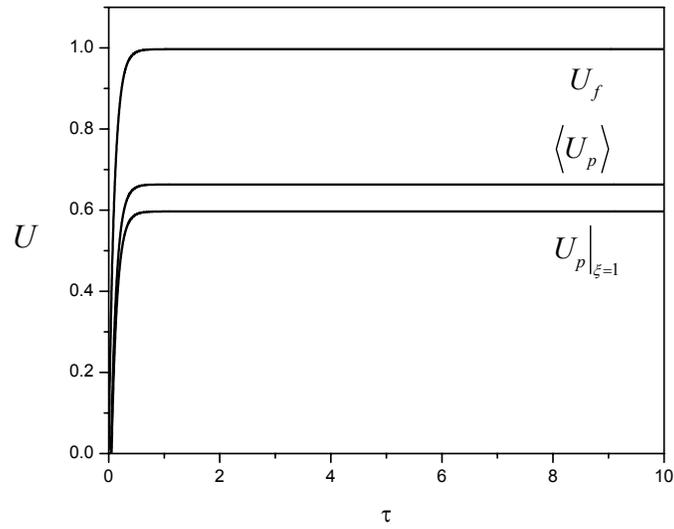


Fig. 3.10 Perfiles de concentración en estado cuasiestacionario, como función del tiempo.

Los valores de los parámetros son:  $\varphi_n = 10, \varphi_p = 0.1, Bi = 1, \Phi = 1$

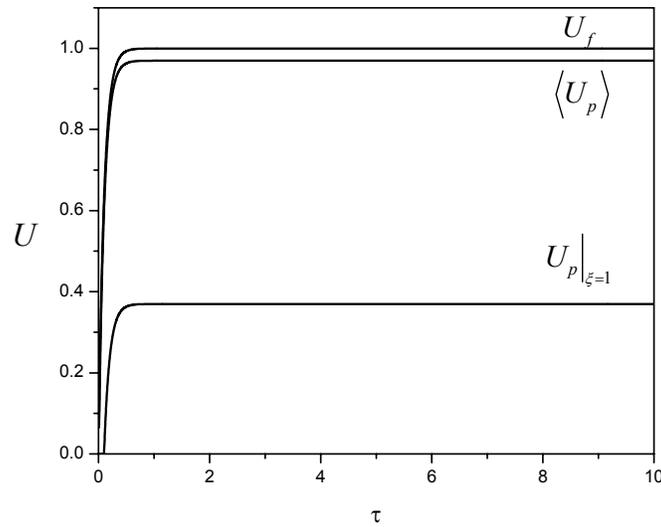


Fig. 3.11 Perfiles de concentración en estado cuasiestacionario, como función del tiempo.

Los valores de los parámetros son:  $\varphi_n = 10, \varphi_p = 0.1, Bi = 100, \Phi = 3$

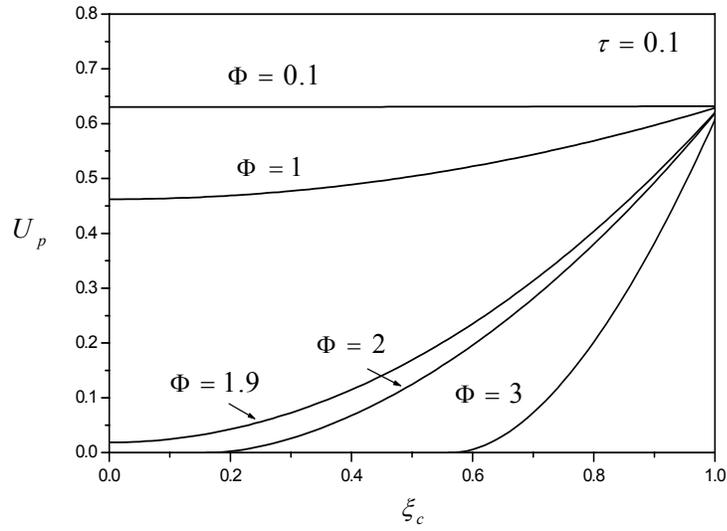


Fig. 3.12 Perfiles de concentración como función de la posición  $\tau = 0.1$

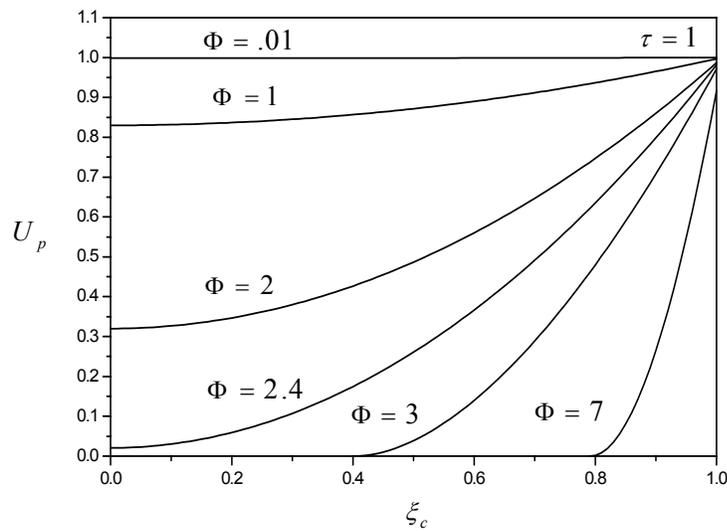


Fig 3.13 Perfiles de concentración como función de la posición  $\tau = 1.0$

### **ESTADO TRANSITORIO**

Finalmente, es de interés en el presente trabajo estudiar el caso en el que los términos de acumulación en los balances de materia no son despreciables. Para este caso, las ecuaciones que describen el sistema pueden escribirse de la siguiente forma:

Para la partícula:

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) \right] - \Phi^2 \quad (3.42)$$

Para el fluido:

$$\frac{dU_f}{d\tau} = \varphi_n [U_{in} - U_f] + \varphi_p [U_p|_{\xi=1} - U_f] \quad (3.43)$$

Condiciones de frontera:

$$-\frac{dU_p}{d\xi} = Bi \left( U_p|_{\xi=1} - U_f \right) \quad \text{en } \xi = 1 \quad (3.44)$$

$$U_p = \text{finita en } 0 \leq \xi \leq 1 \quad (3.45)$$

Y las condiciones iniciales son:

$$U_f = U_{f0} \quad \text{en } \tau = 0 \quad (3.46)$$

$$U_p = U_{p0} \quad \text{en } \tau = 0 \quad (3.47)$$

#### **Reacción en toda la partícula**

La solución a las ecuaciones diferenciales se realizó, mediante el método de la transformada de Laplace, y las soluciones obtenidas son las siguientes:

$$U_p(\xi, \tau) = \frac{Bi}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{U_{p0} \varphi_n - (U_{p0} - U_{f0}) \mu_n^2}{D_n \mu_n^2} \frac{\text{Sen}(\mu_n \xi)}{\text{Sen}(\mu_n)} e^{-\mu_n^2 \tau} \quad (3.48)$$

$$+ \frac{\Phi^2 Bi}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mu_n^2 - \varphi_n}{D_n \mu_n^2} \frac{\text{Sen}(\mu_n \xi)}{\text{Sen}(\mu_n)} \left( \frac{1 - e^{-\mu_n^2 \tau}}{\mu_n^2} \right) + \frac{\varphi_n Bi}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Sen}(\mu_n \xi)}{D_n \text{Sen}(\mu_n)} I_{in}$$

Para el fluido:

$$U_f(\tau) = \varphi_p \varphi_n Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{I_{in}}{A_n D_n} + \Phi^2 \varphi_p Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mu_n^2 - \varphi_n}{A_n D_n \mu_n^2} \left( \frac{1 - e^{-\mu_n^2 \tau}}{\mu_n^2} \right) + \varphi_p Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_n U_{p_0} - (U_{p_0} - U_{f_0}) \mu_n^2}{\mu_n^2 A_n D_n} e^{-\mu_n^2 \tau} \quad (3.49)$$

en donde:

$$A_n = \varphi_n + \varphi_p - \mu_n^2 \quad (3.50)$$

$$B_n = (\varphi_n - \mu_n^2)(Bi - 1) - \varphi_p \quad (3.51)$$

$$D_n = \frac{B_n}{2\mu_n^2} \left( 1 + \frac{B_n}{A_n} \right) - \frac{B_n}{A_n} + \frac{A_n}{2} + Bi - 1 \quad (3.52)$$

Y  $\mu_n$  son las raíces de la siguiente expresión:

$$A_n \text{Cos}(\mu_n) + B_n \frac{\text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} = 0 \quad (3.53)$$

Cuando  $\tau \ll 1$ , se obtienen las condiciones iniciales, tanto en la expresión del fluido como en la de la partícula.

Para obtener una concentración promedio, se usa la definición dada por la ecuación (3.7). De tal forma que al realizar la integración, se obtiene:

$$\langle U_p \rangle = 3Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[U_{p_0} \varphi_n - (U_{p_0} - U_{f_0}) \mu_n^2] X_n}{D_n \mu_n^4} e^{-\mu_n^2 \tau} + 3\Phi^2 Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mu_n^2 - \varphi_n) X_n}{D_n \mu_n^4} \left( \frac{1 - e^{-\mu_n^2 \tau}}{\mu_n^2} \right) + 3Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{I_{in} X_n}{D_n \mu_n^2} \quad (3.54)$$

en donde:

$$X_n = 1 + \frac{B_n}{A_n} \quad (3.55)$$

La evaluación de las ecuaciones anteriores ha sido comparada con la solución numérica del problema, y los perfiles se presentan en las siguiente sección.

### Zona muerta

Realizando el cambio en la condición de frontera especificado anteriormente, la solución a los balances de materia se puede escribir como sigue:

Para el fluido:

$$\begin{aligned}
U_F(\tau) = & \varphi_p B_i \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\mu_n^2 C_N} \theta_\mu - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Delta^\mu \varphi_p}{\mu_n^2 C_N \text{Sen}[\mu_n(1-\xi_c)]} \theta_\mu \\
& + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Delta^\mu}{C_N \text{Sen}[\mu_n(1-\xi_c)]} \left( U_{F_0} e^{-\mu_n^2 \tau} + \varphi_n e^{-\mu_n^2 \tau} \int_0^\tau U_{in}(\gamma) e^{\mu_n^2 \gamma} d\gamma \right) \\
& + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_p \xi_c \Delta^\mu \text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n^2 C_N \text{Sen}(\mu_n \xi_c) \text{Sen}[\mu_n(1-\xi_c)]} \theta_\mu \\
& + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_p \xi_c [(1-B_i) \text{Sen}(\mu_n) - \mu_n \text{Cos}(\mu_n)]}{C_N \mu_n^2 \text{Sen}(\mu_n \xi_c)} \theta_\mu \\
& - \frac{2\varphi_p \text{Sen}(\lambda_n)}{\lambda_n \text{Cos}(\lambda_n \xi_c)} \left\{ \frac{\Delta^\lambda}{[(\varphi_n - \lambda_n^2)(B_i - 1) - \varphi_p] \text{Sen}[\lambda_n(1-\xi_c)] + \lambda_n(\varphi_n + \varphi_p - \lambda_n^2) \text{Cos}[\lambda_n(\xi_c - 1)]} \right\} \theta_\lambda \\
& - \frac{2\varphi_p \text{Sen}[\lambda_n(1-\xi_c)]}{\lambda_n \text{Cos}(\lambda_n \xi_c)} \left\{ \frac{(1-B_i) \text{Sen}(\lambda_n) - \lambda_n \text{Cos}(\lambda_n)}{[(\varphi_n - \lambda_n^2)(B_i - 1) - \varphi_p] \text{Sen}[\lambda_n(1-\xi_c)] + \lambda_n(\varphi_n + \varphi_p - \lambda_n^2) \text{Cos}[\lambda_n(\xi_c - 1)]} \right\} \theta_\lambda
\end{aligned} \tag{3.56}$$

en donde, se ha definido:

$$\begin{aligned}
\Delta^{\delta_n} &= (1-B_i) \text{Sen}[\delta_n(\xi_c - 1)] + \delta_n \text{Cos}[\delta_n(\xi_c - 1)] \\
\delta &= \mu, \lambda
\end{aligned} \tag{3.57}$$

$$\theta_{\delta_n} = U_{p_0} e^{-\delta_n^2 \tau} - \Phi^2 \int_0^\tau e^{-\delta_n^2 \gamma} d\gamma \tag{3.58}$$

Para la partícula:

$$\begin{aligned}
U_p(\xi, \tau) = & \frac{Bi\varphi_p\xi_c}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\mu_n^2} \frac{Sen[\mu_n(\xi - \xi_c)]}{Sen(\mu_n\xi_c)} \frac{\omega^{\mu_n}}{\Omega^{\mu_n}} \Theta^{\mu_n} - \frac{2Bi\varphi_p\xi_c}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Sen[\nu_n(\xi - \xi_c)]}{E_n Sen(\nu_n\xi_c)} \frac{\omega^{\nu_n}}{\Omega^{\nu_n}} \Theta^{\nu_n} \\
& - \frac{2Bi\varphi_p}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Sen[\lambda_n(\xi - \xi_c)]}{\lambda_n Cos(\lambda_n\xi_c)} \frac{Sen[\lambda_n(1 - \xi_c)]}{\Delta^{\lambda_n}} \frac{\omega^{\lambda_n}}{\Omega^{\lambda_n}} \Theta^{\lambda_n} + \frac{Bi^2\varphi_p}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\mu_n^2 C_n} \frac{Sen[\mu_n(\xi - \xi_c)]}{\Delta^{\mu_n}} \Theta^{\mu_n} \\
& - \frac{2Bi^2\varphi_p}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{E_n} \frac{Sen[\nu_n(\xi - \xi_c)]}{\Omega^{\nu_n}} \Theta^{\nu_n} - \frac{Bi\varphi_p}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\mu_n^2 C_n} \frac{Sen[\mu_n(\xi - \xi_c)]}{Sen[\mu_n(1 - \xi_c)]} \Theta^{\mu_n} \\
& + \frac{Bi\xi_c\varphi_p}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Sen[\mu_n(\xi - \xi_c)]}{\mu_n^2 C_n Sen(\mu_n\xi_c)} \frac{Sen(\mu_n)}{Sen[\mu_n(1 - \xi_c)]} \Theta^{\mu_n} - \frac{Bi\varphi_p Sen(\lambda_n)}{\xi\lambda_n Cos(\lambda_n\xi_c)} \left( \frac{Sen[\lambda_n(\xi - \xi_c)]}{\Omega^{\lambda_n}} \right) \Theta^{\lambda_n} \\
& + \frac{Bi\varphi_p}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Sen[\mu_n(\xi - \xi_c)]}{C_n Sen[\mu_n(1 - \xi_c)]} e^{-\mu_n^2\tau} \int_0^\tau U_{in}(\gamma) e^{\mu_n^2\gamma} d\gamma + 2\frac{\xi_c}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Sen[\nu_n(\xi - \xi_c)]}{E_n Cos(\nu_n)} \left( \frac{\omega^{\nu_n}}{Sen[\nu_n(\xi_c - 1)]} \right) \Theta^{\nu_n} \\
& - \frac{2Sen[\lambda_n(\xi - \xi_c)]}{\xi Cos(\lambda_n)} \left( \frac{\omega^{\lambda_n}}{\Delta^{\lambda_n}} \right) \Theta^{\lambda_n} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{BiU_{f0}}{\xi C_n} \frac{Sen[\mu_n(\xi - \xi_c)]}{Sen[\mu_n(1 - \xi_c)]} e^{-\mu_n^2\tau} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2Bi}{\xi} \frac{Sen[\nu_n(\xi - \xi_c)]}{Sen[\nu_n(\xi_c - 1)]} \Theta^{\nu_n} \\
& + \frac{2\xi_c}{\xi\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \left( \frac{\Phi}{\lambda_n} \right)^2 (1 - e^{-\lambda_n^2\tau}) - U_{p0} e^{-\lambda_n^2\tau} \right] \frac{(-1)^n}{n} Sen(\lambda_n\xi)
\end{aligned} \tag{3.59}$$

en donde:

$$\Delta^{\delta_n} = (1 - B_i) Sen[\delta_n(\xi_c - 1)] + \delta_n Cos[\delta_n(\xi_c - 1)] \quad \delta = \mu, \lambda \tag{3.60}$$

$$\Theta^{\delta_n} = U_{p0} e^{-\delta_n\tau} - \Phi^2 \int_0^\tau e^{-\delta_n\gamma} d\gamma \tag{3.61}$$

$$\omega^{\delta_n} = (1 - B_i) Sen(\delta_n) - \delta_n Cos(\delta_n) \quad \delta = \mu, \lambda \tag{3.62}$$

$$\Delta^{\delta_n} = \left[ (\varphi_n - \delta_n^2)(Bi - 1) - \varphi_p \right] Sen[\delta_n(1 - \xi_c)] + \delta_n Cos[\delta_n(\xi_c - 1)] \quad \delta = \mu, \lambda \tag{3.63}$$

Debido a la complejidad involucrada al evaluar las soluciones analíticas para este caso, los perfiles presentados en secciones posteriores se basan en las soluciones obtenidas de forma numérica.

### ***Solución numérica***

Mediante la solución numérica del problema considerando una función escalón como alimentación, se obtienen los perfiles mostrados en la fig. 3.14. Puede notarse que los comportamientos son los descritos considerando cuasiestadoestacionario.

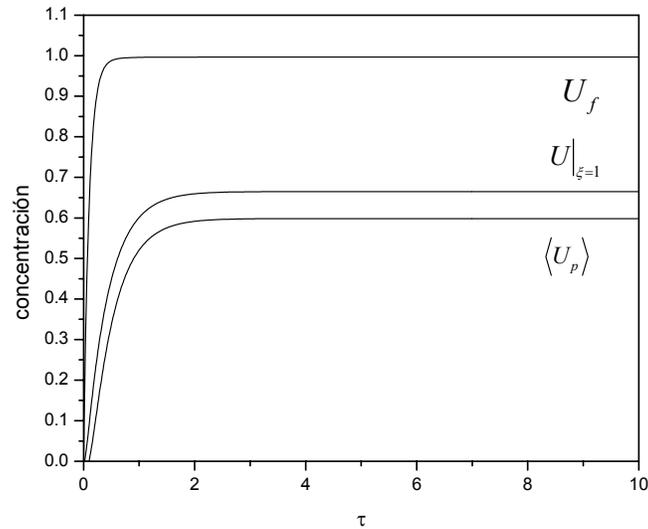


Fig. 3.14 Perfiles de concentración en estado transitorio, como función del tiempo. Los valores de los parámetros son:  $\varphi_n = 10, \varphi_p = 0.1, Bi = 1, \Phi = 1$

### 3.2 CINÉTICA DE MICHAELIS MENTEN

En un gran número de situaciones, la adsorción juega un importante rol y la velocidad de reacción química es representada por modelos del tipo de Michaelis Menten.

#### **Cuasiestado estacionario**

Debido a la no linealidad de la ecuación de balance para el reactivo en la ecuación de la partícula, y al interés existente por obtener métodos aproximados para la solución de este tipo de sistemas, en este estudio se plantea en primera instancia la solución del sistema en estado cuasiestacionario; de tal manera que los balances de materia para el componente clave pueden ser escritos en la siguiente manera:

Para la partícula:

$$\frac{1}{\xi^2} \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) \right] - \Phi^2 \left( \frac{U_p}{1 + k_1 U_p} \right) = 0 \quad (3.64)$$

Para el fluido:

$$\frac{dU_f}{d\tau} = \varphi_n [U_{in} - U_f] + \varphi_p [U_p|_{\xi=1} - U_f] \quad (3.65)$$

Condiciones de frontera:

$$U_p = \text{Finita} \quad \text{en } \xi=0 \quad (3.66)$$

$$-\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = Bi (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad \text{en } \xi = 1 \quad (3.67)$$

Y las condiciones iniciales son:

$$U_f = U_{f0} \quad \text{en } \tau = 0 \quad (3.68)$$

$$U_p = U_{p0} \quad \text{en } 0 \leq \xi \leq 1 \quad (3.69)$$

El uso de la técnica numérica de diferencias finitas permite resolver las ecuaciones diferenciales, de tal manera que los perfiles obtenidos se muestran en la figura (3.15). La tendencia de los perfiles es la misma que la obtenida por Marroquín y col. (2002) para una cinética de primer orden, además de la presentada anteriormente considerando una cinética de orden cero.

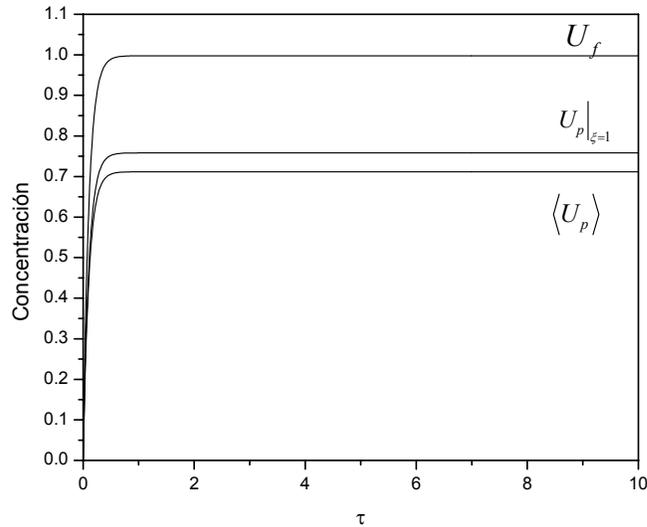


Fig. 3.15 Perfiles de concentración en estado transitorio, como función del tiempo. Los valores de los parámetros son:  $\varphi_n = 10, \varphi_p = 0.1, Bi = 1, \Phi = 1$

### Solución completa

En esta sección se ha denominado solución completa a la obtenida considerando los términos de acumulación presentes en los balances de materia. La solución numérica de tales ecuaciones fue obtenida mediante el método de diferencias finitas y en el Apéndice E se presentan los detalles de la discretización de las ecuaciones.

La constante de adsorción representa la facilidad o dificultad con la que se adhieren las moléculas a la superficie del sólido, es decir, si el valor de la constante es grande, habrá una gran cantidad de reactivo en el sólido disponible a reaccionar y sobre todo poca cantidad de reactivo en los poros del catalizador debido a la reacción, sin embargo, cuando el valor de tal variable es pequeño se presenta poca cantidad de reactivo en el catalizador y la reacción se ve detenida por este efecto, originando una mayor

cantidad de reactivo en el material poroso. Este comportamiento se muestra esquemáticamente en las figuras (3.16, 3.17).

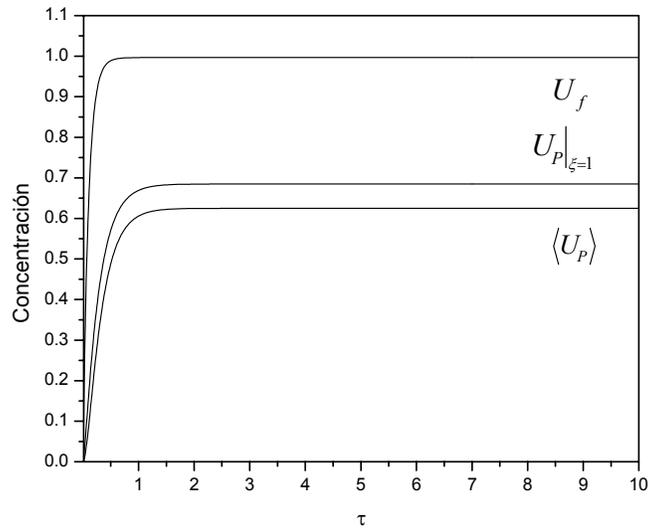


Fig. 3.16 Perfiles de concentración en estado transitorio, considerando una cinética M-M y una función de alimentación tipo escalón. Los valores de los parámetros son:  
 $Bi = 1; \Phi = 1; k_1 = 0.5$

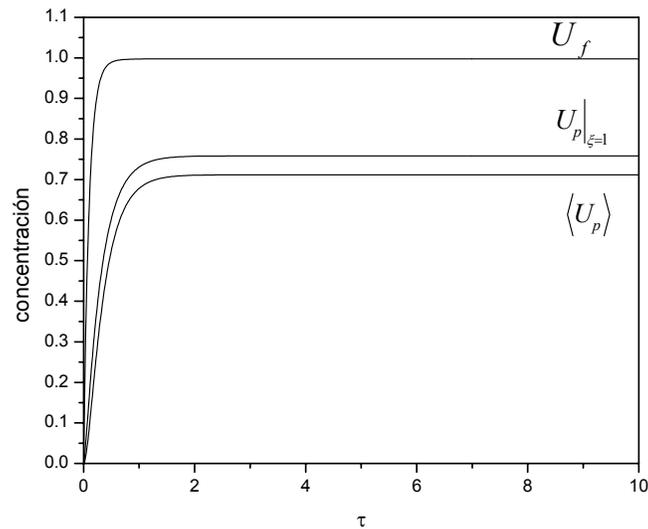


Fig. 3.17 Perfiles de concentración en estado transitorio, considerando una cinética M-M y una función de alimentación tipo escalón. Los valores de los parámetros son:  
 $Bi = 1; \Phi = 1; k_1 = 0.01$

### 3.3 FACTOR DE EFECTIVIDAD

#### Orden cero

Es uno de los objetivos de este trabajo, obtener los comportamientos del factor de efectividad para los casos estudiados anteriormente. Con este objetivo, se retomará la definición del factor de efectividad interno (dada por Aris, 1975).

El factor de efectividad se define como la velocidad de reacción real dividida por la tasa de reacción en la cual los fenómenos de transporte no existen, es decir, como si la reacción se llevará en la superficie de la partícula:

$$\eta = \frac{\int \mathfrak{R} dV}{\int \mathfrak{R}|_{\xi=1} dV} \quad (3.70)$$

Para una cinética de orden cero el factor de efectividad se define en la siguiente forma:

$$\eta = \frac{\int k dV}{\int k dV} \quad (3.71)$$

Debido a que se considera una ecuación en la que solo existen cambios importantes en una dirección, la ecuación anterior puede ser arreglada en la siguiente forma:

$$\eta = \frac{\int_{\xi_c}^1 k \xi^2 d\xi}{\int_0^1 k \xi^2 d\xi} \quad (3.72)$$

Al realizar la integración en la ecuación anterior, se obtiene:

$$\eta = 1 - \xi_c^3 \quad (3.73)$$

Mediante la ecuación anterior se puede determinar el valor del factor de efectividad, para los tres procesos estudiados, es decir, estado estacionario, pseudoestacionario y transitorio; ya que solo es necesario sustituir las expresiones obtenidas para el radio crítico en (3.73); y así determinar el valor del factor de efectividad.

En la fig: (3.18) se muestra el comportamiento del factor de efectividad con respecto a la variación del radio crítico.

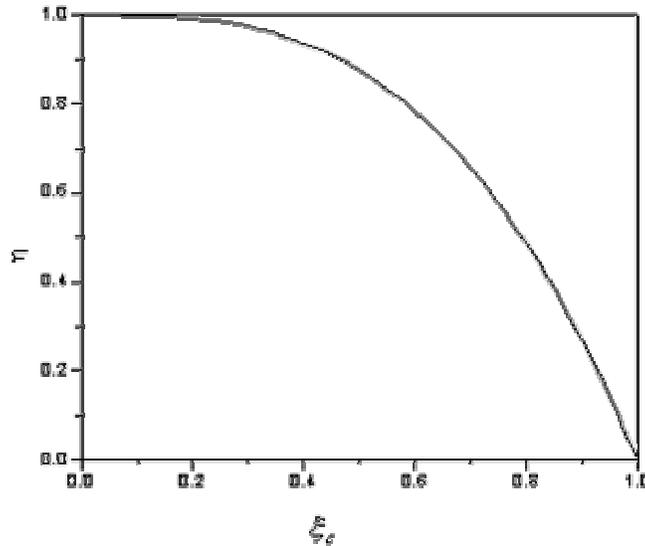


Fig. 3.18 Comportamiento del factor de efectividad con respecto a la variación del radio crítico

A partir de la figura (3.18) se puede notar la presencia de tres zonas:

- 1) Cuando la resistencia difusiva no es importante, se presenta el caso en el que existe reacción en toda la partícula, es decir,  $\xi_c = 0$ ; y el valor del factor de efectividad es igual a 1
- 2) Cuando los fenómenos de transporte adentro de la partícula son importantes, se presenta el fenómeno de agotamiento, y por lo tanto el valor de  $\xi_c \neq 0$ , lo cual origina que el valor de  $\eta$  sea diferente de 1
- 3) Finalmente, cuando la velocidad de reacción es suficientemente rápida, comparada con el proceso difusivo, el reactivo no penetra a los poros del catalizador, provocando que el valor de  $\eta$  sea igual a cero, es decir, la reacción se lleva a cabo en la superficie de la partícula.

## ESTADO ESTACIONARIO

Anteriormente se obtuvo una expresión implícita para determinar el valor del radio crítico (ecuaciones 3.16-3.20). La solución numérica de dicha ecuación permite

determinar el valor del radio crítico, para diferentes módulos de Thiele. La sustitución del valor del radio crítico en la ecuación (3.73) permite obtener valores del factor de efectividad.

En la figura 3.19 se muestra el decremento del factor de efectividad con respecto al incremento del módulo de Thiele. Cuando la resistencia externa a la transferencia de masa es pequeña se origina un retardo en la caída de la curva del factor de efectividad comparada con un sistema en que dichas resistencias son importantes.

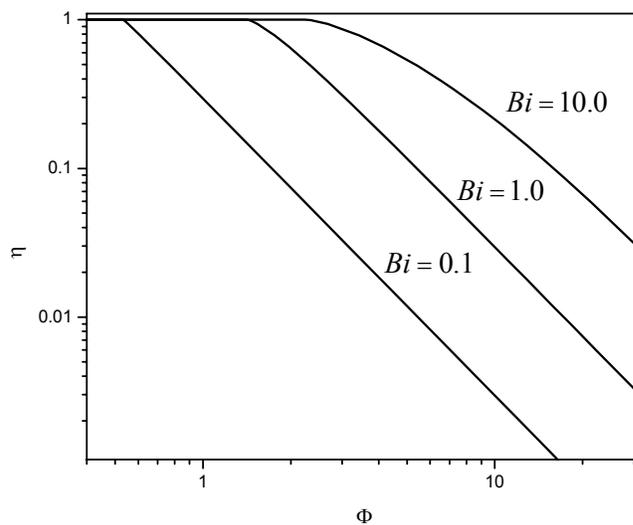


Fig.3.19 Variación del factor de efectividad con respecto al módulo de Thiele.

Dicho decaimiento se debe a la aparición de un radio crítico dentro de la partícula catalítica, como se muestra en la figura 3.19.

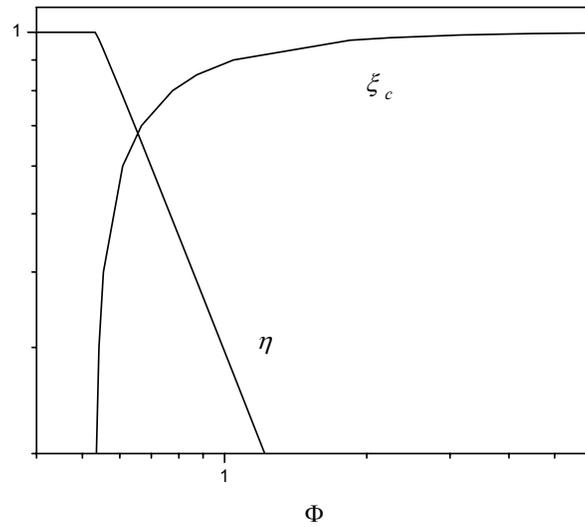


Fig. 3.20 En la figura se muestra la caída del factor de efectividad con la aparición del radio crítico, Los valores de los parámetros usados son:  
 $\varphi_p = 0.1, \varphi_n = 10, Bi = 0.1$ .

### ***ESTADO CUASIESTACIONARIO***

Sustituyendo el valor del radio crítico obtenido mediante la ecuación (3.37) en (3.73), lleva a la obtención de los siguientes perfiles para el factor de efectividad:

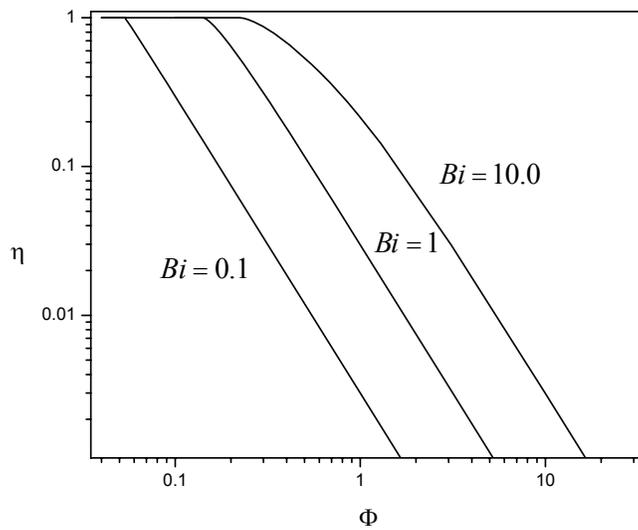


Fig. 3.21 Comportamiento del factor de efectividad con respecto a la variación del módulo de Thiele, para un  $\tau = 0.001$

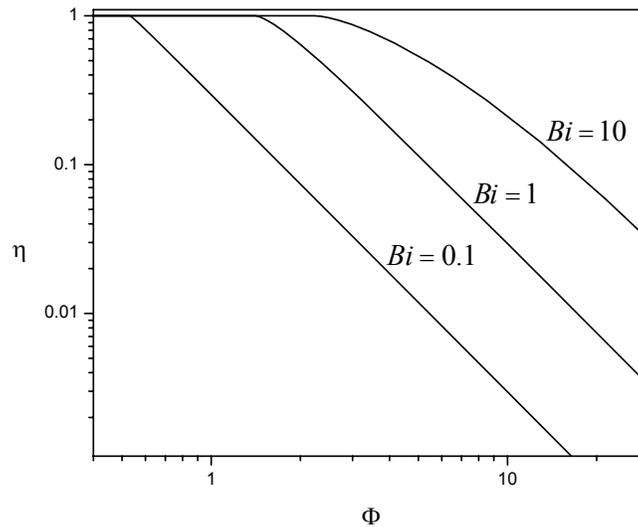


Fig. 3.22 Comportamiento del factor de efectividad con respecto a la variación del módulo de Thiele, para un  $\tau = 1.0$

En las figuras 3.21 y 3.22 puede notarse que a medida que el tiempo avanza, la caída del factor de efectividad se retarda, esto debido a que en  $\tau = 0$ , el valor de la concentración en la partícula es cero. Conforme el proceso transcurre la concentración en

la partícula es mayor a cero y por lo tanto debe ocurrir una reacción más rápida para que pueda presentarse la zona muerta.

Por otra parte, al realizar una comparación entre los perfiles del factor de efectividad en estado estacionario y pseudoestacionario, se nota que el estado estacionario es alcanzado para un  $\tau = 1$ .

### Michaelis Menten

El comportamiento del factor de efectividad para este tipo de cinética se obtuvo numéricamente, y se muestra en la figura 3.23. A tiempos cortos existe poco reactivo en la partícula, por lo que la reacción tiende a ser mínima, pero conforme empieza a existir mayor cantidad de reactivo en los poros (tiempos grandes), el factor de efectividad aumenta su valor ya que existe mayor reacción.

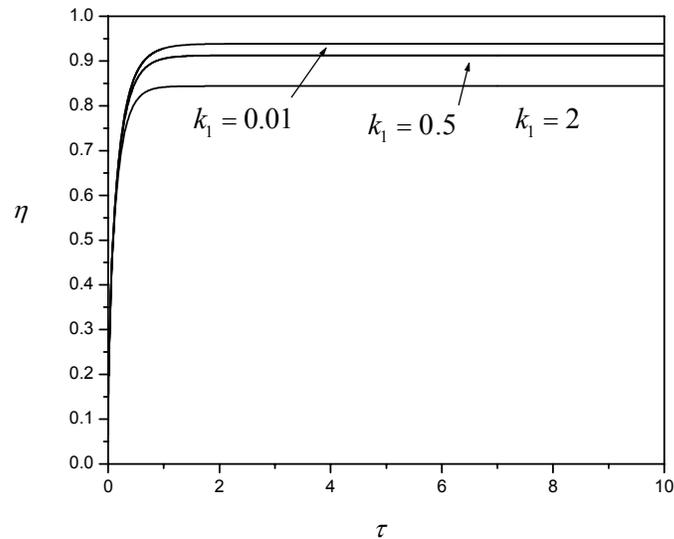


Fig. 3.23 Comportamiento del factor de efectividad con respecto a la variación del tiempo para tres valores de la constante de adsorción (adimensional)  $Bi = 1; \Phi = 1$

## COMPARACIÓN DE LOS PERFILES DE CONCENTRACIÓN

### Orden cero

En la figura 3.24, se presenta una comparación entre el sistema en estado pseudoestacionario (obtenido de forma analítica) y el transitorio (obtenido de forma numérica) para este tipo de cinética.

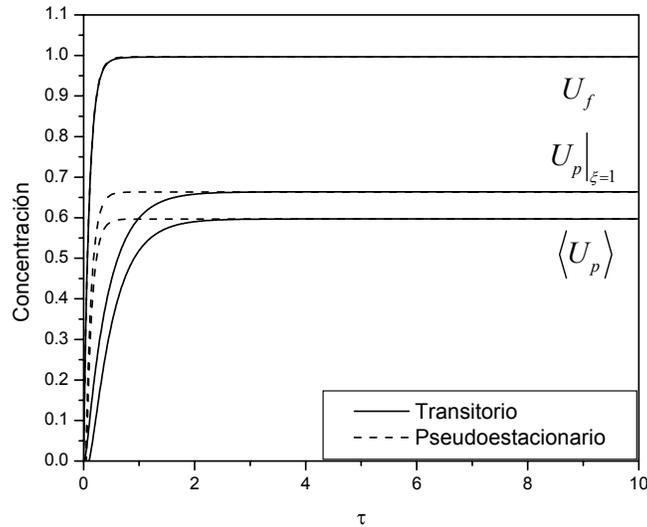


Fig. 3.24 Comparación de los perfiles de concentración en estado cuasiestacionario y transitorio, para una alimentación tipo escalón. Los valores de los parámetros usados son:  $\varphi_p = 0.1, \varphi_n = 10, Bi = 1, \Phi = 1$

### Michaelis Menten

El resultado de la comparación del estado cuasiestacionario con el transitorio para esta cinética se presenta en la figura 3.25, en donde el estado estacionario es alcanzado primeramente por el cuasiestacionario, ya que bajo esta consideración se manejó en un aparente estacionario la ecuación de balance de la partícula.

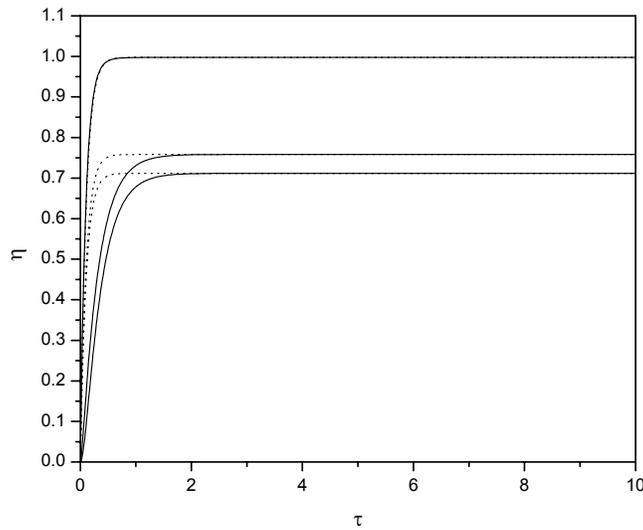
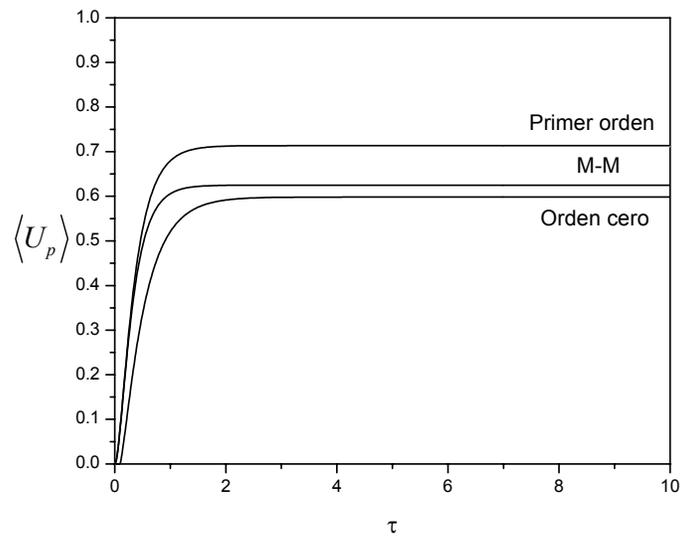


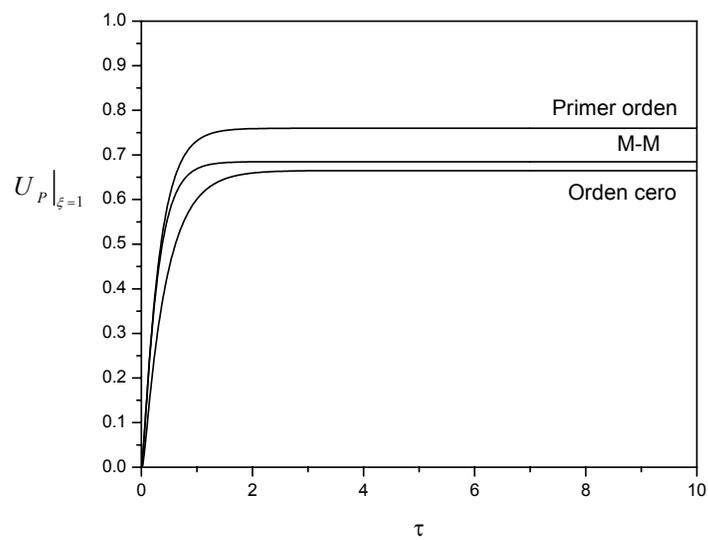
Fig. 3.25 Comparación de los perfiles de concentración en estado cuasiestacionario y transitorio, para una alimentación tipo escalón. Los valores de los parámetros usados son:  $\varphi_p = 0.1, \varphi_n = 10, Bi = 1, \Phi = 1, k_1 = 0.01$

#### Comparación entre las tres cinéticas

Finalmente en la figura (3.26) se presenta una comparación entre los perfiles de concentración en la superficie de la partícula y promedio, para tres diferentes tipos de cinéticas: primer orden, M-M y orden cero. Como era de esperarse, los perfiles obtenidos para una cinética M-M, se encuentran en medio de las cinéticas de primer orden y orden cero. A medida que el valor del producto de la constante de adsorción por la concentración es mayor a uno, los perfiles de la cinética M-M, tienden a acercarse a los de la cinética de orden cero. Por el contrario, cuando el producto mencionado tiende a cero, los perfiles de la cinética M-M tienden a acercarse a los obtenidos para una cinética de primer orden.



a)



b)

Fig. 3.26 Comparación de los perfiles de concentración considerando tres tipos de cinéticas diferentes y una alimentación tipo escalón. Los valores de los parámetros usados son:  $\varphi_p = 0.1, \varphi_n = 10, Bi = 1, \Phi = 1$

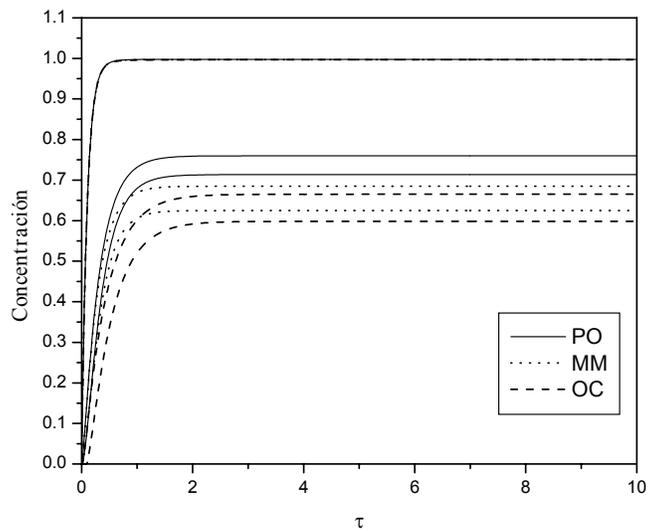


Fig. 3.27 Comparación de los perfiles de concentración considerando tres tipos de cinéticas diferentes y una alimentación tipo escalón. Los valores de los parámetros usados son:  $\varphi_p = 0.1, \varphi_n = 10, Bi = 1, \Phi = 1$

Por otra parte, en el caso de la concentración del fluido se encontró que prácticamente es el mismo perfil para las tres cinéticas (Fig. 3.27). Este resultado es de amplia importancia, ya que en el caso de experimentos dinámicos lo que se mide en el reactor es la concentración a la salida. Por consiguiente, en base a estos resultados se puede concluir que cinéticas complejas (M-M) se pueden modelar como cinéticas más sencillas (primer orden u orden cero).

## CONCLUSIONES

Se ha resuelto un problema de difusión-reacción en un reactor continuo de tanque agitado considerando cinéticas del tipo de Michaelis-Menten y de orden cero. Los resultados se presentaron para la concentración promedio y superficial en la partícula además de la concentración en el fluido.

### **Cinética de orden cero**

Para el caso del orden cero se obtuvieron expresiones analíticas para los perfiles de concentración y para el factor de efectividad; estas expresiones consideran las resistencias interna y externa a la transferencia de masa y permiten el uso de cualquier función de alimentación. Para este tipo de cinética los perfiles de concentración en la partícula presentan valores negativos para algunas combinaciones de los parámetros involucrados en la descripción física del problema  $(Bi, \Phi, \varphi_n, \varphi_p, \tau)$ . La aparición de dicha región se debe a que la velocidad de reacción es mucho más rápida que la velocidad de difusión, de tal modo que el reactivo no tiene tiempo para difundirse en todo el poro. Ya que se presenta una zona muerta en la partícula, su aparición tiene una repercusión directa sobre la determinación del factor de efectividad, por lo cual su evaluación se realizó de tal forma que se desprejia dicha zona. En base a este fenómeno se ha encontrado la presencia de tres zonas. Cuando la velocidad de reacción es mucho más lenta que la velocidad de difusión, el radio crítico es igual a cero y el factor de efectividad es igual a uno. El segundo caso se ha presentado cuando la tasa de reacción es mucho más rápida que el proceso difusivo, obteniéndose un valor para el radio crítico de uno y por lo tanto el factor de efectividad es cero (la reacción se lleva a cabo en la superficie de la partícula). Finalmente cuando ambos fenómenos son del mismo orden de magnitud, el radio crítico tiene un valor entre cero y uno y el factor de efectividad es diferente de uno, por lo cual solo se ocupa una parte del catalizador. Asimismo se han presentado los criterios bajo los cuales es posible que se presente o no una zona muerta en las partículas, además de expresiones analíticas para determinar el valor del radio crítico.

La comparación de los perfiles en estado cuasiestacionario y transitorio, presentan desviaciones apreciables en la región correspondiente a tiempos pequeños. Por otra parte, los resultados obtenidos para el estado estacionario son los mismos para el estado cuasiestacionario para un  $\tau = 1$ .

### **Cinética de Michaelis-Menten**

Al comparar los perfiles para las cinéticas de orden cero y M-M, con los obtenidos por Marroquín y col. (2002), para una cinética de primer orden, se encontró que los perfiles de concentración promedio y en la superficie de las partículas, considerando una cinética de Michaelis –Menten, se encuentran acotados por los perfiles considerando cinéticas de primer orden y de orden cero.

Los resultados obtenidos para la concentración del fluido, muestran que los perfiles de las tres cinéticas son prácticamente iguales, para los valores usados de los parámetros. Lo anterior tiene influencia directa en los desarrollos experimentales, ya que en estas situaciones, es de interés la determinación de la variación de la concentración del fluido. En nuestro trabajo se muestra que no es posible diferenciar la expresión cinética que sigue la reacción; lo cual posibilita el modelar cinéticas complejas como la M-M mediante cinéticas sencillas como son la de primero orden y la de orden cero.

## NOMENCLATURA

$a_v$	Área volumétrica de la partícula, $m^2/m^3$
$A_{fp}$	Área interfacial partícula-fluido, $m^2$
$\langle C_\mu \rangle^\mu$	Concentración promedio de soluto en el fluido, $mol/m^3$
$C_{\mu 0}$	Concentración inicial del soluto en el fluido, $mol/m^3$
$\langle C_\gamma \rangle^\gamma$	Concentración promedio intrínseca en la partícula, $mol/m^3$
$C_{\gamma 0}$	Concentración inicial del soluto en la partícula, $mol/m^3$
$k_0$	Constante de velocidad de reacción para una cinética de orden cero, $mol/s.m^2$
$k_M$	Constante de velocidad de reacción para una cinética de Michaelis-Menten, $m/s$
$k_A$	Constante de adsorción $m^3/mol$
$k_f$	Coefficiente de transferencia de masa, $m/s$
$D_{ef}$	Difusividad efectiva, $m^2/s$
$Bi = \frac{k_f r_p}{D_{ef}}$	Número de Biot
$r$	Variable radial de la partícula, $m$
$r_A$	Velocidad de reacción del componente A por unidad de área superficial de catalizador $mol/m^2.s$
$r_p$	Radio de la partícula, $m$
$t$	Tiempo, $s$
$V$	Volumen del reactor, $m^3$

## LETRAS GRIEGAS

$\varepsilon$	Fracción hueca en la partícula
$\varepsilon_\mu$	Fracción volumétrica de la fase fluida
$\xi$	Radio adimensional
$\xi_c$	Radio crítico adimensional
$\Phi_0^2 = \frac{a_v k_0 r_p^2}{\varepsilon D_{ef} C_\gamma^*}$	Módulo de Thiele para una cinética de orden cero
$\Phi_M^2 = \frac{a_v k_M r_p^2}{\varepsilon D_{ef}}$	Módulo de Thiele para una cinética de Michaelis-Menten
$\psi_n = \frac{r_p^2}{\varepsilon_\mu D_{ef} \tau_R}$	Parámetro de intercambio del fluido
$\psi_p = \frac{A_{fp} k_f r_p^2}{V \varepsilon_\beta D_{ef}}$	Parámetro de intercambio fluido-partícula
$U_p$	Concentración adimensional en la partícula
$U_f$	Concentración adimensional en el fluido
$U_{in}$	Concentración adimensional en la entrada del reactor
$\theta$	Fracción de la superficie catalítica cubierta por reactivo
$\tau$	Tiempo adimensional
$\tau_R$	Tiempo de residencia en el tanque, s

## SUBÍNDICES

$A$	Referente al reactivo A
$p$	Referente a la partícula
$f$	Referente al fluido
$in$	Entrada del reactor

## BIBLIOGRAFÍA

Aris, R. (1975) "*The mathematical theory of diffusion and reaction in permeable catalysis*". Clarendon Press: Oxford. Vol 1, 1<sup>st</sup> Ed.

Carberry, J. J. (1976) "*Chemical and catalytic reaction engineering*". Mc. Graw Hill. Inc. EUA.

Chang H. N. (1982) "*Numerical calculation of effectiveness factors for the Michaelis-Menten type kinetics with high Thiele moduli*". AIChE Journal Vol. 28, No. 6, pp 1030-1032.

Chaudhari R. V., Ramachandran P.A. (1980) "*Three phase slurry reactors*". AIChE Journal Vol. 26, No. 2, pp 177-201

Chaudhari R. V., Ramachandran P.A. (1980) "*Influence of mass transfer on zero order reaction in a catalytic slurry reactor*". Ind. Eng. Chem. Fundam., 19, 201-206

Datta R., Rinker R. G. (1983) "*Transient response of three-phase slurry reactors*". Chemical Engineering Science, Vol. 39, No. 5, pp 893-901.

Do D. D., Rice R. G. (1982) "*The transient response of CSTR containing porous catalyst pellets*". Chemical Engineering Science Vol. 37, No. 10, pp 1471-1475

Levenspiel O. (2001) "*Ingeniería de las Reacciones Químicas*" Ed. Reverte S.A

Marroquín de la Rosa J. O., Morones Escobar R., Viveros García T., Ochoa Tapia J. A.(2002). "*An analytic solution to the transient diffusion-reaction problem in particles dispersed in a slurry reactor*". Chemical Engineering Science, 57, 1409-1417.

Marroquín de la Rosa J. O., Viveros García T., Ochoa Tapia J. A.(1999). “*A linear approximation method to evaluate isothermal effectiveness factors*”. Chem. Eng. Comm., Vol. 174, pp. 53-60

Murray R. S., Abellanas L. (1997) “*Formulas y tablas de matematica aplicada*”. Ed. Mc. Graw Hill. México.

Ruíz Rivapalacio D. G., Ochoa Tapia J. A., (2001) “*Comportamiento transitorio de reactores isotérmicos de suspensión con tres fases*” Borrador de tesis para maestría. UAMI

Smith J. M.(1986) “*Ingeniería de la cinética química*”. Mc. Graw Hill. Inc. México.

Szukiewicz M. K. (2000) “*New approximate model for diffusion and reaction in a porous catalyst*”. AICHE Journal Vol. 46, No. 3, pp 661-665

Szukiewicz M. K. (2002) “*An approximate model for diffusion and reaction in a porous pellet*”. Chemical Engineering Science, Vol. 57 pp 1451-1457

Towler B. F., Rice R. G. (1974) “*A note on the response of a CSTR to a spherical catalyst pellet*”. Chemical Engineering Science, Vol. 29 pp 1828-1832

Whitaker S. (1999) “*The method of volume averaging*”. Kluwer Academic Publishers.

## APÉNDICE A

### Adimensionalización

Las ecuaciones de balance de materia para el componente clave pueden escribirse como sigue:

Para la partícula:

$$\varepsilon \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} = \varepsilon D_{ef} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial r} \right) - a_v R \quad (\text{A.1})$$

Para el fluido:

$$\varepsilon_\mu \frac{\partial \langle C_\mu \rangle^\mu}{\partial t} = \frac{1}{\tau_R} \left( C_{in}(t) - \langle C_\mu \rangle^\mu \right) + \frac{A_{fp}}{V} k_f \left( \langle C_\mu \rangle^\mu \Big|_{r=r_p} - \langle C_\mu \rangle^\mu \right) \quad (\text{A.2})$$

Las ecuaciones anteriores están sujetas a las siguientes condiciones de frontera:

$$-\varepsilon D_{ef} \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial r} = k_f \left( \langle C_\mu \rangle^\mu \Big|_{r=r_p} - \langle C_\mu \rangle^\mu \right) \quad \text{en } r = r_p \quad (\text{A.3})$$

$$\langle C_\mu \rangle^\mu = \varepsilon \langle C_\gamma \rangle^\gamma \quad \text{en } r = r_p \quad (\text{A.4})$$

Las condiciones iniciales para las ecuaciones (A.1) y (A.2) son:

$$\begin{aligned} \langle C_\mu \rangle^\mu &= C_{\mu 0} & \text{en } t = 0 \\ \langle C_\gamma \rangle^\gamma &= C_{\gamma 0} & \text{para } 0 \leq r \leq r_p \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Definiendo las siguientes variables adimensionales:

$$U_f = \frac{\langle C_\mu \rangle^\mu}{\varepsilon C_\gamma^*}; \quad U_p = \frac{\langle C_\gamma \rangle^\gamma}{C_\gamma^*}; \quad \tau = t \frac{D_{ef}}{r_p^2}; \quad \xi = \frac{r}{r_p} \quad (\text{A.6})$$

Aplicando las variables adimensionales a las ecuaciones (A.1) a (A.5), se obtiene:

$$\frac{\varepsilon \varepsilon_\mu C_\gamma^* D_{ef}}{r_p^2} \frac{\partial U_f}{\partial \tau} = \frac{1}{\tau_R} \left[ \varepsilon C_\gamma^* U_{in} - \varepsilon C_\gamma^* U_f \right] + \frac{A_{fp}}{V} k_f \left[ \varepsilon C_\gamma^* U_p \Big|_{\xi=1} - \varepsilon C_\gamma^* U_f \right] \quad (\text{A.7})$$

dividiendo entre  $\varepsilon C_\gamma^*$ , y reorganizando:

$$\frac{\partial U_f}{\partial \tau} = \frac{r_p^2}{\varepsilon_\mu \tau_R D_{ef}} \left[ U_{in} - U_f \right] + \frac{A_{fp} k_f r_p^2}{D_{ef} \varepsilon_\mu V} \left[ U_p \Big|_{\xi=1} - U_f \right] \quad (\text{A.8})$$

o de otra forma

$$\frac{\partial U_f}{\partial \tau} = \varphi_n [U_{in} - U_f] + \varphi_p [U_p|_{\xi=1} - U_f] \quad (\text{A.9})$$

en donde se han definido los siguientes parámetros de intercambio:

*Parámetro de intercambio del fluido:*

$$\varphi_n = \frac{r_p^2}{\varepsilon_\mu \tau_R D_{ef}} \quad (\text{A.10})$$

y el *parámetro de intercambio fluido-partícula:*

$$\varphi_p = \frac{A_{fp} k_f r_p^2}{D_{ef} \varepsilon_\mu V} \quad (\text{A.11})$$

Sustituyendo las variables definidas anteriormente en la ecuación (A.3):

$$-\frac{\varepsilon D_{ef} C_\gamma^*}{r_p} \frac{\partial U_p}{\partial \xi} = k_f \left[ \varepsilon C_\gamma^* U_p|_{\xi=1} - \varepsilon C_\gamma^* U_f \right] \quad (\text{A.12})$$

dividiendo entre  $\varepsilon C_\gamma^*$ , y reorganizando:

$$-\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = \frac{k_f r_p}{D_{ef}} \left[ U_p|_{\xi=1} - U_f \right] \quad \text{en } \xi=1 \quad (\text{A.13})$$

o de otra manera:

$$-\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = B_i \left[ U_p|_{\xi=1} - U_f \right] \quad (\text{A.14})$$

en donde se ha definido el *número de Biot* como:

$$B_i = \frac{k_f r_p}{D_{ef}} = \frac{\text{Transporte por conveccion}}{\text{Transporte por difusion}} \quad (\text{A.15})$$

Es importante notar que en las dos adimensionalizaciones anteriores la ecuación (A.4), ya ha sido empleada.

Por otra parte, para las condiciones iniciales se tiene:

$$U_f = U_{f0} \quad \text{en } \tau = 0 \quad (\text{A.16})$$

$$U_p = U_{p0} \quad \text{en } 0 \leq \xi \leq 1 \quad (\text{A.17})$$

Finalmente, se adimensionalizará la ecuación de la partícula, para ello se consideran las dos cinéticas a estudiar.

### **ORDEN CERO**

Para este caso la ecuación (A.1) puede ser escrita como:

$$\varepsilon \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} = \varepsilon D_{ef} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial r} \right) - a_v k_0 \quad (\text{A.18})$$

Sustituyendo las variables adimensionales, se llega al siguiente resultado:

$$\frac{\varepsilon C_\gamma^* D_{ef}}{r_p^2} \frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \varepsilon D_{ef} \frac{1}{r_p^2 \xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( r_p^2 \xi^2 \frac{C_\gamma^*}{r_p} \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - a_v k_0 \quad (\text{A.19})$$

Rearreglando

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \frac{a_v k_0 r_p^2}{D_{ef} \varepsilon C_\gamma^*} \quad (\text{A.20})$$

definiendo el *módulo de Thiele* como:

$$\Phi_0^2 = \frac{a_v k_0 r_p^2}{D_{ef} \varepsilon C_\gamma^*} = \frac{\text{Velocidad de reaccion}}{\text{Velocidad de difusion}} \quad (\text{A.21})$$

Por lo que se puede escribir la ecuación diferencial de la siguiente manera:

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 \quad (\text{A.22})$$

### **Michaelis Menten**

En este caso el balance de materia para la partícula se escribe como:

$$\varepsilon \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} = \varepsilon D_{ef} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{\partial r} \right) - a_v \frac{k_M \langle C_\gamma \rangle^\gamma}{1 + K \langle C_\gamma \rangle^\gamma} \quad (\text{A.23})$$

Usando las variables expresadas anteriormente, se obtiene:

$$\frac{\varepsilon C_\gamma^* D_{ef}}{r_p^2} \frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \varepsilon D_{ef} \frac{1}{r_p^2 \xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( r_p^2 \xi^2 \frac{C_\gamma^*}{r_p} \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - a_v k_M \frac{C_\gamma^* U_p}{1 + K C_\gamma^* U_p} \quad (\text{A.24})$$

Simplificando se llega a:

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \frac{a_v k_M r_p^2}{\varepsilon D_{ef}} \frac{U_p}{1 + k_1 U_p} \quad (\text{A.25})$$

Para este caso el *módulo de Thiele* es definido como:

$$\Phi_L^2 = \frac{a_v k_M r_p^2}{\varepsilon D_{ef}} \quad (\text{A.26})$$

y agrupando la constante de adsorción con la concentración característica:

$$k_1 = KC_\gamma^* \quad (\text{A.27})$$

Por lo que se llega a la siguiente expresión que representa la ecuación diferencial adimensional para la partícula:

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) - \Phi^2 \frac{U_p}{1 + k_1 U_p} \quad (\text{A.28})$$

## APÉNDICE B

### Solución de las ecuaciones diferenciales en estado estacionario

#### Reacción en toda la partícula

Anteriormente se ha mencionado que para este caso los balances de materia para un componente clave pueden escribirse en la siguiente forma:

Para la partícula:

$$\frac{1}{\xi^2} \left[ \frac{d}{d\xi} \left( \xi^2 \frac{dU_p}{d\xi} \right) \right] - \Phi^2 = 0 \quad (\text{B.1})$$

Para el fluido:

$$\varphi_n [U_{in} - U_f] + \varphi_p [U_p|_{\xi=1} - U_f] = 0 \quad (\text{B.2})$$

Condiciones de frontera:

$$-\frac{dU_p}{d\xi} = Bi (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad \text{en } \xi = 1 \quad (\text{B.3})$$

$$U_p = \text{Finita} \quad 0 \leq \xi \leq 1 \quad (\text{B.4})$$

Integrando dos veces la ecuación (B.1) se obtiene:

$$U_p = \frac{\Phi^2}{6} \xi^2 + A + \frac{B}{\xi} \quad (\text{B.5})$$

Usando la condición de frontera (B.4) en la ecuación anterior, se llega al siguiente resultado:

$$B = 0 \quad (\text{B.6})$$

y por lo tanto:

$$U_p = \frac{\Phi^2}{6} \xi^2 + A \quad (\text{B.7})$$

En la superficie de la partícula ( $\xi = 1$ ) la ecuación (B.7) puede escribirse como:

$$U_p|_{\xi=1} = \frac{\Phi^2}{6} + A \quad (\text{B.8})$$

Por otra parte, reorganizando la ecuación del fluido para  $U_f$  permite obtener:

$$U_f = \frac{\varphi_n}{\varphi_n + \varphi_p} + \frac{\varphi_p U_p|_{\xi=1}}{\varphi_n + \varphi_p} \quad (\text{B.9})$$

Después de sustituir (B.8), (B.9) y la derivada de (B.7) en la condición de frontera dada por la ecuación (B.3), se obtiene el valor de la segunda constante, es decir:

$$A = \frac{3Bi\varphi_n U_{in} - \Phi^2 (\varphi_n + \varphi_p)}{3Bi\varphi_n} - \frac{\Phi^2}{6} \quad (B.10)$$

Al introducir (B.10) en (B.7), se obtiene la ecuación que describe el perfil de concentración para la partícula:

$$U_p = U_{in} - \frac{\Phi^2}{3Bi} \left( 1 + \frac{\varphi_p}{\varphi_n} \right) + \frac{\Phi^2}{6} (\xi^2 - 1) \quad (B.11)$$

Por otra parte, la sustitución de (B.10) en (B.8), y esta a su vez en (B.9) permite encontrar la ecuación que describe el perfil de concentración para el fluido:

$$U_f = U_{in} - \frac{\Phi^2 \varphi_p}{3Bi\varphi_n} \quad (B.12)$$

Definiendo una concentración promedio como:

$$\langle U_p \rangle = \frac{\int_0^1 U_p \xi^2 d\xi}{\int_0^1 \xi^2 d\xi} \quad (B.13)$$

Introduciendo la ecuación (B.11) en la (B.13), se obtiene, después de realizar la integración:

$$\langle U_p \rangle = U_{in} - \frac{\Phi^2}{3Bi} \left( 1 + \frac{\varphi_p}{\varphi_n} \right) - \frac{\Phi^2}{15} \quad (B.14)$$

### Agotamiento del reactivo

Para considerar el agotamiento del reactivo, es necesario cambiar la condición de frontera dada por la expresión (B.4) por la siguiente:

$$U_p = 0 \quad \text{en } \xi = \xi_c \quad (B.15)$$

La solución a la ecuación diferencial de la partícula ha sido obtenida previamente y esta dada por la ecuación (B.5). En dicha ecuación es posible evaluar la condición de frontera descrita por (B.15), de tal modo que esto conduce a:

$$B = \frac{A}{\xi_c} - \frac{\Phi^2}{6} \xi_c^2 \quad (\text{B.16})$$

Después de derivar la ecuación (B.5) con respecto a la posición y sustituirla en (B.3), además de evaluar las ecuaciones anteriores en  $\xi = 1$ , se obtiene el valor de las constantes:

$$A = \frac{(2\Phi^2 + \Phi^2 Bi - \Phi^2 Bi \xi_c^2 - 6BiU_f) \xi_c}{6(Bi \xi_c - \xi_c - Bi)} \quad (\text{B.17})$$

$$B = \frac{2\Phi^2 + \Phi^2 Bi - \Phi^2 Bi \xi_c^2 - 6BiU_f}{6(Bi \xi_c - \xi_c - Bi)} - \frac{\Phi^2}{6} \xi_c^2 \quad (\text{B.18})$$

Sustituyendo (B.17) y (B.18) en (B.5), se obtiene:

$$U_p = \frac{\Phi^2}{6} (\xi^2 - \xi_c^2) + \frac{2\Phi^2 + \Phi^2 Bi - \Phi^2 Bi \xi_c^2 - 6BiU_f}{6(Bi \xi_c - \xi_c - Bi)} \left[ 1 - \frac{\xi_c}{\xi} \right] \quad (\text{B.19})$$

Evalutando la ecuación (B.19) en  $\xi = 1$  y sustituyendola en la ecuación del fluido se llega al siguiente resultado:

$$U_f = \frac{\varphi_n U_{in}}{\varphi_n + \varphi_p} + \frac{\varphi_n}{\varphi_n + \varphi_p} \left[ \frac{\Phi^2}{6} (1 - \xi_c^2) + \frac{2\Phi^2 + \Phi^2 Bi - \Phi^2 Bi \xi_c^2 - 6BiU_f}{6(Bi \xi_c - \xi_c - Bi)} (1 - \xi_c) \right] \quad (\text{B.20})$$

La ecuación anterior puede ser rearrreglada, de tal forma que se obtiene:

$$U_f = \frac{\varphi_n U_{in}}{(\varphi_n + \varphi_p)(1 + \omega)} + \frac{\varphi_p \Phi^2 (1 - \xi_c^2)}{6(\varphi_n + \varphi_p)(1 + \omega)} + \frac{\Phi^2 (2 + Bi - Bi \xi_c^2) \omega}{6Bi(1 + \omega)} \quad (\text{B.21})$$

En donde:

$$\omega = \frac{\varphi_p}{\varphi_p + \varphi_n} \left[ \frac{Bi(1 - \xi_c)}{Bi \xi_c - \xi_c - Bi} \right] \quad (\text{B.22})$$

Si se define la concentración promedio como:

$$\langle U_p \rangle = \frac{\int_{\xi_c}^1 U_p \xi^2 d\xi}{\int_0^1 \xi^2 d\xi} \quad (\text{B.23})$$

Al sustituir el perfil para la concentración puntual en la ecuación (B.23), se encuentra la siguiente expresión para la concentración promedio:

$$\begin{aligned}
\langle U_p \rangle = & \frac{\Phi^2}{10} (1 - \xi_c^5) + \frac{(1 - \xi_c^3)}{6} \left[ -\Phi^2 \xi_c^2 + \frac{\Phi^2 (2 + Bi - Bi \xi_c^2) - 6BiU_f}{Bi \xi_c - \xi_c - Bi} \right] \\
& - \frac{\Phi^2 (2 + Bi - Bi \xi_c^2) - 6BiU_f}{4(Bi \xi_c - \xi_c - Bi)} \xi_c (1 - \xi_c^2)
\end{aligned} \tag{B.24}$$

## APÉNDICE C

### Solución de las ecuaciones diferenciales en estado cuasiestacionario

*Reacción en toda la partícula*

Para este caso el problema puede escribirse de la siguiente forma:

Para la partícula:

$$\frac{1}{\xi^2} \left[ \frac{d}{d\xi} \left( \xi^2 \frac{dU_p}{d\xi} \right) \right] - \Phi^2 = 0 \quad (\text{C.1})$$

Para el fluido:

$$\frac{dU_f}{d\tau} = \varphi_n [U_{in} - U_f] + \varphi_p [U_p|_{\xi=1} - U_f] \quad (\text{C.2})$$

Condiciones de frontera:

$$-\frac{dU_p}{d\xi} = Bi (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad \text{en } \xi = 1 \quad (\text{C.3})$$

$$U_p = \text{Finita} \quad \text{en } \xi = 0 \quad (\text{C.4})$$

Y la condición inicial es:

$$U_f = U_{f0} \quad \text{en } \tau = 0 \quad (\text{C.5})$$

La solución a la ecuación diferencial de la partícula ha sido obtenida anteriormente (estado estacionario) y a continuación se escribe:

$$U_p = \frac{\Phi^2}{6} \xi^2 + A \quad (\text{C.6})$$

En la ecuación (C.6) ya ha sido evaluada la condición de frontera dada por la ecuación (C.4). Para poder evaluar el valor de la otra constante, es necesario evaluar la ecuación (C.6) en la superficie de la partícula y la derivada de (C.6). Al sustituirlas en (C.3) se obtiene:

$$-\frac{\Phi^2}{3} = Bi \left[ \frac{\Phi^2}{6} + A \right] - BiU_f \quad (\text{C.7})$$

Despejando A:

$$A = -\frac{\Phi^2}{3Bi} - \frac{\Phi^2}{6} + U_f \quad (\text{C.8})$$

Sustituyendo (C.8) en (C.6):

$$U_p = \frac{\Phi^2}{6} \xi^2 - \frac{\Phi^2}{3Bi} - \frac{\Phi^2}{6} + U_f \quad (C.9)$$

Evaluando la ecuación (C.9) en la superficie de la partícula, es posible sustituirla en la ecuación para el fluido (C.2):

$$\frac{dU_f}{d\tau} + \varphi_n U_f = \varphi_n U_{in} - \frac{\Phi^2 \varphi_p}{3Bi} \quad (C.10)$$

La solución de la ecuación (C.10) se obtiene mediante el método de la transformada de Laplace, y esta dada por:

$$U_f = U_{f0} e^{-(\varphi_n)\tau} + \frac{\lambda}{\varphi_n} [e^{-(\varphi_n)\tau} - 1] + \varphi_n e^{-(\varphi_n)\tau} \int_0^\tau U_{in}(\beta) e^{(\varphi_n)\beta} d\beta \quad (C.11)$$

$$U_p = \frac{\Phi^2}{6} (\xi^2 - 1) - \frac{\lambda}{\varphi_p} + U_{f0} e^{-(\varphi_n)\tau} + \frac{\lambda}{\varphi_n} [e^{-(\varphi_n)\tau} - 1] + \varphi_n e^{-(\varphi_n)\tau} \int_0^\tau U_{in}(\beta) e^{(\varphi_n)\beta} d\beta \quad (C.12)$$

En las ecuaciones anteriores lambda se calcula mediante:

$$\lambda = \frac{\Phi^2 \varphi_p}{3Bi} \quad (C.13)$$

Para obtener la concentración promedio, es necesario integrar (C.12) de acuerdo a la expresión definida por (B.13). De tal modo que se obtiene:

$$\langle U_p \rangle = -\frac{\Phi^2}{15} - \frac{\lambda}{\varphi_p} + U_{f0} e^{-(\varphi_n)\tau} + \frac{\lambda}{\varphi_n} [e^{-(\varphi_n)\tau} - 1] + \varphi_n e^{-(\varphi_n)\tau} \int_0^\tau U_{in}(\beta) e^{(\varphi_n)\beta} d\beta \quad (C.14)$$

### *Agotamiento del reactivo*

Este caso se considera al cambiar la condición de frontera dada por la ecuación (C.4), por la siguiente expresión:

$$U_p = 0 \quad \text{en } \xi = \xi_c \quad (C.15)$$

Para este caso la solución a la ecuación diferencial de la partícula se escribe como:

$$U_p = \frac{\Phi^2}{6} \xi^2 - \frac{A}{\xi} + B \quad (C.16)$$

y usando la condición de frontera dada por (C.15), se obtiene:

$$B = \frac{A}{\xi_c} - \frac{\Phi^2}{6} \xi_c^2 \quad (\text{C.17})$$

Mediante la ecuación (C.3), puede obtenerse el valor de la otra constante, el cual después de algunos pasos algebraicos es:

$$A = \frac{\Phi^2 (Bi + 2 - Bi\xi_c^2) - 6BiU_f}{6(\xi_c Bi - Bi - \xi_c)} \xi_c \quad (\text{C.18})$$

Sustituyendo (C.18) en (C.17):

$$B = -\frac{\Phi^2}{6} \xi_c^2 + \frac{\Phi^2 (Bi + 2 - Bi\xi_c^2) - 6BiU_f}{6(\xi_c Bi - Bi - \xi_c)} \xi_c \quad (\text{C.19})$$

Introduciendo (C.19) y (C.18) en la ecuación (C.16) se obtiene la siguiente solución para la partícula:

$$U_p = \frac{\Phi^2}{6} (\xi^2 - \xi_c^2) + \frac{2\Phi^2 + \Phi^2 Bi - \Phi^2 Bi\xi_c^2 - 6BiU_f}{6(Bi\xi_c - \xi_c - Bi)} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_c} \right] \quad (\text{C.20})$$

Evaluando (C.20) en  $\xi = 1$ , y sustituyéndola en la ecuación del fluido, se llega a:

$$\frac{dU_f}{d\tau} = \varphi_n U_{in} + \omega - (g + \varphi_n + \varphi_p) U_f \quad (\text{C.21})$$

En donde:

$$\omega = \varphi_p \left[ \frac{\Phi^2}{6} (1 - \xi_c^2) + \frac{2\Phi^2 + \Phi^2 Bi - \Phi^2 Bi\xi_c^2}{6(Bi\xi_c - \xi_c - Bi)} (1 - \xi_c) \right] \quad (\text{C.22})$$

$$g = \frac{Bi\varphi_p (1 - \xi_c)}{(Bi\xi_c - \xi_c - Bi)} \quad (\text{C.23})$$

Mediante el método de la transformada de Laplace es posible resolver la ecuación (C.21), con lo cual, se obtiene:

$$U_f = I_{in} + U_{f0} e^{-(g+\varphi_n+\varphi_p)\tau} + \frac{\omega}{g + \varphi_n + \varphi_p} \left( 1 - e^{-(g+\varphi_n+\varphi_p)\tau} \right) \quad (\text{C.24})$$

En donde se ha definido:

$$I_{in} = \varphi_n \int_0^\tau e^{-(g+\varphi_n+\varphi_p)(\tau-\beta)} U_{in}(\beta) d\beta \quad (\text{C.25})$$

La concentración promedio para la partícula se obtiene integrando (C.20) de acuerdo a la expresión (B.23):

$$\langle U_p \rangle = \frac{\Phi^2 (1 - \xi_c^5)}{10} - \frac{\Phi^2 \xi_c^2 (1 - \xi_c^3)}{6} + \frac{\Phi^2 (Bi + 2 - Bi \xi_c^2) - 6BiU_f}{Bi \xi_c - Bi - \xi_c} \left[ \frac{1 - \xi_c^3}{6} - \frac{\xi_c (1 - \xi_c^2)}{4} \right] \quad (C.26)$$

## APÉNDICE D

### Solución de las ecuaciones diferenciales en estado transitorio

Las ecuaciones que describen el balance de materia, se expresan a continuación:

Para la partícula:

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) \right] - \Phi^2 \quad (\text{D.1})$$

Para el fluido:

$$\frac{dU_f}{d\tau} = \varphi_n [U_{in} - U_f] + \varphi_p [U_p|_{\xi=1} - U_f] \quad (\text{D.2})$$

Condiciones de frontera:

$$-\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = Bi (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad \text{en } \xi = 1 \quad (\text{D.3})$$

$$\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = 0 \quad \text{en } \xi = 0 \quad (\text{D.4})$$

Y las condiciones iniciales son:

$$U_f = U_{f0} \quad \text{en } \tau = 0 \quad (\text{D.5})$$

$$U_p = U_{p0} \quad \text{en } 0 \leq \xi \leq 1 \quad (\text{D.6})$$

Para obtener la solución a este problema se hará uso del método de la transformada de Laplace, de tal modo que al aplicar dicho operador a las ecuaciones diferenciales (D.1) y (D.2), se obtiene:

$$s\bar{U}_p - U_{p0} = \frac{1}{\xi^2} \left[ \frac{d}{d\xi} \left( \xi^2 \frac{d\bar{U}_p}{d\xi} \right) \right] - \frac{\Phi^2}{s} \quad (\text{D.7})$$

Y para el fluido:

$$s\bar{U}_f - U_{f0} = \varphi_n \bar{U}_{in} + \varphi_p \bar{U}_p|_{\xi=1} - (\varphi_n + \varphi_p) \bar{U}_f \quad (\text{D.8})$$

Realizando las operaciones indicadas en la ecuación (D.7), se puede reescribir de la siguiente forma:

$$\frac{d^2 \bar{U}_p}{d\xi^2} + \frac{2}{\xi} \frac{d\bar{U}_p}{d\xi} = s\bar{U}_p - U_{p0} + \frac{\Phi^2}{s} \quad (\text{D.9})$$

Realizando el siguiente cambio de variable:

$$\omega = s\bar{U}_p - U_{p0} + \frac{\Phi^2}{s} \quad (\text{D.10})$$

Calculando las siguientes derivadas:

$$\frac{d\omega}{d\xi} = s \frac{d\bar{U}_p}{d\xi} \quad \text{y} \quad (\text{D.11})$$

$$\frac{d^2\omega}{d\xi^2} = s \frac{d^2\bar{U}_p}{d\xi^2} \quad (\text{D.12})$$

Sustituyendo (D.10), (D.11) y (D.12) en (D.9):

$$\frac{d^2\omega}{d\xi^2} + \frac{2}{\xi} \frac{d\omega}{d\xi} - s\omega = 0 \quad (\text{D.13})$$

Una forma muy útil de resolver la ecuación (D.13), consiste en proponer el siguiente cambio de variable:

$$\omega = \frac{f(\xi)}{\xi} \quad (\text{D.14})$$

Y la primera y segunda derivada son:

$$\frac{d\omega}{d\xi} = \frac{f'}{\xi} - \frac{f}{\xi^2} \quad (\text{D.15})$$

$$\frac{d^2\omega}{d\xi^2} = \frac{f''}{\xi} - \frac{2f'}{\xi^2} + \frac{2f}{\xi^3} \quad (\text{D.16})$$

Sustituyendo (D.14), (D.15) y (D.16) en (D.13):

$$\frac{f''}{\xi} - \frac{sf}{\xi} = 0 \quad (\text{D.17})$$

Multiplicando la ecuación anterior por  $\xi$ , se obtiene:

$$f'' - sf = 0 \quad (\text{D.18})$$

La solución general a la ecuación diferencial (D.18) esta dada por:

$$f = Ae^{\sqrt{s}\xi} + Be^{-\sqrt{s}\xi} \quad (\text{D.19})$$

Para encontrar el valor de las constantes se aplicara la condición de frontera dada por la ecuación (D.4), pero antes de ser usada, es necesario aplicarle el operador de Laplace a dicha ecuación:

$$\frac{d\bar{U}_p}{d\xi} = 0 \quad \text{en } \xi = 0 \quad (\text{D.20})$$

Ya que la ecuación (D.19) es una expresión para  $f$ , es necesario cambiar la variable presente en la ecuación (D.20) a la variable antes mencionada, es decir, se puede expresar (D.20) en la siguiente forma:

$$\frac{d}{d\xi} \left( \frac{f}{\xi} \right) = 0 \quad \text{en } \xi = 0 \quad (\text{D.21})$$

Dividiendo (D.19) entre  $\xi$  y derivando con respecto a la misma variable, se obtiene:

$$\frac{d}{d\xi} \left( \frac{f}{\xi} \right) = A \frac{d}{d\xi} \left( \frac{e^{\sqrt{s}\xi}}{\xi} \right) + B \frac{d}{d\xi} \left( \frac{e^{-\sqrt{s}\xi}}{\xi} \right) \quad (\text{D.22})$$

Al derivar y aplicar la condición de frontera dada por (D.21) se obtiene:

$$A = -B \quad (\text{D.23})$$

Por lo tanto, la solución a la ecuación diferencial esta dada por:

$$f = A \left( e^{\sqrt{s}\xi} - e^{-\sqrt{s}\xi} \right) \quad (\text{D.24})$$

Usando funciones hiperbólicas, y regresando a la variable original, la ecuación (D.24) puede ser reescrita como:

$$\bar{U}_p = \frac{C \sinh(\sqrt{s}\xi)}{s\xi} + \frac{U_{p0}}{s} - \frac{\Phi^2}{s^2} \quad (\text{D.25})$$

Cuando  $\xi = 1$ , se tiene:

$$\bar{U}_p \Big|_{\xi=1} = \frac{C \sinh(\sqrt{s})}{s} + \frac{U_{p0}}{s} - \frac{\Phi^2}{s^2} \quad (\text{D.26})$$

Por otro lado, para la ecuación del fluido se tiene:

$$\bar{U}_f = \frac{\varphi_n U_{in}}{\beta} + \frac{\varphi_p}{\beta} \bar{U}_p \Big|_{\xi=1} + \frac{U_{f0}}{\beta} \quad (\text{D.27})$$

En donde:

$$\beta = s + \varphi_n + \varphi_p \quad (\text{D.28})$$

Para encontrar el valor de la otra constante, se hará uso de la condición de frontera dada por la ecuación (D.3), para lo cual se necesita la derivada de la ecuación (D.25):

$$\frac{d\bar{U}_p}{d\xi} = \frac{C}{s} \left[ \frac{\xi\sqrt{s}\text{Cosh}(\sqrt{s}\xi) - \text{Senh}(\sqrt{s}\xi)}{\xi^2} \right] \quad (\text{D.29})$$

Y al evaluar la ecuación (D.29) en  $\xi = 1$ , se obtiene:

$$\left. \frac{d\bar{U}_p}{d\xi} \right|_{\xi=1} = \frac{C}{s} \left[ \sqrt{s}\text{Cosh}(\sqrt{s}) - \text{Senh}(\sqrt{s}) \right] \quad (\text{D.30})$$

Al sustituir (D.26), (D.27) y (D.30) en (D.3), y después de algunos pasos algebraicos se obtiene:

$$C(s) = \frac{\text{Bi} \left[ s\varphi_n \bar{U}_{in} - (U_{p0} - U_{f0})s - U_{p0}\varphi_n \right]}{\sqrt{s}M(s)} + \frac{\Phi^2 \text{Bi}(s + \varphi_n)}{s\sqrt{s}M(s)} \quad (\text{D.31})$$

Ahora que se conoce el valor de la constante, puede ser sustituida en (D.25), (D.26) y (D.27), y obtener las siguientes expresiones, en el dominio de Laplace:

$$\begin{aligned} \bar{U}_p = & \underbrace{\frac{U_{p0}}{s}}_{T_1} - \underbrace{\frac{\Phi^2}{s^2}}_{T_2} + \underbrace{\frac{\text{Bi}\varphi_n}{M(s)}}_{T_3} \underbrace{\frac{\text{Senh}(\sqrt{s}\xi)}{\sqrt{s}\xi}}_{T_3} \bar{U}_{in} + \underbrace{\frac{\Phi^2 \text{Bi}(s + \varphi_n)}{s^2 M(s)}}_{T_4} \underbrace{\frac{\text{Senh}(\sqrt{s}\xi)}{\sqrt{s}\xi}}_{T_4} \\ & - \underbrace{\frac{\text{Bi} \left[ (U_{p0} - U_{f0})s + U_{p0}\varphi_n \right]}{sM(s)}}_{T_5} \underbrace{\frac{\text{Senh}(\sqrt{s}\xi)}{\sqrt{s}\xi}}_{T_5} \end{aligned} \quad (\text{D.32})$$

Y para el fluido:

$$\begin{aligned} \bar{U}_f = & \underbrace{\frac{U_{f0}}{s + \varphi_n + \varphi_p}}_{T_6} + \underbrace{\frac{\varphi_n \bar{U}_{in}}{s + \varphi_n + \varphi_p}}_{T_7} - \underbrace{\frac{\Phi^2 \varphi_p}{s^2 (s + \varphi_n + \varphi_p)}}_{T_8} + \underbrace{\frac{U_{p0}\varphi_p}{s (s + \varphi_n + \varphi_p)}}_{T_9} + \\ & \underbrace{\frac{\varphi_p \text{Bi}\varphi_n \bar{U}_{in}}{(s + \varphi_n + \varphi_p)M(s)}}_{T_{10}} \underbrace{\frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{\sqrt{s}}}_{T_{10}} + \underbrace{\frac{\Phi^2 \text{Bi}\varphi_p (s + \varphi_n)}{s^2 (s + \varphi_n + \varphi_p)M(s)}}_{T_{11}} \underbrace{\frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{\sqrt{s}}}_{T_{11}} \\ & - \underbrace{\frac{\varphi_p \text{Bi} \left[ (U_{p0} - U_{f0})s + U_{p0}\varphi_n \right]}{s (s + \varphi_n + \varphi_p)M(s)}}_{T_{12}} \underbrace{\frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{\sqrt{s}}}_{T_{12}} \end{aligned} \quad (\text{D.33})$$

En las ecuaciones anteriores, se ha definido:

$$M(s) = \left[ (s + \varphi_n)(\text{Bi} - 1) - \varphi_p \right] \frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{\sqrt{s}} + \beta \text{Cosh}(\sqrt{s}) \quad (\text{D.34})$$

Finalmente, es necesario invertir las ecuaciones (D.32) y (D.33), para obtener las soluciones buscadas en el dominio del tiempo.

### **TRANSFORMADAS INVERSAS**

#### *Ecuación de la partícula*

Mediante el uso de tablas se puede obtener directamente las antitransformadas de los dos primeros términos de la ecuación de la partícula:

Primer término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_1\} = U_{p0} \quad (D.35)$$

Segundo término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_2\} = -\Phi^2 \tau \quad (D.36)$$

Tercer término:

Para la inversión del tercer término es necesario usar el teorema de la convolución. Dicho teorema establece que:

$$\mathcal{L}^{-1}\{g(s)h(s)\} = \int_0^\tau G(\tau - \beta)H(\beta) d\beta \quad (D.37)$$

Por lo tanto:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_3\} = Bi\varphi_n \int_0^\tau U_{in}(\beta) \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{1}{M(s)} \frac{\text{Senh}(\xi\sqrt{s})}{\xi\sqrt{s}}\right\} d\beta \quad (D.38)$$

Para antitransformar el término indicado en la integral de la ecuación (D.39) se usará el método de los residuos:

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{P(s)}{Q(s)}\right\} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{P(s_n)}{Q'(s_n)} e^{s_n \tau} \quad (D.39)$$

De acuerdo a la formula anterior se seleccionará:

$$P(s) = \frac{\text{Senh}(\sqrt{s}\xi)}{\sqrt{s}\xi} \quad (D.40)$$

$$Q(s) = [(s + \varphi_n)(Bi - 1) + \varphi_p] \frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{\sqrt{s}} + (s + \varphi_n + \varphi_p) \text{Cosh}(\sqrt{s}) \quad (D.41)$$

Derivando (D.41)

$$\begin{aligned} \frac{dQ(s)}{ds} = & \text{Cosh}(\sqrt{s}) \left[ \frac{2s + (s + \varphi_n)(Bi-1) - \varphi_p}{2s} \right] \\ & + \frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{\sqrt{s}} \left[ \frac{2s(Bi-1) + s(s + \varphi_n + \varphi_p) - (s + \varphi_n)(Bi-1) + \varphi_p}{2s} \right] \end{aligned} \quad (\text{D.42})$$

Por otra parte, al graficar la ecuación (D.41) se encuentra que solo tiene raíces imaginarias, por lo cual se realiza el siguiente cambio de variable, con el objetivo de determinar la parte real:

$$\sqrt{s} = i\mu_n \quad (\text{D.43})$$

y por lo tanto:

$$s = -\mu_n^2 \quad (\text{D.44})$$

Sustituyendo (D.43) y (D.44) en (D.41) y (D.42):

$$\left[ (\varphi_n - \mu_n^2)(Bi-1) - \varphi_p \right] \frac{\text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} + (\varphi_n + \varphi_p - \mu_n^2) \text{Cos}(\mu_n) = 0 \quad (\text{D.45})$$

$$\begin{aligned} Q'(S_n) = & \text{Cos}(\mu_n) \left[ \frac{\varphi_p + 2\mu_n^2 - (\varphi_n - \mu_n^2)(Bi-1)}{2\mu_n^2} \right] + \\ & \frac{\text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \left[ \frac{2\mu_n^2(Bi-1) + \mu_n^2(\varphi_n + \varphi_p - \mu_n^2) + (\varphi_n - \mu_n^2)(Bi-1) - \varphi_p}{2\mu_n^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{D.46})$$

Introduciendo (D.45) en (D.46), se obtiene:

$$Q'(\mu_n) = \frac{D_n \text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \quad (\text{D.47})$$

En donde se ha definido:

$$D_n = Bi - 1 + \frac{A_n}{2} - \frac{B_n}{A_n} + \frac{B_n}{2\mu_n^2} \left( 1 + \frac{B_n}{A_n} \right) \quad (\text{D.48})$$

$$A_n = \varphi_n + \varphi_p - \mu_n^2 \quad (\text{D.49})$$

$$B_n = (\varphi_n - \mu_n^2)(Bi-1) - \varphi_p \quad (\text{D.50})$$

Sustituyendo (D.43) en (D.40):

$$P(\mu_n) = \frac{\text{Senh}(\mu_n \xi)}{\mu_n \xi} \quad (\text{D.51})$$

Finalmente, la transformada inversa de (D.39) es:

$$\frac{P(\mu_n)}{Q'(\mu_n)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Sen}(\mu_n \xi)}{D_n \xi \text{Sen}(\mu_n)} e^{-\mu_n^2 \tau} \quad (\text{D.52})$$

Introduciendo (D.52) en (D.38), se obtiene la inversa del término trabajado:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_3\} = \frac{Bi \varphi_n}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Sen}(\mu_n \xi)}{D_n \text{Sen}(\mu_n)} e^{-\mu_n^2 \tau} \int_0^{\tau} U_{in}(\beta) e^{\mu_n^2 \beta} d\beta \quad (\text{D.53})$$

Cuarto término:

Por el teorema de la convolución:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_4\} = \Phi^2 Bi \int_0^{\tau} \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{(s + \varphi_n) \text{Senh}(\sqrt{s} \xi)}{sM(s) \sqrt{s} \xi} \right\} d\beta \quad (\text{D.54})$$

Para poder aplicar el método de los residuos, es necesario seleccionar:

$$P(s) = (s + \varphi_n) \frac{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi)}{\sqrt{s} \xi} \quad (\text{D.55})$$

$$Q(s) = sM(s) \quad (\text{D.56})$$

A partir de la ecuación (D.56), puede notarse la existencia de los siguientes polos:

$$a) s = 0 \quad (\text{D.57})$$

$$b) M(s) = 0 \quad (\text{D.58})$$

Derivando la ecuación (D.56):

$$Q'(s) = sM'(s) + M(s) \quad (\text{D.59})$$

Evaluando (D.55) en el primer polo:

$$P(s_a) = \varphi_n \quad (\text{D.60})$$

$$Q'(s_a) = \varphi_n Bi \quad (\text{D.61})$$

Dividiendo las expresiones anteriores:

$$\frac{P(s_a)}{Q'(s_a)} = \frac{1}{Bi} \quad (\text{D.62})$$

Para el segundo conjunto de polos, se obtiene:

$$P(s_b) = (\varphi_n - \mu_n^2) \frac{\text{Sen}(\mu_n \xi)}{\mu_n \xi} \quad (\text{D.63})$$

Y para (D.59):

$$Q'(\mu_n) = \frac{-\mu_n^2 D_n \text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \quad (\text{D.64})$$

Dividiendo (D.63) entre (D.64):

$$\frac{P(s_b)}{Q'(s_b)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mu_n^2 - \varphi_n) \text{Sen}(\mu_n \xi)}{\mu_n^2 \xi D_n \text{Sen}(\mu_n)} e^{-\mu_n^2 \tau} \quad (\text{D.65})$$

Sustituyendo la suma de (D.62) y (D.65) en (D.54):

$$L^{-1}\{T_4\} = \Phi^2 \tau + \frac{\Phi^2 Bi}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mu_n^2 - \varphi_n) \text{Sen}(\mu_n \xi)}{\mu_n^2 D_n \text{Sen}(\mu_n)} \left( \frac{1 - e^{-\mu_n^2 \tau}}{\mu_n^2} \right) \quad (\text{D.66})$$

Quinto término:

Por el método de los residuos:

$$P(s) = -\left[ (U_{p0} - U_{f0}) s Bi + U_{p0} \varphi_n Bi \right] \frac{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi)}{\sqrt{s} \xi} \quad (\text{D.67})$$

Y  $Q(s)$  esta dada por la ecuación (D.56), por lo que los polos son los mismos que los obtenidos en esa ecuación. Por lo tanto, la evaluación de (D.59) y (D.67) en el polo dado por (D.57), origina las siguientes expresiones:

$$P(s_a) = -U_{p0} Bi \varphi_n \quad (\text{D.68})$$

$$Q'(s_a) = Bi \varphi_n \quad (\text{D.69})$$

Dividiendo las ecuaciones anteriores:

$$\frac{P(s_a)}{Q'(s_a)} = -U_{p0} \quad (\text{D.70})$$

Y para el segundo conjunto de polos:

$$P(s_b) = \left[ (U_{p0} - U_{f0}) \mu_n^2 Bi - U_{p0} \varphi_n Bi \right] \frac{\text{Sen}(\mu_n \xi)}{\mu_n \xi} \quad (\text{D.71})$$

$$Q'(s_b) = -\mu_n^2 \frac{D_n \text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \quad (\text{D.72})$$

Dividiendo las expresiones anteriores:

$$\frac{P(s_b)}{Q'(s_b)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{U_{p0} \varphi_n Bi - (U_{p0} - U_{f0}) \mu_n^2 Bi}{\mu_n^2 D_n \xi} \frac{Sen(\mu_n \xi)}{\mu_n \xi} e^{-\mu_n^2 \tau} \quad (D.73)$$

Sumando (D.70) y (D.73), se obtiene la inversa del quinto término:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_5\} = -U_{p0} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{U_{p0} \varphi_n Bi - (U_{p0} - U_{f0}) \mu_n^2 Bi}{\mu_n^2 D_n \xi} \frac{Sen(\mu_n \xi)}{\mu_n \xi} e^{-\mu_n^2 \tau} \quad (D.74)$$

Finalmente, la suma de (D.35), (D.36), (D.53), (D.66) y (D.74) origina la ecuación de la partícula en el dominio del tiempo:

$$U_p(\xi, \tau) = \frac{Bi}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{U_{p0} \varphi_n - (U_{p0} - U_{f0}) \mu_n^2}{D_n \mu_n^2} \frac{Sen(\mu_n \xi)}{Sen(\mu_n)} e^{-\mu_n^2 \tau} + \frac{\Phi^2 Bi}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mu_n^2 - \varphi_n}{D_n \mu_n^2} \frac{Sen(\mu_n \xi)}{Sen(\mu_n)} \left( \frac{1 - e^{-\mu_n^2 \tau}}{\mu_n^2} \right) + \frac{\varphi_n Bi}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Sen(\mu_n \xi)}{D_n Sen(\mu_n)} I_{in} \quad (D.75)$$

Ya que se ha invertido la ecuación de la partícula, se puede continuar con la inversión de la ecuación del fluido:

$$\begin{aligned} \bar{U}_f = & \underbrace{\frac{U_{f0}}{s + \varphi_n + \varphi_p}}_{T_6} + \underbrace{\frac{\varphi_n \bar{U}_{in}}{s + \varphi_n + \varphi_p}}_{T_7} - \underbrace{\frac{\Phi^2 \varphi_p}{s^2 (s + \varphi_n + \varphi_p)}}_{T_8} + \underbrace{\frac{U_{p0} \varphi_p}{s (s + \varphi_n + \varphi_p)}}_{T_9} + \\ & \underbrace{\frac{\varphi_p Bi \varphi_n \bar{U}_{in}}{(s + \varphi_n + \varphi_p) M(s)}}_{T_{10}} + \underbrace{\frac{\Phi^2 Bi \varphi_p (s + \varphi_n)}{s^2 (s + \varphi_n + \varphi_p) M(s)} \frac{Senh(\sqrt{s})}{\sqrt{s}}}_{T_{11}} \\ & - \underbrace{\frac{\varphi_p Bi [(U_{p0} - U_{f0}) s + U_{p0} \varphi_n]}{s (s + \varphi_n + \varphi_p) M(s)} \frac{Senh(\sqrt{s})}{\sqrt{s}}}_{T_{12}} \end{aligned} \quad (D.76)$$

Sexto término:

La inversión del sexto término se obtiene directamente de tablas:

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{U_{f0}}{s + \varphi_n + \varphi_p} \right\} = U_{f0} e^{-(\varphi_n + \varphi_p) \tau} \quad (D.77)$$

Séptimo término:

Para el séptimo término, se usa el teorema de la convolución:

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\varphi_n \bar{U}_{in}}{s + \varphi_n + \varphi_p} \right\} = \varphi_n e^{-(\varphi_n + \varphi_p) \tau} \int_0^{\tau} U_{in}(\gamma) e^{(\varphi_n + \varphi_p) \gamma} d\gamma \quad (D.78)$$

Octavo término:

Mediante fracciones parciales:

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{-\varphi_p \Phi^2}{s^2 (s + \varphi_p + \varphi_n)} \right\} = \frac{\varphi_p \Phi^2}{(\varphi_p + \varphi_n)^2} - \frac{\varphi_p \Phi^2}{\varphi_p + \varphi_n} \tau - \frac{\varphi_p \Phi^2}{(\varphi_p + \varphi_n)^2} e^{-(\varphi_p + \varphi_n)\tau} \quad (\text{D.79})$$

Noveno término:

Repetiendo el método de fracciones parciales:

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{U_{p0} \varphi_p}{s (s + \varphi_n + \varphi_p)} \right\} = \frac{U_{p0} \varphi_p}{\varphi_n + \varphi_p} - \frac{U_{p0} \varphi_p}{\varphi_n + \varphi_p} e^{-(\varphi_n + \varphi_p)\tau} \quad (\text{D.80})$$

Décimo término:

Para este término es necesario hacer una combinación entre el método de los residuos y el teorema de la convolución. De tal modo que se obtiene, por convolución:

$$\mathcal{L}^{-1} \{T_{10}\} = \varphi_p Bi \varphi_n \int_0^\tau U_{in}(\beta) \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{(s + \varphi_n + \varphi_p) M(s)} \frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{\sqrt{s}} \right\} d\beta \quad (\text{D.81})$$

La inversión del término que se encuentra adentro de la integral se logra mediante el método de los residuos, por lo tanto:

$$P(s) = \frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{\sqrt{s}} \quad (\text{D.82})$$

Y

$$Q(s) = (s + \varphi_n + \varphi_p) M(s) \quad (\text{D.83})$$

De la ecuación anterior se nota que presenta los siguientes polos:

$$a) s = -(\varphi_n + \varphi_p) \quad (\text{D.84})$$

$$b) M(s) = 0 \quad (\text{D.85})$$

De acuerdo al método de los residuos, la derivada de (D.82) es necesaria:

$$Q'(s) = (s + \varphi_n + \varphi_p) M'(s) + M(s) \quad (\text{D.86})$$

Usando el polo dado por (D.83):

$$Q'(s) = -\varphi_p Bi \frac{\text{Senh}\left(\sqrt{-(\varphi_p + \varphi_n)}\right)}{\sqrt{-(\varphi_p + \varphi_n)}} \quad (\text{D.87})$$

Evaluando la ecuación (D.82) en el mismo polo, se obtiene:

$$P(s) = \frac{\text{Senh}\left(\sqrt{-\varphi_n - \varphi_p}\right)}{\sqrt{-\varphi_n - \varphi_p}} \quad (\text{D.88})$$

Dividiendo (D.88) entre (D.87)

$$\frac{P(s_a)}{Q'(s_a)} = -\frac{1}{\varphi_p Bi} e^{-(\varphi_n + \varphi_p)\tau} \quad (\text{D.89})$$

Para el segundo polo se tiene:

$$P(s_b) = \frac{\text{Senh}(\mu_n)}{\mu_n} \quad (\text{D.90})$$

La derivada indicada en (D.86) ya ha sido calculada previamente, de tal modo que puede ser escrita como:

$$Q'(s_b) = \frac{A_n D_n \text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \quad (\text{D.91})$$

Dividiendo las ecuaciones anteriores:

$$\frac{P(s)}{Q'(s)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{A_n D_n} e^{-\mu_n^2 \tau} \quad (\text{D.92})$$

Sustituyendo la suma de (D.89) y (D.92) en (D.81), se obtiene:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1}\{T_{10}\} &= -\varphi_n e^{-(\varphi_n + \varphi_p)\tau} \int_0^\tau U_{in}(\beta) e^{(\varphi_n + \varphi_p)\beta} d\beta \\ &+ \varphi_n \varphi_p Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{A_n D_n} e^{-\mu_n^2 \tau} \int_0^\tau U_{in}(\beta) e^{\mu_n^2 \beta} d\beta \end{aligned} \quad (\text{D.93})$$

Onceavo término:

Por convolución, se puede escribir:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{11}\} = \Phi^2 Bi \varphi_p \int_0^\tau \mathcal{L}^{-1}\left\{ \frac{(s + \varphi_n)}{s(s + \varphi_n + \varphi_p)} M(s) \frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{\sqrt{s}} \right\} d\beta \quad (\text{D.94})$$

Para poder aplicar el método de los residuos, se selecciona:

$$P(s) = (s + \varphi_n) \frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{\sqrt{s}} \quad (\text{D.95})$$

Y

$$Q(s) = s(s + \varphi_n + \varphi_p)M(s) \quad (\text{D.96})$$

De la ecuación (D.96), se obtienen los siguientes polos:

$$a) s = 0 \quad (\text{D.97})$$

$$b) s = -(\varphi_n + \varphi_p) \quad (\text{D.98})$$

$$c) M(s) = 0 \quad (\text{D.99})$$

La primera derivada de (D.96) es:

$$Q'(s) = s(s + \varphi_p + \varphi_n)M'(s) + (s + \varphi_p + \varphi_n)M(s) + sM(s) \quad (\text{D.100})$$

Evaluando (D.95) y (D.100) en el polo dado por (D.97):

$$P(s_a) = \varphi_n \quad (\text{D.101})$$

$$Q'(s_a) = (\varphi_n + \varphi_p)\varphi_n Bi \quad (\text{D.102})$$

Dividiendo las ecuaciones anteriores:

$$\frac{P(s_a)}{Q'(s_a)} = \frac{1}{(\varphi_n + \varphi_p)Bi} \quad (\text{D.103})$$

Para el segundo polo:

$$P(s_b) = -\varphi_p \frac{\text{Senh}(\sqrt{-\varphi_n - \varphi_p})}{\sqrt{-\varphi_n - \varphi_p}} \quad (\text{D.104})$$

$$Q'(s_b) = (\varphi_p + \varphi_n)\varphi_p Bi \frac{\text{senh}(\sqrt{-\varphi_p - \varphi_n})}{\sqrt{-\varphi_p - \varphi_n}} \quad (\text{D.105})$$

Dividiendo:

$$\frac{P(s_b)}{Q'(s_b)} = \frac{-1}{(\varphi_n + \varphi_p)Bi} e^{-(\varphi_n + \varphi_p)\tau} \quad (\text{D.106})$$

Finalmente, para el tercer polo:

$$P(s_c) = (\varphi_n - \mu_n^2) \frac{\text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \quad (\text{D.107})$$

$$Q'(s_c) = -\mu_n^2 A_n D_n \frac{\text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \quad (\text{D.108})$$

Dividiendo:

$$\frac{P(s_c)}{Q'(s_c)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mu_n^2 - \varphi_n)}{\mu_n^2 A_n D_n} e^{-\mu_n^2 \tau} \quad (\text{D.109})$$

Sustituyendo la suma de (D.103), (D.106) y (D.109) en (D.94), se obtiene, después de realizar la integración:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1}\{T_{11}\} &= \frac{\Phi^2 \varphi_p}{\varphi_p + \varphi_n} \tau - \frac{\Phi^2 \varphi_p}{(\varphi_p + \varphi_n)^2} + \frac{\Phi^2 \varphi_p}{(\varphi_p + \varphi_n)^2} e^{-(\varphi_p + \varphi_n)\tau} + \\ &\Phi^2 \varphi_p Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mu_n^2 - \varphi_n)}{\mu_n^2 A_n D_n} \left( \frac{1 - e^{-\mu_n^2 \tau}}{\mu_n^2} \right) \end{aligned} \quad (\text{D.110})$$

Doceavo término:

$$P(s) = -\varphi_p Bi \left[ (U_{p0} - U_{f0})s + U_{p0} \varphi_n \right] \frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{\sqrt{s}} \quad (\text{D.111})$$

Y

$$Q(s) = s(s + \varphi_n + \varphi_p)M(s) \quad (\text{D.112})$$

Anteriormente se ha trabajado con el mismo término (denominador), por lo tanto, en esta parte solo se hará la evaluación:

$$P(s_a) = -\varphi_p Bi U_{p0} \varphi_n \quad (\text{D.113})$$

$$Q'(s_a) = (\varphi_n + \varphi_p) \varphi_n Bi \quad (\text{D.114})$$

Dividiendo:

$$\frac{P(s_a)}{Q'(s_a)} = \frac{-\varphi_p U_{p0}}{(\varphi_n + \varphi_p)} \quad (\text{D.115})$$

Para el segundo polo:

$$P(s_b) = \varphi_p Bi \left[ (U_{p0} - U_{f0})(\varphi_n + \varphi_p) - U_{p0} \varphi_n \right] \frac{\text{Senh}\left(\sqrt{-(\varphi_n + \varphi_p)}\right)}{\sqrt{-(\varphi_n + \varphi_p)}} \quad (\text{D.116})$$

$$Q'(s_b) = (\varphi_p + \varphi_n) \varphi_p Bi \frac{\sinh(\sqrt{-\varphi_p - \varphi_n})}{\sqrt{-\varphi_p - \varphi_n}} \quad (D.117)$$

Dividiendo las ecuaciones anteriores:

$$\frac{P(s_b)}{Q'(s_b)} = \frac{[\varphi_p U_{p0} - U_{f0} (\varphi_n + \varphi_p)]}{(\varphi_n + \varphi_p)} e^{-(\varphi_n + \varphi_p)\tau} \quad (D.118)$$

Para el tercer polo:

$$P(s_c) = \varphi_p Bi [(U_{p0} - U_{f0}) \mu_n^2 - U_{p0} \varphi_n] \frac{\text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \quad (D.119)$$

$$Q'(s_c) = -\mu_n^2 A_n D_n \frac{\text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n} \quad (D.120)$$

Dividiendo:

$$\frac{P(s_c)}{Q'(s_c)} = \varphi_p Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{U_{p0} \varphi_n - (U_{p0} - U_{f0}) \mu_n^2}{\mu_n^2 A_n D_n} e^{-\mu_n^2 \tau} \quad (D.121)$$

Sumando (D.115), (D.118) y (D.121):

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1}\{T_{12}\} &= -\frac{\varphi_p U_{p0}}{\varphi_n + \varphi_p} + \frac{\varphi_p U_{p0}}{\varphi_n + \varphi_p} e^{-(\varphi_n + \varphi_p)\tau} - U_{f0} e^{-(\varphi_n + \varphi_p)\tau} \\ &+ \varphi_p Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_n U_{p0} - (U_{p0} - U_{f0}) \mu_n^2}{\mu_n^2 A_n D_n} e^{-\mu_n^2 \tau} \end{aligned} \quad (D.122)$$

Finalmente, la suma de (D.77)-(D.80), (D.93), (D.110) y (D.122) permite obtener la ecuación del fluido:

$$\begin{aligned} U_f(\tau) &= \varphi_p \varphi_n Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{I_{in}}{A_n D_n} + \Phi^2 \varphi_p Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mu_n^2 - \varphi_n}{A_n D_n \mu_n^2} \left( \frac{1 - e^{-\mu_n^2 \tau}}{\mu_n^2} \right) \\ &+ \varphi_p Bi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_n U_{p0} - (U_{p0} - U_{f0}) \mu_n^2}{\mu_n^2 A_n D_n} e^{-\mu_n^2 \tau} \end{aligned} \quad (D.123)$$

## FENÓMENO DE AGOTAMIENTO

Cuando se presenta fenómeno de agotamiento, la solución a la ecuación diferencial de la partícula se expresa como:

$$s\bar{U}_p - U_{p0} + \frac{\Phi^2}{s} = C_1 \frac{\text{Senh}(\sqrt{s}\xi)}{\xi} + C_2 \frac{\text{Cosh}(\sqrt{s}\xi)}{\xi} \quad (\text{D.124})$$

Resolviendo para la concentración de la partícula:

$$\bar{U}_p = C_1 \frac{\text{Senh}(\sqrt{s}\xi)}{\xi s} + C_2 \frac{\text{Cosh}(\sqrt{s}\xi)}{\xi s} + \frac{U_{p0}}{s} - \frac{\Phi^2}{s^2} \quad (\text{D.125})$$

Recordando que la condición de frontera a usar es:

$$U_p = 0 \quad \text{en} \quad \xi = \xi_c \quad (\text{D.126})$$

Empleando (D.126) en (D.125) se llega al siguiente resultado:

$$C_1 = \left[ \frac{\Phi^2 \xi_c}{s} - U_{p0} \xi_c - C_2 \text{Cosh}(\sqrt{s}\xi_c) \right] \frac{1}{\text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c)} \quad (\text{D.127})$$

Para poder usar la condición de frontera (D.3) es necesario derivar (D.125) con respecto a la posición:

$$\frac{d\bar{U}_p}{d\xi} = \frac{C_1}{s} \left[ \frac{\xi \sqrt{s} \text{Cosh}(\sqrt{s}\xi) - \text{Senh}(\sqrt{s}\xi)}{\xi^2} \right] + \frac{C_2}{s} \left[ \frac{\xi \sqrt{s} \text{Senh}(\sqrt{s}\xi) - \text{Cosh}(\sqrt{s}\xi)}{\xi^2} \right] \quad (\text{D.128})$$

Evaluando la derivada anterior en la superficie de la partícula:

$$\left. \frac{d\bar{U}_p}{d\xi} \right|_{\xi=1} = \frac{C_1}{s} \left[ \sqrt{s} \text{Cosh}(\sqrt{s}) - \text{Senh}(\sqrt{s}) \right] + \frac{C_2}{s} \left[ \sqrt{s} \text{Senh}(\sqrt{s}) - \text{Cosh}(\sqrt{s}) \right] \quad (\text{D.129})$$

Y (D.125) queda como:

$$\bar{U}_p \Big|_{\xi=1} = C_1 \frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{s} + C_2 \frac{\text{Cosh}(\sqrt{s})}{s} + \frac{U_{p0}}{s} - \frac{\Phi^2}{s^2} \quad (\text{D.130})$$

Sustituyendo (D.129) y (D.130) en la condición de frontera (D.3) se llega al siguiente resultado:

$$\begin{aligned} C_1 \left[ (1 - B_i) \text{Senh}(\sqrt{s}) - \sqrt{s} \text{Cosh}(\sqrt{s}) \right] &= -\alpha B_i - \bar{U}_f B_i s \\ -C_2 \left[ (1 - B_i) \text{Cosh}(\sqrt{s}) - \sqrt{s} \text{Senh}(\sqrt{s}) \right] & \end{aligned} \quad (\text{D.131})$$

En donde:

$$\alpha = \frac{\Phi^2}{s} - U_{p0} \quad (\text{D.132})$$

Introduciendo (D.127) en (D.131) y resolviendo para  $C_2$ :

$$C_2 = \frac{-B_i(\alpha + \bar{U}_f s) \text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c) - \xi_c \alpha \left[ (1-B_i) \text{Senh}(\sqrt{s}) - \sqrt{s} \text{Cosh}(\sqrt{s}) \right]}{\text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c) \left[ (1-B_i) \text{Cosh}(\sqrt{s}) - \sqrt{s} \text{Senh}(\sqrt{s}) \right] - \text{Cosh}(\sqrt{s}\xi_c) \left[ (1-B_i) \text{Senh}(\sqrt{s}) - \sqrt{s} \text{Cosh}(\sqrt{s}) \right]} \quad (\text{D.133})$$

Sustituyendo (D.133) en (D.127) permite encontrar el valor de la otra constante:

$$C_1 = \frac{\alpha \xi_c}{\text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c)} + \frac{\text{Cosh}(\sqrt{s}\xi_c)}{\text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c)} \times \left\{ \frac{B_i(\alpha + \bar{U}_f s) \text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c) + \xi_c \alpha \left[ (1-B_i) \text{Senh}(\sqrt{s}) - \sqrt{s} \text{Cosh}(\sqrt{s}) \right]}{\text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c) \left[ (1-B_i) \text{Cosh}(\sqrt{s}) - \sqrt{s} \text{Senh}(\sqrt{s}) \right] - \text{Cosh}(\sqrt{s}\xi_c) \left[ (1-B_i) \text{Senh}(\sqrt{s}) - \sqrt{s} \text{Cosh}(\sqrt{s}) \right]} \right\} \quad (\text{D.134})$$

Para obtener la expresión para la concentración, se sustituye (D.133) y (D.134) en (D.130), de tal modo que después algunos pasos algebraicos se obtiene:

$$\bar{U}_p = -\frac{\alpha}{s} + \frac{\alpha \xi_c \text{Senh}(\sqrt{s}\xi)}{s \xi \text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c)} + \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{s \xi \text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c)} \times \left[ \frac{B_i(\alpha + \bar{U}_f s) \text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c) + \xi_c \alpha \left[ (1-B_i) \text{Senh}(\sqrt{s}) - \sqrt{s} \text{Cosh}(\sqrt{s}) \right]}{(1-B_i) \text{Senh}[\sqrt{s}(\xi_c - 1)] + \sqrt{s} \text{Cosh}[\sqrt{s}(\xi_c - 1)]} \right] \quad (\text{D.135})$$

Evaluando (D.135) en la superficie de la partícula:

$$\bar{U}_p \Big|_{\xi=1} = -\frac{\alpha}{s} + \frac{\alpha \xi_c \text{Senh}(\sqrt{s})}{s \text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c)} + \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(1 - \xi_c)]}{s \text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c)} \left[ \frac{B_i(\alpha + \bar{U}_f s) \text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c) + \xi_c \alpha \left[ (1-B_i) \text{Senh}(\sqrt{s}) - \sqrt{s} \text{Cosh}(\sqrt{s}) \right]}{(1-B_i) \text{Senh}[\sqrt{s}(\xi_c - 1)] + \sqrt{s} \text{Cosh}[\sqrt{s}(\xi_c - 1)]} \right] \quad (\text{D.136})$$

Por otra parte, la ecuación del fluido ya ha sido trabajada anteriormente (D.8), de tal modo que sustituyendo (D.136) en dicha ecuación, se obtiene:

$$\begin{aligned}
\bar{U}_f = & \underbrace{U_{f0} \frac{H(s)}{M(s)}}_{\tilde{r}_1} + \underbrace{\varphi_n \bar{U}_{in} \frac{H(s)}{M(s)}}_{\tilde{r}_2} + \underbrace{\frac{\varphi_p \xi_c \Phi^2}{s^2} \frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)} \frac{H(s)}{M(s)}}_{\tilde{r}_3} - \underbrace{\frac{\varphi_p \xi_c U_{p0}}{s} \frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)} \frac{H(s)}{M(s)}}_{\tilde{r}_4} \\
& - \underbrace{\frac{\varphi_p \xi_c \Phi^2}{s^2} \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(1-\xi_c)]}{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)} \frac{G(s)}{M(s)}}_{\tilde{r}_5} + \underbrace{\frac{\varphi_p \xi_c U_{p0}}{s} \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(1-\xi_c)]}{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)} \frac{G(s)}{M(s)}}_{\tilde{r}_5} - \underbrace{\frac{\varphi_p \Phi^2}{s^2} \frac{H(s)}{M(s)}}_{\tilde{r}_7} \\
& + \underbrace{\frac{\varphi_p U_{p0}}{s} \frac{H(s)}{M(s)}}_{\tilde{r}_8} + \underbrace{\frac{\varphi_p B_i \Phi^2}{s^2} \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(1-\xi_c)]}{M(s)}}_{\tilde{r}_9} - \underbrace{\frac{\varphi_p B_i U_{p0}}{s} \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(1-\xi_c)]}{M(s)}}_{\tilde{r}_{10}}
\end{aligned} \tag{D.137}$$

En donde se ha definido:

$$H(s) = (1 - B_i) \text{Senh}[\sqrt{s}(\xi_c - 1)] + \sqrt{s} \text{Cosh}[\sqrt{s}(\xi_c - 1)] \tag{D.138}$$

$$G(s) = (1 - B_i) \text{Senh}(\sqrt{s}) - \sqrt{s} \text{Cosh}(\sqrt{s}) \tag{D.139}$$

$$M(s) = [(B_i - 1)(s + \varphi_n) - \varphi_p] \text{Senh}[\sqrt{s}(1 - \xi_c)] - \beta \sqrt{s} \text{Cosh}[\sqrt{s}(\xi_c - 1)] \tag{D.140}$$

### **TRANSFORMADAS INVERSAS**

Debido a que las ecuaciones (D.135) y (D.137) están en el dominio de Laplace, es necesario antitransformarla para llevarla al dominio del tiempo.

#### Término 1

Antes de invertir este término, es necesario reorganizarlo en la siguiente forma:

$$T_1 = U_{f0} \frac{H(s)/\sqrt{s}}{M(s)/\sqrt{s}} \tag{D.141}$$

Dada la forma de la ecuación (D.141), se usará el método de los residuos. Para lo cual se define:

$$P(s) = U_{f0} \frac{H(s)}{\sqrt{s}} \tag{D.142}$$

$$Q(s) = \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \tag{D.143}$$

Mediante el método enunciado anteriormente es necesario obtener los polos de (D.143):

$$Q(s) = [(B_i - 1)(s + \varphi_n) - \varphi_p] \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(1 - \xi_c)]}{\sqrt{s}} - (s + \varphi_n + \varphi_p) \text{Cosh}[\sqrt{s}(\xi_c - 1)] \quad (\text{D.144})$$

Haciendo uso de identidades trigonometricas, se puede escribir (D.144) como:

$$-\frac{(s + \varphi_n + \varphi_p)}{[(B_i - 1)(s + \varphi_n) - \varphi_p]} = \frac{\tan h[\sqrt{s}(1 - \xi_c)]}{\sqrt{s}} \quad (\text{D.145})$$

Realizando el cambio de variable dado por (D.43):

$$-\frac{(\varphi_n + \varphi_p - \mu_n^2)}{[(B_i - 1)(\varphi_n - \mu_n^2) - \varphi_p]} = \frac{\tan h[\mu_n(1 - \xi_c)]}{\mu_n} \quad (\text{D.146})$$

Por otra parte, es necesario encontrar la derivada de (D.144) con respecto a  $s$ :

$$Q'(s) = C_n \frac{\text{Sen}[\mu_n(1 - \xi_c)]}{\mu_n} \quad (\text{D.147})$$

En donde:

$$C_n = B_i - 1 + \frac{A_n(1 - \xi_c)}{2} + \frac{B_n}{2\mu_n^2} - \frac{B_n}{A_n} \left[ 1 - \frac{B_n(1 - \xi_c)}{2\mu_n^2} \right] \quad (\text{D.148})$$

Y  $A_n, B_n$  estan dadas por (D.49) y (D.50). Por otra parte, desarrollando (D.142) y evaluandola en el polo dado por (D.43):

$$P(s) = U_{f_0} \left[ \frac{(1 - B_i) \text{Sen}[\mu_n(\xi_c - 1)]}{\mu_n} + \text{Cos}[\mu_n(\xi_c - 1)] \right] \quad (\text{D.149})$$

Dividiendo (D.149) entre (D.147):

$$L^{-1}\{T_1\} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{U_{f_0} \left\{ (1 - B_i) \text{Sen}[\mu_n(\xi_c - 1)] + \mu_n \text{Cos}[\mu_n(\xi_c - 1)] \right\}}{C_n \text{Sen}[\mu_n(1 - \xi_c)]} e^{-\mu_n^2 \tau} \quad (\text{D.150})$$

Término 2:

$$T_2 = \varphi_n \frac{H(s)/\sqrt{s}}{M(s)/\sqrt{s}} \bar{U}_{in} \quad (\text{D.151})$$

Mediante el teorema de la convolución, se puede escribir:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_2\} = \varphi_n \int_0^{\tau} \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{H(s)/\sqrt{s}}{M(s)/\sqrt{s}} \right\} U_{in}(\gamma) d\gamma \quad (\text{D.152})$$

El término a invertir indicado en (D.152) fue antitransformado anteriormente, de tal modo que para este caso se obtiene:

$$L^{-1}\{T_2\} = \varphi_n \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1-B_i) \text{Sen}[\mu_n(\xi_c-1)] + \mu_n \text{Cos}[\mu_n(\xi_c-1)]}{C_n \text{Sen}[\mu_n(1-\xi_c)]} e^{-\mu_n^2 \tau} \int_0^{\tau} U_{in}(\gamma) e^{\mu_n^2 \gamma} d\gamma \quad (\text{D.153})$$

Término 3

$$T_3 = \frac{\varphi_p \xi_c \Phi^2}{s^2} \frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)} \frac{H(s)/\sqrt{s}}{M(s)/\sqrt{s}} \quad (\text{D.154})$$

Por medio del teorema de la convolución es posible obtener:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_3\} = \varphi_p \xi_c \Phi^2 \int_0^{\tau} \mathcal{L}^{-1}\left\{ \frac{1}{s} \frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)} \frac{H(s)/\sqrt{s}}{M(s)/\sqrt{s}} \right\} d\gamma \quad (\text{D.155})$$

Mediante el método de los residuos se puede invertir el término indicado en la integral, para esto se define:

$$P(s) = \frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{\sqrt{s}} \frac{H(s)}{\sqrt{s}} \quad (\text{D.156})$$

$$Q(s) = s \frac{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)}{\sqrt{s}} \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \quad (\text{D.157})$$

La ecuación (D.157) presenta los siguientes polos:

$$a) s = 0 \quad (\text{D.158})$$

$$b) \frac{M(s)}{\sqrt{s}} = 0 \quad (\text{D.159})$$

$$c) \frac{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)}{\sqrt{s}} = 0 \quad (\text{D.160})$$

Derivando (D.157) con respecto a  $s$ :

$$Q'(s) = s \frac{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)}{\sqrt{s}} \frac{d}{ds} \left( \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \right) + \frac{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)}{\sqrt{s}} \frac{M(s)}{\sqrt{s}} + \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \left[ \frac{\xi_c \text{Cosh}(\sqrt{s} \xi_c)}{2} - \frac{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)}{2\sqrt{s}} \right] \quad (\text{D.161})$$

La evaluación de (D.156) y (D.161) en el polo dado por (D.158), lleva a:

$$P(s) = (1 - B_i)(\xi_c - 1) + 1 \quad (D.162)$$

$$Q'(s) = \xi_c \left\{ \left[ \varphi_n (B_i - 1) - \varphi_p \right] (1 - \xi_c) + \varphi_n + \varphi_p \right\} \quad (D.163)$$

Dividiendo:

$$\frac{P(s_a)}{Q'(s_a)} = \frac{(1 - B_i)(\xi_c - 1) + 1}{\xi_c \left\{ \left[ \varphi_n (B_i - 1) - \varphi_p \right] (1 - \xi_c) + \varphi_n + \varphi_p \right\}} \quad (D.164)$$

Para el segundo polo, las raíces están dadas por (D.43). Al aplicarlas a (D.156) y (D.161) se obtiene:

$$\frac{P(s_b)}{Q'(s_b)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Sen}(\mu_n) \left\{ (1 - B_i) \text{Sen}[\mu_n (\xi_c - 1)] + \mu_n \text{Cos}[\mu_n (\xi_c - 1)] \right\}}{-\mu_n^2 C_n \text{Sen}(\mu_n \xi_c) \text{Sen}[\mu_n (1 - \xi_c)]} e^{-\mu_n^2 \tau} \quad (D.165)$$

Finalmente se analizó el polo dado por (D.160). Realizando el siguiente cambio de variable:

$$\sqrt{s} = i\lambda_n \quad (D.166)$$

por lo tanto:

$$\text{Senh}(\lambda_n \xi_c) = 0 \quad (D.167)$$

en donde:

$$\lambda_n = \frac{n\pi}{\xi_c} \quad n=1,2,3... \quad (D.168)$$

Dividiendo (D.156) entre (D.161), después de ser evaluadas en el tercer polo:

$$\begin{aligned} & \frac{P(s_c)}{Q'(s_c)} \\ &= \frac{2\text{Sen}(\lambda_n) \left\{ (1 - B_i) \text{Sen}[\lambda_n (\xi_c - 1)] + \lambda_n \text{Cos}[\lambda_n (\xi_c - 1)] \right\}}{\lambda_n \xi_c \text{Cos}(\lambda_n \xi_c) \left\{ \left[ (\varphi_n - \lambda_n^2) (B_i - 1) - \varphi_p \right] \text{Sen}[\lambda_n (1 - \xi_c)] + \lambda_n (\varphi_p + \varphi_n - \lambda_n^2) \text{Cos}[\lambda_n (\xi_c - 1)] \right\}} e^{-\lambda_n^2 \tau} \end{aligned} \quad (D.169)$$

Sumando (D.164), (D.165) y (D.169) se obtiene la inversa de este término:

$$\begin{aligned}
L^{-1}\{T_3\} &= \frac{\varphi_p \Phi^2 [(1-B_i)(\xi_c - 1) + 1]}{[\varphi_n (B_i - 1) - \varphi_p](1 - \xi_c) + \varphi_n + \varphi_p} \tau \\
&+ \varphi_p \xi_c \Phi^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Sen}(\mu_n) \{ (1-B_i) \text{Sen}[\mu_n(\xi_c - 1)] + \mu_n \text{Cos}[\mu_n(\xi_c - 1)] \}}{-\mu_n^2 C_n \text{Sen}(\mu_n \xi_c) \text{Sen}[\mu_n(1 - \xi_c)]} \int_0^{\tau} e^{-\mu_n^2 \gamma} d\gamma \\
&+ \frac{2\varphi_p \Phi^2 \text{Sen}(\lambda_n) \{ (1-B_i) \text{Sen}[\lambda_n(\xi_c - 1)] + \lambda_n \text{Cos}[\lambda_n(\xi_c - 1)] \}}{\lambda_n \text{Cos}(\lambda_n \xi_c) \{ [(\varphi_n - \lambda_n^2)(B_i - 1) - \varphi_p] \text{Sen}[\lambda_n(1 - \xi_c)] + \lambda_n(\varphi_p + \varphi_n - \lambda_n^2) \text{Cos}[\lambda_n(\xi_c - 1)] \}} \int_0^{\tau} e^{-\lambda_n^2 \gamma} d\gamma
\end{aligned} \tag{D.170}$$

Término 4

$$T_4 = -\frac{\varphi_p \xi_c U_{p0}}{s} \frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)} \frac{H(s)/\sqrt{s}}{M(s)/\sqrt{s}} \tag{D.171}$$

Para aplicar el método de los residuos se escoge:

$$P(s) = -\varphi_p \xi_c U_{p0} \frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{\sqrt{s}} \frac{H(s)}{\sqrt{s}} \tag{D.172}$$

$$Q(s) = s \frac{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)}{\sqrt{s}} \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \tag{D.173}$$

Debido a que la ecuación anterior presenta los polos dados por (D.158)-(D.160), se empezará evaluando para (D.158):

$$\frac{P(s_a)}{Q'(s_a)} = \frac{-\varphi_p U_{p0} [(1-B_i)(\xi_c - 1) + 1]}{[\varphi_n (B_i - 1) - \varphi_p](1 - \xi_c) + \varphi_n + \varphi_p} \tag{D.174}$$

Para (D.159):

$$\frac{P(s_b)}{Q'(s_b)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_p \xi_c U_{p0} \text{Sen}(\mu_n) \{ (1-B_i) \text{Sen}[\mu_n(\xi_c - 1)] + \mu_n \text{Cos}[\mu_n(\xi_c - 1)] \}}{\mu_n^2 C_n \text{Sen}(\mu_n \xi_c) \text{Sen}[\mu_n(1 - \xi_c)]} e^{-\mu_n^2 \tau} \tag{D.175}$$

Y para (D.160):

$$\begin{aligned}
&\frac{P(s_c)}{Q'(s_c)} \\
&= \frac{-2\varphi_p U_{p0} \text{Sen}(\lambda_n) \{ (1-B_i) \text{Sen}[\lambda_n(\xi_c - 1)] + \lambda_n \text{Cos}[\lambda_n(\xi_c - 1)] \}}{\lambda_n \text{Cos}(\lambda_n \xi_c) \{ [(\varphi_n - \lambda_n^2)(B_i - 1) - \varphi_p] \text{Sen}[\lambda_n(1 - \xi_c)] + \lambda_n(\varphi_p + \varphi_n - \lambda_n^2) \text{Cos}[\lambda_n(\xi_c - 1)] \}} e^{-\lambda_n^2 \tau}
\end{aligned} \tag{D.176}$$

Sumando (D.174)-(D.176):

$$L^{-1}\{T_4\} = \frac{-\varphi_p U_{p0} [(1-B_i)(\xi_c - 1) + 1]}{[\varphi_n (B_i - 1) - \varphi_p] (1 - \xi_c) + \varphi_n + \varphi_p}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_p \xi_c U_{p0} \text{Sen}(\mu_n) \left\{ (1-B_i) \text{Sen}[\mu_n (\xi_c - 1)] + \mu_n \text{Cos}[\mu_n (\xi_c - 1)] \right\}}{\mu_n^2 C_n \text{Sen}(\mu_n \xi_c) \text{Sen}[\mu_n (1 - \xi_c)]} e^{-\mu_n^2 \tau}$$

$$\frac{2\varphi_p U_{p0} \text{Sen}(\lambda_n) \left\{ (1-B_i) \text{Sen}[\lambda_n (\xi_c - 1)] + \lambda_n \text{Cos}[\lambda_n (\xi_c - 1)] \right\}}{\lambda_n \text{Cos}(\lambda_n \xi_c) \left\{ [\varphi_n - \lambda_n^2] (B_i - 1) - \varphi_p \right\} \text{Sen}[\lambda_n (1 - \xi_c)] + \lambda_n (\varphi_p + \varphi_n - \lambda_n^2) \text{Cos}[\lambda_n (\xi_c - 1)]} e^{-\lambda_n^2 \tau} \quad (\text{D.177})$$

Término 5

$$T_5 = \frac{\varphi_p \xi_c \Phi^2}{s^2} \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(1 - \xi_c)]}{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)} \frac{G(s)/\sqrt{s}}{M(s)/\sqrt{s}} \quad (\text{D.178})$$

Por medio del teorema de la convolución:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_5\} = \varphi_p \xi_c \Phi^2 \int_0^\tau \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{s} \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(1 - \xi_c)]}{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)} \frac{G(s)/\sqrt{s}}{M(s)/\sqrt{s}} \right\} d\gamma \quad (\text{D.179})$$

Mediante el método de los residuos se obtiene para cada uno de los polos:

$$P(s_a) = -B_i (1 - \xi_c) \quad (\text{D.180})$$

$$P(s_b) = \frac{\text{Sen}[\mu_n (1 - \xi_c)]}{\mu_n} \left[ \frac{(1 - B_i) \text{Sen}(\mu_n) - \mu_n \text{Cos}(\mu_n)}{\mu_n} \right] \quad (\text{D.181})$$

$$P(s_c) = \frac{\text{Sen}[\lambda_n (1 - \xi_c)]}{\lambda_n} \left[ \frac{(1 - B_i) \text{Sen}(\lambda_n) - \lambda_n \text{Cos}(\lambda_n)}{\lambda_n} \right] \quad (\text{D.182})$$

Dividiendo (D.180) entre (D.163):

$$\frac{P(s_a)}{Q'(s_a)} = \frac{-B_i (1 - \xi_c)}{\xi_c \left\{ [\varphi_n (B_i - 1) - \varphi_p] (1 - \xi_c) + \varphi_n + \varphi_p \right\}} \quad (\text{D.183})$$

Del mismo modo para el segundo polo:

$$\frac{P(s_b)}{Q'(s_b)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 - B_i) \text{Sen}(\mu_n) + \mu_n \text{Cos}(\mu_n)}{-\mu_n^2 C_n \text{Sen}(\mu_n \xi_c)} e^{-\mu_n^2 \tau} \quad (\text{D.184})$$

Y para el tercero:

$$\frac{P(s_c)}{Q'(s_c)} = \frac{2\text{Sen}[\lambda_n(1-\xi_c)]\{(1-B_i)\text{Sen}(\lambda_n)-\lambda_n\text{Cos}(\lambda_n)\}}{\lambda_n\xi_c\text{Cos}(\lambda_n\xi_c)\{[(\varphi_n-\lambda_n^2)(B_i-1)-\varphi_p]\text{Sen}[\lambda_n(1-\xi_c)]+\lambda_n(\varphi_p+\varphi_n-\lambda_n^2)\text{Cos}[\lambda_n(\xi_c-1)]\}} e^{-\lambda_n^2\tau} \quad (\text{D.185})$$

Sumando las tres ecuaciones anteriores y sustituyendola en (D.179):

$$\begin{aligned} L^{-1}\{T_5\} &= \frac{-B_i\varphi_p\Phi^2(1-\xi_c)}{[\varphi_n(B_i-1)-\varphi_p](1-\xi_c)+\varphi_n+\varphi_p}\tau \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_p\xi_c\Phi^2[(1-B_i)\text{Sen}(\mu_n)-\mu_n\text{Cos}(\mu_n)]}{-\mu_n^2C_n\text{Sen}(\mu_n\xi_c)} \int_0^\tau e^{-\mu_n^2\gamma} d\gamma \\ &+ \frac{2\varphi_p\Phi^2\text{Sen}[\lambda_n(1-\xi_c)]\{(1-B_i)\text{Sen}(\lambda_n)-\lambda_n\text{Cos}(\lambda_n)\}}{\lambda_n\text{Cos}(\lambda_n\xi_c)\{[(\varphi_n-\lambda_n^2)(B_i-1)-\varphi_p]\text{Sen}[\lambda_n(1-\xi_c)]+\lambda_n(\varphi_p+\varphi_n-\lambda_n^2)\text{Cos}[\lambda_n(\xi_c-1)]\}} \int_0^\tau e^{-\lambda_n^2\gamma} d\gamma \end{aligned} \quad (\text{D.186})$$

### Término 6

$$T_6 = -\frac{\varphi_p\xi_c U_{p0}}{s} \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(1-\xi_c)]}{\text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c)} \frac{G(s)/\sqrt{s}}{M(s)/\sqrt{s}} \quad (\text{D.187})$$

Para el polo dado por (D.158) se obtiene:

$$\frac{P(s_a)}{Q'(s_a)} = \frac{\varphi_p B_i U_{p0} (1-\xi_c)}{[\varphi_n(B_i-1)-\varphi_p](1-\xi_c)+\varphi_n+\varphi_p} \quad (\text{D.188})$$

Para el polo dado por (D.159) se tiene:

$$\frac{P(s_b)}{Q'(s_b)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_p\xi_c U_{p0} [(1-B_i)\text{Sen}(\mu_n)-\mu_n\text{Cos}(\mu_n)]}{\mu_n^2 C_n \text{Sen}(\mu_n\xi_c)} e^{-\mu_n^2\tau} \quad (\text{D.189})$$

Y para (D.160):

$$\frac{P(s_c)}{Q'(s_c)} = \frac{-2\varphi_p U_{p0} \text{Sen}[\lambda_n(1-\xi_c)]\{(1-B_i)\text{Sen}(\lambda_n)-\lambda_n\text{Cos}(\lambda_n)\}}{\lambda_n\text{Cos}(\lambda_n\xi_c)\{[(\varphi_n-\lambda_n^2)(B_i-1)-\varphi_p]\text{Sen}[\lambda_n(1-\xi_c)]+\lambda_n(\varphi_p+\varphi_n-\lambda_n^2)\text{Cos}[\lambda_n(\xi_c-1)]\}} e^{-\lambda_n^2\tau} \quad (\text{D.190})$$

Sumando los tres últimos términos:

$$\begin{aligned}
\frac{P(s_c)}{Q'(s_c)} &= \frac{\varphi_p B_i U_{p0} (1 - \xi_c)}{[\varphi_n (B_i - 1) - \varphi_p] (1 - \xi_c) + \varphi_n + \varphi_p} \\
&+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_p \xi_c U_{p0} [(1 - B_i) \text{Sen}(\mu_n) - \mu_n \text{Cos}(\mu_n)]}{\mu_n^2 C_n \text{Sen}(\mu_n \xi_c)} e^{-\mu_n^2 \tau} \\
&- \frac{-2\varphi_p U_{p0} \text{Sen}[\lambda_n (1 - \xi_c)] \{ (1 - B_i) \text{Sen}(\lambda_n) - \lambda_n \text{Cos}(\lambda_n) \}}{\lambda_n \text{Cos}(\lambda_n \xi_c) \left\{ [(\varphi_n - \lambda_n^2) (B_i - 1) - \varphi_p] \text{Sen}[\lambda_n (1 - \xi_c)] + \lambda_n (\varphi_p + \varphi_n - \lambda_n^2) \text{Cos}[\lambda_n (\xi_c - 1)] \right\}} e^{-\lambda_n^2 \tau}
\end{aligned} \tag{D.191}$$

### Término 7

$$T_7 = -\frac{\varphi_p \Phi^2}{s^2} \frac{H(s)/\sqrt{s}}{M(s)/\sqrt{s}} \tag{D.192}$$

Mediante convolución se puede escribir:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_7\} = -\varphi_p \Phi^2 \int_0^\tau \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{1}{s} \frac{H(s)/\sqrt{s}}{M(s)/\sqrt{s}}\right\} d\gamma \tag{D.193}$$

Para poder hacer uso del método de los residuos se define:

$$P(s) = \frac{H(s)}{\sqrt{s}} \tag{D.194}$$

$$Q(s) = s \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \tag{D.195}$$

La ecuación (D.195) presenta los siguientes polos:

$$a) s = 0 \tag{D.196}$$

$$b) \frac{M(s)}{\sqrt{s}} = 0 \tag{D.197}$$

La derivada de (D.195) se escribe a continuación:

$$Q'(s) = s \frac{d}{ds} \left( \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \right) + \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \tag{D.198}$$

Aplicando el polo dado por (D.196) a (D.194) y (D.198) y dividiendo:

$$\frac{P(s_a)}{Q'(s_a)} = \frac{(B_i - 1)(1 - \xi_c) + 1}{[\varphi_n (B_i - 1) - \varphi_p] (1 - \xi_c) + \varphi_n + \varphi_p} \tag{D.199}$$

Mientras que para el segundo polo se obtiene:

$$\frac{P(s_b)}{Q'(s_b)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1-B_i)Sen[\mu_n(\xi_c-1)] + \mu_n Cos[\mu_n(\xi_c-1)]}{-\mu_n^2 C_n Sen[\mu_n(1-\xi_c)]} e^{-\mu_n^2 \tau} \quad (D.200)$$

Sumando (D.199) y (D.200), y sustituyendo el resultado en (D.193):

$$L^{-1}\{T_7\} = \frac{-\varphi_p \Phi^2 [(B_i-1)(1-\xi_c)+1]}{[\varphi_n(B_i-1)-\varphi_p](1-\xi_c)+\varphi_n+\varphi_p} \tau + \varphi_p \Phi^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1-B_i)Sen[\mu_n(\xi_c-1)] + \mu_n Cos[\mu_n(\xi_c-1)]}{\mu_n^2 C_n Sen[\mu_n(1-\xi_c)]} \int_0^{\tau} e^{-\mu_n^2 \gamma} d\gamma \quad (D.201)$$

### Término 8

$$T_8 = \frac{\varphi_p U_{p0}}{s} \frac{H(s)/\sqrt{s}}{M(s)/\sqrt{s}} \quad (D.202)$$

Seleccionando:

$$P(s) = \varphi_p U_{p0} \frac{H(s)}{\sqrt{s}} \quad (D.203)$$

$$Q(s) = s \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \quad (D.204)$$

Para el primer polo se obtiene:

$$\frac{P(s_a)}{Q'(s_a)} = \frac{\varphi_p U_{p0} [(B_i-1)(1-\xi_c)+1]}{[\varphi_n(B_i-1)-\varphi_p](1-\xi_c)+\varphi_n+\varphi_p} \quad (D.205)$$

Y para el segundo:

$$\frac{P(s_b)}{Q'(s_b)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_p U_{p0} \{(1-B_i)Sen[\mu_n(\xi_c-1)] + \mu_n Cos[\mu_n(\xi_c-1)]\}}{-\mu_n^2 C_n Sen[\mu_n(1-\xi_c)]} e^{-\mu_n^2 \tau} \quad (D.206)$$

Sumando (D.205) y (D.206) se obtiene:

$$L^{-1}\{T_8\} = \frac{\varphi_p U_{p0} [(B_i-1)(1-\xi_c)+1]}{[\varphi_n(B_i-1)-\varphi_p](1-\xi_c)+\varphi_n+\varphi_p} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_p U_{p0} \{(1-B_i)Sen[\mu_n(\xi_c-1)] + \mu_n Cos[\mu_n(\xi_c-1)]\}}{-\mu_n^2 C_n Sen[\mu_n(1-\xi_c)]} e^{-\mu_n^2 \tau} \quad (D.207)$$

### Término 9

$$T_9 = \frac{\varphi_p B_i \Phi^2}{s^2} \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(1-\xi_c)]}{M(s)} \quad (\text{D.208})$$

Mediante el teorema de la convolución se puede escribir:

$$L^{-1}\{T_9\} = \varphi_p B_i \Phi^2 \int_0^\tau L^{-1}\left\{\frac{1}{s} \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(1-\xi_c)]}{M(s)}\right\} d\gamma \quad (\text{D.209})$$

El término dentro de la integral tiene la misma forma en el denominador que los dos invertidos anteriormente, esto implica que los polos son los mismos. Por tal motivo se empezará evaluando para el primer polo, esto produce el siguiente resultado:

$$\frac{P(s_a)}{Q'(s_a)} = \frac{(1-\xi_c)}{[\varphi_n(B_i-1) - \varphi_p](1-\xi_c) + \varphi_n + \varphi_p} \quad (\text{D.210})$$

y para el segundo polo:

$$\frac{P(s_b)}{Q'(s_b)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{-1}{\mu_n^2 C_n} e^{-\mu_n^2 \tau} \quad (\text{D.211})$$

Sumando las dos ecuaciones anteriores se llega al siguiente resultado:

$$L^{-1}\{T_9\} = \frac{\varphi_p B_i \Phi^2 (1-\xi_c)}{[\varphi_n(B_i-1) - \varphi_p](1-\xi_c) + \varphi_n + \varphi_p} \tau + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{-\varphi_p B_i \Phi^2}{\mu_n^2 C_n} \int_0^\tau e^{-\mu_n^2 \gamma} d\gamma \quad (\text{D.212})$$

### Término 10

$$T_{10} = -\frac{\varphi_p B_i U_{p0}}{s} \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(1-\xi_c)]}{M(s)} \quad (\text{D.213})$$

Ya que el denominador es el mismo que el término anterior, para este caso la inversión lleva al siguiente término.

$$L^{-1}\{T_{10}\} = \frac{-\varphi_p B_i U_{p0} (1-\xi_c)}{[\varphi_n(B_i-1) - \varphi_p](1-\xi_c) + \varphi_n + \varphi_p} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_p B_i U_{p0}}{\mu_n^2 C_n} e^{-\mu_n^2 \tau} \quad (\text{D.214})$$

Finalmente sumando los términos (D.150), (D.153), (D.170), (D.177), (D.186), (D.191), (D.201), (D.207), (D.212) y (D.214) se llega a la ecuación para el fluido:

$$\begin{aligned}
U_F(\tau) = & \varphi_p B_i \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\mu_n^2 C_n} \theta_\mu - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Delta^\mu \varphi_p}{\mu_n^2 C_n \text{Sen}[\mu_n(1-\xi_c)]} \theta_\mu \\
& + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Delta^\mu}{C_n \text{Sen}[\mu_n(1-\xi_c)]} \left( U_{f_0} e^{-\mu_n^2 \tau} + \varphi_n e^{-\mu_n^2 \tau} \int_0^\tau U_{in}(\gamma) e^{\mu_n^2 \gamma} d\gamma \right) \\
& + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_p \xi_c \Delta^\mu \text{Sen}(\mu_n)}{\mu_n^2 C_n \text{Sen}(\mu_n \xi_c) \text{Sen}[\mu_n(1-\xi_c)]} \theta_\mu \\
& + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_p \xi_c [(1-B_i) \text{Sen}(\mu_n) - \mu_n \text{Cos}(\mu_n)]}{C_n \mu_n^2 \text{Sen}(\mu_n \xi_c)} \theta_\mu \\
& - \frac{2\varphi_p}{\lambda_n \text{Cos}(\lambda_n \xi_c)} \left\{ \frac{\text{Sen}(\lambda_n) \Delta^\lambda + \text{Sen}[\lambda_n(1-\xi_c)] [(1-B_i) \text{Sen}(\lambda_n) - \lambda_n \text{Cos}(\lambda_n)]}{[(\varphi_n - \lambda_n^2)(B_i - 1) - \varphi_p] \text{Sen}[\lambda_n(1-\xi_c)] + \lambda_n (\varphi_n + \varphi_p - \lambda_n^2) \text{Cos}[\lambda_n(\xi_c - 1)]} \right\} \theta_\lambda
\end{aligned} \tag{D.215}$$

En donde:

$$\Delta^{\delta_n} = (1-B_i) \text{Sen}[\delta_n(\xi_c - 1)] + \delta_n \text{Cos}[\delta_n(\xi_c - 1)] \quad \delta = \mu, \lambda \tag{D.216}$$

$$\theta_{\delta_n} = U_{p_0} e^{-\delta_n \tau} - \Phi^2 \int_0^\tau e^{-\delta_n \gamma} d\gamma \tag{D.217}$$

## INVERSIÓN DE LA ECUACIÓN DE LA PARTÍCULA

Para la inversión de la ecuación de la partícula, se tiene que sustituir la expresión del fluido, de tal modo que el resultado es el siguiente:

$$\begin{aligned}
 \bar{U}_p = & -\frac{\alpha}{s} + \underbrace{\frac{\alpha\xi_c \text{Senh}(\sqrt{s}\xi)}{s\xi \text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c)}}_{T_{12}} + \underbrace{\frac{\alpha B_i \text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{s\xi H(s)}}_{T_{13}} + \underbrace{\frac{\alpha\xi_c \text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{s\xi \text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c)}}_{T_{14}} \frac{G(s)}{H(s)} \\
 & + \underbrace{\frac{B_i U_{f0} \text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{\xi M(s)}}_{T_{15}} + \underbrace{\frac{B_i \varphi_n \text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{\xi M(s)}}_{T_{16}} \bar{U}_{in} + \underbrace{\frac{B_i \varphi_p \xi_c \Phi^2 \text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)] \text{Senh}(\sqrt{s})}{\xi s^2 \text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c) M(s)}}_{T_{17}} \\
 & - \underbrace{\frac{B_i \varphi_p \xi_c U_{p0} \text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)] \text{Senh}(\sqrt{s})}{\xi s \text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c) M(s)}}_{T_{18}} + \underbrace{\frac{B_i \varphi_p \xi_c \Phi^2 \text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)] \text{Senh}[\sqrt{s}(1 - \xi_c)]}{\xi s^2 \text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c) H(s) M(s)}}_{T_{19}} \\
 & - \underbrace{\frac{B_i \varphi_p \xi_c U_{p0} \text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)] \text{Senh}[\sqrt{s}(1 - \xi_c)]}{\xi s \text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c) H(s) M(s)}}_{T_{20}} - \underbrace{\frac{B_i \varphi_p \Phi^2 \text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{\xi s^2 M(s)}}_{T_{21}} + \underbrace{\frac{B_i \varphi_p U_{p0} \text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{\xi s M(s)}}_{T_{22}} \\
 & + \underbrace{\frac{B_i^2 \varphi_p \Phi^2 \text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)] \text{Senh}[\sqrt{s}(1 - \xi_c)]}{\xi s^2 H(s) M(s)}}_{T_{23}} - \underbrace{\frac{B_i^2 \varphi_p U_{p0} \text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)] \text{Senh}[\sqrt{s}(1 - \xi_c)]}{\xi s H(s) M(s)}}_{T_{24}}
 \end{aligned} \tag{D.218}$$

### Término 11

La inversión del término 11 puede realizarse directamente de tablas:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{11}\} = U_{p0} - \Phi^2 \tau \tag{D.219}$$

### Término 12

Del mismo modo, para el término 12:

$$\mathcal{L}^{-1}\{T_{12}\} = \Phi^2 \tau - U_{p0} + \frac{2\xi_c}{\xi\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \left( \frac{\Phi \xi_c}{\pi n} \right)^2 \left( 1 - e^{-\left(\frac{n\pi}{\xi_c}\right)^2 \tau} \right) - U_{p0} e^{-\left(\frac{n\pi}{\xi_c}\right)^2 \tau} \right] \frac{(-1)^n}{n} \text{Sen}\left(\frac{n\pi\xi}{\xi_c}\right) \tag{D.220}$$

### Término 13:

Al realizar las multiplicaciones indicadas se obtienen los dos términos siguientes:

$$T_{13} = \frac{\Phi^2 B_i \text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{s^2 \xi H(s)} - \frac{B_i U_{p0} \text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{s \xi H(s)} \tag{D.221}$$

Por medio del teorema de la convolución, el primer término de (D.221) puede escribirse como sigue:

$$L^{-1} \left\{ \frac{\Phi^2 B_i \operatorname{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{s^2 \xi H(s)} \right\} = \frac{\Phi^2 B_i}{\xi} \int_0^\tau L^{-1} \left\{ \frac{1 \operatorname{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{s H(s)} \right\} d\gamma \quad (D.222)$$

El término dentro de la integral puede ser invertido mediante el teorema de los residuos, por lo tanto:

$$P(s) = \frac{\operatorname{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{\sqrt{s}} \quad (D.223)$$

$$Q(s) = s \frac{H(s)}{\sqrt{s}} \quad (D.224)$$

Y la derivada de (D.224) es:

$$Q'(s) = s \frac{d}{ds} \left( \frac{H(s)}{\sqrt{s}} \right) + \frac{H(s)}{\sqrt{s}} \quad (D.225)$$

A partir de la ecuación (D.224) se nota la presencia de los siguientes polos:

$$a) s = 0 \quad (D.226)$$

$$b) \frac{H(s)}{\sqrt{s}} = 0 \quad (D.227)$$

A continuación se procederá a obtener la derivada de  $\frac{H(s)}{\sqrt{s}}$ :

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \left( \frac{H(s)}{\sqrt{s}} \right) &= \frac{(1-B_i)(\xi_c - 1)}{2s} \operatorname{Cosh}[\sqrt{s}(\xi_c - 1)] \\ &+ \frac{\operatorname{Senh}[\sqrt{s}(\xi_c - 1)]}{2\sqrt{s}} \left[ (\xi_c - 1) - \frac{(1-B_i)}{s} \right] \end{aligned} \quad (D.228)$$

Por otra parte, es necesario encontrar las raíces de la expresión dada por (D.227):

$$\frac{H(s)}{\sqrt{s}} = \frac{(1-B_i) \operatorname{Senh}[\sqrt{s}(\xi_c - 1)]}{\sqrt{s}} + \operatorname{Cosh}[\sqrt{s}(\xi_c - 1)] = 0 \quad (D.229)$$

Rearreglando:

$$\frac{-1}{(1-B_i)} = \frac{\tanh[\sqrt{s}(\xi_c - 1)]}{\sqrt{s}} \quad (D.230)$$

Y mediante el siguiente cambio de variable:

$$\sqrt{s} = i\nu_n \quad (\text{D.231})$$

Por lo tanto, se puede escribir (D.230) como:

$$\frac{-1}{(1-B_i)} = \frac{\tan[v_n(\xi_c - 1)]}{\nu_n} \quad (\text{D.232})$$

Sustituyendo (D.231) en (D.229):

$$\frac{d}{ds} \left( \frac{H(s)}{\sqrt{s}} \right) = \frac{E_n}{2\nu_n^2} \frac{\text{Sen}[v_n(\xi_c - 1)]}{\nu_n} \quad (\text{D.233})$$

Y el coeficiente esta dado por:

$$E_n = (1-B_i) + (\xi_c - 1)\nu_n^2 + (1-B_i)^2(\xi_c - 1) \quad (\text{D.234})$$

Aplicando (D.226) a (D.223) y (D.225) se llega a lo siguiente después de dividir las:

$$\frac{P(s_a)}{Q'(s_a)} = \frac{\xi - \xi_c}{(1-B_i)(\xi_c - 1) + 1} \quad (\text{D.235})$$

Y para el segundo polo (D.227):

$$\frac{P(s_b)}{Q'(s_b)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{-2\text{Sen}[v_n(\xi - \xi_c)]}{E_n \text{Sen}[v_n(\xi_c - 1)]} e^{-\nu_n^2 \tau} \quad (\text{D.236})$$

Sumando (D.235) y (D.236) y sustituyendo la expresión resultante en (D.222):

$$\frac{B_i \Phi^2}{\xi} \left[ \frac{\xi - \xi_c}{(1-B_i)(\xi_c - 1) + 1} \tau - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Sen}[v_n(\xi - \xi_c)]}{E_n \text{Sen}[v_n(\xi_c - 1)]} \int_0^{\tau} e^{-\nu_n^2 \gamma} d\gamma \right] \quad (\text{D.237})$$

Debido a la semejanza entre los términos de la ecuación (D.222), la inversión del segundo término de dicha ecuación produce un término analogo al de (D.237):

$$-\frac{B_i U_{p0}}{\xi} \left[ \frac{\xi - \xi_c}{(1-B_i)(\xi_c - 1) + 1} - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Sen}[v_n(\xi - \xi_c)]}{E_n \text{Sen}[v_n(\xi_c - 1)]} e^{-\nu_n^2 \tau} \right] \quad (\text{D.238})$$

por lo tanto, el proceso de inversión lleva a la obtención de la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} L^{-1}\{T_{13}\} &= \frac{B_i(\xi - \xi_c)}{\xi[(1-B_i)(\xi_c - 1) + 1]} (\Phi^2 \tau - U_{p0}) \\ &- 2 \frac{B_i}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Sen}[v_n(\xi - \xi_c)]}{E_n \text{Sen}[v_n(\xi_c - 1)]} \left( \Phi^2 \int_0^{\tau} e^{-\nu_n^2 \gamma} d\gamma - U_{p0} e^{-\nu_n^2 \tau} \right) \end{aligned} \quad (\text{D.239})$$

Término 14

$$T_{14} = \frac{\alpha \xi_c}{s \xi} \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)} \frac{G(s)}{H(s)} \quad (\text{D.240})$$

Sustituyendo (D.132) en (D.240):

$$T_{14} = \frac{\xi_c \Phi^2}{s^2 \xi} \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)} \frac{G(s)}{H(s)} - \frac{U_{p0} \xi_c}{s \xi} \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)} \frac{G(s)}{H(s)} \quad (\text{D.241})$$

Se empezará invirtiendo el primer término de (D.241), de tal modo que mediante el teorema de la convolución se llega a lo siguiente:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\xi_c \Phi^2}{s^2 \xi} \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)} \frac{G(s)}{H(s)} \right\} = \\ \frac{\xi_c \Phi^2}{\xi} \int_0^\tau \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{s} \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)} \frac{G(s)}{H(s)} \right\} d\gamma \end{aligned} \quad (\text{D.242})$$

Para poder aplicar el método de los residuos, es necesario definir:

$$P(s) = \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{\sqrt{s}} \frac{G(s)}{\sqrt{s}} \quad (\text{D.243})$$

$$Q(s) = s \frac{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)}{\sqrt{s}} \frac{H(s)}{\sqrt{s}} \quad (\text{D.244})$$

Los polos de (D.244) son:

$$a) s = 0 \quad (\text{D.245})$$

$$b) \frac{H(s)}{\sqrt{s}} = 0 \quad (\text{D.246})$$

$$c) \frac{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)}{\sqrt{s}} = 0 \quad (\text{D.247})$$

Derivando (D.244) con respecto a s:

$$Q'(s) = s \frac{\text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c)}{\sqrt{s}} \frac{d}{ds} \left( \frac{H(s)}{\sqrt{s}} \right) + \frac{\text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c)}{\sqrt{s}} \frac{H(s)}{\sqrt{s}} + \frac{H(s)}{2\sqrt{s}} \left[ \xi_c \text{Cosh}(\sqrt{s}\xi_c) - \frac{\text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c)}{\sqrt{s}} \right] \quad (\text{D.248})$$

Aplicando (D.245) a (D.243) y (D.248):

$$\frac{P(s_a)}{Q'(s_a)} = \frac{-B_i(\xi - \xi_c)}{\xi_c [(1-B_i)(\xi_c - 1) + 1]} \quad (\text{D.249})$$

Para el segundo polo:

$$\frac{P(s_b)}{Q'(s_b)} = \frac{2\text{Sen}[\lambda_n(\xi - \xi_c)]}{\xi_c \text{Cos}(\lambda_n \xi_c)} \left\{ \frac{(1-B_i)\text{Sen}(\lambda_n) - \lambda_n \text{Cos}(\lambda_n)}{(1-B_i)\text{Sen}[\lambda_n(\xi_c - 1)] + \lambda_n \text{Cos}[\lambda_n(\xi_c - 1)]} \right\} e^{-\lambda_n^2 \tau} \quad (\text{D.250})$$

Y para el tercero:

$$\frac{P(s_c)}{Q'(s_c)} = \frac{-2\text{Sen}[v_n(\xi - \xi_c)]}{E_n \text{Sen}(v_n \xi_c)} \left\{ \frac{(1-B_i)\text{Sen}(v_n) - v_n \text{Cos}(v_n)}{\text{Sen}[v_n(\xi_c - 1)]} \right\} e^{-v_n^2 \tau} \quad (\text{D.251})$$

Sustituyendo la suma de las tres últimas expresiones en la ecuación (D.242):

$$\begin{aligned} L^{-1} \left\{ \frac{\xi_c \Phi^2 \text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{s^2 \xi \text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c)} \frac{G(s)}{H(s)} \right\} &= \frac{\Phi^2}{\xi} \left\{ \frac{-B_i(\xi - \xi_c)}{\xi_c [(1-B_i)(\xi_c - 1) + 1]} \right\} \tau \\ &+ \frac{2\text{Sen}[\lambda_n(\xi - \xi_c)]}{\xi_c \text{Cos}(\lambda_n \xi_c)} \left\{ \frac{(1-B_i)\text{Sen}(\lambda_n) - \lambda_n \text{Cos}(\lambda_n)}{(1-B_i)\text{Sen}[\lambda_n(\xi_c - 1)] + \lambda_n \text{Cos}[\lambda_n(\xi_c - 1)]} \right\} \int_0^\tau e^{-\lambda_n^2 \gamma} d\gamma \quad (\text{D.252}) \\ &- \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2\text{Sen}[v_n(\xi - \xi_c)]}{E_n \text{Sen}(v_n \xi_c)} \left\{ \frac{(1-B_i)\text{Sen}(v_n) - v_n \text{Cos}(v_n)}{\text{Sen}[v_n(\xi_c - 1)]} \right\} \int_0^\tau e^{-v_n^2 \gamma} d\gamma \end{aligned}$$

De manera analoga se obtiene la inversa para el segundo término de (D.241).

Finalmente se llega a la inversión del término trabajado:

$$\begin{aligned} L^{-1} \{T_{14}\} &= \frac{-B_i(\xi - \xi_c)}{\xi [(1-B_i)(\xi_c - 1) + 1]} (\Phi^2 \tau - U_{p0}) \\ &+ \frac{2\text{Sen}[\lambda_n(\xi - \xi_c)]}{\xi \text{Cos}(\lambda_n \xi_c)} \left\{ \frac{(1-B_i)\text{Sen}(\lambda_n) - \lambda_n \text{Cos}(\lambda_n)}{(1-B_i)\text{Sen}[\lambda_n(\xi_c - 1)] + \lambda_n \text{Cos}[\lambda_n(\xi_c - 1)]} \right\} (\Phi^2 \int_0^\tau e^{-\lambda_n^2 \gamma} d\gamma - U_{p0} e^{-\lambda_n^2 \tau}) \\ &- \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2\xi_c \text{Sen}[v_n(\xi - \xi_c)]}{E_n \xi \text{Sen}(v_n \xi_c)} \left\{ \frac{(1-B_i)\text{Sen}(v_n) - v_n \text{Cos}(v_n)}{\text{Sen}[v_n(\xi_c - 1)]} \right\} (\Phi^2 \int_0^\tau e^{-v_n^2 \gamma} d\gamma - U_{p0} e^{-v_n^2 \tau}) \quad (\text{D.253}) \end{aligned}$$

Término 15

$$T_{15} = \frac{B_i U_{f0}}{\xi} \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{M(s)} \quad (\text{D.254})$$

Para la aplicación del método de los residuos se necesita:

$$P(s) = \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{\sqrt{s}} \quad (\text{D.255})$$

$$Q(s) = \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \quad (\text{D.256})$$

Las raíces de (D.256) ya fueron obtenidas anteriormente

$$Q'(s) = C_n \frac{\text{Sen}[\mu_n(1 - \xi_c)]}{\mu_n} \quad (\text{D.257})$$

Al aplicar los polos a (D.255) y (D.257), se obtiene:

$$L^{-1}\{T_{15}\} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{B_i U_{f0}}{\xi C_n} \frac{\text{Sen}[\mu_n(\xi - \xi_c)]}{\text{Sen}[\mu_n(1 - \xi_c)]} e^{-\mu_n^2 \tau} \quad (\text{D.258})$$

Término 16

$$T_{16} = \frac{B_i \varphi_n}{\xi} \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{M(s)} \bar{U}_{in} \quad (\text{D.259})$$

Por el teorema de la convolución:

$$L^{-1}\{T_{16}\} = \frac{B_i \varphi_n}{\xi} \int_0^{\tau} L^{-1}\left\{\frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{M(s)}\right\} U_{in}(\gamma) d\gamma \quad (\text{D.260})$$

Se puede notar que el término a invertir dentro de la integral ya fue trabajado anteriormente, por lo tanto se obtiene el siguiente resultado:

$$L^{-1}\{T_{16}\} = \frac{B_i \varphi_n}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Sen}[\mu_n(\xi - \xi_c)]}{C_n \text{Sen}[\mu_n(1 - \xi_c)]} e^{-\mu_n^2 \tau} \int_0^{\tau} U_{in}(\gamma) e^{\mu_n^2 \gamma} d\gamma \quad (\text{D.261})$$

Término 17

$$T_{17} = \frac{B_i \varphi_p \xi_c \Phi^2}{\xi s^2} \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{\text{Senh}(\sqrt{s} \xi_c)} \frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{M(s)} \quad (\text{D.262})$$

Aplicando convolución:

$$L^{-1}\{T_{17}\} = \frac{B_i \varphi_p \xi_c \Phi^2}{\xi} \int_0^\tau L^{-1} \left\{ \frac{1}{s} \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{\text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c)} \frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{M(s)} \right\} d\gamma \quad (\text{D.263})$$

Para usar el método de los residuos se define:

$$P(s) = \frac{\text{Senh}[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)]}{\sqrt{s}} \frac{\text{Senh}(\sqrt{s})}{\sqrt{s}} \quad (\text{D.264})$$

$$Q(s) = s \frac{\text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c)}{\sqrt{s}} \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \quad (\text{D.265})$$

La derivada con respecto a s de (D.265) esta dada por:

$$Q'(s) = s \frac{\text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c)}{\sqrt{s}} \frac{d}{ds} \left( \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \right) + \frac{\text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c)}{\sqrt{s}} \frac{M(s)}{\sqrt{s}} + \frac{M(s)}{2\sqrt{s}} \left[ \xi_c \text{Cosh}(\sqrt{s}\xi_c) - \frac{\text{Senh}(\sqrt{s}\xi_c)}{\sqrt{s}} \right] \quad (\text{D.266})$$

Los polos de (D.265) estan dados por las expresiones (D.158)-(D.160). Por lo tanto al evaluar (D.264) y (D.266) para el primer polo se obtiene:

$$\frac{P(s_a)}{Q'(s_a)} = \frac{\xi - \xi_c}{\xi_c \{ [\varphi_n (B_i - 1) - \varphi_p] (1 - \xi_c) + \varphi_n + \varphi_p \}} \quad (\text{D.267})$$

Para el segundo polo se obtiene:

$$\frac{P(s_b)}{Q'(s_b)} = \frac{\text{Sen}(\lambda_n)}{\xi_c \lambda_n \text{Cos}(\lambda_n \xi_c)} \left\{ \frac{\text{Sen}[\lambda_n(\xi - \xi_c)] e^{-\lambda_n^2 \tau}}{[(\varphi_n - \lambda_n^2)(B_i - 1) - \varphi_p] \text{Sen}[\lambda_n(1 - \xi_c)] + \lambda_n(\varphi_p + \varphi_n - \lambda_n^2) \text{Cos}[\lambda_n(\xi_c - 1)]} \right\} \quad (\text{D.268})$$

Y para el tercer polo:

$$\frac{P(s_c)}{Q'(s_c)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Sen}[\mu_n(\xi - \xi_c)] \text{Sen}(\mu_n)}{-\mu_n^2 C_n \text{Sen}(\mu_n \xi_c) \text{Sen}[\mu_n(1 - \xi_c)]} e^{-\mu_n^2 \tau} \quad (\text{D.269})$$

Sustituyendo la suma de (D.267)-(D.269) en (D.263):

$$\begin{aligned}
L^{-1}\{T_{17}\} &= \frac{B_i \varphi_p \Phi^2 (\xi - \xi_c)}{\xi \left\{ [\varphi_n (B_i - 1) - \varphi_p] (1 - \xi_c) + \varphi_n + \varphi_p \right\}} \tau \\
&+ \frac{Sen(\lambda_n)}{\xi \lambda_n Cos(\lambda_n \xi_c)} \left\{ \frac{B_i \varphi_p \Phi^2 Sen[\lambda_n (\xi - \xi_c)]}{\left[ (\varphi_n - \lambda_n^2) (B_i - 1) - \varphi_p \right] Sen[\lambda_n (1 - \xi_c)] + \lambda_n (\varphi_p + \varphi_n - \lambda_n^2) Cos[\lambda_n (\xi_c - 1)]} \right\} \int_0^\tau e^{-\lambda_n^2 \gamma} d\gamma \\
&- \frac{B_i \varphi_p \xi_c \Phi^2}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Sen[\mu_n (\xi - \xi_c)]}{\mu_n^2 C_n Sen(\mu_n \xi_c)} \frac{Sen(\mu_n)}{Sen[\mu_n (1 - \xi_c)]} \int_0^\tau e^{-\mu_n^2 \gamma} d\gamma
\end{aligned} \tag{D.270}$$

Término 18

$$T_{18} = -\frac{B_i \varphi_p \xi_c U_{p0}}{\xi s} \frac{Senh[\sqrt{s} (\xi - \xi_c)]}{Senh(\sqrt{s} \xi_c)} \frac{Senh(\sqrt{s})}{M(s)} \tag{D.271}$$

Tomando la inversa del término anterior:

$$L^{-1}\{T_{18}\} = -\frac{B_i \varphi_p \xi_c U_{p0}}{\xi} L^{-1} \left\{ \frac{1}{s} \frac{Senh[\sqrt{s} (\xi - \xi_c)]}{Senh(\sqrt{s} \xi_c)} \frac{Senh(\sqrt{s})}{M(s)} \right\} \tag{D.272}$$

Dado que el término anterior ha sido antitransformado previamente, se tiene:

$$\begin{aligned}
L^{-1}\{T_{18}\} &= \frac{-B_i \varphi_p U_{p0} (\xi - \xi_c)}{\xi \left\{ [\varphi_n (B_i - 1) - \varphi_p] (1 - \xi_c) + \varphi_n + \varphi_p \right\}} \\
&- \frac{B_i U_{p0} \varphi_p Sen(\lambda_n)}{\xi \lambda_n Cos(\lambda_n \xi_c)} \left\{ \frac{Sen[\lambda_n (\xi - \xi_c)]}{\left[ (\varphi_n - \lambda_n^2) (B_i - 1) - \varphi_p \right] Sen[\lambda_n (1 - \xi_c)] + \lambda_n (\varphi_p + \varphi_n - \lambda_n^2) Cos[\lambda_n (\xi_c - 1)]} \right\} e^{-\lambda_n^2 \tau} \\
&+ \frac{B_i \varphi_p \xi_c U_{p0}}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Sen[\mu_n (\xi - \xi_c)]}{\mu_n^2 C_n Sen(\mu_n \xi_c)} \frac{Sen(\mu_n)}{Sen[\mu_n (1 - \xi_c)]} e^{-\mu_n^2 \tau}
\end{aligned} \tag{D.273}$$

Término 19 y 20:

$$T_{19} = \frac{B_i \varphi_p \xi_c \Phi^2}{\xi s^2} \frac{Senh[\sqrt{s} (\xi - \xi_c)]}{Senh(\sqrt{s} \xi_c)} \frac{Senh[\sqrt{s} (1 - \xi_c)]}{H(s)} \frac{G(s)}{M(s)} \tag{D.274}$$

Por convolución:

$$L^{-1}\{T_{19}\} = \frac{B_i \varphi_p \xi_c \Phi^2}{\xi} \int_0^\tau L^{-1} \left\{ \frac{1}{s} \frac{Senh[\sqrt{s} (\xi - \xi_c)]}{Senh(\sqrt{s} \xi_c)} \frac{Senh[\sqrt{s} (1 - \xi_c)]}{H(s)} \frac{G(s)}{M(s)} \right\} d\gamma \tag{D.275}$$

Para poder usar el método de los residuos se selecciona:

$$P(s) = \frac{\text{Senh}\left[\sqrt{s}(\xi - \xi_c)\right]}{\sqrt{s}} \frac{\text{Senh}\left[\sqrt{s}(1 - \xi_c)\right]}{\sqrt{s}} \frac{G(s)}{\sqrt{s}} \quad (\text{D.276})$$

$$Q(s) = s \frac{\text{Senh}\left(\sqrt{s}\xi_c\right)}{\sqrt{s}} \frac{H(s)}{\sqrt{s}} \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \quad (\text{D.277})$$

La derivada de (D.277) es:

$$Q'(s) = s \frac{\text{Senh}\left(\sqrt{s}\xi_c\right)}{\sqrt{s}} \frac{H(s)}{\sqrt{s}} \frac{d}{ds} \left( \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \right) + s \frac{\text{Senh}\left(\sqrt{s}\xi_c\right)}{\sqrt{s}} \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \frac{d}{ds} \left( \frac{H(s)}{\sqrt{s}} \right) \quad (\text{D.278})$$

$$+ \frac{\text{Senh}\left(\sqrt{s}\xi_c\right)}{\sqrt{s}} \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \frac{H(s)}{\sqrt{s}} + \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \frac{H(s)}{2\sqrt{s}} \left[ \xi_c \text{Cosh}\left(\sqrt{s}\xi_c\right) - \frac{\text{Senh}\left(\sqrt{s}\xi_c\right)}{\sqrt{s}} \right]$$

Y los polos estan dados por:

$$a) s = 0 \quad (\text{D.279})$$

$$b) \frac{\text{Senh}\left(\sqrt{s}\xi_c\right)}{\sqrt{s}} = 0 \quad (\text{D.280})$$

$$c) \frac{H(s)}{\sqrt{s}} = 0 \quad (\text{D.281})$$

$$d) \frac{M(s)}{\sqrt{s}} = 0 \quad (\text{D.282})$$

Evaluando (D.276) y (D.278) en el polo dado por (D.279):

$$\frac{P(s_a)}{Q'(s_a)} = \frac{-B_i (\xi - \xi_c)(1 - \xi_c)}{\xi_c [(1 - B_i)(\xi_c - 1) + 1] \left\{ [\varphi_n (B_i - 1) - \varphi_p] (1 - \xi_c) + \varphi_n + \varphi_p \right\}} \quad (\text{D.283})$$

Para el segundo polo:

$$\frac{P(s_b)}{Q'(s_b)} = \frac{2 \text{Sen}\left[\lambda_n (\xi - \xi_c)\right]}{\xi_c \lambda_n \text{Cos}(\lambda_n \xi_c)} \left\{ \frac{\text{Sen}\left[\lambda_n (1 - \xi_c)\right]}{(1 - B_i) \text{Sen}\left[\lambda_n (\xi_c - 1)\right] + \lambda_n \text{Cos}\left[\lambda_n (\xi_c - 1)\right]} \right\} \quad (\text{D.284})$$

$$\left\{ \frac{\left[ (1 - B_i) \text{Sen}(\lambda_n) - \lambda_n \text{Cos}(\lambda_n) \right] e^{-\lambda_n^2 \tau}}{\left[ (\varphi_n - \lambda_n^2)(B_i - 1) - \varphi_p \right] \text{Sen}\left[\lambda_n (1 - \xi_c)\right] + \lambda_n (\varphi_p + \varphi_n - \lambda_n^2) \text{Cos}\left[\lambda_n (\xi_c - 1)\right]} \right\}$$

Para el tercero:

$$\frac{P(s_c)}{Q'(s_c)} = \frac{2\text{Sen}[v_n(\xi - \xi_c)]}{E_n \text{Sen}(v_n \xi_c)} \left\{ \frac{[(1-B_i)\text{Sen}(v_n) - v_n \text{Cos}(v_n)]e^{-v_n^2 \tau}}{[(\varphi_n - v_n^2)(B_i - 1) - \varphi_p] \text{Sen}[v_n(1 - \xi_c)] + v_n(\varphi_p + \varphi_n - v_n^2) \text{Cos}[v_n(\xi_c - 1)]} \right\} \quad (\text{D.285})$$

Para el cuarto polo:

$$\frac{P(s_d)}{Q'(s_d)} = \frac{\text{Sen}[\mu_n(\xi - \xi_c)]}{-\mu_n^2 C_n \text{Sen}(\mu_n \xi_c)} \left\{ \frac{[(1-B_i)\text{Sen}(\mu_n) - \mu_n \text{Cos}(\mu_n)]e^{-\mu_n^2 \tau}}{(1-B_i)\text{Sen}[\mu_n(\xi_c - 1)] + \mu_n \text{Cos}[\mu_n(\xi_c - 1)]} \right\} \quad (\text{D.286})$$

Finalmente la suma de (D.283)-(D.286) y la sustitución de esta en (D.275) lleva a la inversión del término trabajado, pero debido a su semejanza con  $T_{20}$  se realizará la inversión de manera simultanea:

$$\begin{aligned} L^{-1}\{T_{19} + T_{20}\} &= \frac{-B_i^2 \varphi_p (\xi - \xi_c)(1 - \xi_c)}{\xi [(1-B_i)(\xi_c - 1) + 1] \{[\varphi_n(B_i - 1) - \varphi_p](1 - \xi_c) + \varphi_n + \varphi_p\}} (\Phi^2 \tau - U_{p0}) \\ &+ \frac{2B_i \varphi_p \text{Sen}[\lambda_n(\xi - \xi_c)]}{\xi \lambda_n \text{Cos}(\lambda_n \xi_c)} \left\{ \frac{\text{Sen}[\lambda_n(1 - \xi_c)]}{(1-B_i)\text{Sen}[\lambda_n(\xi_c - 1)] + \lambda_n \text{Cos}[\lambda_n(\xi_c - 1)]} \right\} \\ &\left\{ \frac{[(1-B_i)\text{Sen}(\lambda_n) - \lambda_n \text{Cos}(\lambda_n)]}{[(\varphi_n - \lambda_n^2)(B_i - 1) - \varphi_p] \text{Sen}[\lambda_n(1 - \xi_c)] + \lambda_n(\varphi_p + \varphi_n - \lambda_n^2) \text{Cos}[\lambda_n(\xi_c - 1)]} \right\} \left( \Phi^2 \int_0^\tau e^{-\lambda_n^2 \gamma} d\gamma - U_{p0} e^{-\lambda_n^2 \tau} \right) \\ &+ \frac{2B_i \varphi_p \xi_c \text{Sen}[v_n(\xi - \xi_c)]}{E_n \xi \text{Sen}(v_n \xi_c)} \left\{ \frac{(1-B_i)\text{Sen}(v_n) - v_n \text{Cos}(v_n)}{[(\varphi_n - v_n^2)(B_i - 1) - \varphi_p] \text{Sen}[v_n(1 - \xi_c)] + v_n(\varphi_p + \varphi_n - v_n^2) \text{Cos}[v_n(\xi_c - 1)]} \right\} \left( \Phi^2 \int_0^\tau e^{-v_n^2 \gamma} d\gamma - U_{p0} e^{-v_n^2 \tau} \right) \\ &- \sum_{n=1}^{\infty} \frac{B_i \varphi_p \xi_c \text{Sen}[\mu_n(\xi - \xi_c)]}{\xi \mu_n^2 C_n \text{Sen}(\mu_n \xi_c)} \left\{ \frac{[(1-B_i)\text{Sen}(\mu_n) - \mu_n \text{Cos}(\mu_n)]}{(1-B_i)\text{Sen}[\mu_n(\xi_c - 1)] + \mu_n \text{Cos}[\mu_n(\xi_c - 1)]} \right\} \left( \Phi^2 \int_0^\tau e^{-\mu_n^2 \gamma} d\gamma - U_{p0} e^{-\mu_n^2 \tau} \right) \end{aligned} \quad (\text{D.287})$$

Término 21

$$T_{21} = -\frac{B_i \varphi_p \Phi^2}{\xi S^2} \frac{\sinh[\sqrt{S}(\xi - \xi_c)]}{M(S)} \quad (\text{D.288})$$

Por convolución:

$$L^{-1}\{T_{21}\} = -\frac{B_i \varphi_p \Phi^2}{\xi S^2} \int_0^\tau L^{-1} \left\{ \frac{1}{S} \frac{\sinh[\sqrt{S}(\xi - \xi_c)]}{M(S)} \right\} d\gamma \quad (\text{D.289})$$

Debido a que anteriormente se han invertido términos analógicos al dado por la ecuación (D.289), a continuación se presenta el resultado del proceso de inversión:

$$L^{-1}\{T_{21}\} = -\frac{B_i \varphi_p \Phi^2}{\xi} \left[ \frac{(\xi - \xi_c)}{[\varphi_n (B_i - 1) - \varphi_p](1 - \xi_c) + \varphi_n + \varphi_p} \tau \right] + \frac{B_i \varphi_p \Phi^2}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\mu_n^2 c_n} \frac{\text{Sen}[\mu_n (\xi - \xi_c)]}{\text{Sen}[\mu_n (1 - \xi_c)]} \int_0^{\tau} e^{-\mu_n^2 \gamma} d\gamma \quad (\text{D.290})$$

### Término 22

$$T_{22} = \frac{B_i \varphi_p u_{po}}{\xi S} \frac{\text{senh}[\sqrt{S} (\xi - \xi_c)]}{M(S)} \quad (\text{D.291})$$

La inversión del término anterior produce el siguiente resultado:

$$L^{-1}\{T_{22}\} = \frac{B_i \varphi_p U_{po} (\xi - \xi_c)}{\xi \{[\varphi_n (B_i - 1) - \varphi_p](1 - \xi_c) + \varphi_n + \varphi_p\}} - \frac{B_i \varphi_p U_{po}}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\mu_n^2 c_n} \frac{\text{Sen}[\mu_n (\xi - \xi_c)]}{\text{Sen}[\mu_n (1 - \xi_c)]} e^{-\mu_n^2 \tau} \quad (\text{D.292})$$

### Término 23

$$T_{23} = -\frac{B_i \varphi_p \Phi^2}{\xi S^2} \frac{\text{senh}[\sqrt{S} (\xi - \xi_c)]}{H(s)} \frac{\text{senh}[\sqrt{S} (1 - \xi_c)]}{M(s)} \quad (\text{D.293})$$

Mediante convolución:

$$L^{-1}\{T_{23}\} = \frac{B_i^2 \varphi_p \Phi^2}{\xi S^2} \int_0^{\tau} L^{-1} \left\{ \frac{1}{S} \frac{\text{senh}[\sqrt{S} (\xi - \xi_c)]}{H(S)} \frac{\text{senh}[\sqrt{S} (1 - \xi_c)]}{M(S)} \right\} d\gamma \quad (\text{D.294})$$

Si se define:

$$P(s) = \frac{\text{Senh}[\sqrt{s} (\xi - \xi_c)]}{\sqrt{s}} \frac{\text{Senh}[\sqrt{s} (1 - \xi_c)]}{\sqrt{s}} \quad (\text{D.295})$$

$$Q(s) = s \frac{H(s)}{\sqrt{s}} \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \quad (\text{D.296})$$

La derivada del término anterior se escribe a continuación:

$$Q'(s) = s \frac{H(s)}{\sqrt{s}} \frac{d}{ds} \left( \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \right) + \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \frac{H(s)}{\sqrt{s}} + \frac{d}{ds} \left( \frac{H(s)}{\sqrt{s}} \right) \frac{M(s)}{\sqrt{s}} \quad (D.297)$$

Los polos de (D.296) son:

$$a) s = 0 \quad (D.298)$$

$$Q(s) \frac{H(s)}{\sqrt{s}} = 0 \quad (D.299)$$

$$Q(s) \frac{M(s)}{\sqrt{s}} = 0 \quad (D.300)$$

Evaluando en cada polo las expresiones (D.295) y (D.297), y sustituyendo su suma en (D.294) se llega al siguiente término:

$$\begin{aligned} L^{-1}\{T_{23}\} &= \frac{B_i^2 \varphi_p \Phi^2 (\xi - \xi_c)(1 - \xi_c)}{\xi [(1 - B_i)(\xi_c - 1) + 1] \{ [\varphi_n (B_i - 1) - \varphi_p] (1 - \xi_c) + \varphi_n + \varphi_p \}} \tau \\ &+ \frac{2B_i^2 \varphi_p \Phi^2}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Sen[v_n (\xi - \xi_c)]}{E_n \{ [(\varphi_n - v_n^2)(B_i - 1) - \varphi_p] Sen[v_n (1 - \xi_c)] + v_n (\varphi_p + \varphi_n - v_n^2) Cos[v_n (\xi_c - 1)] \}} \int_0^{\tau} e^{-v_n^2 \gamma} d\gamma \\ &- \frac{B_i^2 \varphi_p \Phi^2}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\mu_n^2 C_n} \left\{ \frac{Sen[\mu_n (\xi - \xi_c)]}{(1 - B_i) Sen[\mu_n (\xi_c - 1)] + \mu_n Cos[\mu_n (\xi_c - 1)]} \right\} \int_0^{\tau} e^{-\mu_n^2 \gamma} d\gamma \end{aligned} \quad (D.301)$$

#### Término 24

$$T_{24} = - \frac{B_i^2 \varphi_p U_{p0}}{\xi s} \frac{Senh[\sqrt{s} (\xi - \xi_c)]}{H(s)} \frac{Senh[\sqrt{s} (1 - \xi_c)]}{M(s)} \quad (D.302)$$

Por convolución:

$$L^{-1}\{T_{24}\} = - \frac{B_i^2 \varphi_p U_{p0}}{\xi} L^{-1} \left\{ \frac{1}{s} \frac{Senh[\sqrt{s} (\xi - \xi_c)]}{H(s)} \frac{Senh[\sqrt{s} (1 - \xi_c)]}{M(s)} \right\} d\gamma \quad (D.303)$$

El término indicado en (D.303) se ha invertido anteriormente y el resultado encontrado ha sido sustituido en dicha expresión, de tal forma que se origina lo siguiente:

$$\begin{aligned}
L^{-1}\{T_{24}\} &= \frac{-B_i^2 \varphi_p U_{p0} (\xi - \xi_c)(1 - \xi_c)}{\xi [(1 - B_i)(\xi_c - 1) + 1] \{[\varphi_n (B_i - 1) - \varphi_p] (1 - \xi_c) + \varphi_n + \varphi_p\}} \\
&- \frac{2B_i^2 \varphi_p U_{p0}}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{E_n \{[\varphi_n - \nu_n^2] (B_i - 1) - \varphi_p\} \text{Sen}[\nu_n (\xi - \xi_c)] e^{-\nu_n^2 \tau}}{E_n \{[\varphi_n - \nu_n^2] (B_i - 1) - \varphi_p\} \text{Sen}[\nu_n (1 - \xi_c)] + \nu_n (\varphi_p + \varphi_n - \nu_n^2) \text{Cos}[\nu_n (\xi_c - 1)]} \\
&+ \frac{B_i^2 \varphi_p U_{p0}}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\mu_n^2 C_n} \left\{ \frac{\text{Sen}[\mu_n (\xi - \xi_c)] e^{-\mu_n^2 \tau}}{(1 - B_i) \text{Sen}[\mu_n (\xi_c - 1)] + \mu_n \text{Cos}[\mu_n (\xi_c - 1)]} \right\}
\end{aligned} \tag{D.304}$$

Finalmente hemos llegado a la ecuación de la partícula:

$$\begin{aligned}
U_p(\xi, \tau) &= \frac{B_i \varphi_p \xi_c}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\mu_n^2} \frac{\text{Sen}[\mu_n (\xi - \xi_c)]}{\text{Sen}(\mu_n \xi_c)} \frac{\omega^{\mu_n}}{\Omega^{\mu_n}} \Theta^{\mu_n} - \frac{2B_i \varphi_p \xi_c}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Sen}[\nu_n (\xi - \xi_c)]}{E_n \text{Sen}(\nu_n \xi_c)} \frac{\omega^{\nu_n}}{\Omega^{\nu_n}} \Theta^{\nu_n} \\
&- \frac{2B_i \varphi_p}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Sen}[\lambda_n (\xi - \xi_c)]}{\lambda_n \text{Cos}(\lambda_n \xi_c)} \frac{\text{Sen}[\lambda_n (1 - \xi_c)]}{\Delta^{\lambda_n}} \frac{\omega^{\lambda_n}}{\Omega^{\lambda_n}} \Theta^{\lambda_n} + \frac{B_i^2 \varphi_p}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\mu_n^2 C_n} \frac{\text{Sen}[\mu_n (\xi - \xi_c)]}{\Delta^{\mu_n}} \Theta^{\mu_n} \\
&- \frac{2B_i^2 \varphi_p}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{E_n} \frac{\text{Sen}[\nu_n (\xi - \xi_c)]}{\Omega^{\nu_n}} \Theta^{\nu_n} - \frac{B_i \varphi_p}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\mu_n^2 C_n} \frac{\text{Sen}[\mu_n (\xi - \xi_c)]}{\text{Sen}[\mu_n (1 - \xi_c)]} \Theta^{\mu_n} \\
&+ \frac{B_i \xi_c \varphi_p}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Sen}[\mu_n (\xi - \xi_c)]}{\mu_n^2 C_n \text{Sen}(\mu_n \xi_c)} \frac{\text{Sen}(\mu_n)}{\text{Sen}[\mu_n (1 - \xi_c)]} \Theta^{\mu_n} - \frac{B_i \varphi_p \text{Sen}(\lambda_n)}{\xi \lambda_n \text{Cos}(\lambda_n \xi_c)} \left( \frac{\text{Sen}[\lambda_n (\xi - \xi_c)]}{\Omega^{\lambda_n}} \right) \Theta^{\lambda_n} \\
&+ \frac{B_i \varphi_p}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Sen}[\mu_n (\xi - \xi_c)]}{C_n \text{Sen}[\mu_n (1 - \xi_c)]} e^{-\mu_n^2 \tau} \int_0^{\tau} U_{in}(\gamma) e^{\mu_n^2 \gamma} d\gamma + 2 \frac{\xi_c}{\xi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Sen}[\nu_n (\xi - \xi_c)]}{E_n \text{Cos}(\nu_n)} \left( \frac{\omega^{\nu_n}}{\text{Sen}[\nu_n (\xi_c - 1)]} \right) \Theta^{\nu_n} \\
&- \frac{2 \text{Sen}[\lambda_n (\xi - \xi_c)]}{\xi \text{Cos}(\lambda_n)} \left( \frac{\omega^{\lambda_n}}{\Delta^{\lambda_n}} \right) \Theta^{\lambda_n} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{B_i U_{f0}}{\xi C_n} \frac{\text{Sen}[\mu_n (\xi - \xi_c)]}{\text{Sen}[\mu_n (1 - \xi_c)]} e^{-\mu_n^2 \tau} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2B_i}{\xi} \frac{\text{Sen}[\nu_n (\xi - \xi_c)]}{\text{Sen}[\nu_n (\xi_c - 1)]} \Theta^{\nu_n} \\
&+ \frac{2\xi_c}{\xi \pi} \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \left( \frac{\Phi}{\lambda_n} \right)^2 (1 - e^{-\lambda_n^2 \tau}) - U_{p0} e^{-\lambda_n^2 \tau} \right] \frac{(-1)^n}{n} \text{Sen}(\lambda_n \xi)
\end{aligned} \tag{D.305}$$

En donde se ha definido:

$$\Delta^{\delta_n} = (1 - B_i) \text{Sen}[\delta_n (\xi_c - 1)] + \delta_n \text{Cos}[\delta_n (\xi_c - 1)] \quad \delta = \mu, \lambda \tag{D.306}$$

$$\Theta^{\delta_n} = U_{p0} e^{-\delta_n \tau} - \Phi^2 \int_0^{\tau} e^{-\delta_n \gamma} d\gamma \tag{D.307}$$

$$\omega^{\delta_n} = (1 - B_i) \text{Sen}(\delta_n) - \delta_n \text{Cos}(\delta_n) \tag{D.308}$$

$$\Delta^{\delta_n} = [(\varphi_n - \delta_n^2) (B_i - 1) - \varphi_p] \text{Sen}[\delta_n (1 - \xi_c)] + \delta_n \text{Cos}[\delta_n (\xi_c - 1)] \tag{D.309}$$

## APÉNDICE E

### Discretización de ecuaciones

Las ecuaciones que describen el balance de materia, se expresan a continuación:

Para la partícula:

$$\frac{\partial U_p}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^2} \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right) \right] - \Phi^2 \left( \frac{U_p}{1 + k_1 U_p} \right) \quad (\text{E.1})$$

Para el fluido:

$$\frac{dU_f}{d\tau} = \varphi_n [U_{in} - U_f] + \varphi_p [U_p|_{\xi=1} - U_f] \quad (\text{E.2})$$

Condiciones de frontera:

$$-\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = B_i (U_p|_{\xi=1} - U_f) \quad \text{en } \xi = 1 \quad (\text{E.3})$$

$$\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = 0 \quad \text{en } \xi = 0 \quad (\text{E.4})$$

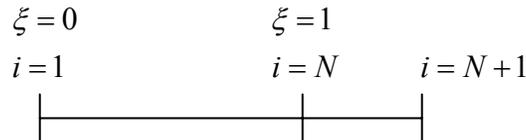
Y las condiciones iniciales son:

$$U_f = U_{f0} \quad \text{en } \tau = 0 \quad (\text{E.5})$$

$$U_p = U_{p0} \quad \text{en } 0 \leq \xi \leq 1 \quad (\text{E.6})$$

Partiendo de las ecuaciones de balance de materia para el componente clave, en estado transitorio, se procede a su discretización mediante el método de diferencias finitas.

El siguiente esquema presenta la malla a considerar para la posición:



### ECUACIÓN DIFERENCIAL PARA LA PARTÍCULA

Para resolver el problema, se empezará discretizando el término de acumulación de la ecuación de la partícula; mediante diferencias centradas:

$$U_p\left(\tau - \frac{\Delta\tau}{2}\right) = U_p(\tau) - \frac{\partial U_p}{\partial\tau}\left(\frac{\Delta\tau}{2}\right) \quad (\text{E.7})$$

$$U_p\left(\tau + \frac{\Delta\tau}{2}\right) = U_p(\tau) + \frac{\partial U_p}{\partial\tau}\left(\frac{\Delta\tau}{2}\right) \quad (\text{E.8})$$

Restando (E.8) a (E.7):

$$U_p\left(\tau + \frac{\Delta\tau}{2}\right) - U_p\left(\tau - \frac{\Delta\tau}{2}\right) = \frac{\partial U_p}{\partial\tau}(\Delta\tau) \quad (\text{E.9})$$

Despejando la derivada temporal, y expresando en forma indicial, se obtiene:

$$\frac{\partial U}{\partial\tau} = \frac{U_i^{k+\frac{1}{2}} - U_i^{k-\frac{1}{2}}}{\Delta\tau} \quad (\text{E.10})$$

Reescribiendo (E.10):

$$\left(\frac{\partial U}{\partial\tau}\right)_i^{k+\frac{1}{2}} = \frac{U_i^{k+1} - U_i^k}{\Delta\tau} = \frac{\Delta U_i^{k+1}}{\Delta\tau} \quad (\text{E.11})$$

En donde:

$$U_i^{k+1} - U_i^k = \Delta U_i^{k+1} \quad (\text{E.12})$$

Sustituyendo (E.11) en la ecuación de la partícula y usando el método de Crank Nicholson, la ecuación (E.1) puede ser escrita como:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial\tau}\right)_i^{k+\frac{1}{2}} = (1-\lambda) \left[ \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial\xi} \left( \xi^2 \frac{\partial U}{\partial\xi} \right) - \Phi^2 \left( \frac{U}{1+k_1 U} \right) \right]_i^k + \lambda \left[ \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial\xi} \left( \xi^2 \frac{\partial U}{\partial\xi} \right) - \Phi^2 \left( \frac{U}{1+k_1 U} \right) \right]_i^{k+1} \quad (\text{E.13})$$

En donde si:

$\lambda = 0$ , Método explícito

$\lambda = 1$ , Método implícito

$\lambda = \frac{1}{2}$ , Método de Crank Nicholson

Ahora es necesario linearizar los términos evaluados en  $k+1$  alrededor del tiempo  $k$ , esto se logra utilizando el método de linearización de Ritchmeyer. Para lo cual se iniciará con el término:

$$\left( \xi^2 \frac{\partial U}{\partial\xi} \right)_i^{k+1} = \left( \xi^2 \frac{\partial U}{\partial\xi} \right)_i^k + \frac{\partial}{\partial\tau} \left( \xi^2 \frac{\partial U}{\partial\xi} \right)_i^k (\Delta\tau) \quad (\text{E.14})$$

Apelando a la continuidad de la solución de  $U_p(\xi, \tau)$ , es posible intercambiar el orden de derivación en el segundo miembro del lado derecho de (E.14):

$$\left( \xi^2 \frac{\partial U}{\partial \xi} \right)_i^{k+1} = \left( \xi^2 \frac{\partial U}{\partial \xi} \right)_i^k + (\xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \frac{\partial U}{\partial \tau} \right)_i^k (\Delta \tau) \quad (\text{E.15})$$

Expandiendo la derivada temporal hacia delante, se obtiene:

$$U_i(\tau + \Delta \tau) = U_i(\tau) + \frac{\partial U_i}{\partial \tau} (\Delta \tau) \quad (\text{E.16})$$

Despejando la derivada:

$$\frac{\partial U_i}{\partial \tau} = \frac{U_i(\tau + \Delta \tau) - U_i(\tau)}{(\Delta \tau)} = \frac{U_i^{k+1} - U_i^k}{(\Delta \tau)} \quad (\text{E.17})$$

De acuerdo a la definición dada en (E.12), se puede escribir (E.17) como:

$$\frac{\partial U_i}{\partial \tau} = \frac{\Delta U_i^{k+1}}{(\Delta \tau)} \quad (\text{E.18})$$

Sustituyendo (E.17) en (E.15):

$$\left( \xi^2 \frac{\partial U}{\partial \xi} \right)_i^{k+1} = \left( \xi^2 \frac{\partial U}{\partial \xi} \right)_i^k + (\xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} (\Delta U_i^{k+1}) \quad (\text{E.19})$$

Al sustituir (E.19) en (E.13), se obtienen los dos términos siguientes:

$$T_1 = \frac{1}{\xi^2} \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi^2 \frac{\partial U}{\partial \xi} \right) \right]_i^k \quad \text{y} \quad (\text{E.20})$$

$$T_2 = \frac{1}{\xi^2} \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} \left( (\xi^2) \frac{\partial}{\partial \xi} \Delta U_i^{k+1} \right) \right] \quad (\text{E.21})$$

Los cuales necesitan expandirse en diferencias centradas, es decir, definiendo:

$$w = \xi^2 \frac{\partial U_i}{\partial \xi} \quad (\text{E.22})$$

$$w^k \left( \xi + \frac{\Delta \xi}{2} \right) = w^k(\xi) + \frac{\partial w^k}{\partial \xi} \left( \frac{\Delta \xi}{2} \right)$$

$$w^k \left( \xi - \frac{\Delta \xi}{2} \right) = w^k(\xi) - \frac{\partial w^k}{\partial \xi} \left( \frac{\Delta \xi}{2} \right)$$

Restando las ecuaciones anteriores, se obtiene:

$$w^k \left( \xi + \frac{\Delta \xi}{2} \right) - w^k \left( \xi - \frac{\Delta \xi}{2} \right) = \frac{\partial w^k}{\partial \xi} (\Delta \xi) \quad (\text{E.23})$$

Rearreglando la ecuación (E.23):

$$\frac{\partial w^k}{\partial \xi} = \frac{w_{i+\frac{1}{2}}^k - w_{i-\frac{1}{2}}^k}{\Delta \xi} \quad (\text{E.24})$$

Sustituyendo (E.22) en (E.24):

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi^2 \frac{\partial U}{\partial \xi} \right)_i^k = \frac{\left( \xi^2 \frac{\partial U}{\partial \xi} \right)_{i+\frac{1}{2}}^k - \left( \xi^2 \frac{\partial U}{\partial \xi} \right)_{i-\frac{1}{2}}^k}{\Delta \xi} \quad (\text{E.25})$$

Discretizando la derivada interna de (E.25):

$$\frac{\partial U_p}{\partial \xi} = \frac{U_p \left( \xi + \frac{\Delta \xi}{2} \right) - U_p \left( \xi - \frac{\Delta \xi}{2} \right)}{\Delta \xi} = \frac{U_{i+\frac{1}{2}} - U_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta \xi} \quad (\text{E.26})$$

Introduciendo (E.26) en (E.25):

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi^2 \frac{\partial U_p}{\partial \xi} \right)^k = \frac{1}{\xi^2} \frac{\left( \xi^2 \right)_{i+\frac{1}{2}}^k (U_{i+1}^k - U_i^k) - \left( \xi^2 \right)_{i-\frac{1}{2}}^k (U_i^k - U_{i-1}^k)}{(\Delta \xi)^2} \quad (\text{E.27})$$

De manera análoga al desarrollo anterior, se tiene para (E.21):

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi^2 \frac{\partial}{\partial \xi} \Delta U_i^{k+1} \right)^k = \frac{1}{\xi_i^2} \frac{\left( \xi^2 \right)_{i+\frac{1}{2}}^k (\Delta U_{i+1}^{k+1} - \Delta U_i^{k+1}) - \left( \xi^2 \right)_{i-\frac{1}{2}}^k (\Delta U_i^{k+1} - \Delta U_{i-1}^{k+1})}{(\Delta \xi)^2} \quad (\text{E.28})$$

A continuación se linealiza el término de reacción, para lo cual se define:

$$f(U_p) = \left( \frac{U_p}{1 + k_1 U_p} \right) \quad (\text{E.29})$$

Linearizando (E.29) alrededor del tiempo k, se obtiene:

$$f(U)_i^{k+1} = f(U)_i^k + \left. \frac{\partial f(U)}{\partial \tau} \right|_i^k (\Delta \tau) + \dots \quad (\text{E.30})$$

Mediante regla de la cadena, se puede escribir:

$$f(U)_i^{k+1} = f(U)_i^k + \left. \frac{\partial f(U)}{\partial U} \right|_i^k \left. \frac{\partial U}{\partial \tau} \right|_i^k (\Delta \tau) + \dots \quad (\text{E.31})$$

Sustituyendo (E.18) en (E.31):

$$f(U)_i^{k+1} = f(U)_i^k + \left. \frac{\partial f(U)}{\partial U} \right|_i^k (\Delta U_i^{k+1}) \quad (\text{E.32})$$

En este punto es necesario escribir la ecuación (E.13) con la nomenclatura usada anteriormente:

$$\left( \frac{\partial U}{\partial \tau} \right)_i^{k+\frac{1}{2}} = (1-\lambda) [T_1 - \Phi^2 f_i^k] + \lambda \left[ T_1 + T_2 - \Phi^2 f_i^k - \Phi^2 \left. \frac{\partial f}{\partial U} \right|_i^k (\Delta U_i^{k+1}) \right] \quad (\text{E.33})$$

Desarrollando las multiplicaciones indicadas en (E.33):

$$\left( \frac{\partial U}{\partial \tau} \right)_i^{k+\frac{1}{2}} = T_1 - \Phi^2 f_i^k + \lambda T_2 - \lambda \left[ \Phi^2 \left. \frac{\partial f}{\partial U} \right|_i^k (\Delta U_i^{k+1}) \right] \quad (\text{E.34})$$

La sustitución de (E.11), (E.27) y (E.28) en (E.29) da como resultado:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta U_i^{k+1}}{\Delta \tau} &= \frac{1}{\xi_i^2} \frac{(\xi^2)_{i+\frac{1}{2}}^k (U_{i+1}^k - U_i^k) - (\xi^2)_{i-\frac{1}{2}}^k (U_i^k - U_{i-1}^k)}{(\Delta \xi)^2} - \Phi^2 f_i^k + \\ &\frac{\lambda}{\xi_i^2} \frac{(\xi^2)_{i+\frac{1}{2}}^k (\Delta U_{i+1}^{k+1} - \Delta U_i^{k+1}) - (\xi^2)_{i-\frac{1}{2}}^k (\Delta U_i^{k+1} - \Delta U_{i-1}^{k+1})}{(\Delta \xi)^2} - \lambda \left[ \Phi^2 \left. \frac{\partial f}{\partial U} \right|_i^k (\Delta U_i^{k+1}) \right] \end{aligned} \quad (\text{E.35})$$

Multiplicando por  $\Delta \tau$  la ecuación (E.35):

$$\begin{aligned} \Delta U_i^{k+1} &= \frac{r}{\xi_i^2} \left[ (\xi^2)_{i+\frac{1}{2}}^k (U_{i+1}^k - U_i^k) - (\xi^2)_{i-\frac{1}{2}}^k (U_i^k - U_{i-1}^k) \right] - \Phi^2 f_i^k \Delta \tau + \\ &\frac{\lambda r}{\xi_i^2} \left[ (\xi^2)_{i+\frac{1}{2}}^k (\Delta U_{i+1}^{k+1} - \Delta U_i^{k+1}) - (\xi^2)_{i-\frac{1}{2}}^k (\Delta U_i^{k+1} - \Delta U_{i-1}^{k+1}) \right] - \lambda \Delta \tau \left[ \Phi^2 \left. \frac{\partial f}{\partial U} \right|_i^k (\Delta U_i^{k+1}) \right] \end{aligned} \quad (\text{E.36})$$

En la ecuación (E.36) se ha usado la siguiente definición:

$$r = \frac{\Delta \tau}{(\Delta \xi)^2} \quad (\text{E.37})$$

Rearreglando la ecuación (E.37), se tiene:

$$B_i \Delta U_i^{k+1} + C_i \Delta U_{i+1}^{k+1} + A_i \Delta U_{i-1}^{k+1} = D_i \quad (\text{E.38})$$

En donde:

$$B_i = 1 + \lambda \Delta \tau \Phi^2 \left. \frac{\partial f}{\partial U} \right|_i^k + \frac{\lambda r}{\xi_i^2} \left[ (\xi^2)_{i+\frac{1}{2}}^k + (\xi^2)_{i-\frac{1}{2}}^k \right] \quad (\text{E.39})$$

$$C_i = -\frac{\lambda r}{\xi_i^2} \left[ \left( \xi^2 \right)_{i+\frac{1}{2}}^k \right] \quad (\text{E.40})$$

$$A_i = -\frac{\lambda r}{\xi_i^2} \left( \xi^2 \right)_{i-\frac{1}{2}}^k \quad (\text{E.41})$$

$$D_i = \frac{r}{\xi_i^2} \left[ \left( \xi^2 \right)_{i+\frac{1}{2}}^k (U_{i+1}^k - U_i^k) - \left( \xi^2 \right)_{i-\frac{1}{2}}^k (U_i^k - U_{i-1}^k) \right] - \Phi^2 \Delta \tau f_i^k \quad (\text{E.42})$$

La ecuación (E.42) es válida para  $2 \leq i \leq N-1$ , las ecuaciones restantes se obtendrán a continuación:

### Condición de frontera 1

Al considerar la condición de frontera dada por la ecuación (E.4); se procede a linealizarla mediante el método de Ritchmeyer. Por lo tanto se puede escribir:

$$\left( \frac{\partial U}{\partial \xi} \right)_i^{k+1} = \left( \frac{\partial U}{\partial \xi} \right)_i^k + \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\partial U}{\partial \xi} \right)_i^k (\Delta \tau) \quad (\text{E.43})$$

Intercambiando el orden de diferenciación y considerando que la ecuación (E.4), es válida también para el instante k, la ecuación (E.43) se simplifica a:

$$\left( \frac{\partial U}{\partial \xi} \right)_i^{k+1} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \frac{\partial U}{\partial \tau} \right)_i^k (\Delta \tau) \quad (\text{E.44})$$

Usando (E.18) en (E.44):

$$\left( \frac{\partial U}{\partial \xi} \right)_i^{k+1} = \frac{\partial}{\partial \xi} (\Delta U_i^{k+1}) \quad (\text{E.45})$$

Ya que la ecuación (E.45) es igual a cero para  $\xi = 0$ , se puede escribir:

$$\frac{\partial}{\partial \xi} (\Delta U_i^{k+1}) = 0 \quad (\text{E.46})$$

Expandiendo (E.46) en series de Taylor:

$$\Delta U_i^{k+1} (\xi + \Delta \xi) = \Delta U_i^{k+1} (\xi) + \frac{\partial (\Delta U_i^{k+1})}{\partial \xi} \Delta \xi + \dots \quad (\text{E.47})$$

Despejando la derivada:

$$\frac{\partial}{\partial \xi} (\Delta U_i^{k+1}) = \frac{\Delta U_{i+1}^{k+1} - \Delta U_i^{k+1}}{(\Delta \xi)} = 0 \quad (\text{E.48})$$

Por lo tanto:

$$\Delta U_{i+1}^{k+1} - \Delta U_i^{k+1} = 0 \quad (\text{E.49})$$

En forma matricial puede escribirse (E.43) como:

$$C_1 \Delta U_2^{k+1} + B_1 \Delta U_1^{k+1} = D_1 \quad (\text{E.50})$$

En donde los coeficientes están dados por:

$$B_1 = 1 \quad (\text{E.51})$$

$$C_1 = -1 \quad (\text{E.52})$$

$$D_1 = 0 \quad (\text{E.53})$$

La ecuación (E.49) es válida únicamente para  $i = 1$ .

## Condición de frontera 2

La ecuación dada por la expresión (E.3) puede escribirse para el instante  $k+1$  como:

$$-\left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi}\right)^{k+1} = \left(B_i U_p \Big|_{\xi=1}\right)^{k+1} - \left(B_i U_f\right)^{k+1} \quad (\text{E.54})$$

Linearizando el primer término de la ecuación (E.54):

$$\left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi}\right)^{k+1} = \left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi}\right)^k + \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi}\right)^k \Delta \tau \quad (\text{E.55})$$

Rearreglando la ecuación (E.55):

$$\left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi}\right)^{k+1} = \left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi}\right)^k + \frac{\partial}{\partial \tau} (\Delta U_i^{k+1}) \quad (\text{E.56})$$

De la misma forma, para el primer término del lado derecho de la ecuación (E.54):

$$\left(B_i U_p \Big|_{\xi=1}\right)^{k+1} = \left(B_i U_p \Big|_{\xi=1}\right)^k + \frac{\partial}{\partial \tau} \left(B_i U_p \Big|_{\xi=1}\right)^k \Delta \tau \quad (\text{E.57})$$

Y se puede escribir:

$$\left(B_i U_p \Big|_{\xi=1}\right)^{k+1} = \left(B_i U_p \Big|_{\xi=1}\right)^k + B_i \Delta U_{pN}^{k+1} \quad (\text{E.58})$$

Finalmente para el segundo término del lado derecho de (E.54):

$$\left(B_i U_f\right)^{k+1} = \left(B_i U_f\right)^k + \frac{\partial}{\partial \tau} \left(B_i U_f\right)^k \Delta \tau \quad (\text{E.59})$$

Rearreglando la ecuación anterior:

$$(B_i U_f)^{k+1} = (B_i U_f)^k + B_i (\Delta U_f)^{k+1} \quad (\text{E.60})$$

Al sustituir (E.56), (E.58) y (E.60) en (E.54):

$$-\left(\frac{\partial U_p}{\partial \xi}\right)^k - \frac{\partial}{\partial \xi}(\Delta U_i^{k+1}) = \left(B_i U_p \Big|_{\xi=1}\right)^k + B_i \Delta U_{pN}^{k+1} - (B_i U_f)^k - B_i (\Delta U_f)^{k+1} \quad (\text{E.61})$$

Ya que la ecuación (E.54) es válida tanto para k como para k+1, la ecuación (E.61) se reduce a lo siguiente:

$$-\frac{\partial}{\partial \xi}(\Delta U_i^{k+1}) = B_i \Delta U_{pN}^{k+1} - B_i (\Delta U_f)^{k+1} \quad (\text{E.62})$$

Al expandir el término del lado izquierdo de (E.62) en series de Taylor hacia atrás, se obtiene:

$$\Delta U^{k+1}(\xi - \Delta \xi) = \Delta U^{k+1}(\xi) - \frac{\partial}{\partial \xi}(\Delta U^{k+1}) \Delta \xi \quad (\text{E.63})$$

Despejando la primera derivada de (E.63):

$$\frac{\partial}{\partial \xi}(\Delta U^{k+1}) = \frac{\Delta U_i^{k+1} - \Delta U_{i-1}^{k+1}}{\Delta \xi} \quad (\text{E.64})$$

Introduciendo (E.64) en (E.62) y reorganizando:

$$\Delta U_{N-1}^{k+1} - \Delta U_N^{k+1} = \Delta \xi B_i \Delta U_N^{k+1} - \Delta \xi B_i \Delta U_{N+1}^{k+1} \quad (\text{E.65})$$

O de otra forma:

$$\Delta U_{N-1}^{k+1} - (1 + \Delta \xi B_i) \Delta U_N^{k+1} + \Delta \xi B_i \Delta U_{N+1}^{k+1} = 0 \quad (\text{E.66})$$

Finalmente:

$$A_N \Delta U_{N-1}^{k+1} + B_N \Delta U_N^{k+1} + C_N \Delta U_{N+1}^{k+1} = D_N \quad (\text{E.67})$$

Y los coeficientes están dados por:

$$A_N = 1 \quad (\text{E.68})$$

$$B_N = -(1 + \Delta \xi B_i) \quad (\text{E.69})$$

$$C_N = B_i \Delta \xi \quad (\text{E.70})$$

$$D_N = 0 \quad (\text{E.71})$$

### Ecuación diferencial para el fluido

Estamos ahora en posición de trabajar con la ecuación diferencial para el fluido; de tal modo que usando la ecuación (E.2) y el método de Crank Nicholson:

$$\frac{\Delta U_{N+1}^{k+1}}{\Delta \tau} = (1-\lambda) \left[ \varphi_p U_N - (\varphi_p + \varphi_n) U_{N+1} \right]_i^k + \lambda \left[ \varphi_p U_N - (\varphi_p + \varphi_n) U_{N+1} \right]_i^{k+1} + (\varphi_n U_{in})_i^{k+\frac{1}{2}} \quad (\text{E.72})$$

Linealizando los términos evaluados en k+1 alrededor del instante k:

$$\left[ (\varphi_p + \varphi_n) U_{N+1} \right]^{k+1} = \left[ (\varphi_p + \varphi_n) U_{N+1} \right]^k + \frac{\partial}{\partial \tau} \left[ (\varphi_p + \varphi_n) U_{N+1} \right]^k (\Delta \tau) \quad (\text{E.73})$$

La ecuación anterior puede reescribirse como:

$$\left[ (\varphi_p + \varphi_n) U_{N+1} \right]^{k+1} = \left[ (\varphi_p + \varphi_n) U_{N+1} \right]^k + (\varphi_p + \varphi_n) \Delta U_{N+1}^{k+1} \quad (\text{E.74})$$

El último término de (E.72) puede escribirse como:

$$(\varphi_p U_N)^{k+1} = (\varphi_p U_N)^k + \varphi_p \Delta U_N^{k+1} \quad (\text{E.75})$$

Sustituyendo (E.74) y (E.75) en (E.72):

$$\begin{aligned} \frac{\Delta U_{N+1}^{k+1}}{\Delta \tau} &= (\varphi_p U_N)^k - \left[ (\varphi_p + \varphi_n) U_{N+1} \right]^k + \lambda \left[ (\varphi_p + \varphi_n) U_{N+1} \right]^k - \lambda (\varphi_p U_N)^k - \\ &\lambda \left[ (\varphi_p + \varphi_n) U_{N+1} \right]^k - \lambda (\varphi_p + \varphi_n) \Delta U_{N+1}^{k+1} + \lambda (\varphi_p U_N)^k + \lambda \varphi_p \Delta U_N^{k+1} + (\varphi_n U_{in})_i^{k+\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (\text{E.76})$$

Rearreglando la ecuación anterior:

$$\begin{aligned} \left[ 1 + \Delta \tau \lambda (\varphi_n + \varphi_p) \right] \Delta U_{N+1}^{k+1} - \lambda \Delta \tau \varphi_p \Delta U_N^{k+1} &= -\Delta \tau \left[ (\varphi_n + \varphi_p) U_{N+1} \right]^k + \\ (\varphi_p U_N)^k \Delta \tau + \Delta \tau (\varphi_n U_{in})_i^{k+\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (\text{E.77})$$

Definiendo:

$$B_{N+1} = 1 + \Delta \tau \lambda (\varphi_n + \varphi_p) \quad (\text{E.78})$$

$$A_{N+1} = -\Delta \tau \lambda \varphi_p \quad (\text{E.79})$$

$$D_{N+1} = -\Delta \tau \left[ (\varphi_n + \varphi_p) U_{N+1} \right]^k + (\varphi_p U_N)^k \Delta \tau + \Delta \tau (\varphi_n U_{in})_i^{k+\frac{1}{2}} \quad (\text{E.80})$$

Entonces, podemos escribir (E.71) como:

$$B_{N+1} \Delta U_{N+1}^{k+1} + A_{N+1} \Delta U_N^{k+1} = D_{N+1} \quad (\text{E.81})$$

Una vez que las ecuaciones diferenciales han sido discretizadas, es necesario usar el algoritmo de Thomas para la solución del sistema matricial formado.