



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA
Unidad Iztapalapa

Notas de curso



Fenómenos de transporte computacionales

Francisco J. Valdés Parada

Fenómenos de transporte computacionales

Notas de curso

Francisco J. Valdés Parada



Casa abierta al tiempo

Dr. José Antonio de los Reyes Heredia

Rector General

Dra. Norma Rondero López

Secretaria General

Dra. Verónica Medina Bañuelos

Rectora de la Unidad Iztapalapa

Dr. Juan José Ambriz García

Secretario de Unidad

Dr. Jesús Alberto Ochoa Tapia

Director de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Mtro. Federico Bañuelos Bárcena

Coordinador de Extensión Universitaria

Lic. Adrián Felipe Valencia Llamas

Jefe de la Sección de Producción Editorial

Fenómenos de transporte computacionales

© UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA-IZTAPALAPA

Av. San Rafael Atlixco No. 186, Col. Vicentina, Del. Iztapalapa, C. P. 09340, CDMX, México

ISBN Colección: 978-607-28-2107-1

No. de control interno: 03.0302.II.11.001.22

Impreso en México / Printed in Mexico



Índice general

1	Repaso de fenómenos de transporte	9
1.1	Introducción	9
1.2	Generalidades sobre el modelado	9
1.2.1	Clasificación de modelos matemáticos	10
1.3	Herramental matemático	10
1.4	Conservación de masa	12
1.5	Conservación de cantidad de movimiento lineal	14
1.6	Ecuación de energía mecánica	16
1.7	Ecuación de la energía térmica	17
1.8	Transferencia de masa de una especie	22
1.9	Síntesis	23
1.10	Condiciones de frontera	24
2	El método de diferencias finitas	25
2.1	Introducción	25
2.2	Mallas computacionales	26
2.3	El método de diferencias finitas en 1D	26
2.4	El algoritmo de Thomas	29
2.5	Solución de un problema de transferencia de calor unidimensional	30
2.6	Difusión y reacción en diferentes geometrías	35
2.6.1	Cinética de primer orden	35
2.6.2	Cinética no lineal: Uso de funciones de Green	41

2.7	Transporte entre un medio poroso y un fluido	47
2.7.1	Ley de Darcy	47
2.7.2	Modelo de Beavers y Joseph	47
2.7.3	Modelo de Neale y Nader	49
2.8	Análisis de problemas transitorios	54
2.8.1	Planteamiento del problema	54
2.8.2	Método explícito	55
2.8.3	Método implícito	56
2.8.4	Método de Crank-Nicholson	56
2.8.5	Método general	57
2.9	Dinámica de un reactor tipo tanque agitado con cinética no lineal	59
3	Uso de Comsol multiphysics	67
3.1	Introducción	67
3.2	Modelos transitorios	68
3.2.1	Reactor continuo tipo tanque agitado homogéneo	68
3.2.2	Dinámica de la temperatura promedio en una aleta de enfriamiento anular	71
3.3	Flujo alrededor de tres perfiles NACA	75
3.3.1	Flujo laminar	75
3.3.2	Flujo turbulento	79
3.4	Flujo de fluidos y transferencia de masa por un automóvil	80
3.5	Flujo y transporte de masa desde la chimenea de una industria	83
3.6	Transporte en medios porosos	86
3.6.1	Análisis en el seno del medio poroso	86
3.7	Transferencia de masa y reacción heterogénea en medios porosos	92
3.7.1	desarrollo del modelo	92
3.7.2	Solución de los problemas de cerradura y predicción de los coeficientes de medio efectivo	97
3.8	Maquinaria rotatoria	101
3.8.1	Tanque agitado	103
3.8.2	Flujo alrededor de turbinas eólicas de eje horizontal	107
3.9	Flujo multifásico	110
3.9.1	Método de conjunto de nivel (<i>Level set</i>)	111
3.9.2	Método de campo de fase (Cahn-Hilliard)	111
3.9.3	Método de malla móvil	113
3.9.4	Método de conjunto de nivel (<i>Level set</i>)	113
3.9.5	Flujo en una tubería con válvula de compuerta usando campo de fase (<i>phase field</i>)	116
3.9.6	Malla móvil	118
	Bibliografía	123



Prefacio

El propósito de este texto es aportar un material de apoyo en la impartición de cursos relacionados con fenómenos de transporte tanto de nivel licenciatura como de posgrado. En específico, el texto está dirigido a servir de apoyo en los cursos optativos de fenómenos de transporte computacionales de la licenciatura de ingeniería en energía de la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. Este curso optativo se toma después de haber aprobado los cursos de mecánica de fluidos, transferencia de calor y de masa. Por ello, el material fundamental de este texto se presenta en forma breve. Sin embargo, esto no limita de ninguna manera a que el material que se presenta en este texto sea usado sólo en dicho curso. De hecho, se recomienda su uso para ilustrar simulaciones numéricas en cursos teóricos y prácticos de mecánica de fluidos, transferencia de calor y transferencia de masa. Esto con la intención de promover una formación integral en fenómenos de transporte que conjunte conceptos teóricos, soluciones analíticas clásicas, simulaciones numéricas y experimentos de laboratorio.

El texto está dividido en tres capítulos: en el capítulo 1 se hace un repaso de las ecuaciones fundamentales de fenómenos de transporte. En el capítulo 2 se presentan fundamentos y aplicaciones del método numérico de diferencias finitas para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales. Por último, en el capítulo 3 se presentan varios problemas de aplicación que ilustran el uso del método de elemento finito mediante el software comercial Comsol Multiphysics. Pensando en un curso de 12 semanas dedicado exclusivamente a los temas de este texto, se sugiere la siguiente distribución: dos semanas para el capítulo 1, 4 semanas y media para el capítulo 2 y el mismo tiempo para el capítulo 3. Cabe agregar que este curso es meramente introductorio y se recomienda consultar textos especializados para profundizar varios de los temas discutidos aquí. La elección de los ejercicios y casos de estudios presentados aquí obedece tanto a inquietudes que me han compartido estudiantes como al intercambio de opiniones con otros docentes y a los intereses de investigación en fenómenos de transporte en sistemas de escalas múltiples, la cual es la línea de investigación que sigo. Agradezco profundamente a las personas que, de una u otra forma, han contribuido en la realización de este texto.

Francisco J. Valdés Parada
Ciudad de México
Marzo, 2022

An illustration in a warm, golden-brown color palette. It depicts a person's profile on the right, looking towards a large screen or board. On the left, a hand is pointing towards a 3D coordinate system with x, y, and z axes. The screen displays a complex geometric diagram involving a sphere and various lines and planes. The overall style is that of a technical or educational presentation.

1. Repaso de fenómenos de transporte

1.1 Introducción

El propósito de este capítulo es hacer un repaso de los conceptos clave en fenómenos de transporte que son esenciales para abordar la solución numérica de los diversos problemas que se presentan en el resto del texto. Para cumplir este objetivo, en la sección 1.2 se presentan primeramente algunas generalidades sobre el modelado, donde se ubican a los modelos matemáticos en fenómenos de transporte como modelos matemáticos deterministas basados en principios fundamentales. Posteriormente, en la sección 1.3 se definen los principales operadores de diferenciación espacial y temporal, así como los teoremas general del transporte y de la divergencia. Con estas herramientas, se deducen las ecuaciones que gobiernan la conservación de masa total (sección 1.4) y la conservación de cantidad de movimiento lineal (sección 1.5), que rigen la mecánica de fluidos. Más adelante, se presentan las dos componentes de la primera ley de la termodinámica que son la ecuación de la energía mecánica (sección 1.6) y de la energía térmica (sección 1.7). Finalmente, se deducen las ecuaciones de conservación de especies químicas en la sección 1.8. Más adelante se analizan todas las ecuaciones de conservación en forma conjunta y se consigue sintetizarlas en un solo modelo generalizado en la sección 1.9. El último elemento que se presenta son los tres tipos generales de condiciones de frontera que pueden usarse para completar el planteamiento de problemas de valor a la frontera como se reporta en la sección 1.10. Vale la pena insistir que el material presentado aquí es un repaso de fenómenos de transporte, si el lector requiere de una exposición más a fondo se le recomienda revisar por ejemplo los textos de Whitaker (1983); Deen (1998); Slattery (1999); Batchelor (2000); Bird *y col.* (2014); Mauri (2015); Gray y Gray (2017), entre muchos otros más.

1.2 Generalidades sobre el modelado

Los fenómenos de transporte tratan sobre la descripción de los cambios espacio-temporales de la masa, cantidad de movimiento y calor en diferentes niveles de escala de interés práctico. Para llevar a cabo esta descripción, es conveniente comenzar por la definición de un modelo como se muestra a continuación:

Definición 1.2.1 — Modelo. Representación de la realidad

1.2.1 Clasificación de modelos matemáticos

De acuerdo a Aris (1994), los modelos matemáticos pueden definirse como una representación matemática de aspectos no matemáticos. En otras palabras, en un modelo matemático se utiliza el lenguaje de las matemáticas para representar algún aspecto de la realidad, ya sea físico, químico, biológico, social, etc. Existen en la literatura muchas maneras de clasificar modelos matemáticos (lineales, no-lineales, estacionarios, transitorios, etc.). De acuerdo a la relación que guardan entre la información de entrada y salida, se pueden distinguir dos tipos de modelos matemáticos (Himmelblau y Bischoff, 1968): los deterministas, en los cuales las mismas entradas producen siempre las mismas salidas y los estocásticos donde lo anterior no siempre se cumple y más bien existe una cierta probabilidad de que se obtenga un tipo de resultado de salida ante un tipo de entrada. Los modelos estocásticos cobran especial importancia para estudiar situaciones con altos grados de incertidumbre (por ejemplo, el movimiento aleatorio del polvo en el aire, o el mercado cambiario), mientras que los modelos deterministas son más apropiados en sistemas donde se puede tener certidumbre que un cierto proceso ocurra (por ejemplo, el vaciado de un tanque, el calentamiento de una barra, etc.). Sin embargo, hay casos que pueden estudiarse mediante ambos enfoques, un ejemplo de ello es la difusión molecular. En este texto, se utilizarán primordialmente los modelos matemáticos deterministas porque son apropiados para los casos de estudio que se tratan aquí. Sin embargo, lo anterior no sugiere que los modelos estocásticos sean menos importantes o prácticos.

Los modelos deterministas pueden formularse de varias formas, las cuales pueden agruparse en dos categorías: los modelos basados en la observación y los modelos basados en principios fundamentales. Los primeros necesitan de modelos físicos (es decir, experimentos) que aporten datos confiables para posteriormente encontrar expresiones matemáticas que los representen. Este enfoque requiere que los experimentos sean reproducibles y no necesariamente enriquecen el entendimiento del proceso más allá de las observaciones experimentales (Gershenfeld, 1998). En este caso, un modelo será más aceptable que otro en función de qué tan cerca se ajusten las predicciones teóricas a los datos experimentales. Si un modelo determinado no es capaz de reproducir un cierto conjunto de datos experimentales puede ser simplemente reemplazado por otro, tal vez con más parámetros de ajuste, que logre una mejor concordancia.

Los modelos basados en principios fundamentales tienen su origen a menudo también en la observación experimental y en la necesidad de mejorar la comprensión de lo que ocurre en el sistema. Como su nombre lo indica, su formulación involucra principios conservativos que tienen su origen en la termodinámica (Callen, 1985). Tras ser resueltos, estos modelos deben validarse al comparar las predicciones del modelo con datos obtenidos experimentalmente. En este caso un modelo será mejor que otro no solo en la medida en que pueda reproducir los resultados experimentales sino en cuanto a los fundamentos teóricos propuestos que expliquen satisfactoriamente los experimentos. Si esta concordancia no se alcanza a menudo se debe a las suposiciones impuestas en la simplificación de los modelos, las cuales pueden revisarse y corregirse para asegurarse que la realidad sea representada de manera adecuada. En síntesis, los modelos basados en la observación, son modelos *a posteriori* (ya que requieren de la experimentación para formularse) y los modelos basados en principios fundamentales son modelos *a priori* de la experiencia, sin embargo, esto no implica que no requieran de experimentos para su validación.

1.3 Herramiental matemático

Definición 1.3.1 — Operadores de diferenciación espacial. Sea \mathbf{a} una función vectorial continua, entonces se pueden definir los siguientes operadores:

1. **Gradiente:** $\nabla \mathbf{a}$, el cual indica la dirección donde ocurren los cambios espaciales de la función \mathbf{a} . Este operador está definido para escalares, vectores y tensores.
2. **Divergencia:** $\nabla \cdot \mathbf{a}$, indica si un campo vectorial o tensorial se expande (divergencia positiva), se contrae (divergencia negativa) o permanece inalterado (divergencia cero).
3. **Rotacional:** $\nabla \times \mathbf{a}$, indica la rotación de un campo vectorial. Tanto la divergencia como el rotacional sólo están definidos para vectores y tensores.

Definición 1.3.2 — Derivadas temporales. Sea f una función (escalar, vectorial o tensorial) continua en el espacio y en el tiempo, de acuerdo al marco de referencia pueden definirse las siguientes tres derivadas:

1. **Derivada parcial:** Describe los cambios de f de acuerdo a un observador que se encuentra fijo en el espacio y se representa matemáticamente como $\partial f / \partial t$.
2. **Derivada total:** Describe los cambios de f de acuerdo a un observador que se mueve a una velocidad arbitraria \mathbf{w} y se representa matemáticamente como:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{w} \cdot \nabla f. \quad (1.3.1)$$

3. **Derivada material:** Describe los cambios de f de acuerdo a un observador que se mueve a la velocidad del fluido \mathbf{v} y se representa matemáticamente como:

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f. \quad (1.3.2)$$

Con las definiciones anteriores se pueden describir varios procesos de interés a un nivel de escala local e instantáneo, es decir a un nivel de escala microscópico. Sin embargo, a menudo el interés está en describir procesos que ocurren a niveles de escala mayores que el continuo. Para llevar a cabo estas descripciones *macroscópicas*, existen tres tipos de regiones que están disponibles para el análisis de problemas de fenómenos de transporte:

Definición 1.3.3 — Regiones espaciales.

1. Región arbitraria: su forma, movimiento y tamaño no tienen restricción alguna.
2. Región material: su forma y tamaño deben asegurar que siempre se conserve la misma cantidad de materia y su velocidad es la del fluido.
3. Región fija: su forma y tamaño no pueden cambiar y está fijo en el espacio.

Como puede notarse, una región arbitraria está asociada a una derivada total, mientras que una región material está asociada a una derivada material y una región fija a una derivada parcial debido a los sistemas de referencia utilizados. De esta forma, la derivada total de una propiedad f definida en una región arbitraria define el *teorema general del transporte*:

Teorema 1.3.1 — Teorema general del transporte. Sea f una propiedad definida en una región arbitraria $\mathcal{V}_A(t)$, entonces la derivada total de la integral volumétrica de f satisface la siguiente igualdad

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A(t)} f dV = \int_{\mathcal{V}_A(t)} \frac{\partial f}{\partial t} dV + \int_{\mathcal{A}_A(t)} \mathbf{n} \cdot \mathbf{w} f dA, \quad (1.3.3)$$

donde \mathbf{w} representa la velocidad con la que se desplazan las superficies de $\mathcal{A}_A(t)$. Además, \mathbf{n} es el vector unitario normal a dicha superficie.

Para el caso en que el dominio siempre tenga la misma cantidad de materia (es decir, es un dominio material, \mathcal{V}_M) y se mueva a la velocidad del fluido \mathbf{v} , el teorema general del transporte se

transforma en el Teorema del transporte de Reynolds:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M(t)} A dV = \int_{\mathcal{V}_M(t)} \frac{\partial A}{\partial t} dV + \int_{\mathcal{A}_M(t)} \mathbf{A} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA. \quad (1.3.4)$$

Por último, para el caso en que el dominio de integración está fijo en el espacio (y es por tanto independiente del tiempo), el teorema general del transporte se reduce a:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_f} A dV = \int_{\mathcal{V}_f} \frac{\partial A}{\partial t} dV. \quad (1.3.5)$$

Como puede notarse, la utilidad que tienen los teoremas anteriores es para intercambiar las operaciones de diferenciación temporal e integración espacial, lo cual es de especial importancia en la deducción de modelos de transporte como se muestra más adelante. Aunado a estos teoremas, se cuenta con el teorema de la divergencia:

$$\int_{\mathcal{V}} \nabla \cdot \mathbf{a} dV = \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot \mathbf{a} dA. \quad (1.3.6)$$

El cual es aplicable a cualquiera de las tres regiones definidas arriba y permite transformar integrales tridimensionales a integrales de superficie.

En los párrafos siguientes se revisa el uso del herramental matemático presentado arriba a la deducción de las ecuaciones de conservación de masa, de cantidad de movimiento y de energía mecánica en una fase. Estas deducciones se hacen ya que el planteamiento de los modelos matemáticos del resto del texto se hace a partir de estos principios. De esta forma, para cada aplicación que se considera aquí se hacen simplificaciones a estas ecuaciones generales. Lo anterior difiere del uso de técnicas como los balance de coraza (Bird y col., 2014) en donde se deduce el modelo particular a emplear para cada aplicación.

Ejercicio 1.1 Demuestre que el teorema del transporte de Reynolds puede expresarse como:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M(t)} A dV = \int_{\mathcal{V}_M(t)} \left(\frac{DA}{Dt} + A \nabla \cdot \mathbf{v} \right) dV. \quad (1.3.7)$$

1.4 Conservación de masa

El principio de conservación de masa es bien conocido y puede enunciarse en cualquiera de las tres regiones mencionadas arriba. Como la región arbitraria es la más general, es conveniente expresar en palabras este principio de conservación como sigue

Ecuación de continuidad (forma macroscópica con palabras)

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{La razón de cambio en el tiempo} \\ \text{de la masa en la región} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Flujo neto de entrada de masa} \\ \text{por las fronteras de la región} \end{array} \right\}. \quad (1.4.1)$$

Antes de continuar, es pertinente aclarar que en el interior de la región solo está comprendida una fase. El lado izquierdo de esta ecuación puede expresarse en lenguaje matemático como sigue

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{La razón de cambio en el tiempo} \\ \text{de la masa en la región} \end{array} \right\} = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \rho dV. \quad (1.4.2)$$

Note que la masa de la región se calculó sumando los productos de la densidad por el diferencial de volumen a lo largo de \mathcal{V}_A . Por su parte, el flujo neto de entrada de masa por las fronteras se traduce en lenguaje matemático mediante la siguiente integral de superficie

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Flujo neto de entrada de masa} \\ \text{por las fronteras de la región} \end{array} \right\} = - \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \rho(\mathbf{v} - \mathbf{w}) dA, \quad (1.4.3)$$

donde el signo negativo se debe a que el vector unitario apunta hacia afuera de la superficie \mathcal{A}_A . Sustituyendo las ecuaciones (1.4.2) y (1.4.3) en la ecuación (1.4.1) da como resultado

Ecuación de continuidad (forma macroscópica)

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \rho dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \rho(\mathbf{v} - \mathbf{w}) dA = 0. \quad (1.4.4)$$

Esta forma del principio de conservación de masa es especialmente útil para estudiar problemas macroscópicos. Con esta ecuación se pueden describir los cambios temporales, pero no espaciales de la masa en regiones arbitrarias. Sin embargo, por el momento el interés está en deducir su forma local e instantánea, es decir una ecuación que sea válida en cada punto de una fase a cada instante de tiempo. La aplicación del teorema general del transporte (ecuación 1.3.3) al primer término de la ecuación anterior lleva a la siguiente expresión

$$\int_{\mathcal{V}_A} \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v} dA = 0. \quad (1.4.5)$$

O bien, usando el teorema de la divergencia en el segundo término y agrupando los dos términos resultantes en una sola integral

$$\int_{\mathcal{V}_A} \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \right] dV = 0. \quad (1.4.6)$$

A partir de esta integral se deduce la *ecuación de continuidad*

Ecuación de continuidad (forma microscópica)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (1.4.7)$$

Esta ecuación es válida en cada punto de una fase y requiere además de una ecuación de estado que relacione a la densidad con la presión y temperatura. Para casos en los que la densidad sea constante en el espacio y en el tiempo, la ecuación anterior se deduce a

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (1.4.8)$$

la cual expresa la condición de *flujo incompresible*.

Ejercicio 1.2 Muestre que si se comienza por el principio de conservación de masa en una región material o arbitraria, se puede llegar a la ecuación (1.4.5). ■

Ejercicio 1.3 — Formulación alternativa de la ecuación de continuidad. Utilice la definición de derivada material y lleve a cabo las operaciones algebraicas necesarias para demostrar que la ecuación de continuidad dada en la ecuación (1.4.7) puede expresarse como

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho (\nabla \cdot \mathbf{v}) = 0. \quad (1.4.9)$$

Ejercicio 1.4 — Teorema modificado de Reynolds. Utilice la ecuación de continuidad para deducir el teorema modificado de Reynolds

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \rho \psi dV = \int_{\mathcal{V}_M} \rho \frac{D\psi}{Dt} dV, \quad (1.4.10)$$

donde ψ es una función continua en el espacio y en el tiempo.

1.5 Conservación de cantidad de movimiento lineal

El principio de conservación de cantidad de movimiento lineal engloba a las tres leyes de Newton y corresponde a la primera ley de Euler como lo explica (Whitaker, 2009). Para un dominio arbitrario, este principio se puede expresar en palabras como (Gray y Gray, 2017)

Ecuación de movimiento lineal (forma macroscópica en palabras)

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{La razón de cambio en el tiempo de} \\ \text{la cantidad de movimiento en} \\ \text{un dominio arbitrario} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Flujo neto de entrada de} \\ \text{cantidad de movimiento por} \\ \text{las fronteras del dominio} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Fuerzas que actúan} \\ \text{dentro del dominio} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Fuerzas que actúan en} \\ \text{las fronteras del dominio} \end{array} \right\}. \quad (1.5.1)$$

Traduciendo al lenguaje matemático cada término de esta ecuación se obtiene

Ecuación de movimiento lineal (forma macroscópica)

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \rho \mathbf{v} dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \rho (\mathbf{v} - \mathbf{w}) \mathbf{v} dA = \int_{\mathcal{V}_A} \rho \mathbf{b} dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{t}_n dA, \quad (1.5.2)$$

donde \mathbf{b} representa las fuerzas volumétricas por unidad de masa, mientras que \mathbf{t}_n es el vector de fuerzas superficiales. De acuerdo al *teorema fundamental de Cauchy*, dicho vector se relaciona con el tensor de esfuerzos totales como (Whitaker, 1992):

$$\mathbf{t}_n = \mathbf{n} \cdot \mathbf{T}. \quad (1.5.3)$$

Sustituyendo esta definición en la ecuación (1.5.2) y usando el teorema general del transporte en el primer término del lado izquierdo se obtiene que

$$\int_{\mathcal{V}_A} \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} dA = \int_{\mathcal{V}_A} \rho \mathbf{b} dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} dA. \quad (1.5.4)$$

O bien, tras aplicar el teorema de la divergencia y agrupar todos los términos dentro de una sola integral volumétrica:

$$\int_{\mathcal{V}_A} \left[\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) - \rho \mathbf{b} - \nabla \cdot \mathbf{T} \right] dV = \mathbf{0}. \quad (1.5.5)$$

De donde se extrae la *primera ecuación de Cauchy*

Primera ecuación de Cauchy

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \rho \mathbf{b} + \nabla \cdot \mathbf{T}. \quad (1.5.6)$$

Para obtener este resultado se utilizó la forma microscópica de la ecuación de continuidad (ecuación 1.4.7) así como la definición de la derivada material (ecuación 1.3.2). El tensor de esfuerzos totales puede descomponerse en los esfuerzos perpendiculares (debidos a la presión) y tangenciales (debidos a los esfuerzos viscosos) al fluido como se muestra a continuación

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}, \quad (1.5.7)$$

donde el signo de menos en el primer término se debe a que la presión se aplica hacia el fluido y el sentido del esfuerzo es hacia afuera del fluido. El tensor de esfuerzos cortantes en el segundo término de la ecuación anterior se puede relacionar con el tensor de deformación $\mathbf{D} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T]$ de manera lineal de acuerdo a la ley de Newton de la viscosidad (Batchelor, 2000)

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu \mathbf{D} + \mathbf{I} \left(\kappa - \frac{2}{3}\mu \right) (\nabla \cdot \mathbf{v}), \quad (1.5.8)$$

donde μ es el coeficiente de viscosidad dinámica, κ es la viscosidad de dilatación (o viscosidad de volumétrica). Los coeficientes μ y κ pueden cambiar con la presión y la temperatura y para el caso de un flujo Newtoniano se consideran independientes de \mathbf{D} . Se sabe que $\kappa = 0$ para gases monoatómicos y es generalmente aceptado que $\kappa \ll \mu$ para otros fluidos. Una excepción de esta suposición es un líquido que contenga burbujas, como un refresco. Para casos en los que el flujo se incompresible, la ecuación de continuidad adquiere la forma dada en la ecuación (1.4.8) y el tensor de esfuerzos cortantes se reduce a

$$\boldsymbol{\tau} = \mu [\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T]. \quad (1.5.9)$$

Sustituyendo esta expresión en la primera ecuación de Cauchy (ecuación 1.5.6) da lugar a la conocida ecuación de Navier (1822)-Stokes (1880) (ver ejercicio 1.6):

Ecuación de Navier-Stokes

$$\underbrace{\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}}_{\text{acumulación de cantidad de movimiento}} + \underbrace{\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}}_{\text{esfuerzos inerciales}} = - \underbrace{\nabla p}_{\text{esfuerzos superficiales normales}} + \underbrace{\rho \mathbf{g}}_{\text{esfuerzos volumétricos}} + \underbrace{\mu \nabla^2 \mathbf{v}}_{\text{esfuerzos superficiales tangenciales}}, \quad (1.5.10)$$

donde el vector de fuerza volumétrica fue reemplazado por el vector de gravedad. Note que se incluyó el significado físico de cada término. Esta ecuación, junto con la ecuación de continuidad dada en la ecuación (1.4.8) forman un sistema cerrado de ecuaciones diferenciales, cuyas incógnitas son la presión y la velocidad y con las cuales se puede estudiar una amplia variedad de problemas como se muestra en los textos de mecánica de fluidos (Whitaker, 1992; Batchelor, 2000).

Ejercicio 1.5 Utilice la ecuación de continuidad y la definición de derivada material para deducir la ecuación (1.5.6) a partir de la ecuación (1.5.5). ■

Ejercicio 1.6 Tome la divergencia de ambos lados de la ecuación (1.5.9) y tome en cuenta la condición de flujo incompresible, para demostrar que $\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = \mu \nabla^2 \mathbf{v}$ para casos en los que el coeficiente de viscosidad sea constante. ■

1.6 Ecuación de energía mecánica

Para los desarrollos que siguen es necesario deducir la ecuación de energía mecánica en una fase. Esta ecuación puede deducirse a partir de las ecuaciones de movimiento. Para ilustrar lo anterior se toma el producto interno de la primera ecuación de Cauchy con el vector de velocidad del fluido \mathbf{v} ,

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} \cdot \mathbf{v} = \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} + (\nabla \cdot \mathbf{T}) \cdot \mathbf{v}. \quad (1.6.1)$$

Para avanzar, se toman en cuenta las siguientes identidades

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{2} \frac{Dv^2}{Dt}, \quad (1.6.2a)$$

$$(\nabla \cdot \mathbf{T}) \cdot \mathbf{v} = \nabla \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) - \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v}. \quad (1.6.2b)$$

De esta forma, la ecuación (1.6.1) toma la siguiente forma

$$\frac{\rho}{2} \frac{Dv^2}{Dt} = \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) - \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v}. \quad (1.6.3)$$

Esta forma en particular de la ecuación de energía mecánica se usará más adelante para la deducción de la ecuación de energía térmica. Si se sustituye ahora la descomposición del tensor de esfuerzos totales dada en la ecuación (1.5.7), el resultado es

$$\frac{\rho}{2} \frac{Dv^2}{Dt} = -\nabla \cdot (p\mathbf{v}) + \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} + p(\nabla \cdot \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{v}) - \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v}. \quad (1.6.4)$$

Más aún, para un flujo newtoniano e incompresible se satisface la ecuación (1.5.9). Por lo tanto, el penúltimo término del lado derecho de la ecuación (1.6.4) toma la siguiente forma

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{v}) = \frac{\mu}{2} \nabla^2 v^2 + \mu \nabla \cdot ((\nabla \mathbf{v})^T \cdot \mathbf{v}). \quad (1.6.5)$$

En donde se tomó en cuenta la identidad

$$\nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{2} \nabla v^2, \quad (1.6.6)$$

Note que el último término de la ecuación eq13 puede modificarse al notar que

$$\nabla \cdot ((\nabla \mathbf{v})^T \cdot \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}) = \nabla \mathbf{v} : \nabla \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla (\nabla \cdot \mathbf{v}) = \nabla \mathbf{v} : \nabla \mathbf{v}. \quad (1.6.7)$$

En la última igualdad se tomó en cuenta la suposición de flujo incompresible. De esta forma, la ecuación (1.6.4) toma la siguiente forma:

$$\frac{\rho}{2} \frac{Dv^2}{Dt} = -\nabla \cdot (p\mathbf{v}) + \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{2} \mu \nabla^2 v^2 + \mu \nabla \mathbf{v} : \nabla \mathbf{v} - \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v}. \quad (1.6.8)$$

Dirigiendo la atención al último término de la ecuación anterior, el resultado de sustituir la ley de Newton de la viscosidad es:

$$\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} = \mu \nabla \mathbf{v} : \nabla \mathbf{v} + \mu (\nabla \mathbf{v})^T : \nabla \mathbf{v}. \quad (1.6.9)$$

Por lo que la forma final de la ecuación de energía mecánica es:

Ecuación de energía mecánica

$$\frac{\rho}{2} \left(\frac{\partial v^2}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla v^2 \right) = -\nabla \cdot (p\mathbf{v}) + \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{2} \mu \nabla^2 v^2 - \mu \nabla \mathbf{v}^T : \nabla \mathbf{v}. \quad (1.6.10)$$

Los términos del lado izquierdo de la ecuación anterior representan la acumulación y el transporte convectivo de energía cinética, respectivamente. Por su parte, los términos del lado derecho representan: $-\nabla \cdot (p\mathbf{v})$: la tasa de trabajo de presión ejercida por los alrededores hacia el fluido; $\rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v}$ la tasa de trabajo debida a fuerzas volumétricas; $\frac{1}{2} \mu \nabla^2 v^2$ transporte difusivo de energía cinética; $-\mu \nabla \mathbf{v}^T : \nabla \mathbf{v}$ la tasa de conversión irreversible de energía mecánica a energía interna o disipación viscosa.

Ejercicio 1.7 Utilice notación indicial para demostrar las identidades dadas en las ecuaciones (1.6.2), (1.6.6) y (1.6.7). ■

Ejercicio 1.8 Deduzca el resultado dado en la ecuación (1.6.10) a partir de tomar el producto punto de la ecuación de Navier-Stokes con el vector de velocidad. ■

1.7 Ecuación de la energía térmica

El principio fundamental de conservación de energía es la primera ley de la termodinámica y puede enunciarse como sigue

Primera ley de la termodinámica (expresada en palabras)

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{El cambio de energía interna} \\ \text{cinética y potencial de un sistema} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Suma del calor y trabajo que actúan} \\ \text{sobre la superficie del sistema} \end{array} \right\}. \quad (1.7.1)$$

En lenguaje matemático, la ecuación anterior toma la siguiente forma algebraica:

$$\Delta U + \Delta E_c + \Delta E_p = Q + W. \quad (1.7.2)$$

Donde los cambios de energía interna, cinética y potencial se refieren a la diferencia entre los estados final e inicial de dichas propiedades. Estos estados inicial y final, pueden asociarse a instantes de tiempo específicos, los cuales se denotan como t_1 y t_2 , respectivamente. De esta forma, se tiene que

$$\Delta \psi = \psi(t_2) - \psi(t_1) = \int_{t_1}^{t_2} D\psi; \quad \psi = U, E_c, E_p. \quad (1.7.3)$$

Por su parte Q y W pueden expresarse también como integrales temporales de las tasas a las cuales se suministra calor y trabajo al sistema en cada instante, esto es,

$$Q = \int_{t_1}^{t_2} \dot{Q} Dt; \quad W = \int_{t_1}^{t_2} \dot{W} Dt. \quad (1.7.4)$$

Por lo tanto, la primera ley de la termodinámica también puede escribirse como una sola integral temporal:

$$\int_{t_1}^{t_2} [DU + DE_c + DE_p - (\dot{Q} + \dot{W}) Dt] = 0. \quad (1.7.5)$$

De donde se puede extraer la siguiente ecuación diferencial ordinaria:

$$\frac{DU}{Dt} + \frac{DE_c}{Dt} + \frac{DE_p}{Dt} = \dot{Q} + \dot{W}. \quad (1.7.6)$$

Esta expresión es la *forma instantánea de la primera ley de la termodinámica*. Debe quedar claro que todas las cantidades involucradas en la ecuación anterior son macroscópicas pues se refieren al sistema, que en este contexto se refiere a un cuerpo o bien a una región material. Por ello, las derivadas que aparecen en la ecuación anterior son derivadas materiales.

Ya que U , E_c y E_p son cantidades macroscópicas, pueden expresarse en términos de sus contrapartes microscópicas (y por unidad de masa) mediante las siguientes integrales volumétricas

$$U = \int_{\mathcal{V}_M} \rho \hat{e} dV; \quad E_c = \int_{\mathcal{V}_M} \rho \frac{v^2}{2} dV; \quad E_p = \int_{\mathcal{V}_M} \rho \hat{\phi} dV, \quad (1.7.7)$$

donde \hat{e} y $\hat{\phi}$ denotan la energía interna por unidad de masa y la energía potencial por unidad de masa, respectivamente.

Dirigiendo la atención al primer término en el lado derecho de la ecuación (1.7.6), se sabe que la energía suministrada en forma de calor o por medio de radiación es recibida por la superficie del cuerpo. Por lo que si se denota por \mathbf{q} y \mathbf{q}_R a la densidad de flujo (o *flux*) de calor (es decir, el calor por unidad de área y de tiempo) y de radiación hacia el cuerpo, se tiene entonces que

$$\dot{Q} = - \int_{\mathcal{A}_M} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_R) dA, \quad (1.7.8)$$

donde el signo negativo se debe a que el vector unitario, \mathbf{n} , está dirigido hacia afuera del cuerpo, mientras que los flujos de calor van dirigidos hacia dentro del cuerpo.

Por último, la tasa a la cual se suministra trabajo (es decir, la potencia) en las superficies del sistema puede expresarse en términos del producto interno del vector de esfuerzos y la velocidad del fluido, o bien usando el teorema fundamental de Cauchy (ecuación 1.5.3) como sigue:

$$\dot{W} = \int_{\mathcal{A}_M} \mathbf{t}_n \cdot \mathbf{v} dA = \int_{\mathcal{A}_M} \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{v} dA. \quad (1.7.9)$$

Usando estas definiciones en la ecuación (1.7.6), la forma instantánea de la primera ley de la termodinámica es ahora:

Primera ley de la termodinámica (forma macroscópica e instantánea)

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \left(\rho \hat{e} + \frac{1}{2} \rho v^2 + \rho \hat{\phi} \right) dV = \int_{\mathcal{A}_M} \mathbf{n} \cdot (-\mathbf{q} - \mathbf{q}_R + \mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) dA. \quad (1.7.10)$$

Dirigiendo la atención al último término del lado izquierdo de la ecuación anterior se tiene, con la ayuda del teorema modificado de Reynolds (ver ecuación 1.4.10), que:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \rho \hat{\phi} dV = \int_{\mathcal{V}_M} \rho \frac{D\hat{\phi}}{Dt} dV = \int_{\mathcal{V}_M} \rho \left(\frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \hat{\phi} \right) dV. \quad (1.7.11)$$

Dado que la energía potencial no cambia con el tiempo, la ecuación anterior se reduce a:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \rho \hat{\phi} dV = \int_{\mathcal{V}_M} \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \hat{\phi} dV = - \int_{\mathcal{V}_M} \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} dV. \quad (1.7.12)$$

En la última igualdad se utilizó la definición del vector de fuerzas volumétricas por unidad de masa:

$$\mathbf{b} = -\nabla\hat{\phi}. \quad (1.7.13)$$

De esta forma, la ecuación (1.7.10) puede escribirse como:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \left(\rho \hat{e} + \frac{1}{2} \rho v^2 \right) dV = \int_{\mathcal{A}_M} \mathbf{n} \cdot (-\mathbf{q} - \mathbf{q}_R + \mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) dA + \int_{\mathcal{V}_M} \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} dV. \quad (1.7.14)$$

Este resultado es consistente con la siguiente ecuación con palabras que puede encontrarse en textos de fenómenos de transporte (Bird y col., 2006; Whitaker, 1983). Como es evidente, la ecuación (1.7.14) es válida para una región material. Gray y Gray (2017) proporcionan una versión más general de esta ecuación, la cual es aplicable a una región arbitraria.

Ejercicio 1.9 Utilice la descomposición del tensor de esfuerzos totales dada en la ecuación (1.5.7) para expresar a la ecuación (1.7.14) en términos de la presión y el tensor de esfuerzos viscosos. ■

Para deducir la forma local e instantánea de la ecuación de conservación de energía, es conveniente expresar la ecuación (1.7.14) como una sola integral de volumen igualada a cero tal y como se hizo en el caso de la ecuación de continuidad (sección 1.4) y de cantidad de movimiento (sección 1.5). Como primer paso, se utiliza el teorema modificado de Reynolds (ecuación 1.4.10) en el término del lado izquierdo de la ecuación (1.7.14), lo que da como resultado

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \left(\rho \hat{e} + \frac{1}{2} \rho v^2 \right) dV = \int_{\mathcal{V}_M} \rho \frac{D}{Dt} \left(\hat{e} + \frac{1}{2} v^2 \right) dV = \int_{\mathcal{V}_M} \rho \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\hat{e} + \frac{1}{2} v^2 \right) + \mathbf{v} \cdot \nabla \left(\hat{e} + \frac{1}{2} v^2 \right) \right] dV, \quad (1.7.15a)$$

donde en la última igualdad se utilizó la definición de la derivada material. Con este paso ya no se tiene una derivada de una integral, sino una integral volumétrica de términos con derivadas. El siguiente paso es entonces aplicar el teorema de la divergencia en el primer término del lado derecho de la ecuación (1.7.14), para transformar dicha integral de superficie a la siguiente integral volumétrica

$$\int_{\mathcal{A}_M} \mathbf{n} \cdot (-\mathbf{q} - \mathbf{q}_R + \mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) dA = \int_{\mathcal{V}_M} \nabla \cdot (-\mathbf{q} - \mathbf{q}_R + \mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) dV. \quad (1.7.15b)$$

El resultado de sustituir las ecuaciones (1.7.15) en la ecuación (1.7.14) es la siguiente expresión,

$$\int_{\mathcal{V}_M} \left[\rho \frac{D}{Dt} \left(\hat{e} + \frac{1}{2} v^2 \right) + \nabla \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_R - \mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) - \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \right] dV = 0. \quad (1.7.16)$$

De donde se extrae la *ecuación de energía total* (Bird y col., 2006)

Ecuación de energía total (versión microscópica)

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(\hat{e} + \frac{1}{2} v^2 \right) = -\nabla \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_R) + \nabla \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) + \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v}. \quad (1.7.17)$$

La ecuación anterior combina tanto las contribuciones térmicas como mecánicas de transporte de energía que actúan en cada punto de una fase. En la sección 1.6, se presentó la deducción de la

ecuación de energía mecánica. Para aislar las contribuciones exclusivas por transporte de energía térmica de la ecuación de energía total, se sustrae la ecuación (1.6.3) a la ecuación (1.7.17) para obtener la siguiente expresión

$$\rho \frac{D\hat{e}}{Dt} = -\nabla \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_R) + \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v}, \quad (1.7.18)$$

la cual es una primera forma microscópica de la *ecuación de energía térmica*. A diferencia de la ecuación de energía mecánica, la cual requiere conocimiento de la velocidad y el tensor de esfuerzos totales, los cuales provienen de resolver las ecuaciones de continuidad y de cantidad de movimiento; la ecuación anterior tiene como incógnitas a la energía interna por unidad de masa, así como las densidades de flujo por conducción y radiación. Estas variables no están disponibles en este punto del análisis, por lo que el modelo no está cerrado. Para atender esta situación, se comienza por sustituir la descomposición del tensor de esfuerzos totales dada en la ecuación (1.5.7) en el último término de la ecuación anterior para obtener

$$\rho \frac{D\hat{e}}{Dt} = -\nabla \cdot \mathbf{q} - \nabla \cdot \mathbf{q}_R - p \nabla \cdot \mathbf{v} + \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v}. \quad (1.7.19)$$

Con el fin de expresar al lado izquierdo de la ecuación (1.7.19) en función de la temperatura del cuerpo, se recurre a la definición de entalpía por unidad de masa (Callen, 1985):

$$\hat{h} = \hat{e} + \frac{p}{\rho}. \quad (1.7.20)$$

Aplicando el operador de derivada material en ambos lados de la ecuación anterior da como resultado

$$\frac{D\hat{h}}{Dt} = \frac{D\hat{e}}{Dt} + \frac{1}{\rho} \frac{Dp}{Dt} - \frac{p}{\rho^2} \frac{D\rho}{Dt}. \quad (1.7.21)$$

Despejando de la ecuación anterior el término $\frac{D\hat{e}}{Dt}$ y, tomando en cuenta la forma de la ecuación de continuidad dada en la ecuación (1.4.9) se obtiene el siguiente resultado

$$\frac{D\hat{e}}{Dt} = \frac{D\hat{h}}{Dt} - \frac{1}{\rho} \frac{Dp}{Dt} - \frac{p}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (1.7.22)$$

Sustituyendo la expresión anterior en el término del lado izquierdo de la ecuación (1.7.19), da lugar a

$$\rho \frac{D\hat{h}}{Dt} = -\nabla \cdot \mathbf{q} - \nabla \cdot \mathbf{q}_R + \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} + \frac{Dp}{Dt}. \quad (1.7.23)$$

Para avanzar es conveniente recordar que la entalpía es función de la temperatura y la presión (ver, por ejemplo Callen, 1985), y dicha dependencia puede expresarse como sigue

$$\frac{D\hat{h}}{Dt} = \left. \frac{D\hat{h}}{DT} \right|_p \frac{DT}{Dt} + \left. \frac{D\hat{h}}{Dp} \right|_T \frac{Dp}{Dt} = C_p \frac{DT}{Dt} + \frac{1}{\rho} (1 - \alpha_T) \frac{Dp}{Dt}, \quad (1.7.24)$$

donde C_p y α_T son la capacidad calorífica a presión constante y el coeficiente de expansión térmica, respectivamente (ver ejercicio 1.10). Este último coeficiente se define como

$$\alpha_T = - \left. \frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{DT} \right|_p. \quad (1.7.25)$$

Sustituyendo la ecuación (1.7.24) en la ecuación (1.7.23) y usando la definición de la derivada material permite llegar a la siguiente expresión

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \Phi. \quad (1.7.26)$$

Para hacer más breve esta expresión se utilizó la siguiente definición

$$\Phi = \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} + T \alpha_T \frac{Dp}{Dt} - \nabla \cdot \mathbf{q}_R. \quad (1.7.27)$$

Note que si $\Phi > 0$, existe generación de calor en el sistema y si $\Phi < 0$ el sistema tiene pérdidas de calor. Aunque se conservará esta forma compacta, no debe olvidarse que Φ contiene contribuciones debidas a la disipación viscosa, los cambios materiales de la presión y la radiación.

Ejercicio 1.10 — Entalpía y expansión térmica. Partiendo de la siguiente relación entre la entalpía por unidad de masa, la entropía por unidad de masa (s) y la presión para sistemas cerrados (es decir, regiones materiales),

$$Dh = TDs + \frac{Dp}{\rho}, \quad (1.7.28)$$

y tomando en cuenta que

$$\left. \frac{Ds}{Dp} \right|_T = - \left. \frac{D\rho^{-1}}{DT} \right|_P, \quad (1.7.29)$$

demuestre que

$$\left. \frac{Dh}{Dp} \right|_T = \frac{1}{\rho} (1 - \alpha T). \quad (1.7.30)$$

Ejercicio 1.11 — Disipación viscosa. En el caso en el que exista flujo de un fluido, ¿qué signo debe tener $\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v}$?

Ejercicio 1.12 — Forma macroscópica de la ecuación de energía térmica. Integre la ecuación (1.7.26) en una región arbitraria y explique, bajo qué condiciones, puede obtenerse la siguiente forma macroscópica de la ecuación de energía térmica

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \rho C_p T dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot [\rho C_p T (\mathbf{v} - \mathbf{w}) + \mathbf{q}] dA = \int_{\mathcal{V}_A} \Phi dV. \quad (1.7.31)$$

Explique el significado físico de cada término para así poder expresar este resultado en forma de ecuación con palabras.

Por último, el flux conductivo de calor está relacionado con el gradiente de temperatura mediante la ley de Fourier (1878):

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K} \cdot \nabla T, \quad (1.7.32)$$

donde \mathbf{K} es el tensor de conductividad térmica. Para materiales de conductividad isotropa, se tiene que $\mathbf{K} = k\mathbf{l}$. En estos casos, la ecuación de energía térmica se expresa como:

Ecuación de energía térmica (forma local e instantánea)

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \Phi. \quad (1.7.33)$$

La ecuación anterior es la forma cerrada de la ecuación de la energía térmica en su versión local e instantánea.

1.8 Transferencia de masa de una especie

Existen dos axiomas fundamentales que rigen el transporte de masa en mezclas multicomponentes. El primer axioma puede expresarse con palabras como sigue:

Principio de conservación de masa (expresada en palabras)

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{La razón de cambio en el tiempo} \\ \text{de la masa de una especie} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{La tasa de entrada de masa de la} \\ \text{especie por las fronteras} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{La tasa de generación o} \\ \text{consumo de la especie} \end{array} \right\}. \quad (1.8.1)$$

Traduciendo al lenguaje matemático la ecuación anterior se obtiene la siguiente expresión

Forma macroscópica del principio de conservación de masa

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \rho_A dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \rho_A (\mathbf{v}_A - \mathbf{w}) dA = \int_{\mathcal{V}_A} r_A dV. \quad (1.8.2)$$

donde ρ_A , \mathbf{v}_A y r_A representan la densidad, velocidad y tasa de generación de la especie A , respectivamente. Como se indica en la ecuación de arriba, esta forma corresponde a la versión macroscópica de la conservación de masa, por lo que se dedican los siguientes párrafos a la deducción de su versión microscópica.

Utilizando el teorema general del transporte en el lado izquierdo de la ecuación (1.8.2) resulta:

$$\int_{\mathcal{V}_A} \frac{\partial \rho_A}{\partial t} dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_A \rho_A dA = \int_{\mathcal{V}_A} r_A dV. \quad (1.8.3)$$

Usando ahora el teorema de la divergencia en el segundo término del lado izquierdo, se obtiene

$$\int_{\mathcal{V}_A} \left(\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_A \rho_A) - r_A \right) dV = 0. \quad (1.8.4)$$

A partir de este resultado se puede extraer la *ecuación de continuidad de una especie*:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{n}_A = r_A, \quad A = 1, \dots, N. \quad (1.8.5)$$

En donde además se utilizó la definición del *flux másico de una especie*:

$$\mathbf{n}_A = \rho_A \mathbf{v}_A. \quad (1.8.6)$$

La ecuación (1.8.5) no está cerrada pues no se ha especificado la relación entre \mathbf{n}_A y r_A con la concentración másica ρ_A . La forma específica de r_A está determinada por la aplicación particular

que se esté estudiando y puede ser un término lineal o no lineal. Para atender la cerradura del flux másico \mathbf{n}_A , puede tomarse en cuenta el hecho de que la velocidad de una especie, \mathbf{v}_A , puede descomponerse en términos de la velocidad convectiva \mathbf{v} y de la velocidad difusiva \mathbf{u}_A :

$$\mathbf{v}_A = \mathbf{v} + \mathbf{u}_A. \quad (1.8.7)$$

O bien, en términos del flux

$$\mathbf{n}_A = \rho_A \mathbf{v} + \mathbf{j}_A. \quad (1.8.8)$$

donde $\rho_A \mathbf{v}$ es el flux convectivo y \mathbf{j}_A es el flux difusivo. Este último se relaciona con el gradiente de ρ_A mediante la *ley de Fick (1855)*

$$\mathbf{j}_A = -\mathcal{D}_A \nabla \rho_A, \quad (1.8.9)$$

donde \mathcal{D}_A es el coeficiente de difusión de la especie A . Es importante mencionar que la relación de cerradura dada en la ecuación anterior sólo es válida para condiciones de solución diluida, esto es, cuando $\rho_A \ll \rho$.

Entonces, la forma cerrada de la ecuación de continuidad en base másica es:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_A \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\mathcal{D}_A \nabla \rho_A) + r_A, \quad A = 1, \dots, N. \quad (1.8.10)$$

A menudo, se utiliza la forma *molar* de la ecuación anterior. Para obtenerla simplemente se dividen ambos lados de la ecuación entre el peso molecular de la especie A , M_A , para obtener

Forma microscópica de la conservación de una especie (base molar)

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \nabla \cdot (c_A \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\mathcal{D}_A \nabla c_A) + R_A, \quad A = 1, \dots, N, \quad (1.8.11)$$

donde $c_A = \rho_A/M_A$ y $R_A = r_A/M_A$. A pesar de las suposiciones que implican estas ecuaciones, pueden usarse para resolver una amplia variedad de problemas de interés en ingeniería.

1.9 Síntesis

Las ecuaciones de conservación que se dedujeron en los párrafos anteriores pueden resumirse como sigue:

- Transferencia total de masa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (1.9.1)$$

- Transferencia de una especie (base másica)

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_A \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\mathcal{D}_A \nabla \rho_A) + r_A. \quad (1.9.2)$$

- Transferencia de una especie (base molar)

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \nabla \cdot (c_A \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\mathcal{D}_A \nabla c_A) + R_A. \quad (1.9.3)$$

- Transferencia de cantidad de movimiento

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{v}). \quad (1.9.4)$$

- Transferencia de calor

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (T\mathbf{v}) = \nabla \cdot (\alpha \nabla T) + \frac{\Phi}{\rho c_p}. \quad (1.9.5)$$

Las ecuaciones deducidas en los párrafos anteriores pueden resumirse en la siguiente forma general:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi \mathbf{v} + \boldsymbol{\sigma}) = \Psi, \quad (1.9.6)$$

donde el primer término del lado izquierdo se refiere a la acumulación, el segundo término al transporte por convección y difusión, mientras que el término del lado derecho es una fuente (o sumidero). Las formas particulares de las variables involucradas en la ecuación anterior se muestran a continuación:

Resumen de fenómenos de transporte			
Transporte	φ	$\boldsymbol{\sigma}$	Ψ
Masa total	ρ	$\mathbf{0}$	0
Masa de una especie (base másica)	ρ_A	$-\mathcal{D}_A \nabla \rho_A$	r_A
Masa de una especie (base molar)	c_A	$-\mathcal{D}_A \nabla c_A$	R_A
Cantidad de movimiento	$\rho \mathbf{v}$	$-\mu \nabla \mathbf{v}$	$\rho \mathbf{g} - \nabla p$
Transferencia de calor	T	$-\alpha \nabla T$	$\Phi / \rho c_p$

1.10 Condiciones de frontera

Aunque las condiciones de frontera tienen una formulación más amplia, para los propósitos de muchas de las aplicaciones que se abordan en este texto, es conveniente clasificarlas en las siguientes tres categorías:

- Condiciones tipo Dirichlet:** se especifica el valor de la variable dependiente en una frontera:

$$\varphi = \phi, \quad \text{en } \mathcal{A}. \quad (1.10.1)$$

Este es el caso cuando se conoce por ejemplo el valor de la temperatura en una superficie o bien cuando se especifica la presión de un fluido en una cara del sistema.

- Condiciones tipo Neuman:** Se especifica el valor del flux en una frontera. A menudo, se conoce la componente normal a la superficie del flux, esto es:

$$\mathbf{n} \cdot (\varphi \mathbf{v} + \boldsymbol{\sigma}) = \xi, \quad \text{en } \mathcal{A}. \quad (1.10.2)$$

En este texto, el vector normal siempre apunta de la fase que se está considerando hacia el exterior. Este es el caso cuando se conoce el valor de una fuente o sumidero de calor o masa en alguna superficie o bien cuando se conoce el valor del esfuerzo cortante en alguna superficie.

- Condiciones tipo Robin:** Se especifica una combinación lineal de la variable dependiente y el flux:

$$\alpha \varphi + \beta \mathbf{n} \cdot (\varphi \mathbf{v} + \boldsymbol{\sigma}) = \gamma, \quad \text{en } \mathcal{A}. \quad (1.10.3)$$

Un ejemplo de esta condición es la ley de enfriamiento de Newton:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{q} = h(T - T_\infty), \quad \text{en } \mathcal{A}, \quad (1.10.4)$$

donde h es el coeficiente interfacial de transferencia de calor, el cual colapsa el transporte por convección y conducción que tiene lugar en la capa límite. Esta misma estructura matemática puede encontrarse en problemas de transferencia de masa y de cantidad de movimiento.

An illustration in a warm, golden-brown color palette. It depicts a person's profile on the right, looking towards a 3D coordinate system on the left. The person's hand is pointing towards the system. The coordinate system has three axes labeled x, y, and z. A sphere is drawn in the 3D space, with lines connecting its center to the axes. The background features faint outlines of other faces, suggesting a collaborative or educational setting.

2. El método de diferencias finitas

2.1 Introducción

Los modelos matemáticos desarrollados en el capítulo anterior pueden usarse para describir el transporte de masa, cantidad de movimiento y calor en una amplia variedad de sistemas de interés. Sin embargo, la solución de las ecuaciones de transporte sólo puede llevarse a cabo de manera analítica en ciertas geometrías, como son cartesianas, cilíndricas y esféricas. Para estudiar la solución en dominios más complicados es necesario recurrir a los métodos numéricos. A pesar del progreso en el poder computacional que se tiene para resolver numéricamente las ecuaciones de transporte, no debe olvidarse que este tipo de soluciones son aproximadas pues las ecuaciones se resuelven de manera discreta y no continua como en las soluciones analíticas. Actualmente, existen muchas alternativas interesantes de soluciones numéricas como son el elemento a la frontera (Katsikadelis, 2016), el método de diferencias finitas (Smith, 1985), el método de elemento finito (Šolin, 2005) y de volumen finito (Versteeg y Malalasekera, 2007). El método de elemento a la frontera incorpora de manera exacta las condiciones de frontera mediante la fórmula de Green y posteriormente interpola la información para determinar la solución en el dominio. Los métodos de diferencias finitas y elemento finito resuelven las formas microscópicas de las ecuaciones de conservación en nodos y elementos discretos y son el método numérico a utilizar en este texto. Por último, el método de volumen finito discretiza y resuelve las ecuaciones de transporte en su forma macroscópica. De hecho, este último método, así como el método del elemento finito, se utilizan mucho para la solución numérica de las ecuaciones de flujo de fluidos y es un campo activo de investigación que se conoce como *dinámica de fluidos computacional* o bien *computational fluid dynamics* (CFD) (Hinch, 2020).

El objetivo de este capítulo es presentar fundamentos y algunas aplicaciones del método de diferencias finitas en problemas de interés en ingeniería. Para cumplir este objetivo, el capítulo está organizado como sigue: en la sección 2.2 se presenta una breve discusión acerca de las mallas computacionales, lo que da pie a que se presenten los fundamentos del método de diferencias finitas junto con el algoritmo de Thomas en las secciones 2.3 y 2.4, respectivamente. Estos conceptos se utilizan primeramente para predecir el perfil de temperatura en una barra que separa dos placas paralelas como se ilustra en la sección 2.5. Esta primera ilustración es unidimensional en

coordenadas cartesianas, por lo que en la sección 2.6 se estudia un problema de transporte reactivo de un soluto en coordenadas cartesianas, cilíndricas y esféricas y se hacen las predicciones del factor de efectividad en estos y otros sistemas coordenados. Además, en esta misma sección se incluye un apartado donde se explica la solución de problemas no lineales mediante funciones de Green. Posteriormente, se estudia un problema en el que hay transporte en dos dominios y se elige al transporte entre un medio poroso y un fluido para ilustrar esta situación en la sección 2.7. Las últimas dos secciones del capítulo están dedicadas a los fundamentos y aplicaciones de problemas de transporte transitorios. En específico, en la sección 2.9 se estudia la dinámica de la transferencia de masa y reacción en un tanque agitado heterogéneo. En todos los casos presentados aquí se presentan los programas en Matlab correspondientes para obtener los resultados reportados.

2.2 Mallas computacionales

Para llevar a cabo la solución numérica de problemas de valor a la frontera, es necesario dividir al dominio de la ecuación diferencial en numerosos subdominios que se conocen como *celdas* o *elementos*. Los vértices de los elementos se llaman *nodos* y pueden ubicarse tanto en el dominio como en sus fronteras. Ya que un número infinito de subdominios lleva a un continuo, puede razonarse que en cuanto más fina sea la malla mejor será la solución numérica. Sin embargo, esta idea intuitiva no siempre está justificada. De hecho, el éxito de una solución numérica depende más bien de su convergencia y estabilidad, mientras que su exactitud y precisión pueden mejorarse a través de la malla computacional.

Existen tres tipos de mallas computacionales: *estructuradas*, *no estructuradas* e *híbridas*. Las mallas estructuradas consisten en nodos indizados en un cierto orden, de tal forma que la malla es cuadrilateral en 2D y hexagonal en 3D. Las mallas no estructuradas consisten en nodos colocados aleatoriamente, que al unirse forman por lo regular elementos triangulares (2D) o tetraédricos (3D). Por último, las mallas híbridas son una combinación de las mallas estructuradas y no estructuradas. En la figura 2.1 se muestra un ejemplo de las mallas estructuradas y no estructuradas para un dominio bidimensional, destacando los nodos de dominio y de frontera. Como puede notarse, en una malla estructurada los elementos son regulares, mientras que en una malla no estructurada los triángulos son de tamaño variable. De hecho, las mallas estructuradas son más eficientes desde el punto de vista computacional pues requieren menos memoria respecto a las mallas no estructuradas. Sin embargo, las mallas estructuradas no son fáciles de construir para geometrías complicadas como la de la figura 2.1. Para combinar las bondades de ambos tipos de mallas es que se propusieron las mallas híbridas.

Cabe agregar que en aplicaciones más sofisticadas de problemas de ingeniería, no sólo es necesario contar con mallas híbridas o de tamaño variable, sino que además es necesario permitir que las mallas se deformen, se refinan o incluso se muevan en una dirección determinada (Farmer y col., 2009). El procedimiento de refinado de malla consiste en los siguientes pasos: 1) resolver el problema con una determinada malla, 2) Identificar las mallas que deben hacerse más gruesas o más finas, 3) Dividir los elementos para el refinado y 4) refinar elementos adicionales para mantener un cambio suave en la densidad de la malla, lo cual es necesario para no perder la estabilidad de la solución. En aplicaciones más avanzadas se ilustra el uso de mallas móviles en Comsol Multiphysics. Por el momento, las aplicaciones se centrarán en el uso de mallas fijas y estructuradas.

2.3 El método de diferencias finitas en 1D

Los métodos de diferencias finitas se basan en el uso de series de Taylor para aproximar las derivadas en las ecuaciones diferenciales. De una manera sencilla, una serie de Taylor se define como sigue

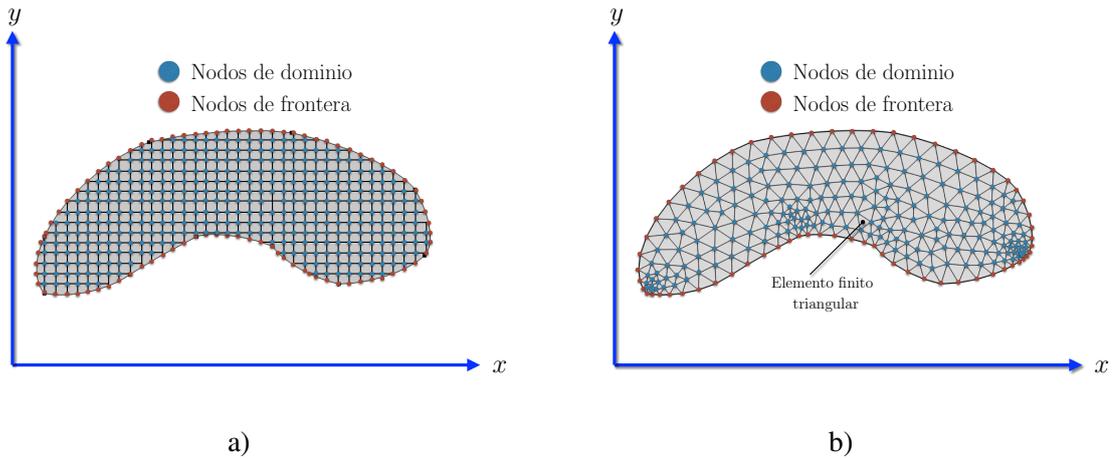


Figura 2.1: Ejemplos de nodos y elementos para a) una malla estructurada y b) una malla no estructurada en un dominio bidimensional.

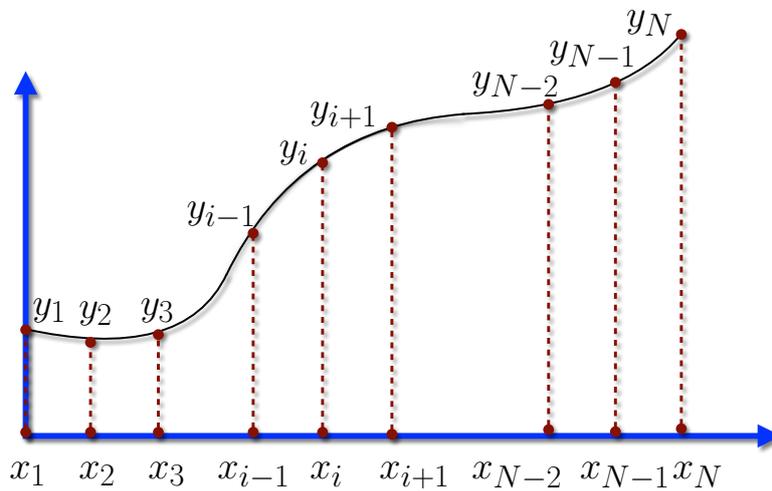


Figura 2.2: Esquema de la relación de una función unidimensional y sus nodos computacionales.

Definición 2.3.1 — Serie de Taylor. Una función $f(x)$, la cual es infinitamente diferenciable, puede expandirse alrededor de un punto x_0 de acuerdo a la siguiente expresión

$$f(x) = f(a) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(x - x_0)^n}{n!} \left. \frac{\partial^n f}{\partial x^n} \right|_{x=a} \quad (2.3.1)$$

Para el caso particular en el que $x_0 = 0$, la serie se conoce como *serie de Maclaurin*.

En la figura 2.2 se muestra un ejemplo de una función unidimensional y su relación con N nodos computacionales. De esta forma, el nodo x_1 corresponde a la posición $x = a$ que es el inicio del dominio, mientras que el nodo x_N representa a la posición $x = b$ que marca el final del dominio. El espaciamiento, Δx , de los nodos computacionales puede calcularse como sigue

$$\Delta x = \frac{x_N - x_1}{N - 1} = \frac{b - a}{N - 1} \quad (2.3.2)$$

Como dicho espaciamento es constante, se tiene que

$$\Delta x = \frac{x_i - x_1}{i - 1}, \quad (2.3.3)$$

de donde puede despejarse a x_i como sigue:

$$x_i = a + (i - 1)\Delta x, \quad \text{para } i = 1, \dots, N. \quad (2.3.4)$$

De esta forma, una función y definida en el nodo $i + 1$ puede expandirse en series de Taylor alrededor del nodo i como sigue

$$y_{i+1} = y_i + \Delta x \left. \frac{\partial y}{\partial x} \right|_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left. \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \right|_i + \frac{\Delta x^3}{3!} \left. \frac{\partial^3 y}{\partial x^3} \right|_i + \frac{\Delta x^4}{4!} \left. \frac{\partial^4 y}{\partial x^4} \right|_i + \dots \quad (2.3.5a)$$

De la misma forma, una función definida en el nodo $i - 1$ puede expandirse alrededor del nodo i como sigue

$$y_{i-1} = y_i - \Delta x \left. \frac{\partial y}{\partial x} \right|_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left. \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \right|_i - \frac{\Delta x^3}{3!} \left. \frac{\partial^3 y}{\partial x^3} \right|_i + \frac{\Delta x^4}{4!} \left. \frac{\partial^4 y}{\partial x^4} \right|_i + \dots \quad (2.3.5b)$$

Sumando estas ecuaciones se obtiene la siguiente fórmula para la segunda derivada:

Definición 2.3.2 — Aproximación de la segunda derivada.

$$\left. \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \right|_i = \frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{\Delta x^2} + \mathbf{O}(\Delta x^2), \quad (2.3.6)$$

donde $\mathbf{O}(\Delta x^2)$ denota que la fórmula tiene un orden de aproximación de Δx^2 .

Además, utilizando las ecuaciones (2.3.5) se obtienen las siguientes tres fórmulas para la primera derivada

Definición 2.3.3 — Aproximaciones de la primera derivada.

■ **Derivada hacia adelante**

$$\left. \frac{\partial y}{\partial x} \right|_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{\Delta x} + \mathbf{O}(\Delta x). \quad (2.3.7)$$

■ **Derivada hacia atrás**

$$\left. \frac{\partial y}{\partial x} \right|_i = \frac{y_i - y_{i-1}}{\Delta x} + \mathbf{O}(\Delta x). \quad (2.3.8)$$

■ **Derivada centrada**

$$\left. \frac{\partial y}{\partial x} \right|_i = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2\Delta x} + \mathbf{O}(\Delta x^2). \quad (2.3.9)$$

Como puede notarse, las fórmulas de derivada hacia adelante y atrás tienen mayor error que la fórmula de derivada centrada, lo cual sugeriría que sólo debiera usarse esta última fórmula; sin embargo, esto no siempre es posible. Por ejemplo, si una condición en la frontera $x = a$ es de tipo Neumann, entonces sólo puede usarse la fórmula de derivada hacia atrás.

De esta forma, lo que se genera al discretizar la ecuación diferencial y condiciones de frontera es un sistema de ecuaciones algebraicas que debe resolverse de una forma eficiente. En principio, pueden usarse diferentes técnicas para resolver sistemas de ecuaciones como el método de

eliminación gaussiana. Sin embargo, como se mostrará en los ejemplos más adelante, el sistema de ecuaciones que se genera con esta técnica es de tipo *tridiagonal*. Se le conoce así ya que la matriz de coeficientes del sistema de ecuaciones contiene ceros excepto en la diagonal principal y en las diagonales arriba y abajo de ésta. Para resolver este tipo de sistemas de ecuaciones se utiliza el *algoritmo de Thomas*, el cual se explica en los siguientes párrafos.

2.4 El algoritmo de Thomas

Considere la siguiente ecuación vectorial

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{d} \quad (2.4.1)$$

En donde \mathbf{M} es la matriz de coeficientes y tiene N filas por N columnas, \mathbf{u} es el vector de incógnitas (de N filas y una columna) y \mathbf{d} es un vector de la misma dimensión que \mathbf{u} pero que no contiene incógnitas. La ecuación anterior puede expresarse en forma matricial como sigue

$$\underbrace{\begin{bmatrix} B_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_3 & B_3 & C_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_N & B_N \end{bmatrix}}_{\mathbf{M}} \underbrace{\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ u_N \end{bmatrix}}_{\mathbf{u}} = \underbrace{\begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ d_N \end{bmatrix}}_{\mathbf{d}}. \quad (2.4.2)$$

Como puede notarse, este es un sistema que acopla N -ecuaciones linealmente independientes. La primera ecuación es

$$B_1 u_1 + C_1 u_2 = d_1. \quad (2.4.3)$$

Despejando a la incógnita u_1 se obtiene la siguiente expresión

$$u_1 = g_1 - b_1 u_2. \quad (2.4.4)$$

Por conveniencia, se usaron las siguientes definiciones en la ecuación anterior

$$\omega_1 = B_1^{-1} \quad b_1 = \omega_1 C_1 \quad g_1 = \omega_1 d_1. \quad (2.4.5)$$

Como puede notarse, la ecuación (2.4.4) no es una solución explícita de u_1 pues aún depende de la incógnita u_2 . Continuando con la segunda ecuación a resolver, ésta puede escribirse como

$$A_2 (g_1 - b_1 u_2) + B_2 u_2 + C_2 u_3 = d_2, \quad (2.4.6)$$

donde ya se sustituyó el resultado de la ecuación (2.4.4). Despejando u_2 de la ecuación anterior se obtiene una expresión con estructura similar a la mostrada en la ecuación (2.4.4):

$$u_2 = g_2 - b_2 u_3, \quad (2.4.7)$$

donde ahora se usaron las siguientes definiciones

$$\omega_2 = (B_2 - A_2 b_1)^{-1}; \quad b_2 = \omega_2 C_2, \quad g_2 = \omega_2 (d_2 - A_2 g_1). \quad (2.4.8)$$

A partir del resultado anterior se puede deducir la siguiente fórmula de recurrencia

$$u_i = g_i - b_i u_{i+1}, \quad \text{para } i = 2, \dots, N-1, \quad (2.4.9)$$

donde los coeficientes son:

$$\omega_i = (B_i - A_i b_{i-1})^{-1} \quad b_i = \omega_i C_i \quad g_i = \omega_i (d_i - A_i g_{i-1}) \quad \text{para } i = 2, \dots, N-1. \quad (2.4.10)$$

Es claro que la ecuación (2.4.9) no puede usarse para $i = N$ ya que quedaría expresada en términos de la incógnita u_{N+1} , la cual no existe. Por ello, vale la pena dirigir la atención a la última ecuación del sistema de ecuaciones, la cual puede escribirse como sigue

$$A_N u_{N-1} + B_N u_N = d_N. \quad (2.4.11)$$

O bien, sustituyendo a la ecuación (2.4.9) para $i = N-1$, esto es: $u_{N-1} = g_{N-1} - b_{N-1} u_N$ y despejando a u_N , se obtiene la siguiente expresión cerrada

$$u_N = \frac{d_N - A_N g_{N-1}}{B_N - A_N b_{N-1}} = g_N. \quad (2.4.12)$$

En este momento es importante notar que los vectores de coeficientes ω , \mathbf{b} y \mathbf{g} pueden calcularse tan solo con el conocimiento de los componentes de la matriz \mathbf{M} y el vector \mathbf{d} . De esta forma, al tener todos los componentes de los vectores ω , \mathbf{b} y \mathbf{g} se puede proceder a determinar u_N , el cual puede usarse para calcular u_{N-1} y así sucesivamente hasta llegar a u_1 . A continuación se presenta la programación en Matlab de una función llamada Thomas que sigue este algoritmo

Algoritmo de Thomas como función en Matlab

```
function u=Thomas(A,B,C,D,N)
w=zeros(N,1);
b=zeros(N,1);
g=zeros(N,1);
w(1)=1/B(1);
b(1)=w(1)*C(1);
g(1)=w(1)*D(1);
for i=2:N-1
    w(i)=1/(B(i)-A(i)*b(i-1));
    b(i)=w(i)*C(i);
    g(i)=w(i)*(D(i)-A(i)*g(i-1));
end
w(N)=1/(B(N)-A(N)*b(N-1));
g(N)=w(N)*(D(N)-A(N)*g(N-1));
u(N)=g(N);
for i=N-1:-1:1
    u(i)=g(i)-b(i)*u(i+1);
end
```

A continuación se ilustra el uso de este método en un problema que tiene solución analítica.

2.5 Solución de un problema de transferencia de calor unidimensional

Considere el sistema mostrado en la figura 2.3, el cual consiste en dos placas paralelas separadas entre sí a una distancia L por una barra cilíndrica de radio R . Esta barra cumple la función de

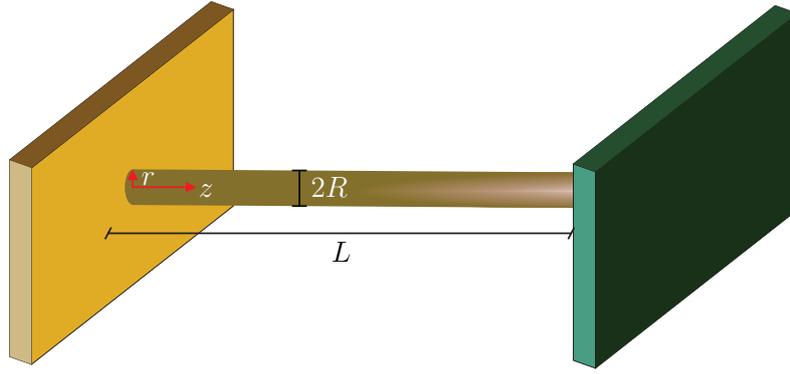


Figura 2.3: Esquema de un sistema que consiste en dos placas paralelas a diferentes temperaturas separadas a una distancia L por un cilindro de radio R .

transferir el calor de la placa izquierda (la cual se supone se encuentra a la temperatura mayor T_0) hacia la placa de la derecha, la cual se encuentra a una temperatura T_L . Además, la superficie lateral de la barra está expuesta a la temperatura ambiente (T_a) y presenta resistencias a la transferencia de calor. Se busca predecir los cambios espaciales de la temperatura promedio (en la sección transversal) a lo largo de la barra.

Bajo condiciones de estado estacionario y ya que no hay convección ni fuente interna en la barra, la ecuación de energía térmica se reduce, para esta situación física, a:

$$0 = \nabla \cdot (k\nabla T). \quad (2.5.1)$$

O bien, en coordenadas cilíndricas y tomando en cuenta que la conductividad térmica es una constante distinta de cero:

$$0 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}. \quad (2.5.2a)$$

Suponiendo condiciones de simetría angular y radial, la ecuación anterior está sujeta a las siguientes condiciones de frontera:

$$\text{en } r = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad (2.5.2b)$$

$$\text{en } r = R, \quad -k \frac{\partial T}{\partial r} = h(T - T_a), \quad (2.5.2c)$$

$$T(r, 0, z) = T(r, 2\pi, z), \quad (2.5.2d)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial \theta} \right|_{\theta=0} = \left. \frac{\partial T}{\partial \theta} \right|_{\theta=2\pi}, \quad (2.5.2e)$$

$$\text{en } z = 0, \quad T = T_0, \quad (2.5.2f)$$

$$\text{en } z = L, \quad T = T_L. \quad (2.5.2g)$$

En la ecuación (2.5.2c), h es el coeficiente interfacial de transferencia de calor y se supone constante. En este primero problema, el interés no está en resolver las ecuaciones anteriores, sino en describir la transferencia de calor en términos de la siguiente temperatura promedio:

$$\langle T \rangle = \frac{1}{\pi R^2} \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{r=0}^{r=R} T r dr d\theta. \quad (2.5.3)$$

Note que la temperatura promedio sólo depende de z . Aplicando este operador de promediado a la ecuación diferencial (2.5.2a) resulta la siguiente expresión:

$$0 = \left\langle \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right\rangle + \left\langle \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} \right\rangle + \frac{d^2 \langle T \rangle}{dz^2}. \quad (2.5.4)$$

Ahora bien, con base en las condiciones de frontera se deducen los siguientes resultados:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right\rangle &= \frac{1}{\pi R^2} \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{r=0}^{r=R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) dr d\theta = \frac{1}{\pi R} \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} d\theta \\ &= -\frac{h}{\pi k R} \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} (T|_{r=R} - T_a) d\theta, \end{aligned} \quad (2.5.5a)$$

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} \right\rangle = \frac{1}{\pi R^2} \int_{r=0}^{r=R} \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \frac{1}{r} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} d\theta dr = \frac{1}{\pi R^2} \int_{r=0}^{r=R} \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} \Big|_{\theta=0}^{\theta=2\pi} dr = 0. \quad (2.5.5b)$$

En la ecuación (2.5.5a) a menudo suele suponerse que la temperatura en la superficie de la barra es igual a la temperatura promedio, lo cual es razonable siempre y cuando $r \ll L$. Bajo esta suposición, la ecuación (2.5.4) se reduce a

$$0 = \frac{d^2 \langle T \rangle}{dz^2} - \frac{2h}{kR} (\langle T \rangle - T_a). \quad (2.5.6a)$$

Para deducir las condiciones de frontera correspondientes, se promedian las ecuaciones (2.5.2f) y (2.5.2g) suponiendo que T_0 y T_L son constantes para obtener:

$$\text{en } z = 0, \quad \langle T \rangle = T_0, \quad (2.5.6b)$$

$$\text{en } z = L, \quad \langle T \rangle = T_L. \quad (2.5.6c)$$

Note que la formulación del modelo partió del principio de conservación, el cual se simplificó mediante la aplicación de un operador de promediado y de suposiciones razonables. Esto difiere del uso de balances de coraza (Bird y col., 2014) en donde se deduce el modelo particular a cada aplicación a partir de considerar las contribuciones de entrada y salida en cada cara de una región de integración definida *ad hoc*.

Antes de resolver el problema es conveniente reformularlo de manera adimensional. Para ello, se definen las siguientes variables y parámetros adimensionales

$$z^* = \frac{z}{L}, \quad T^* = \frac{\langle T \rangle - T_a}{T_0 - T_a}, \quad T_L^* = \frac{T_L - T_a}{T_0 - T_a}, \quad Bi = \frac{2hL^2}{kR}, \quad (2.5.7)$$

donde Bi es el número de Biot y relaciona las resistencias internas a la transferencia de calor respecto a las resistencias externas. De esta forma, el problema adimensional puede escribirse como

$$0 = \frac{d^2 T^*}{dz^{*2}} - Bi T^*, \quad (2.5.8a)$$

$$z^* = 0, \quad T^* = 1, \quad (2.5.8b)$$

$$z^* = 1, \quad T^* = T_L^*. \quad (2.5.8c)$$

Este problema tiene solución analítica y está dada por la siguiente expresión (ver ejercicio 2.2)

$$T^* = \frac{T_L^* \sinh(\sqrt{Bi} z^*) + \sinh[\sqrt{Bi}(1 - z^*)]}{\sinh(\sqrt{Bi})}. \quad (2.5.9)$$

En forma discreta, el problema dado en las ecuaciones (2.5.8) puede escribirse como el siguiente conjunto de ecuaciones algebraicas

$$T_1^* = 1, \quad \text{en } i = 1, \quad (2.5.10a)$$

$$T_{i-1}^* + \varphi T_i^* + T_{i+1}^* = 0, \quad 2 \leq i \leq N-1, \quad (2.5.10b)$$

$$T_N^* = T_L^*, \quad \text{en } i = N. \quad (2.5.10c)$$

En la ecuación (2.5.10b) se usó

$$\varphi = -(2 + \Delta z^2 Bi). \quad (2.5.11)$$

El sistema de ecuaciones (2.5.10) puede expresarse en forma matricial como sigue

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 1 & \varphi & 1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \varphi & 1 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \varphi & 1 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots \\ \dots & \dots \\ \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 1 & \varphi & 1 & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 1 & \varphi & 1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1^* \\ T_2^* \\ T_3^* \\ T_4^* \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ T_{N-2}^* \\ T_{N-1}^* \\ T_N^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ 0 \\ 0 \\ T_L^* \end{bmatrix}. \quad (2.5.12)$$

Como puede notarse la matriz de coeficientes es tridiagonal y puede usarse el algoritmo de Thomas descrito arriba para resolver este sistema de ecuaciones algebraicas. Bajo este esquema, se encuentra que, en este caso, los vectores **A**, **B**, **C** y **d** son:

$$A_1 = 0, \quad B_1 = 1, \quad C_1 = 0, \quad d_1 = 1, \quad (2.5.13a)$$

$$A_i = 1, \quad B_i = \varphi, \quad C_i = 1, \quad d_i = 0; \quad i = 2, \dots, N-1, \quad (2.5.13b)$$

$$A_N = 0, \quad B_N = 1, \quad C_N = 0, \quad d_N = T_L^*. \quad (2.5.13c)$$

Como puede notarse, la evaluación de la solución analítica solo requiere de especificar los valores de los parámetros Bi y T_L^* , mientras que para evaluar la solución numérica se requiere además especificar el número N de nodos computacionales. A continuación se presenta el programa de Matlab para resolver y comparar ambas soluciones

Programa para la comparación de las soluciones analítica y numérica

```
clear; close all; clc;
format long

% Parámetros
Bi = 1000;
TL= 0;
N=100;

z=linspace(0,1,N);
dz= z(2)-z(1);

%Solución analítica
Ta= (TL*sinh(sqrt(Bi)*z)+sinh(sqrt(Bi)*(1-z)))/sinh(sqrt(Bi));
```

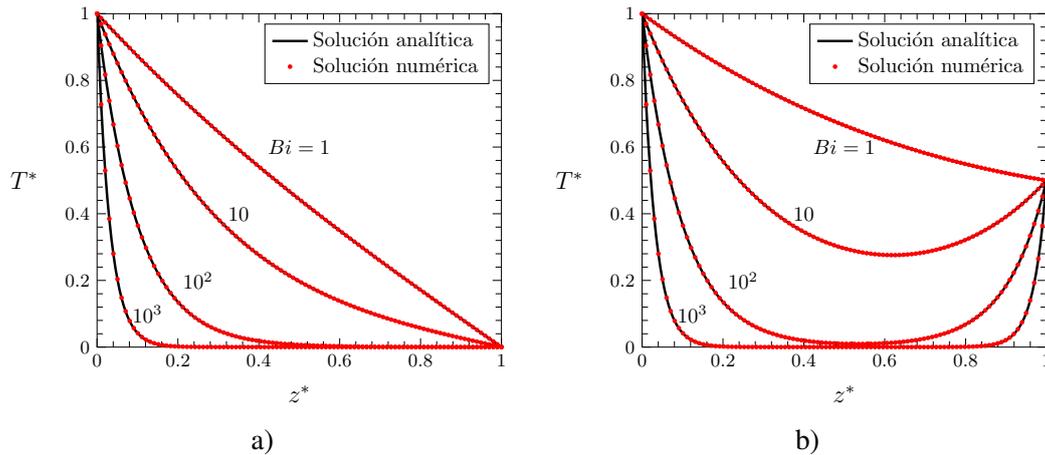


Figura 2.4: Comparación entre las soluciones analítica y numérica para los perfiles de la temperatura promedio en una barra que separa a dos placas paralelas para diferentes valores del número de Biot; fijando a) $T_L^* = 0$ y b) $T_L^* = 0.5$. La solución numérica se presenta usando 100 nodos computacionales.

```

% Solución numérica
A= zeros(N,1);
B= zeros(N,1);
C= zeros(N,1);
d= zeros(N,1);

% Primera condición de frontera
B(1)=1;
d(1)=1;

%Ecuación diferencial
for i=2:N-1
    A(i)= 1;
    B(i)= -(2+dz^2*Bi);
    C(i)= 1;
    d(i)= 0;
end

% Segunda condición de frontera
B(N)=1;
d(N)= TL;

T=Thomas(A,B,C,d,N);
plot(z,Ta, z, T, 'o')

```

En la figura 2.4 se muestra la evaluación de la solución analítica y su comparación con la solución numérica tomando 100 nodos para diferentes valores del número de Biot y tomando dos valores de T_L^* . Se hicieron pruebas con otros números de nodos y se encontró que al fijar $N = 100$ era suficiente para obtener la excelente concordancia entre ambas soluciones que se aprecia en las gráficas del a figura 2.4. Cuando no se cuenta con una solución analítica, se deben hacer pruebas de convergencia de malla en donde se va incrementando sistemáticamente el número

de nodos computacionales hasta que se obtienen resultados que sean prácticamente invariantes a un incremento de N .

De acuerdo a la figura 2.4a), cuando la temperatura de la placa derecha es igual a la temperatura ambiental, la temperatura más baja se encuentra en $z^* = 1$ y, conforme se incrementa el número de Biot, más porciones de la barra alcanzan esta temperatura mínima. Esto tiene sentido ya que un aumento en Bi se traduce en una mejor transferencia de calor con el ambiente. Por su parte, los resultados reportados en la figura 2.4b) corresponden al caso en el que la temperatura más baja es la ambiental y por ello la temperatura mínima se encuentra dentro de la barra y no en $z^* = 1$ para $Bi \geq 10$. Por supuesto el análisis presentado aquí puede extenderse a situaciones más complicadas como se explora en el ejercicio 2.1.

Ejercicio 2.1 — Situaciones físicas alternas. Deduzca el modelo promedio y escriba la forma discretizada del problema para los siguientes casos:

1. El transporte de calor se da por conducción en la barra pero existen resistencias interfaciales a la transferencia de calor en $z = 0$ y $z = L$.
2. El transporte de calor se da por conducción y convección en la barra. Esto es posible si pasa un fluido por dentro de la barra.

En ambos casos presente la discretización de los problemas adimensionales. ■

Ejercicio 2.2 — Solución analítica. Resuelva analíticamente el problema dado en las ecuaciones (2.5.8). Para ello, tome en cuenta que la solución general de la siguiente ecuación diferencial ordinaria de segundo orden

$$\frac{d^2y}{dx^2} - \phi^2y = 0, \quad (2.5.14)$$

está dada por

$$y = c_1 \sinh(\phi x) + c_2 \cosh(\phi x). \quad (2.5.15)$$

Además, utilice la siguiente identidad

$$\sinh(x \pm y) = \sinh(x)\cosh(y) \pm \cosh(x)\sinh(y). \quad (2.5.16)$$

■

2.6 Difusión y reacción en diferentes geometrías

2.6.1 Cinética de primer orden

Considere el siguiente problema de valor a la frontera

$$0 = \frac{\mathcal{D}_A}{x^m} \frac{d}{dx} \left(x^m \frac{dc_A}{dx} \right) - kc_A, \quad (2.6.1a)$$

$$x = 0, \quad \frac{dc_A}{dx} = 0, \quad (2.6.1b)$$

$$x = L, \quad -\mathcal{D}_A \frac{dc_A}{dx} = h(c_A - c_\infty). \quad (2.6.1c)$$

Este problema representa el transporte de masa (en base molar) en estado estacionario por difusión sujeto a una reacción de consumo de primer orden en una sola dirección. Su deducción se discute con más detalle en el ejercicio 2.3. En la ecuación (2.6.1a) el coeficiente m se usa para representar

la geometría, de tal manera que $m = 0, 1$ y 2 corresponde a coordenadas cartesianas, cilíndricas y esféricas (Aris, 1957); aunque también es posible considerar valores fraccionales para representar otro tipo de geometrías como lo sugirieron Burghardt y Kubaczka (1996). La condición de frontera dada en la ecuación (2.6.1b) es una condición de simetría y quiere decir que lo que ocurre en la mitad del sistema es igual a lo que ocurre en la otra mitad y por ello el problema solo se resuelve en una mitad. Por último, la condición de frontera dada en la ecuación (2.6.1c) es una ley de enfriamiento de Newton y representa que la frontera en $x = L$ ofrece resistencias a la transferencia de masa. En esta ecuación h representa el coeficiente interfacial de transferencia de masa y c_∞ es la concentración suficientemente lejos del sistema. En este problema se busca determinar el perfil de concentración interno en el dominio para posteriormente calcular el factor de efectividad definido como

$$\eta = \frac{\int_{x=0}^{x=L} -kc_A x^m dx}{\int_{x=0}^{x=L} -kc_A (x=L)x^m dx} = \frac{(m+1)}{L^{m+1}c_A(x=L)} \int_{x=0}^{x=L} c_A x^m dx. \quad (2.6.2)$$

Para resolver el problema se definen las siguientes variables y parámetros adimensionales

$$c^* = \frac{c_A}{c_\infty}; \quad x^* = \frac{x}{L}, \quad \phi^2 = \frac{kL^2}{\mathcal{D}_A}, \quad Bi = \frac{hL}{\mathcal{D}_A}. \quad (2.6.3)$$

De esta forma, el problema adimensional es

$$0 = \frac{d}{dx^*} \left(x^{*m} \frac{dc^*}{dx^*} \right) - \phi^2 x^{*m} c^*, \quad (2.6.4a)$$

$$x^* = 0, \quad \frac{dc^*}{dx^*} = 0, \quad (2.6.4b)$$

$$x^* = 1, \quad -\frac{dc^*}{dx^*} = Bi(c^* - 1). \quad (2.6.4c)$$

Y el factor de efectividad se escribe ahora como

$$\eta = \frac{(m+1)}{c^*(x^*=1)} \int_{x^*=0}^{x^*=1} c^* x^{*m} dx^*. \quad (2.6.5)$$

Para escribir el problema en forma discreta es necesario contar con las siguientes fórmulas de discretización centradas (Smith, 1985)

$$\frac{d}{dx^*} \left(x^{*m} \frac{dc_A^*}{dx^*} \right) = \frac{\left(x^{*m} \frac{dc_A^*}{dx^*} \right)_{i+1/2} - \left(x^{*m} \frac{dc_A^*}{dx^*} \right)_{i-1/2}}{\Delta x^*}, \quad (2.6.6a)$$

$$\left(x^{*m} \frac{dc_A^*}{dx^*} \right)_{i+1/2} = x_{i+1/2}^{*m} \left(\frac{c_{i+1}^* - c_i^*}{\Delta x^*} \right), \quad (2.6.6b)$$

$$\left(x^{*m} \frac{dc_A^*}{dx^*} \right)_{i-1/2} = x_{i-1/2}^{*m} \left(\frac{c_i^* - c_{i-1}^*}{\Delta x^*} \right), \quad (2.6.6c)$$

donde $x_{i+1/2}^* = (i-1/2)\Delta x^*$ y $x_{i-1/2}^* = (i-3/2)\Delta x^*$. De esta forma, sustituyendo las ecuaciones (2.6.6b) y (2.6.6c) en la ecuación (2.6.6a) se obtiene que

$$\frac{d}{dx^*} \left(x^{*m} \frac{dc_A^*}{dx^*} \right) = \frac{x_{i+1/2}^{*m} c_{i+1}^* - \left(x_{i+1/2}^{*m} + x_{i-1/2}^{*m} \right) c_i^* + x_{i-1/2}^{*m} c_{i-1}^*}{\Delta x^{*2}}. \quad (2.6.7)$$

Con esta fórmula a la mano se obtiene la siguiente forma discretizada del problema de valor a la frontera

$$-c_1^* + c_2^* = 0, \quad (2.6.8a)$$

$$x_{i-1/2}^{*m} c_{i-1}^* - \left(x_{i+1/2}^{*m} + x_{i-1/2}^{*m} + \phi^2 \Delta x^{*2} x^{*m} \right) c_i^* + x_{i+1/2}^{*m} c_{i+1}^* = 0, \quad i = 2, \dots, N-1, \quad (2.6.8b)$$

$$-c_{N-1}^* + (Bi\Delta x^* + 1)c_N^* = Bi\Delta x^*. \quad (2.6.8c)$$

Para calcular el factor de efectividad se necesita llevar a cabo la integral numérica de la concentración, para lo cual se puede recurrir a la regla del trapecio, la cual se define a continuación:

Definición 2.6.1 — Regla del trapecio. Para una función $f(x)$ continua por tramos y definida en el intervalo $x = a$ y $x = b$ en N nodos computacionales, su integral definida en estos límites puede aproximarse como sigue

$$\int_{x=a}^{x=b} f(x) dx = \frac{b-a}{2(N-1)} \left[f(a) + 2 \sum_{i=2}^{i=N-1} f(x_i) + f(b) \right]. \quad (2.6.9)$$

Esta fórmula de integración puede programarse como función en Matlab como sigue

Función trapecio en Matlab

```
function I = trapecio(f,a,b,N)
suma=0;
for i=2:N-1
    suma= suma+f(i);
end
I= (b-a)/(2*(N-1))*(f(1)+2*suma+f(N));
```

De esta forma, para el problema que se desea resolver, el factor de efectividad puede calcularse como sigue

$$\eta = \frac{m+1}{2(N-1)c_N^*} \left[2 \sum_{i=2}^{i=N-1} c_i^* x_i^{*m} + c_N^* \right]. \quad (2.6.10)$$

A continuación se muestra el programa para la evaluación de la solución sin incluir el cálculo del factor de efectividad:

Programa de difusión y reacción (versión 1)

```
clear; close all; clc;
format long
% Parámetros
Nfi= 10;
fi = 100; %logspace(-1,1,Nfi);
Bi =10;
N= 1000;
dx= 1/(N-1);
m=2;
% Vectores
A=zeros(N,1);
```

```

B=zeros(N,1);
C=zeros(N,1);
D=zeros(N,1);
x=zeros(N,1);
xp=zeros(N,1);
xn=zeros(N,1);

%Vectores de posición
for i=1:N
    x(i)= (i-1)*dx;
    xp(i)= (i-1/2)*dx;
    xn(i)= (i-3/2)*dx;
end

% i =1
B(1) = -1;
C(1)= 1;
% i=2, ...,N-1
for i=2:N-1
    A(i)=xn(i)^m;
    B(i)= -(xn(i)^m+xp(i)^m+fi^2*dx^2*x(i)^m);
    C(i)= xp(i)^m;
end
% i=N
A(N)= -1;
B(N)= (Bi*dx+1);
D(N)= Bi*dx;

c=Thomas(A,B,C,D,N);
plot(x,c)

```

En la figura 2.5 se presentan ejemplos de los perfiles de concentración para una placa ($m = 0$) y una esfera ($m = 2$) variando el módulo de Thiele en cuatro órdenes de magnitud y para dos valores del número de Biot. Los resultados muestran que un aumento en el módulo de Thiele hace que la concentración dentro de la partícula disminuya, lo cual tiene sentido ya que se incrementa la tasa de reacción respecto a la velocidad de difusión. Además, los perfiles de concentración también aumentan con el número de Biot, ya que se disminuyen las resistencias externas a la transferencia de masa. Además, al comparar los resultados de una placa con los de una esfera, se observa que los perfiles de concentración se incrementan en la esfera ya que contiene mayor superficie de contacto.

El programa que se mostró arriba se modificó para poder calcular el factor de efectividad y se lista a continuación

Programa de difusión y reacción (versión 2)

```

clear; close all; clc;
format long
% Parámetros
Nfi= 1000;
til = logspace(-1,2,Nfi);

```

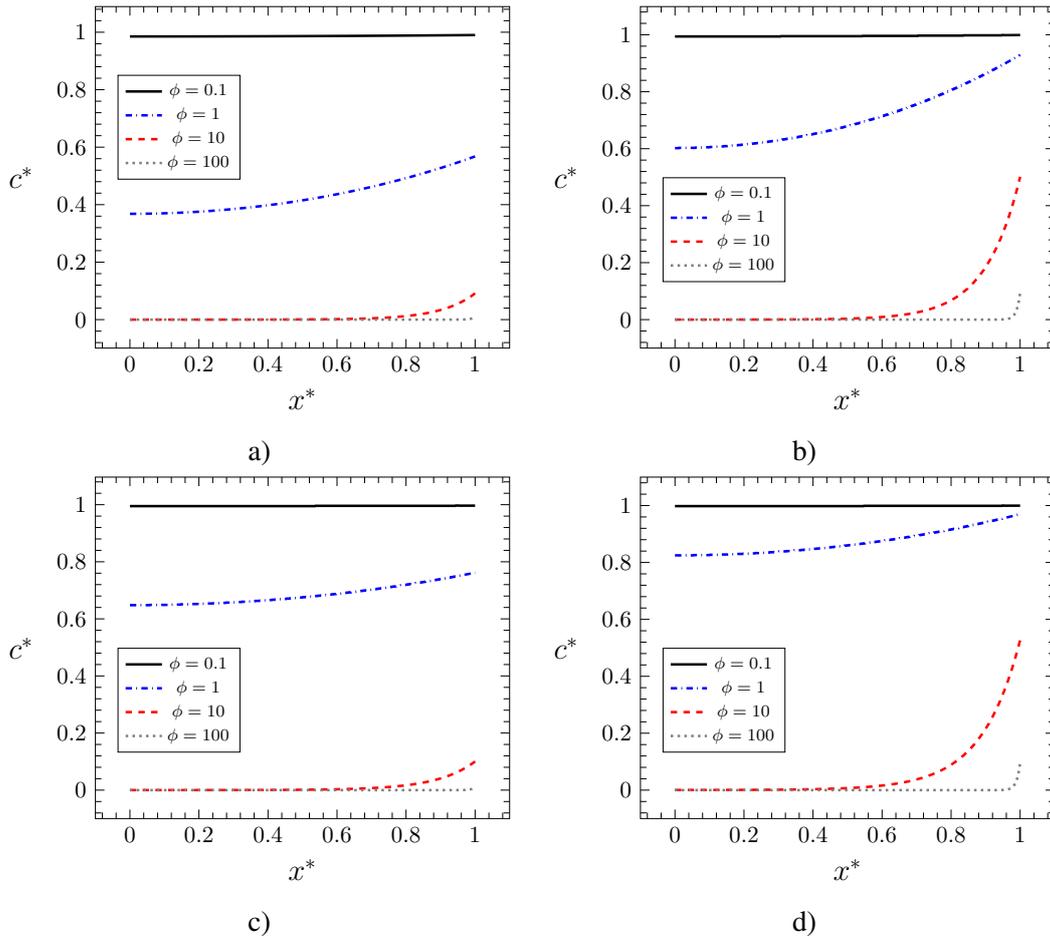


Figura 2.5: Perfiles de concentración para a) $Bi = 1, m = 0$; b) $Bi = 10, m = 0$; c) $Bi = 1, m = 2$; d) $Bi = 10, m = 2$ para cuatro valores de ϕ .

```

Bi =10;
N= 1000;
dx= 1/(N-1);
m=2;
% Vectores
A=zeros(N,1);
B=zeros(N,1);
C=zeros(N,1);
D=zeros(N,1);
x=zeros(N,1);
xp=zeros(N,1);
xn=zeros(N,1);
f=zeros(N,1);
eta = zeros(Nfi,1);

%Vectores de posición
for i=1:N
    x(i)= (i-1)*dx;

```

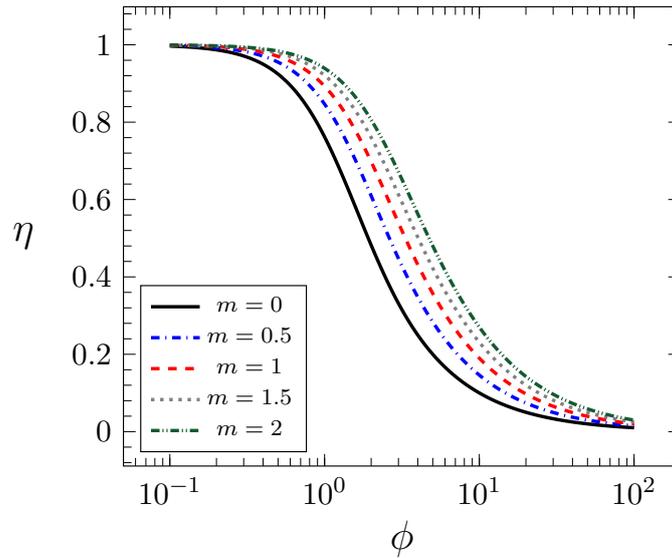


Figura 2.6: Predicción del factor de efectividad como función del módulo de Thiele para diferentes geometrías.

```

    xp(i)= (i-1/2)*dx;
    xn(i)= (i-3/2)*dx;
end

% i =1
B(1) = -1;
C(1)= 1;

% i=N
A(N)= -1;
B(N)= (Bi*dx+1);
D(N)= Bi*dx;

for j=1:Nfi
    fi=til(j);
    % i=2,...,N-1
    for i=2:N-1
        A(i)=xn(i)^m;
        B(i)= -(xn(i)^m+xp(i)^m+fi^2*dx^2*x(i)^m);
        C(i)= xp(i)^m;
    end
    c=Thomas(A,B,C,D,N);
    for i=1:N
        f(i)= c(i)*x(i)^m;
    end
    eta(j)= (m+1)*trapecio(f,0,1,N)/c(N);
end
semilogx(til,eta)

```

En la figura 2.6 se presentan predicciones del factor de efectividad para un amplio rango de

valores del módulo de Thiele para diferentes geometrías, incluyendo factores de forma fraccionales. Como es de esperarse, el factor de efectividad disminuye cuando se incrementa el módulo de Thiele. Además, al incrementar la superficie de contacto, es decir al aumentar el valor del factor de forma m , se incrementa el factor de efectividad. Estos resultados son consistentes con los mostrados en la figura 2.5 para los perfiles de concentración.

Hasta este momento el análisis se ha llevado a cabo para una cinética de primer orden. Para concluir esta sección se presenta un esquema iterativo para analizar casos con cinéticas no lineales.

Ejercicio 2.3 — Deducción del problema de valor a la frontera. En este problema se busca que deduzca las ecuaciones (2.6.1) para coordenadas cartesianas, cilíndricas y esféricas. Explique qué suposiciones deben satisfacerse para que estas ecuaciones sean aplicables. ■

Ejercicio 2.4 — Soluciones analíticas de los factores de efectividad. Demuestre que las expresiones analíticas del factor de efectividad en coordenadas cartesianas, cilíndricas y esféricas son

$$m = 0, \quad \eta = \frac{\tanh(\phi)}{\phi}, \quad (2.6.11a)$$

$$m = 1, \quad \eta = \frac{2 I_1(\phi)}{\phi I_0(\phi)}, \quad (2.6.11b)$$

$$m = 2, \quad \eta = \frac{3}{\phi} \left[\frac{1}{\tanh(\phi)} - \frac{1}{\phi} \right]. \quad (2.6.11c)$$

2.6.2 Cinética no lineal: Uso de funciones de Green

Reconsidere el problema adimensional para condiciones en las cuales no hay resistencias a la transferencia de masa:

$$\frac{d}{dx^*} \left(x^{*m} \frac{dc^*}{dx^*} \right) = \phi^2 x^{*m} R(c^*), \quad (2.6.12a)$$

$$x^* = 0, \quad \frac{dc^*}{dx^*} = 0, \quad (2.6.12b)$$

$$x^* = 1, \quad c^* = 1. \quad (2.6.12c)$$

En este caso se busca encontrar la solución de este problema para el caso en el que $R(c^*)$ sea una función no lineal. Valdés-Parada y col. (2007) sugirieron considerar el lado derecho de la ecuación (2.6.12a) como un término no homogéneo. Como lo explica Haberman (2012), a cada problema de valor a la frontera se le puede definir un problema asociado de una función de Green en donde el término no homogéneo en la ecuación diferencial se reemplaza por una delta de Dirac y las condiciones de frontera se reemplazan por sus versiones homogéneas, esto es,

$$\frac{d}{dx^*} \left(x^{*m} \frac{dG}{dx^*} \right) = \delta(x^* - x_0^*), \quad (2.6.13a)$$

$$x^* = 0, \quad \frac{dG}{dx^*} = 0, \quad (2.6.13b)$$

$$x^* = 1, \quad G = 0, \quad (2.6.13c)$$

donde $x_0^* \in [0, 1]$ es la variable que indica el punto donde se está aplicando la discontinuidad. Dado que la delta de Dirac es simétrica, se sigue que $G(x^*, x_0) = G(x_0, x^*)$. Esto es, la función de Green

es la respuesta del sistema en x^* ante una fuente concentrada en x_0^* y viceversa. La variable c^* y la función de Green G pueden relacionarse mediante la fórmula de Green

Fórmula de Green

$$\int_{x^*=0}^{x^*=1} \left[\frac{d}{dx^*} \left(x^{*m} \frac{dc^*}{dx} \right) G - \frac{d}{dx^*} \left(x^{*m} \frac{dG}{dx} \right) c^* \right] dx^* = x^{*m} \left(\frac{dc^*}{dx^*} G - \frac{dG}{dx^*} c^* \right) \Big|_{x^*=0}^{x^*=1}. \quad (2.6.14)$$

Sustituyendo las ecuaciones diferenciales y condiciones de frontera para c^* y G se obtiene

$$\int_{x^*=0}^{x^*=1} \delta(x^* - x_0^*) c^* dx^* = \frac{dG}{dx^*} \Big|_{x^*=1} + \phi^2 \int_{x^*=0}^{x^*=1} x^{*m} R(c^*) G dx^*. \quad (2.6.15)$$

Usando la propiedad de filtración de la delta de Dirac

$$\int_{x^*=0}^{x^*=1} \delta(x^* - x_0^*) c^* dx^* = c^*(x_0^*), \quad (2.6.16)$$

y reemplazando $x_0^* \rightarrow x^*$ se obtiene

$$c^*(x^*) = \underbrace{\frac{dG}{dx_0^*} \Big|_{x_0^*=1}}_{\text{Influencia de la fuente superficial}} + \underbrace{\phi^2 \int_{x_0^*=0}^{x_0^*=1} R(c^*) G x_0^{*m} dx_0^*}_{\text{Influencia de la reacción química}}. \quad (2.6.17)$$

Esta forma de la solución permite además identificar la contribución de las fuentes. Evidentemente, la anterior es una solución implícita pues la concentración c^* depende de sí misma en el término asociado con la contribución de la reacción, por lo que se requerirá de un esquema iterativo para encontrar la solución. Más aún, para poder avanzar es necesario resolver el problema lineal dado en las ecuaciones (2.6.13) para así obtener a la función de Green. Con este fin se resuelve la ecuación (2.6.13a) para $x^* \neq x_0^*$, la solución general se puede expresar como

$$m \neq 1, \quad G(x, x_0) = \begin{cases} \frac{c_1}{(1-m)x^{*m-1}} + c_2, & x^* < x_0^* \\ \frac{c_3}{(1-m)x^{*m-1}} + c_4, & x^* > x_0^* \end{cases}, \quad (2.6.18a)$$

$$m = 1, \quad G(x, x_0) = \begin{cases} c_1 \ln x^* + c_2, & x^* < x_0^* \\ c_3 \ln x^* + c_4, & x^* > x_0^* \end{cases}. \quad (2.6.18b)$$

Usando las condiciones de frontera dadas en las ecuaciones (2.6.13b) y (2.6.13c) se obtiene que

$$m \neq 1, \quad G(x, x_0) = \begin{cases} c_2, & x^* < x_0^* \\ \left(\frac{1}{x^{*m-1}} - 1 \right) \frac{c_3}{(1-m)}, & x^* > x_0^* \end{cases}, \quad (2.6.19a)$$

$$m = 1, \quad G(x, x_0) = \begin{cases} c_2, & x^* < x_0^* \\ c_3 \ln x^*, & x^* > x_0^* \end{cases}. \quad (2.6.19b)$$

Para determinar las dos constantes faltantes se impone la condición de continuidad de la función de Green alrededor de $x^* = x_0^*$:

$$x^* = x_0^*, \quad G(x_0^{*-}, x_0^*) = G(x_0^{*+}, x_0^*), \quad (2.6.20)$$

la cual tiene sentido físico ya que la concentración es continua en todo el dominio. La segunda condición de frontera resulta de integrar a la ecuación (2.6.13a) alrededor de x_0^* y puede escribirse como sigue

$$x^* = x_0^*, \quad \left. \frac{dG}{dx^*} \right|_{x^*=x_0^{*+}} - \left. \frac{dG}{dx^*} \right|_{x^*=x_0^{*-}} = \frac{1}{x_0^{*m}}. \quad (2.6.21)$$

Usando estas dos condiciones de frontera se obtienen las siguientes expresiones finales para la función de Green

$$m \neq 1, \quad G(x, x_0) = \frac{1}{(1-m)} \begin{cases} \frac{1}{x_0^{*m-1}} - 1, & x^* < x_0^* \\ \frac{1}{x^{*m-1}} - 1, & x^* > x_0^* \end{cases}, \quad (2.6.22a)$$

$$m = 1, \quad G(x, x_0) = \begin{cases} \ln x_0^*, & x^* < x_0^* \\ \ln x^*, & x^* > x_0^* \end{cases}. \quad (2.6.22b)$$

Como puede notarse estos resultados cumplen con la condición de simetría de la función de Green. De acuerdo a las expresiones anteriores se puede deducir que

$$\left. \frac{dG}{dx_0^*} \right|_{x_0^*=1} = 1. \quad (2.6.23)$$

Por lo tanto, la solución del problema se puede escribir como

$$c^*(x^*) = 1 + \phi^2 \int_{x_0^*=0}^{x_0^*=1} R(c^*) G x_0^{*m} dx_0^*. \quad (2.6.24)$$

Como se mencionó, para obtener la solución es necesario llevar a cabo un proceso iterativo, para ello se propondrá una solución, c_s^* , y si no se satisface una cierta tolerancia, esta propuesta debe actualizarse. Una opción para llevar a cabo la actualización de la solución propuesta es la siguiente fórmula

$$c_s^* = w c_s^* + (1-w) c^*. \quad (2.6.25)$$

Cabe mencionar que las funciones de Green no están definidas en $x^* = 0$, por lo que es recomendable usar la fórmula de derivada hacia adelante para calcular el primer valor de la concentración, lo cual es consistente con la condición de frontera dada en la ecuación (2.6.12b). A continuación se presenta el programa que se escribió para obtener la solución del problema, en este caso se consideró

$$R(c^*) = \frac{c^*}{1+c^*}. \quad (2.6.26)$$

Programa para evaluar la solución obtenida mediante funciones de Green

```
clear; close all; clc;
format long
fi = 1;
N= 1000;
Na= 50;
m= 0;
dx = 1/(N-1);
tol= 1e-3;
niter= 4000;
```

```

%W= 0.9999; % para fi>5
W= 0.99;
%Vectores
x= zeros(N,1);
x0= zeros(N,1);
c= zeros(N,1);
f= zeros(N,1);
R= zeros(N,1);
cs= zeros(N,1);
ca= zeros(Na,1);
difs= zeros(niter,1);

% Para fi>5
% for i=1:N
%   cs(i)= 1.1*cosh(fi*(i-1)*dx)/cosh(fi);
% end

for k=2:niter
  for i=1:N
    R(i)= cs(i)/(1+cs(i));
  end

  for i=2:N
    x(i)= (i-1)*dx;
    x0(i)= (i-1)*dx;
    for j=2:N
      if x(i) < x0(j)
        if m ==1
          G=log(x0(j));
        else
          G = (1/(x0(j)^(m-1))-1)/(1-m);
        end
      else
        if m ==1
          G=log(x(i));
        else
          G = (1/(x(i)^(m-1))-1)/(1-m);
        end
      end
      f(j)= R(j)*x0(j)^m*G;
    end
    int1= trapecio(f,dx,1,N-1);
    c(i)= 1+fi^2*(int1);
  end
  c(1) = c(2);

  flag=0;

  for i=1:N

```

```

        dif= abs(c(i)-cs(i));
        if dif >tol
            flag=1;
            disp(dif)
            break
        end
    end

    if flag == 0
        break
    end

    for i=1:N
        cs(i)=abs( W*cs(i)+(1-W)*c(i));
    end
    difs(k)= dif;
% Para fi>5
%     if abs(difs(k)-difs(k-1)) <2e-6 && difs(k)< 1.1*tol
%         break
%     end
end

if k==niter
    disp('no hubo sol')
end

xa= linspace(0,1,Na);
for i=1:Na
    ca(i)= cosh(fi*xa(i))/cosh(fi);
end

plot(x,c,xa,ca,'o')

```

En la figura 2.7 se muestran los resultados del programa para diferentes valores del módulo de Thiele. Además, se incluyen los perfiles de concentración correspondientes a una cinética de primer orden. Como puede apreciarse, ambos tipos de soluciones comienzan a acercarse a medida que se incrementa ϕ . Por supuesto, este código puede complementarse para permitir el cálculo del factor de efectividad para diferentes geometrías y cinéticas. Como lo mencionan Valdés-Parada y col. (2007) este tipo de cálculos se llevan a cabo usando menos iteraciones que con el método de diferencias finitas. Además, estos autores incluyen una discusión sobre el uso de esta técnica para abordar problemas con convección, transporte en estado no estacionario e incluso para sistemas multicomponentes.

Ejercicio 2.5 — Funciones de Green cuando hay resistencias externas a la transferencia de masa. Demuestre que cuando se consideran resistencias a la transferencia de masa en la

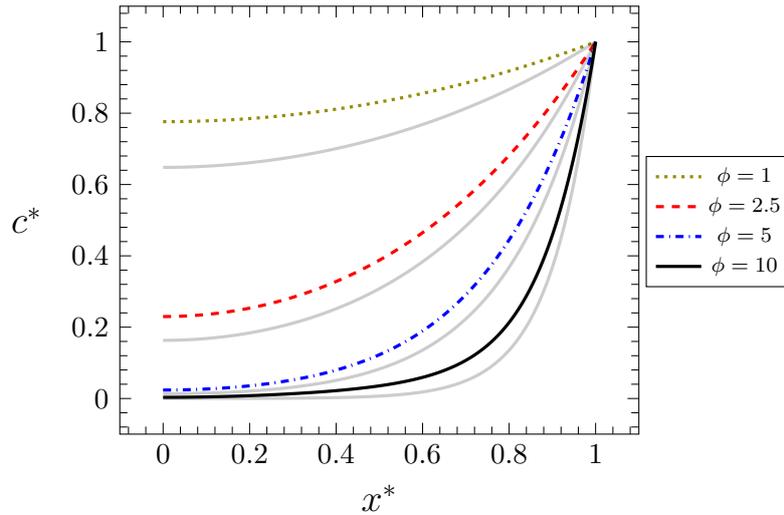


Figura 2.7: Perfiles de concentración para una cinética no lineal en una placa para diferentes valores del módulo de Thiele. Para propósitos de comparación, se incluyen los perfiles correspondientes para una cinética de primer orden como curvas en gris.

frontera $x^* = 1$, las funciones de Green son

$$m \neq 1, \quad G(x, x_0) = \begin{cases} \frac{1}{(1-m)} \left(\frac{1}{x_0^{*m-1}} - 1 \right) - Bi^{-1}, & x^* < x_0^* \\ \frac{1}{(1-m)} \left(\frac{1}{x^{*m-1}} - 1 \right) - Bi^{-1}, & x^* > x_0^* \end{cases}, \quad (2.6.27a)$$

$$m = 1, \quad G(x, x_0) = \begin{cases} \ln x_0^* - Bi^{-1}, & x^* < x_0^* \\ \ln x^* - Bi^{-1}, & x^* > x_0^* \end{cases}. \quad (2.6.27b)$$

Ejercicio 2.6 Utilice la fórmula de Green y los resultados del ejercicio anterior para demostrar que la solución del problema en este caso es

$$c^*(x^*) = \phi^2 \int_{x_0^*=0}^{x_0^*=x^*} R(c^*) G^+ x_0^{*m} dx_0^* + \phi^2 \int_{x_0^*=x^*}^{x_0^*=1} R(c^*) G^- x_0^{*m} dx_0^* - Bi G(x^*, 1), \quad (2.6.28)$$

donde G^+ es la sección de la función de Green aplicable cuando $x^* > x_0^*$, mientras que G^- es la sección de la función de Green correspondiente a $x^* < x_0^*$.

Ejercicio 2.7 Una barra cilíndrica de combustible nuclear genera calor de acuerdo a la ecuación $\Phi = \alpha T^3$, donde α es una constante conocida. La barra tiene un radio r_1 y una conductividad térmica k_1 y está recubierta por un material aislante de radio r_2 y conductividad térmica k_2 . Puede suponer que las conductividades térmicas son constantes y que la barra y el aislante tienen una longitud L que es mucho mayor que cualquiera de los radios. Considerando que el aislante ofrece resistencias a la transferencia de calor hacia un medio que se encuentra a una temperatura T_a , determine el perfil de temperatura en la barra y el aislante bajo condiciones de estado estacionario.

2.7 Transporte entre un medio poroso y un fluido

2.7.1 Ley de Darcy

El transporte en medios porosos es un tema que actualmente tiene una gran variedad de aplicaciones que van desde la biología celular y la nanotecnología hasta la contaminación ambiental en zonas urbanas. Dentro del medio poroso es normalmente aceptado que aplique la ley de Darcy (1856), la cual en su versión unidimensional es,

$$v_D = -\frac{K}{\mu} \frac{\partial p}{\partial x}. \quad (2.7.1)$$

Esta ecuación fue propuesta de manera empírica y ha sido deducida de manera teórica en muchos trabajos como el de Whitaker (1986). En la ecuación anterior, K es el coeficiente de permeabilidad, el cual puede predecirse usando la ecuación de Kozeny (1927)-Carman (1956)

$$\frac{K}{d_p^2} = \frac{\varepsilon^3}{180(1-\varepsilon)^2}, \quad (2.7.2)$$

donde d_p es el diámetro de partícula efectivo y ε es la porosidad. Al concebir al medio poroso como un arreglo periódico de esferas en cubos, d_p se relaciona con ℓ mediante la siguiente expresión

$$d_p = \ell \sqrt[3]{\frac{6(1-\varepsilon)}{\pi}}, \quad (2.7.3)$$

donde ℓ es el largo de la celda periódica cúbica y puede tomarse como $\ell = \mathbf{O}(10^{-3} - 10^{-6})\text{m}$.

2.7.2 Modelo de Beavers y Joseph

Aunque la ley de Darcy puede aplicarse dentro del medio poroso, ocurren cambios rápidos de la velocidad cerca de la frontera de un medio poroso y un fluido. De hecho, en el fluido libre aplica la ecuación de Stokes (1842) bajo condiciones de flujo reptante

$$0 = -\frac{dp}{dx} + \mu \frac{d^2 v_x}{dz^2}. \quad (2.7.4)$$

Beavers y Joseph (1967) propusieron la siguiente expresión para acoplar la ecuación de Stokes con la ley de Darcy en la superficie medio poroso-fluido

$$z = 0, \quad \frac{dv_x}{dz} = \frac{\alpha}{\sqrt{K}} (v_x - v_D), \quad (2.7.5)$$

donde α es un coeficiente adimensional que puede variar entre $\mathbf{O}(0.1)$ y $\mathbf{O}(10)$. En la superficie superior, $z = L$ se impone la condición de no deslizamiento

$$z = L, \quad v_x = 0. \quad (2.7.6)$$

Escogiendo a la velocidad de Darcy como la velocidad de referencia, se definen las siguientes variables y parámetros adimensionales

$$v^* = \frac{v_x}{v_D}, \quad z^* = \frac{z}{L}, \quad \ell^* = \frac{\ell}{L}. \quad (2.7.7)$$

De esta forma, el modelo adimensional es

$$z^* = 0, \quad \frac{dv_x^*}{dz^*} = \frac{\alpha}{\sqrt{K^*}} (v_x^* - 1), \quad (2.7.8a)$$

$$0 = \frac{1}{K^*} + \frac{d^2 v_x^*}{dz^{*2}}, \quad 0 < z^* < 1, \quad (2.7.8b)$$

$$z^* = 1, \quad v_x^* = 0, \quad (2.7.8c)$$

donde K^* se define como

$$K^* = \frac{K}{L^2} = \frac{\varepsilon^3}{180(1-\varepsilon)^2} \left[\frac{6(1-\varepsilon)}{\pi} \right]^{2/3} \ell^{*2}. \quad (2.7.9)$$

La forma discretizada de las ecuaciones (2.7.8) es

$$\left(\frac{\alpha \Delta z^*}{\sqrt{K^*}} + 1 \right) v_1^* - v_2^* = \frac{\alpha \Delta z^*}{\sqrt{K^*}}, \quad (2.7.10a)$$

$$v_{i-1}^* - 2v_i^* + v_{i+1}^* = -\frac{\Delta z^{*2}}{K^*}, \quad i = 2, \dots, N-1, \quad (2.7.10b)$$

$$v_N^* = 0. \quad (2.7.10c)$$

La solución analítica del problema puede encontrarse simplemente integrando dos veces la ecuación diferencial y usando las condiciones de frontera. El resultado final es

$$v^* = \frac{1}{2K^*} \left[1 - z^{*2} + \frac{\alpha \left(2 - \frac{1}{K^*} \right) \sqrt{K^*}}{\left(1 + \frac{\alpha}{\sqrt{K^*}} \right)} (1 - z^*) \right]. \quad (2.7.11)$$

El programa para la evaluación de la solución numérica y su comparación con la solución analítica se muestra a continuación

Programa de Beavers y Joseph en Matlab

```
clear; close all; clc;
format long
% Parámetros
e= 0.2; % Porosidad = 0.2, 0.4, 0.6 y 0.8
l= 1e-4/1e-2; %l*
a = 0.10; % \alpha 0.1, 1 y 10
N= 500; %Número de nodos para la solución numérica
Na= 50; %Número de nodos para la solución analítica
dz = 1/(N-1); % \Delta z numérica
dza = 1/(Na-1); % \Delta z analítica
K= e^3/(180*(1-e)^2)*(6*(1-e)/pi)^(2/3)*l^2; %K*

%Definición de los vectores
A= zeros(N,1);
B= zeros(N,1);
C= zeros(N,1);
D= zeros(N,1);
z= zeros(N,1);
va= zeros(Na,1);
za= zeros(Na,1);

% Definición de z
for i=1:N
    z(i) = (i-1)*dz;
end

% Solución analítica
for i=1:Na
```

```

    za(i) = (i-1)*dza;
    va(i)= (1-za(i)^2+a*(2-1/K)*sqrt(K)/(1+a/sqrt(K))*(1-za(i)))/(2*K);
end

% Definición de los componentes no nulos de los vectores A, B, C y D
% i=1
B(1)= a*dz/sqrt(K)+1;
C(1)= -1;
D(1)= a*dz/sqrt(K);

% i=2, ..., N-1
for i=2:N-1
    A(i)= 1;
    B(i)= -2;
    C(i)= 1;
    D(i)= -dz^2/K;
end

% i=N
B(N)=1;

v=Thomas(A,B,C,D,N);
plot(v,z,va,za,'o')

```

En la figura 2.8 se presenta la evaluación de los perfiles de velocidad resultantes de la solución numérica para diferentes valores de la porosidad y del coeficiente de salto α . Como puede notarse, al incrementar la porosidad se disminuye la diferencia entre la velocidad del medio poroso y la del fluido y el mismo efecto tiene el aumentar el valor de α . Además, los cambios en α son al parecer más apreciables conforme aumenta la porosidad. Sin embargo para $\alpha > 1$ los resultados ya son insensibles a cambios en α , lo cual sugiere que en este caso la condición de Beavers y Joseph se reduce a la continuidad de la velocidad.

2.7.3 Modelo de Neale y Nader

Neale y Nader (1974) propusieron no considerar un salto en la velocidad y en su lugar utilizar la ecuación de Darcy-Brinkman en el medio poroso. De acuerdo a estos autores el modelo matemático es el siguiente

$$z = -L_p, \quad v_p = v_D, \quad (2.7.12a)$$

$$-L_p < z < 0, \quad 0 = -\frac{dp}{dx} + \frac{\mu}{\varepsilon} \frac{d^2 v_p}{dz^2} - \frac{\mu}{K} v_p, \quad (2.7.12b)$$

$$z = 0, \quad v_p = v_x, \quad \frac{\mu}{\varepsilon} \frac{\partial v_p}{\partial z} = \mu \frac{\partial v_x}{\partial z}, \quad (2.7.12c)$$

$$0 < z < L, \quad 0 = -\frac{dp}{dx} + \mu \frac{d^2 v_x}{dz^2}, \quad (2.7.12d)$$

$$z = L, \quad v_x = 0, \quad (2.7.12e)$$

donde v_p es la velocidad promedio en el medio poroso y L_p es la longitud del medio poroso. Las

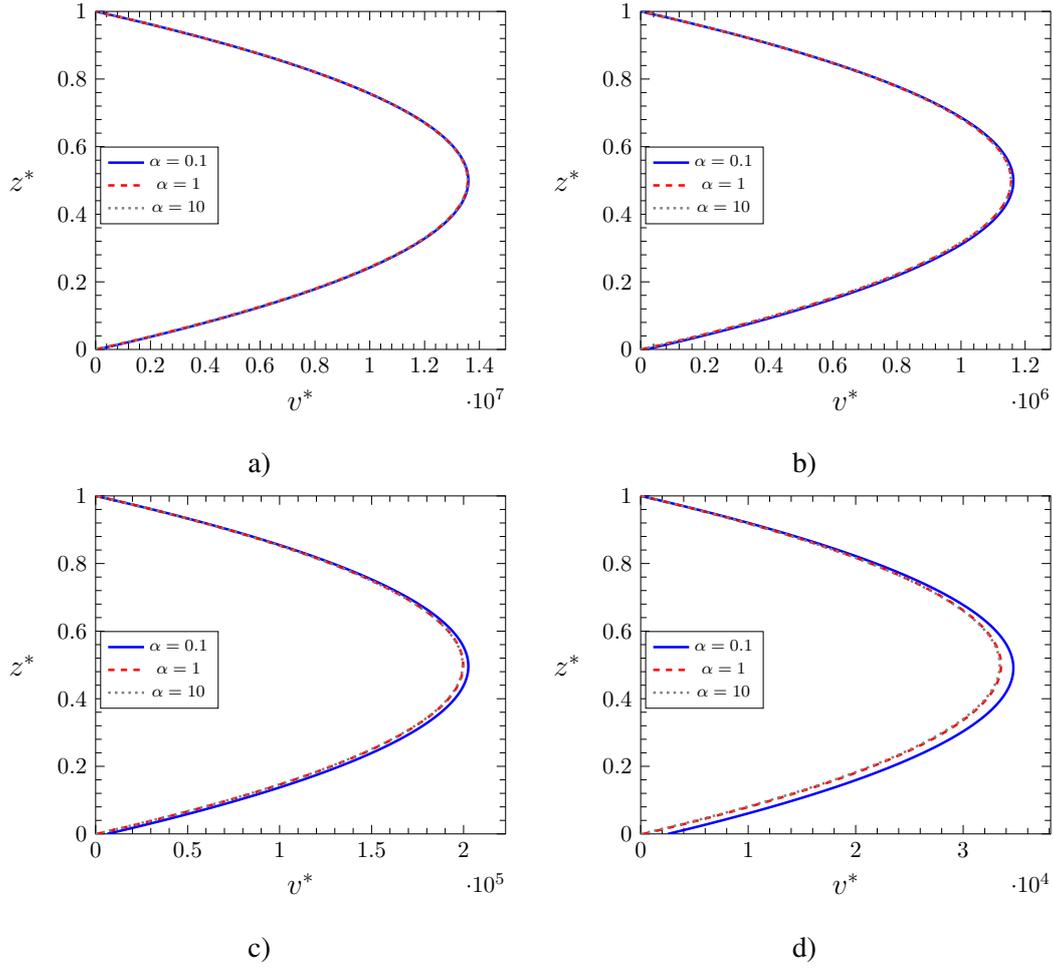


Figura 2.8: Efecto del coeficiente de salto α sobre los perfiles de velocidad para a) $\varepsilon = 0.2$, b) $\varepsilon = 0.4$, c) $\varepsilon = 0.6$ y d) $\varepsilon = 0.8$. Se fijó $\ell^* = 0.01$ en todas las simulaciones.

ecuaciones anteriores pueden escribirse en forma adimensional como sigue

$$z^* = -L_p^*, \quad v_p^* = 1, \quad (2.7.13a)$$

$$-L_p^* < z^* < 0, \quad 0 = \frac{1}{K^*} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{d^2 v_p^*}{dz^{*2}} - \frac{1}{K^*} v_p^*, \quad (2.7.13b)$$

$$z^* = 0, \quad v_p^* = v_x^*, \quad \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial v_p^*}{\partial z^*} = \frac{\partial v_x^*}{\partial z^*}, \quad (2.7.13c)$$

$$0 < z^* < 1, \quad 0 = \frac{1}{K^*} + \frac{d^2 v_x^*}{dz^{*2}}, \quad (2.7.13d)$$

$$z^* = 1, \quad v_x^* = 0, \quad (2.7.13e)$$

donde $L_p^* = L_p/L$ y $v_p^* = v_p/v_D$. Este problema puede expresarse en forma discreta como

sigue

$$u_1 = 1, \quad (2.7.14a)$$

$$u_{i-1} - \left(2 + \frac{\varepsilon \Delta z^{*2}}{K^*}\right) u_i + u_{i+1} = -\frac{\varepsilon \Delta z^{*2}}{K^*}, \quad i = 2, \dots, N_0 - 1, \quad (2.7.14b)$$

$$v_{N_0-1} - (1 + \varepsilon) v_{N_0} + \varepsilon v_{N_0+1} = 0, \quad (2.7.14c)$$

$$u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1} = -\frac{\Delta z^{*2}}{K^*}, \quad i = N_0 + 1, \dots, N - 1, \quad (2.7.14d)$$

$$u_N = 0. \quad (2.7.14e)$$

Note que en esta forma discreta no se distingue entre v_p^* y v_x^* de manera que con una sola aplicación del algoritmo de Thomas se obtiene la solución u en todo el dominio. Además el valor del nodo N_0 puede determinarse mediante la siguiente ecuación

$$N_0 = 1 + \frac{L_p^*}{\Delta z}. \quad (2.7.15)$$

El programa para la evaluación de la solución numérica es el siguiente:

Programa de Neale y Nader en Matlab

```
clear; close all; clc;
format long
% Parámetros
e= 0.2; % porosidad = 0.2, 0.4, 0.6 y 0.8
l= 1e-4/1e-2; %l*
N= 2000; %Número de nodos para la solución numérica
Lp= 1; %Lp*
dz = (1+Lp)/(N-1); %\Delta z numérica
N0 = 1+round(Lp/dz);
K= e^3/(180*(1-e)^2)*(6*(1-e)/pi)^(2/3)*l^2; %K*

%Definición de los vectores
A= zeros(N,1);
B= zeros(N,1);
C= zeros(N,1);
D= zeros(N,1);
z= zeros(N,1);

% Definición de z
for i=1:N
    z(i) = (i-1)*dz-Lp;
end

% Definición de los componentes no nulos de los vectores A, B, C y D
% i=1
B(1)=1;
D(1)= 1;

%Medio poroso
for i=2:N0-1
```

```

    A(i)=1;
    B(i)= -(2+e*dz^2/K);
    C(i)= 1;
    D(i)= -e*dz^2/K;
end

%Superficie divisoria
A(NO)= 1;
B(NO)= -(1+e);
C(NO)= e;
D(NO)= 0;

% Fluido
for i=NO+1:N-1
    A(i)= 1;
    B(i)= -2;
    C(i)= 1;
    D(i)= -dz^2/K;
end

% Frontera superior
B(N)=1;
u=Thomas(A,B,C,D,N);
plot(u,z)

```

En la figura 2.9 se muestra la evaluación de la solución numérica del problema de Neale y Nader y se comparan las predicciones con las que aporta la solución del problema de Beavers y Joseph (1967) para cuatro valores de la porosidad. Como puede notarse ambas soluciones son equivalentes cuando $\alpha > 1$, lo cual es de esperarse pues hay condiciones de continuidad de la velocidad. En todos los casos se observa una transición suave de la velocidad cerca de la frontera la cual tiene lugar en una zona relativamente pequeña (ver el trabajo de Ochoa-Tapia y col., 2017, para una discusión acerca del espesor de esta capa) y se aprecia ahora con más claridad el salto en la velocidad sugerido por Beavers y Joseph (1967). Durante los últimos cincuenta años han habido una cantidad considerable de trabajos respecto a la derivación y análisis de la condición de frontera entre un medio poroso y un fluido y actualmente es un tema de investigación activo.

Ejercicio 2.8 Obtenga la solución analítica dada en la ecuación (2.7.11). ■

Ejercicio 2.9 Explore el efecto que tiene el parámetro ℓ^* sobre las soluciones. ■

Ejercicio 2.10 Valdés-Parada y col. (2013) propusieron que debe haber un salto tanto en la velocidad como en el esfuerzo para acoplar las ecuaciones de Darcy-Brinkman y de Stokes. Bajo esta propuesta las condiciones de continuidad del problema de Neale y Nader se reemplazan por

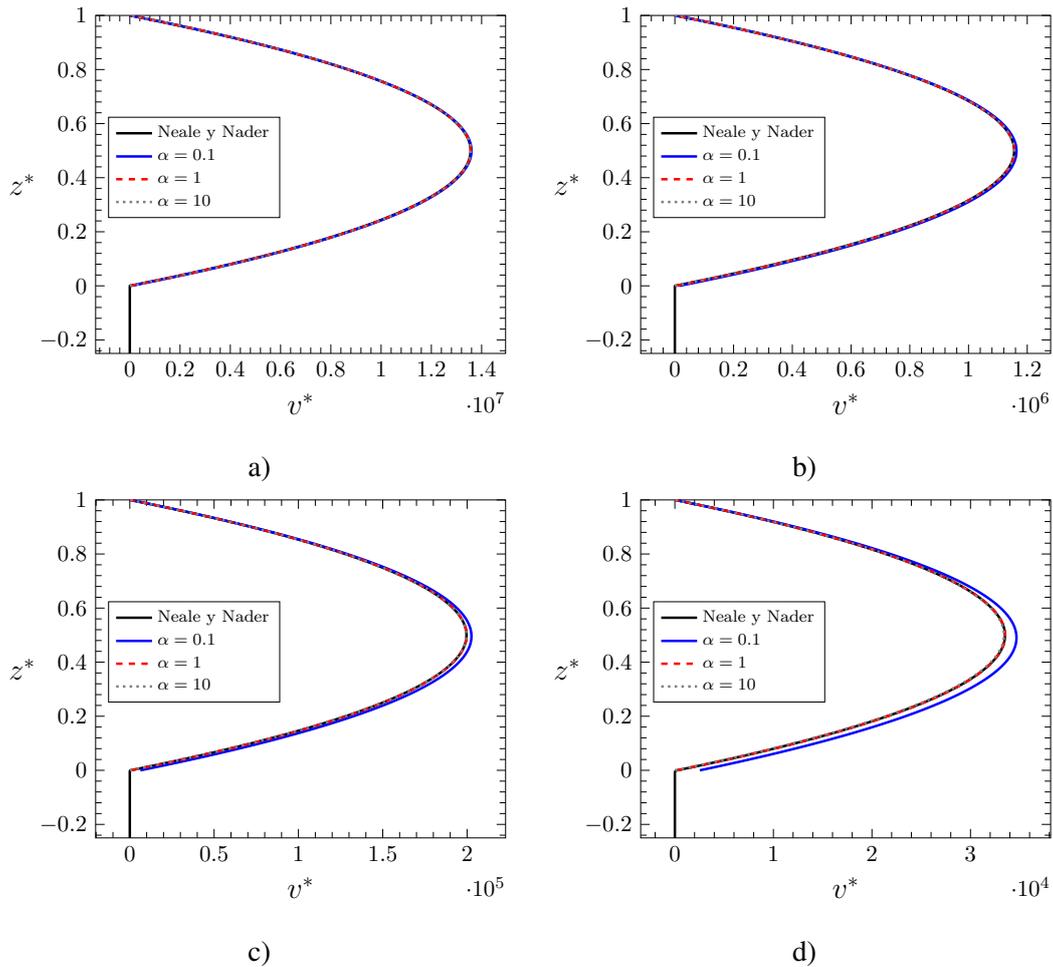


Figura 2.9: Comparación de las predicciones de los perfiles de velocidad resultantes del problema de Neale y Nader (1974) comparados con los de Beavers y Joseph (1967) para a) $\varepsilon = 0.2$, b) $\varepsilon = 0.4$, c) $\varepsilon = 0.6$ y d) $\varepsilon = 0.8$. En todas las simulaciones se tomó $\ell^* = 0.01$.

las siguientes ecuaciones

$$z = 0, \quad \frac{\partial v_x}{\partial z} - \frac{\alpha_1}{\varepsilon \sqrt{K}} \frac{\partial v_p}{\partial y} = \frac{\alpha}{\sqrt{K}} (v_x - \alpha_2 v_p), \quad (2.7.16a)$$

$$z = 0, \quad \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial v_p}{\partial z} - \frac{\partial v_x}{\partial z} = \frac{\beta}{\sqrt{K}} v_p, \quad (2.7.16b)$$

donde α , α_1 , α_2 y β son coeficientes de salto que pueden determinarse de manera teórica. Resuelva este nuevo problema y compare los resultados con los de Neale y Nader (1974) y de Beavers y Joseph (1967). ■

Ejercicio 2.11 Considere un sistema formado por un medio poroso y un fluido cuya frontera es plana y el sistema coordenado se fija en dicha posición para un sistema unidimensional. El medio poroso tiene una longitud L_ω y el fluido L_η . Para describir la transferencia difusiva de

masa entre los dos sistemas se utiliza la siguiente ecuación diferencial de coeficientes variables:

$$\varepsilon(x) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\varepsilon(x) D_{ef}(x) \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial x} \right] \quad (2.7.17)$$

donde $\varepsilon = \varepsilon_\omega$ y $D_{ef} = D_\omega = 2\mathcal{D}_\beta / (3 - \varepsilon_\omega)$ en el seno del medio poroso (en $x = -r_0$), mientras que $\varepsilon = 1$ y $D_{ef} = \mathcal{D}_\beta$ en el seno del fluido (en $r = r_0$). Puede suponer que tanto los cambios de la porosidad, como del producto εD_{ef} , son lineales en la zona comprendida entre $-r_0$ y r_0 (Valdés-Parada y col., 2007). Puede suponer que $L_\omega = L_\eta$. Además, considere las siguientes condiciones de frontera e iniciales:

$$x = -L_\omega, \quad \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial x} = 0; \quad x = L_\eta, \quad \langle c_{A\beta} \rangle^\beta = c_{\text{máx}}; \quad t = 0, \quad \langle c_{A\beta} \rangle^\beta = c_0 \quad (2.7.18)$$

Haga un programa en Matlab que resuelva numéricamente a la versión adimensional de este problema con el método de diferencias finitas considerando $\varepsilon_\omega = 0.2, 0.4, 0.6$ y 0.8 . Describa la dinámica de la concentración entre el medio poroso y el fluido. ■

Ejercicio 2.12 Resuelva el problema anterior considerando que sólo en la zona que va de $-r_0$ a r_0 ocurre una reacción química de primer orden. ■

2.8 Análisis de problemas transitorios

2.8.1 Planteamiento del problema

Considere la conducción de calor en una placa de largo L que en un inicio tenía la siguiente distribución lineal por secciones

$$T(x, y, z, 0) = T_1 + T_0 \begin{cases} \frac{2x}{L}, & 0 \leq x \leq \frac{L}{2} \\ 2\left(1 - \frac{x}{L}\right), & \frac{L}{2} \leq x \leq L \end{cases}, \quad (2.8.1)$$

donde T_0 y T_1 son valores constantes y $T_1 < T_0$. En un tiempo posterior, los extremos de la placa se mantienen a la temperatura constante T_1 y la placa no tiene fuentes ni sumideros de calor y está aislada en las otras superficies ($\partial\Omega$).

Para las condiciones de transporte descritas arriba, el problema de valor a la frontera es

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right), \quad (2.8.2a)$$

$$\text{en } x = 0, L, \quad T = T_1, \quad (2.8.2b)$$

$$\text{En } \partial\Omega, \quad -\mathbf{n} \cdot k \nabla T = 0, \quad (2.8.2c)$$

donde ρ , C_p y k representan la densidad, capacidad calorífica a presión constante y conductividad térmica de la placa, respectivamente. Además, la condición inicial está dada en la ecuación (2.8.1).

Para reducir la dimensión del problema se define el operador de promediado

$$\langle T \rangle^{yz} = \frac{1}{WH} \int_{y=0}^{y=W} \int_{z=0}^{z=H} T \, dz dy, \quad (2.8.3)$$

donde W y H es el ancho y alto de la placa. Aplicando este operador de promediado a la ecuación diferencial y tomando en cuenta las condiciones de frontera en $\partial\Omega$ lleva a

$$\frac{\partial \langle T \rangle^{yz}}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 \langle T \rangle^{yz}}{\partial x^2}. \quad (2.8.4)$$

Aquí se utilizó la definición de la difusividad térmica $\alpha = k/\rho C_p$. Usando el operador de promediado en las condiciones de frontera dadas en la ecuación (2.8.2b) da como resultado

$$\text{en } x = 0, L, \quad \langle T \rangle^{yz} = T_1. \quad (2.8.5)$$

Por último, la condición inicial de este problema resulta de aplicar el operador de promediado a ambos lados de la ecuación (2.8.1):

$$\langle T \rangle^{yz}(x, 0) = T_1 + T_0 \begin{cases} \frac{2x}{L}, & 0 \leq x \leq \frac{L}{2} \\ 2\left(1 - \frac{x}{L}\right), & \frac{L}{2} \leq x \leq L \end{cases}. \quad (2.8.6)$$

Antes de proceder con la solución del problema es conveniente expresarlo en términos de las siguientes variables adimensionales

$$T^* = \frac{\langle T \rangle^{yz} - T_1}{T_0}; \quad x^* = \frac{x}{L}; \quad t^* = \frac{t\alpha}{L^2}. \quad (2.8.7)$$

De esta forma, el problema adimensional se escribe como

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} = \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}}, \quad (2.8.8a)$$

$$\text{en } x^* = 0, 1, \quad T^* = 0, \quad (2.8.8b)$$

$$\text{cuando } t^* = 0, \quad T^* = \begin{cases} 2x^*, & 0 \leq x^* \leq \frac{1}{2} \\ 2(1 - x^*), & \frac{1}{2} \leq x^* \leq 1 \end{cases}. \quad (2.8.8c)$$

La forma discretizada de la ecuación diferencial puede llevarse a cabo de tres maneras, las cuales se describen a continuación.

2.8.2 Método explícito

Asignando los nodos i al espacio y k para el tiempo, la forma discreta de la ecuación diferencial puede escribirse como

$$\left. \frac{\partial T^*}{\partial t^*} \right|_i^k = \left. \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} \right|_i^k. \quad (2.8.9)$$

Para la derivada espacial se utiliza la fórmula de la segunda derivada deducida antes (ecuación 2.3.6), mientras que para la derivada temporal sólo puede usarse la fórmula de derivada hacia adelante (ecuación 2.3.7). Esto es:

$$\left. \frac{\partial T^*}{\partial t^*} \right|_i^k = \frac{T_i^{*k+1} - T_i^{*k}}{\Delta t^*}, \quad (2.8.10a)$$

$$\left. \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} \right|_i^k = \frac{T_{i+1}^{*k} - 2T_i^{*k} + T_{i-1}^{*k}}{\Delta x^{*2}}. \quad (2.8.10b)$$

Sustituyendo estas aproximaciones en la ecuación (2.8.9) resulta que

$$T_i^{*k+1} = T_i^{*k} + r \left(T_{i+1}^{*k} - 2T_i^{*k} + T_{i-1}^{*k} \right), \quad i = 2, \dots, Nx - 1; k = 1, \dots, Nt - 1, \quad (2.8.11)$$

donde $r = \Delta t^*/\Delta x^{*2}$; mientras que Nx y Nt representan el número de nodos espaciales en la dirección x y en el tiempo, respectivamente. Además, la forma discretizada de las condiciones de frontera es

$$\text{en } i = 1, \quad T_i^{*k+1} = 0, \quad k = 1, \dots, Nt - 1, \quad (2.8.12)$$

$$\text{en } i = Nx, \quad T_i^{*k+1} = 0, \quad k = 1, \dots, Nt - 1. \quad (2.8.13)$$

Por último, la condición inicial discretizada es:

$$k = 1, \quad T_i^{*k} = 2x_i^*, \quad i = 1, \dots, Nx/2, \quad (2.8.14)$$

$$k = 1, \quad T_i^{*k} = 2(1 - x_i^*), \quad i = Nx/2, \dots, Nx. \quad (2.8.15)$$

Como puede notarse, este esquema no requiere del algoritmo de Thomas; sin embargo, requiere una cantidad considerable de nodos computacionales para obtener soluciones estables. De hecho, Smith (1985) explica que este esquema sólo es estable para $0 < r \leq 0.5$.

2.8.3 Método implícito

En este esquema, se conserva el uso de la ecuación (2.8.10a) pero se evalúa la derivada espacial en el instante $k + 1$, esto es,

$$\left. \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} \right|_i^{k+1} = \frac{T_{i+1}^{*k+1} - 2T_i^{*k+1} + T_{i-1}^{*k+1}}{\Delta x^{*2}}. \quad (2.8.16)$$

Bajo estas condiciones, la forma discretizada de la ecuación (2.8.9) es

$$\frac{T_i^{*k+1} - T_i^{*k}}{\Delta t^*} = \frac{T_{i+1}^{*k+1} - 2T_i^{*k+1} + T_{i-1}^{*k+1}}{\Delta x^{*2}}. \quad (2.8.17)$$

O bien, en forma tridiagonal,

$$rT_{i-1}^{*k+1} - (2r + 1)T_i^{*k+1} + rT_{i+1}^{*k+1} = -T_i^{*k} \quad i = 2, \dots, Nx - 1; k = 1, \dots, Nt - 1. \quad (2.8.18)$$

El resto de la discretización no cambia respecto al método explícito. Esta opción es más estable y requiere menos nodos computacionales que el método explícito aunque en este caso sí se requiere de la inversión de matrices tridiagonales en cada instante del tiempo mediante el algoritmo de Thomas.

2.8.4 Método de Crank-Nicholson

En este esquema, la forma discretizada de la ecuación diferencial es un promedio ponderado de los dos esquemas anteriores, esto es

$$\left. \frac{\partial T^*}{\partial t^*} \right|_i^k = \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} \right|_i^k + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} \right|_i^{k+1}. \quad (2.8.19)$$

Sustituyendo en esta ecuación las expresiones dadas en las ecuaciones (2.8.10) y (2.8.16) se obtiene

$$\frac{T_i^{*k+1} - T_i^{*k}}{\Delta t^*} = \frac{T_{i+1}^{*k} - 2T_i^{*k} + T_{i-1}^{*k}}{2\Delta x^{*2}} + \frac{T_{i+1}^{*k+1} - 2T_i^{*k+1} + T_{i-1}^{*k+1}}{2\Delta x^{*2}}. \quad (2.8.20)$$

Esta ecuación puede escribirse en forma tridiagonal como sigue:

$$rT_{i-1}^{*k+1} - 2(r + 1)T_i^{*k+1} + rT_{i+1}^{*k+1} = -2T_i^{*k} - r(T_{i+1}^{*k} - 2T_i^{*k} + T_{i-1}^{*k}). \quad (2.8.21)$$

De nuevo, el resto de la formulación discreta no se ve alterada.

2.8.5 Método general

Los esquemas descritos arriba pueden resumirse en el siguiente esquema de discretización

$$\left. \frac{\partial T^*}{\partial t^*} \right|_i^k = (1 - \lambda) \left. \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} \right|_i^k + \lambda \left. \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} \right|_i^{k+1}. \quad (2.8.22)$$

En donde, $\lambda = 0$ lleva al método explícito, $\lambda = 1$ corresponde al método implícito y $\lambda = 1/2$ conduce al método de Crank-Nicholson. Utilizando las fórmulas de discretización, se obtiene la siguiente ecuación

$$\frac{T_i^{*k+1} - T_i^{*k}}{\Delta t^*} = (1 - \lambda) \frac{T_{i+1}^{*k} - 2T_i^{*k} + T_{i-1}^{*k}}{\Delta x^{*2}} + \lambda \frac{T_{i+1}^{*k+1} - 2T_i^{*k+1} + T_{i-1}^{*k+1}}{\Delta x^{*2}}. \quad (2.8.23)$$

Esta ecuación puede expresarse en forma tridiagonal como sigue

$$\lambda r T_{i-1}^{*k+1} - (2\lambda r + 1) T_i^{*k+1} + \lambda r T_{i+1}^{*k+1} = -T_i^{*k} - r(1 - \lambda) (T_{i+1}^{*k} - 2T_i^{*k} + T_{i-1}^{*k}). \quad (2.8.24)$$

A continuación se presenta el programa en Matlab para la evaluación de la solución usando los tres esquemas en términos de la temperatura puntual y de su valor promedio definido como

$$\langle T^* \rangle = \int_{x^*=0}^{x^*=1} T^* dx^*. \quad (2.8.25)$$

Programa para resolver la ecuación de calor

```
clear; close all; clc;
format long

%Parámetros
lam= 1/2;
Nx= 1000;
Nt = 10000;
tmax =5e-2;

dt = tmax/(Nt-1);
dx= 1/(Nx-1);
r= dt/dx^2;

A= zeros(Nx,1);
B= zeros(Nx,1);
C= zeros(Nx,1);
D= zeros(Nx,1);
T= zeros(Nx,1);
x= zeros(Nx,1);
t= zeros(Nt,1);
Tprom= zeros(Nt,1);

for i=1:Nx
    x(i)= (i-1)*dx;
end
```

```

for k=1:Nt
    t(k)= (k-1)*dt;
end

% Condición inicial
for i=1:Nx
    if x(i)<= 1/2
        T(i)= 2*x(i);
    else
        T(i)= 2*(1-x(i));
    end
end

Tprom(1)= trapecio(T,0,1,Nx);

%CF 1
B(1)=1;

%CF 2
B(Nx)=1;

for k=1:Nt-1
    for i=2:Nx-1
        A(i)= lam*r;
        B(i)= -(2*lam*r+1);
        C(i)= lam*r;
        D(i)= -T(i)-r*(1-lam)*(T(i+1)-2*T(i)+T(i-1));
    end
    T= Thomas(A,B,C,D,Nx);
    Tprom(k+1)= trapecio(T,0,1,Nx);
end

figure
plot(x,T)

%Para guardar la solución con menos puntos
NN= 100;
tt= logspace(-4,log(tmax),NN);
TT= zeros(NN,1);
tol= 1e-4;

for k=1:NN
    for j=1:Nt
        if abs(t(j)-tt(k))< tol
            TT(k)= Tprom(j);
            break
        end
    end
end

```

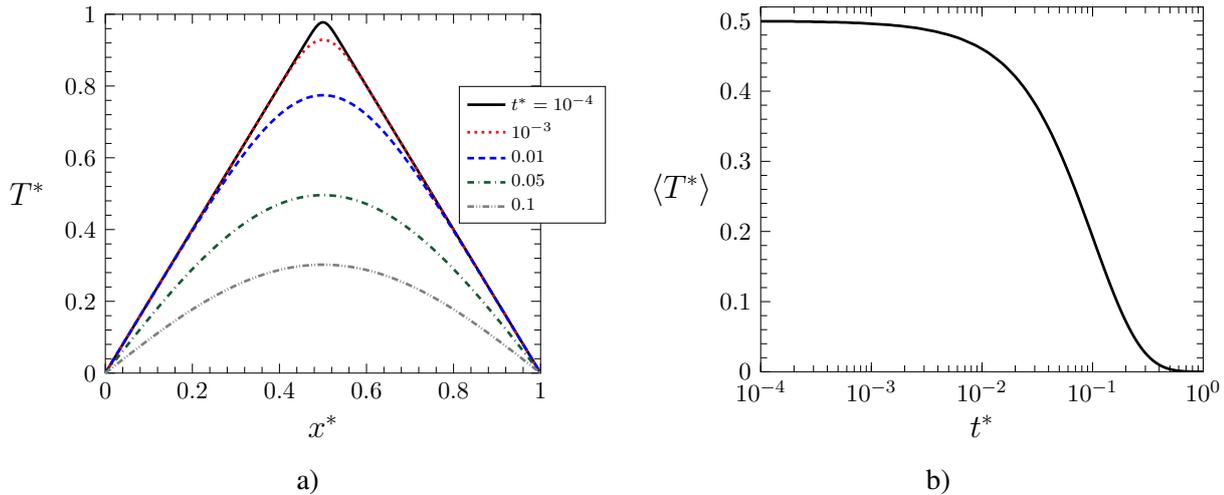


Figura 2.10: Dinámica de a) los perfiles de temperatura y b) la temperatura promedio usando el método de Crank-Nicholson tomando $Nx = 1000$ y $Nt = 10000$.

```
end
```

```
figure
semilogx(tt,TT,'o-')
```

En la figura 2.10 se presenta la dinámica de los perfiles de la temperatura T^* y de la temperatura promedio usando el método de Crank-Nicholson. Los resultados corresponden a $r = 99$ ya que se verificó que para valores menores de este parámetro computacional los resultados ya no sufren mayores cambios. Como es de esperarse, los valores máximos de la temperatura se encuentran a tiempos cortos y decaen hasta volverse nulos en estado estacionario. Esto quiere decir que en estado estacionario, la temperatura de la placa es uniforme y vale T_1 , el cual es el resultado esperado.

Ejercicio 2.13 — Convergencia. Lleve a cabo análisis de convergencia para diferentes valores de r usando los esquemas implícito y explícito. ■

Ejercicio 2.14 Reconsidere el problema de Neale y Nader, sólo que ahora el gradiente de presión es transitorio y obedece a la siguiente expresión:

$$\frac{dp}{dx} = -\frac{p_0 - p_L}{L} (1 - \gamma \sin(\omega t)) \quad (2.8.26)$$

donde p_0 , p_L , L y ω son constantes conocidas. Utilice las versiones transitorias de las ecuaciones de Stokes y de Darcy-Brinkman para determinar la dinámica de los perfiles de velocidad entre un medio poroso y un fluido. ■

2.9 Dinámica de un reactor tipo tanque agitado con cinética no lineal

Considere un tanque agitado continuo el cual contiene partículas esféricas con enzimas inmobilizadas, las cuales funcionan como catalizador biológico para degradar un sustrato (especie A), el cual se alimenta de manera transitoria al sistema. Suponiendo que no hay distribución de tamaños de partícula y que éstas oponen resistencias a la transferencia de masa, el modelo que describe la

transferencia de masa y reacción del sustrato en el fluido del tanque y las partículas es el siguiente

$$\frac{dc_f}{dt} = \frac{1}{t_R} (c_{en}(t) - c_f) + a_v h (c_p|_{r=r_p} - c_f), \quad (2.9.1a)$$

$$\text{en } r = r_p, \quad -D_{ef} \frac{\partial c_p}{\partial r} = h (c_p|_{r=r_p} - c_f), \quad (2.9.1b)$$

$$\frac{\partial c_p}{\partial t} = \frac{D_{ef}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c_p}{\partial r} \right) - \frac{k_1 c_p}{k_2 + c_p}, \quad (2.9.1c)$$

$$\text{en } r = 0, \quad \frac{\partial c_p}{\partial r} = 0, \quad (2.9.1d)$$

$$\text{cuando } t = 0, \quad c_p = c_{p0}, \quad c_f = c_{f0}. \quad (2.9.1e)$$

Para resolver este problema es conveniente reformularlo en términos de las siguientes variables y números adimensionales

$$c_p^* = \frac{c_p}{k_2}, \quad c_f^* = \frac{c_f}{k_2}, \quad c_{en}^* = \frac{c_{en}}{k_2}, \quad r^* = \frac{r}{r_p}, \quad t^* = \frac{t D_{ef}}{r_p^2}, \quad \phi^2 = \frac{k_1 r_p^2}{k_2 D_{ef}}, \quad Bi = \frac{h r_p}{D_{ef}}$$

$$t_R^* = \frac{t_R D_{ef}}{r_p^2}, \quad a_v^* = r_p a_v. \quad (2.9.2)$$

De esta forma, la versión adimensional del problema es

$$\frac{dc_f^*}{dt^*} = \frac{1}{t_R^*} (c_{en}^*(t^*) - c_f^*) + a_v^* Bi (c_p^*|_{r^*=1} - c_f^*), \quad (2.9.3a)$$

$$\text{en } r^* = 1, \quad -\frac{\partial c_p^*}{\partial r^*} = Bi (c_p^*|_{r^*=1} - c_f^*), \quad (2.9.3b)$$

$$\frac{\partial c_p^*}{\partial t^*} = \frac{1}{r^{*2}} \frac{\partial}{\partial r^*} \left(r^{*2} \frac{\partial c_p^*}{\partial r^*} \right) - \frac{\phi^2 c_p^*}{1 + c_p^*}, \quad (2.9.3c)$$

$$\text{en } r^* = 0, \quad \frac{\partial c_p^*}{\partial r^*} = 0, \quad (2.9.3d)$$

$$\text{cuando } t^* = 0, \quad c_p^* = c_{p0}^*, \quad c_f^* = c_{f0}^*. \quad (2.9.3e)$$

El interés de este problema es el estudiar la influencia del número de Biot y el módulo de Thiele sobre la dinámica de la concentración del sustrato. En específico, el interés está en predecir, c_f^* , $c_p^*|_{r^*=1}$ y la concentración promedio en la partícula, definida como

$$\langle c \rangle = 3 \int_{r^*=0}^{r^*=1} c_p^* r^{*2} dr^*. \quad (2.9.4)$$

Para la aplicación numérica que se muestra en los siguientes párrafos, se considera el caso en el que inicialmente la concentración del sustrato tanto en las partículas como en el fluido es cero. De esta forma, la única fuente del problema es la concentración a la entrada del reactor, la cual se representa como la siguiente función oscilatoria:

$$c_{en}^*(t^*) = \frac{2}{3} \left[1 + \frac{1}{2} \text{sen}(\omega^* t^*) \right]. \quad (2.9.5)$$

A continuación se describe la discretización del problema en términos de una sola variable c . Comenzando por la condición de frontera en $r^* = 0$, usando la fórmula de derivada hacia adelante se obtiene:

$$i = 1, \quad c_1 - c_2 = 0. \quad (2.9.6)$$

Utilizando el esquema de Crank-Nicholson, la ecuación de conservación de masa molar de especies químicas en las partículas se escribe como sigue

$$i = 2, \dots, Nr - 1, \quad 2 \frac{c_i^{k+1} - c_i^k}{\Delta t^*} = \frac{r_{i+1/2}^{*2} (c_{i+1}^{k+1} - c_i^{k+1}) - r_{i-1/2}^{*2} (c_i^{k+1} - c_{i-1}^{k+1})}{r_i^{*2} \Delta r^{*2}} + \frac{r_{i+1/2}^{*2} (c_{i+1}^k - c_i^k) - r_{i-1/2}^{*2} (c_i^k - c_{i-1}^k)}{r_i^{*2} \Delta r^{*2}} - R_i^{k+1} - R_i^k, \quad (2.9.7)$$

donde R representa al término de reacción. Debido a la presencia del término R_i^{k+1} , la ecuación anterior no puede expresarse en una forma tridiagonal. Para atender este problema se propone usar la siguiente linealización:

$$R_i^{k+1} \approx R_i^k + \left. \frac{\partial R}{\partial t^*} \right|_i^k \Delta t^*. \quad (2.9.8)$$

Usando la regla de la cadena en el último término resulta que

$$R_i^{k+1} \approx R_i^k + \left. \frac{dR}{dc} \frac{\partial c}{\partial t^*} \right|_i^k \Delta t^*. \quad (2.9.9)$$

O bien, discretizando la derivada temporal hacia adelante:

$$R_i^{k+1} \approx R_i^k + \left. \frac{dR}{dc} \right|_i^k (c_i^{k+1} - c_i^k). \quad (2.9.10)$$

En donde,

$$\left. \frac{dR}{dc} \right|_i^k = \frac{\phi^2}{(1 + c_i^k)^2}. \quad (2.9.11)$$

Sustituyendo el resultado dado en la ecuación (2.9.10) en la ecuación (2.9.7) permite obtener lo siguiente

$$i = 2, \dots, Nr - 1, \quad 2 \frac{c_i^{k+1} - c_i^k}{\Delta t^*} = \frac{r_{i+1/2}^{*2} (c_{i+1}^{k+1} - c_i^{k+1}) - r_{i-1/2}^{*2} (c_i^{k+1} - c_{i-1}^{k+1})}{r_i^{*2} \Delta r^{*2}} + \frac{r_{i+1/2}^{*2} (c_{i+1}^k - c_i^k) - r_{i-1/2}^{*2} (c_i^k - c_{i-1}^k)}{r_i^{*2} \Delta r^{*2}} - \frac{\phi^2}{(1 + c_i^k)^2} (c_i^{k+1} - c_i^k) - 2R_i^k. \quad (2.9.12)$$

La cual puede escribirse en forma tridiagonal como sigue

$$i = 2, \dots, Nr - 1, \quad -r_{ni} c_{i-1}^{k+1} + \left(2 + r_{pi} + r_{ni} + \frac{\phi^2 \Delta t^*}{(1 + c_i^k)^2} \right) c_i^{k+1} - r_{pi} c_{i+1}^{k+1} = 2c_i^k + r_{pi} (c_{i+1}^k - c_i^k) - r_{ni} (c_i^k - c_{i-1}^k) + \frac{\phi^2 \Delta t^*}{(1 + c_i^k)^2} c_i^k - 2\Delta t^* R_i^k. \quad (2.9.13)$$

En donde se definieron los siguientes coeficientes

$$r_{pi} = \frac{\Delta t^* r_{i+1/2}^{*2}}{\Delta r^{*2} r_i^{*2}}; \quad r_{ni} = \frac{\Delta t^* r_{i-1/2}^{*2}}{\Delta r^{*2} r_i^{*2}}. \quad (2.9.14)$$

Dirigiendo la atención a la condición de frontera interfacial, se usa la fórmula de derivada hacia atrás para obtener

$$i = Nr, \quad -c_{Nr-1}^{k+1} + (1 + Bi\Delta r^*)c_{Nr}^{k+1} - Bi\Delta r^*c_{Nr+1}^{k+1} = 0. \quad (2.9.15)$$

Aquí se consideró a la concentración en la fase fluida como una línea más en la matriz tridiagonal, la cual en este caso tendrá $Nr + 1$ filas. Para la fase fluida (que constituye la fila $Nr + 1$) se usa también el esquema de Crank-Nicholson. De esta forma, la ecuación en el fluido discretizada es

$$-a_v^*Bi\Delta t^*c_{Nr}^{k+1} + \left(2 + \frac{\Delta t^*}{t_R^*} + a_v^*Bi\Delta t^*\right)c_{Nr+1}^{k+1} = \frac{\Delta t^*}{t_R^*}c_{en}^{k+1} + 2c_{Nr+1}^k + \frac{\Delta t^*}{t_R^*}(c_{en}^k - c_{Nr+1}^k) + a_v^*Bi\Delta t^*(c_{Nr}^k - c_{Nr+1}^k). \quad (2.9.16)$$

Con base en esta discretización se presenta el siguiente programa en Matlab:

Programa de la dinámica de la concentración en un tanque agitado

```
clear; close all; clc;
format long
% Parámetros
Bi= 1;
til= 1;
av= 1/2;
tR= 1/2;
w= 10;
tmax= 10;
Nt= 10000;
Nr= 1000;
dt = tmax/(Nt-1);
dr = 1/(Nr-1);

r=zeros(Nr,1);
rp=zeros(Nr,1);
rn=zeros(Nr,1);
A=zeros(Nr+1,1);
B=zeros(Nr+1,1);
C=zeros(Nr+1,1);
D=zeros(Nr+1,1);
f=zeros(Nr,1);
c=zeros(Nr+1,1); % C.I. c =0
t=zeros(Nt,1);
cs=zeros(Nt,1);
cen=zeros(Nt,1);
cf=zeros(Nt,1);
cprom=zeros(Nt,1);

for i=1:Nr
    r(i)= (i-1)*dr;
    rp(i)= dt*((i-0.5)/r(i))^2;
    rn(i)= dt*((i-1.5)/r(i))^2;
```

```

end

B(1)=1;
C(1)= -1;

for k=1:Nt
    t(k)= (k-1)*dt;
    cen(k)= 2/3*(1+0.5*sin(w*t(k)));
end

h = waitbar(0,'Ya vamos...');
for k=1:Nt-1
    for i=2:Nr-1
        A(i)= -rn(i);
        B(i)= 2+rp(i)+rn(i)+til*dt/(1+c(i))^2;
        C(i)= -rp(i);
        D(i)= 2*c(i)+rp(i)*(c(i+1)-c(i))-rn(i)*(c(i)-c(i-1))...
            +til*dt/(1+c(i))^2*c(i)-2*dt*til*c(i)/(1+c(i));
    end
    A(Nr)= -1;
    B(Nr)= 1+Bi*dr;
    C(Nr)= -Bi*dr;

    A(Nr+1)= -av*Bi*dt;
    B(Nr+1)= 2+dt/tR+av*Bi*dt;
    D(Nr+1)= dt*cen(k+1)/tR+2*c(Nr+1)+dt*(cen(k)-c(Nr+1))/tR...
        +av*Bi*dt*(c(Nr)-c(Nr+1));

    c= Thomas(A,B,C,D,Nr+1);
    cs(k+1)= c(Nr);
    cf(k+1)= c(Nr+1);

    for i=1:Nr
        f(i)= r(i)^2*c(i);
    end
    cprom(k+1)= 3*trapecio(f,0,1,Nr);
    waitbar(k / Nt)
end
close(h)

semilogx(t,cprom, t,cs, t,cf)
legend('promedio', 'superficial', 'fluido')

```

En la figura 2.11 se presenta un ejemplo de la dinámica de la concentración promedio en las partícula, en la interfase sólido fluido y en la fase fluida. Note que, debido a la funcionalidad oscilatoria de la concentración de entrada, los resultados adquieren, después de un tiempo suficientemente mayor al tiempo característico de la difusión en las partículas (esto es, para $t^* > 1$) un régimen permanente de oscilatorios. En otras palabras, las predicciones de la concentración adquieren un comportamiento estable pero no estacionario. Como puede notarse, al incrementar el número de

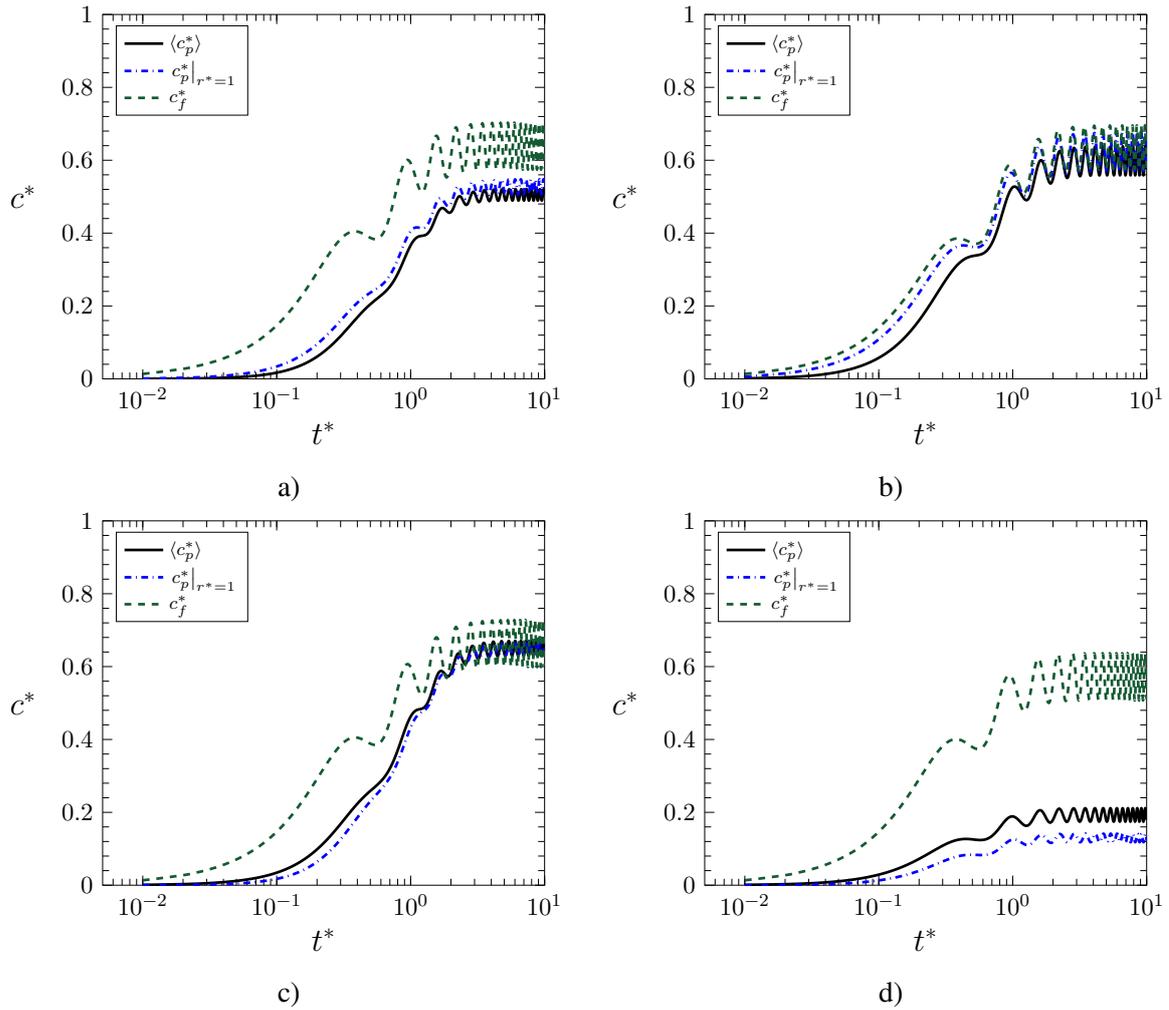


Figura 2.11: Ejemplos de la dinámica de la concentración del sustrato para a) $Bi = 1, \phi^2 = 1$; b) $Bi = 10, \phi^2 = 1$; c) $Bi = 1, \phi^2 = 0.1$ y d) $Bi = 1, \phi^2 = 10$. En todos los casos $a_v^* = 0.5, t_R^* = 0.5$ y $\omega^* = 10$.

Biot se reducen las resistencias interfaciales a la transferencia de masa y por ello la concentración en la partícula se aproxima a la del fluido. Un efecto similar se produce al disminuir el módulo de Thiele. Por último, los valores más bajos se encuentran para condiciones en las que ϕ^2 es máximo. Por supuesto, el modelo tiene más grados de libertad que pueden explorarse y eso se busca en el ejercicio 2.15. Además, en el ejercicio 2.16 se exploran otras funciones de entrada. Como un comentario final vale la pena agregar que [Valdes-Parada y col. \(2005\)](#) desarrollaron una solución analítica aproximada para este problema basada en el uso de aproximaciones en series de Taylor para linealizar a la reacción.

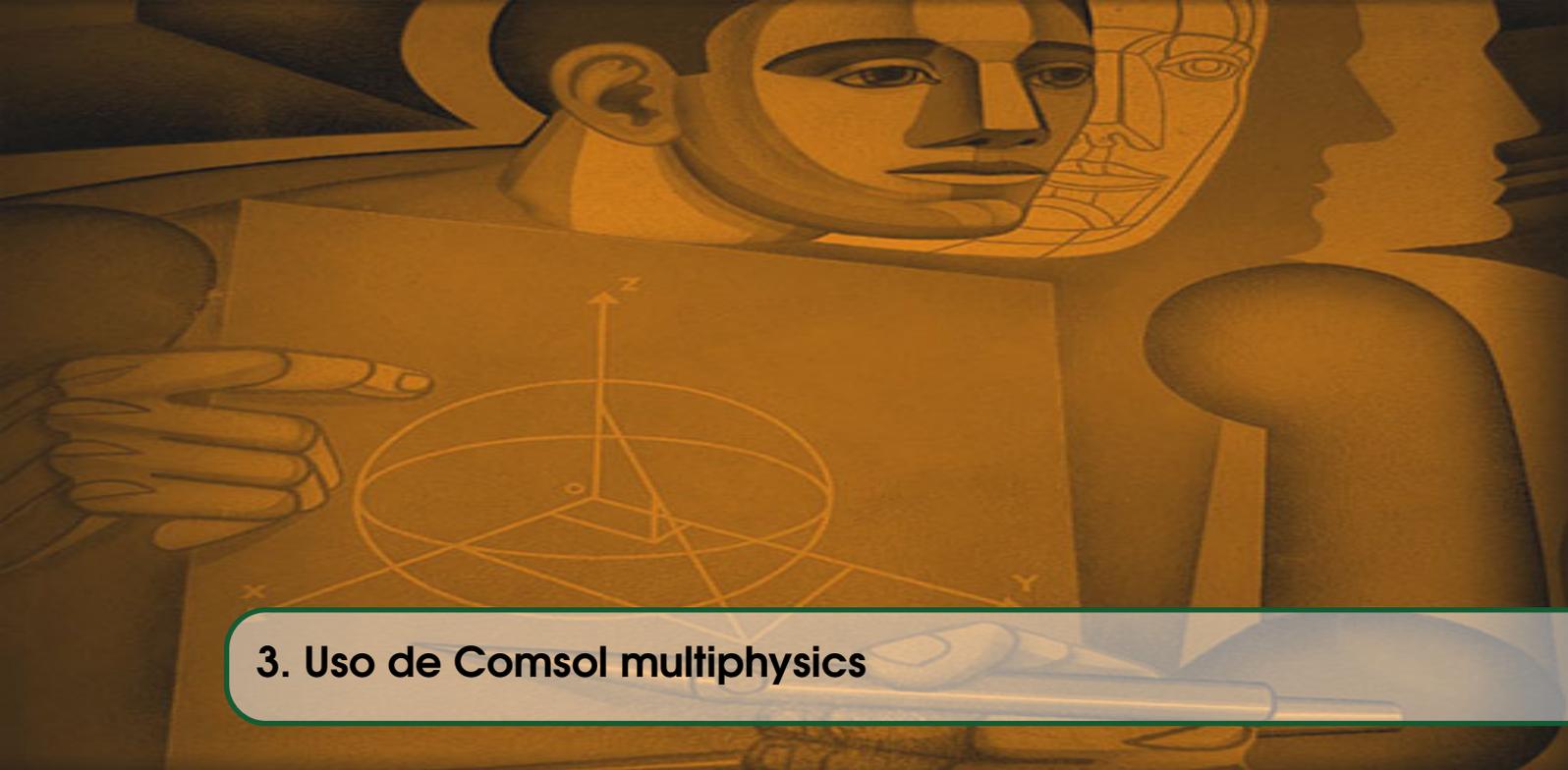
Ejercicio 2.15 — Análisis paramétrico. En la figura 2.11 se explora el efecto del número de Biot y del módulo de Thiele sobre la dinámica de la concentración de l sustrato. En este ejercicio debe explorar la influencia de los parámetros a_v^*, t_R^* y ω^* .

Ejercicio 2.16 — Diferentes funciones de entrada. Los resultados presentados en esta sección corresponden a una alimentación oscilatoria. En este ejercicio debe considerar la respuesta del sistema ante las siguientes funciones de entrada:

$$c_{en}^*(t^*) = 1; \quad (2.9.17a)$$

$$c_{en}^* = \begin{cases} 0, & 0 \leq t^* \leq 0.5 \\ 1, & 0.5 \leq t^* \leq 0.75 \\ 0, & t^* \geq 0.75 \end{cases} . \quad (2.9.17b)$$

El primer caso corresponde a un escalón unitario ya que inicialmente la concentración del soluto era nula en el tanque. Mientras que el segundo caso corresponde a un pulso finito. ■

An illustration in a warm, golden-brown color palette. It depicts a person's profile on the right, looking towards a central screen. On the screen, a 3D coordinate system is shown with x, y, and z axes. A hand on the left side of the screen points towards the diagram. The background features stylized, overlapping faces, suggesting a focus on human cognition or learning. A semi-transparent blue banner with a green border is positioned at the bottom of the illustration, containing the chapter title.

3. Uso de Comsol multiphysics

3.1 Introducción

El propósito de este capítulo es abordar la solución de problemas de transporte más complejos que los abordados en el capítulo anterior mediante el uso del método de elemento finito. Esta técnica numérica es mucho más versátil que el método de diferencias finitas ya que permite resolver los problemas de transporte en geometrías más realistas. Aunque ciertamente pueden desarrollarse códigos para programar este método numérico como se hizo en el capítulo anterior, esto trasciende los alcances de este texto. Al lector interesado se le recomienda consultar referencias como el trabajo de Šolin (2005) o bien el de Pepper y Heinrich (2017) que contienen fundamentos y aplicaciones que pueden programarse en Matlab. El enfoque que se adopta aquí es más bien en ilustrar el uso del resolutor comercial Comsol Multiphysics en la resolución numérica de diversos problemas relacionados con fenómenos de transporte.

Para cumplir el objetivo planteado arriba, el capítulo se organiza de la siguiente manera: Primeramente, en la sección 3.2 se abordan problemas transitorios en un reactor tipo tanque agitado homogéneo en donde la concentración promedio solo cambia con el tiempo y posteriormente se estudia la transferencia de calor en una aleta de enfriamiento de tipo anular mediante una formulación axisimétrica. Más adelante, en la sección 3.3 se estudia el flujo laminar y turbulento de un fluido incompresible alrededor de un perfil NACA. Las aplicaciones anteriores sólo involucran un tipo de transporte, por lo que en la sección 3.4 se combinan las ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento y de transporte de especies químicas para estudiar la transferencia de masa ocasionada por fuentes móviles. Posteriormente, se estudia el transporte inercial (sección 3.6) y la transferencia de masa y reacción (sección 3.7) en medios porosos usando el método del promedio volumétrico. Este análisis implica la solución de los problemas de cerradura asociados para predecir los coeficientes de medio efectivo asociados. Más adelante, en la sección 3.8 se ejemplifica el estudio de maquinarias rotatorias mediante el estudio del transporte de cantidad de movimiento y de calor en un tanque agitado. Por último, en la sección 3.9 se presentan tres técnicas numéricas para estudiar el flujo multifásico que son: el método de conjunto de nivel, el método de campo de fase y el método de malla móvil. En cada caso se aplican a problemas específicos ilustrativos.

Tabla 3.1: Descomposición de la componente normal del flux de masa en las superficies del sistema.

\mathcal{A}	\mathcal{A}_p	\mathcal{A}_a	\mathcal{A}_e	\mathcal{A}_s
$\mathbf{n} \cdot c_A \mathbf{v}_A$	0	0	$-c_e v_e$	$c_s v_s$
$\mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v}$	0	0	$-\rho v_e$	ρv_s

3.2 Modelos transitorios

3.2.1 Reactor continuo tipo tanque agitado homogéneo

Un reactor tipo tanque agitado es un recipiente que tiene un agitador en donde ingresa una fase fluida que contiene una (o varias) especie(s) química(s) la cual reacciona en el interior del sistema. Para desarrollar la ecuación que gobierna el transporte de masa en este sistema se parte del principio de conservación de masa:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \rho_A dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \rho_A (\mathbf{v}_A - \mathbf{w}) dA = \int_{\mathcal{V}_A} r_A dV. \quad (3.2.1)$$

La cual, al dividirla en ambos lados entre el peso molecular de la especie A , M_A , da lugar a su forma en base molar

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} c_A dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot c_A (\mathbf{v}_A - \mathbf{w}) dA = \int_{\mathcal{V}_A} R_A dV. \quad (3.2.2)$$

En donde $c_A = \rho_A/M_A$ y $R_A = r_A/M_A$. Suponiendo que el tanque se encuentra lleno del fluido, entonces puede usarse una región fija y la ecuación anterior se escribe como

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} c_A dV + \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot c_A \mathbf{v}_A dA = \int_{\mathcal{V}} R_A dV. \quad (3.2.3)$$

En este punto es conveniente definir a la concentración promedio en el tanque como

$$\langle c_A \rangle = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}} c_A dV, \quad (3.2.4)$$

donde V es el volumen del fluido en el tanque y se considera constante en el tiempo. Dividiendo ambos lados de la ecuación (3.2.3) entre V , se obtiene

$$\frac{d\langle c_A \rangle}{dt} + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot c_A \mathbf{v}_A dA = \langle R_A \rangle. \quad (3.2.5)$$

La superficie del fluido en el tanque \mathcal{A} puede descomponerse como la suma de la superficie en contacto con las paredes, \mathcal{A}_p , la superficie en contacto con el agitador, \mathcal{A}_a , la superficie de entrada, \mathcal{A}_e y la superficie de salida, \mathcal{A}_s :

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_p + \mathcal{A}_a + \mathcal{A}_e + \mathcal{A}_s. \quad (3.2.6)$$

Con base en esta descomposición, se obtienen los resultados que se muestran en la tabla 3.1, en donde se muestra que no hay transferencia de masa hacia las paredes o hacia el agitador y que las velocidades de entrada y salida están alineadas con las normales. Usando esta información en la ecuación (3.2.5) se obtiene el siguiente resultado

$$\frac{d\langle c_A \rangle}{dt} - \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_e} c_e v_e dA + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_s} c_s v_s dA = \langle R_A \rangle. \quad (3.2.7)$$

Para simplificar esta ecuación se supone que la concentración del reactivo a la entrada es constante. Además, si el reactor tiene una agitación perfecta puede suponerse que la concentración en la corriente de salida es igual a la concentración promedio dentro del tanque, esto es,

$$c_s = \langle c_A \rangle. \quad (3.2.8)$$

Bajo estas condiciones, la ecuación (3.2.7) toma la siguiente forma

$$\frac{d\langle c_A \rangle}{dt} - \frac{c_e}{V} \int_{\mathcal{A}_e} v_e dA + \frac{\langle c_A \rangle}{V} \int_{\mathcal{A}_s} v_s dA = \langle R_A \rangle. \quad (3.2.9)$$

Para poder avanzar es conveniente recordar la forma macroscópica de la ecuación de conservación de la masa total para una región fija:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v} dA = 0. \quad (3.2.10)$$

La cual, para un flujo incompresible se reduce a

$$\int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v} dA = 0. \quad (3.2.11)$$

Tomando en cuenta la descomposición mostrada en la tabla 3.1, esta ecuación se expresa como

$$- \int_{\mathcal{A}_e} \rho v_e dA + \int_{\mathcal{A}_s} \rho v_s dA = 0. \quad (3.2.12)$$

Como el flujo es incompresible, la densidad es constante y la ecuación anterior lleva a

$$\dot{Q} = \int_{\mathcal{A}_e} v_e dA = \int_{\mathcal{A}_s} v_s dA. \quad (3.2.13)$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación (3.2.9) se obtiene que

$$\frac{d\langle c_A \rangle}{dt} = \frac{1}{t_R} (c_e - \langle c_A \rangle) + \langle R_A \rangle. \quad (3.2.14)$$

En donde el tiempo de residencia se define como $t_R = V/\dot{Q}$. Para cerrar esta ecuación es necesario especificar la tasa de reacción y la concentración de entrada. En este caso de estudio, el interés está en explorar la influencia del orden de reacción en la dinámica de la concentración, para ello, se expresa a la tasa de reacción como

$$\langle R_A \rangle = -k_\alpha \langle c_A \rangle^\alpha. \quad (3.2.15)$$

En los desarrollos que siguen se consideran las siguientes dos funciones de entrada

$$c_e = \begin{cases} 0, & t \leq 0 \\ c_1, & t > 0 \end{cases}, \quad (3.2.16a)$$

$$c_e = \begin{cases} 0, & t \leq 0 \\ \frac{c_1}{2} [1 + \gamma \text{sen}(\omega t)], & t > 0 \end{cases}. \quad (3.2.16b)$$

Por último, el modelo se completa con la condición inicial

$$\text{cuando } t = 0, \quad \langle c_A \rangle = c_0. \quad (3.2.17)$$

Antes de resolver el problema es conveniente reformularlo en términos de las siguientes variables y parámetros adimensionales

$$c^* = \frac{\langle c_A \rangle}{c_1}; \quad t^* = \frac{t}{t_R}; \quad Da = k_\alpha c_1^{\alpha-1} t_{ref}, \quad c_e^* = \frac{c_e}{c_1}, \quad c_0^* = \frac{c_0}{c_1}; \quad \omega^* = t_R \omega, \quad (3.2.18)$$

donde Da es el número de Damköhler y relaciona la velocidad de reacción con la velocidad de transporte de masa en el reactor. De esta forma, la versión adimensional del modelo macroscópico es

$$\frac{dc^*}{dt^*} = c_e^* - c^* - Da c^{*\alpha}, \quad (3.2.19a)$$

$$c_e^* = \begin{cases} 0, & t^* \leq 0 \\ 1, & t^* > 0 \end{cases}, \quad (3.2.19b)$$

$$c_e^* = \begin{cases} 0, & t^* \leq 0 \\ \frac{1}{2}[1 + \gamma \text{sen}(\omega^* t^*)], & t^* > 0 \end{cases}, \quad (3.2.19c)$$

$$\text{cuando } t^* = 0, \quad c^* = c_0^*. \quad (3.2.19d)$$

Como puede notarse, los parámetros del problema son Da , α , γ , ω^* y c_0^* así como el tipo de función de entrada. Para resolver este problema con el software Comsol multiphysics se siguen estos pasos:

Pasos a seguir para la solución numérica del problema

1. Presione *Model wizard* y escoja 0D del menú que aparece.
2. Desarrolle el árbol de *Mathematics* y desarrolle la rama de *ODE and DAE interfaces*, elija *Global ODEs and DAEs (ge)* y presione el botón *Add*.
3. Presione el botón *Study* y elija *Time dependent* del menú que aparece y presione el botón que dice *Done*.
4. En la pestaña de *Parameters* ingrese los siguientes parámetros y valores: $Da = 1$, $a = 1$, $g = 0.5$, $w = 10$, $c_0 = 0$.
5. En la rama de *Component 1*, haga click derecho en *Definitions/variables* en la primera fila y en la primera columna escriba: cen1. Esta función representa a la función de entrada dada en la ecuación (3.2.19b), así que en la segunda columna escriba 1.
6. En la segunda fila y primera columna, escriba cen2. Esta función representará a la función de entrada dada en la ecuación (3.2.19c). Para ello, escriba en la segunda columna de esta fila debe escribir lo siguiente: $0.5*(1+g*\sin(w*t))$
7. En la rama de *Global ODEs and DAEs (ge)* seleccione *Global Equations 1*.
8. En la primera fila de la columna *Name* escriba c .
9. En la primera fila de la segunda columna debe escribir la ecuación diferencial:

$$ct+c-cen1+Da*c^a$$

Como puede notar $ct \equiv dc^*/dt^*$ y la ecuación se escribe en el lado izquierdo igualada a cero.

10. En la rama de *Study 1*, haga click en *Step 1: Time Dependent*, localice la casilla que dice *Times* y presione el botón de rangos. En *Entry method* escoja *Logarithmic*, en *Start* escriba $1e-4$, en *Stop* escriba 10 y especifique 100 pasos por década; por último presione *Replace*.
11. Si desea tener el control del espaciamiento en el tiempo que toma el haga click derecho en *Study 1* y elija *Show default solver* desarrolle la rama *Solution 1*, ubique *Time-Dependent Solver 1* y desarrolle la ventana llamada *Time Stepping*. En *Steps taken by solver* elija *Manual* y en la casilla de *Time step* escriba por ejemplo 0.001.
12. Presione el botón llamado *compute*.
13. Una vez obtenido el resultado, seleccione *x-Axis logscale* y en *1D Plot Group 1* seleccione

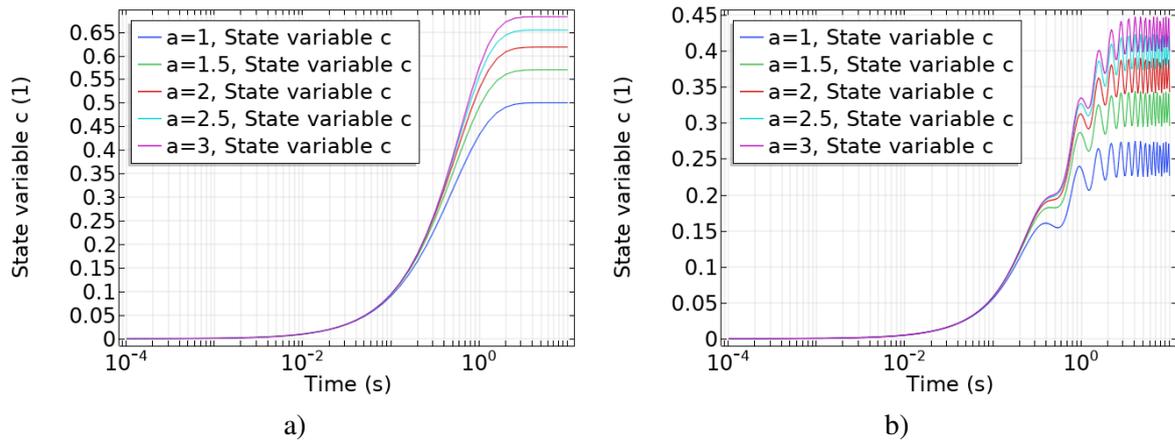


Figura 3.1: Dinámica de la concentración adimensional de la especie A en un reactor continuo tipo tanque agitado para diversos órdenes de reacción usando: a) una función de entrada tipo escalón unitario y b) una función de entrada oscilatoria.

que la leyenda aparezca en la esquina superior izquierda.

14. Para llevar a cabo un barrido paramétrico haga click derecho en *Study 1* y seleccione *Parametric Sweep*. En *Parameter name* elija *a* y en *Parameter value list* escoja un rango que comience en 1, tenga un espaciado de 0.5 y termine en 3.
15. Repita el proceso para *cen2*.

En la figura 3.1 se muestra la dinámica de la concentración obtenida con la secuencia de pasos descrita arriba. Como puede notarse, la concentración experimenta los cambios más importantes para $t^* \in (10^{-2}, 1)$. Además, se aprecia que conforme se incrementa el orden de la reacción, la concentración se vuelve cada vez menos sensible a cambios en α .

Ejercicio 3.1 — Validación con la solución analítica. Resuelva el problema para una cinética de primer orden de manera analítica y evalúe el desempeño de la solución numérica para diferentes pasos de tiempo. ■

Ejercicio 3.2 — Análisis paramétrico. Evalúe la influencia del número de Damköhler, γ y ω^* en las predicciones de la dinámica de la concentración promedio. ■

3.2.2 Dinámica de la temperatura promedio en una aleta de enfriamiento anular

Considere la aleta de enfriamiento anular mostrada en la figura 3.2, la cual se utiliza para disipar radialmente el calor de una tubería. En este problema se desea estudiar la dinámica de la temperatura promedio (en las direcciones axial y angular) en la aleta de enfriamiento. Bajo estas condiciones, la forma microscópica de la ecuación de energía térmica es

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\alpha}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\alpha}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}. \quad (3.2.20a)$$

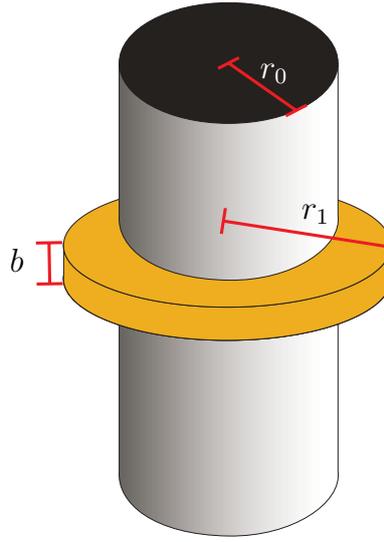


Figura 3.2: Esquema de una aleta de enfriamiento anular de radio r_1 y ancho b alrededor de una barra de radio r_0 .

Donde $\alpha = k/(\rho c_p)$ es la difusividad térmica. La cual está sujeta a las siguientes condiciones de frontera:

$$\text{en } r = r_0, \quad T = T_p, \quad (3.2.20b)$$

$$\text{en } r = r_1, \quad -k \frac{\partial T}{\partial r} = h(T - T_a), \quad (3.2.20c)$$

$$\text{en } z = \pm b/2, \quad \mp k \frac{\partial T}{\partial z} = h(T - T_a). \quad (3.2.20d)$$

Donde T_p es la temperatura en la pared del tubo y T_a es la temperatura ambiente. Además, aplican condiciones de periodicidad (de la temperatura y el flux de calor) en la dirección angular. Por último, el problema se completa con la condición inicial

$$\text{cuando } t = 0, \quad T = T_0. \quad (3.2.20e)$$

Para reducir la dimensión espacial del problema se define el siguiente operador de promediado

$$\langle T \rangle^{\theta z} = \frac{1}{2\pi b} \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{z=-b/2}^{z=b/2} T dz d\theta. \quad (3.2.21)$$

Aplicando este operador a la ecuación (3.2.20a) se obtiene que

$$\frac{\partial \langle T \rangle^{\theta z}}{\partial t} = \frac{\alpha}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \langle T \rangle^{\theta z}}{\partial r} \right) - \frac{2h}{b\rho c_p} \left(\langle T \rangle^{\theta z} - T_a \right). \quad (3.2.22)$$

Para obtener este resultado se adoptó la siguiente suposición

$$T|_{z=b/2} = T|_{z=-b/2} \approx \langle T \rangle^{\theta z}. \quad (3.2.23)$$

La ecuación (3.2.22) está sujeta a las siguientes condiciones de frontera e inicial

$$\text{en } r = r_0, \quad \langle T \rangle^{\theta z} = T_p, \quad (3.2.24)$$

$$\text{en } r = r_1, \quad -k \frac{\partial \langle T \rangle^{\theta z}}{\partial r} = h \left(\langle T \rangle^{\theta z} - T_a \right), \quad (3.2.25)$$

$$\text{cuando } t = 0, \quad \langle T \rangle^{\theta z} = T_0. \quad (3.2.26)$$

Como en los casos anteriores, antes de resolver el problema es conveniente reformularlo en términos de las siguientes variables adimensionales

$$T^* = \frac{\langle T \rangle^{\theta z} - T_a}{T_p - T_a}, \quad T_0^* = \frac{T_0 - T_a}{T_p - T_a}, \quad r^* = \frac{r}{r_1}, \quad r_0^* = \frac{r_0}{r_1}, \quad t^* = \frac{\alpha t}{r_1^2},$$

$$Bi = \frac{hr_1}{k}, \quad m^2 = \frac{2Bir_1}{b}. \quad (3.2.27)$$

De esta forma, la versión adimensional del problema es

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} = \frac{1}{r^*} \left(r^* \frac{\partial T^*}{\partial r^*} \right) - m^2 T^*, \quad (3.2.28a)$$

$$\text{en } r^* = r_0^*, \quad T^* = 1, \quad (3.2.28b)$$

$$\text{en } r^* = 1, \quad -\frac{\partial T^*}{\partial r^*} = Bi T^*, \quad (3.2.28c)$$

$$\text{cuando } t^* = 0, \quad T^* = T_0^*. \quad (3.2.28d)$$

Los parámetros de este modelo son r_0^* , r_1/b , Bi y T_0^* . Para resolver el problema en Comsol Multiphysics, se siguen los pasos que se listan a continuación.

Pasos a seguir para resolver el problema del cálculo de la temperatura promedio en la aleta anular

1. Presione *Model wizard* y escoja 1D axisymmetric del menú que aparece.
2. Desarrolle el árbol de *Heat transfer* y seleccione *Heat Transfer in Solids (ht)* y presione el botón *Add* y posteriormente el botón *Study*.
3. En el siguiente menú seleccione *Time dependent study* y presione el botón *Done*.
4. En la sección de *Parameters* especifique: $r_0= 0.25$, $r_1b= 10$, $Bi = 1$, $m_2 = 2*Bi*r_1b$, $T_0 = 0.1$.
5. Haga click derecho en la rama *Geometry/Interval* en coordenadas remplace 0 por r_0 y presione el botón *Build all objects*. Este es el dominio espacial para llevar a cabo la solución del problema.
6. En la rama de *Heat Transfer in Solids (ht)/Solid 1* especifique que la conductividad térmica, la densidad y la capacidad calorífica sean la unidad.
7. Haga click derecho en *Heat Transfer in Solids (ht)* y seleccione *Heat source* y seleccione el dominio 1. En la casilla de *Heat source* escriba $-m_2*T$.
8. Haga click derecho en *Heat Transfer in Solids (ht)* y seleccione *Temperature*, seleccione el nodo 1 y escriba en la temperatura el valor de 1.
9. Haga click derecho en *Heat Transfer in Solids (ht)* y seleccione *Heat Flux*, seleccione el nodo 2 y escriba en *general inward flux* el valor de $-Bi*T$. La razón del cambio de signo se debe a que Comsol utiliza $-\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}$.
10. En *Initial values* escriba T_0 .
11. Haga click derecho en *Mesh* y seleccione *Edge*, posteriormente haga click derecho en *Edge* y seleccione *size*. En el menú que aparece seleccione *Custom* y habilite la casilla de *Maximum element size* y escriba 0.001.
12. En la rama de *Study 1*, haga click en *Step 1: Time Dependent*, localice la casilla que dice *Times* y presione el botón de rangos. En *Entry method* escoja *Logarithmic*, en *Start* escriba $1e-4$, en *Stop* escriba 10 y especifique 100 pasos por década; por último presione *Replace*.
13. Si desea tener el control del espaciamiento en el tiempo que toma el resolutor haga click derecho en *Study 1* y elija *Show default solver* desarrolle la rama *Solution 1*, ubique *Time-Dependent Solver 1* y desarrolle la ventana llamada *Time Stepping*. En *Steps taken by solver* elija *Manual* y en la casilla de *Time step* escriba por ejemplo 0.0001.

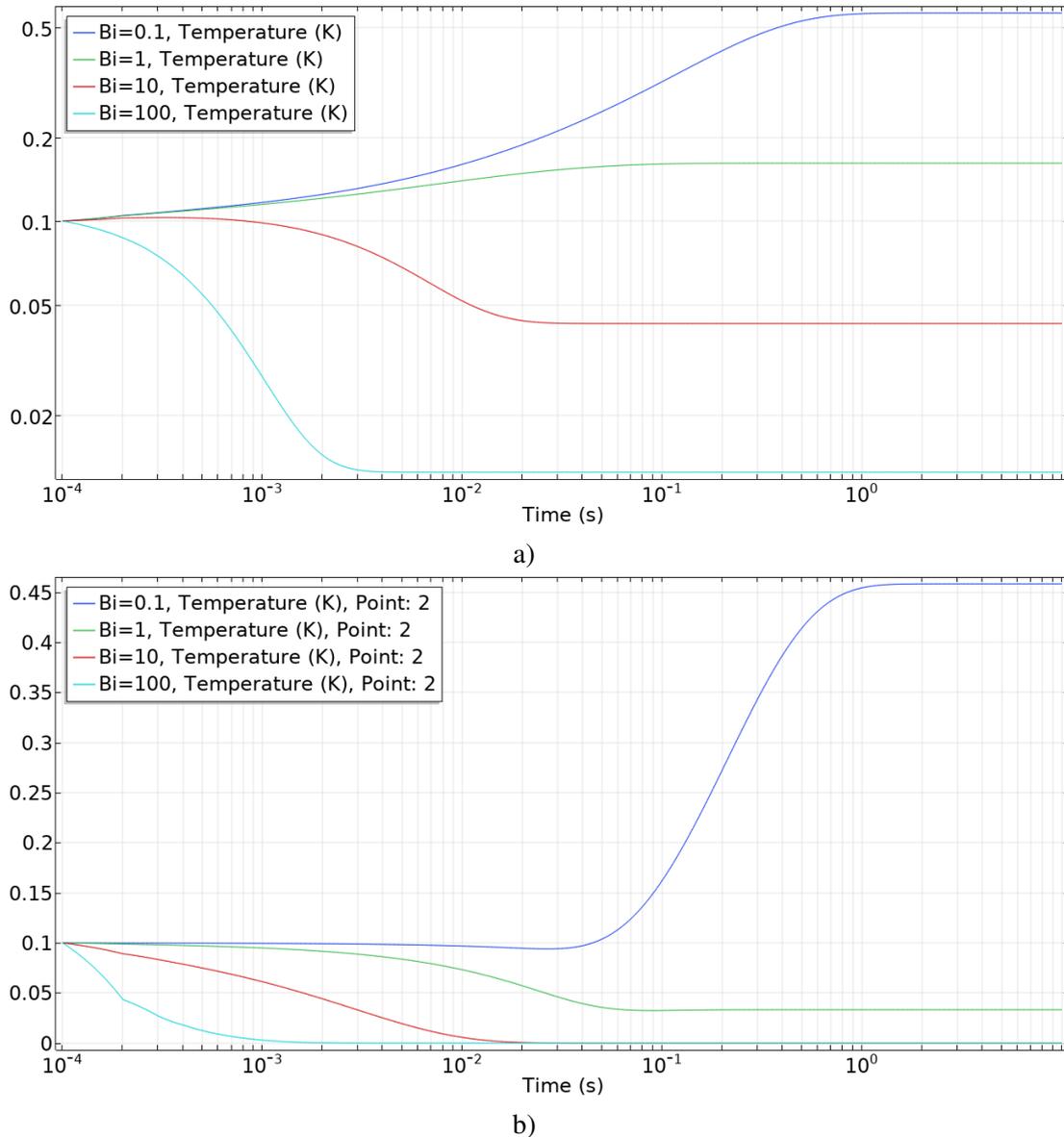


Figura 3.3: Dinámica de a) la temperatura promedio en toda la aleta y b) la temperatura en $r^* = 1$ para diferentes valores del número de Biot

14. Presione el botón llamado *compute*.
15. Repita el proceso para un análisis paramétrico en el número de Biot para valores de 0.1, 1, 10 y 100.
16. Presente los resultados en términos de las dinámicas de la temperatura promedio en toda la aleta y la temperatura en $r^* = 1$.
17. Para calcular la temperatura promedio haga click derecho en *Derived values/Average/Line average*.

En la figura 3.3 se muestra la dinámica de la temperatura promedio y la temperatura en $r^* = 1$ para diferentes valores del número de Biot. Como puede notarse, cuando el número de Biot es suficientemente pequeño, la aleta incrementa su temperatura con el tiempo, llegando a alcanzar temperaturas de aproximadamente la mitad de la temperatura del tubo. Por el contrario, conforme se incrementa el número de Biot, la temperatura en la aleta rápidamente se aproxima a la temperatura

ambiente. Es importante notar que el tiempo de respuesta al ambiente aumenta con el número de Biot. De hecho, para $Bi = 1$ la temperatura promedio casi no cambia respecto a su valor inicial. El archivo de consol que lleva a cabo la solución numérica del problema se llama Aleta_Anular.mph y está disponible con el autor.

Ejercicio 3.3 — Análisis paramétrico. Evalúe los efectos que tienen los parámetros r_0^* y r_1/b sobre las soluciones. ■

Ejercicio 3.4 — Dinámica de la eficiencia de la aleta. La eficiencia de la aleta se define como la razón de la tasa de transferencia de calor promedio que recibe la aleta

$$\langle \dot{Q} \rangle^{\theta z} \Big|_{r=r_0} = -\frac{2\pi r_0 b k}{r_1} (T_p - T_a) \frac{dT^*}{dr^*} \Big|_{r^*=r_0^*}. \quad (3.2.29)$$

Entre la tasa máxima de calor que puede disipar la aleta

$$\langle \dot{Q} \rangle_{\text{máx}}^{\theta z} = A_f h (T_p - T_a), \quad (3.2.30)$$

donde el área de la aleta, A_f se define como

$$A_f = 2\pi (r_1^2 - r_0^2) + 2\pi r_1 b + 2\pi r_0 b. \quad (3.2.31)$$

Evalúe la dinámica de la eficiencia de la aleta y discuta los resultados obtenidos. ■

Ejercicio 3.5 Comparar los perfiles de temperatura con los resultantes de un análisis en una geometría 2D-axisimétrica. ■

Ejercicio 3.6 Resuelva el problema visto en esta sección usando el método de Crank-Nicholson y compare las predicciones de su programa con las que ofrece Comsol. Haga una discusión en cuanto a la convergencia de las soluciones en términos de los nodos computacionales en el espacio y en el tiempo. ■

3.3 Flujo alrededor de tres perfiles NACA

3.3.1 Flujo laminar

En esta sección se desea estudiar el flujo de un fluido alrededor de tres perfiles NACA. En específico, se consideran los perfiles NACA-0008, NACA-6409 y NACA-6412, cada uno del mismo largo ℓ . Se supondrá que cada perfil alar está suspendido en la misma cámara de viento (de largo L y altura H) y que están suficientemente separados entre sí para no influenciar los respectivos perfiles de velocidad. Puede despreocuparse de las fuerzas volumétricas debidas a la fuerza de gravedad. Suponiendo flujo newtoniano, incompresible y en estado estacionario, las ecuaciones que gobiernan el transporte de cantidad de movimiento son

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (3.3.1a)$$

$$\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v}. \quad (3.3.1b)$$

Fijando el eje coordenado a la entrada del flujo de aire y suponiendo que el flujo es paralelo a la horizontal, entonces la condición de frontera en la superficie de entrada es

$$\text{en } x = 0, \quad \mathbf{v} = -v_e \mathbf{n}. \quad (3.3.1c)$$

Si la cámara de viento tiene una longitud L y está abierta al ambiente, entonces la condición de frontera en la superficie de salida es

$$\text{en } x = L, \quad \mathbf{n} \cdot [-p\mathbf{l} + \mu (\nabla\mathbf{v} + (\nabla\mathbf{v})^T)] = -p_a\mathbf{n}. \quad (3.3.1d)$$

Cabe aclarar que Comsol Multiphysics maneja presiones relativas, por lo que la programación de la ecuación anterior debe llevar a una condición de frontera homogénea. En el resto de las superficies del sistema ($\partial\Omega$) se impone la condición de no deslizamiento

$$\text{en } \partial\Omega, \quad \mathbf{v} = \mathbf{0}. \quad (3.3.1e)$$

Antes de proceder a la solución numérica, es conveniente definir las siguientes variables y parámetros adimensionales

$$\mathbf{v}^* = \frac{\mathbf{v}}{v_e}; \quad \mathbf{r}^* = \frac{\mathbf{r}}{\ell}; \quad p^* = \frac{p\ell}{\mu v_e}; \quad Re = \frac{\rho v_e \ell}{\mu}; \quad L^* = \frac{L}{\ell}. \quad (3.3.2)$$

De esta forma, el problema adimensional es

$$\nabla^* \cdot \mathbf{v}^* = 0, \quad (3.3.3a)$$

$$Re\mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* = -\nabla^* p^* + \nabla^{*2} \mathbf{v}^*, \quad (3.3.3b)$$

$$\text{en } x^* = 0, \quad \mathbf{v}^* = -\mathbf{n}, \quad (3.3.3c)$$

$$\text{en } x^* = L^*, \quad \mathbf{n} \cdot [-p^*\mathbf{l} + (\nabla^* \mathbf{v}^* + (\nabla^* \mathbf{v}^*)^T)] = \mathbf{0}, \quad (3.3.3d)$$

$$\text{en } \partial\Omega, \quad \mathbf{v}^* = \mathbf{0}. \quad (3.3.3e)$$

La altura adimensional del sistema se denota como $H^* = H/\ell$. Se desea calcular en cada caso cuál es la componente x de la fuerza que ejerce el fluido sobre cada perfil alar. Ya que el sistema se estudia en 2D, dicha componente del vector de fuerza se calcula como sigue

$$f_x = W_o \oint \mathbf{n} \cdot [-p\mathbf{l} + \mu (\nabla\mathbf{v} + (\nabla\mathbf{v})^T)] \cdot \mathbf{e}_x d\sigma. \quad (3.3.4)$$

Donde W_o es el espesor del obstáculo. O bien, en forma adimensional

$$f_x^* \equiv \frac{f_x}{W_o \mu v_e} = \oint \mathbf{n} \cdot [-p^*\mathbf{l} + (\nabla^* \mathbf{v}^* + (\nabla^* \mathbf{v}^*)^T)] \cdot \mathbf{e}_x d\sigma^*. \quad (3.3.5)$$

Para resolver este problema en Comsol Multiphysics se siguen estos pasos:

Programa para estudiar la fuerza sobre perfiles alares

1. En *Model Wizard* elija 2D.
2. En la física elija: *Fluid flow/Single-Phase Flow/Laminar Flow (spf)*. Haga click en *Add* y posteriormente en *Study*.
3. Seleccione *Stationary* en el menú de estudios y posteriormente el botón de *Done*.
4. En *Parameters 1* ingrese los siguientes parámetros: $L = 10$, $H = 10$, $Re = 1$.
5. En *Geometry* seleccione *Parametric curve*, en expresiones para x escriba s y para y escriba $0.595*(0.298*\text{sqrt}(s)-0.127*s-0.358*s^2+0.292*s^3-0.105*s^4)$
6. En *Relative tolerance* fije $1e-5$.
7. Seleccione *Geometry/Transforms/Mirror* y seleccione a $pc1$. Habilite la casilla que dice *Keep input objects* y en *Normal Vector to Line of Reflection* fije $x = 0$ y $y = 1$.
8. Seleccione *Geometry/Conversions/Convert to Solid* y seleccione a $pc1$ y $mir1$.
9. Seleccione *Geometry/Transforms/Move* y seleccione a $csol1$. En x fije -0.5 y en y escriba 2.5 . Por último, en label escriba *NACA-0008*.
10. Los otros dos perfiles NACA se tienen tabulados, para acceder al primero de ellos

- seleccione *Geometry/Interpolation Curve* y cargue los datos para el perfil NACA-6409. En *Object Type* seleccione *Solid*.
11. Seleccione *Geometry/Transforms/Move* y seleccione a ic1. En x fije -0.5 y en y escriba -2.5. Por último, en label escriba NACA-6409.
 12. Seleccione *Geometry/Interpolation Curve* y cargue los datos para el perfil NACA-6412. En *Object Type* seleccione *Solid*.
 13. Seleccione *Geometry/Transforms/Move* y seleccione a ic2. En x fije -0.5 y en y escriba 0. Por último, en label escriba NACA-6412. Hasta este punto se han dibujado los tres perfiles alares y sólo falta dibujar la cámara de viento.
 14. Seleccione *Geometry/Rectangle* y escriba en *Width* L y en *Height* H . En *Position* escoja en *Base* la opción de *Center*.
 15. Seleccione *Geometry/Booleans and Partitions/Difference* y seleccione en *Objects to add* al rectángulo r1. En *Objects to subtract* seleccione a los tres perfiles alares: mov1, mov2 y mov3.
 16. Presione el botón *Buid all objects*.
 17. *Laminar Flow/Fluid Properties 1* fije a la densidad como Re y a la viscosidad como 1.
 18. En *Laminar Flow/Inlet*, seleccione la frontera 1 y en la casilla de U_0 escriba 1.
 19. En *Laminar Flow/Outlet*, seleccione la frontera 4 y en la casilla de p_0 escriba 0.
 20. Comsol por default fija a todas las condiciones de frontera como velocidad igual a cero, por lo que no es necesario especificar mas condiciones de frontera.
 21. En *Mesh* elija *Extremely fine*.
 22. En *Study* elija *Parametric Sweep*, elija Re y escriba 1 10 100 1000 1e4.
 23. En *Study* presione *Compute*.

En la figura 3.4 se reportan las líneas de corriente de la velocidad del fluido alrededor de los tres perfiles alares para los valores del número de Reynolds considerados aquí. Como puede notarse, el flujo cada vez es más dominado por la inercia, lo cual se traduce en que disminuye el espesor de la capa límite de transferencia de cantidad de movimiento. Para calcular la fuerza sobre cada perfil alar siguiendo a la ecuación (3.3.4) siga estos pasos:

Cálculo de la fuerza sobre los álabes

1. Repita el análisis paramétrico pero ahora escoja un rango logarítmico para el número de Reynolds que vaya de 1 a 10^4 con 10 pasos por década.
2. En *Results/Derived values*, escoja *Line integration*, seleccione las fronteras 5 y 6 y en expresión escriba

$$-n_x * p + n_x * u_x + n_y * u_y + n_x * u_x + n_y * v_x$$

Y presione *Evaluate*.

3. Repita lo anterior para las fronteras 7 y 8, así como para las fronteras 9 y 10.

Las predicciones de la fuerza que el viento le cede a cada perfil alar se muestran en la figura 3.5. Como puede notarse, el número de Reynolds comienza a ejercer una influencia considerable sobre la fuerza para valores superiores a 100, mientras que la influencia de la geometría comienza a hacerse notar a partir de $Re > 10^3$. De estas simulaciones se puede concluir que el perfil NACA-6412 es el que recibe la mayor fuerza.

Ejercicio 3.7 — Componente y de la fuerza. Los cálculos realizados en esta sección se centraron en la componente x de la fuerza del fluido sobre los perfiles alares. Calcule la componente y y compare sus resultados con los de la componente x .

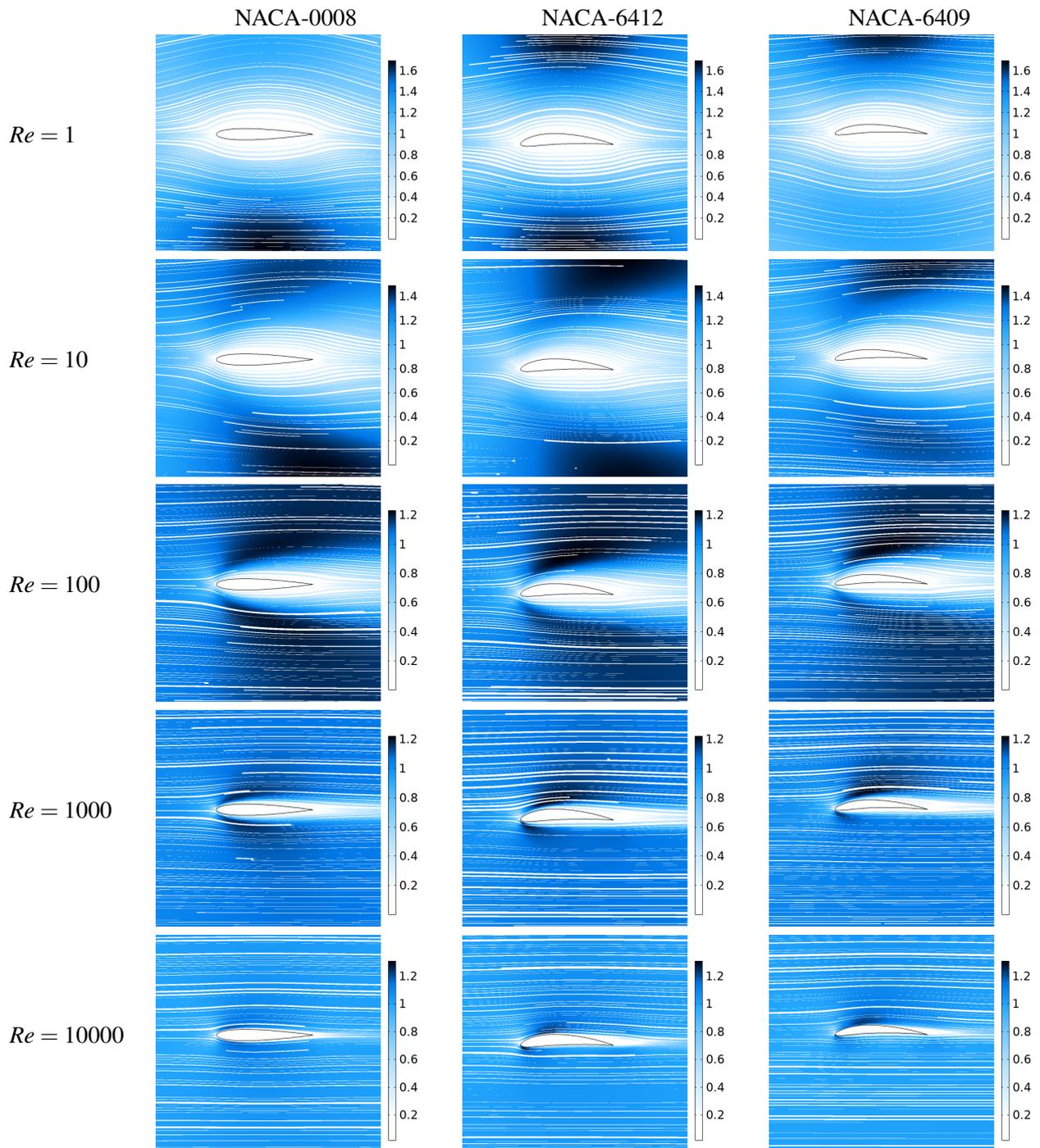


Figura 3.4: Líneas de corriente alrededor de los tres perfiles alares para diferentes valores del número de Reynolds.

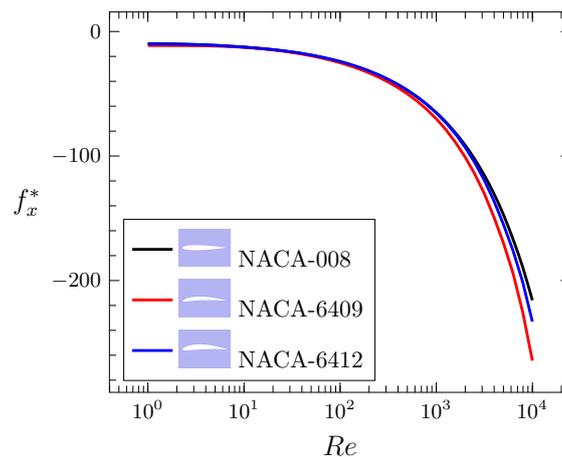


Figura 3.5: Predicciones de la componente x de la fuerza adimensional que ejerce el fluido sobre cada uno de los perfiles NACA.

Ejercicio 3.8 — Acoplamiento con transferencia de masa. Agregue al problema la física de transferencia de masa y suponga que en las fronteras entre el fluido y los perfiles alares se lleva a cabo una reacción química heterogénea. Considere $Pe = 0.1Re$ y $\phi^2 = 10$. Analice el problema y explique para qué condiciones se favorece el consumo del reactivo. ■

Ejercicio 3.9 — Resultados en 3D. Repita tanto el problema visto en la sección como el acoplado con transferencia de masa en 3D. Para ello, suponga que $W^* = 10$ y $W_o^* = 1$. ■

3.3.2 Flujo turbulento

Los resultados obtenidos hasta el momento están limitados a condiciones de flujo laminar. De hecho, el resolutor mostró algunos problemas de convergencia para obtener la solución para $Re = 10^4$. Por ello, es recomendable explorar las predicciones que aporta un resolutor para flujo turbulento. Entre las diferentes opciones que aporta Comsol Multiphysics para llevar a cabo estudios en flujo turbulento, es recomendable usar el modelo SST, el cual combina tanto a los modelos de κ - ϵ como de κ - ω . A continuación se presentan los pasos a seguir para hacer un programa que funcione bajo condiciones de flujo turbulento.

Programa para estudiar la fuerza sobre perfiles alares en flujo turbulento

1. En *Model Wizard* elija 2D.
2. En la física elija: *Fluid flow/Single-Phase Flow/Turbulent Flow, SST (spf)*. Haga click en *Add* y posteriormente en *Study*.
3. Seleccione *Stationary with initialization* en el menú de estudios y posteriormente el botón de *Done*.
4. Seleccione *Geometry/Inser Sequence* y localice el programa anterior.
5. Agregue $Re = 1$ en *Parameters*
6. Repita las mismas características para la física y la malla.
7. En el rango de valores del número de Reynolds en el barrido paramétrico fije: 1e3 1e4 1e5 1e6 y oprima *Compute*.

Usando estos pasos, se hizo un programa que dio como resultados las predicciones que se presentan en la figura 3.6. Como puede notarse, en este caso es más evidente la ventaja que ofrece

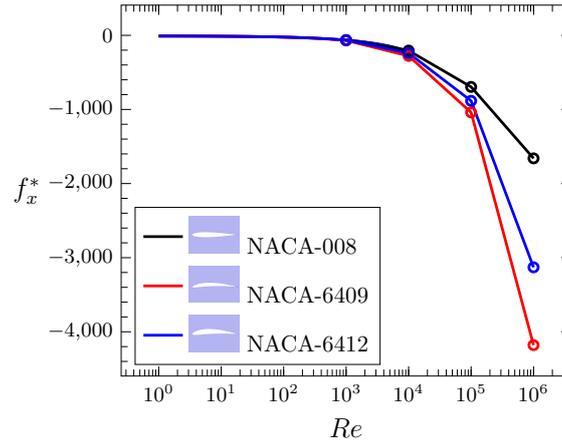


Figura 3.6: Predicciones de la componente x de la fuerza adimensional que ejerce el fluido sobre cada uno de los perfiles NACA tanto para régimen laminar como turbulento.

la geometría del perfil NACA-6409. No debe perderse de vista que estos resultados se obtuvieron en geometrías bidimensionales bajo condiciones de estado estacionario. Un análisis más realista debería relajar estas condiciones simplificadas.

3.4 Flujo de fluidos y transferencia de masa por un automóvil

Considere un automóvil que se encuentra dentro de un embotellamiento. Se desea investigar la dispersión de los contaminantes emitidos por el auto a diferentes valores del número de Reynolds. Estos contaminantes se denotan como la especie A . Las ecuaciones diferenciales que gobiernan el transporte de cantidad de movimiento y de masa son

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (3.4.1a)$$

$$\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v}, \quad (3.4.1b)$$

$$\mathbf{v} \cdot \nabla c_A = \mathcal{D}_A \nabla^2 c_A, \quad (3.4.1c)$$

Las cuales se resuelven en una celda que tiene una longitud L , profundidad W y altura H . En referencia a esta celda, las ecuaciones anteriores están sujetas a las siguientes condiciones de frontera

$$\text{en } x = -L/2, \quad \mathbf{v} = -v_e \mathbf{n}, \quad c_A = c_e, \quad (3.4.1d)$$

$$\text{en } x = L/2, \quad \mathbf{n} \cdot [-p \mathbf{l} + \mu (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T)] = -p_a \mathbf{n}; \quad \mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_A \nabla c_A = 0, \quad (3.4.1e)$$

$$\text{en } z = 0, \quad \mathbf{v} = \mathbf{0}; \quad \mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_A \nabla c_A = 0, \quad (3.4.1f)$$

$$\text{en } z = H, \quad \mathbf{n} \cdot \mu (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T) = \mathbf{0}; \quad \mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_A \nabla c_A = 0, \quad (3.4.1g)$$

$$\text{en } y = -W/2, W/2, \quad \mathbf{v}(-W/2) = \mathbf{v}(W/2); \quad c_A(-W/2) = c_A(W/2). \quad (3.4.1h)$$

Como puede notarse, el flujo del viento va en la dirección x , en la entrada de la celda (en $x = -L/2$), se supone conocida la velocidad del viento y la concentración del contaminante, mientras que en el extremo opuesto (en $x = L/2$) se supone que la componente normal del tensor total de esfuerzos es igual a la presión atmosférica y que el flux difusivo es nulo. En la base de la celda (en $z = 0$), se impone la condición de no deslizamiento y se especifica que no hay transporte de masa, mientras que en $z = 0$, se supone que el esfuerzo cortante y que el flux difusivo son nulos. Por último, se imponen condiciones de periodicidad en las superficies laterales de la celda. Además, en la

superficie del auto, sin incluir el escape, $\partial\Omega$ aplican las siguientes condiciones de no deslizamiento y de nulidad del flux difusivo:

$$\text{en } \partial\Omega, \quad \mathbf{v} = \mathbf{0}; \quad \mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_A \nabla c_A = 0. \quad (3.4.1i)$$

Mientras que en la superficie de salida del escape, $\partial\Omega_s$, se suponen conocidas la velocidad del fluido y la concentración del contaminante

$$\text{en } \partial\Omega_s, \quad \mathbf{v} = -v_s \mathbf{n}; \quad c_A = c_s. \quad (3.4.1j)$$

Con esta condición de frontera, se completa el planteamiento del problema. Antes de proceder a resolverlo, es conveniente replantearlo en términos de las siguientes variables y parámetros adimensionales

$$c^* = \frac{c_A}{c_s}; \quad \mathbf{v}^* = \frac{\mathbf{v}}{v_e}; \quad \mathbf{r}^* = \frac{\mathbf{r}}{\ell}; \quad p^* = \frac{p\ell}{\mu v_e}; \quad Pe = \frac{v_e \ell}{\mathcal{D}_A}; \quad Re = \frac{\rho v_e \ell}{\mu}. \quad (3.4.2)$$

En donde ℓ es la longitud del auto. De esta forma, el problema adimensional es

$$\nabla^* \cdot \mathbf{v}^* = 0, \quad (3.4.3a)$$

$$Re \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* = -\nabla^* p^* + \nabla^{*2} \mathbf{v}^*, \quad (3.4.3b)$$

$$Pe \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* c_A^* = \nabla^{*2} c_A^*, \quad (3.4.3c)$$

$$\text{en } x^* = -L^*/2, \quad \mathbf{v}^* = -\mathbf{n}, \quad c_A^* = c_e^*, \quad (3.4.3d)$$

$$\text{en } x^* = L^*/2, \quad \mathbf{n} \cdot [-p^* \mathbf{l} + (\nabla^* \mathbf{v}^* + (\nabla^* \mathbf{v}^*)^T)] = \mathbf{0}; \quad \mathbf{n} \cdot \nabla^* c_A^* = 0, \quad (3.4.3e)$$

$$\text{en } z^* = 0, \quad \mathbf{v}^* = \mathbf{0}; \quad \mathbf{n} \cdot \nabla^* c_A^* = 0, \quad (3.4.3f)$$

$$\text{en } z^* = H^*, \quad \mathbf{n} \cdot (\nabla^* \mathbf{v}^* + (\nabla^* \mathbf{v}^*)^T) = \mathbf{0}; \quad \mathbf{n} \cdot \nabla^* c_A^* = 0, \quad (3.4.3g)$$

$$\text{en } y^* = -W^*/2, W^*/2, \quad \mathbf{v}^* (-W/2) = \mathbf{v}^* (W/2); \quad c_A^* (-W/2) = c_A^* (W/2), \quad (3.4.3h)$$

$$\text{en } \partial\Omega, \quad \mathbf{v}^* = \mathbf{0}; \quad \mathbf{n} \cdot \nabla^* c_A^* = 0, \quad (3.4.3i)$$

$$\text{en } \partial\Omega_s, \quad \mathbf{v}^* = -v_s^* \mathbf{n}; \quad c_A^* = 1. \quad (3.4.3j)$$

Para resolver este problema en Comsol se siguen estos pasos:

Programa en Comsol para la solución del problema

1. En *Model Wizard* elija 3D.
2. En la física elija: *Fluid flow/Single-Phase Flow/Laminar Flow (spf)*. Haga click en *Add* y posteriormente en *Chemical Species Transport* elija *Transport of Diluted Species* y haga click en *Add*. Por último haga click en *Study*.
3. Seleccione *Stationary* en el menú de estudios y posteriormente el botón de *Done*.
4. En *Parameters 1* ingrese los siguientes parámetros: L = 2, H = 2, W = 2, Re = 1 y Pe = 0.1*Re.
5. Haga click derecho en *Geometry* y seleccione *Import*. En *Import 1* seleccione el archivo *car.mphbin* (disponible con el autor) y presione el botón *Import*.
6. Haga click derecho en *Geometry* y seleccione *Transforms/Scale*. Seleccione *imp1* y en *Factor* escriba 1/4.
7. Para dibujar el escape del auto haga click derecho en *Geometry* y seleccione *Cylinder*. Escriba en *Radius* 0.01, en *Height* 0.2; en *position* escriba en *x* 0.45 y en *z* 0.075. Por último en *Axis* elija *x-axis*.
8. Haga click derecho en *Geometry* y seleccione *Block*. Escriba L, W y H para *Width*, *Depth* y *Height*, respectivamente. En la posición especifique que la esquina se encuentra en *x* = -L/2 y *y* = -W/2.
9. Haga click derecho en *Geometry* y seleccione *Booleans and Partitions/Difference*. En

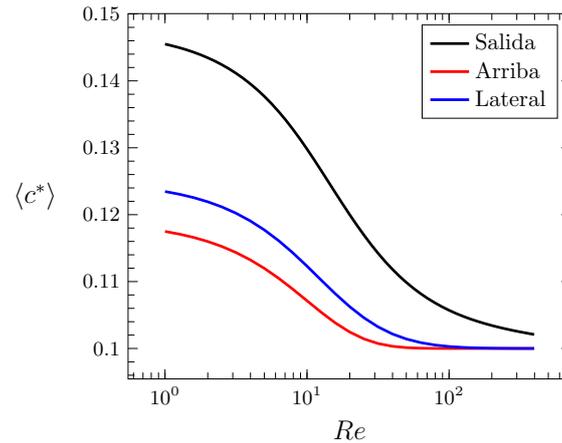


Figura 3.7: Dependencia de la concentración promedio del contaminante con el número de Reynolds. El promedio fue tomado en las superficies de salida, arriba y lateral.

Objects to add seleccione blk1 y en *Objects to Subtract* seleccione sca1 y cyl1 y deshabilite la casilla que dice *Keep interior Boundaries*.

10. En *Laminar flow/Fluid properties* escriba en la densidad Re y para la viscosidad 1.
11. En *Laminar flow/Inlet*, seleccione la frontera 1 y escriba en *Normal inflow velocity* 1.
12. En *Laminar flow/Outlet* y seleccione la frontera 158.
13. En *Laminar flow/Periodic Flow Condition* y seleccione las fronteras 2 y 5.
14. En *Laminar flow/Open Boundary*, seleccione la frontera 4 y seleccione *No viscous stress* en *Boundary condition*.
15. En *Laminar flow/Inlet*, seleccione la frontera 157 y escriba en *Normal inflow velocity* 0.5.
16. En *Transport of Diluted Species/Transport Properties 1* escriba para las componentes del vector de velocidad Pe^*u , Pe^*v y Pe^*w . Por último fije que el coeficiente de difusión sea 1.
17. En *Transport of Diluted Species/Inflow*, seleccione la frontera 1 y escriba en *Concentration* 0.1.
18. En *Transport of Diluted Species/Outflow*, seleccione la frontera 158.
19. En *Transport of Diluted Species/Periodic Condition*, seleccione las fronteras 2 y 5.
20. En *Transport of Diluted Species/Concentration*, seleccione la frontera 157; habilite la casilla de *Species c* y escriba 1.
21. En *Mesh* seleccione *Coarse*.
22. En *Study* seleccione *Compute*.
23. Lleve a cabo un barrido paramétrico en el número de Reynolds de forma logarítmica que vaya de 1 a 500 con 10 elementos por década.

En la figura 3.7 se muestra la predicción de la concentración promedio en las superficies de salida, arriba y lateral como función del número de Reynolds. Como puede notarse, las concentraciones en todas las superficies tienden a disminuir con el aumento del número de Reynolds. Para tener una idea más clara de lo anterior, en la figura 3.8 se muestran las predicciones para las líneas de corriente del flux total de masa en la superficie del escape del auto. Como puede notarse, la pluma de contaminante está cada vez menos dispersa conforme se incrementa el número de Reynolds.

Ejercicio 3.10 El análisis presentado en esta sección supone que el auto está estacionado, por lo que en este ejercicio se busca examinar el efecto que tiene considerar el desplazamiento del auto. Para ello, considere diferentes velocidades adimensionales del auto y mantenga el resto de

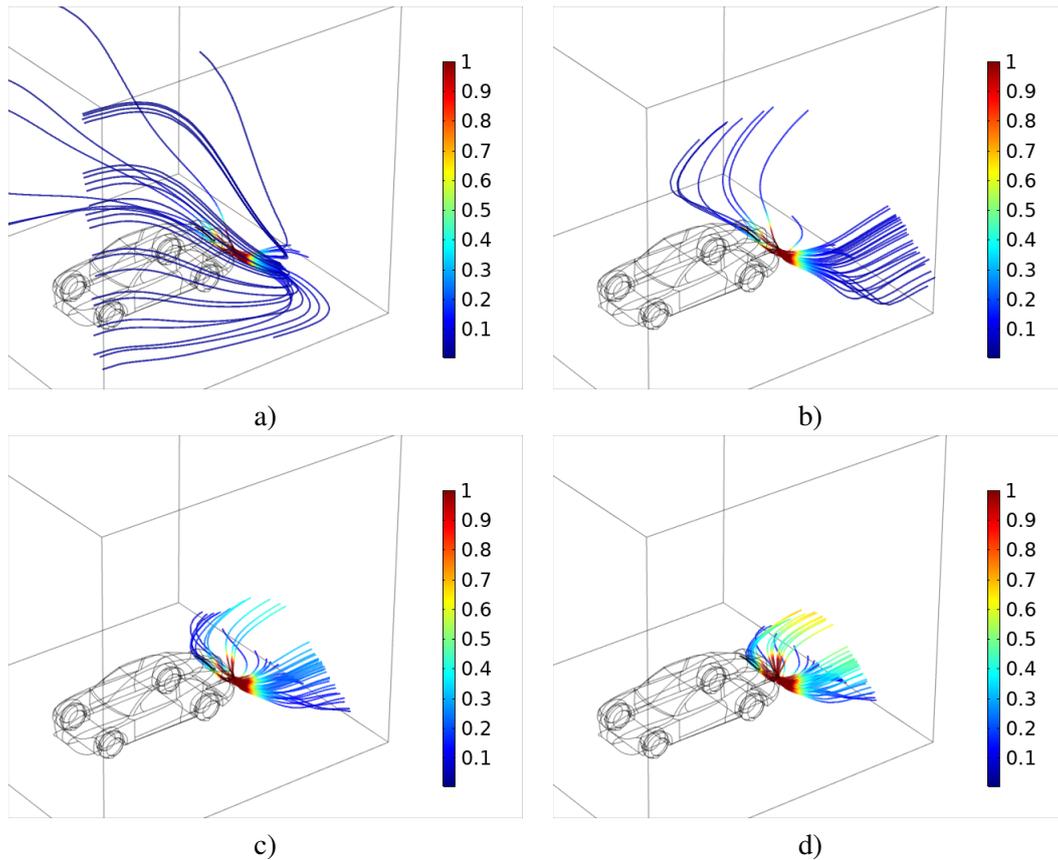


Figura 3.8: Líneas de corriente del flux total de masa resultante del escape del auto para a) $Re = 1$, b) $Re = 10$, c) $Re = 50$ y d) $Re = 100$

las condiciones de frontera en las superficies de la celda. ■

Ejercicio 3.11 Extienda ahora el análisis considerando mas de un automóvil (de preferencia de diferentes geometrías) en la celda. Analice la influencia que tiene la separación entre autos sobre el transporte de masa y cantidad de movimiento. ■

3.5 Flujo y transporte de masa desde la chimenea de una industria

En este problema se busca acoplar de nuevo la transferencia de masa y el transporte de cantidad de movimiento en un sistema que tiene fronteras internas. Para ello, considere el flujo de un contaminante (especie A) desde la chimenea de una industria hacia el aire para diferentes condiciones de flujo. Se busca conocer la dependencia de la concentración del contaminante en la atmósfera como función del número de Reynolds. Se puede suponer que el flujo es newtoniano, incompresible y en estado estacionario y que el contaminante se encuentra formando una solución diluida en cada punto del sistema y que no hay cambios relevantes de temperatura. Con base en estas suposiciones, las ecuaciones que gobiernan el transporte de cantidad de movimiento y masa (total y de la especie A) en la fase gaseosa (fase- β) dentro y fuera de la chimenea son

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (3.5.1a)$$

$$\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v}, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (3.5.1b)$$

$$\mathbf{v} \cdot \nabla c_A = \mathcal{D}_A \nabla^2 c_A, \quad \text{en la fase-}\beta. \quad (3.5.1c)$$

Note que no se consideró la contribución por la gravedad. En las interfases entre las fases fluida y sólida ($\mathcal{A}_{\beta\sigma}$) se impone la condición de no deslizamiento y se supone que no hay transferencia de masa. Esto se expresa como sigue

$$\text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad \mathbf{v} = \mathbf{0}, \quad -\mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_A \nabla c_A = 0. \quad (3.5.1d)$$

Además, el sistema tiene dos superficies de entrada: la superficie donde comienza la chimenea (\mathcal{A}_{ch}) y la superficie que va en la dirección del viento (\mathcal{A}_e). En ambas superficies se supone conocida la velocidad del fluido y la concentración de la especie de acuerdo a las siguientes expresiones

$$\text{en } \mathcal{A}_{ch}, \quad \mathbf{v} = v_{ch} \mathbf{e}_z; \quad c_A = c_{ch}, \quad (3.5.1e)$$

$$\text{en } \mathcal{A}_e, \quad \mathbf{v} = v_e \mathbf{e}_x; \quad c_A = c_e. \quad (3.5.1f)$$

En el resto de las fronteras ($\partial\Omega$) se supone que el esfuerzo cortante es despreciable respecto a la presión atmosférica (p_a) y que además la concentración de la especie A es constante, por lo que

$$\text{en } \partial\Omega, \quad \mathbf{n} \cdot (-p\mathbf{l} + \boldsymbol{\tau}) = -\mathbf{n}p_a; \quad -\mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_A \nabla c_A = 0. \quad (3.5.1g)$$

Antes de resolver el problema, es conveniente reformularlo en términos de las siguientes definiciones adimensionales:

$$\mathbf{r}^* = \frac{\mathbf{r}}{L}; \quad c^* = \frac{c_A}{c_{ch}}; \quad \mathbf{v}^* = \frac{\mathbf{v}}{v_{ref}}; \quad p^* = \frac{p - p_a}{p_{ref}}; \quad Re = \frac{\rho v_{ref} L}{\mu}; \quad Pe = \frac{v_{ref} L}{\mathcal{D}_A}. \quad (3.5.2)$$

En donde L es el alto de la chimenea y $v_{ref} = v_{ch}$ y $p_{ref} = v_{ch}\mu/L$. De esta forma, el modelo adimensional es

$$\nabla^* \cdot \mathbf{v}^* = 0, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (3.5.3a)$$

$$Re \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* = -\nabla^* p^* + \nabla^{*2} \mathbf{v}^*, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (3.5.3b)$$

$$Pe \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* c^* = \nabla^{*2} c^*, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (3.5.3c)$$

$$\text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad \mathbf{v}^* = \mathbf{0}, \quad -\mathbf{n} \cdot \nabla^* c^* = 0, \quad (3.5.3d)$$

$$\text{en } \mathcal{A}_{ch}, \quad \mathbf{v}^* = \mathbf{e}_z; \quad c^* = 1, \quad (3.5.3e)$$

$$\text{en } \mathcal{A}_e, \quad \mathbf{v}^* = v_e^* \mathbf{e}_x; \quad c^* = c_e^*, \quad (3.5.3f)$$

$$\text{en } \partial\Omega, \quad \mathbf{n} \cdot (-p^* \mathbf{l} + \boldsymbol{\tau}^*) = \mathbf{0}; \quad -\mathbf{n} \cdot \nabla^* c^* = 0. \quad (3.5.3g)$$

Para resolver el problema usando Comsol Multiphysics pueden seguirse estos pasos:

Solución del problema de flujo y transporte de masa en una chimenea

1. Haga click en *Model Wizard* y seleccione 3D, agregue un módulo de flujo laminar y otro de transporte de especies diluidas en estado estacionario.
2. Defina como parámetros al número de Reynolds (asigne un valor de 1 por ahora) y defina al número de Péclet como $10 \cdot Re$.
3. Haga click derecho en *Geometry 1* y elija a un bloque cuyo ancho y profundidad sean 2 y su altura sea 1. Además, especifique su centro en (0,0,0.5).
4. Haga click derecho en *Geometry 1* y elija a un cono cuyo radio inferior sea 0.1, su altura sea 1 y su radio superior sea 0.075. Fije la posición de su base en (0,0,1).
5. Dibuje un nuevo bloque, cuyas dimensiones sean ancho = 10, profundidad = 8, altura = 3 y cuyo centro se localiza en (0, 0, 1.5).
6. Lleve a cabo la operación booleana de diferencia en donde sustraiga al cono y bloque 2 el bloque 1.
7. Haga click derecho en *Materials/Blank Material* y especifique que la densidad es Re y la viscosidad es 1.
8. Haga click derecho en *Laminar Flow/Inlet*, seleccione a la frontera 12 y especifique que

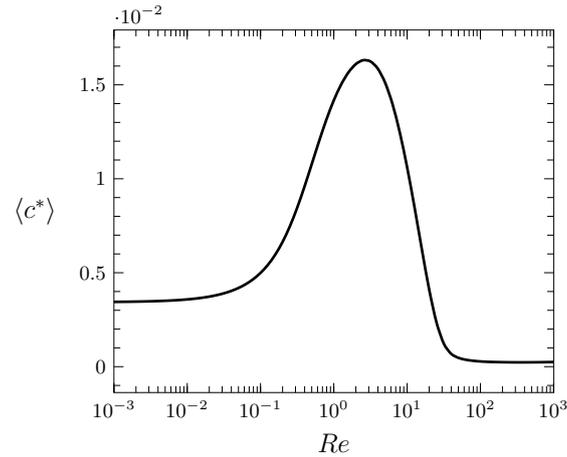


Figura 3.9: Dependencia de la concentración promedio adimensional del contaminante en el aire con el número de Reynolds.

- la velocidad de entrada es 1. Repita esta operación para la frontera 1 y fije el valor de la velocidad en 0.1.
9. Haga click derecho en *Laminar Flow/Outlet* y seleccione a las fronteras 2, 4, 5 y 17.
 10. Haga click derecho en *Laminar Flow/Interior wall* y seleccione a las fronteras 10, 11, 14 y 15.
 11. En *Transport of diluted species/Transport properties 1* especifique que las componentes de la velocidad sean Pe^*u , Pe^*v y Pe^*w y además fije el valor del coeficiente de difusión en 1.
 12. Haga click derecho en *Transport of diluted species/Inflow*, seleccione a la frontera 12 y especifique el valor de la concentración en 1.
 13. Repita la operación anterior, seleccione a la frontera 1 y fije el valor de la concentración en 0.
 14. Haga click derecho en *Transport of diluted species/Outflow* y elija a las fronteras 2, 4, 5 y 17.
 15. Haga click derecho en *Transport of diluted species/Interior surfaces/Thin impermeable barrier*, seleccione a las fronteras 10, 11, 14 y 15.
 16. En *Mesh* seleccione una malla normal.
 17. Haga click derecho en *Study 1/Parametric sweep* y defina un barrido en el número de Reynolds en forma logarítmica que vaya desde $1e-3$ hasta $1e3$ con 10 pasos por década.
 18. En *Study 1/Step 1 stationary* deshabilite el transporte de especies diluidas.
 19. Haga click derecho en *Study 1/Study steps/Stationary/Stationary* y deshabilite el flujo laminar y asegúrese que se tome la última solución del estudio 1. Por último presione el botón de *compute*.

En la figura 3.9 se muestra la predicción de la concentración promedio en el aire con el número de Reynolds. Como puede notarse, para $Re < 0.1$, la concentración promedio no se altera por un incremento en el número de Reynolds. Mientras que el valor máximo de la concentración se alcanza para $Re = O(1)$, ya que en este caso, la convección y la difusión de masa se ven favorecidas. En contraste, cuando $Re > 10$, la convección en el aire externo a la chimenea ayuda a disipar la concentración del contaminante hasta llevarla a un valor mínimo.

Ejercicio 3.12 Resuelva de nuevo el problema para condiciones en las que la velocidad del aire sea la misma en ambas superficies de entrada. Discuta sus resultados. ■

Ejercicio 3.13 Reconsidere el problema pero ahora suponga que la superficie interna de la chimenea está recubierta de una sustancia que ayuda a consumir a la especie A antes de que sea emitida a la atmósfera. Haga los cálculos correspondientes y discuta sus resultados. ■

3.6 Transporte en medios porosos

3.6.1 Análisis en el seno del medio poroso

El flujo en medios porosos es uno de los grandes problemas de ingeniería actualmente. Considere por ahora el flujo newtoniano, incompresible y estacionario de una sola fase fluida (fase- β) a través de una matriz sólida (fase- σ) que es rígida (es decir no se deforma) y homogénea (es decir, la porosidad no cambia con la posición). Bajo estas condiciones, las ecuaciones de conservación de masa total y de cantidad de movimiento son

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (3.6.1a)$$

$$\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \mu \nabla^2 \mathbf{v}, \quad \text{en la fase-}\beta. \quad (3.6.1b)$$

En donde la velocidad satisface la condición de no deslizamiento en la interfase sólido-fluido, $\mathcal{A}_{\beta\sigma}$,

$$\text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad \mathbf{v} = \mathbf{0}. \quad (3.6.1c)$$

El planteamiento del problema se completa con condiciones de frontera en las superficies macroscópicas del sistema. Sin embargo, como se mostrará más adelante, dichas condiciones de frontera no son necesarias para el análisis que se busca en este texto.

Con el fin realizar una descripción macroscópica de esta situación física, se define una región de promediado, \mathcal{V} , la cual contiene tanto a porciones de la fase fluida como de los sólidos. Esto es, $\mathcal{V} = \mathcal{V}_\beta + \mathcal{V}_\sigma$. El objetivo es utilizar esta región de promediado como soporte para generar un nuevo medio continuo en donde ya no se distinguen a las dos fases que componen al medio poroso. Con este fin, la longitud característica, r_0 , de la región de promediado debe ser mucho mayor que la máxima longitud característica en la escala de poro, ℓ , y, al mismo tiempo, mucho menor que la mínima longitud característica, L , asociada con el medio poroso en su conjunto. Esto es,

$$\ell \ll r_0 \ll L. \quad (3.6.2)$$

En términos de esta región de promediado, se pueden definir los operadores de promediado superficial

$$\langle \psi \rangle = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}_\beta} \psi dV, \quad (3.6.3a)$$

e intrínseco

$$\langle \psi \rangle^\beta = \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{V}_\beta} \psi dV, \quad (3.6.3b)$$

para una propiedad ψ que está definida por tramos en la fase- β como la velocidad o la presión en la fase fluida. Los operadores de promediado definidos arriba están acomplados por medio de la relación de Dupuit-Forchheimer

$$\langle \psi \rangle = \varepsilon \langle \psi \rangle^\beta. \quad (3.6.3c)$$

En donde $\varepsilon = V_\beta/V$ representa la porosidad del medio. De acuerdo a las suposiciones adoptadas arriba, este parámetro permanece constante para el análisis que se desarrolla aquí.

Al igual que en el análisis estadístico, las propiedades definidas en la escala de poro pueden descomponerse en términos de su promedio intrínseco y sus correspondientes desviaciones espaciales como sigue (Gray, 1975)

$$\psi = \langle \psi \rangle^\beta + \tilde{\psi}. \quad (3.6.4)$$

De hecho, en varios métodos de escalamiento como el promedio volumétrico (Whitaker, 1999) o el método de homogenización (Auriault y col., 2009), se suele adoptar la suposición de que las desviaciones son campos periódicos en el medio poroso. Más aún, para intercambiar diferenciación e integración espaciales se utiliza el teorema del promediado espacial (Howes y Whitaker, 1985):

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{a} \rangle = \nabla \cdot \langle \mathbf{a} \rangle + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n} \cdot \mathbf{a} \, dA. \quad (3.6.5)$$

Aplicando el operador de promediado intrínseco a la ecuación de conservación de masa se obtiene

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{v} \rangle = 0. \quad (3.6.6)$$

O bien, usando el teorema del promediado espacial, considerando la condición de frontera interfacial, resulta que

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v} \rangle = 0. \quad (3.6.7)$$

La cual es la forma final de esta ecuación macroscópica.

Dirigiendo la atención a la ecuación de conservación de cantidad de movimiento, si se representa la geometría del medio poroso como un arreglo periódico, entonces el problema en la escala de poro puede formularse en una sola celda periódica como sigue

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad \text{en } \mathcal{V}_\beta, \quad (3.6.8a)$$

$$\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \mu \nabla^2 \mathbf{v}, \quad \text{en } \mathcal{V}_\beta, \quad (3.6.8b)$$

$$\text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad \mathbf{v} = \mathbf{0}. \quad (3.6.8c)$$

En este dominio simplificado de solución la velocidad es periódica y obedece entonces a la siguiente condición de frontera en las entradas y salidas de la celda unitaria:

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i), \quad i = 1, 2, 3; \quad \psi = \mathbf{v}. \quad (3.6.8d)$$

En donde \mathbf{l}_i son vectores que representan el largo de la celda unitaria en cada dirección. Sin embargo, la presión no puede ser periódica en la celda unitaria ya que esto implicaría que no hubiera flujo. Para atender esta situación, se utiliza la descomposición espacial dada en la ecuación (3.6.4) para obtener el siguiente problema en la escala de poro dentro de una celda unitaria:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad \text{en } \mathcal{V}_\beta, \quad (3.6.9a)$$

$$\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla \tilde{p} + \mu \nabla^2 \mathbf{v} - \nabla \langle p \rangle^\beta + \rho \mathbf{g}, \quad \text{en } \mathcal{V}_\beta, \quad (3.6.9b)$$

$$\text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad \mathbf{v} = \mathbf{0}, \quad (3.6.9c)$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i), \quad i = 1, 2, 3; \quad \psi = \mathbf{v}, \tilde{p}. \quad (3.6.9d)$$

Más aún, aplicando el operador de promediado intrínseco a la ecuación (3.6.4), se deduce que las desviaciones de la presión están acotadas de acuerdo a la siguiente expresión:

$$\langle \tilde{p} \rangle^\beta = 0. \quad (3.6.9e)$$

A pesar de las suposiciones hechas hasta el momento, el problema es no lineal debido al término inercial en la ecuación (3.6.9b) y por lo tanto no es posible deducir la solución formal. Para atender esta situación se supone que existe una solución del problema, \mathbf{v}_c , la cual se puede utilizar en esta ecuación para obtener:

$$\frac{\rho}{\mu} \mathbf{v}_c \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{1}{\mu} \nabla \tilde{p} + \nabla^2 \mathbf{v} - \underbrace{\frac{1}{\mu} (\nabla \langle p \rangle^\beta + \rho \mathbf{g})}_{\text{fuente}}, \quad \text{en } \mathcal{V}_\beta. \quad (3.6.10)$$

De esta forma, el problema es lineal y su solución puede expresarse en términos de la fuente como sigue

$$\mathbf{v} = -\frac{\mathbf{D}}{\mu} \cdot (\nabla \langle p \rangle^\beta + \rho \mathbf{g}), \quad (3.6.11a)$$

$$\tilde{p} = -\mathbf{d} \cdot (\nabla \langle p \rangle^\beta + \rho \mathbf{g}). \quad (3.6.11b)$$

En donde las variables \mathbf{D} y \mathbf{d} satisfacen el siguiente problema de valor a la frontera

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{V}_\beta, \quad (3.6.12a)$$

$$\frac{\rho}{\mu} \mathbf{v}_c \cdot \nabla \mathbf{D} = -\nabla \mathbf{d} + \nabla^2 \mathbf{D} + \mathbf{I}, \quad \text{en } \mathcal{V}_\beta, \quad (3.6.12b)$$

$$\text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad \mathbf{D} = \mathbf{0}, \quad (3.6.12c)$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i), \quad i = 1, 2, 3; \quad \psi = \mathbf{D}, \mathbf{d}, \quad (3.6.12d)$$

$$\langle \mathbf{d} \rangle^\beta = \mathbf{0}. \quad (3.6.12e)$$

Ya que se cuenta con la solución del problema en la celda unitaria, se puede deducir el modelo macroscópico al simplemente aplicar el operador de promediado superficial a la ecuación (3.6.11a) para obtener

$$\langle \mathbf{v} \rangle = -\frac{\mathbf{H}}{\mu} \cdot (\nabla \langle p \rangle^\beta + \rho \mathbf{g}). \quad (3.6.13)$$

En donde \mathbf{H} es el *coeficiente de permeabilidad aparente* y se define en términos de la variable de cerradura \mathbf{D} como sigue

$$\mathbf{H} = \langle \mathbf{D} \rangle. \quad (3.6.14)$$

Para condiciones en las cuales el flujo es reptante en el medio poroso, el término inercial desaparece en la ecuación (3.6.12b) y el tensor $\mathbf{H} \rightarrow \mathbf{K}$, siendo \mathbf{K} el tensor intrínseco de permeabilidad del medio poroso.

El problema de las variables de cerradura (o bien, el *problema de cerradura*) dado en las ecuaciones (3.6.12), corresponde al deducido por Whitaker (1996) usando el método del promedio volumétrico. Al examinar este problema, es evidente que es necesario contar con la solución de la velocidad antes de resolverlo. Para evitar esto, se puede sustituir la ecuación (3.6.11a) en la ecuación (3.6.12b) para obtener

$$-\frac{\rho}{\mu} \left[\frac{1}{\mu} (\nabla \langle p \rangle^\beta + \rho \mathbf{g}) \right] \cdot \mathbf{D}^T \cdot \nabla \mathbf{D} = -\nabla \mathbf{d} + \nabla^2 \mathbf{D} + \mathbf{I}, \quad \text{en } \mathcal{V}_\beta. \quad (3.6.15)$$

Antes de resolver el problema de cerradura es conveniente reformularlo en términos de las siguientes variables y parámetros adimensionales

$$\mathbf{D}^* = \frac{\mathbf{D}}{\ell^2}; \quad \mathbf{d}^* = \frac{\mathbf{d}}{\ell}; \quad \mathbf{r}^* = \frac{\mathbf{r}}{\ell}; \quad \boldsymbol{\lambda} = \frac{\ell^2}{\mu v_{ref}} (\nabla \langle p \rangle^\beta + \rho \mathbf{g}); \quad Re = \frac{\rho v_{ref} \ell}{\mu}. \quad (3.6.16)$$

En donde ℓ es el largo de uno de los lados de la celda unitaria y la velocidad de referencia se define como

$$v_{ref} = \frac{\ell^2}{\mu} \left\| \nabla \langle p \rangle^\beta + \rho \mathbf{g} \right\|. \quad (3.6.17)$$

Con esta definición, es claro que $\boldsymbol{\lambda}$ representa un vector unitario en la dirección del gradiente de presión macroscópico tomando en cuenta los efectos de la gravedad. De esta forma, el problema de cerradura adimensional se escribe como

$$\nabla^* \cdot \mathbf{D}^* = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{V}_\beta, \quad (3.6.18a)$$

$$-Re\boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{D}^{*T} \cdot \nabla^* \mathbf{D}^* = -\nabla^* \mathbf{d}^* + \nabla^{*2} \mathbf{D}^* + \mathbf{I}, \quad \text{en } \mathcal{V}_\beta, \quad (3.6.18b)$$

$$\text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad \mathbf{D}^* = \mathbf{0}, \quad (3.6.18c)$$

$$\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}^*) = \boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}^* + \mathbf{I}_i^*), \quad i = 1, 2, 3; \quad \boldsymbol{\psi} = \mathbf{D}^*, \mathbf{d}^*, \quad (3.6.18d)$$

$$\langle \mathbf{d}^* \rangle^\beta = \mathbf{0}. \quad (3.6.18e)$$

Esta formulación fue propuesta recientemente por [Valdés-Parada y col. \(2016\)](#) en donde se exploró la influencia de la orientación del gradiente de presión sobre las predicciones del tensor de dispersión para la transferencia de masa. En esta sección el interés está en predecir las componentes del tensor de permeabilidad aparente, el cual en forma adimensional se escribe como

$$\mathbf{H}^* = \frac{\mathbf{H}}{\ell^2} = \langle \mathbf{D}^* \rangle. \quad (3.6.19)$$

En la ecuación (3.6.18b), el producto $\boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{D}^{*T} \cdot \nabla^*$ se puede desarrollar como

$$\boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{D}^{*T} \cdot \nabla^* = \lambda_i \mathbf{e}_i \cdot D_{jk} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_j \cdot \frac{\partial}{\partial x_l} \mathbf{e}_l = \lambda_i D_{ji} \frac{\partial}{\partial x_j}. \quad (3.6.20)$$

Note que no se usó el superíndice * para denotar a las componentes de los vectores y tensores con el fin de facilitar la notación. En un sistema coordenado cartesiano en 2D, el resultado anterior se expresa como

$$\lambda_i D_{ji} \frac{\partial}{\partial x_j} = \lambda_x D_{jx} \frac{\partial}{\partial x_j} + \lambda_y D_{jy} \frac{\partial}{\partial x_j} = \lambda_x \left(D_{xx} \frac{\partial}{\partial x} + D_{yx} \frac{\partial}{\partial y} \right) + \lambda_y \left(D_{xy} \frac{\partial}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial}{\partial y} \right). \quad (3.6.21)$$

Mientras que para un sistema en 3D se obtiene que

$$\begin{aligned} \lambda_i D_{ji} \frac{\partial}{\partial x_j} &= \lambda_x D_{jx} \frac{\partial}{\partial x_j} + \lambda_y D_{jy} \frac{\partial}{\partial x_j} + \lambda_z D_{jz} \frac{\partial}{\partial x_j} = \lambda_x \left(D_{xx} \frac{\partial}{\partial x} + D_{yx} \frac{\partial}{\partial y} + D_{zx} \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ &+ \lambda_y \left(D_{xy} \frac{\partial}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial}{\partial y} + D_{zy} \frac{\partial}{\partial z} \right) + \lambda_z \left(D_{xz} \frac{\partial}{\partial x} + D_{yz} \frac{\partial}{\partial y} + D_{zz} \frac{\partial}{\partial z} \right). \end{aligned} \quad (3.6.22)$$

En adelante se presentan los desarrollos para sistemas en 2D aunque la extensión a 3D es directa. De esta forma, la ecuación de conservación de masa lleva a las siguientes dos expresiones

Componente-x

$$\frac{\partial D_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial D_{yx}}{\partial y} = 0, \quad (3.6.23a)$$

Componente-y

$$\frac{\partial D_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial D_{yy}}{\partial y} = 0. \quad (3.6.23b)$$

Con estos resultados a la mano, es posible expresar las tres componentes de la ecuación de cantidad de movimiento como:

Componente xx

$$0 = -\frac{\partial d_x}{\partial x} + \nabla^*2 D_{xx} + 1 + Re\lambda_x \left(D_{xx} \frac{\partial D_{xx}}{\partial x} + D_{yx} \frac{\partial D_{xx}}{\partial y} \right) + Re\lambda_y \left(D_{xy} \frac{\partial D_{xx}}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial D_{xx}}{\partial y} \right). \quad (3.6.24a)$$

Componente yx

$$0 = -\frac{\partial d_x}{\partial y} + \nabla^*2 D_{yx} + Re\lambda_x \left(D_{xx} \frac{\partial D_{yx}}{\partial x} + D_{yx} \frac{\partial D_{yx}}{\partial y} \right) + Re\lambda_y \left(D_{xy} \frac{\partial D_{yx}}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial D_{yx}}{\partial y} \right). \quad (3.6.24b)$$

Componente xy

$$0 = -\frac{\partial d_y}{\partial x} + \nabla^*2 D_{xy} + Re\lambda_x \left(D_{xx} \frac{\partial D_{xy}}{\partial x} + D_{yx} \frac{\partial D_{xy}}{\partial y} \right) + Re\lambda_y \left(D_{xy} \frac{\partial D_{xy}}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial D_{xy}}{\partial y} \right). \quad (3.6.24c)$$

Componente yy

$$0 = -\frac{\partial d_y}{\partial y} + \nabla^*2 D_{yy} + 1 + Re\lambda_x \left(D_{xx} \frac{\partial D_{yy}}{\partial x} + D_{yx} \frac{\partial D_{yy}}{\partial y} \right) + Re\lambda_y \left(D_{xy} \frac{\partial D_{yy}}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial D_{yy}}{\partial y} \right). \quad (3.6.24d)$$

Como puede notarse, las componentes *xx* y *yx* están acopladas mediante la ecuación (3.6.23a); mientras que las componentes *xy* y *yy* se acoplan mediante la ecuación (3.6.23b). De esta forma, los parámetros de entrada al programa son: la porosidad, la geometría, las componentes del vector λ y *Re*.

Para resolver este problema se considerará que la fase sólida es un cuadrado. De esta forma, para resolver el problema en Comsol siga estos pasos:

Programa para predecir las componentes del tensor de permeabilidad aparente

1. En *Model Wizard* seleccione 2D.
2. Seleccione *Fluid Flow/Single-Phase Flow/Creeping Flow* y presione *Add* dos veces. En adelante, se hacen las siguientes equivalencias:

$$D_{xx} \rightarrow u; \quad D_{yx} \rightarrow v; \quad dx \rightarrow p \quad (3.6.25a)$$

$$D_{yx} \rightarrow u2; \quad D_{yy} \rightarrow v2; \quad dy \rightarrow p2 \quad (3.6.25b)$$

3. Presione *Study* y seleccione *Stationary* en el menú siguiente.
4. En *Parameters* escriba alfa (el ángulo de flujo) = 0 [deg]. Posteriormente defina $l_x = \cos(\text{alfa})$, $l_y = \sin(\text{alfa})$, $Re = 1000$, $eg = 0.4$, $a = \text{sqrt}(1-eg)$.
5. Haga click derecho en *Geometry* y seleccione *Square*. En *Side length* escriba *a* y en la posición elija *Base: Center*.
6. Haga click derecho en *Square 1* y elija *Duplicate*. En *Side length* escriba 1.
7. Haga click derecho en *Geometry/Booleans and Partitions/Difference*. En *Objects to add* seleccione a *sq2* y en *Objects to subtract* seleccione a *sq1*.
8. En *Definitions/Component Couplings/Average* fije en *Operator name* a *v* y seleccione al dominio 1.
9. En *Creeping Flow/Fluid Properties 1* asigne a la densidad y a la viscosidad los valores de 1.
10. En *Creeping Flow/Volume Force* seleccione al dominio 1. En la componente *x* escriba

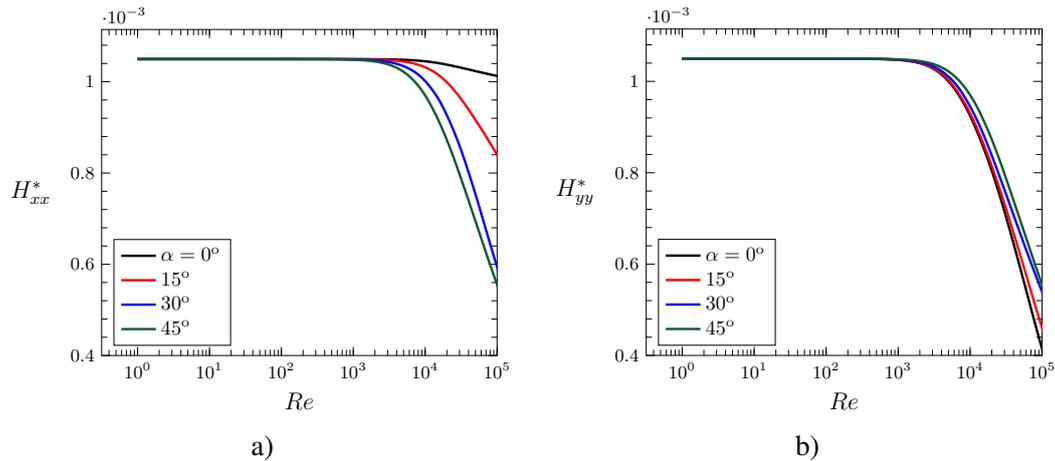


Figura 3.10: Predicciones de las componentes xx y yy del tensor \mathbf{H} como funciones del número de Reynolds para diversos valores del ángulo de flujo para $\varepsilon = 0.4$.

$$1+ \text{Re} * 1x * (u * ux + v * uy) + \text{Re} * 1y * (u2 * ux + v2 * uy)$$

En la componente y escriba

$$\text{Re} * 1x * (u * vx + v * vy) + \text{Re} * 1y * (u2 * vx + v2 * vy)$$

11. En *Creeping Flow/Periodic Flow Condition* y seleccione las fronteras 1 y 8.
12. Haga click derecho en *Periodic Flow Condition 1* y seleccione *Duplicate*, borre las fronteras 1 y 8 y seleccione a las fronteras 2 y 3.
13. En *Creeping Flow/Global/Global constraint*. En *Apply reaction terms on* seleccione *User defined*. En *Constraint expression* escriba $av(p)$ y en *Constraint force expression* escriba $test(av(p))$.
14. En *Creeping Flow 2/Fluid Properties 2* asigne a la densidad y a la viscosidad los valores de 1.
15. En *Creeping Flow 2/Volume Force* seleccione al dominio 1. En la componente x escriba

$$\text{Re} * 1x * (u * u2x + v * u2y) + \text{Re} * 1y * (u2 * u2x + v2 * u2y)$$

En la componente y escriba

$$1+ \text{Re} * 1x * (u * v2x + v * v2y) + \text{Re} * 1y * (u2 * v2x + v2 * v2y)$$

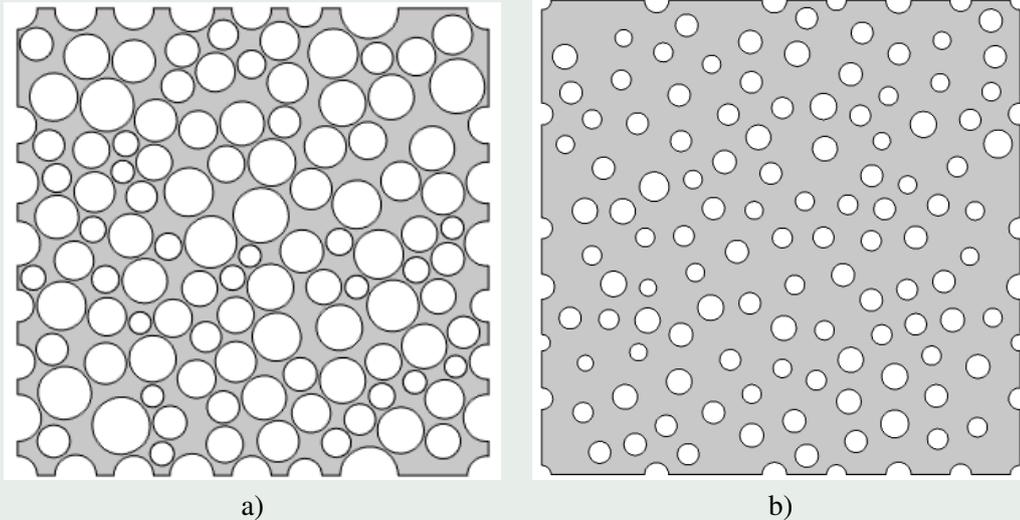
16. En *Creeping Flow 2/Periodic Flow Condition* y seleccione las fronteras 1 y 8.
17. Haga click derecho en *Periodic Flow Condition 1* y seleccione *Duplicate*, borre las fronteras 1 y 8 y seleccione a las fronteras 2 y 3.
18. En *Creeping Flow/Global/Global constraint*. En *Apply reaction terms on* seleccione *User defined*. En *Constraint expression* escriba $av(p2)$ y en *Constraint force expression* escriba $test(av(p2))$.
19. Escoja en *Mesh* el valor *Extremely Fine*.
20. En *Study* presione *Compute*.

Usando este programa se hizo un barrido paramétrico en el número de Reynolds para 4 valores del ángulo de flujo α y una porosidad de 0.4. Los resultados se presentan en la figura 3.10 para las componentes xx y yy del tensor de permeabilidad aparente. Las componentes fuera de la diagonal se encontraron que presentan valores despreciables respecto a los valores en la diagonal. Como puede

notarse, las predicciones de las componentes diagonales del tensor disminuyen conforme aumenta el número de Reynolds. Además, al incrementar el ángulo de flujo disminuyen las predicciones de H_{xx}^* y lo opuesto sucede para la componente H_{yy}^* .

Ejercicio 3.14 — Influencia de la porosidad. Resuelva de nuevo el problema para una porosidad de 0.8 y compare sus predicciones con las obtenidas para una porosidad de 0.4. Se recomienda mejorar la malla respecto a la *extremely fine*.

Ejercicio 3.15 — Geometría aleatoria. Resuelva el problema para las dos geometrías aleatorias mostradas en la figura siguiente



En la geometría del a) la porosidad es 0.4 y en la del b) la porosidad es 0.8; ambas geometrías están disponibles con el autor. Compare sus predicciones con las resultantes de la geometría sencilla discutida arriba.

3.7 Transferencia de masa y reacción heterogénea en medios porosos

3.7.1 desarrollo del modelo

Considere la transferencia difusiva de masa de una especie química A , que se encuentra diluida en la fase fluida (fase- β) que satura los poros de un medio poroso rígido y homogéneo. En partes de la superficie de la fase sólida se lleva a cabo una reacción heterogénea y se denotan como superficies activas ($\mathcal{A}_{\beta\sigma}$), mientras que a aquellas porciones donde no ocurre reacción se les denota como superficies pasivas ($\mathcal{A}_{\beta\kappa}$). Bajo estas circunstancias, la ecuación diferencial que describe el transporte de la especie A al nivel de escala de poro es

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{D}_A \nabla c_A), \quad \text{en la fase-}\beta. \quad (3.7.1a)$$

La cual está sujeta a las siguientes condiciones de frontera interfaciales

$$-\mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_A \nabla c_A = kc_A, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (3.7.1b)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_A \nabla c_A = 0, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\kappa}. \quad (3.7.1c)$$

Aplicando el operador de promedio superficial a la ecuación (3.7.1a), tomando en cuenta que el medio poroso es rígido y homogéneo y aplicando el teorema del promediado espacial, da como

resultado

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{D}_A \langle \nabla c_A \rangle) + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_A \nabla c_A dA + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\kappa}} \mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_A \nabla c_A dA. \quad (3.7.2)$$

Note que se despreciaron los cambios espaciales del coeficiente de difusión molecular, \mathcal{D}_A , en la región de promediado. Sustituyendo las condiciones de frontera interfaciales y despreciando los cambios espaciales de la constante de reacción k en $\mathcal{A}_{\beta\sigma}$ da lugar a

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{D}_A \langle \nabla c_A \rangle) - \frac{k}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} c_A dA. \quad (3.7.3)$$

Aplicando de nuevo el teorema del promediado espacial al término difusivo, resulta la siguiente expresión:

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\mathcal{D}_A \left(\nabla \langle c_A \rangle + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n} c_A dA + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\kappa}} \mathbf{n} c_A dA \right) \right] - \frac{k}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} c_A dA. \quad (3.7.4)$$

Más aún, utilizando la relación $\langle c_A \rangle = \varepsilon \langle c_A \rangle^\beta$, donde $\varepsilon = V_\beta/V$ se supone constante tanto en la posición como en el tiempo, la ecuación anterior puede escribirse como

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle^\beta}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\mathcal{D}_A \left(\nabla \langle c_A \rangle^\beta + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n} c_A dA + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\kappa}} \mathbf{n} c_A dA \right) \right] - \frac{k}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} c_A dA. \quad (3.7.5)$$

Para eliminar a las concentraciones en los términos integrales, se sustituye la descomposición espacial

$$c_A = \langle c_A \rangle^\beta + \tilde{c}_A, \quad (3.7.6)$$

y se toma en cuenta la suposición de que $\langle c_A \rangle^\beta$ puede considerarse como una constante en las regiones de integración para obtener

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle c_A \rangle^\beta}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\mathcal{D}_A \left(\nabla \langle c_A \rangle^\beta + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n} dA \langle c_A \rangle^\beta + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\kappa}} \mathbf{n} \tilde{c}_A dA \right) \right] \\ - k a_v \varepsilon^{-1} \langle c_A \rangle^\beta - \frac{k}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \tilde{c}_A dA. \end{aligned} \quad (3.7.7)$$

En donde $a_v = A_{\beta\sigma}/V$ es el área interfacial de la superficie activa por unidad de volumen. Además, $\mathcal{A}_\beta = \mathcal{A}_{\beta\sigma} + \mathcal{A}_{\beta\kappa}$. Más aún, a partir del teorema del promediado espacial, se deduce que

$$\frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n} dA = -\nabla \ln \varepsilon = \mathbf{0}. \quad (3.7.8)$$

Por lo tanto, la ecuación (3.7.7) se reduce a

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle^\beta}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\mathcal{D}_A \left(\nabla \langle c_A \rangle^\beta + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n} \tilde{c}_A dA \right) \right] - k a_v \varepsilon^{-1} \left(\langle c_A \rangle^\beta + \frac{1}{A_{\beta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \tilde{c}_A dA \right). \quad (3.7.9)$$

Para cerrar esta ecuación, es necesario determinar a las desviaciones espaciales de la concentración. Para ello, es necesario deducir, simplificar y formalmente resolver las ecuaciones gobernantes de las desviaciones espaciales de la concentración. Para deducir la ecuación diferencial, se resta la ecuación anterior a la ecuación (3.7.1a) para obtener

$$\frac{\partial \tilde{c}_A}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\mathcal{D}_A \left(\nabla \tilde{c}_A - \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n} \tilde{c}_A dA \right) \right] + ka_v \varepsilon^{-1} \left(\langle c_A \rangle^\beta + \frac{1}{A_{\beta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \tilde{c}_A dA \right). \quad (3.7.10)$$

Con la intención de simplificar a la ecuación anterior, se proponen los siguientes estimados de orden de magnitud

$$\frac{\partial \tilde{c}_A}{\partial t} = \mathbf{O} \left(\frac{\tilde{c}_A}{t^*} \right), \quad (3.7.11a)$$

$$\mathcal{D}_A \nabla^2 \tilde{c}_A = \mathbf{O} \left(\frac{\mathcal{D}_A \tilde{c}_A}{\ell^2} \right), \quad (3.7.11b)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{\mathcal{D}_A}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n} \tilde{c}_A dA \right) = \mathbf{O} \left(\frac{\mathcal{D}_A \tilde{c}_A}{\ell L} \right). \quad (3.7.11c)$$

Entonces, para condiciones en las cuales se satisfagan las siguientes restricciones de escala temporal y espacial:

$$\frac{\ell^2}{\mathcal{D}_A} \ll t^*; \quad \ell \ll L, \quad (3.7.12)$$

la ecuación (3.7.10) se reduce a

$$0 = \mathcal{D}_A \nabla^2 \tilde{c}_A + ka_v \varepsilon^{-1} \left(\langle c_A \rangle^\beta + \frac{1}{A_{\beta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \tilde{c}_A dA \right). \quad (3.7.13a)$$

La cual está sujeta a las siguientes condiciones de frontera interfaciales

$$-\mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_A \nabla \tilde{c}_A = \mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_A \nabla \langle c_A \rangle^\beta + k \tilde{c}_A + k \langle c_A \rangle^\beta, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (3.7.13b)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_A \nabla \tilde{c}_A = \mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_A \nabla \langle c_A \rangle^\beta, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\kappa}. \quad (3.7.13c)$$

Estas condiciones resultan de sustituir la descomposición espacial de la concentración en las ecuaciones (3.7.1b) y (3.7.1c). Más aún, ya que este problema se resolverá en una celda unitaria periódica y representativa de la geometría en la escala de poro, es razonable imponer las siguientes condiciones de frontera

$$\tilde{c}_A(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \tilde{c}_A(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3. \quad (3.7.13d)$$

Por último, los campos de las desviaciones están acotados de acuerdo a la siguiente restricción promedio

$$\langle \tilde{c}_A \rangle^\beta = 0. \quad (3.7.13e)$$

Dada la linealidad del problema, puede proponerse su solución formal en términos de las fuentes como sigue

$$\tilde{c}_A = \mathbf{b} \cdot \nabla \langle c_A \rangle^\beta + s \langle c_A \rangle. \quad (3.7.14)$$

En donde \mathbf{b} y s son variables de cerradura, las cuales resuelven los siguientes problemas de valor a la frontera que resultan de sustituir a la ecuación anterior en las ecuaciones (3.7.13)

Problema-I (fuente $\nabla\langle c_A \rangle^\beta$)

$$\mathbf{0} = \mathcal{D}_A \nabla^2 \mathbf{b} + \frac{k}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{b} dA, \quad (3.7.15a)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_A \nabla \mathbf{b} = \mathbf{n} \mathcal{D}_A + k \mathbf{b}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (3.7.15b)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{b} = \mathbf{n}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\kappa}, \quad (3.7.15c)$$

$$\mathbf{b}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{b}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3, \quad (3.7.15d)$$

$$\langle \mathbf{b} \rangle^\beta = \mathbf{0}. \quad (3.7.15e)$$

Problema-II (fuente $\langle c_A \rangle^\beta$)

$$0 = \mathcal{D}_A \nabla^2 s + k a_v \varepsilon^{-1} \left(1 + \frac{1}{A_{\beta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} s dA \right), \quad (3.7.16a)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_A \nabla s = k s + k, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (3.7.16b)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_A \nabla s = 0, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\kappa}, \quad (3.7.16c)$$

$$s(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = s(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3, \quad (3.7.16d)$$

$$\langle s \rangle^\beta = 0. \quad (3.7.16e)$$

Este último problema puede reformularse en términos de la siguiente variable

$$f = s + 1, \quad (3.7.17)$$

para dar lugar a

$$0 = \mathcal{D}_A \nabla^2 f + \frac{k}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} f dA, \quad (3.7.18a)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_A \nabla f = k f, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (3.7.18b)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_A \nabla f = 0, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\kappa}, \quad (3.7.18c)$$

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = f(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3, \quad (3.7.18d)$$

$$\langle f \rangle^\beta = 1. \quad (3.7.18e)$$

Ahora que se cuenta con la solución formal dada en la ecuación (3.7.14), puede sustituirse en la ecuación (3.7.9) para obtener

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle c_A \rangle^\beta}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\mathcal{D}_A \left(\mathbf{l} + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n} \mathbf{b} dA \right) \cdot \nabla \langle c_A \rangle^\beta + \left(\frac{\mathcal{D}_A}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n} \mathbf{s} dA \right) \langle c_A \rangle^\beta \right] \\ - k a_v \varepsilon^{-1} \left(1 + \frac{1}{A_{\beta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} s dA \right) \langle c_A \rangle^\beta - \frac{k}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{b} dA \cdot \nabla \langle c_A \rangle^\beta. \end{aligned} \quad (3.7.19)$$

O bien, en términos de la variable de cerradura f :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle c_A \rangle^\beta}{\partial t} &= \nabla \cdot \left[\mathcal{D}_A \left(\mathbf{I} + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n} \mathbf{b} dA \right) \cdot \nabla \langle c_A \rangle^\beta + \left(\frac{\mathcal{D}_A}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n} f dA \right) \langle c_A \rangle^\beta \right] \\ &- \frac{k}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} f dA \langle c_A \rangle^\beta - \frac{k}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{b} dA \cdot \nabla \langle c_A \rangle^\beta. \end{aligned} \quad (3.7.20)$$

Esta expresión puede recuperarse a partir de un método mas corto como se muestra en el ejercicio 3.16. Note que en la obtención de la ecuación anterior se tomó en cuenta el resultado dado en la ecuación (3.7.8). Ya que las variables de cerradura \mathbf{b} y f se resuelven en una celda unitaria periódica, sus integrales son independientes de la posición. Lo anterior permite expresar a la ecuación (3.7.20) como sigue:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle c_A \rangle^\beta}{\partial t} &= \mathcal{D}_A \left(\mathbf{I} + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n} \mathbf{b} dA \right) : \nabla \nabla \langle c_A \rangle^\beta - \frac{\mathcal{D}_A}{V_\beta} \left(\frac{k}{\mathcal{D}_A} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{b} dA - \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n} f dA \right) \cdot \nabla \langle c_A \rangle^\beta \\ &- \frac{k a_v \varepsilon^{-1}}{A_{\beta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} f dA \langle c_A \rangle^\beta. \end{aligned} \quad (3.7.21)$$

Para simplificar esta ecuación se definen los siguientes coeficientes de medio efectivo:

$$\mathbf{D}_{ef} = \mathcal{D}_A \left(\mathbf{I} + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n} \mathbf{b} dA \right), \quad (3.7.22a)$$

$$\mathbf{v}_{ef} = \frac{\mathcal{D}_A}{V_\beta} \left(\frac{k}{\mathcal{D}_A} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{b} dA - \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n} f dA \right), \quad (3.7.22b)$$

$$k_{ef} = \frac{k}{A_{\beta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} f dA. \quad (3.7.22c)$$

De esta forma, la ecuación (3.7.21) puede escribirse como

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle^\beta}{\partial t} = \mathbf{D}_{ef} : \nabla \nabla \langle c_A \rangle^\beta - \mathbf{v}_{ef} \cdot \nabla \langle c_A \rangle^\beta - k_{ef} a_v \varepsilon^{-1} \langle c_A \rangle^\beta. \quad (3.7.23)$$

Note que el proceso de promediado dio lugar a un término convectivo. Para estimar la relevancia de dicho término es necesario resolver los problemas de cerradura y calcular los coeficientes de medio efectivo. Esto se lleva a cabo en los siguientes párrafos.

Ejercicio 3.16 — Forma alternativa de obtener el modelo cerrado. Tomando en cuenta el cambio de variable dado en la ecuación (3.7.17), la solución formal puede escribirse como

$$c_A = \mathbf{b} \cdot \nabla \langle c_A \rangle^\beta + f \langle c_A \rangle^\beta. \quad (3.7.24)$$

Sustituya este resultado en la ecuación (3.7.5) para recuperar la expresión dada en la ecuación (3.7.20). ■

3.7.2 Solución de los problemas de cerradura y predicción de los coeficientes de medio efectivo

Antes de proceder a la solución de los problemas de cerradura, es conveniente reformularlos en términos de las siguientes definiciones adimensionales:

$$\mathbf{b}^* = \frac{\mathbf{b}}{\ell}; \quad \mathbf{r}^* = \frac{\mathbf{r}}{\ell}; \quad \phi^2 = \frac{k\ell}{\mathcal{D}_A}; \quad \mathbf{v}_{ef}^* = \frac{\mathbf{v}_{ef}\ell}{\mathcal{D}_A}; \quad k_{ef}^* = \frac{k_{ef}}{k}. \quad (3.7.25)$$

Aquí ℓ es el largo de la cerda unitaria periódica. De esta forma, las ecuaciones (3.7.15) y (3.7.18) pueden escribirse como

*Problema-I**

$$\mathbf{0} = \nabla^{*2}\mathbf{b}^* + \frac{\phi^2}{\varepsilon} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{b}^* dA^*, \quad (3.7.26a)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \nabla^*\mathbf{b}^* = \mathbf{n} + \phi^2\mathbf{b}^*, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (3.7.26b)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \nabla^*\mathbf{b}^* = \mathbf{n}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\kappa}, \quad (3.7.26c)$$

$$\mathbf{b}^*(\mathbf{r}^* + \mathbf{l}_i^*) = \mathbf{b}^*(\mathbf{r}^*), \quad i = 1, 2, 3, \quad (3.7.26d)$$

$$\langle \mathbf{b}^* \rangle^\beta = \mathbf{0}. \quad (3.7.26e)$$

*Problema-II**

$$0 = \nabla^{*2}f + \frac{\phi^2}{\varepsilon} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} f dA^*, \quad (3.7.27a)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \nabla^*f = \phi^2f, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (3.7.27b)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \nabla^*f = 0, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\kappa}, \quad (3.7.27c)$$

$$f(\mathbf{r}^* + \mathbf{l}_i^*) = f(\mathbf{r}^*), \quad i = 1, 2, 3, \quad (3.7.27d)$$

$$\langle f \rangle^\beta = 1. \quad (3.7.27e)$$

Mientras que las versiones adimensionales de los coeficientes de medio efectivo son

$$\frac{\mathbf{D}_{ef}}{\mathcal{D}_A} = \mathbf{I} + \frac{1}{\varepsilon} \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n}\mathbf{b}^* dA^*, \quad (3.7.28a)$$

$$\mathbf{v}_{ef}^* = \frac{1}{\varepsilon} \left(\phi^2 \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{b}^* dA^* - \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n}f dA^* \right), \quad (3.7.28b)$$

$$k_{ef}^* = \frac{1}{A_{\beta\sigma}^*} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} f dA^*. \quad (3.7.28c)$$

A continuación se listan los pasos a seguir para resolver estos dos problemas de cerradura en Comsol Multiphysics, junto con la predicción de los coeficientes de medio efectivo.

Solución numérica de los problemas I^* y II^*

1. Haga click en *Model Wizard* y seleccione 2D. Posteriormente, agregue tres módulos de *Transport of diluted species*. Un módulo es para bx , otro para by y el final para f . Posteriormente, haga click en *Study* y seleccione *Stationary*. Por último presione el botón *Done*.
2. La geometría de la fase sólida consiste en un círculo, el cual está centrado en una celda

unitaria cuadrada. Para ello, vaya en *Parameters 1* fije el valor de la porosidad ε como ε y asigne el valor de 0.8. Posteriormente defina al radio del círculo como a y defina su valor como $\sqrt{(1-\varepsilon)/\pi}$. Por último, defina el valor del módulo de Thiele (ϕ^2) como til y asigne el valor de 1.

3. Haga click derecho en *Geometry 1* y seleccione *Square*. Repita esta operación y elija *Circle*, asigne al radio el valor de a y especifique que su centro se encuentra en (0.5, 0.5). Por último, haga click derecho en *Geometry 1/Booleans and partitions/Difference*. En *Objects to add* seleccione al cuadrado y en *Objects to subtract* seleccione al círculo.
4. Haga click derecho en *Definitions/Nonlocal couplings/Average*, seleccione el dominio 1 y en *Operator name* escriba av .
5. Para definir las superficies reactivas, haga click derecho en *Definitions/Selections/Explicit*. En *Geometric entity level* seleccione *Boundary* y elija a las fronteras 6 y 7. Por último, en *label* escriba Abs . Repita esta operación y defina a la superficie Ab como aquella que contenga a las fronteras 5-8. Es decir, Ab denota a todas las superficies sólido-fluido.
6. Haga click derecho en *Definitions/Nonlocal couplings/Integration*. En *Geometric entity level* seleccione *Boundary* y elija Abs . Por último en *Operator name* escriba iAb . Repita la operación para Ab y nombre al operador iAb .
7. Para definir a los coeficientes de medio efectivo haga click derecho en *Definitions/Variables* e introduzca las siguientes definiciones:

D_{xx}	$1+iAb(nx*bx)/\varepsilon$
D_{yx}	$iAb(ny*bx)/\varepsilon$
D_{xy}	$iAb(nx*by)/\varepsilon$
D_{yy}	$1+iAb(ny*by)/\varepsilon$
v_{ex}	$(\text{til}*iAbs(bx)- iAb(nx*f))/\varepsilon$
v_{ey}	$(\text{til}*iAbs(by)- iAb(ny*f))/\varepsilon$
kef	$iAbs(f)/iAbs(1)$

8. Elimine al mecanismo de transporte por convección de todos los módulos de *Transport of diluted species*. Además, fije el valor del coeficiente de difusión en 1 para todos los módulos.
9. Haga click derecho en *Transport of Diluted Species (tds)/Reactions/Reactions*, seleccione el dominio 1 y en la reacción escriba $\text{til}*iAbs(bx)/\varepsilon$.
10. Haga click derecho en *Transport of Diluted Species (tds)/Flux* y seleccione Abs , habilite la casilla para bx y escriba $-nx-\text{til}*bx$. Repita la operación para las fronteras 5 y 8 y en este caso solo escriba $-nx$.
11. Haga click derecho en *Transport of Diluted Species (tds)/Periodic condition* y seleccione a las fronteras 1 y 4. Repita la operación para las fronteras 2 y 3.
12. Haga click derecho en *Transport of Diluted Species (tds)/Global/Global constraint*. En *Apply reaction terms on* seleccione *User defined*, en *Constraint expression* escriba $av(bx)$ y en *Constraint force expression* escriba $\text{test}(av(bx))$.
13. Repita los pasos usados en este problema en el módulo de *Transport of Diluted Species 2 (tds2)*, sólo considere los siguientes cambios: 1) En *Reactions* escriba $\text{til}*iAbs(by)/\varepsilon$; 2) En el flux para la frontera Abs escriba $-ny-\text{til}*by$; 3) En el flux que aplica a las fronteras 5 y 8 escriba $-ny$; 4) En *Global constraint* escriba $av(by)$ y $\text{test}(av(by))$.
14. Los pasos anteriores son similares para el tercer módulo. Los cambios a realizar son: 1) En *Reactions* escriba $\text{til}*iAbs(f)/\varepsilon$; 2) En el flux para la frontera Abs escriba $-\text{til}*f$; 3) En el flux que aplica a las fronteras 5 y 8 escriba 0; 4) En *Global constraint* escriba $av(f)-1$ y $\text{test}(av(f)-1)$.

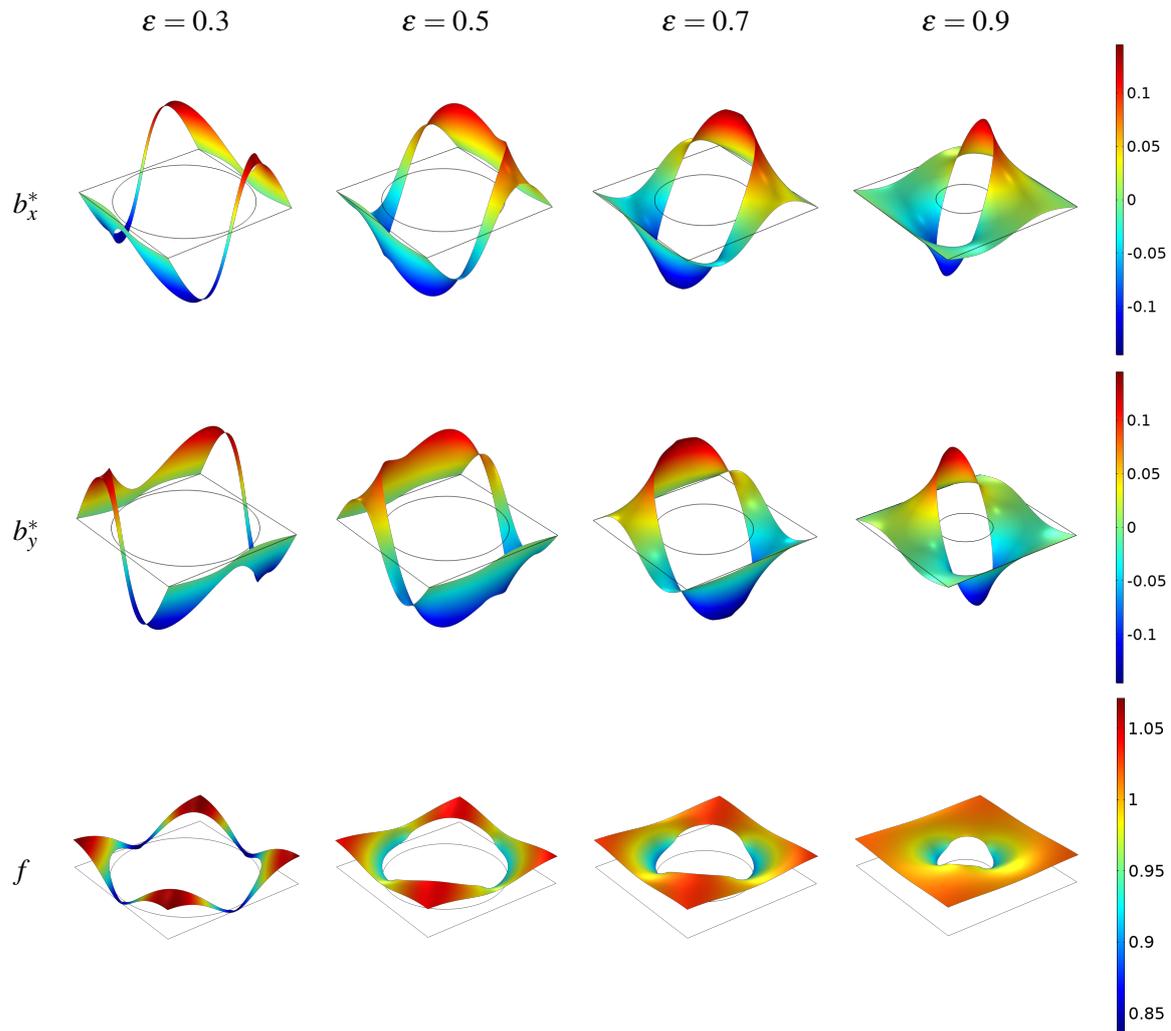


Figura 3.11: Ejemplos de los campos de las variables de cerradura b_x^* , b_y^* y f para diferentes valores de la porosidad tomando $\phi^2 = 1$.

15. En *mesh* elija *extremely fine*.
16. En *Study 1* presione el botón *Compute*.
17. Una vez resueltos los problemas puede recuperar los valores de los coeficientes de medio efectivo en *Derived values/Global evaluation*.

En la figura 3.11 se presentan ejemplos de los campos de las variables de cerradura b_x^* , b_y^* y f para diferentes valores de la porosidad fijando $\phi^2 = 1$. Las componentes del vector \mathbf{b}^* presentan valores extremos alrededor del obstáculo, lo cual es de esperarse ya que los términos fuente en el *Problema-I** son las componentes del vector unitario dirigido del fluido a la fase sólida. Por su parte, los campos de la variable de cerradura f oscilan a lo largo de toda la celda unitaria y sus valores máximos se encuentran en las esquinas de la celda. Además, las oscilaciones que presentan los campos de ambas variables de cerradura se atenúan conforme aumenta la porosidad.

Como puede notarse, los campos de b_x^* , al ser rotados 90° , corresponden a los de b_y^* . Esto es de esperarse debido a la geometría considerada y a la distribución de las superficies activas. Lo anterior tiene repercusiones en los valores de las componentes del tensor de difusión efectiva. Ya que en este caso, los valores de D_{xx} son iguales a los de D_{yy} y las componentes fuera de la diagonal son, a lo más, un orden de magnitud inferiores a las componentes diagonales. Bajo estas condiciones,

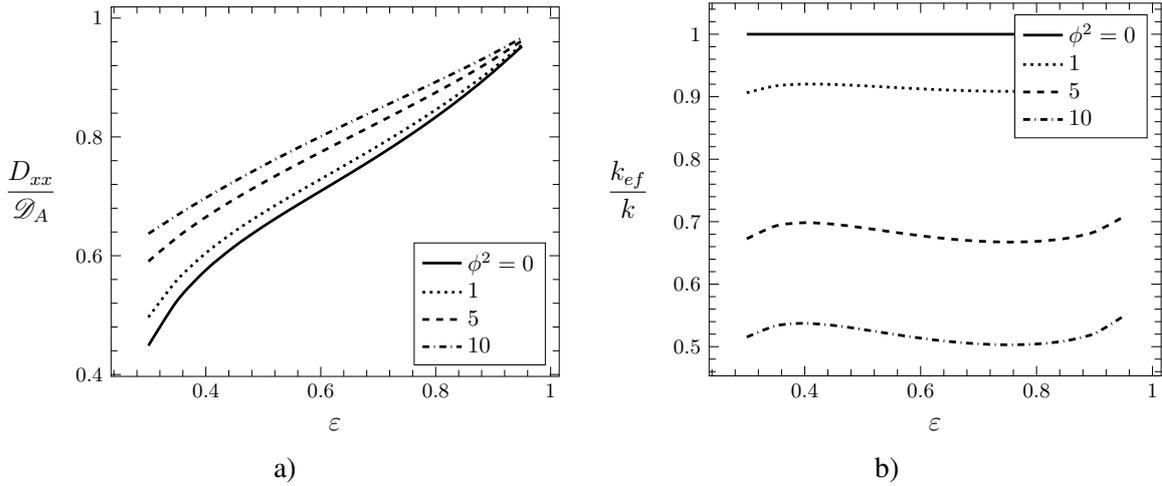


Figura 3.12: Predicciones de la dependencia de a) D_{xx}/\mathcal{D}_A y b) k_{ef}/k con la porosidad y el módulo de Thiele ϕ^2 .

sólo es necesario reportar los valores de D_{xx} . Más aún, las componentes del vector de velocidad resultan ser prácticamente cero, por lo que el modelo macroscópico se reduce a

$$\varepsilon \frac{\partial \langle c_A \rangle^\beta}{\partial t} = \varepsilon \mathbf{D}_{ef} : \nabla \nabla \langle c_A \rangle^\beta - k_{ef} a_v \langle c_A \rangle^\beta. \quad (3.7.29)$$

De lo anterior es claro que solo es necesario calcular los valores de D_{xx} y k_{ef} del programa de Comsol elaborado arriba. En la figura 3.12 se presentan las predicciones de las formas adimensionales de ambos coeficientes de medio efectivo como funciones de la porosidad y del módulo de Thiele. Como puede notarse, la difusión efectiva aumenta con la porosidad y con el módulo de Thiele. El que D_{xx} aumente con la porosidad es lógico por la geometría considerada, pues cada vez hay menor cantidad de fase sólida en el medio poroso, lo cual favorece la difusión. El hecho de que la difusión efectiva aumente con la tasa de reacción, solo se aprecia sensiblemente para valores de $\phi^2 > 1$. Más aún, la dependencia del coeficiente de reacción con la porosidad es oscilatoria con la porosidad y este efecto es más pronunciado conforme se incrementa el módulo de Thiele. Valdés-Parada y col. (2020) mostraron que si se ignora la dependencia de la reacción en el término difusivo y k_{ef} se aproxima por k , no se incurre en un error significativo en las predicciones de la concentración promedio. Sin embargo, para valores de ϕ^2 mayores a la unidad, esta dependencia no puede ignorarse. Al lector interesado en este tema se le recomiendan los trabajos de Valdes-Parada y Alvarez-Ramirez (2010); Valdés-Parada y col. (2011); Aguilar-Madera y col. (2015); Valdés-Parada y col. (2017); Ray y col. (2018); Bourbatache y col. (2020).

Ejercicio 3.17 Para modelar la transferencia de masa involucrando convección y difusión se utiliza el siguiente modelo macroscópico (Whitaker, 1999):

$$\frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta = \mathbf{D}_\beta^* : \nabla \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta. \quad (3.7.30)$$

En donde \mathbf{D}_β^* es el coeficiente de dispersión total, el cual se calcula de acuerdo a la siguiente

expresión

$$\frac{\mathbf{D}_\beta^*}{\mathcal{D}_\beta} = \mathbf{I} + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b}_\beta dA - \frac{1}{\mathcal{D}_\beta} \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle^\beta. \quad (3.7.31)$$

En la ecuación anterior \mathcal{D}_β es el coeficiente de difusión molecular de la especie A en la fase fluida. Además, la variable \mathbf{b}_β resuelve el siguiente problema de valor a la frontera

$$\tilde{\mathbf{v}}_\beta + \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta = \mathcal{D}_\beta \nabla^2 \mathbf{b}_\beta, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (3.7.32a)$$

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta = \mathbf{n}_{\beta\sigma}, \quad \text{en la interfase sólido-fluido}, \quad (3.7.32b)$$

$$\mathbf{b}_\beta(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{b}_\beta(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3, \quad (3.7.32c)$$

$$\langle \mathbf{b}_\beta \rangle^\beta = \mathbf{0}. \quad (3.7.32d)$$

En donde \mathbf{v}_β es la velocidad del fluido a escala de poro. En este problema se deben predecir a las componentes xx y yy del tensor de dispersión de masa para $\varepsilon_\beta = 0.4$ y $Re = 1000$ como función del número de Péclet de partícula, el cual se define como

$$Pe_p = \frac{\|\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta\| d_p}{\mathcal{D}_\beta} \left(\frac{\varepsilon_\beta}{1 - \varepsilon_\beta} \right). \quad (3.7.32e)$$

En donde, $d_p = 6V_p/A_p$ es el diámetro promedio de la partícula sólida en la celda unitaria; mientras que V_p y A_p representan el volumen y área de las partículas. Puede considerar un valor máximo de $Pe_p = 1000$. ■

3.8 Maquinaria rotatoria

Normalmente cuando se trabaja en problemas de flujo de fluidos se utiliza un sistema de referencia inercial en donde el observador está fijo. Sin embargo, en problemas que involucran maquinaria rotatoria es conveniente utilizar un sistema coordenado móvil. Para comprender las implicaciones que tiene lidiar con un sistema coordenado rotatorio en las ecuaciones de transporte, considere la siguiente relación entre la derivada temporal de una propiedad vectorial o tensorial continua $\boldsymbol{\varphi}$ en un sistema coordenado inercial con un sistema coordenado rotatorio (Batchelor, 2000)

$$\left(\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial t} \right)_{\text{inercial}} = \left(\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial t} \right)_{\text{rotatorio}} + \boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{\varphi}. \quad (3.8.1)$$

En donde $\boldsymbol{\Omega}$ es el vector de velocidad angular y es, en general, una función del tiempo. Aplicando la transformación anterior al vector de posición \mathbf{r} , se obtiene

$$\left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \right)_{\text{inercial}} = \left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \right)_{\text{rotatorio}} + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}. \quad (3.8.2)$$

O bien, aplicando las siguientes definiciones:

$$\mathbf{v}_{\text{inercial}} \equiv \mathbf{v} = \left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \right)_{\text{inercial}}, \quad (3.8.3a)$$

$$\mathbf{v}_{\text{rotatorio}} \equiv \mathbf{u} = \left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \right)_{\text{rotatorio}}, \quad (3.8.3b)$$

la ecuación (3.8.2) puede escribirse como

$$\mathbf{v} = \mathbf{u} + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}. \quad (3.8.4)$$

Derivando ambos lados de la ecuación anterior respecto al tiempo en un sistema inercial, el término de aceleración temporal en la ecuación de Navier-Stokes puede expresarse como

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right)_{\text{inercial}} + \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial t} \right)_{\text{inercial}} \times \mathbf{r} + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{v}. \quad (3.8.5)$$

Note que en el último término se utilizó la definición dada en la ecuación (3.8.3a). El objetivo es expresar a todos los términos del lado derecho en función de derivadas y velocidades asociadas al dominio rotatorio. Con este fin, se utiliza el resultado dado en la ecuación (3.8.4) en el último término de la ecuación anterior para obtener

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right)_{\text{inercial}} + \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial t} \right)_{\text{inercial}} \times \mathbf{r} + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{u} + \boldsymbol{\Omega} \times (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}). \quad (3.8.6)$$

Usando ahora la descomposición dada en la ecuación (3.8.1) en el primer término del lado derecho de la ecuación (3.8.6) resulta que

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right)_{\text{rotatorio}} + \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial t} \right)_{\text{inercial}} \times \mathbf{r} + 2\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{u} + \boldsymbol{\Omega} \times (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}). \quad (3.8.7)$$

Por último, ya que el producto cruz de un vector por sí mismo es cero, se deduce de la ecuación (3.8.1) que

$$\left(\frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial t} \right)_{\text{inercial}} = \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial t} \right)_{\text{rotatorio}}. \quad (3.8.8)$$

Entonces, la ecuación (3.8.7) puede expresarse finalmente en términos de variables y derivadas en el dominio rotatorio como sigue

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right)_{\text{rotatorio}} + \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial t} \right)_{\text{rotatorio}} \times \mathbf{r} + 2\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{u} + \boldsymbol{\Omega} \times (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}). \quad (3.8.9)$$

De esta forma, la ecuación de Navier-Stokes toma la siguiente forma (Keke Zhang, 2017)

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial t} \times \mathbf{r} + 2\rho \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{u} + \rho \boldsymbol{\Omega} \times (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}) + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \mu \nabla^2 \mathbf{u}. \quad (3.8.10)$$

Evidentemente, en zonas donde no haya rotación $\boldsymbol{\Omega} = \mathbf{0}$ y $\mathbf{u} = \mathbf{v}$. De esta forma, para un sistema en estado estacionario, las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento en un dominio rotatorio son

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.8.11a)$$

$$2 \frac{\rho}{\mu} \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{u} + \frac{\rho}{\mu} \boldsymbol{\Omega} \times (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}) + \frac{\rho}{\mu} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\mu} \nabla p + \frac{\rho}{\mu} \mathbf{g} + \nabla^2 \mathbf{u}. \quad (3.8.11b)$$

Cuando Comsol Multiphysics lleva a cabo una solución de tipo rotor congelado (o *frozen rotor*) lo que hace es resolver la versión de las ecuaciones de masa total y cantidad de movimiento dada en las ecuaciones (3.8.11b). En el sistema de coordenadas rotatorio, la velocidad \mathbf{u} es nula en la interfase sólido rotatorio fluido. Además, en el resto de las superficies sólidas no rotatorias, la velocidad del fluido es cero. Por tanto, puede generalizarse que la siguiente condición de frontera aplica en la interfase sólido fluido:

$$\mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad \mathcal{A}_{\beta\sigma}. \quad (3.8.12)$$

En los siguientes párrafos se ilustra el uso de la maquinaria rotatoria en dos sistemas de interés en ingeniería.

3.8.1 Tanque agitado

Considere la transferencia de calor y cantidad de movimiento en un tanque agitado que no tiene entradas y salidas. Se busca analizar la transferencia de calor y cantidad de movimiento en el sistema bajo diferentes condiciones de flujo y de agitación. Para ello, el espacio total ocupado por el fluido en el tanque (Ω) se descompone en los dominios inercial (Ω_i) y rotatorio (Ω_r) en los cuales, bajo condiciones de flujo incompresible y newtoniano en estado estacionario, las ecuaciones que gobiernan la transferencia total de masa y de cantidad de movimiento lineal del fluido en el tanque pueden expresarse como sigue

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad \text{en } \Omega_i, \quad (3.8.13a)$$

$$\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v}, \quad \text{en } \Omega_i, \quad (3.8.13b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad \text{en } \Omega_r, \quad (3.8.13c)$$

$$2\rho \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{u} + \rho \boldsymbol{\Omega} \times (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}) + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u}, \quad \text{en } \Omega_r. \quad (3.8.13d)$$

Note que no se incluyeron las contribuciones debidas a la gravedad ya que pueden suponerse despreciables respecto a los esfuerzos inerciales en el tanque agitado. Como se explicó arriba, en las paredes rotatorias (\mathcal{A}_r), la velocidad del fluido relativa al movimiento del dominio (\mathbf{u}) es nula, esto es

$$\mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_r. \quad (3.8.13e)$$

Además, en las paredes fijas del tanque (\mathcal{A}_f) la velocidad del fluido es cero

$$\mathbf{v} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_f. \quad (3.8.13f)$$

En las superficies superiores del fluido en el tanque (tanto en la superficie rotatoria, \mathcal{A}_{rs} , como en la inercial, \mathcal{A}_{is}), se supone que la presión del fluido es la atmosférica y que ésta es mucho mayor que los esfuerzos viscosos. Con base en esto se proponen las siguientes condiciones de frontera

$$\mathbf{n} \cdot [-p\mathbf{l} + \mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] = -\mathbf{n}p_a, \quad \text{en } \mathcal{A}_{rs}, \quad (3.8.13g)$$

$$\mathbf{n} \cdot [-p\mathbf{l} + \mu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] = -\mathbf{n}p_a, \quad \text{en } \mathcal{A}_{is}. \quad (3.8.13h)$$

Para resolver este problema es conveniente reformularlo en términos de las siguientes definiciones adimensionales

$$\nabla^* = \ell_{ref} \nabla, \quad \mathbf{v}^* = \frac{\mathbf{v}}{v_{ref}}, \quad \mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{v_{ref}}; \quad \boldsymbol{\Omega}^* = \frac{\boldsymbol{\Omega} \ell_{ref}}{v_{ref}}; \quad p^* = \frac{(p - p_a) \ell_{ref}}{\mu v_{ref}}, \quad Re = \frac{\rho v_{ref} \ell_{ref}}{\mu}. \quad (3.8.14)$$

En donde ℓ_{ref} se toma como la altura del agitador. De esta forma, la versión adimensional del problema es

$$\nabla^* \cdot \mathbf{v}^* = 0, \quad \text{en } \Omega_i, \quad (3.8.15a)$$

$$Re \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* = -\nabla^* p^* + \nabla^{*2} \mathbf{v}^*, \quad \text{en } \Omega_i, \quad (3.8.15b)$$

$$\nabla^* \cdot \mathbf{u}^* = 0, \quad \text{en } \Omega_r, \quad (3.8.15c)$$

$$2Re \boldsymbol{\Omega}^* \times \mathbf{u}^* + Re \boldsymbol{\Omega}^* \times (\boldsymbol{\Omega}^* \times \mathbf{r}^*) + Re \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \mathbf{u}^* = -\nabla^* p^* + \nabla^{*2} \mathbf{u}^*, \quad \text{en } \Omega_r, \quad (3.8.15d)$$

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_r, \quad (3.8.15e)$$

$$\mathbf{v}^* = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_f, \quad (3.8.15f)$$

$$\mathbf{n} \cdot [-p^* \mathbf{l} + \nabla^* \mathbf{u}^* + \nabla^* \mathbf{u}^{*T}] = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{rs}, \quad (3.8.15g)$$

$$\mathbf{n} \cdot [-p^* \mathbf{l} + \nabla^* \mathbf{v}^* + \nabla^* \mathbf{v}^{*T}] = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{is}. \quad (3.8.15h)$$

Dirigiendo ahora la atención al problema de transferencia de calor, la ecuación de energía térmica es en este caso

$$\mathbf{v} \cdot \nabla T = \alpha \nabla^2 T, \quad \text{en } \Omega, \quad (3.8.16a)$$

donde $\alpha = k/\rho C_p$ es la difusividad térmica. En las paredes laterales del tanque (\mathcal{A}_{lat}) se supone que se tiene una fuente conocida y constante de calor, por lo que

$$\mathbf{n} \cdot k \nabla T = q_0, \quad \mathcal{A}_{lat}. \quad (3.8.16b)$$

Además, las paredes inferiores (\mathcal{A}_{inf}) del tanque y el agitador se suponen aislados

$$\mathbf{n} \cdot k \nabla T = 0, \quad \mathcal{A}_{inf} + \mathcal{A}_r. \quad (3.8.16c)$$

Por último, en la superficie del líquido se utiliza la ley de enfriamiento de Newton

$$-\mathbf{n} \cdot k \nabla T = h(T - T_a), \quad \mathcal{A}_{rs} + \mathcal{A}_{is}. \quad (3.8.16d)$$

Al igual que en el caso de transferencia de cantidad de movimiento, el problema se reformula en forma adimensional usando las siguientes definiciones

$$T^* = \frac{T - T_a}{T_a}, \quad Pe = \frac{v_{ref} \ell_{ref}}{\alpha}, \quad Bi = \frac{h \ell_{ref}}{k}, \quad q_0^* = \frac{q_0 \ell_{ref}}{k T_a}. \quad (3.8.17)$$

Entonces, el problema adimensional de transferencia de calor es

$$Pe \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* T^* = \nabla^{*2} T^*, \quad \text{en } \Omega, \quad (3.8.18a)$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla^* T^* = q_0^*, \quad \mathcal{A}_{lat}, \quad (3.8.18b)$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla^* T^* = 0, \quad \mathcal{A}_{inf} + \mathcal{A}_r, \quad (3.8.18c)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \nabla^* T^* = Bi T^*, \quad \mathcal{A}_{rs} + \mathcal{A}_{is}. \quad (3.8.18d)$$

Como puede notarse, los grados de libertad del problema son Re , Pe , Bi y la velocidad de rotación. Este último parámetro adimensional se especificará como rpm. En los siguientes párrafos se describe la programación de estos problemas en Comsol Multiphysics.

Programa tanque agitado

1. En *Model Wizard* elija una geometría tridimensional.
2. En *Fluid flow/Single-Phase Flow/Rotating Machinery*, *Fluid Flow* elija *Rotating Machinery*, *Laminar Flow* y presione *Add*.
3. En *Heat Transfer* seleccione *Heat Transfer in Fluids* y presione *Add*. Posteriormente, presione el botón *Study*.
4. En *Preset Studies for Selected Physics Interfaces* seleccione *Frozen Rotor* y presione *Done*.
5. Fije los siguientes parámetros: $Re = 100$, $Pe = 10 * Re$, $Bi = 1$, $rpm = 1$, $q_0 = 100$.
6. Dibuje un cilindro de radio 0.5 y altura 1.5. Este primer cilindro representa el dominio de fluido rotatorio, más adelante se construirá el cilindro que representa las paredes del tanque. Por el momento se procede a construir el agitador.
7. Dibuje un cilindro de radio 0.05 y altura 1, cuya posición es (0,0,0.5).
8. Construya un bloque de ancho 0.05, profundidad 0.5 y altura 0.1, cuya posición es (-0.025, -0.25,0.5).
9. Dibuje un cilindro de radio 0.6 y altura 1.5. Este cilindro representa las paredes del tanque.
10. Haga una diferencia entre la suma de los dos cilindros mas grandes y el agitador. Esto es, haga click derecho en *Geometry* y en *Booleans and partitions* seleccione *Difference*. En *Objects to add* seleccione *acyl1* y *cyl3*; mientras que en *Objects to subtract* seleccione a *cyl2* y *blk1*.

11. Establezca que el dominio rotatorio es el dominio 2 y establezca que la velocidad de rotación es rpm. Para ello, vaya a *Moving Mesh/Rotating Domain 1* y asegúrese de que sólo esté seleccionado el dominio 2. Y en *Revolutions per time* escriba rpm en la variable f .
12. Haga click derecho en *Laminar Flow/Wall* y seleccione a la frontera 7, y desarrolle la pestaña de *wall movement* y seleccione que la velocidad de traslación sea cero. Además habilite la casilla de *Sliding wall* para asegurar que la velocidad sea cero.
13. En *Laminar Flow/Fluid properties* fije a la densidad como el número de Reynolds y a la viscosidad como 1.
14. Haga click derecho en *Laminar Flow* y seleccione *Open Boundary* y establezca que la superficie del fluido (fronteras 8 y 4) es una frontera abierta. Con este paso se ha terminado la programación del flujo de fluidos y se procede ahora con la transferencia de calor.
15. En *Heat Transfer in Fluids/Fluid 1* especifique que las componentes de la velocidad del fluido son $Pe * u$, $Pe * v$ y $Pe * w$; además establezca que los valores de la conductividad térmica, densidad, capacidad calorífica y razón de calores específicos corresponden a 1.
16. Haga click derecho en *Heat Transfer in Fluids/Heat flux* y seleccione a las paredes externas del tanque (fronteras 1, 2, 21 y 26) y especifique el valor del flux entrante de calor como q_0 .
17. Haga click derecho en *Heat Transfer in Fluids/Heat flux* y seleccione a las fronteras 4 y 8. Además elija la casilla correspondiente al flux convectivo de calor, donde $h = Bi$ y $T_{ext} = 0$.
18. Haga un malleo con *coarser*.
19. En *Study 1/Frozen Rotor* presione el botón de *compute*.
20. Para ver por dentro del dominio en *Data Sets/Study 1/Solution 1* haga click derecho y elija *selection* y elija a los dominios 2 y 4.
21. Si se desea se puede llevar a cabo un barrido paramétrico de 1 hasta 100 rpm. Además, es recomendable que el estudio se haga en dos pasos, el primero para el flujo de fluidos y el segundo para la transferencia de calor.

En las figuras 3.13 y 3.14 se muestran las líneas de corriente de velocidad y del flux total de calor para tres velocidades de agitación adimensionales y para tres valores del número de Reynolds, respectivamente. Como puede notarse, para velocidades arriba de 10 rpm, el mezclado es bastante eficiente y la temperatura puede considerarse uniforme. Como es de esperarse, a mayor agitación, mayor es la velocidad del fluido en el tanque, sin embargo, es interesante notar que llega un momento en que a mayor agitación se empeora la transferencia de calor desde las paredes hacia dentro del tanque. Estas observaciones se corroboran al modificar el número de Reynolds, de hecho, para $Re = 10$ y $rpm = 10$ la temperatura en el tanque es prácticamente uniforme (los cambios más apreciables de temperatura se aprecian cerca del rotor), aunque disminuyó en un orden de magnitud en comparación con el caso en el que $Re = 1$. Esto quiere decir que en el uso de tanques agitados se debe hacer un balance entre la eficiencia de agitación y la temperatura que se busca en el fluido en el tanque.

Ejercicio 3.18 — Geometría del agitador. Evalúe la influencia de la geometría y altura del agitador en los perfiles de temperatura y las líneas de corriente. Puede cambiar la posición del agitador o bien agregar más agitadores. ■

Ejercicio 3.19 — Influencia de números adimensionales. En los párrafos anteriores se examinó la influencia de la velocidad de agitación. En este problema debe examinar la influencia de los números de Péclet y Biot en el desempeño del tanque. ■

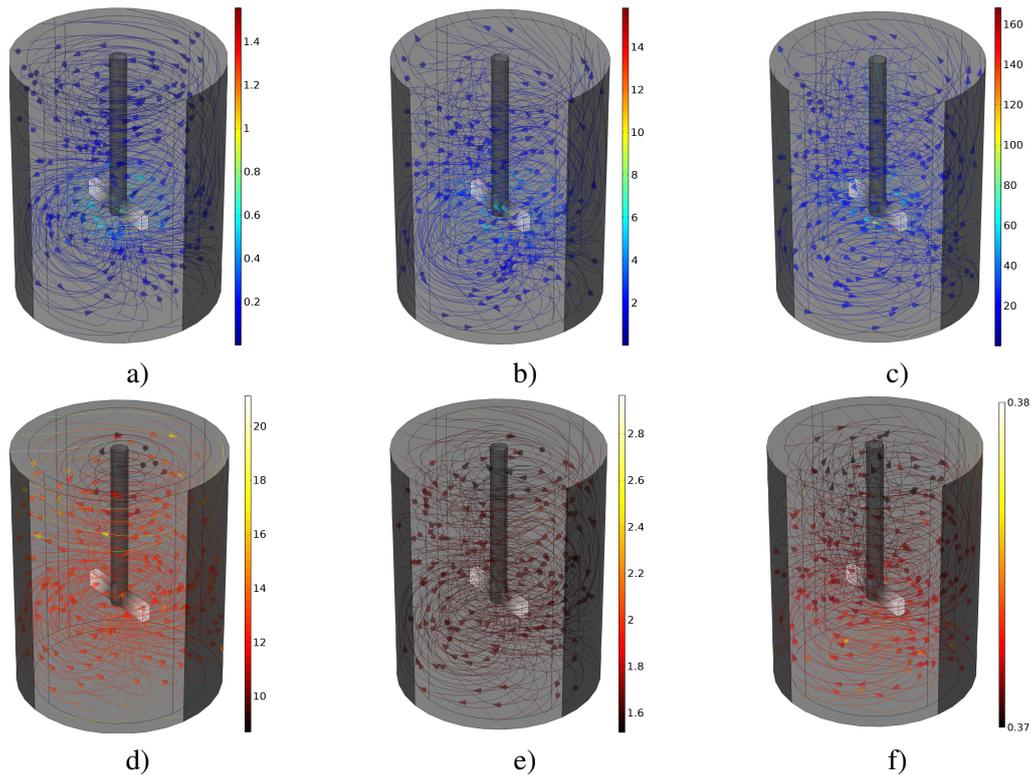


Figura 3.13: Líneas de corriente de la velocidad (a-c) y del flux total de calor (d-f) para rpm = 1 (a, d), 10 (b, e) y 100 (c y f). En todos los casos se tomó $Re = 100$, $Bi = 1$ y $q_0^* = 100$. En las figuras a-c la barra de color indica la magnitud de la velocidad adimensional y en las figuras d-f la temperatura adimensional.

Ejercicio 3.20 — Resistencia eléctrica. Suponga que dentro del tanque se introduce una resistencia eléctrica con un flux de calor constante. Evalúe el desempeño del sistema para este caso. ■

Ejercicio 3.21 — Transferencia de masa. Combine este problema con el módulo de transferencia de masa para estudiar la influencia de la agitación en la convección de masa, suponga que las paredes del tanque están cubiertas de catalizador y se lleva a cabo una reacción irreversible de primer orden. ■

Ejercicio 3.22 — Flujo continuo. El tanque agitado estudiado en esta sección opera de manera discontinua, ya que no tiene flujos de entrada y de salida; el propósito de este ejercicio es que analice una operación continua. Para ello, dibuje tubos horizontales para las corrientes de entrada (por el lado superior izquierdo del tanque) y salida (por el lado inferior derecho) que lleven el mismo flujo volumétrico. Suponga que el fluido de entrada tiene una temperatura conocida y que la temperatura es constante en el efluente. Evalúe las condiciones de operación que permitan suponer condiciones de mezclado perfecto, esto es, que la corriente de salida tiene la misma temperatura que la temperatura promedio en el tanque. ■

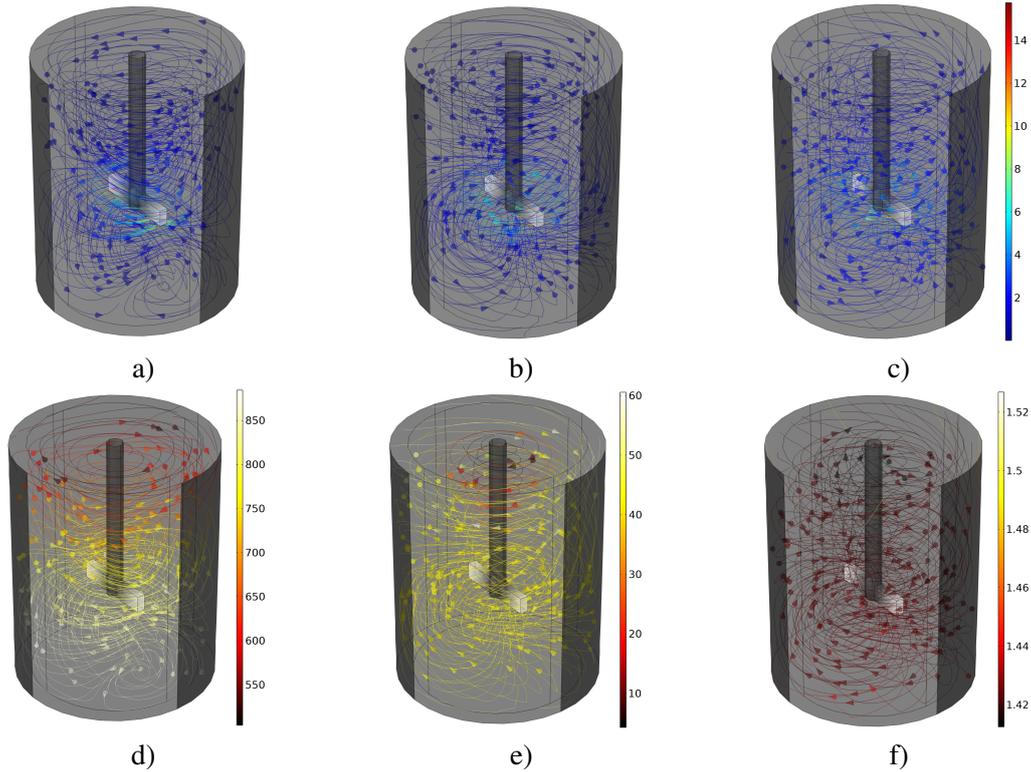


Figura 3.14: Líneas de corriente de la velocidad (a-c) y del flux total de calor (d-f) para $Re = 1$ (a, d), 10 (b, e) y 200 (c y f). En todos los casos se tomó $rpm = 10$, $Bi = 1$ y $q_0^* = 100$. En las figuras a-c la barra de color indica la magnitud de la velocidad adimensional y en las figuras d-f la temperatura adimensional.

3.8.2 Flujo alrededor de turbinas eólicas de eje horizontal

Las turbinas eólicas son el segundo tipo de tecnologías de energéticas alternativas que se utilizan actualmente, solo por debajo de la energía solar (ver, por ejemplo, [Hand y Cashman, 2020](#)). La tecnología y el modelado matemático de las turbinas eólicas es un campo aún abierto a investigación ([Schaffarczyk, 2014](#); [Nelson, 2020](#)). Por ello, en esta sección se estudia el flujo de aire alrededor de turbinas eólicas de eje horizontal. En específico, se busca analizar si la estela de una turbina perturba o no la corriente de aire que llega a otra para diferentes condiciones de flujo y de rotación.

Para cumplir el objetivo del problema se consideran dos turbinas eólicas de eje horizontal separadas entre sí a una distancia conocida y se define a un dominio inercial (Ω_i) y a dos dominios rotatorios idénticos alrededor de cada turbina (Ω_r). Suponiendo que el flujo de aire se mantiene subsónico, es razonable analizar el problema bajo condiciones de flujo incompresible, newtoniano y en estado estacionario. Por tanto, las ecuaciones de conservación de masa total y de cantidad de movimiento son las mismas que en la sección anterior y están dadas por

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad \text{en } \Omega_i, \quad (3.8.19a)$$

$$\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v}, \quad \text{en } \Omega_i, \quad (3.8.19b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad \text{en } \Omega_r, \quad (3.8.19c)$$

$$2\rho \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{u} + \rho \boldsymbol{\Omega} \times (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}) + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u}, \quad \text{en } \Omega_r. \quad (3.8.19d)$$

Ahora bien, en el piso (\mathcal{A}_f) es razonable imponer la condición de no deslizamiento

$$\mathbf{v} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_f. \quad (3.8.19e)$$

Además en la interfase entre el viento y las palas \mathcal{A}_r , la velocidad relativa del viento respecto al movimiento de las palas es cero:

$$\mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_r. \quad (3.8.19f)$$

En la superficie de entrada al sistema (\mathcal{A}_e) la velocidad se supone alineada con el eje x y constante:

$$\mathbf{v} = v_e \mathbf{e}_x, \quad \text{en } \mathcal{A}_e. \quad (3.8.19g)$$

Por último, en el resto de las fronteras del dominio inercial ($\partial\Omega_i$) se supone que la presión atmosférica es mucho mayor que los esfuerzos cortantes y por tanto:

$$\mathbf{n} \cdot [-p\mathbf{l} + \mu(\nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v}^T)] = -p_a\mathbf{n}, \quad \text{en } \partial\Omega_i. \quad (3.8.19h)$$

Antes de continuar vale la pena mencionar que en este estudio se prescribe la velocidad de rotación de las turbinas. Esto es, se considera conocida la velocidad de desplazamiento de las palas en función de la capacidad del viento, la resistencia del material y el diseño de la turbina. Esta suposición es conveniente pues hace innecesario acoplar las ecuaciones de mecánica de fluidos con las de mecánica de sólidos. Aunque ciertamente, un estudio mas completo debe acoplar el transporte de cantidad de movimiento en ambas fases.

Al igual que en otros problemas, antes de proceder con la solución del problem, es conveniente reformularlo en forma adimensional. Para ello se recurre a las definiciones dadas en la ecuación (3.8.14) del problema pasado. En este caso se toma como ℓ_{ref} al largo de las palas de la turbina y como $v_{ref} = v_e$. Con base en estas definiciones, el problema adimensional se escribe como sigue

$$\nabla^* \cdot \mathbf{v}^* = 0, \quad \text{en } \Omega_i, \quad (3.8.20a)$$

$$Re\mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* = -\nabla^* p^* + \nabla^{*2} \mathbf{v}^*, \quad \text{en } \Omega_i, \quad (3.8.20b)$$

$$\nabla^* \cdot \mathbf{u}^* = 0, \quad \text{en } \Omega_r, \quad (3.8.20c)$$

$$2Re\boldsymbol{\Omega}^* \times \mathbf{u}^* + Re\boldsymbol{\Omega}^* \times (\boldsymbol{\Omega}^* \times \mathbf{r}^*) + Re\mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \mathbf{u}^* = -\nabla^* p^* + \nabla^{*2} \mathbf{u}^*, \quad \text{en } \Omega_r, \quad (3.8.20d)$$

$$\mathbf{v}^* = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_f, \quad (3.8.20e)$$

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_r, \quad (3.8.20f)$$

$$\mathbf{v}^* = \mathbf{e}_x, \quad \text{en } \mathcal{A}_e, \quad (3.8.20g)$$

$$\mathbf{n} \cdot [-p^*\mathbf{l} + \nabla^* \mathbf{v}^* + \nabla^* \mathbf{v}^{*T}] = \mathbf{0}, \quad \text{en } \partial\Omega_i. \quad (3.8.20h)$$

A continuación se listan los pasos a seguir para resolver este problema en Comsol Multiphysics:

Flujo alrededor de turbinas eólicas de eje horizontal

1. Haga click en *Model Wizard* y elija una geometría tridimensional. Además, en la física elija *Fluid Flow/Single Phase Flow/Rotating Machinery*, *Fluid Flow/Laminar Flow* y por último elija un estudio de rotor congelado.
2. Defina al número de Reynolds como un parámetro y asigne por el momento un valor de 1000. Además defina a rpm como 10 por ahora.
3. Descargue la geometría disponible en esta liga:
<https://www.dropbox.com/s/1lwf7vgkrq5evif/HAWT.mphbin?dl=0>
4. Haga click derecho en *Geometry 1/Import* y localice el archivo que descargó en el punto anterior y por último presione el botón de *Import*.
5. Haga click derecho en *Geometry 1/Cylinder* especifique que el radio sea 2, la altura 0.2 y que su posición se ubica en (-0.15, 0, 2.5) y especifique que el eje es el eje x .
6. Haga click derecho en *Geometry 1/Transforms/Copy* y seleccione a los dos objetos dibujados antes. Además, defina un desplazamiento de 5 unidades en X y -5 unidades en

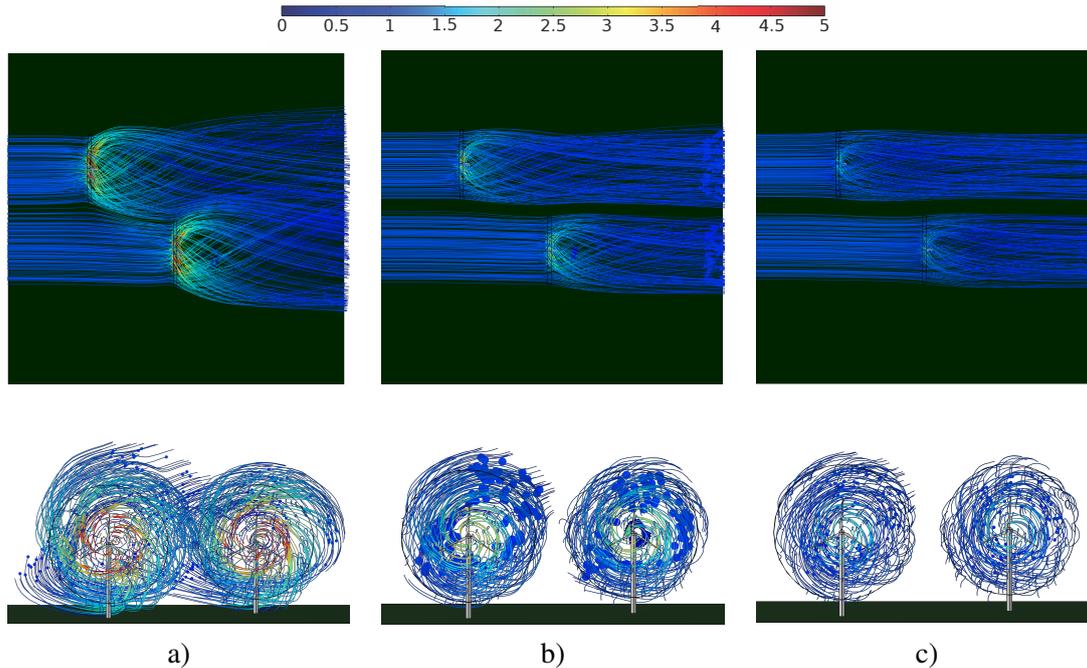


Figura 3.15: Vistas vertical y frontal de las líneas de corriente de la velocidad adimensional del aire para a) $Re = 10^3$, b) 10^4 y c) 10^5 . En todos los casos se tomó $rpm = 10$.

- y.
7. Haga click derecho en *Geometry 1/Block*. Especifique su tamaño como sigue: ancho y profundidad 20, altura 10. Además especifique que su esquina se encuentra en $(-5, -13, 0)$.
 8. Haga click derecho en *Geometry 1/Booleans and partitions* y reste a los tres cilindros los dos aerogeneradores.
 9. En *Definitions/Moving Mesh/Rotating Domain 1* seleccione sólo al dominio 2, en *revolutions per time* escriba rpm. Además, en *Rotation axis base point* escriba $(-0.15, 0, 2.5)$ y especifique el eje de rotación en $(1,0,0)$.
 10. Duplique el dominio rotatorio anterior y modifique el punto de la base del eje de rotación para que sea $(4.85, -5, 2.5)$.
 11. En *Laminar Flow/Fluid Properties 1* defina a la densidad como Re y a la viscosidad como 1.
 12. En *Laminar Flow/Inlet* seleccione a la frontera 1 y especifique que la velocidad de entrada sea 1.
 13. En *Laminar Flow/Outlet* y seleccione a las fronteras 2, 4, 5 y 84.
 14. En *Mesh* elija coarser.
 15. Lleve a cabo barridos paramétricos en el número de Reynolds.

En la figura 3.15 se muestran tres ejemplos de líneas de corriente de la velocidad adimensional resultantes de la solución numérica del problema para tres valores del número de Reynolds. Como puede apreciarse, para $Re = 10^3$ las líneas de corriente de una turbina interfieren con las de la otra. Afortunadamente, conforme aumenta el número de Reynolds el espesor de las capas límite disminuye y el separar a las turbinas eólicas en 5 diámetros de pala parece ser suficiente para que el flujo de una turbina no altere a otra. Por supuesto, en la práctica las decisiones sobre la instalación de las turbinas eólicas obedece también a otros factores como la topología del parque eólico, la rosa de los vientos, entre otros.

Ejercicio 3.23 — Turbinas de eje vertical. Repita el análisis llevado a cabo en esta sección para turbinas de eje vertical como la turbina de tipo Savonius. ■

Ejercicio 3.24 — Transferencia de masa. Un tema de interés en el uso de parques eólicos es su influencia sobre el transporte de especies químicas (como el polen de las plantas). Para analizar la influencia del transporte de cantidad de movimiento sobre la transferencia de masa, considere el transporte con convección y difusión de una especie química pasiva para diferentes condiciones de flujo. Evalúe las consecuencias del uso de turbinas eólicas sobre la transferencia de especies químicas y, en función de sus resultados, haga propuestas razonables para su mejora. ■

3.9 Flujo multifásico

Para concluir este capítulo sobre el uso del resolvidor de elemento finito Comsol Multiphysics, se presentan algunos ejemplos de flujo multifásico. El flujo entre varias fases es un tópico interesante pues tiene una amplia variedad de aplicaciones prácticas que trascienden de hecho el campo de la ingeniería. Desde el punto de vista numérico, no es posible actualmente modelar este tipo de flujos en sistemas macroscópicos (de longitudes características del orden de magnitud de metros o mas) a partir de las ecuaciones gobernantes al nivel del continuo en cada punto del sistema. Para atender esta situación se utilizan modelos de flujo multifásico *disperso*; mientras que para modelar el flujo a niveles de escala cercanos a los del continuo se utilizan modelos de flujo *separado*. En estos últimos se distingue entre fases e interfaces, mientras que en los modelos dispersos, la fase fluida dispersa se modela como un pseudo-continuo¹.

En ambos enfoques de modelado se utiliza una función indicadora de fase, ϕ , (también conocida como *función de campo de fase*). De esta forma, por ejemplo en un sistema aire-agua, ϕ puede utilizarse para localizar al aire y adquiere el valor de 0 en las posiciones espaciales donde se encuentre solo el agua y valdrá 1 cuando sólo exista aire. En los modelos de flujo separado la función ϕ cambia abruptamente de 0 a uno en la interfase. De hecho, justo en la interfase ϕ adquiere el valor de 0.5. Por su parte, en los modelos flujo disperso, la función ϕ denota a la fracción volumétrica promedio del aire en el agua y sufre cambios suaves entre 0 y 1 a lo largo del dominio de solución. De esta forma es posible modelar los cambios espaciales de propiedades como la densidad y la viscosidad usando la siguiente expresión:

$$\psi = \psi_1 + \phi(\psi_2 - \psi_1). \quad (3.9.1)$$

De esta forma, si $\phi = 0$, se recuperan las propiedades del fluido 1 y si $\phi = 1$ las del fluido 2. Así, se puede obtener una transición de las propiedades de los fluidos que será tan suave como la función ϕ . En los siguientes párrafos se discuten las maneras de resolver numéricamente modelos de flujo separado.

Para resolver problemas usando el modelo de flujo separado hay tres principales alternativas: el método de conjunto de nivel (*Level set*), el método de campo de fase (*phase field*) y el *método de malla móvil*. En los primeros dos, la función de fase obedece a la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi = F, \quad (3.9.2)$$

donde F es un término fuente (con unidades de velocidad) y difiere entre un método y otro. Si este término fuera cero, la solución numérica de la ecuación anterior se vuelve altamente inestable y es poco probable que se obtengan resultados útiles.

¹Un pseudo-continuo puede entenderse como una representación de un sistema que tiene mas de una fase como si se tratara de una sola fase.

3.9.1 Método de conjunto de nivel (Level set)

En este método la fuente está dada por la siguiente expresión no lineal (Olsson y Kreiss, 2005):

$$F = \gamma \nabla \cdot \left(\varepsilon \nabla \phi - \phi(1 - \phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right). \quad (3.9.3)$$

Donde γ es un parámetro de reinicialización (o estabilidad), mientras que ε especifica el espesor de la capa en donde ϕ cambia de cero a uno, es decir, el espesor de la interfase. Para muchas aplicaciones, es razonable fijar $\varepsilon = \ell_m/2$, siendo ℓ_m el tamaño de malla usado alrededor de la interfase o bien igual al tamaño del elemento mas grande cerca de la frontera entre los fluidos. El parámetro γ se utiliza para asegurar que los gradientes de la función ϕ estén orientados hacia la superficie libre a lo largo del tiempo. En otras palabras, el papel que juega este parámetro es el de asegurarse que las variaciones de la función ϕ estén contenidas en el espesor de la interfase. Si se fijan valores demasiado pequeños de este coeficiente se corre el riesgo de que la función ϕ se quede atrapada en el seno de alguna de las fases y dará lugar a la generación espontánea de interfases en la solución numérica y la vuelve inestable. Mientras que si su valor se fija en valores demasiado elevados suele traducirse en tiempos de cómputo excesivamente largos. Por ello, γ suele tomarse como el valor de la velocidad máxima del sistema

Por último, note que el vector unitario perpendicular a la interfase está dado por la siguiente expresión:

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \Big|_{\phi=0.5}. \quad (3.9.4a)$$

Mientras que la curvatura media se calcula mediante

$$2H = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \Big|_{\phi=0.5} \right). \quad (3.9.4b)$$

3.9.2 Método de campo de fase (Cahn-Hilliard)

El método de campo de fase es preferible cuando se estudian flujos multifásicos en donde la tensión superficial juega un papel importante. Cuando esta contribución puede ignorarse es mejor utilizar el método de conjunto de nivel. En este método, ϕ adquiere valores de -1 a 1 (ver ejercicio 3.25) y el término fuente F juega el papel de un minimizador de la energía libre del sistema mediante un parámetro de movilidad que obedece a la ecuación de Cahn y Hilliard (1958) :

$$F = \nabla \cdot (\gamma \nabla G), \quad (3.9.5)$$

donde γ en este modelo representa la movilidad y G es el potencial químico. La movilidad determina la escala temporal del término difusivo de Cahn-Hilliard y debe ser al mismo tiempo lo suficientemente grande para garantizar que el espesor de la interfase sea constante y suficientemente pequeño para no sobrecompensar al término convectivo (Yue y col., 2004). En Comsol Multiphysics, la movilidad se calcula de acuerdo a la siguiente expresión:

$$\gamma = \chi \varepsilon^2. \quad (3.9.6)$$

Aquí, ε de nuevo representa el espesor de la interfase el cual se supone, en general, mayor que el espesor real de la interfase física (Jacqmin, 1999). Por su parte, χ es un parámetro ajustable que no debe ser suficientemente grande para garantizar la estabilidad de la solución numérica pero, al mismo tiempo, suficientemente pequeño para dar como resultado una interfase bien definida. Su orden de magnitud se propone que sea como sigue:

$$\chi = \mathbf{O} \left(\frac{\nu}{\sigma} \right). \quad (3.9.7)$$

Siendo σ , la tensión superficial. Por su parte, el potencial químico se define como

$$G = \frac{\lambda}{\varepsilon^2} [-\varepsilon^2 \nabla^2 \phi + \phi(\phi^2 - 1)]. \quad (3.9.8)$$

En esta expresión, λ es la densidad de energía de mezclado y está relacionada con la tensión superficial y el espesor de la interfase mediante la siguiente expresión (Jacqmin, 1999):

$$\lambda = \frac{3\sqrt{2}\varepsilon\sigma}{4}. \quad (3.9.9)$$

Note que al sustituir las ecuaciones (3.9.8) y (3.9.5) en la ecuación (3.9.2) se obtiene una ecuación diferencial de cuarto orden para ϕ . Una alternativa es expresar al modelo resultante como un sistema de dos ecuaciones. Para el caso en el que los fluidos sean incompresibles, la ecuación de la función de fase satisface la siguiente ecuación diferencial escrita en forma conservativa:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\mathbf{v}\phi - \frac{\gamma\lambda}{\varepsilon^2} \nabla \psi \right) = 0. \quad (3.9.10)$$

En donde la variable auxiliar ψ se define como

$$\psi = -\varepsilon^2 \nabla^2 \phi + \phi(\phi^2 - 1). \quad (3.9.11)$$

La forma conservativa es deseable ya que da lugar a la conservación numérica exacta de la integral de ϕ , aunque su tiempo de cómputo suele ser mayor que cuando se usa la forma no conservativa. En algunos casos, existen fuentes externas de energía libre y la ecuación anterior se expresa como

$$\psi = -\varepsilon^2 \nabla^2 \phi + \phi(\phi^2 - 1) + \frac{\varepsilon^2}{\lambda} \frac{\partial f}{\partial \phi}. \quad (3.9.12)$$

Aquí, f denota la energía libre externa. Una vez que se haya resuelto el problema, puede calcularse la curvatura media de la interfase mediante la siguiente expresión:

$$2H = (1 - \phi^2) \frac{G}{\sigma}. \quad (3.9.13)$$

Tanto el método de campo de fase como el de conjunto de nivel inducen un término volumétrico en la ecuación de Navier-Stokes, de tal manera que, para el método de campo de fase, dicha ecuación puede escribirse como sigue:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = \nabla \cdot (-p\mathbf{l} + \boldsymbol{\tau}) + \rho \mathbf{g} + G \nabla \phi, \quad (3.9.14a)$$

mientras que en el método de conjunto de nivel, la ecuación de Navier-Stokes se expresa de la siguiente manera (Unverdi y Tryggvason, 1992; Sethian y Smereka, 2003)

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = \nabla \cdot (-p\mathbf{l} + \boldsymbol{\tau}) + \rho \mathbf{g} + \gamma H \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) \mathbf{n}. \quad (3.9.14b)$$

En donde el vector de posición \mathbf{r}_l localiza cada punto de la interfase. De hecho, en varias aplicaciones es razonable aproximar a la delta de Dirac como (Barnkob y Andersen, 2007)

$$\mathbf{n} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) \approx \nabla \phi|_{\phi=0.5}. \quad (3.9.15)$$

3.9.3 Método de malla móvil

Por último, el método de malla móvil es recomendable en problemas de superficies que no sufren cambios considerables en su estructura (es decir, no es adecuado para describir olas que se rompen o la división de burbujas). En este método, la interfase se modela como una superficie geométrica que separa dos dominios y las fuerzas superficiales y de tensión superficial se especifican directamente como condiciones de frontera. De esta forma, la malla adquiere la velocidad del fluido a cada instante del tiempo. En otras palabras, en este método se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes en cada nodo computacional de la malla en movimiento.

Para concluir esta exposición, vale la pena recalcar que, cuando no hay transferencia de masa entre las fases, la condición de salto del transporte de cantidad de movimiento se expresa como sigue (Slattery y col., 2006):

$$\nabla_s \sigma + 2H\mathbf{n}\sigma = \mathbf{n} \cdot (\mathbf{T}_2 - \mathbf{T}_1). \quad (3.9.16)$$

En la ecuación anterior, $\nabla_s = (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \nabla$ es el operador gradiente superficial. La componente normal de la ecuación anterior es

$$2H\sigma = \mathbf{n} \cdot (\mathbf{T}_2 - \mathbf{T}_1) \cdot \mathbf{n}. \quad (3.9.17a)$$

mientras que su componente tangencial es

$$\nabla_s \sigma \cdot \mathbf{t} = \mathbf{n} \cdot (\mathbf{T}_2 - \mathbf{T}_1) \cdot \mathbf{t}. \quad (3.9.17b)$$

Aquí \mathbf{t} es el vector unitario tangencial a la superficie fluido-fluido. La ecuación (3.9.17a) muestra que la tensión superficial es el resultado del balance entre los esfuerzos totales entre las fases. La ecuación (3.9.17b) muestra que los gradientes de la tensión superficial siempre inducen movimiento, lo cual se conoce como el efecto *Marangoni* (1871).

Por último, hay muchos problemas en los cuales el término viscoso del fluido dos es mucho menor que el del fluido 1 ($\tau_2 \ll \tau_1$), como ocurre en la superficie entre el agua y el aire. Estos son los problemas de *superficie libre* y permiten reducir a la ecuación (3.9.16) a la siguiente forma:

$$\nabla_s \sigma + 2H\mathbf{n}\sigma + \mathbf{n}p_2 = -\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}_1. \quad (3.9.18)$$

El método de malla móvil es recomendable para estudiar superficies libres, ya que en estos casos se evita modelar el transporte de cantidad de movimiento en la fase gaseosa, lo cual sería inevitable con los dos métodos anteriores. De hecho, en los métodos de conjunto de nivel y de campo de fase se suele utilizar una malla fija y de hecho suele requerir una malla fina en las interfases, por lo que la malla debe ser, en general, bastante densa.

Ejercicio 3.25 Demuestre que en el método de campo de fase la ecuación (3.9.1) se transforma en:

$$\psi = \psi_1 \left(\frac{1 - \phi}{2} \right) + \psi_2 \left(\frac{1 + \phi}{2} \right). \quad (3.9.19)$$

3.9.4 Método de conjunto de nivel (*Level set*)

Considere una columna de agua en donde se liberan burbujas de aire desde la superficie inferior de una forma pausada que permite evitar que las burbujas se junten entre sí. El propósito de este ejercicio es estudiar la dinámica del flujo de una burbuja de aire en el agua usando el método de *Level set* para describir el movimiento de la interfase. Bajo este enfoque numérico, puede

considerarse un modelo de una sola ecuación que describa el transporte de masa y cantidad de movimiento como sigue:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (3.9.20a)$$

$$\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \gamma H \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_I) \mathbf{n}. \quad (3.9.20b)$$

En las ecuaciones anteriores, la densidad, viscosidad, velocidad y presión están definidas en ambas fases mediante la ecuación (3.9.1). Para facilitar el análisis, se considera una porción del sistema suficientemente lejos de la entrada, de tal forma que las burbujas ascienden sólo por gravedad y, dado que se consideran suficientemente lejos unas de otras pueden ignorarse los efectos inter-burbujas. En el ejercicio 3.29 se examina el caso entre un par de burbujas. Además, se supone que el desplazamiento de la burbuja se da a lo largo del eje de simetría de la columna y que no hay gradientes de presión aplicados al agua. Por lo que el movimiento de los fluidos se debe al desplazamiento de la burbuja de aire.

El desplazamiento de la interfase se describe mediante la ecuación (3.9.2), con el término F dado en la ecuación (3.9.3). En esta versión del problema se supone que no hay aire acumulado en la parte superior de la columna, mientras que en el ejercicio 3.28 se examina la solución cuando este es el caso.

Para resolver este problema en Comsol Multiphysics, siga estos pasos:

Desplazamiento de una burbuja de aire en agua

1. Haga click en *Model Wizard* y elija *2D axisymmetric*.
2. Elija *Fluid Flow/Multiphase Flow/Two-Phase Flow, Level Set/Laminar Two-Phase Flow, Level Set*. Presione *Add* y posteriormente el botón *Study*; posteriormente seleccione *Time Dependent with Phase Initialization*, y presione *Done*.
3. En *Geometry* asigne como *Length unit* mm.
4. Haga click derecho en *Geometry* y elija *Rectangle* de anchura 5 y altura 80 mm. La esquina del rectángulo se localiza en $r = 0$ y $z = -20$ mm.
5. Haga click derecho en *Geometry* y elija *Circle* de radio 2 mm. En *Sector angle* escriba 180 y en *Rotation* escriba -90.
6. Haga click derecho en *Materials* y elija *Add material from library* y busque *Air gas* y seleccione *Add to Component 1*.
7. Repita el proceso pra agregar el material *Water, liquid* y asigne que su dominio de aplicación es el dominio 1.
8. En *Laminar Flow* habilite la casilla *Include gravity*.
9. En *Laminar Flow/Points/Pressure Point Constraint* y seleccione el punto 8.
10. Diríjase a *Two-phase flow, Level set 1/Fluid 1 properties/Fluid 1* y elija al aire; mientras que para el fluido 2 debe elegir al agua. Por último, en la sección *Surface tension*, habilite la casilla que dice *Include surface tension force in momentum equation*, elija *Library coefficient, liquid/gas interface* y elija *Water/Air*. En el ejercicio 3.30 se examina el caso en el que las burbujas son de aceite de oliva.
11. En *Wetted wall 1* seleccione las fronteras 9 y 10.
12. En *Level Set Model 1* especifique para γ el valor de 0.2. En el ejercicio 3.26 se examina la influencia de este parámetro.
13. En *Level Set* localice *Initial Values, Fluid 2*, seleccione el dominio 1. Este paso es importante para que se ubique la posición inicial del agua. Al hacer esta elección automáticamente se define también la posición inicial del aceite.
14. Haga click derecho en *Mesh 1* elija *Free triangular*. Posteriormente haga click derecho en *Free triangular* y seleccione *Size*. En el menú de *Element size*, elija en *Calibrate for* la opción *Fluid dynamics* y en *Predefined* elija *Finer*. En el ejercicio 3.27 se evalúa la

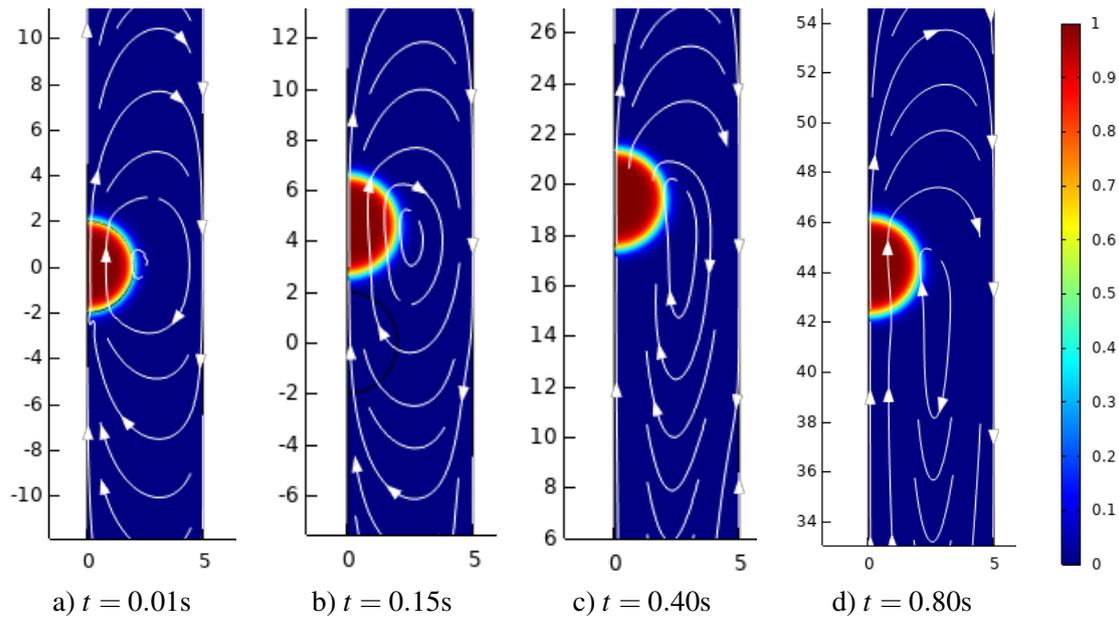


Figura 3.16: Dinámica de una burbuja de aire ascendiendo en una columna de agua. La escala de colores se refiere a la función ϕ y las líneas de corriente corresponden a la velocidad de los fluidos.

influencia de la malla computacional.

15. En *Step 2: Time Dependent* escriba el siguiente rango: (0,0.5/50,1) y presione el botón de *compute*.

En la figura 3.16 se muestra la dinámica de la burbuja de aire en el agua mediante la gráfica de la función ϕ incluyendo las líneas de corriente de la velocidad. Como puede apreciarse, a tiempos cortos las líneas de corriente de la velocidad son simétricas alrededor de la burbuja. Esta simetría se pierde rápidamente conforme pasa el tiempo y se va formando una estela detrás de la burbuja, la cual tiene un efecto sobre las burbujas vecinas como se examina en el ejercicio 3.29. Evidentemente, para modelar un sistema de burbujeo más complicado, ya no es posible continuar con la suposición de flujo axisimétrico y deben realizarse simulaciones tridimensionales, lo cual es ciertamente posible de hacer en Comsol Multiphysics aunque a un mayor costo computacional.

Ejercicio 3.26 — Influencia del parámetro γ . Resuelva de nuevo el problema para diferentes valores del parámetro γ que vayan desde 10^{-2} hasta 10. Evalúe la sensibilidad de los resultados a este parámetro y decida si el valor elegido arriba fue adecuado o no. ■

Ejercicio 3.27 — Influencia de la malla computacional. Evalúe la sensibilidad de los resultados numéricos obtenidos arriba usando mallas finas y extremadamente finas y decida si la malla utilizada fue adecuada o no en la solución del problema. ■

Ejercicio 3.28 — Encuentro con la fase gaseosa en la parte superior. En el problema resuelto arriba solo se analizó el viaje de una burbuja de aire suponiendo que en la parte superior de la columna no habían otras burbujas. El propósito de este ejercicio es modelar una situación en la que una burbuja de aire se une a varias otras que ya coalescieron y forman una fase homogénea en la parte superior de la columna. Suponga que dicha sección se ubica a partir de la posición: 50 mm y compare la dinámica de la burbuja con el caso estudiado arriba. ■

Ejercicio 3.29 — Par de burbujas. En este ejercicio se busca repetir el problema resuelto arriba pero ahora considerando dos burbujas del mismo radio, cuyos centros están inicialmente separados a una distancia de 10 mm. Compare la dinámica de ambas burbujas con la de la burbuja estudiada en esta sección. ■

Ejercicio 3.30 — Burbujas de aceite en agua. Repita el problema resuelto en esta sección pero sustituya al aire por aceite de oliva a 20 °C y compare la dinámica de las burbujas. ■

3.9.5 Flujo en una tubería con válvula de compuerta usando campo de fase (*phase field*)

Considere una tubería de sección transversal circular que inicialmente contiene agua en reposo en una sección y el resto del sistema contiene aire. El agua y el aire están separados por dos válvulas de compuerta, cuyo espesor es despreciable. Posteriormente, se abre totalmente una compuerta y solo parcialmente la segunda y se le permite fluir al agua por la tubería desplazando el aire. Por simplicidad, se considera que el sistema no tiene entradas ni salidas y se desea evaluar la dinámica del flujo de agua en el sistema modelando el desplazamiento de la interfase líquido gas usando el método de campo de fase. En el análisis puede suponer flujo incompresible y que existe un plano de simetría en la mitad del tubo. A continuación, se describen los pasos a seguir para llevar a cabo la solución numérica de este problema en Comsol Multiphysics.

Programa para modelar el desborde de un fluido en una tubería

1. En *Model Wizard*, seleccione 3D.
2. En *Fluid Flow/Multiphase Flow/Two-Phase Flow, Phase Field* seleccione *Laminar Two-Phase Flow, Phase Field* y presione el botón *Add*. Haga click en el botón *Study*.
3. En *Preset Studies for Selected Multiphysics* seleccione *Time Dependent with Phase Initialization* y presione el botón *Done*.
4. En *Geometry* elija mm como unidades de medida.
5. Haga click derecho en *Geometry* y seleccione *Cylinder*. En *Radius* escriba 5 y en *Height* 30. Desarrolle la rama de *Layers*, habilite la casilla de *Layers on bottom* y haga una capa de espesor de 10 mm. Además, en *Axis type* elija el eje *x*.
6. Haga click derecho en *Geometry* y seleccione *Work Plane* en *Plane*, elija *yz* y en *x-coordinate* elija la mitad de la caja, es decir 15 mm.
7. Haga click derecho en *Plane geometry* y seleccione *circle*. En *Radius*, escriba 5 y en *Position* en *xw* escriba 0 y en *yw* 5.
8. Haga click derecho en *Geometry 1* y seleccione *Booleans and partitions/Difference*. Substraiga al cilindro el plano de trabajo. De esta manera habrá dibujado a una compuerta totalmente abierta y a otra parcialmente abierta. Ahora se dividirá el sistema a la mitad aprovechando la simetría del flujo.
9. Haga click derecho en *Geometry 1* y seleccione *Block*. En *Width* escriba 30, en *Depth* 5 y en *Height* 10. Por último, establezca que la esquina del bloque se ubica en (0, -5, -5).
10. Haga una nueva operación booleana de diferencia y substraiga al tubo el bloque recién creado para obtener como resultado la mitad del tubo.
11. Haga click derecho en *Definitions/Selections/Explicit*. En *Geometric entity level* elija *Boundary* y seleccione las fronteras 2 y 6. Este es el plano de simetría por lo que en *Label* puede escribir *sym*.
12. Repita la operación anterior y ahora seleccione a la pared del tubo (fronteras 3, 4, 7 y 8) y en *Label* escriba *wall*.

13. Haga click derecho en *Materials* y seleccione *Add materials from library* y seleccione al Aire y elija *Add to component 1*. Repita el procedimiento para el Agua líquida. Asigne al aire al dominio 2 y al agua al dominio 1.
14. En *Laminar Flow* habilite la casilla *Include gravity* y en el vector de referencia \mathbf{r}_{ref} especifique (0,0,10 [mm]).
15. En *Laminar Flow/Initial Values* escriba lo siguiente para la presión:

$$spf.rho*g_const*(10[mm]-z)$$
 y deshabilite la casilla que dice *Compensate for hydrostatic pressure*.
16. Haga click derecho en *Laminar Flow*, seleccione *Symmetry* y elija a sym.
17. Haga click derecho en *Laminar Flow*, seleccione *Interior wall* y elija a la frontera 9.
18. Haga click derecho en *Laminar Flow/Points* y seleccione *Pressure Point Constraint*, elija al punto 11 y deshabilite la casilla *Compensate for hydrostatic pressure*.
19. En *Phase Field* elija *Phase Field Model 1* y en *Phase Field Parameters* en *Mobility tuning parameter χ* escriba 5.
20. En *Phase Field/Initial values*, *Fluid 2* seleccione al dominio 2 que es el que ocupa inicialmente el aire y elija fluido 2 ($\phi = 1$).
21. Haga click derecho en *Phase Field*, seleccione *Symmetry* y elija sym.
22. Haga click derecho en *Phase Field*, seleccione *Interior Wetted Wall* y elija a la frontera 9.
23. En *Two-Phase Flow*, *Phase Field 1* asigne que el Fluido 1 sea el agua y el fluido 2 sea el aire.
24. En *Mesh* escoja *Coarse*.
25. En *step 2: Time dependent* especifique el siguiente rango: range(0,0.005,0.5).
26. Haga click derecho en *Study 1* y elija *Get initial value*.
27. Vaya a *Volume Fraction of Fluid 1* y deshabilite la casilla *Plot data set edges*. Desarrolle el árbol y elimine *Slice 1*.
28. En *Isosurface 1*, en *Coloring and Style* en *Color* cambie *Gray* por *Custom* y escoja los valores de RGB: 54, 140, 203.
29. Haga click derecho en *Volume Fraction of Fluid 1* y elija *Surface* y en *Expression* escriba 1 y elija un color uniforme y gris.
30. Haga click derecho en *Surface 1* y elija *Selection* y elija a las fronteras de wall (3, 4, 7 y 8).
31. Vuelva a crear una superficie y en *Expression* escriba $pf.Vf1$. En *Manual color range* escribe 0.5 para los valores máximo y mínimo. Mientras que en *Manual data range* escriba 0.5 y 1 para los valores mínimo y máximo. Además, expanda la rama de *Quality* y en *Smoothing* elija *None*. Más abajo, en *Inherit style* elija a *Isosurface 1*.
32. Haga click derecho en *Surface 2* y elija *Selection* y elija a las fronteras de sym (2 y 6).
33. Vuelva a crear una superficie y en *Expression* escriba 1 y elija un color uniforme y que sea negro.
34. Haga click derecho en *Surface 3* y elija *Selection* y elija a la frontera 9.
35. Desarrolle *Solver configurations/Solution 1/Dependent variables 2* en *Pressure (comp1.p)* en *Scaling* cambie el método a manual y en *Scale* escriba 100. Más abajo, en *Velocity field* haga lo mismo y en *Scale* escriba 1.
36. En *Study 1* presione *Compute*.

En la figura 3.17 se presenta un ejemplo de la dinámica de la fase agua en el sistema. Como puede notarse, los cambios más significativos tienen lugar a tiempos cortos y en menos de 0.5 s el agua llega al extremo derecho del tubo. Como el tubo está cerrado, se genera un oleaje cuando el fluido llega a esta frontera. En cuanto a la velocidad de los fluidos, se aprecia el flujo de aire

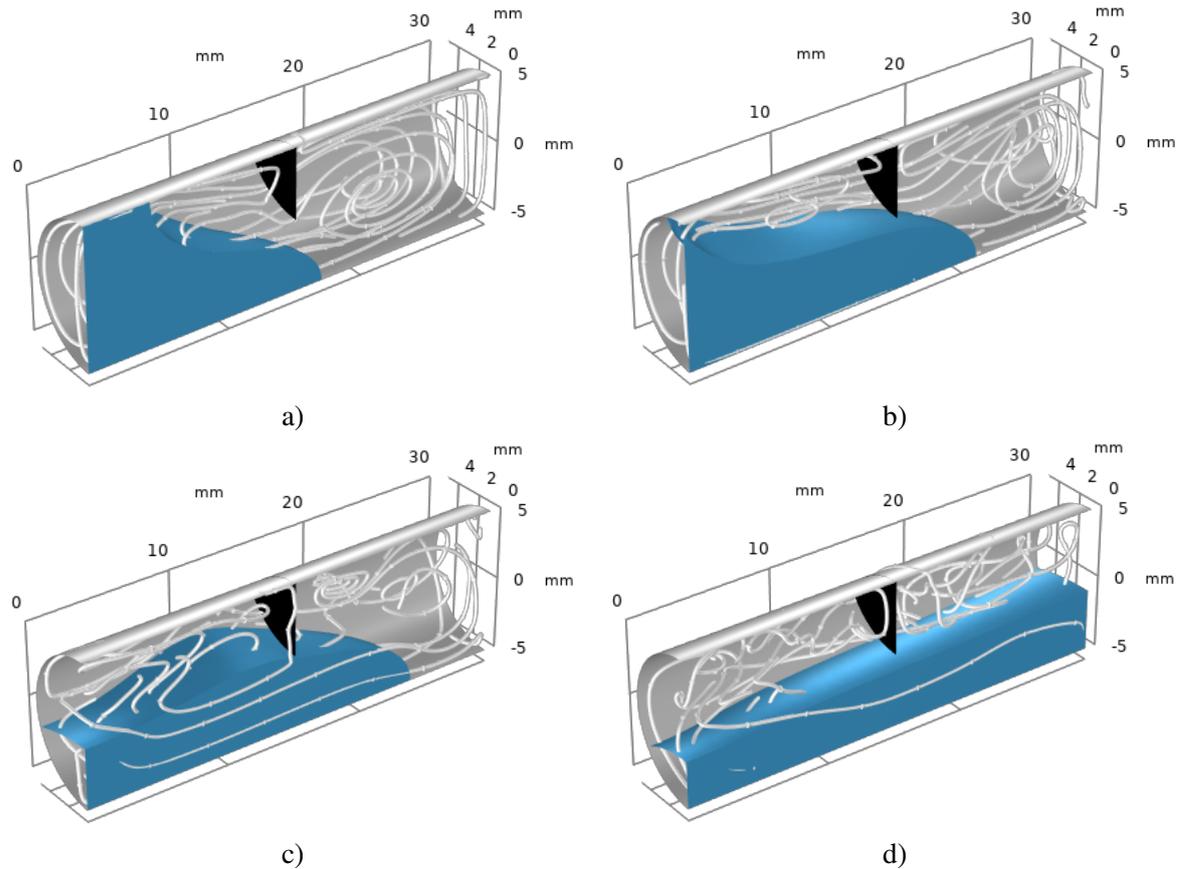


Figura 3.17: Dinámica de la fase agua para a) $t = 0.05$ s; b) $t = 0.1$ s; c) $t = 0.15$ s y d) $t = 0.5$ s. Las líneas de corriente corresponden a la velocidad del agua y del aire.

de derecha a izquierda conforme pasa el tiempo de tal manera que poco a poco se balancean las fuerzas en ambos compartimentos del tubo. Este comportamiento del fluido se ve alterado si se le permite la salida al fluido como se discute en el ejercicio 3.31.

Ejercicio 3.31 — Modelado con salida de fluido. En este problema se busca estudiar el efecto de tener la frontera derecha abierta al flujo. Establezca que a la salida del tubo los fluidos están expuestos a la presión atmosférica y analice las diferencias entre los resultados.

3.9.6 Malla móvil

Para ilustrar esta técnica numérica se recurre al problema clásico del vaciado de agua desde un tanque cilíndrico que tiene un tubo vertical colocado en su parte inferior. En el ejercicio 3.33 se examina el caso en el que el tubo de descarga es horizontal. Suponiendo flujo newtoniano e incompresible, las ecuaciones que rigen la conservación de masa y de cantidad de movimiento en cada punto del sistema son

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\beta = 0, \quad (3.9.21a)$$

$$\rho_\beta \frac{\partial \mathbf{v}_\beta}{\partial t} + \rho_\beta \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \mathbf{v}_\beta = -\nabla p_\beta + \rho_\beta \mathbf{g} + \mu_\beta \nabla^2 \mathbf{v}_\beta. \quad (3.9.21b)$$

En la superficie superior del líquido (\mathcal{A}_s) en el tanque se supone que no hay transferencia de masa, por lo que la condición de frontera es

$$\mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot (\mathbf{T}_\beta - \mathbf{T}_\gamma) = \nabla_s \sigma + 2H\mathbf{n}_{\beta\gamma}\sigma, \quad \text{en } \mathcal{A}_s. \quad (3.9.21c)$$

En la ecuación anterior, $\mathbf{T}_\beta = -p_\beta \mathbf{I} + \mu_\beta (\nabla \mathbf{v}_\beta + \nabla \mathbf{v}_\beta^T)$, mientras que en el aire superior pueden despreciarse los esfuerzos cortantes, por lo que $\mathbf{T}_\gamma = -p_\gamma \mathbf{I}$. Además, σ representa la tensión superficial y $2H = \nabla_s \cdot \mathbf{n}_{\beta\gamma}$ es la curvatura media de la interfase. Además, dado que el agua está deslizando por las paredes del depósito (\mathcal{A}_D) hacia el fondo, es razonable imponer una condición de deslizamiento de Navier (1822) en dichas superficies:

$$\mathbf{v}_\beta = -\xi \lambda (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot [\mathbf{n} \cdot (\nabla \mathbf{v}_\beta + \nabla \mathbf{v}_\beta^T)], \quad \text{en } \mathcal{A}_D. \quad (3.9.21d)$$

Por el contrario, en las paredes internas del tubo de descarga (\mathcal{A}_d) se impone la condición de no deslizamiento

$$\mathbf{v}_\beta = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_d. \quad (3.9.21e)$$

En la superficie de salida del tubo de descarga la presión es la atmosférica por lo que

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}_\beta = -p_\gamma \mathbf{n}. \quad (3.9.21f)$$

Por último, la geometría del sistema permite resolverlo en solo la mitad de él a partir de una condición de simetría radial:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial r} = \mathbf{0}, \quad \text{en } r = 0. \quad (3.9.21g)$$

Por simplicidad se considera que el sistema se encontraba bajo condiciones hidrostáticas al inicio. Este problema se resolverá en forma dimensional en los siguientes párrafos considerando el movimiento de la columna de agua. Para simplificar el análisis, se utiliza el cambio de variable $p = p_\beta - p_\gamma$. A continuación se listan los pasos a seguir para resolver numéricamente este problema en Comsol Multiphysics.

Programa del vaciado de un tanque

1. Haga click en *Model wizard* y elija *2D axisymmetric*. Posteriormente, en física elija *Fluid Flow/Multiphase Flow/Two-phase flow, Moving Mesh/Laminar two-phase flow, moving mesh*. Presione el botón *Add* y posteriormente el botón *Study*. En el siguiente menú elija *Time dependent* y por último presione el botón *Done*.
2. Haga click derecho en *Geometry/Rectangle* y especifique un ancho de 0.5 m y una altura de 1 m. Repita esta operación para generar un segundo rectángulo el cual tiene una anchura de 0.1 m y su esquina está localizada en (0,-1).
3. Para eliminar las fronteras internas haga click derecho en *Geometry/Booleans and Partitions/Union* y seleccione a los dos rectángulos dibujados en el paso anterior y deshabilite la casilla que dice *Keep interior boundaries*. Por último, presione el botón *Build all objects*.
4. En este caso no es necesario especificar detalles sobre el movimiento de la malla pues adquirirá los valores de la velocidad del fluido, por lo que la atención se centrará ahora en el planteamiento del modelo de flujo de fluidos. En *Laminar Flow* habilite la casilla que dice *Include gravity* y en *Reference position* especifique la componente z del vector de referencia es 1 (la altura del tanque).
5. En *Laminar Flow/Fluid Properties 1* cambie la densidad y viscosidad de *From material* a *User defined* y no cambie los valores que aparecen ya que corresponden a las propiedades del agua a temperatura ambiente.
6. En *Laminar Flow/Initial values 1* en *Pressure* escriba:

```
spf.rho*g_const*(1-z)
```

y deshabilite la casilla que dice *Compensate for hydrostatic pressure*.

7. Haga click derecho en *Laminar Flow/Outlet*, seleccione la frontera 2 y deshabilite la casilla que dice *Compensate for hydrostatic pressure*. De esta forma se especifica que la presión del fluido es la atmosférica, o bien $p = 0$.
8. Haga click derecho en *Laminar Flow* y elija *Wall* y seleccione a las fronteras 6 y 7 que son las fronteras en las que se establece la condición de deslizamiento de Navier. Para ello, en *Wall condition* seleccione *Navier slip*.
9. Por último, haga click derecho en *Laminar Flow/Fluid interface features/Free surface* y seleccione a la frontera 4. No tiene que hacer mas cambios ya que por default Comsol tiene la tensión superficial del agua en la interfase con el aire.
10. Haga click derecho en *Mesh 1* y elija *Free triangular*. Posteriormente, haga click derecho en *Free Triangular* y seleccione *Size* en *Calibrate for* elija *Fluid dynamics* y presione el botón *Build All*.
11. Haga click derecho en *Study 1* y elija *Get initial value*. Posteriormente, en *Study 1/Step1: Time Dependent* y en *Output times* escriba $\text{range}(0,0.1,5.9)$. Además, desarrolle la pestaña que dice *Results while solving* y habilite la casilla de *Plot* y elija *Velocity, 3D (spf)*. Por último, presione el botón *Compute*. De esta forma, mientras se resuelve el problema podrá apreciar cómo se mueve el fluido en el tanque.

En la figura 3.18 se ilustran algunos resultados de la simulación numérica de la velocidad en el sistema a diferentes tiempos. Como puede apreciarse, a tiempos cortos, los cambios más importantes de la velocidad ocurren cerca de la superficie en contacto con el tubo de descarga. De hecho, en dicho tubo se establece rápidamente un perfil en estado cuasiestacionario. Conforme va aumentando el tiempo, más y más porciones del fluido en el tanque se ven afectadas por el proceso de desagüe hasta llegar a una altura mínima. En un sistema experimental se observaría además la presencia de burbujas de aire y la formación de torbellinos turbulentos en la superficie de salida del tanque. Por lo que los resultados presentados aquí deben considerarse como aproximados cuando esta situación se presenta. En el ejercicio 3.32 se examina el efecto que tiene considerar diferentes tubos de salida.

Ejercicio 3.32 — Análisis con diferentes tubos de salida. Repita el ejercicio visto aquí y examine el papel que juegan tanto el diámetro del tubo de salida como su longitud. Pruebe al menos lo que sucede cuando se aumenta al doble el radio y la longitud del tubo de descarga como cuando se disminuyen a la mitad dichas longitudes. ■

Ejercicio 3.33 — Descarga mediante un tubo horizontal. Reconsidere el problema visto aquí pero ahora coloque el tubo de descarga en una posición horizontal. En esta configuración ya no es posible seguir utilizando un modelo 2D axisimétrico y debe usarse un modelo tridimensional. ■

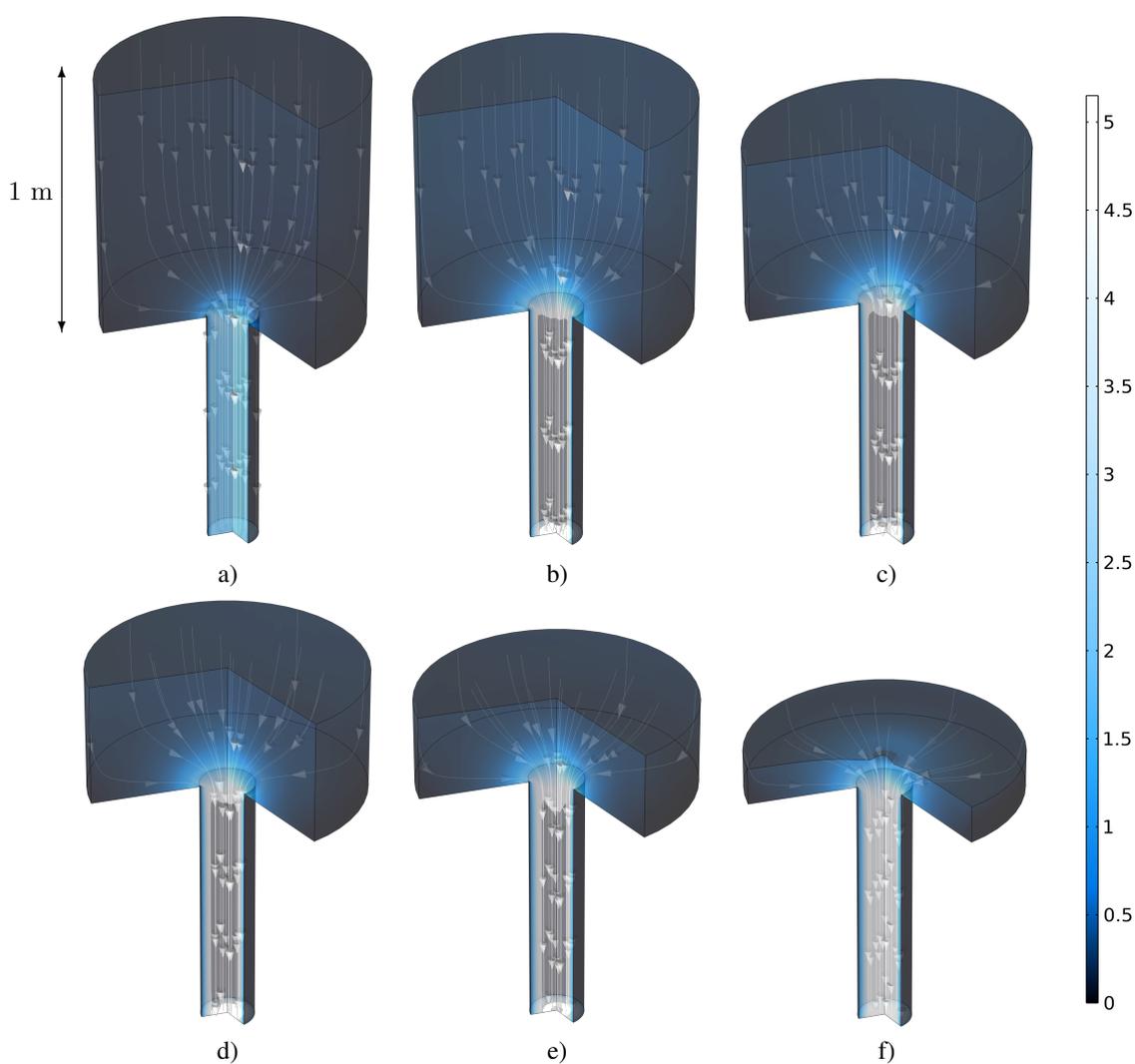
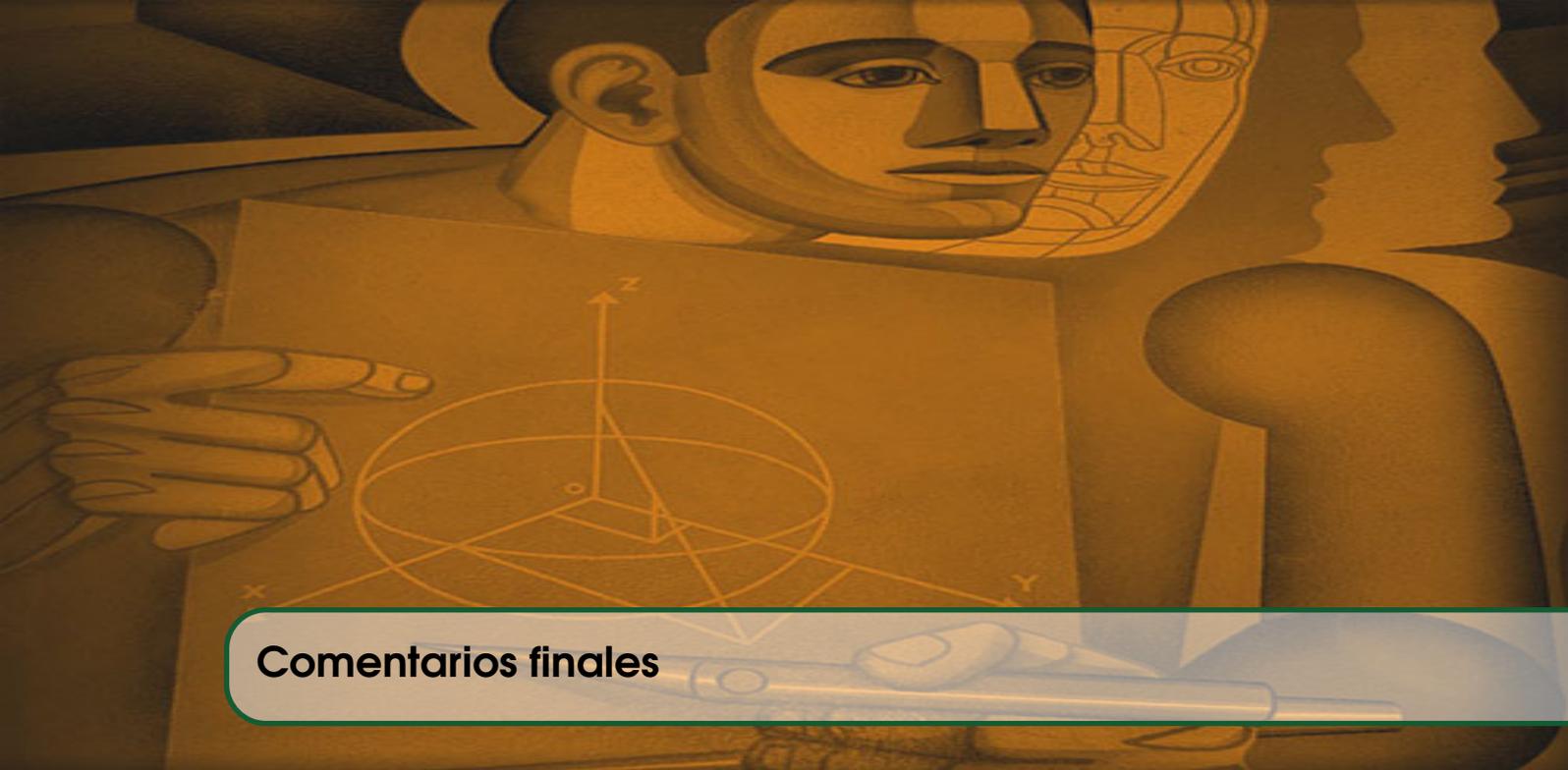


Figura 3.18: Dinámica del vaciado de un tanque para: a) $t = 0.1$ s, b) $t = 1$ s, c) $t = 2.5$ s, d) $t = 3.5$ s, e) $t = 4.5$ s y f) $t = 5.9$ s. La escala de colores y las líneas de corriente se refieren a la magnitud de la velocidad.

An illustration in a warm, golden-brown color palette. It depicts a person's head and hand. The hand is pointing towards a 3D coordinate system with x, y, and z axes. The coordinate system shows a sphere and a rectangular prism. The person's face is partially visible, looking towards the diagram. The background is dark and abstract.

Comentarios finales

En este texto se presenta un primer acercamiento de la solución numérica de varios modelos matemáticos encontrados en cursos de fenómenos de transporte. La intención de este texto es que pueda usarse como material de consulta en cursos tradicionales (teóricos o experimentales) de fenómenos de transporte así como en el curso optativo de fenómenos de transporte computacionales. En la actualidad, no debe limitarse la enseñanza de fenómenos de transporte a problemas clásicos que tienen solución analítica como se hacía hace medio siglo. Las simulaciones numéricas han adquirido un papel cada vez más importante en los últimos 20 años, en especial debido al incremento en las capacidades de cómputo y en el desarrollo de software especializado.

Motivado por lo anterior es que se preparó el presente texto. Se partió de un repaso de las ecuaciones fundamentales de fenómenos de transporte y posteriormente se presentaron los fundamentos y algunas aplicaciones del método de diferencias finitas. Las aplicaciones son mayoritariamente de nivel licenciatura aunque se incluyeron algunos temas de posgrado como el uso de funciones de Green para la solución de problemas no lineales. Más aún, la última parte del texto que trató sobre la aplicación del software de elemento finito Comsol Multiphysics en algunos problemas particulares de ingeniería. La elección de los problemas responde a inquietudes que me han compartido varios alumnos y colegas docentes, así como a intereses de investigación particulares de la línea de investigación que desarrollo que trata sobre fenómenos de transporte en sistemas de escalas múltiples. Espero sinceramente que el texto haya sido útil e interesante para docentes y alumnos y tengan por seguro que he dado lo mejor de mi en la preparación de este material.

Sinceramente, muchas gracias por acompañarme en este texto y cualquier comentario o sugerencia para mejorar el contenido siempre será bienvenido.

Francisco J. Valdés Parada



Bibliografía

- Aguilar-Madera, C.G., Baz-Rodríguez, S.A., Ocampo-Pérez, R. (2015). Effective mass diffusion and dispersion in random porous media. *The Canadian Journal of Chemical Engineering* **93**, 756–765.
- Aris, R. (1957). On shape factors for irregular particles—i. *Chemical Engineering Science* **6**, 262–268.
- Aris, R. (1994). *Mathematical Modelling Techniques (Dover Books on Computer Science)*. Dover Publications.
- Auriault, J.L., Boutin, C., Geindreau, C. (2009). *Homogenization of Coupled Phenomena in Heterogenous Media*. ISTE & Wiley.
- Barnkob, R., Andersen, M. (2007). Two Phase Flow by Level Set Method. Technical University of Denmark. 1 edición.
- Batchelor, G.K. (2000). *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press.
- Beavers, G., Joseph, D. (1967). Boundary conditions at a naturally permeable wall. *Journal of Fluid Mechanics* **30**, 197.
- Bird, R.B., Stewart, W.E., Lightfoot, E.N. (2006). *Transport Phenomena, Revised 2nd Edition*. John Wiley & Sons, Inc.
- Bird, R.B., Stewart, W.E., Lightfoot, E.N., Klingenberg, D.J. (2014). *Introductory Transport Phenomena*. John Wiley & Sons Inc.
- Bourbatache, M.K., Millet, O., Moyne, C. (2020). Upscaling diffusion-reaction in porous media. *Acta Mechanica* **231**, 2011–2031.
- Burghardt, A., Kubaczka, A. (1996). Generalization of the effectiveness factor for any shape of a catalyst pellet. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* **35**, 65–74.

- Cahn, J.W., Hilliard, J.E. (1958). Free energy of a nonuniform system. i. interfacial free energy. *The Journal of Chemical Physics* **28**, 258–267.
- Callen, H.B. (1985). *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. John Wiley & Sons.
- Carman, P.C. (1956). *Flow of gases through porous media*. Butterworths.
- Darcy, H. (1856). *Les fontaines publiques de la ville de Dijon : exposition et application des principes à suivre et des formules à employer dans les questions de distribution d'eau*. V. Dalmont (Paris).
- Deen, W.M. (1998). *Analysis of Transport Phenomena (Topics in Chemical Engineering)*. Oxford University Press.
- Farmer, R.C., Pike, R.W., Cheng, G.C., Chen, Y.S. (2009). *Computational Transport Phenomena for Engineering Analyses*. CRC Press.
- Fick, A. (1855). Ueber diffusion. *Annalen der Physik und Chemie* **170**, 59–86.
- Fourier, J.B.J. (1878). *The Analytical Theory of Heat*. Cambridge University Press.
- Gershenfeld, N. (1998). *The Nature of Mathematical Modeling*. Cambridge University Press.
- Gray, W., Gray, G. (2017). *Introduction to Environmental Modeling*. Cambridge University Press.
- Gray, W.G. (1975). A derivation of the equations for multi-phase transport. *Chemical Engineering Science* **30**, 229–233.
- Haberman, R. (2012). *Applied Partial Differential Equations with Fourier Series and Boundary Value Problems (Featured Titles for Partial Differential Equations)*. Pearson. fifth edición.
- Hand, B., Cashman, A. (2020). A review on the historical development of the lift-type vertical axis wind turbine: From onshore to offshore floating application. *Sustainable Energy Technologies and Assessments* **38**, 100646.
- Herrera, I., Pinder, G. (2012). *Mathematical Modeling in Science and Engineering: An axiomatic approach*. Wiley-Blackwell.
- Himmelblau, D.M., Bischoff, K.B. (1968). *Process Analysis and Simulation. Deterministic Systems*. John Wiley & Sons Inc.
- Hinch, E.J. (2020). *Think Before You Compute: A Prelude to Computational Fluid Dynamics*. CAMBRIDGE.
- Howes, F.A., Whitaker, S. (1985). The spatial averaging theorem revisited. *Chemical Engineering Science* **40**, 1387–1392.
- Jacqmin, D. (1999). Calculation of two-phase navier–stokes flows using phase-field modeling. *Journal of Computational Physics* **155**, 96–127.
- Katsikadelis, J.T. (2016). *The Boundary Element Method for Engineers and Scientists: Theory and Applications*. ACADEMIC PR INC.
- Keke Zhang, X.L. (2017). *Theory and Modeling of Rotating Fluids*. Cambridge University Press.

- Kozeny, J. (1927). Ueber kapillare leitung des wassers im boden. *Sitzungsber Akad. Wiss., Wien* **136**, 271–306.
- Marangoni, C. (1871). Sul principio della viscosita' superficiale dei liquidi stabilito dalsig. j. plateau. *Il Nuovo Cimento* **5-6**, 239–273.
- Mauri, R. (2015). *Transport Phenomena in Multiphase Flows*. Springer-Verlag GmbH.
- Navier, M. (1822). *Mémoire sur les lois du mouvement des fluides*. volumen 6. l'Académie Royale des Sciences.
- Neale, G., Nader, W. (1974). Practical significance of Brinkman's extension of Darcy's law: Coupled parallel flows within a channel and a bounding porous medium. *The Canadian Journal of Chemical Engineering* **52**, 475–478.
- Nelson, V. (2020). *Innovative wind turbines : an illustrated guidebook*. CRC press, Taylor & Francis Group, Boca Raton, FL.
- Ochoa-Tapia, J., Valdés-Parada, F., Goyeau, B., Lasseux, D. (2017). Fluid motion in the fluid/porous medium inter-region. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* **16**, 923–938.
- Olsson, E., Kreiss, G. (2005). A conservative level set method for two phase flow. *Journal of Computational Physics* **210**, 225–246.
- Pepper, D.W., Heinrich, J.C. (2017). *The Finite Element Method: Basic Concepts and Applications with Matlab, Maple, and Comsol, Third Edition*. CRC PR INC.
- Ray, N., Rupp, A., Schulz, R., Knabner, P. (2018). Old and new approaches predicting the diffusion in porous media. *Transport in Porous Media* **124**, 803–824.
- Schaffarczyk, A.P. (2014). *Introduction to Wind Turbine Aerodynamics*. Springer Berlin Heidelberg.
- Sethian, J.A., Smereka, P. (2003). Level set methods for fluid interfaces. *Annual Review of Fluid Mechanics* **35**, 341–372.
- Slattery, J.C. (1999). *Advanced Transport Phenomena (Cambridge Series in Chemical Engineering)*. Cambridge University Press.
- Slattery, J.C., Sagis, L., Oh, E.S. (2006). *Interfacial Transport Phenomena*. Springer-Verlag GmbH.
- Smith, G. (1985). *Numerical Solution of Partial Differential Equations*. OUP Oxford.
- Stokes, G.G. (1842). On the steady motion of incompressible fluids, en: *Mathematical and Physical Papers vol.1*. Cambridge University Press, pp. 1–16.
- Stokes, G.G. (1880). On the theories of the internal friction of fluids in motion, and of the equilibrium and motion of elastic solids, en: *Mathematical and Physical Papers vol.1*. Cambridge University Press, pp. 75–129.
- Unverdi, S.O., Tryggvason, G. (1992). A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics* **100**, 25–37.
- Šolin (2005). *Finite Element Method*. John Wiley & Sons.
- Valdés-Parada, F., Aguilar-Madera, C., Álvarez-Ramírez, J. (2011). On diffusion, dispersion and reaction in porous media. *Chemical Engineering Science* **66**, 2177–2190.

- Valdes-Parada, F., Alvarez-Ramirez, J. (2010). On the effective diffusivity under chemical reaction in porous media. *Chemical Engineering Science* **65**, 4100–4104.
- Valdes-Parada, F., Alvarez-Ramirez, J., Ochoa-Tapia, J. (2005). An approximate solution for a transient two-phase stirred tank bioreactor with nonlinear kinetics. *Biotechnology Progress* **21**, 1420–1428.
- Valdés-Parada, F., Alvarez-Ramírez, J., Ochoa-Tapia, J. (2007). Análisis de problemas de transporte de masa y reacción mediante funciones de Green. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* **6**, 283–294.
- Valdés-Parada, F.J., Aguilar-Madera, C.G., Ochoa-Tapia, J.A., Goyeau, B. (2013). Velocity and stress jump conditions between a porous medium and a fluid. *Advances in Water Resources* **62**, 327–339.
- Valdés-Parada, F.J., Lasseux, D., Bellet, F. (2016). A new formulation of the dispersion tensor in homogeneous porous media. *Advances in Water Resources* **90**, 70–82.
- Valdés-Parada, F.J., Lasseux, D., Whitaker, S. (2017). Diffusion and heterogeneous reaction in porous media: The macroscale model revisited. *International Journal of Chemical Reactor Engineering* **15**.
- Valdés-Parada, F.J., Lasseux, D., Whitaker, S. (2020). Upscaling reactive transport under hydrodynamic slip conditions in homogeneous porous media. *Water Resources Research* **56**.
- Valdés-Parada, F.J., Ochoa-Tapia, J.A., Alvarez-Ramirez, J. (2007). Diffusive mass transport in the fluid–porous medium inter-region: Closure problem solution for the one-domain approach. *Chemical Engineering Science* **62**, 6054–6068.
- Versteeg, H., Malalasekera, W. (2007). *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method (2nd Edition)*. Pearson.
- Whitaker, S. (1983). *Fundamental Principles of Heat Transfer*. Krieger Publishing Company.
- Whitaker, S. (1986). Flow in porous media i: A theoretical derivation of Darcy’s law. *Transport in Porous Media* **1**, 3–25.
- Whitaker, S. (1992). *Introduction to Fluid Mechanics*. Krieger Pub Co.
- Whitaker, S. (1996). The Forchheimer equation: A theoretical development. *Transport in Porous Media* **25**, 27–61.
- Whitaker, S. (1999). *The Method of Volume Averaging*. Springer Netherlands.
- Whitaker, S. (2009). Newton’s laws, Euler’s laws and the speed of light. *Chemical Engineering Education* **43**, 96–103.
- Yue, P., Feng, J., Liu, C., Shen, J. (2004). A diffuse-interface method for simulating two-phase flows of complex fluids. *Journal of Fluid Mechanics* **515**, 293–317.