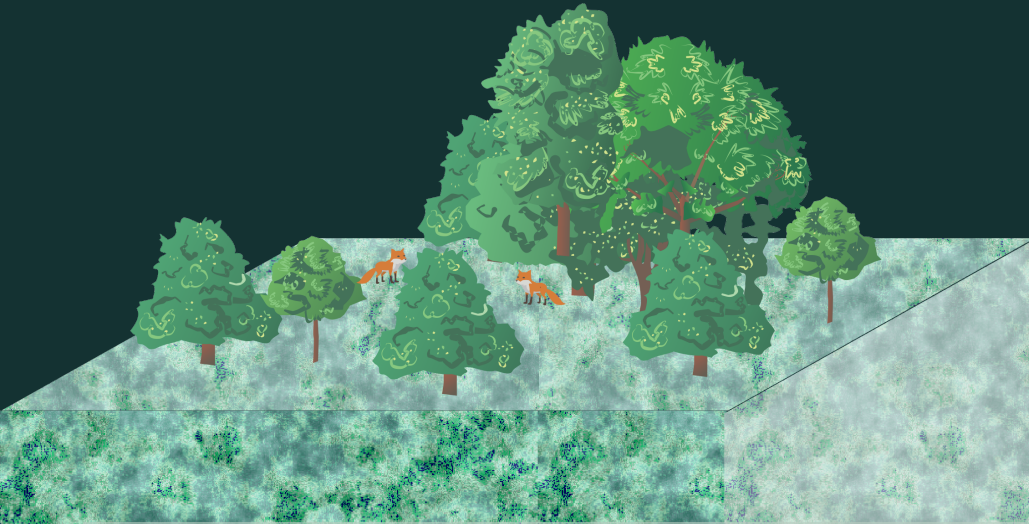




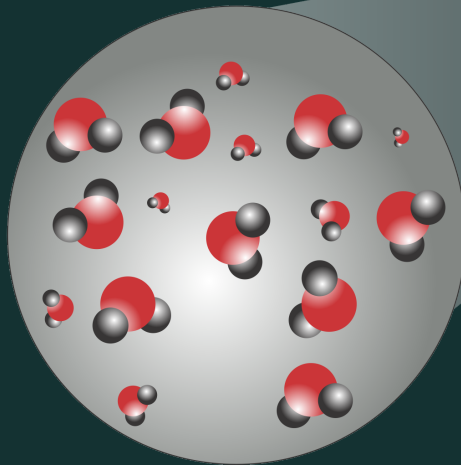
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA
Unidad Iztapalapa

Colección CBI

Libro de texto



Modelado matemático en sistemas de escalas múltiples



Francisco J. Valdés-Parada

Modelado matemático en sistemas de escalas múltiples

Francisco J. Valdés-Parada

Libro de texto



Casa abierta al tiempo

Dr. José Antonio de los Reyes Heredia

Rector General

Dra. Norma Rondero López

Secretaria General

Dra. Verónica Medina Bañuelos

Rector de la Unidad Iztapalapa

Dr. Juan José Ambriz García

Secretario de Unidad

Dr. Román Linares Romero

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

Modelado matemático en sistemas de escalas múltiples

© UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA-IZTAPALAPA

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

ISBN Colección: 978-607-477-998-1

ISBN Volumen: 978-607-28-2579-6

Impreso en México / Printed in Mexico



Índice general

1	Introducción al modelado matemático	11
1.1	Objetivo y organización del capítulo	11
1.2	Concepto de modelo	11
1.3	Enseñanza del modelado matemático	11
1.4	Clasificación de los modelos matemáticos	12
1.5	Algunas definiciones fundamentales	15
1.5.1	Variables de estado	15
1.5.2	Estado estacionario, estado estable y estado de equilibrio	15
1.5.3	Modelos distribuidos y agrupados	17
1.5.4	Modelos lineales y no lineales	17
1.5.5	Mecanismos de cambio	18
1.5.6	Difusión y dispersión	18
1.6	Escalas espaciales y temporales	19
1.6.1	Nivel de escala del continuo y concepto de REV	19
1.6.2	Longitudes de escala	20
1.6.3	Escalas temporales	22
1.7	Algunos números adimensionales	22
1.7.1	Número de Mach	22
1.7.2	Número de Reynolds	22
1.7.3	Número de Prandtl	23
1.7.4	Número de Schmidt	23
1.7.5	Número de Péclet	23
1.7.6	Números de Biot, Nusselt y Sherwood	24
1.7.7	Módulo de Thiele y número de Damköhler	24
1.7.8	Números de Bond, capilar y de Weber	25
1.8	Comentarios finales	25
2	Instrumental matemático	27
2.1	Introducción	27
2.2	Escalares, vectores y tensores	27

2.3	Producto diádico y transpuestas de tensores	29
2.4	Producto punto o interno	31
2.5	Derivadas temporales	35
2.6	Teoremas integrales	35
2.6.1	Teorema de la divergencia	35
2.6.2	Teorema general del transporte	38
2.6.3	Teorema del promediado espacial	41
2.7	Comentarios finales	43
3	Transporte de masa	45
3.1	Introducción	45
3.2	Modelo macroscópico de la conservación de masa total	45
3.3	Aplicaciones del modelo macroscópico de conservación de masa	48
3.3.1	Extracción de agua de un cilindro	48
3.3.2	Vaciado de un tanque	50
3.4	Modelo de conservación de masa total a escala microscópica	53
3.4.1	Ecuación de continuidad	53
3.4.2	Condición de salto de masa en una interfase	54
3.5	Modelo macroscópico de conservación de masa de una especie	57
3.6	Forma microscópica de conservación de masa de una especie	60
3.6.1	Ecuación diferencial a escala microscópica	60
3.6.2	Versión adimensional de la forma microscópica del principio de conservación de masa de una especie	62
3.6.3	Condición interfacial para la transferencia de masa de una especie	63
3.7	Aplicaciones del modelo macroscópico de conservación de masa	66
3.7.1	Aplicación del balance macroscópico a un CSTR	66
3.7.2	Modelado del transporte de contaminantes en un lago	70
3.8	Comentarios finales	72
4	Transporte de cantidad de movimiento	75
4.1	Introducción	75
4.2	Forma macroscópica de conservación de cantidad de movimiento	75
4.3	Forma microscópica de conservación de cantidad de movimiento	78
4.3.1	Ecuación de Navier-Stokes	78
4.3.2	Versión adimensional de la ecuación de Navier-Stokes	80
4.3.3	Condición de frontera entre fases	81
4.4	Ejemplo de aplicación: Fuerza de un fluido en un codo	83
4.5	Ecuación macroscópica de energía mecánica	89
4.5.1	Deducción del modelo	89
4.5.2	Aplicación al problema de flujo en un codo	93
4.6	Versión microscópica de la ecuación de energía mecánica	94
4.7	Comentarios finales	95
5	Transferencia de calor	97
5.1	Introducción	97
5.2	Primera ley de la termodinámica	97
5.3	Ecuación de energía térmica: Formas macroscópica y microscópica	100
5.4	Ley de Fourier	103

5.5	Condiciones de frontera	105
5.5.1	Condición de salto del flux de calor	105
5.5.2	Condición de salto de la temperatura	107
5.6	Aplicación: Enfriamiento de una hamburguesa	107
5.7	Comentarios finales	111
6	Transporte en medios porosos	113
6.1	Introducción	113
6.2	Elementos para llevar a cabo el escalamiento	114
6.2.1	Definiciones fundamentales	114
6.2.2	Adaptación de los teoremas integrales	116
6.2.3	Descomposición espacial y expansión en series de Taylor y de potencias	117
6.2.4	Métodos del promedio volumétrico y homogenización	118
6.3	Flujo inercial en medios porosos	120
6.3.1	Promediado de la ecuación de continuidad	121
6.3.2	Escalamiento de la ecuación de conservación de cantidad de movimiento	121
6.3.3	Solución del problema de cerradura	128
6.4	Convección, difusión y reacción en medios porosos	130
6.4.1	Promediado	130
6.4.2	Cerradura	132
6.4.3	Modelo cerrado	135
6.4.4	Solución del problema de cerradura	137
6.4.5	Validación de modelos macroscópicos de transporte reactivo de una especie química en medios porosos	140
6.5	Transferencia de calor en medios porosos	143
6.5.1	Planteamiento del modelo	143
6.5.2	Promediado	144
6.5.3	Modelo de no equilibrio y dos ecuaciones	145
6.5.4	Modelo de equilibrio	150
6.5.5	Modelo de no equilibrio y una ecuación	153
6.5.6	Resumen de los modelos de medio efectivo	156
6.6	Comentarios finales	157
7	Ecuaciones diferenciales parciales	159
7.1	Introducción	159
7.2	Preliminares	160
7.2.1	Acerca de la solución de ecuaciones diferenciales de segundo orden	160
7.2.2	Identidades de funciones trigonométricas hiperbólicas	161
7.2.3	Solución de ecuaciones no homogéneas	161
7.2.4	El problema de Sturm-Liouville	162
7.3	Solución de ecuaciones diferenciales ordinarias usando la fórmula de Green y el problema de Sturm-Liouville	162
7.4	Transformada de Laplace	165
7.5	Solución de ecuaciones diferenciales parciales	168
7.5.1	Solución por el método de expansión en funciones propias y la fórmula de Green	169
7.5.2	Solución mediante la transformada de Laplace	170
7.6	Uso de la fórmula de Green en problemas no homogéneos	171
7.6.1	Solución con funciones propias en una sola dirección	172
7.6.2	Solución utilizando funciones propias en dos direcciones	174

7.7	Solución de un problema tridimensional y transitorio	176
7.8	Resumen del capítulo	180
	Bibliografía	181



Prefacio

Muchos sistemas de interés práctico, tanto en ciencias básicas e ingeniería como en ciencias de la salud, son de naturaleza jerárquica. Lo anterior implica que los procesos que ocurren a un determinado nivel de escala, están determinados por lo que ocurre en niveles de escala inferiores. Actualmente, existen técnicas de escalamiento que permiten deducir las ecuaciones de transporte (de cantidad de movimiento, calor o masa) a un cierto nivel de escala a partir de sus contrapartes en otros niveles de escala. A lo largo de este texto se utiliza la palabra *escalamiento* para referirse al filtrado sistemático de información al pasar de un cierto nivel de escala a otro. En este sentido, es fundamental contar con una descripción apropiada de los fenómenos de transporte en el nivel de escala inferior, para posteriormente llevar a cabo el escalamiento de dichas ecuaciones y deducir las ecuaciones gobernantes en el nivel de escala superior.

El objetivo de este texto es proporcionar elementos fundamentales para formular ecuaciones de transporte de cantidad de movimiento, calor y masa tanto al nivel de escala del continuo como para deducir las ecuaciones de transporte en niveles de escala superiores. El material se organiza de la siguiente manera: Los capítulos 1 y 2 son introductorios. El primero parte del concepto de modelo e incluye una descripción de definiciones fundamentales como son las longitudes espaciales y temporales y las definiciones de algunos números adimensionales. Mientras que en el segundo capítulo se proporciona el instrumental matemático a utilizar en el resto del texto que va desde el uso de escalares, vectores y tensores y sus operaciones fundamentales hasta la deducción de los teoremas integrales más relevantes en fenómenos de transporte. Los capítulos 3-5 tratan sobre la deducción de las ecuaciones diferenciales y condiciones de frontera que aplican en la transferencia de masa, cantidad de movimiento y calor al nivel de escala del continuo. Posteriormente, en el capítulo 6 se expone el tema del transporte en medios porosos para ejemplificar el proceso de escalamiento usando los métodos de homogenización y del promedio volumétrico y se aplica a tres situaciones de transporte representativas del transporte de cantidad de movimiento, calor y masa. Por último, el capítulo 7 está dedicado a la solución analítica de ecuaciones diferenciales parciales usando el método de expansión en funciones propias junto con la fórmula de Green así como el método de transformada de Laplace.

El material no es introductorio y no está dirigido a lectores que sea la primera vez que estudian fenómenos de transporte. Como puede notarse, el texto es un enfoque integral de los tres tipos de fenómenos de transporte y se recomienda para alumnos que deseen ver a los fenómenos desde una perspectiva diferente a la que adquirieron cuando los estudiaron de manera segregada. En otras palabras, el texto se recomienda para aquellos alumnos de licenciatura que busquen llevar a cabo un repaso de fenómenos de transporte (o bien, busquen darles un segundo vistazo) y para alumnos de

posgrado que deseen adquirir un conocimiento más profundo que les sirva para emprender proyectos de investigación. El texto no pretende sustituir materiales clásicos y altamente recomendables de fenómenos de transporte como son los textos de [Bird y col. \(2006\)](#), [Slattery \(1999\)](#), [Whitaker \(1992\)](#), [Deen \(1998\)](#), entre otros. Más bien, la aportación de este texto consiste en presentar una visión unificada e integral para estudiar los fenómenos de transporte en diferentes niveles de escala. Además, el texto proporciona las herramientas para el planteamiento, escalamiento y solución de las ecuaciones de transporte. A pesar de lo anterior, varios de los temas que se tocan en este texto pueden ser útiles de manera aislada para alumnos que están cursando por primera vez alguna materia asociada con fenómenos de transporte. Por ello, el texto puede servir como material de apoyo para las siguientes UEA de licenciatura:

1. Mecánica de fluidos.
2. Transferencia de calor.
3. Transferencia de masa.
4. Fenómenos de transporte computacional-I y II.
5. Hidráulica básica.
6. Dinámica del agua subterránea.

y de posgrado:

1. Modelado matemático en ingeniería en energía y medio ambiente.
2. Escalamiento en fenómenos de transporte.
3. Transferencia de calor y masa.
4. Mecánica de fluidos.
5. Matemáticas aplicadas a la ingeniería química.
6. Fenómenos de transporte en sistemas multifásicos.

El texto se complementa con el uso del software Comsol Multiphysics para la solución numérica de varios de los problemas que se plantean mediante la técnica de elemento finito. Por lo anterior, este material puede ser de utilidad para alumnos de las licenciaturas de ingeniería en energía, ingeniería química, ingeniería hidrológica, ingeniería bioquímica, ingeniería en alimentos, entre otras. Además, puede servir de libro de texto para alumnos del posgrado en energía y medio ambiente, el posgrado en ingeniería química y el posgrado en biotecnología así como a programas de licenciatura y posgrado que sean afines a los mencionados.

Agradezco sinceramente los comentarios y sugerencias hechos por los alumnos con quienes he compartido versiones preliminares de este texto y que me han ayudado a mejorarlo considerablemente. De la misma forma, agradezco al lector de este texto y lo invito a contactarme para cualquier pregunta o comentario respecto a este material.

Francisco J. Valdés-Parada
iqfv@xanum.uam.mx
Ciudad de México, 2022



1. Introducción al modelado matemático

1.1 Objetivo y organización del capítulo

El propósito de este capítulo es servir de antesala para el resto del material que se presenta en este texto. Por ello, el tema central es el modelado matemático y se presenta el concepto de modelo y se discute acerca de la enseñanza del modelado matemático en las primeras secciones. Posteriormente, se presenta una clasificación de los modelos matemáticos con base en diferentes criterios en la sección 1.4. Más adelante, en la sección 1.5 se presentan algunas definiciones fundamentales como variables de estado, mecanismos de cambio, entre otros. Posteriormente, se presenta una descripción de los niveles de escala espaciales y temporales en la sección 1.6. Por último, se reportan algunos números adimensionales y su significado físico en la sección 1.7.

1.2 Concepto de modelo

De manera algo vaga, puede entenderse a un modelo como una *representación de algún aspecto de la realidad*. Dicha representación puede hacerse por diversos medios, como el lenguaje, la escritura, la música, así como las matemáticas. Entonces, bajo este punto de vista, el modelado matemático es una representación, en términos matemáticos, de algún aspecto de la realidad que sea de interés.

1.3 Enseñanza del modelado matemático

La educación de las matemáticas tradicionalmente consiste en el aprendizaje y uso de conceptos, teoremas, axiomas, identidades, etc. para resolver problemas meramente matemáticos sin hacer mucho hincapié en la relación con la realidad. De hecho, cuando en los cursos de matemáticas se hacen conexiones con problemas físicos, químicos o biológicos, el alumno a menudo experimenta un grado de dificultad mayor pues sabe que si no tradujo adecuadamente el enunciado del problema al lenguaje matemático el resultado que obtendrá será equivocado, sin importar si el uso de las herramientas matemáticas fue correcto. De hecho, este proceso de traducción al lenguaje matemático no suele ser sencillo y requiere de práctica y experiencia para llevarlo a cabo exitosamente. En los cursos de matemáticas, raras veces se dedica un tiempo justo a aprender a hacer esta actividad pues el énfasis está en el uso del instrumental matemático. Por su parte, en los algunos cursos de física de bachillerato, e incluso en asignaturas de nivel superior, las clases consisten en presentar conceptos a los alumnos, seguidos de las ecuaciones matemáticas que sirven para describirlos, junto con problemas de aplicación, que a menudo consisten en sustituir datos en fórmulas y hacer

operaciones matemáticas para llegar a un resultado. De hecho, las operaciones de sustitución de datos y las manipulaciones algebraicas implícitas en varios problemas de física de bachillerato no requieren el nivel de complejidad de las operaciones que se ven en los cursos de cálculo. Entonces, se tiene una disparidad en la educación, por un lado en los cursos de matemáticas no se aprende a formular modelos y, por otro lado, en los cursos de física no se dedica el tiempo necesario a la deducción de los modelos y los cursos a menudo se reducen al uso de fórmulas con suposiciones implícitas que no siempre se resaltan para obtener resultados.

En las carreras de ingeniería, la falta de uso de las herramientas de cálculo y ecuaciones diferenciales se ve compensada en materias de licenciatura relacionadas con física, química y biología, aunque a menudo estas herramientas se usan tiempo después de los cursos formativos y por tanto el profesor debe: i) dedicar tiempo de la clase para re-explicar el uso de las herramientas matemáticas ya olvidadas (o incluso no vistas) por los alumnos o bien ii) dejar a los alumnos a su suerte para que ellos remedien sus carencias por sus propios medios. El caso específico de los cursos de fenómenos de transporte, suelen ser clasificados por los alumnos como los cursos más complicados de sus carreras. Estos cursos tratan sobre el desarrollo, solución y análisis de modelos matemáticos que representen formas de transporte de cantidad de movimiento, calor y masa principalmente, aunque también se puede incluir el transporte de corriente eléctrica. De hecho, los cursos de fenómenos de transporte no son más que ejercicios de aplicación de la primera ley de la termodinámica a procesos irreversibles (Swaney y Bird, 2017). La dificultad de estos cursos recae en varios frentes: por un lado no se abordan temas fáciles de mecanizar, por otro lado, se requiere tener habilidad en la traducción al lenguaje matemático para el planteamiento de los modelos, así como de elementos de cálculo vectorial y tensorial, ecuaciones diferenciales y métodos numéricos. Además, se requiere la evaluación de los modelos, su análisis y comparación con experimentos. Actualmente, se pueden identificar al menos dos retos en la enseñanza de los fenómenos de transporte: 1) hacer un balance entre matemáticas y física y 2) hacer un balance entre simulaciones numéricas, experimentos de laboratorio y clases tradicionales (Valdés-Parada, 2019). El primer reto al parecer se ha resuelto usando modelos matemáticos sencillos (es decir usando ecuaciones algebraicas o bien ecuaciones diferenciales ordinarias) en cursos de licenciatura y dejando las ecuaciones diferenciales parciales para los cursos de posgrado. Esto trae consigo una falsa sensación de conocimiento y habilidades para el estudiante de licenciatura, siendo que muchos problemas prácticos requieren del uso de ecuaciones diferenciales parciales. Esta dificultad se ha pretendido superar con el uso de software. Sin embargo, ésta es una espada de doble filo ya que si no se tiene suficiente conocimiento de la física del problema, métodos numéricos y del uso adecuado del software se corre el riesgo de producir resultados llamativos que sean erróneos. Las simulaciones numéricas sin duda son valiosas y poderosas pero no son un reemplazo a los experimentos en el laboratorio. De ahí el segundo reto en la enseñanza de los fenómenos de transporte, el cual no ha sido cubierto de manera unificada en la actualidad.

Más que la parte matemática, la importancia de estos cursos recae en el ejercicio (y en ocasiones desarrollo) de habilidades de pensamiento que permitan llevar con éxito el modelado matemático de los sistemas de interés con un razonable grado de error. En este punto es importante mencionar, que todo modelo, al ser una abstracción de la realidad, implica suposiciones. El uso adecuado de ellas es un elemento crucial y determinante en el éxito o fracaso del modelo. El correcto uso de suposiciones no es sencillo y requiere de práctica, por ello es conveniente incluir varios problemas de aplicación que sirvan de ensayo de estos elementos.

1.4 Clasificación de los modelos matemáticos

En muchas aplicaciones de interés, el modelado de algún aspecto de la realidad se lleva a cabo ya sea por *medios físicos* o por *medios matemáticos*. El primer tipo de modelos consiste en llevar a cabo experimentos, a menudo en condiciones controladas, para representar el aspecto que se desea modelar. Los experimentos consisten en aplicar una técnica conocida para poder llevar a cabo el estudio. Sin embargo, en ocasiones dichas técnicas deben modificarse para cumplir los objetivos buscados o incluso, de no existir una técnica experimental, es necesario llevar a cabo el diseño de una nueva técnica, lo cual es lo menos frecuente en la práctica. El trabajo experimental es a

menudo largo pues los experimentos requieren de tiempo y mediciones continuas para llevarse a cabo. Además, siempre que sea posible, un estudio experimental debe ser reproducible, por lo que a menudo es necesario llevar a cabo numerosas repeticiones del experimento para obtener resultados *estadísticamente significativos*, esto es, resultados cuya desviación estándar no se encuentre demasiado lejos del valor medio y que no se deben a la casualidad. Dicho en forma más técnica, un resultado es estadísticamente significativo si la hipótesis nula es cierta y hay una baja probabilidad de obtener resultados distintos a los obtenidos. Una vez concluidos los experimentos, los resultados suelen compararse con modelos matemáticos, ya sean ecuaciones de correlación estadística o modelos basados en principios de conservación, entre otros. Frecuentemente, los estudios que utilizan modelos físicos se enfocan a la parte experimental y la parte del modelado matemático queda relegada, en el mejor de los casos, en un segundo plano.

Por su parte el modelado matemático puede clasificarse en dos grandes ramas: *modelos deterministas* y *modelos probabilísticos*. Estos últimos se clasifican en *modelos estadísticos* y en *modelos estocásticos*. Los modelos estadísticos involucran analizar elementos aleatorios para los cuales no hay teoría que los modele. Por su parte los modelos estocásticos utilizan las probabilidades para modelar procesos aleatorios. Por ejemplo, si se desea modelar el movimiento de polen en el aire, entonces un modelo estadístico simplemente tomaría mediciones de las posiciones y reportaría resultados en función de un error experimental. Se reportarían mediciones como la media, desviación estándar, curtosis, etc. de la distribución de datos, las cuales son valiosas y pueden ayudar a elaborar conjeturas e incluso conclusiones. Por su parte, un modelo estocástico simularía cada grano de polen como una partícula que tiene probabilidades de moverse en cualquier dirección y realizaría numerosas repeticiones basadas en la probabilidad de desplazamientos de cada partícula para describir el proceso. De manera simple, la diferencia entre un modelo estadístico y un modelo estocástico es que en los estocásticos se hace un esfuerzo por describir los procesos mediante simulaciones y en los modelos estadísticos no es el caso. En ambos tipos de modelos, se cumple que a una misma entrada no siempre se produce una misma salida. Actualmente, la mecánica estadística está basada en ecuaciones estocásticas para describir lo que ocurre a escala atómica y subatómica. A un nivel de escala de micrómetros en adelante (es decir, en el *nivel de escala del continuo*), es posible usar tanto modelos matemáticos estocásticos como deterministas. Estos últimos son aquellos en los que para una misma entrada siempre se obtiene la misma salida.

■ **Ejemplo 1.1** Considere un medio de cultivo donde se encuentran bacterias aerobias. Suponga que al inicio del experimento (esto es, al tiempo $t = 0$), la concentración de glucosa en el medio de cultivo es de 0.5 M y que después de 2 h la concentración disminuyó a 0.1 M. ¿Cuál es la concentración de glucosa en $t = 1$ h y a $t = 3$ h?

Con los datos que aporta el problema, es tentador proponer el siguiente modelo lineal

$$C = 0.5 - 0.2t,$$

ya que reproduce los únicos dos datos con los que se cuenta. De esta forma, podría decirse que en $t = 1$ h la concentración de glucosa es de 0.3 M; sin embargo, este modelo predice que para $t = 3$ h la concentración será de -0.1 M, lo cual carece de sentido físico. Este ejercicio enseña que es más fácil confiar en un modelo para interpolar que para extrapolar. ■

El modelo deducido en este ejemplo es un modelo determinista basado en la experimentación. Imagine ahora una situación distinta como un saco que contiene las bolas de una mesa de billar y se extrae una bola y sale aquella con el número 2 y al extraer la segunda sale aquella con el número 9. Si se hiciera un ajuste lineal con estos datos, sería un golpe de suerte que funcionara bien el modelo. En este caso, es mejor usar un modelo estocástico basado en probabilidades.

Frecuentemente, la división entre estas dos ramas del modelado matemático no es abrupta y es posible formular modelos híbridos. Dentro de los modelos matemáticos deterministas puede hacerse una clasificación en *modelos basados en la experimentación* (modelos estadísticos de correlación) y los *modelos basados en principios de conservación*. En otras palabras, hay modelos deterministas *a priori* y *a posteriori* (Valdés-Parada, 2014). Ambos modelos son juzgados como buenos o malos en función de qué tan bien reproduzcan datos experimentales. Sin embargo, los

modelos *a priori* son por lo regular mas generalizables que los modelos *a posteriori*, los cuales sólo suelen considerarse válidos para las condiciones experimentales usadas.

De esta forma, la mayoría de los modelos de los cursos de fenómenos de transporte son modelos matemáticos deterministas basados en principios de conservación. Es importante mencionar que la complejidad de un modelo matemático no debe ir de la mano con su grado de credibilidad. Por ejemplo, es fácil que alguien se convenza por gráficas y animaciones tridimensionales que sugieren estar representando un determinado proceso; sin embargo, es más fácil llevar a cabo una simulación mal hecha que conduzca a resultados visualmente llamativos que un modelado riguroso que podría, incluso, no necesitar un elevado grado de complejidad. De hecho a menudo cuando se está estudiando un proceso para el cual no existe un modelo se comienza por el planteamiento del modelo mas sencillo y se evalúan sus alcances y limitaciones. En función de estas últimas es que se van proponiendo mejoras que permitan llevar a un modelo más robusto. Por supuesto, otro punto de vista es comenzar por el modelo más complicado posible e ir ponderando acerca de la pertinencia de simplificaciones. La elección final del tipo de modelo a usar también suele obedecer a factores como el tiempo y los recursos disponibles para el estudio.

■ **Ejemplo 1.2** Considere el siguiente conjunto de datos:

x	y
1	0.1
2	1
3	10

¿Cuál será el valor de y para $x = 4$?

Intuitivamente, la respuesta que se produce es 100 pues al parecer con cada valor de x se aumenta en un cero el valor de y . El modelo matemático que describe este razonamiento es:

$$y = 10^{x-2}.$$

Sin embargo, si se hace un ajuste polinomial a los datos se encontrará la siguiente expresión

$$y = 4.05x^2 - 11.25x + 7.3.$$

El cual predice que, para $x = 4$, $y = 27.1$. Entonces dado que ambos modelos basados en la experimentación representan los datos, ¿cuál de ellos es el correcto?

La respuesta a esta última pregunta la tiene el proceso bajo estudio. Por ejemplo, si los datos representan la tasa de crecimiento de una población, entonces es posible que el modelo exponencial sea adecuado, siempre y cuando las condiciones del medio lo permitan. Sin embargo, si se tratara de otra situación como la tasa de transferencia de calor en una placa contra el tiempo, entonces el modelo polinomial es el más adecuado ya que la temperatura no suele crecer exponencialmente. Este ejemplo sencillo, ayuda a ver la importancia que tiene el conocimiento de la situación que se está estudiando en el tipo de modelo *a posteriori* a emplear.

■

Un riesgo que se corre con modelos estadísticos que reproducen datos es el atribuirles un significado físico a dichos modelos. Aunque se pueden dar excepciones por supuesto, es una práctica destinada al fracaso el hacer correlaciones entre datos y procesos sin un firme fundamento físico o biológico (y en algunos casos social). Por ejemplo, durante la década de los años 90 y la primera década de este siglo yo tenía la firme idea de que cada año par sería malo y que cada año non sería muy bueno, no solo en cuestiones personales sino también en cuanto a la vida académica. Esta correlación fue totalmente destruida en la segunda década de este siglo. A pesar de lo mundano del ejemplo anterior, permite ver que el *conocer la respuesta no siempre explica la causa*. Y no solo porque un tipo de correlación exista, implica que tiene un fundamento físico aceptable. De hecho, han habido momentos en la historia de la ciencia que los fundamentos físicos han tenido que mejorarse o incluso abandonarse por completo a la luz de experimentos concluyentes que los desacreditan. Tal es el caso de la teoría del éter (Dirac, 1951), por citar un ejemplo.

Existe otro tipo de modelos que no corresponden a los modelos físicos ni a los matemáticos que son los *modelos conceptuales*. Este tipo de modelos consisten en diagramas que muestran los aspectos relevantes de la realidad que se desea estudiar y a menudo incluyen subsistemas, interacciones entre corrientes, etc. Ejemplos de este tipo de modelos son los diagramas que se utilizan en cursos de balances de materia y energía o bien los diagramas de flujo de una planta o un proceso, así como los ciclos bioquímicos, entre muchos otros. Con frecuencia, los modelos conceptuales son la antesala de los modelos matemáticos, pues proporcionan un panorama claro del sistema que se desea representar en términos matemáticos.

Es importante mencionar que todo modelo matemático debe *verificarse* y *validarse* para poderse tomar como cierto. La verificación se refiere, en el caso de las soluciones de ecuaciones diferenciales a que la solución satisfaga la formulación del problema (ecuaciones diferenciales y condiciones iniciales y a la frontera); o bien que un código esté bien programado. Mientras que la validación se refiere a que el modelo debe ser capaz de reproducir datos provenientes de experimentos, siempre y cuando dichos experimentos se hayan realizado bajo condiciones acordes con las suposiciones involucradas en los modelos. Note que los modelos conceptuales no requieren este tipo de validación pues son simplemente una representación de ideas. Sin embargo, un modelo matemático debe forzosamente ser validado. Si dicha validación falla, entonces el modelo debe revisarse, reformularse o, en el peor de los casos abandonarse, lo cual constituye un proceso iterativo que es parte de la naturaleza perfectible de la ciencia.

El propósito de este texto es fortalecer las habilidades de pensamiento del alumno que le permita formular, resolver y analizar modelos matemáticos de fenómenos de transporte. Es importante mencionar que este texto no se trata de un entrenamiento en modelado matemático, sino en un ejercicio de aprendizaje que requiere de procesos de pensamiento por parte de los alumnos y el profesor que se logra mediante una diálogo fluido y un ambiente favorecedor a la discusión. Las herramientas matemáticas que se emplearán serán de tipo analítico y con poca necesidad de la programación computacional. Esto se hace para evitar la distracción en las herramientas matemáticas y enfocar los esfuerzos en la comprensión de lo que se está haciendo, más que en producir resultados llamativos en software del que no se comprende completamente su funcionamiento. Sin embargo, sí se contempla el uso de software en algunos problemas específicos. Por último, cabe agregar que en varios sitios del texto, se sigue el criterio y punto de vista del autor y no se tiene la menor intención en promover un adoctrinamiento en el lector, sino en compartir opiniones y los comentarios constructivos del lector serán siempre bienvenidos y ampliamente agradecidos.

1.5 Algunas definiciones fundamentales

1.5.1 Variables de estado

El estado de un sistema se caracteriza por los valores de ciertas variables que lo determinan. Estas variables son la presión, la velocidad, la temperatura, la concentración, la geometría y las fuerzas impulsoras. De hecho, las fuerzas impulsoras (cambios de presión, temperatura, concentración, etc.) son las que determinan los cambios de estado de un sistema.

1.5.2 Estado estacionario, estado estable y estado de equilibrio

Un sistema está en estado estacionario cuando su estado (es decir, los valores de las variables de estado) no cambia con el tiempo. Un proceso puede estar en estado estacionario, mientras que otro puede estar en estado transitorio al mismo tiempo.

■ **Ejemplo 1.3** Considere el flujo de agua a través del subsuelo el cual puede deberse a una combinación de efectos gravitatorios y de un gradiente de presión. Suponga que el fluido acarrea un contaminante que podría llegar a un acuífero subterráneo. En este proceso están involucrados el transporte de cantidad de movimiento y de masa de la especie química. ¿cuál de los dos está en estado estacionario y cuál está en estado transitorio?, justifique su respuesta. Suponga que el contaminante es el ion arseniato y que el transporte de masa se da principalmente por difusión, mientras que el flujo es reptante.

Respuesta: Para las condiciones descritas arriba, el transporte (de cantidad de movimiento y de masa) se da por condiciones difusivas. Aunque estos conceptos se revisarán más adelante, por el momento basta con recordar que tanto el coeficiente de difusión de cantidad de movimiento como el de transferencia de masa tienen unidades de m^2/s . Con este dato es lógico inferir que el tiempo característico de cantidad de movimiento por unidad de superficie es del orden de magnitud del inverso del coeficiente de difusión de cantidad de movimiento (es decir, la viscosidad cinemática $\nu = \mu/\rho$) y para transferencia de masa se cumple una relación similar. Para el agua a 20°C la viscosidad cinemática es aproximadamente $10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$, por lo que el tiempo característico de cantidad de movimiento por unidad de área es del orden de 10^6 s/m^2 . Mientras que para el arseniato en agua, el valor del coeficiente de difusión es del orden de magnitud de $10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ (Tanaka y col., 2013). Con estos datos, se puede deducir que el tiempo para que alcance el estado estacionario la transferencia de masa del arseniato es 10^3 veces mayor que el tiempo que toma a la velocidad alcanzar el estado estacionario. Lo anterior justificaría considerar a las ecuaciones de mecánica de fluidos en estado estacionario y a las de transferencia de masa de arseniato en estado transitorio. ■

Incluso un mismo tipo de transporte puede estar en estado estacionario o transitorio respecto a otro dependiendo del nivel de escala en el que se encuentre. Lo anterior se ilustra en el siguiente ejemplo:

■ **Ejemplo 1.4** Considere un biorreactor tubular de lecho empacado en el cual hay un soporte sobre el cual se hace crecer biomasa formando biopelículas. Suponiendo que el espesor de las biopelículas (ℓ) es del orden de magnitud de $1 \mu\text{m}$ y que el radio del reactor (R) es del orden de magnitud de 1 cm , ¿en dónde se alcanza primero el estado estacionario: en las biopelículas o a lo largo del radio del reactor?

Respuesta: En este caso, el coeficiente de difusión en las biopelículas (D_B) es menor que fuera de ellas (\mathcal{D}_B). Sin embargo, dicha reducción suele ser de solo un orden de magnitud (Wood y Whitaker, 1998), esto es, $D_B = \mathbf{O}(0.1\mathcal{D}_B)$. De esta forma, el tiempo característico del transporte en las biopelículas puede expresarse como

$$t_B = \frac{\ell^2}{0.1\mathcal{D}_B} = \frac{10^{-11}\text{m}^2}{\mathcal{D}_B}.$$

Mientras que el tiempo característico del transporte en la dirección radial del reactor puede estimarse como

$$t_R = \frac{R^2}{\mathcal{D}_B} = \frac{10^{-4}\text{m}^2}{\mathcal{D}_B}.$$

Dividiendo las dos ecuaciones anteriores resulta que

$$t_B = 10^{-7}t_R.$$

Con este resultado se deduce que el transporte de masa dentro de la biopelícula alcanza el estado estacionario mucho antes que a lo largo del radio del reactor. ■

El estado estacionario es distinto del *estado estable*, entendiendo este último como una respuesta acotada del sistema ante una entrada acotada. De esta forma un sistema será inestable cuando presente una respuesta desbordada ante una determinada entrada. Por ejemplo, en el caso de un accidente severo en una central nuclear, la temperatura en el reactor puede volverse rápidamente inestable si no se insertan las barras de control. Un caso de un sistema no estacionario pero estable corresponde a una respuesta oscilatoria sostenida, como la que experimenta la estela de agua detrás de una turbina marina.

Por último, vale la pena mencionar que, cuando un proceso se encuentra en *equilibrio termodinámico* no ocurre ningún cambio en el espacio ni en el tiempo de alguna variable de estado. En otras palabras, cuando un sistema está en equilibrio, no hay transporte ni acumulación ni reacción química alguna. El que una variable esté en equilibrio no necesariamente implica que el resto de las variables también lo estén. Por ejemplo, un sistema puede operar bajo condiciones isotérmicas (es decir, en equilibrio térmico) y permitir que haya transferencia de masa o de cantidad de movimiento.

Vale la pena resumir lo anterior mediante las siguientes definiciones:

Definición 1.5.1 — Estado estacionario. Es cuando una o más variables de estado no dependen del tiempo; sin embargo, podrían depender de la posición. Si en un mismo proceso una variable se encuentra en estado estacionario y otra no, la primera se dice que está en estado cuasi-estacionario.

Definición 1.5.2 — Estado estable. Es cuando un sistema ofrece una respuesta acotada a una entrada acotada. Un sistema puede estar en estado estacionario o transitorio y también en estado estable. Sin embargo, todo estado inestable es transitorio.

Definición 1.5.3 — Estado de equilibrio. Es cuando las variables de estado no cambian ni con la posición ni con el tiempo. Toda variable en equilibrio está en estado estacionario pero lo opuesto no es necesariamente cierto.

1.5.3 Modelos distribuidos y agrupados

Definición 1.5.4 — Modelo distribuido. Son modelos cuyas variables de estado son funciones de la posición y del tiempo (o sólo de la posición).

Este tipo de modelos involucran la solución de ecuaciones diferenciales parciales u ordinarias y son adecuados cuando se requiere suficiente detalle para describir los cambios espaciales o espacio-temporales en un sistema. Las ecuaciones de este tipo son válidas al nivel de escala del continuo o bien son resultado de un proceso de escalamiento en donde no se anulan todas las dependencias espaciales. En este texto, se comparte el punto de vista de (Wood, 2009) y se hace una distinción entre promediado y escalamiento mediante las siguientes definiciones:

Definición 1.5.5 — Promediado. Es el resultado de la aplicación de un operador de integración (o de sumatoria), lo cual implica un reacomodo más que una pérdida de información.

Definición 1.5.6 — Escalamiento. Filtrado sistemático de información al pasar de un nivel de escala a otro

Como puede notarse el escalamiento implica promediado pero el promediado no necesariamente implica un escalamiento. Cuando el promediado se lleva a cabo de tal manera que se elimina la dependencia espacial de la variable dependiente (o bien, cuando se obtiene a partir de ignorar la dependencia espacial) el siguiente tipo de modelo:

Definición 1.5.7 — Modelos agrupados. Son aquellos en los que la variable dependiente sólo es función del tiempo o bien es una constante.

Los modelos agrupados se representan mediante ecuaciones diferenciales ordinarias o algebraicas. Por ejemplo, actualmente un tema de interés de investigación en turbinas eólicas es la estela que dejan detrás de ellas. Cuando se toma en cuenta cómo cambia la velocidad con la posición y en el tiempo o solo con la posición, se tiene un modelo distribuido y cuando se integran en el espacio estos cambios espaciales de la velocidad se tiene un modelo agrupado. Bird y col. (2006) usan los términos *modelo macroscópico* y *modelo microscópico* para referirse a los modelos agrupado y distribuido, respectivamente. Este enfoque es compartido en este texto como se ilustra en capítulos posteriores.

1.5.4 Modelos lineales y no lineales

Suponga que tiene un sistema al que ingresa un número N de entradas. Cada entrada puede ser función de la posición y el tiempo y se denota como E_i . Entonces, la entrada total del sistema es

$$E = \sum_{i=1}^{i=N} a_i E_i, \quad (1.5.1)$$

donde a_i son parámetros adimensionales conocidos. Ahora imagine que se pueden controlar las entradas una por una de tal forma que se puedan cerrar todas excepto una para estudiar la respuesta del sistema, las cuales se denotan como S_i . Si la salida del sistema es proporcional a las entradas

mediante una expresión como la siguiente:

$$S = \sum_{i=1}^{i=N} a_i S_i, \quad (1.5.2)$$

entonces se dice que el sistema es lineal (Gray y Gray, 2017). Note que cuando las diferentes entradas de un sistema interactúan entre sí, no es posible llegar a la conclusión dada por la ecuación anterior y en ese caso el sistema es no lineal. Los sistemas lineales tienen la propiedad que pueden descomponerse en sus componentes individuales y estudiar por separado el efecto en la salida del sistema para posteriormente sumarse y obtener la salida global.

■ **Ejemplo 1.5** Considere una viga de las vías del metro. Las superficies superior e inferior están sometidas a fluxes de calor q_s y q_i , respectivamente. Mientras que las superficies laterales están aisladas. Explique qué pruebas haría para deducir si el modelo de transferencia de calor es lineal o es no lineal.

Respuesta: Se pueden hacer mediciones de la temperatura al estar las superficies a las condiciones indicadas. Posteriormente se pueden hacer pruebas manteniendo solo la superficie inferior al flux q_i y manteniendo aislada la superficie superior y repetir el experimento a la inversa y sumar las temperaturas de ambos experimentos. Si resulta el mismo valor que al estar presentes los dos fluxes de calor el modelo es lineal. ■

Ejercicio 1.1 Considere la extracción de petróleo a través de un yacimiento. ¿Bajo qué condiciones el transporte de cantidad de movimiento es lineal y cuando es no lineal? ■

1.5.5 Mecanismos de cambio

En el análisis de los diversos tipos de transporte en sistemas de interés, es crucial conocer: 1) Los mecanismos que operan dentro del sistema que afectan a las propiedades de interés y 2) Los mecanismos que permiten el transporte de la propiedad en las fronteras del sistema. Desde un punto de vista matemático, esto equivale a determinar las fuentes volumétricas y superficiales. Además de estas fuentes, se puede identificar a la condición inicial del sistema.

Las fuentes volumétricas pueden ser intrínsecas o extrínsecas. En el primer caso se generan a partir de las propiedades y procesos que tienen lugar dentro del sistema y corresponden a términos homogéneos. Las fuentes extrínsecas se deben a procesos o actividades externas al sistema. A continuación se presentan las principales fuentes volumétricas para el transporte total de masa, el transporte de una especie química, la transferencia de cantidad de movimiento y la transferencia de energía:

Tipo de transporte	Fuente volumétrica	Tipo de fuente
Masa total	No tiene	NA
Especies químicas	Reacciones químicas	Intrínseca
Cantidad de movimiento	Gravedad, campos electromagnéticos	Extrínsecas
Energía	Interna	Intrínseca
	Cinética	Intrínseca
	Potencial	Extrínseca
	Trabajo	Extrínseco
	Calor por radiación	Extrínseco

En capítulos posteriores se discutirá con mayor profundidad acerca de los tipos de fuentes en cada una de las ecuaciones de fenómenos de transporte. Por el momento, esta breve revisión es suficiente y se continuará en el texto discutiendo algunos conceptos de particular interés en varias aplicaciones prácticas.

1.5.6 Difusión y dispersión

La difusión (ya sea de masa, calor o cantidad de movimiento) es una interacción que ocurre al nivel de escala molecular. Este tipo de transporte ayuda a que se extienda la distribución de

una variable de estado dada. La difusión promueve la mezcla de dicha variable: en el caso de la transferencia de masa se considera un movimiento aleatorio de moléculas de las especies químicas, en el caso de la transferencia de calor corresponde a la conducción de calor y en el caso del transporte de cantidad de movimiento se asocia al esfuerzo cortante.

La dispersión se debe a causas mecánicas y lleva a la mezcla de propiedades que mejoran el transporte por difusión. Tanto la difusión como la dispersión involucran movimientos relativos a una velocidad promedio. De hecho la dispersión se observa a niveles de escala superiores que la difusión molecular y es el resultado de interacciones que ocurren a niveles de escala inferiores. A continuación se discute sobre la jerarquía de niveles de escala que ayudará a aclarar estos conceptos.

1.6 Escalas espaciales y temporales

Una buena parte de los sistemas de interés en ciencias básicas e ingeniería son de naturaleza jerárquica. Esto quiere decir que los procesos que ocurren en un cierto nivel de escala están determinados por lo que ocurre en niveles de escala inferiores. Ante esta situación cabe preguntarse ¿cuál es nivel de escala más pequeño de donde parten los demás niveles? Para el tipo de modelos matemáticos que se utilizarán en este texto, se parte de ecuaciones válidas en el nivel de escala del continuo, el cual merece una explicación detallada y se proporciona a continuación.

1.6.1 Nivel de escala del continuo y concepto de REV

El nivel de escala del continuo, también conocido como la microescala, se caracteriza porque las propiedades son funciones continuas que llenan por completo el espacio ocupado por una fase. Estas propiedades (como la densidad, velocidad, temperatura, entre otras) son en realidad promedios de propiedades definidas a escala molecular. Dichos promedios se obtuvieron al integrar las propiedades moleculares en un dominio de promediado que contiene un número suficientemente grande de moléculas que permitan garantizar las propiedades del continuo en una fase. Este tamaño debe ser tal que las propiedades promedio resultantes sean independientes de este parámetro. Cuando esto ocurre, se clasifica a este dominio como un *Volumen Elemental Representativo* o REV por sus siglas en inglés.

Para comprender mejor el concepto del REV considere el ejemplo clásico del cálculo de la densidad de una masa de agua usando un dominio de promediado esférico. La densidad se obtiene de calcular la masa contenida en un volumen de promediado dado para una posición y tiempo específicos del sistema. Si se denota al diámetro de la esfera como d , entonces los valores de la densidad serán, en general, funciones de d . De hecho, es posible identificar tres regiones características de valores de la densidad dependiendo del valor de d . En la primera región, que se caracteriza por una longitud de escala ℓ , el tamaño de la región de promediado puede ser compatible con una molécula (o la distancia entre moléculas) y por lo tanto la densidad solo puede valer cero si solo se muestreó espacio vacío o un valor máximo que corresponde al caso en que se muestreó una molécula. En el caso de empezar con vacío, se observará que al incrementar el tamaño de la región de promediado, los valores oscilarán de manera creciente con oscilaciones cada vez menores hasta llegar a un estado estable, el cual caracteriza la región II. Es en esta segunda región donde es posible definir un REV ya que los valores de la densidad no cambiarán apreciablemente si se modifica d . Para que se alcance la región II es necesario que se cumpla la siguiente desigualdad:

$$\ell \ll d. \quad (1.6.1)$$

Cabe mencionar que el concepto del REV no necesariamente funciona en zonas cercanas a una interfase, ya que el REV no contendrá solo porciones de la misma fase. Es por ello, que para describir el transporte en fases se utilizan ecuaciones diferenciales y para describir el transporte en interfases se utilizan condiciones de frontera, las cuales pueden indicar la continuidad o no de una cierta propiedad. En este último caso, se conocen como condiciones de salto. En capítulos posteriores se ilustra la deducción de las condiciones de frontera para diversos tipos de transporte.

Por supuesto, el tamaño del REV no puede hacerse infinitamente grande, ya que no es raro que en un mismo sistema haya heterogeneidades que alteren los cálculos si se incrementa demasiado el

tamaño del REV. Para evitar esto, se denota a la longitud característica de la fase como L . Entonces, el tamaño del REV debe ser al menos dos órdenes de magnitud menor que dicha longitud, esto es

$$d \ll L. \quad (1.6.2)$$

Para casos en los que no se presenten dichas heterogeneidades (por ejemplo una botella con agua destilada), entonces puede obviarse la restricción anterior. El concepto de REV no solo se utiliza para describir propiedades al nivel de escala del continuo a partir de propiedades a escala molecular, sino que además puede ayudar a generar nuevos continuos a niveles de escala superiores a la microescala. Cabe agregar que los conceptos de microescala y macroescala se refieren en este texto al nivel del continuo y al nivel de un sistema por completo que se desee estudiar. Estos conceptos suelen tener otro significado en textos de física en donde la macroescala se refiere al nivel del continuo (ver, por ejemplo, Piña-Garza y de la Selva-Monroy, 2018). Por esta razón, no debe perderse el significado preciso de estos conceptos en este texto. Más aún, el establecer restricciones de escala como $\ell \ll d \ll L$ sólo indica que debe haber una separación de al menos dos órdenes de magnitud entre niveles de escala. Para una definición más precisa de cómo caracterizar cada nivel de escala, una práctica común es definir cada nivel de escala a partir de los valores máximos y mínimos en donde tiene sentido el concepto del REV (ver, por ejemplo, Bear, 2018).

Ejercicio 1.2 A menudo las mediciones de las tasas de reacción se llevan a cabo en reactores de tipo tanque agitado a escala laboratorio. Identifique ℓ , d y L en este sistema y explique si es adecuado o no para determinar las tasas de reacción. ■

Ejercicio 1.3 Considere un tanque agitado cuya mezcla no es perfecta, aunque éste no lo sepa su operador. En este tanque se llevan a cabo dos experimentos con diferentes especies químicas. Después de una hora, se detiene la reacción y se mide la cantidad total de especies químicas que permanecen en el reactor. Suponga que de la literatura se sabe que las cinéticas para estas reacciones son de primer y segundo orden, es decir, $r_i = -k_i x_i$ y $r_i = -k_i (x_i)^2$, donde r_i y x_i denotan la tasa de reacción y la fracción molar promedio de la especie i en el reactor. ¿Debe esperarse que estas expresiones sub-predigan, predigan o sobre-predigan los resultados experimentales? ■

Ejercicio 1.4 Si se estudia un sistema en el cual sólo es posible hacer mediciones a escala de metros, y se lleva a cabo una reacción, cuya cinética se determina en un tanque agitado a escala experimental, ¿habrá problema en usar esta tasa de reacción en el modelo del sistema? Explique con cuidado su respuesta. ■

Ejercicio 1.5 — Justifique o refute el siguiente argumento. Si se desarrolla una ecuación de conservación de masa para determinar la cantidad de masa total en un sistema, en lugar de la distribución espacial de la masa, no se necesita conocer el campo de velocidad ni en la microescala ni en la macroescala. ■

Ejercicio 1.6 — Justifique o refute el siguiente argumento. Si se desea estudiar la interacción entre el agua subterránea y el agua superficial, el modelo debe tratar a ambos sistemas en las mismas escalas espaciales y temporales. ■

1.6.2 Longitudes de escala

Considere el esquema mostrado en la figura 1.1 que corresponde a un sistema de un medio poroso desde la escala molecular hasta la escala de campo o mega-escala. De acuerdo con este esquema, es razonable proponer la siguiente jerarquía de longitudes de escalas características (Gray y Miller, 2014)

$$\ell_{mo} \ll \ell_{mi} \ll \ell_r \ll \ell^{ma} \ll \ell^{me}. \quad (1.6.3)$$

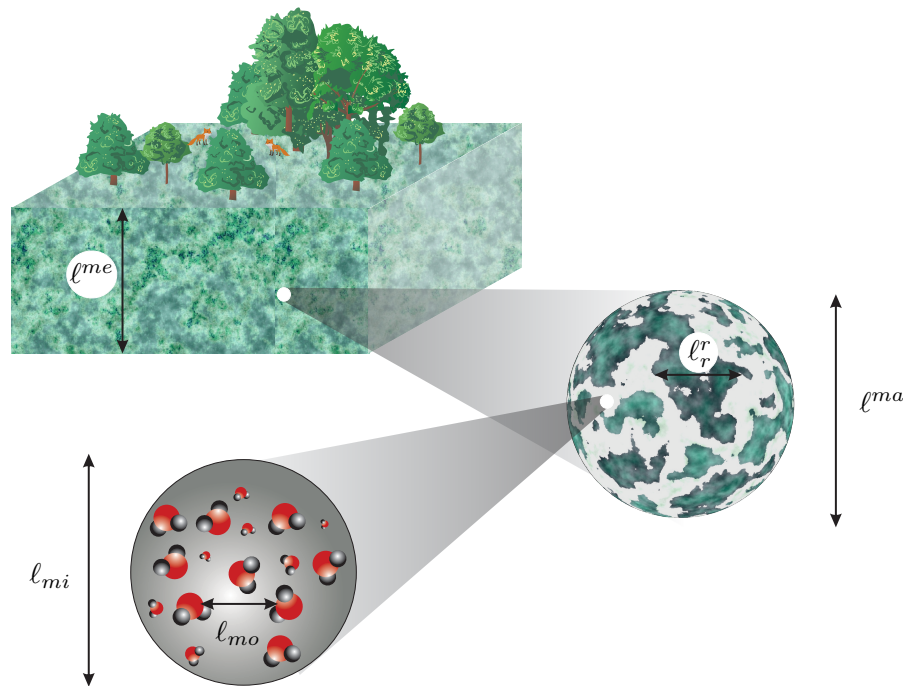


Figura 1.1: Esquema de las longitudes de escala características de un medio poroso en el subsuelo.

Aunque los valores específicos de estas longitudes características cambian de sistema a sistema, es conveniente discutir acerca de cada una de ellas para el caso de un medio poroso en el subsuelo.

- **Escala molecular, ℓ_{mo} :** Corresponde a la trayectoria libre media entre colisiones de moléculas dentro de una fase. Para el aire, su valor es aproximadamente de 10^{-7} m. Para un líquido como el agua se reduce a 2.75×10^{-10} m. Para sólidos se utiliza la trayectoria libre inelástica, la cual corresponde a la distancia que recorre un electrón a través del sólido antes de que su energía decaiga en $\exp(-1)$ su valor inicial. En este nivel de escala, un sistema debe modelarse de manera discreta en términos de las moléculas, su velocidad y sus colisiones.
- **Microescala o escala del continuo, ℓ_{mi} :** Este es el nivel de escala más pequeño en el cual aplica la hipótesis del continuo. Es en este nivel de escala donde se pueden plantear las ecuaciones de conservación de masa, energía y cantidad de movimiento. Dado que este nivel de escala está basado en la existencia de un REV, las mediciones de las propiedades pueden hacerse sin indicar el tamaño usado para hacerlas. El valor de este nivel de escala debe ser al menos un orden de magnitud superior al de la escala molecular. En este nivel de escala es posible identificar fases, interfases, curvas comunes y puntos de contacto. La temperatura, presión, velocidad, concentración, entre otras variables de estado surgen a partir del promediado de ciertas propiedades definidas en la escala molecular.
- **Escala de resolución, ℓ_r^r :** Este nivel de escala está relacionado con las longitudes de escala naturales del sistema como puede ser el tamaño de los sólidos que componen el medio poroso, el cual corresponde típicamente a 10^{-4} m. Aunque normalmente se dan distribuciones de tamaños de sólidos que oscilan entre 10^{-1} m y 10^{-6} m. Este nivel de escala es identificable en sistemas que tengan estructuras internas o longitudes características internas. Por lo tanto, un sistema que sólo tenga una fase no tendrá escala de resolución.
- **Macroescala, ℓ^{ma} :** En este nivel de escala, cada entidad (fase, interfase, curva común o punto de contacto) del sistema puede tratarse como un nuevo continuo. Esto es, de ser pertinente la existencia de un REV, se pueden desarrollar ecuaciones de conservación de una manera similar a las ecuaciones de la microescala, es decir, mediante un proceso de escalamiento. Como resultado del proceso de escalamiento, sólo se conserva, de manera promedio, parte de la información proveniente de la microescala. Además, surgen nuevas propiedades como la porosidad, el área interfacial por unidad de volumen, entre otras, como resultado del proceso de promediado. Dado que las cantidades promedio están basadas en la existencia de un REV,

sus valores son insensibles a cambios en el tamaño de la región de promediado y no puede tenerse confianza en las predicciones de estas propiedades promedio cerca de las fronteras de la macroescala. El tamaño característico del REV de la macroescala debe ser entre 10 y 100 veces mayor que la escala de resolución. Un mismo sistema puede tener más de una escala característica para la macroescala, tal es el caso de un medio poroso que tenga fracturas.

- **Mega-escala o escala de campo, ℓ^{me}** : Es la longitud característica del sistema de interés. Esta longitud puede tener diferentes valores en distintas direcciones. Por ejemplo, en un tubo capilar, la dirección radial puede ser macroscópica, mientras que la dirección axial corresponde a la mega-escala. Si se integran las ecuaciones de la macroescala en todo el dominio de la mega-escala, entonces el resultado es un modelo de parámetros agrupados.

1.6.3 Escalas temporales

Para los propósitos de este texto, es conveniente distinguir entre las escalas de equilibrio termodinámico y las escalas de tiempo de los procesos de transporte del sistema. Para ello, se definen:

- **Escala de tiempo termodinámica, τ_t** : Es una medida del tiempo necesario para que un sistema dinámico alcance la configuración de equilibrio. Esta escala de tiempo está asociada con una longitud de escala puesto que es natural pensar que un sistema grande disipe una perturbación termodinámica (como un gradiente de temperatura o concentración) en un tiempo mayor que en un sistema más pequeño. Vale la pena recordar que en una configuración de equilibrio no hay transporte de ninguna propiedad de estado.
- **Escala de tiempo dinámica, τ_d** : Es la escala de tiempo asociada a una propiedad, la cual es distinta a la escala de tiempo para que el sistema alcance el equilibrio. Por ejemplo, la escala de tiempo para que se disipe una perturbación en el gradiente de presión asociada a un flujo es mucho menor que el tiempo característico para que se disipe el flux de calor o de masa asociado.

1.7 Algunos números adimensionales

En la solución y análisis de varios modelos de este texto se recurre a reformularlos de manera adimensional. Esta operación se hace por conveniencia e involucra a menudo definir números adimensionales cuyo significado físico es bien conocido. Por ello, en los siguientes párrafos se definen algunos números adimensionales que serán de interés en este texto.

1.7.1 Número de Mach

En problemas de flujo en ingeniería, es necesario definir si el flujo de un fluido es compresible o incompresible. Para ello, puede usarse el número de Mach, el cual se define como:

$$Ma = \frac{v}{c}, \quad (1.7.1)$$

donde c es la velocidad del sonido a través del fluido en cuestión. Para valores de $Ma < 0.2 - 0.3$ el flujo es subsónico e incompresible y para $Ma > 1$ el flujo es supersónico. Cuando un flujo es incompresible, puede suponerse que su densidad es constante. Sin embargo, existe una alternativa entre el flujo compresible e incompresible que es el flujo *ligeramente* compresible. En este caso la densidad del fluido se aproxima por su valor promedio en un sistema, el cual puede cambiar con la posición (al nivel de escala macroscópico) y el tiempo como lo explican [Lasseux y col. \(2016\)](#).

1.7.2 Número de Reynolds

Este número adimensional define la relación entre las fuerzas inerciales y las fuerzas viscosas, esto es:

$$Re = \frac{\rho v \ell}{\mu} = \frac{\rho v \ell}{\mu} = \frac{v \ell}{\nu}, \quad (1.7.2)$$

donde ν es la viscosidad cinemática y μ es la viscosidad dinámica. El número de Reynolds ayuda a caracterizar los regímenes de flujo, desde flujo reptante ($Re = 0$), incluyendo el flujo laminar, de transición, turbulento y finalmente potencial ($Re \rightarrow \infty$).

Ejercicio 1.7 ¿Cuál debería ser la longitud característica, ℓ , que debe usarse para estudiar el flujo en medios porosos? ■

1.7.3 Número de Prandtl

Este número relaciona la habilidad de un fluido para disipar la cantidad de movimiento por fuerzas viscosas, respecto a su habilidad para difundir energía térmica por conducción y se expresa como:

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{\mu/\rho}{k/(\rho c_p)}. \quad (1.7.3)$$

Note que, a diferencia del número de Reynolds que depende del sistema a través de ℓ y ν , el número de Prandtl sólo depende de las propiedades del fluido.

1.7.4 Número de Schmidt

Es análogo al número de Prandtl, sólo que en lugar de relacionar la habilidad para difundir energía térmica, el número de Schmidt relaciona la disipación viscosa respecto a la capacidad del fluido para difundir a una especie química A , es decir,

$$Sc = \frac{\nu}{\mathcal{D}_A}. \quad (1.7.4)$$

Tanto el número de Prandtl como el número de Schmidt se usan para estudiar el transporte en capas límite.

Ejercicio 1.8 El número de Schmidt puede interpretarse como la razón entre el tiempo característico de la difusión y el tiempo característico de la disipación viscosa. Muestre que entonces, el número de Schmidt puede expresarse como

$$Sc = \frac{\ell_{\mathcal{D}}^2/\mathcal{D}_A}{\ell_v^2/\nu}, \quad (1.7.5)$$

siendo $\ell_{\mathcal{D}}$ y ℓ_v las longitudes características asociadas a la difusión y a la disipación viscosa, respectivamente. ■

1.7.5 Número de Péclet

Este número se deriva de los números de Reynolds y de Schmidt (para transferencia de masa) o bien como el producto del Reynolds y el número de Prandtl (para transferencia de calor) y relaciona la transferencia por convección, respecto al transporte por difusión (o conducción):

$$Pe_C = RePr = \frac{\nu \ell}{\alpha}, \quad (1.7.6a)$$

$$Pe_M = ReSc = \frac{\nu \ell}{\mathcal{D}_A}. \quad (1.7.6b)$$

Este número aparece en las ecuaciones de transporte de calor y masa y tiene un sentido similar al número de Reynolds.

Ejercicio 1.9 Una forma alternativa de concebir al número de Péclet es como la razón entre el tiempo característico de la difusión $t_{\mathcal{D}}^* = \ell_{\mathcal{D}}^2/\mathcal{D}_A$ y el tiempo característico de la convección $t_a^* = \ell_a/\nu$. Entonces, el número de Péclet para transferencia de masa es:

$$Pe_M = \frac{t_{\mathcal{D}}^*}{t_a^*} = \frac{\nu \ell_{\mathcal{D}}^2}{\mathcal{D}_A \ell_a}. \quad (1.7.7)$$

Por tanto, la longitud $\ell = \ell_{\mathcal{D}}^2 / \ell_a$. Considere la transferencia de masa por convección y difusión a través de un tubo capilar de radio R y longitud L . En este caso, ¿cuál es el valor de ℓ ? ■

1.7.6 Números de Biot, Nusselt y Sherwood

Este número se utiliza para estudiar la transferencia de calor o masa en la frontera entre un sólido y un fluido. En el caso de la transferencia de calor, se define como

$$Bi_C = \frac{h\ell}{k_s}, \quad (1.7.8a)$$

donde h es el coeficiente interfacial de transferencia de calor y k_s es la conductividad térmica del sólido. De esta forma, este número puede interpretarse como la razón entre las resistencias internas (ℓ/k_s) respecto a las resistencias externas a la transferencia de calor:

$$Bi_C = \frac{\ell/k_s}{1/h}. \quad (1.7.8b)$$

De esta forma, para $Bi_C \gg 1$ la frontera no ofrece resistencias externas a la transferencia de calor. Este número debe distinguirse del número de Nusselt, el cual se define como

$$Nu = \frac{h\ell}{k_f}, \quad (1.7.8c)$$

donde k_f es la conductividad térmica del fluido. El número de Nusselt se suele calcular como función de los números de Reynolds y Prandtl mediante la correlación de Ranz-Marshall:

$$Nu = 2 + 0.6Re^{1/2}Pe^{1/3}, \quad 0 \leq Re < 200; \quad 0 \leq Pr < 250. \quad (1.7.8d)$$

Para transferencia de masa, el número de Biot se define como

$$Bi_M = \frac{k_M\ell}{\mathcal{D}_{A,S}}, \quad (1.7.8e)$$

donde k_M es el coeficiente interfacial de transferencia de masa y $\mathcal{D}_{A,S}$ es el coeficiente de difusión en el sólido. Cuando el coeficiente de difusión es el del fluido, entonces se utiliza el número de Sherwood:

$$Sh = \frac{k_M\ell}{\mathcal{D}_{A,f}}, \quad (1.7.8f)$$

donde $\mathcal{D}_{A,f}$ es el coeficiente de difusión en el fluido. Este número se puede calcular también usando la correlación de Ranz-Marshall:

$$Sh = 2 + 0.6Re^{1/2}Sc^{1/3}, \quad 0 \leq Re < 200; \quad 0 \leq Sc < 250. \quad (1.7.8g)$$

1.7.7 Módulo de Thiele y número de Damköhler

Este número adimensional es exclusivo de la transferencia de masa de especies químicas y relaciona la tasa de reacción respecto a la tasa de difusión. Para una reacción homogénea de primer orden $r_A = -k_1c_A$, este número adimensional es:

$$\Phi_1^2 = \frac{k_1\ell^2}{\mathcal{D}_A}, \quad (1.7.9)$$

donde $k_1 [=] s^{-1}$ es el coeficiente de reacción. Para una reacción de orden cero $r_A = -k_0$, donde $k_0 [=] mol/m^3s$, el módulo de Thiele es:

$$\Phi_0^2 = \frac{k_0\ell^2}{c_{ref}\mathcal{D}_A}. \quad (1.7.10)$$

De estos casos, se puede deducir que el tiempo característico de una reacción de orden n es:

$$t_{rx} = (k_n c_{ref}^{n-1})^{-1}. \quad (1.7.11)$$

Entonces, el módulo de Thiele puede interpretarse como la razón entre el tiempo característico de la difusión respecto al tiempo característico de la reacción.

En ingeniería de reactores, se suele usar una definición más general que es el número de Damköhler, el cual se define como la razón entre el tiempo característico del transporte entre el tiempo característico de la reacción. Por ejemplo, en un reactor tipo tanque agitado, el tiempo característico del proceso es el tiempo de residencia, t_r , por lo tanto, el número de Damköhler será:

$$Da = k_n c_{ref}^{n-1} t_r. \quad (1.7.12)$$

Note que el número de Damköhler se reduce al módulo de Thiele cuando el transporte se da por difusión.

Ejercicio 1.10 Muestre que el módulo de Thiele para una reacción de segundo orden es

$$\Phi_2^2 = \frac{k_2 c_{ref} \ell^2}{\mathcal{D}_A}. \quad (1.7.13)$$

Ejercicio 1.11 Explique cómo se modificaría el módulo de Thiele para una reacción de primer orden en el caso en que la reacción sea heterogénea.

1.7.8 Números de Bond, capilar y de Weber

Estos números adimensionales son de especial importancia en flujos multifásicos. El número de Bond se define como la relación entre las fuerzas gravitacionales comparadas a la tensión superficial:

$$Bo = \frac{\rho g \ell^2}{\gamma}, \quad (1.7.14)$$

donde γ [N/m] es la tensión superficial entre los fluidos. De esta forma, cuando $Bo \gg 1$, las fuerzas gravitacionales dominan sobre las fuerzas de tensión superficial.

El número de capilar se define como la relación entre las fuerzas viscosas y las fuerzas de tensión superficial, esto es,

$$Ca = \frac{\mu v}{\gamma}. \quad (1.7.15)$$

En flujos en medios porosos, este número puede llegar a ser del orden de magnitud de 10^{-5} , en cuyo caso el flujo está dominado por las fuerzas capilares.

Una variante del número capilar es el número de Weber, el cual relaciona las fuerzas inerciales respecto a las fuerzas de tensión superficial:

$$We = ReCa = \frac{\rho v^2 \ell}{\gamma}. \quad (1.7.16)$$

1.8 Comentarios finales

En este capítulo se presentó una introducción al tipo de modelado matemático que se seguirá en el resto del texto. Resulta pertinente destacar algunos de los conceptos revisados en este capítulo: un modelo es una representación de una porción de la realidad. Cuando esta representación se hace de manera experimental se habla de modelos físicos, mientras que en este texto los modelos se representan de manera matemática. Entre las distintas clasificaciones de los modelos matemáticos

se distinguieron a los modelos probabilísticos (donde una misma entrada no necesariamente da lugar al mismo resultado) y a los deterministas (donde a una misma entrada siempre le corresponde la misma salida). Los modelos deterministas se clasificaron, de acuerdo con su origen, en modelos *a priori* (aquellos que están basados en principios fundamentales) y *a posteriori* (aquellos que requieren de datos experimentales para ser formulados). No debe olvidarse que esta clasificación no es un indicativo que los distintos tipos de modelos no puedan complementarse entre sí. De hecho en la práctica es común que, por ejemplo, los modelos *a priori* utilicen información que aportan los modelos *a posteriori*. Además de estas clasificaciones, con base en los niveles de escala espacial se pueden identificar a los modelos macroscópicos y a los modelos aplicables a la escala microscópica. En capítulos posteriores se deducirán modelos deterministas de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía térmica en ambos niveles de escala.

Se enfatizó que la mayoría de los sistemas de interés en ciencias e ingeniería son de naturaleza jerárquica, en donde el transporte de alguna propiedad a un cierto nivel de escala está regido por lo que ocurre en un nivel de escala inferior. Para llevar a cabo el proceso de promediado (suavizado espacial) y escalamiento (filtrado sistemático de información al ir de un nivel de escala a otro) en sistemas jerárquicos es necesario definir a un dominio de promediado representativo (o REV). Además de la separación de escalas espaciales, se distinguió entre la escala temporal termodinámica (la cual corresponde al tiempo que se requiere para que ya no ocurra ningún tipo de transporte en un sistema), y la escala de tiempo dinámica (que es el tiempo para que se alcance un estado estacionario, más no para que se termine el transporte de alguna propiedad). Por último, se definieron algunos de los números adimensionales más importantes en fenómenos de transporte y el papel que juegan. Algunos de ellos se retomarán en capítulos posteriores de este texto. Antes de comenzar con el desarrollo de las ecuaciones gobernantes del transporte de diversas propiedades en los niveles de escala microscópico y macroscópico, es pertinente completar los conceptos presentados en este capítulo con el instrumental matemático necesario para el resto del texto. Esto se presenta en el siguiente capítulo.



2. Instrumental matemático

2.1 Introducción

El propósito de este capítulo es proporcionar los elementos matemáticos más importantes para el desarrollo del material que se presenta en el resto del texto. Con este fin, se comienza por hacer un breve repaso de los conceptos de escalares, vectores y tensores en la sección 2.2. Posteriormente, se abordan algunas operaciones fundamentales que involucran a los vectores y tensores como son el producto diádico (sección 2.3), el producto punto (sección 2.4) y el uso de operadores de diferenciación espacial (operadores gradiente, divergencia y Laplaciano) y temporal (sección 2.5). Más adelante, en la sección 2.6 se presentan los teoremas de la divergencia, el teorema general del transporte y el teorema del promediado espacial. Los teoremas de la divergencia y del transporte son esenciales para la deducción de las ecuaciones fundamentales de fenómenos de transporte. Mientras que los teoremas general del transporte y del promediado espacial son de especial importancia para el desarrollo de modelos de medio efectivo como se muestra en capítulos posteriores.

2.2 Escalares, vectores y tensores

Como se revisó en el capítulo anterior, existen muchas maneras de clasificar a las cantidades físicas. Por ejemplo, aquellas como la velocidad, presión, densidad, temperatura, geometría, se conocen como *variables de estado* ya que con ellas se pueden describir las condiciones en las que se encuentra un determinado sistema (Gray y Gray, 2017).

En el estudio de diversos sistemas de interés práctico es común encontrar variables de estado, que con conocer su magnitud es suficiente para comprender su significado. Por ejemplo, la masa, la temperatura, o la longitud son cantidades que con aportar su valor numérico y conocer las unidades en que se expresan es suficiente para comprenderlas. Estas propiedades se denominan *escalares* y pueden definirse como sigue.

Definición 2.2.1 — Escalar. Es una propiedad que sólo requiere de su magnitud y unidades para entender su significado.

Aunque el uso de escalares es de lo más común, existen otro tipo de propiedades que además de su magnitud requieren conocer su dirección para entender su significado. Por ejemplo, no es lo mismo decir que se aplicó una fuerza de 100 N a un fluido en la dirección normal que en la dirección tangencial a sus superficie. De hecho, cuando dicha fuerza se expresa por unidad de área, en el primer caso se habla de la presión y en el segundo de la fuerza de corte, y ambas tienen un

significado físico distinto debido a la dirección en la que se ejercen a pesar de ser ambas una fuerza. Este tipo de cantidades se denominan *vectores* y pueden definirse como sigue

Definición 2.2.2 — Vector. Es una propiedad que requiere del conocimiento tanto de su magnitud como de su dirección para entender su significado.

Ya que los vectores requieren del conocimiento de la dirección en la que se aplican, es natural deducir que es necesario identificar el sistema coordenado al que están referidos. Por ejemplo, la velocidad de un automóvil en movimiento no se percibe de la misma forma si se encuentra el observador parado en la calle (sistema coordenado fijo) que si se encuentra en otro vehículo en movimiento (sistema coordenado móvil). Más adelante se discutirá más al respecto de los cambios que percibe un observador en función de su sistema de referencia. Por el momento es suficiente mencionar que la elección del tipo de sistema coordenado a utilizar para describir cantidades vectoriales es arbitrario y, siempre que sea posible, debe establecerse en la forma mas conveniente relativa al sistema bajo estudio.

En un sistema coordenado tridimensional, un vector como el de la velocidad (\mathbf{v}) tiene tres componentes (o proyecciones sobre cada uno de los ejes de un sistema coordenado) y puede expresarse de la siguiente manera

$$\mathbf{v} = v_1 \mathbf{e}_1 + v_2 \mathbf{e}_2 + v_3 \mathbf{e}_3 = \sum_{i=1}^{i=3} v_i \mathbf{e}_i \equiv v_i \mathbf{e}_i. \quad (2.2.1)$$

En esta ecuación, \mathbf{e}_i ($i = 1, 2, 3$) representan los vectores unitarios del sistema coordenado, mientras que v_i denotan las tres componentes del vector \mathbf{v} . En la última igualdad se muestra la *convención de la sumatoria* de Einstein (1916), la cual aprovecha el hecho de que la suma siempre se da del uno al tres por lo que puede prescindirse del símbolo de sumatoria para simplificar la notación. De hecho, a este tipo de representación se conoce como *notación indicial*.

De acuerdo con la ecuación (2.2.1) la dirección de un vector está definida por los valores de sus componentes en combinación con los vectores unitarios. Por ejemplo, si $v_1 = v_2 = 0$, la dirección del vector será paralela al eje 3. Las componentes de un vector no solo determinan su dirección, sino también su magnitud de acuerdo con la siguiente fórmula,

$$\|\mathbf{v}\| = \sqrt{v_1^2 + v_2^2 + v_3^2} = \sqrt{v_i v_i}. \quad (2.2.2)$$

Más aún, al dividir un vector entre su magnitud (siempre que esta sea distinta de cero) se obtiene como resultado un vector unitario en la dirección del vector

$$\mathbf{e}_v = \frac{\mathbf{v}}{\|\mathbf{v}\|}. \quad (2.2.3)$$

Además de los escalares y vectores, existen propiedades que requieren de conocer más de tres cantidades para comprender su significado, tal es el caso de los tensores. Por ejemplo, un tensor de segundo orden tiene nueve componentes, mientras que un tensor de tercer orden tiene 27 componentes. De aquí puede deducirse que el número de componentes de un tensor está dado por 3^n , siendo n el orden del tensor. De esta forma, un escalar puede concebirse como un tensor de orden cero (y tiene $3^0 = 1$ componente), un vector puede verse como un tensor de orden uno (con $3^1 = 3$ componentes) y así sucesivamente. Usando notación indicial, un tensor de segundo orden se define en términos de sus componentes A_{ij} y los vectores unitarios como sigue

$$\mathbf{A} = A_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j. \quad (2.2.4)$$

Note que las componentes A_{ij} de un tensor de segundo orden pueden representarse como una matriz de 3×3 . A pesar de que en este texto se ocupan mayoritariamente escalares, vectores y tensores de segundo orden, en la práctica no es raro encontrar tensores de tercer orden o incluso de órdenes superiores.

2.3 Producto diádico y transpuestas de tensores

Son muchas las operaciones que se pueden hacer con escalares, vectores y tensores que incluyen tanto simples manipulaciones algebraicas como operaciones de diferenciación e integración. Algunas de estas operaciones se describen en este texto pero para un conocimiento más profundo del tema se le recomienda al lector textos como los de [Aris \(1989\)](#) y [Simmonds \(1994\)](#). La primera operación que se discute aquí es el producto diádico entre dos vectores. Esta operación da como resultado un tensor de segundo orden como se muestra a continuación:

$$\mathbf{ab} \equiv \mathbf{a} \otimes \mathbf{b} = (a_i \mathbf{e}_i)(b_j \mathbf{e}_j) = a_i b_j \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j = A_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j = \mathbf{A}. \quad (2.3.1)$$

De manera similar, el producto diádico entre un vector y un tensor de segundo orden da lugar a un tensor de tercer orden de acuerdo con la siguiente expresión

$$\mathbf{aB} = (a_i \mathbf{e}_i)(B_{jk} \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k) = a_i B_{jk} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k = C_{ijk} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k = \mathbf{C}, \quad (2.3.2)$$

y un resultado equivalente se obtiene al hacer el producto diádico entre tres vectores.

Cabe mencionar que existen algunas operaciones que sólo pueden aplicarse a tensores de segundo orden en adelante. Por ejemplo, un vector no tiene inversa pero un tensor de segundo orden sí. Además, la *transpuesta* de un tensor de segundo orden consiste en intercambiar las filas por columnas de la matriz que definen sus componentes. Lo anterior puede expresarse en notación indicial como sigue

$$\mathbf{A}^T = A_{ji} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j = A_{ij} \mathbf{e}_j \mathbf{e}_i. \quad (2.3.3)$$

Cuando un tensor es igual a su transpuesta, esto es,

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^T, \quad (2.3.4)$$

se dice que es un *tensor simétrico*. Mientras que cuando se cumple la siguiente relación:

$$\mathbf{A}^T = -\mathbf{A}, \quad (2.3.5)$$

se dice que el tensor es *antisimétrico*. Cualquier tensor de segundo orden puede ser sujeto a la siguiente *descomposición fundamental* en sus partes simétrica y antisimétrica

$$\mathbf{A} = \underbrace{\frac{1}{2}(\mathbf{A} + \mathbf{A}^T)}_{\text{tensor simétrico}} + \underbrace{\frac{1}{2}(\mathbf{A} - \mathbf{A}^T)}_{\text{tensor antisimétrico}}. \quad (2.3.6)$$

Los tensores de tercer orden también pueden transponerse de las siguientes tres formas

$$\mathbf{B}^{T1} = B_{jik} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k = B_{ijk} \mathbf{e}_j \mathbf{e}_i \mathbf{e}_k, \quad (2.3.7a)$$

$$\mathbf{B}^{T2} = B_{ikj} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k = B_{ijk} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_k \mathbf{e}_j, \quad (2.3.7b)$$

$$\mathbf{B}^{T3} = B_{kji} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k = B_{ijk} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_j \mathbf{e}_i, \quad (2.3.7c)$$

donde los superíndices $T1$, $T2$ y $T3$ se usaron para distinguir el intercambio de los primeros dos índices, los últimos dos índices y el primer y tercer índice, respectivamente. Como es de esperarse, en cuanto mayor sea el orden del tensor también lo será la cantidad de posibilidades de transposición (ver ejercicio 2.2).

Un tipo especial de vector es el operador diferencial *nabla*, el cual se distingue porque sus componentes son las derivadas respecto a la posición en cada dirección y está definido como sigue

$$\nabla = \mathbf{e}_i \frac{\partial}{\partial x_i}. \quad (2.3.8)$$

Cuando este operador diferencial se aplica en producto diádico, se define al operador gradiente como:

Definición 2.3.1 — Operador gradiente. Sea φ una función escalar, vectorial o tensorial continua en el espacio, entonces el gradiente de φ se define como

$$\nabla\varphi = \mathbf{e}_i \frac{\partial\varphi}{\partial x_i}. \quad (2.3.9)$$

Note que si $\varphi = a$ (un escalar), el resultado es el siguiente vector

$$\nabla a = \mathbf{e}_i \frac{\partial a}{\partial x_i}. \quad (2.3.10a)$$

Ahora bien, cuando $\varphi = \mathbf{a}$ (un vector), el operador gradiente da como resultado el siguiente tensor de segundo orden

$$\nabla\mathbf{a} = \frac{\partial a_j}{\partial x_i} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j. \quad (2.3.10b)$$

Por último, el gradiente de un tensor de segundo orden ($\varphi = \mathbf{A}$) da como resultado un tensor de tercer orden como se muestra a continuación

$$\nabla\mathbf{A} = \left(\mathbf{e}_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right) (A_{jk} \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k) = \frac{\partial A_{jk}}{\partial x_i} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k. \quad (2.3.10c)$$

Por supuesto, el operador gradiente puede aplicarse a tensores de orden superior, siempre y cuando sus componentes sean funciones continuas de la posición.

Considere por ejemplo a la temperatura de un material, T , la cual es un escalar, según la definición anterior, el gradiente de la temperatura se define como

$$\nabla T = \mathbf{e}_i \frac{\partial T}{\partial x_i}. \quad (2.3.11)$$

Para comprender el significado físico de esta cantidad, es conveniente recordar que los valores de las componentes de un vector definen su dirección y que la derivada espacial representa la razón de cambio de una propiedad respecto a la posición. Entonces, se puede concluir que el gradiente de temperatura indica la dirección espacial en donde tienen lugar los cambios más importantes de la temperatura de un material.

Más aún, el vector de posición relativo a un sistema coordenado arbitrario se define como

$$\mathbf{r} = x_i \mathbf{e}_i; \quad (2.3.12)$$

entonces el gradiente de este vector define al tensor identidad, \mathbf{I} , de la siguiente forma

$$\nabla\mathbf{r} = \left(\mathbf{e}_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right) (x_j \mathbf{e}_j) = \frac{\partial x_j}{\partial x_i} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j = \delta_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j = \mathbf{I}. \quad (2.3.13)$$

Para obtener este resultado se utilizó a la delta de Kronecker, la cual se define como

Definición 2.3.2 — Delta de Kronecker.

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{sí } i = j \\ 0, & \text{sí } i \neq j \end{cases}. \quad (2.3.14)$$

Esta definición es pertinente ya que x_j es independiente de x_i cuando $i \neq j$ y por ello $\partial x_j / \partial x_i = 0$ en este caso, mientras que cuando $i = j$, se cumple que $\partial x_j / \partial x_i = 1$. De esta forma, la delta de Kronecker hace que los índices i se conviertan en índices j y viceversa. Tomando en cuenta esto último, el tensor identidad puede escribirse como sigue

$$\mathbf{I} = \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i = \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.3.15)$$

Ejercicio 2.1 — Presión. La presión se entiende como la fuerza que se ejerce sobre una superficie. Ya que la fuerza es un vector, ¿es la presión un escalar o un vector? argumente y justifique suficientemente su respuesta. ■

Ejercicio 2.2 — Transpuestas de un tensor de cuarto orden. Un tensor de cuarto orden, como el tensor de elasticidad involucrado en la ley de Hooke que rige la mecánica de sólidos, está definido como

$$\mathbf{A} = A_{ijkl} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k \mathbf{e}_l. \quad (2.3.16)$$

Determine cada una de las transpuestas que pueden aplicarse a este tensor. ■

Ejercicio 2.3 — Tensores de vorticidad y deformación. Aplique la descomposición fundamental al gradiente de velocidad para recuperar la siguiente expresión

$$\nabla \mathbf{v} = \mathbf{D} + \mathbf{W}. \quad (2.3.17)$$

En donde los tensores de deformación (\mathbf{D}) y de vorticidad (\mathbf{W}) se definen como

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T], \quad (2.3.18a)$$

$$\mathbf{W} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{v} - (\nabla \mathbf{v})^T]. \quad (2.3.18b)$$

Discuta acerca del significado físico de estos tensores y su relación con el flujo de fluidos. ■

Ejercicio 2.4 Demuestre las siguientes identidades

$$\nabla(ab) = b \nabla a + a \nabla b, \quad (2.3.19a)$$

$$\nabla(\mathbf{a}\mathbf{b}) = (\nabla \mathbf{a})\mathbf{b} + (\mathbf{a}\nabla \mathbf{b})^T. \quad (2.3.19b)$$

En las ecuaciones anteriores a y b son funciones escalares, mientras que \mathbf{a} y \mathbf{b} son funciones vectoriales. ■

2.4 Producto punto o interno

Entre las operaciones fundamentales entre vectores y tensores más relevantes se encuentra el producto punto o interno y puede llevarse a cabo entre vectores y tensores. El producto punto entre dos vectores se define como sigue

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \|\mathbf{a}\| \|\mathbf{b}\| \cos \theta_{\mathbf{ab}}, \quad 0 \leq \theta_{\mathbf{ab}} \leq \pi, \quad (2.4.1)$$

donde $\theta_{\mathbf{ab}}$ es el ángulo entre los vectores \mathbf{a} y \mathbf{b} , mientras que $\|\mathbf{a}\|$ y $\|\mathbf{b}\|$ denotan las magnitudes de los vectores \mathbf{a} y \mathbf{b} . Ya que $\cos \theta_{\mathbf{aa}} = \cos 0 = 1$, el producto interno de un vector consigo mismo da como resultado la magnitud de dicho vector al cuadrado. Esto es:

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{a} = \|\mathbf{a}\|^2. \quad (2.4.2)$$

De acuerdo con la definición dada en la ecuación (2.4.1) y haciendo uso de la notación indicial se deduce que

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = (a_i \mathbf{e}_i) \cdot (b_j \mathbf{e}_j) = a_i b_j (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j) = a_i b_j \cos \theta_{\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j}. \quad (2.4.3)$$

En la última igualdad se tomó en cuenta el hecho de que la magnitud de los vectores unitarios es uno. Ya que los vectores unitarios son ortogonales, se deduce que si $i \neq j$, entonces $\cos \theta_{\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j} = 0$, mientras que si $i = j$, se cumple que $\cos \theta_{\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j} = 1$. Estas observaciones motivan a usar de nuevo a la delta de Kronecker (ver ecuación 2.3.14) para deducir que

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_i b_j \delta_{ij} = a_i b_i. \quad (2.4.4)$$

Este resultado da una nueva propiedad a la convención de la sumatoria pues ahora dos índices repetidos no solo implican que hay una sumatoria de tres términos, sino que además hay un producto punto. Más aún, comparando los resultados dados en las ecuaciones (2.4.3) y (2.4.4) se deduce el siguiente resultado para el producto punto entre vectores unitarios

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij}. \quad (2.4.5)$$

Por supuesto, las aplicación del producto interno no está limitada a vectores. El producto punto de un tensor de segundo orden con un vector puede desarrollarse como se muestra a continuación

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{b} = (A_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j) \cdot (b_k \mathbf{e}_k) = A_{ij} b_k \underbrace{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_k}_{\delta_{ik}} = A_{ij} b_j \mathbf{e}_i. \quad (2.4.6)$$

Note que el resultado es un vector y que para llegar a esta conclusión se utilizó la identidad dada en la ecuación (2.4.5) y que se llevó a cabo el producto punto entre los vectores unitarios más cercanos, lo cual se conoce como una *convención de anidamiento*.

Más aún, el producto interno entre dos tensores de segundo orden puede llevarse a cabo como se muestra a continuación

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = (A_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j) \cdot (B_{kl} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_l) = A_{ij} B_{kl} \mathbf{e}_i \underbrace{(\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}_k)}_{\delta_{jk}} \mathbf{e}_l = A_{ij} B_{jl} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_l; \quad (2.4.7)$$

y el resultado es claramente otro tensor de segundo orden. Esto sugiere que si se lleva a cabo una segunda operación de producto interno el resultado final puede reducirse a un escalar. Esto es:

$$\mathbf{A} : \mathbf{B} = (A_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j) : (B_{kl} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_l) = A_{ij} B_{kl} (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_l) (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}_k) = A_{ij} B_{ji}. \quad (2.4.8)$$

Este resultado es de utilidad para definir la magnitud de un tensor de segundo orden como sigue

$$\|\mathbf{A}\| = \frac{1}{2} \sqrt{\mathbf{A} : \mathbf{A}} = \frac{1}{2} \sqrt{A_{ij} A_{ji}}. \quad (2.4.9)$$

Cuando el producto punto se hace entre el operador nabla y un vector o un tensor, se define al operador de divergencia como se explica a continuación.

Definición 2.4.1 — Operador divergencia. Sea φ una función vectorial o tensorial continua en el espacio, el operador divergencia se define, cuando $\varphi = \mathbf{a}$ (un vector) como

$$\nabla \cdot \mathbf{a} = \left(\mathbf{e}_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right) \cdot (a_j \mathbf{e}_j) = \frac{\partial a_j}{\partial x_i} \underbrace{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j}_{\delta_{ij}} = \frac{\partial a_i}{\partial x_i}. \quad (2.4.10)$$

Mientras que para un tensor de segundo orden (esto es $\varphi = \mathbf{A}$), el resultado es

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \left(\mathbf{e}_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right) \cdot (A_{jk} \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k) = \frac{\partial A_{jk}}{\partial x_i} \underbrace{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j}_{\delta_{ij}} \mathbf{e}_k = \frac{\partial A_{ik}}{\partial x_i} \mathbf{e}_k. \quad (2.4.11)$$

Al igual que para el operador gradiente, la divergencia puede aplicarse tensores de orden superior, siempre y cuando sean funciones continuas.

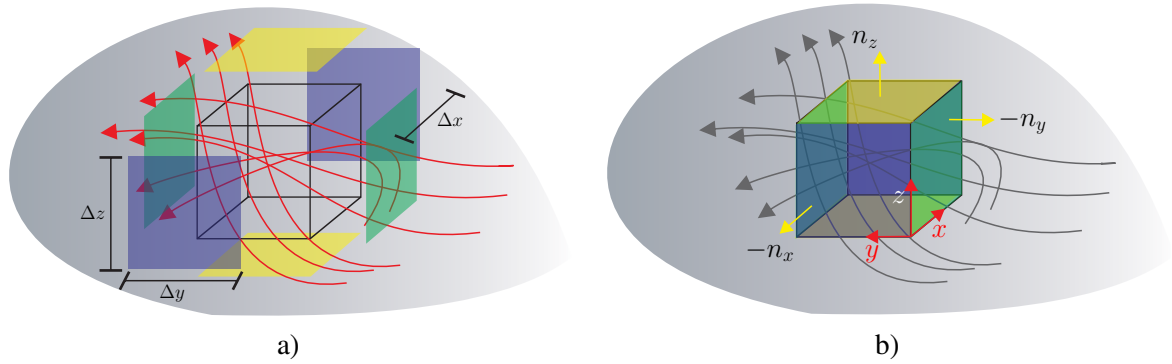


Figura 2.1: a) Esquema del flujo de un fluido a través de una región de integración de forma cúbica. b) Ubicación del sistema coordenado en el cubo, incluyendo ejemplos de las direcciones de tres vectores unitarios.

Para comprender el significado físico de este operador, considere el esquema mostrado en la figura 2.1 en donde se muestra el flujo de un fluido a través de una región de integración que se eligió, por simplicidad, que tenga forma cúbica. El flujo volumétrico (que es un escalar) se define como el producto de la proyección normal de la velocidad por el área correspondiente a cada cara del cubo. Esto es,

$$\dot{Q} = \int_{\Delta\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \, dA = \int_{\Delta\mathcal{A}} n_i v_i \, dA. \quad (2.4.12)$$

En la ecuación anterior $\mathbf{n} = n_i \mathbf{e}_i$ representa al vector unitario normal a cada superficie del cubo. Como se muestra en la figura 2.1b), los vectores normales siempre van dirigidos desde la superficie hacia afuera del cubo y adquieren signos positivos cuando las direcciones coinciden con las del sistema coordenado y negativos en caso contrario. Tomando en cuenta estas observaciones, se deduce lo siguiente

$$\int_{\Delta\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \, dA = (\langle v_x \rangle|_{x+\Delta x} - \langle v_x \rangle|_x) \Delta y \Delta z + (\langle v_y \rangle|_{y+\Delta y} - \langle v_y \rangle|_y) \Delta x \Delta z + (\langle v_z \rangle|_{z+\Delta z} - \langle v_z \rangle|_z) \Delta y \Delta x. \quad (2.4.13)$$

En la ecuación anterior se usaron los siguientes operadores de promediado

$$\langle v_x \rangle = \frac{1}{\Delta y \Delta z} \int_y^{y+\Delta y} \int_z^{z+\Delta z} v_x \, dz dy, \quad (2.4.14a)$$

$$\langle v_y \rangle = \frac{1}{\Delta x \Delta z} \int_x^{x+\Delta x} \int_z^{z+\Delta z} v_y \, dz dx, \quad (2.4.14b)$$

$$\langle v_z \rangle = \frac{1}{\Delta y \Delta x} \int_y^{y+\Delta y} \int_x^{x+\Delta x} v_z \, dx dy. \quad (2.4.14c)$$

Dividiendo ambos lados de la ecuación (2.4.13) entre el volumen del cubo $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$ y tomando el límite cuando este volumen tiende a cero se obtiene, al tomar en cuenta la definición de derivada, la siguiente expresión

$$\lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \, dA = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = \nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (2.4.15)$$

Esta expresión muestra que la divergencia de la velocidad representa el flujo neto de un fluido por unidad de volumen en cada punto. Entonces, cuando $\nabla \cdot \mathbf{v} > 0$, el flujo se expande y se dice

que es *divergente*. En el caso contrario, cuando $\nabla \cdot \mathbf{v} < 0$, el flujo es *convergente* pues se está comprimiendo el fluido. Por último, si $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ el flujo es incompresible (o subsónico, ver sección 1.7.1) y el vector de velocidad se dice que es *solenoidal*.

Para concluir esta sección se presenta un operador diferencial de especial importancia y que se utilizará en este texto, el cual es el operador Laplaciano. Este operador diferencial resulta de tomar la divergencia del gradiente de una función y se define como sigue

Definición 2.4.2 — Operador laplaciano. Sea φ una función (escalar, vectorial o tensorial) continua en el espacio, el operador laplaciano se define como

$$\nabla \cdot (\nabla \varphi) = \nabla^2 \varphi. \quad (2.4.16)$$

Más aún, se dice que una función es *potencial* cuando satisface la siguiente ecuación diferencial

$$\nabla^2 \varphi = 0, \quad (2.4.17a)$$

la cual se conoce como *ecuación de Laplace*. Note que esta ecuación es una forma particular de la siguiente ecuación diferencial no homogénea

$$\nabla^2 \varphi = f(\mathbf{r}), \quad (2.4.17b)$$

la cual se conoce como *ecuación de Poisson*. En esta última ecuación $f(\mathbf{r})$ es una función continua de la posición.

Ejercicio 2.5 Demuestre las siguientes identidades usando notación indicial

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{a}, \quad (2.4.18a)$$

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{e}_1 = a_1, \quad (2.4.18b)$$

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{A}^T, \quad (2.4.18c)$$

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = (\mathbf{B}^T \cdot \mathbf{A}^T)^T. \quad (2.4.18d)$$

Ejercicio 2.6 Utilice la definición del tensor identidad ($\mathbf{I} = \delta_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j$) para demostrar las siguientes identidades

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{I} = \mathbf{a}, \quad (2.4.19a)$$

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{I} = \mathbf{A}. \quad (2.4.19b)$$

Ejercicio 2.7 Utilice notación indicial para determinar si la siguiente igualdad es válida o no

$$\mathbf{A} : \mathbf{B} = \mathbf{B} : \mathbf{A}.$$

Ejercicio 2.8 Demuestre las siguientes identidades

$$\nabla \cdot (\varphi \mathbf{a}) = \varphi (\nabla \cdot \mathbf{a}) + \mathbf{a} \cdot \nabla \varphi, \quad (2.4.20a)$$

$$\mathbf{a} = \nabla \cdot (\mathbf{a} \mathbf{r}) - (\nabla \cdot \mathbf{a}) \mathbf{r}. \quad (2.4.20b)$$

En la ecuación (2.4.20a) φ es una función escalar y \mathbf{a} es una función vectorial. Esta misma

función aparece en la ecuación (2.4.20b), donde además \mathbf{r} es el vector de posición definido en la ecuación (2.3.12) ■

2.5 Derivadas temporales

En las secciones anteriores se definieron algunas operaciones fundamentales con vectores y tensores. Además, se definieron los operadores diferenciales gradiente, divergencia y laplaciano, los cuales sirven para derivar espacialmente funciones continuas. En esta sección se presentan las diferentes formas de derivar funciones respecto al tiempo. Aunque a primera vista esta operación pareciera trivial, en realidad la forma de derivar respecto al tiempo una función depende del observador. Esto último no es de sorprender, pues los cambios temporales de una propiedad no se aprecian de igual forma si el observador está fijo, o si se mueve con una velocidad arbitraria. Es en este sentido que se definen las siguientes tres derivadas temporales (Bird y col., 2006; Slattery, 1999; Gray y Gray, 2017):

Definición 2.5.1 — Derivadas temporales. Considere una función (escalar, vectorial o tensorial) φ , la cual es continua en el espacio y en el tiempo. Dependiendo del movimiento del observador, se pueden definir las siguientes derivadas temporales:

1. **Derivada parcial:** Describe los cambios de una función que registra un observador fijo en el espacio. Esta derivada de hecho está presente en los otros dos tipos de derivadas. En forma matemática se representa como

$$\left. \frac{d\varphi}{dt} \right|_{\mathbf{r}} = \frac{\partial \varphi}{\partial t}. \quad (2.5.1)$$

2. **Derivada total:** Describe los cambios temporales de una propiedad que mide un observador que se mueve a una velocidad arbitraria \mathbf{w} . En forma matemática se expresa esta derivada como sigue

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathbf{w} \cdot \nabla \varphi. \quad (2.5.2)$$

Como puede notarse, el primer término corresponde a los cambios de la propiedad medidos por un observador fijo, por lo que el segundo término puede interpretarse como una compensación que considera el movimiento arbitrario del observador.

3. **Derivada material:** Este tipo de derivada aplica a casos en los que la propiedad que se desea estudiar está en un fluido en movimiento. Esta derivada describe los cambios temporales de una función medidos por un observador que se mueve a la velocidad del fluido \mathbf{v} . La forma matemática de esta derivada se deduce a partir de la derivada total al tomar $\mathbf{w} = \mathbf{v}$ y se expresa como

$$\left. \frac{d\varphi}{dt} \right|_{\mathbf{w}=\mathbf{v}} \equiv \frac{D\varphi}{Dt} = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \varphi. \quad (2.5.3)$$

Como puede notarse, cuando φ se encuentra en estado estacionario (es decir, cuando es independiente del tiempo), sólo la derivada parcial se reduce a cero. Más aún, estas derivadas se aplicaron a una función definida a la escala microscópica. En la siguiente sección se aplican a integrales de funciones definidas en tres tipos de regiones de integración.

2.6 Teoremas integrales

2.6.1 Teorema de la divergencia

Teorema 2.6.1 — Teorema de la divergencia. Sea $\boldsymbol{\varphi}$ una función vectorial o tensorial continua, derivable y que su derivada sea también continua en el espacio, la integral volumétrica de su

divergencia satisface la siguiente identidad

$$\int_{\mathcal{V}} \nabla \cdot \boldsymbol{\varphi} \, dV = \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\varphi} \, dA. \quad (2.6.1)$$

En la ecuación anterior, \mathcal{A} representa a la superficie de \mathcal{V} .

Como puede notarse, este teorema solo puede aplicarse para vectores y tensores pues es para estas cantidades que puede usarse el operador de divergencia (ver definición 2.4.1). Sin embargo, a partir de la ecuación (2.6.1) puede desarrollarse una forma alternativa que es aplicable al operador gradiente (ver ejercicio 2.9)

El teorema de la divergencia puede usarse además para deducir la *fórmula de Green*, la cual es de especial importancia en la solución de problemas de valor a la frontera como se muestra en capítulos posteriores de este texto. Para ello, considere primeramente a la ecuación (2.6.1) para el caso en el que $\boldsymbol{\varphi} = \phi \nabla \phi$, en donde ϕ y ϕ son funciones escalares continuas del espacio, el resultado es

$$\int_{\mathcal{V}} (\phi \nabla^2 \phi + \nabla \phi \cdot \nabla \phi) \, dV = \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot \phi \nabla \phi \, dA. \quad (2.6.2)$$

Si ahora se toma $\boldsymbol{\varphi} = \phi \nabla \phi$, se obtiene una expresión equivalente

$$\int_{\mathcal{V}} (\phi \nabla^2 \phi + \nabla \phi \cdot \nabla \phi) \, dV = \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot \phi \nabla \phi \, dA. \quad (2.6.3)$$

De esta forma, al restar la ecuación anterior a la ecuación (2.6.2), tomando en cuenta que $\nabla \phi \cdot \nabla \phi = \nabla \phi \cdot \nabla \phi$, se obtiene

Definición 2.6.1 — Fórmula de Green entre escalares. Sean ϕ y ϕ funciones escalares espacialmente continuas, entonces se cumple que

$$\int_{\mathcal{V}} (\phi \nabla^2 \phi - \phi \nabla^2 \phi) = \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot (\phi \nabla \phi - \phi \nabla \phi) \, dA. \quad (2.6.4)$$

Cabe insistir que esta versión de la fórmula de Green sólo es aplicable a funciones escalares. En el ejercicio 2.10 se deducen versiones alternativas aplicables a funciones vectoriales y tensoriales.

Ejercicio 2.9 Considere el teorema de la divergencia en la forma dada en la ecuación (2.6.1) y suponga que $\boldsymbol{\varphi} = \mathbf{c}\phi$, en donde \mathbf{c} es un vector constante no nulo y ϕ es una función tensorial continua de exactamente un orden inferior que $\boldsymbol{\varphi}$. Utilice este cambio de variables y lleve a cabo las operaciones correspondientes para deducir la siguiente expresión

$$\int_{\mathcal{V}} \nabla \phi \, dV = \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \phi \, dA. \quad (2.6.5)$$

Ejercicio 2.10 — Versiones alternativas de la fórmula de Green. Considere a las funciones vectoriales, \mathbf{a} y \mathbf{b} , y tensoriales \mathbf{A} y \mathbf{B} , las cuales son espacialmente continuas. Demuestre las

siguientes identidades, las cuales son versiones alternativas de la fórmula de Green

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{V}} [\mathbf{a} \cdot (\nabla \cdot (\nabla \mathbf{b} + \nabla \mathbf{b}^T)) - \mathbf{b} \cdot (\nabla \cdot (\nabla \mathbf{a} + \nabla \mathbf{a}^T))] dV \\ &= \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot [\mathbf{a} \cdot (\nabla \mathbf{b} + \nabla \mathbf{b}^T) - \mathbf{b} \cdot (\nabla \mathbf{a} + \nabla \mathbf{a}^T)] dA, \end{aligned} \quad (2.6.6a)$$

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{V}} [\mathbf{a} \cdot (\nabla \cdot (\nabla \mathbf{B} + \nabla \mathbf{B}^{T1})) - (\nabla \cdot (\nabla \mathbf{a} + \nabla \mathbf{a}^T)) \cdot \mathbf{B}] dV \\ &= \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot [\mathbf{a} \cdot (\nabla \mathbf{B} + \nabla \mathbf{B}^{T1}) - (\nabla \mathbf{a} + \nabla \mathbf{a}^T) \cdot \mathbf{B}] dA, \end{aligned} \quad (2.6.6b)$$

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{V}} [\mathbf{A}^T \cdot (\nabla \cdot (\nabla \mathbf{B} + \nabla \mathbf{B}^{T1})) - (\nabla \cdot (\nabla \mathbf{A} + \nabla \mathbf{A}^{T1}))^T \cdot \mathbf{B}] dV \\ &= \int_{\mathcal{A}} [\mathbf{A}^T \cdot (\mathbf{n} \cdot (\nabla \mathbf{B} + \nabla \mathbf{B}^{T1})) - (\mathbf{n} \cdot (\nabla \mathbf{A} + \nabla \mathbf{A}^{T1}))^T \cdot \mathbf{B}] dA. \end{aligned} \quad (2.6.6c)$$

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{V}_\alpha} [\mathbf{a} \cdot (d\mathbf{a}^v \cdot \nabla \mathbf{B} - \nabla \mathbf{b} + c \nabla \cdot (\nabla \mathbf{B} + \nabla \mathbf{B}^{T1})) - (-d\mathbf{a}^v \cdot \nabla \mathbf{a} - \nabla a + c \nabla \cdot (\nabla \mathbf{a} + \nabla \mathbf{a}^T)) \cdot \mathbf{B}] dV \\ & - \int_{\mathcal{V}_\alpha} [(\nabla \cdot \mathbf{a}) \mathbf{b} - d(\nabla \cdot \mathbf{a}^v)(\mathbf{a} \cdot \mathbf{B}) - (\nabla \cdot \mathbf{B})a] dV \\ &= \int_{\mathcal{A}_\alpha} [\mathbf{a} \cdot (\mathbf{n} \cdot (-\mathbf{l}\mathbf{b} + c(\nabla \mathbf{B} + \nabla \mathbf{B}^{T1}))) - \mathbf{n} \cdot (-d\mathbf{a}^v \mathbf{a} - \mathbf{l}a + c(\nabla \mathbf{a} + \nabla \mathbf{a}^T))] \cdot \mathbf{B}] dA, \end{aligned} \quad (2.6.6d)$$

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{V}_\alpha} [\mathbf{A}^T \cdot \left(\frac{\rho_\alpha}{\mu_\alpha} \mathbf{v}_\alpha \cdot \nabla \mathbf{B} - \nabla \mathbf{b} + c \nabla^2 \mathbf{B} \right) - \left(-\frac{\rho_\alpha}{\mu_\alpha} \mathbf{v}_\alpha \cdot \nabla \mathbf{A} - \nabla a + c \nabla^2 \mathbf{A} \right)^T \cdot \mathbf{B}] dV \\ &= \int_{\mathcal{A}_\alpha} \left[\mathbf{A}^T \cdot (\mathbf{n} \cdot (-\mathbf{l}\mathbf{b} + c(\nabla \mathbf{B} + \nabla \mathbf{B}^{T1}))) - \left(\mathbf{n} \cdot \left(-\frac{\rho_\alpha}{\mu_\alpha} \mathbf{v}_\alpha \mathbf{A} - \mathbf{l}a + c(\nabla \mathbf{A} + \nabla \mathbf{A}^{T1}) \right) \right)^T \cdot \mathbf{B} \right] dA. \end{aligned} \quad (2.6.6e)$$

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{V}_\alpha} [(d\mathbf{a}^v \cdot \nabla \mathbf{a} - \nabla a + c \nabla \cdot (\nabla \mathbf{a} + \nabla \mathbf{a}^T)) \cdot \mathbf{B} - \mathbf{a} \cdot (-d\mathbf{a}^v \cdot \nabla \mathbf{B} - \nabla \mathbf{b} + c \nabla \cdot (\nabla \mathbf{B} + \nabla \mathbf{B}^{T1}))] dV \\ & + \int_{\mathcal{V}_\alpha} [(\nabla \cdot \mathbf{a}) \mathbf{b} + d(\nabla \cdot \mathbf{a}^v)(\mathbf{a} \cdot \mathbf{B}) - (\nabla \cdot \mathbf{B})a] dV \\ &= \int_{\mathcal{A}_\alpha} [\mathbf{n} \cdot (d\mathbf{a}^v \mathbf{a} - \mathbf{l}a + c(\nabla \mathbf{a} + \nabla \mathbf{a}^T)) \cdot \mathbf{B} - \mathbf{a} \cdot (\mathbf{n} \cdot (-\mathbf{l}\mathbf{b} + c(\nabla \mathbf{B} + \nabla \mathbf{B}^{T1})))] dA, \end{aligned} \quad (2.6.6f)$$

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{V}_\alpha} [\mathbf{a} \cdot (d\mathbf{a} \cdot \nabla \mathbf{b} - \nabla b + c \nabla \cdot (\nabla \mathbf{b} + \nabla \mathbf{b}^T)) - \mathbf{b} \cdot (-d\mathbf{a} \cdot \nabla \mathbf{a} - \nabla a + c \nabla \cdot (\nabla \mathbf{a} + \nabla \mathbf{a}^T))] dV \\ & - \int_{\mathcal{V}_\alpha} [(b - d\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \nabla \cdot \mathbf{a} - a \nabla \cdot \mathbf{b}] dV \\ &= \int_{\mathcal{A}_\alpha} [\mathbf{a} \cdot (\mathbf{n} \cdot (d\mathbf{a}\mathbf{b} - \mathbf{l}b + c(\nabla \mathbf{b} + \nabla \mathbf{b}^T))) - \mathbf{b} \cdot (\mathbf{n} \cdot (-\mathbf{l}a + c(\nabla \mathbf{a} + \nabla \mathbf{a}^T)))] dA. \end{aligned} \quad (2.6.6g)$$

■

2.6.2 Teorema general del transporte

En la sección 2.5 se definieron tres posibilidades en las que un observador puede cuantificar los cambios temporales de una función. Estas posibilidades corresponden a que el observador pueda quedarse fijo, pueda moverse a una velocidad arbitraria \mathbf{w} o bien a que se mueva a la misma velocidad \mathbf{v} del fluido. En una forma similar pueden definirse tres tipos de regiones¹ de integración espacial:

Definición 2.6.2 — Regiones de integración.

1. **Región fija** \mathcal{V}_f : Su forma y tamaño no cambian con la posición ni con el tiempo. Permite el transporte a través de sus fronteras (\mathcal{A}_f).
2. **Región arbitraria** \mathcal{V}_A : Su forma y tamaño pueden cambiar con la posición y el tiempo sin restricción alguna. Al igual que para la región fija permite que haya transporte a través de sus fronteras cuya velocidad de desplazamiento es \mathbf{w} .
3. **Región material** \mathcal{V}_M : Su forma y tamaño pueden cambiar con la posición y el tiempo pero \mathcal{V}_M debe contener siempre la misma cantidad de materia. Por tanto, no permiten el transporte a través de sus fronteras, las cuales se desplazan a la velocidad del fluido, \mathbf{v} .

Tanto el teorema de la divergencia, como la fórmula de Green pueden aplicarse a estas tres regiones de integración. Más aún, cuando se requiere tomar la derivada temporal de una integral definida en alguna de las tres regiones definidas arriba resultan diferentes identidades. Como es lógico suponer, a una región fija le corresponde una derivada parcial, mientras que a una región arbitraria le corresponde una derivada total y a una región material le corresponde una derivada material. Para una función φ (escalar, vectorial o tensorial) que es continua en el espacio y en el tiempo y que está siendo integrada en una región fija (\mathcal{V}_f), el resultado de tomar su derivada parcial respecto al tiempo es directo y está dado por la siguiente identidad

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}_f} \varphi dV = \int_{\mathcal{V}_f} \frac{\partial \varphi}{\partial t} dV. \quad (2.6.7)$$

Como puede observarse, ya que los límites de integración son independientes del tiempo, en este caso las operaciones de diferenciación temporal e integración espacial pueden intercambiarse con libertad. Sin embargo, cuando se deriva temporalmente a una integral en una región arbitraria (\mathcal{V}_A), no puede hacerse un intercambio directo de operaciones. En este caso, aplica el siguiente teorema

Teorema 2.6.2 — Teorema general del transporte.

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \varphi dV = \int_{\mathcal{V}_A} \frac{\partial \varphi}{\partial t} dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{w}\varphi) dA. \quad (2.6.8)$$

El término del lado izquierdo representa la razón de cambio en el tiempo de la integral de la función φ , mientras que el primer término en el lado derecho es la integral volumétrica de la acumulación de φ . El segundo término en el lado derecho representa una contribución debida al desplazamiento de la superficie \mathcal{A}_A .

Como puede observarse, lo que se consigue con este teorema es intercambiar las operaciones de diferenciación temporal e integración espacial en una región arbitraria. Sin embargo, ya que las fronteras de la región son, en general, móviles, es necesario contar con una contribución adicional que considere esta situación. Este es el papel que juega el último término en el lado derecho de la ecuación (2.6.8).

Ya que una región arbitraria puede reducirse a una región material (\mathcal{V}_M) (al no permitir transporte por sus fronteras y haciendo que se desplacen a la velocidad del fluido \mathbf{v}), entonces a partir del teorema general del transporte puede deducirse el siguiente teorema:

¹En este contexto se usan los términos *región* o *dominio* para denotar porciones tridimensionales del espacio donde se lleva a cabo una operación de integración.

Teorema 2.6.3 — Teorema del transporte de Reynolds.

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \varphi dV = \int_{\mathcal{V}_M} \frac{\partial \varphi}{\partial t} dV + \int_{\mathcal{A}_M} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v}\varphi) dA. \quad (2.6.9)$$

Estos teoremas son de especial importancia en la deducción de las ecuaciones gobernantes del transporte de cantidad de movimiento, calor y masa como se muestra en capítulos posteriores.

■ **Ejemplo 2.1 — Crecimiento celular.** En su estudio del crecimiento celular (fase- σ) en biopelículas, Wood y Whitaker (1999) partieron de la ecuación de conservación de masa total en la fase celular al nivel de escala microscópico (esta ecuación se deduce en la sección 3.4.1)

$$\frac{\partial \rho_\sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\sigma \mathbf{v}_\sigma) = 0. \quad (2.6.10)$$

En donde ρ_σ y \mathbf{v}_σ representan la densidad y velocidad de las células al nivel de escala microscópico. En esta ecuación, el primer término representa la acumulación de masa y el segundo término el transporte de masa en cada punto de las células. El propósito de este ejemplo es deducir la versión macroscópica de esta ecuación usando los teoremas general del transporte y de la divergencia y explicar el significado físico de cada término de la ecuación resultante. Suponga que las células están embebidas en un medio de cultivo (fase- β), por lo que el sistema consiste de dos fases como se ilustra en la figura 2.2.

Solución. Para resolver el problema puede suponerse que el sistema permite definir una región de promediado representativa (o REV, ver sección 1.6.1 así como el esquema mostrado en la figura 2.2). Esto permite definir el siguiente operador de promediado de una propiedad ψ_σ ,

$$\langle \psi_\sigma \rangle = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}_\sigma} \psi_\sigma dV, \quad (2.6.11)$$

donde V es el volumen de la región de promediado y se supone constante. Sin embargo, \mathcal{V}_σ es una región arbitraria pues el espacio ocupado por las células puede cambiar con la posición y el tiempo. Aplicando este operador a la ecuación (2.6.10), resulta que

$$\frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}_\sigma} \frac{\partial \rho_\sigma}{\partial t} dV + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}_\sigma} \nabla \cdot (\rho_\sigma \mathbf{v}_\sigma) dV = 0. \quad (2.6.12)$$

Usando el teorema de la divergencia (ecuación 2.6.1) en el último término, la ecuación anterior se expresa como

$$\frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}_\sigma} \frac{\partial \rho_\sigma}{\partial t} dV + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_\sigma \cdot (\rho_\sigma \mathbf{v}_\sigma) dV = 0. \quad (2.6.13)$$

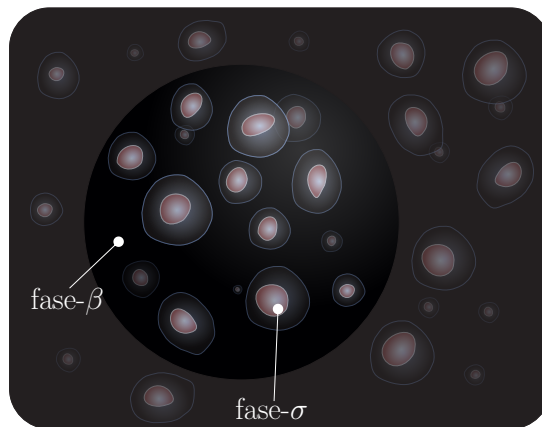


Figura 2.2: Esquema de una región de promediado aplicada a un sistema compuesto por células (fase- σ) y medio de cultivo (fase- β)

Ahora bien, usando el teorema general del transporte (ecuación 2.6.8) en el primer término, se deduce la siguiente expresión

$$\frac{1}{V} \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_\sigma} \rho_\sigma dV + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_\sigma \cdot [(\mathbf{v}_\sigma - \mathbf{w}) \rho_\sigma] dV = 0. \quad (2.6.14)$$

Ya que V es constante, puede insertarse en la derivada total del primer término, por lo que al usar la definición dada en la ecuación (2.6.11), el resultado anterior puede escribirse como

$$\frac{d\langle \rho_\sigma \rangle}{dt} + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_\sigma \cdot [(\mathbf{v}_\sigma - \mathbf{w}) \rho_\sigma] dV = 0. \quad (2.6.15)$$

Dirigiendo la atención al segundo término, se tiene que la superficie \mathcal{A}_σ puede descomponerse en las superficies de entrada y salida de la región de promediado en contacto con las células ($\mathcal{A}_{\sigma e}$) y las superficies de las células en contacto con el medio de cultivo ($\mathcal{A}_{\beta\sigma}$). Tomando en cuenta lo anterior, la ecuación (2.6.15) puede escribirse como sigue

$$\frac{d\langle \rho_\sigma \rangle}{dt} + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\sigma e}} \mathbf{n}_{\sigma e} \cdot [(\mathbf{v}_\sigma - \mathbf{w}) \rho_\sigma] dV + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot [(\mathbf{v}_\sigma - \mathbf{w}) \rho_\sigma] dV = 0. \quad (2.6.16)$$

En donde $\mathbf{n}_{\sigma e}$ es el vector unitario dirigido de las células hacia las superficies de entrada y salida de la región de integración, mientras que $\mathbf{n}_{\beta\sigma}$ es el vector unitario dirigido desde las células hacia el medio de cultivo. Como es de esperarse, ambos vectores cambian de signo al invertir su dirección. Tomando esto en cuenta, la ecuación anterior puede expresarse como sigue

$$\frac{d\langle \rho_\sigma \rangle}{dt} = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\sigma e}} \mathbf{n}_{e\sigma} \cdot (\mathbf{v}_\sigma \rho_\sigma) dV + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot [(\mathbf{v}_\sigma - \mathbf{w}) \rho_\sigma] dV. \quad (2.6.17)$$

Note que en el primer término del lado derecho se consideró que las superficies de entrada y salida de la región de integración están fijas. La ecuación anterior es el modelo buscado y corresponde a la ecuación (27) del trabajo de Wood y Whitaker (1999). El término en el lado izquierdo representa la razón de cambio en el tiempo de la masa celular contenida en la región de integración. El primer término en el lado derecho representa la tasa a la cual entra (cuando $\mathbf{n}_{e\sigma} \cdot \mathbf{v}_\sigma > 0$) o sale (cuando $\mathbf{n}_{e\sigma} \cdot \mathbf{v}_\sigma < 0$) masa celular de la región de promediado. Por último, el segundo término en el lado derecho de la ecuación anterior representa la tasa a la cual la masa ingresa a por las paredes celulares dentro de la región de promediado. De hecho, este último término puede tomar en cuenta el proceso de división celular (o mitosis) dentro de la región de promediado. Estos mecanismos de entrada y salida por las fronteras de la región de promediado, así como la división celular se ilustran en la dinámica celular mostrada en la figura 2.3. Note que la forma de las fronteras de la región no cambió durante el tiempo pero si la cantidad de células.

Ejercicio 2.11 Muestre que el teorema del transporte de Reynolds puede expresarse como:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} A dV = \int_{\mathcal{V}_M} \left(\frac{DA}{Dt} + A \nabla \cdot \mathbf{v} \right) dV. \quad (2.6.18)$$

Ejercicio 2.12 Utilice el resultado del problema anterior para demostrar que si $A = 1$, el teorema del transporte de Reynolds indica que

$$\frac{dV_M}{dt} = \int_{\mathcal{V}_M} \nabla \cdot \mathbf{v} dV, \quad (2.6.19)$$

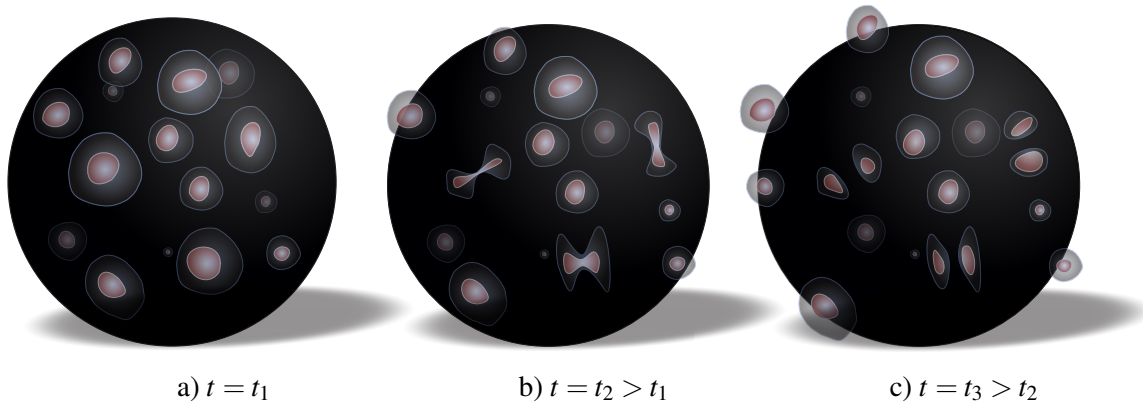


Figura 2.3: Esquema de la dinámica celular en una región de promediado a tres instantes de tiempo considerando la posibilidad de la ocurrencia de la división celular.

donde $V_M = \int_{\mathcal{V}_M} dV$ es el volumen del dominio material. Como puede notarse, si $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$, el resultado es que V_M es constante y esto es consistente con la característica de flujo incompresible. Discuta lo que ocurre con V_M si $\nabla \cdot \mathbf{v} > 0$ o bien cuando $\nabla \cdot \mathbf{v} < 0$. ■

2.6.3 Teorema del promediado espacial

En los párrafos anteriores se revisaron maneras de intercambiar operaciones de diferenciación temporal e integración espacial en tres tipos de regiones de integración. Sin embargo, a menudo es necesario también intercambiar las operaciones de diferenciación e integración espacial; para ello, es necesario contar con un teorema adicional que es el teorema del promediado espacial. Este teorema fue deducido de manera independiente por [Marle \(1967\)](#); [Anderson y Jackson \(1967\)](#); [Slattery \(1967\)](#); [Whitaker \(1967\)](#) y desde entonces han habido otras deducciones (ver, por ejemplo, [Howes y Whitaker, 1985](#); [Wood, 2013](#); [Gray y Miller, 2013](#)). El teorema del promediado espacial es de importancia fundamental en la deducción de modelos promedio por diversas técnicas de escalamiento (ver, por ejemplo [Battiato y col., 2019](#)) y se utilizará en el capítulo 6.

Para comprender este teorema, considere una región de promediado, la cual puede en principio ser una región arbitraria; sin embargo, por simplicidad se considera aquí como una región fija. Esta región se aplica a un sistema que tiene n -fases. Dicha región de promediado tiene una longitud característica, r_0 , que es mucho mayor que la máxima longitud característica de las fases (ℓ) y a la vez es mucho menor que la mínima longitud característica de todo el sistema, L y puede considerarse como una región representativa. Esto es

$$\ell \ll r_0 \ll L. \quad (2.6.20)$$

De todas las fases involucradas, por el momento el interés se centra en el transporte dentro de una de ellas (la fase- γ). De esta forma, la región de promediado \mathcal{V} puede descomponerse en

$$\mathcal{V} = \mathcal{V}_\gamma + \sum_{i=1}^{i=n-1} \mathcal{V}_i. \quad (2.6.21)$$

Note que aunque \mathcal{V} es una región fija, las subregiones \mathcal{V}_i que la componen pueden ser arbitrarias, si fuera necesario. Por el momento considere una función (vectorial o tensorial) continua en la fase- γ , $\boldsymbol{\phi}_\gamma$. El resultado de integrar la divergencia de esta función es, de acuerdo con la ecuación (2.6.1), el siguiente

$$\int_{\mathcal{V}_\gamma} \nabla \cdot \boldsymbol{\phi}_\gamma dV = \int_{\mathcal{A}_\gamma} \mathbf{n}_\gamma \cdot \boldsymbol{\phi}_\gamma dA. \quad (2.6.22)$$

En la ecuación anterior, \mathbf{n}_γ es un vector unitario que va dirigido hacia afuera de la superficie \mathcal{A}_γ . Al igual que como se hizo en el ejemplo 2.1, esta superficie puede dividirse en las superficies de

entrada y salida de la región de promediado (\mathcal{A}_γ) y en las superficies en contacto con las otras fases ($\mathcal{A}_{\gamma i}$). Tomando en cuenta esto último, la ecuación (2.6.22) puede escribirse como

$$\int_{\mathcal{V}_\gamma} \nabla \cdot \boldsymbol{\varphi}_\gamma dV = \int_{\mathcal{A}_{\gamma e}} \mathbf{n}_{\gamma e} \cdot \boldsymbol{\varphi}_\gamma dA + \sum_{i=1}^{i=n} \int_{\mathcal{A}_{\gamma i}} \mathbf{n}_{\gamma i} \cdot \boldsymbol{\varphi}_\gamma dA. \quad (2.6.23)$$

Como lo demuestran geoméricamente [Howes y Whitaker \(1985\)](#), la integral de entradas y salidas puede expresarse como

$$\int_{\mathcal{A}_{\gamma e}} \mathbf{n}_{\gamma e} \cdot \boldsymbol{\varphi}_\gamma dA = \nabla \cdot \int_{\mathcal{V}_\gamma} \boldsymbol{\varphi}_\gamma dV. \quad (2.6.24)$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación (2.6.23) y dividiendo ambos lados de la ecuación entre $V = \int_{\mathcal{V}} dV$ se obtiene la siguiente expresión

Teorema 2.6.4 — Teorema del promediado espacial para una divergencia.

$$\langle \nabla \cdot \boldsymbol{\varphi}_\gamma \rangle_\gamma = \nabla \cdot \langle \boldsymbol{\varphi}_\gamma \rangle_\gamma + \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{i=n} \int_{\mathcal{A}_{\gamma i}} \mathbf{n}_{\gamma i} \cdot \boldsymbol{\varphi}_\gamma dA. \quad (2.6.25)$$

En esta forma del teorema del promediado espacial se utilizó la siguiente definición

Definición 2.6.3 — Promedio superficial o de fase.

$$\langle \boldsymbol{\varphi}_\gamma \rangle_\gamma = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}_\gamma} \boldsymbol{\varphi}_\gamma dV. \quad (2.6.26)$$

Este operador es el preferido para promediar al vector de velocidad de un fluido. Sin embargo, cuando se desea promediar a la presión, la temperatura o a la concentración de un soluto, se prefiere usar el siguiente operador de promediado

Definición 2.6.4 — Promedio intrínseco.

$$\langle \boldsymbol{\varphi}_\gamma \rangle^\gamma = \frac{1}{V_\gamma} \int_{\mathcal{V}_\gamma} \boldsymbol{\varphi}_\gamma dV. \quad (2.6.27)$$

Note que las integrales de ambas definiciones son las mismas, por lo que el promedio superficial puede expresarse en función del promedio intrínseco mediante la *relación de Dupuit-Forchheimer* ([Nield y Bejan, 2017](#))

$$\langle \boldsymbol{\varphi}_\gamma \rangle_\gamma = \varepsilon_\gamma \langle \boldsymbol{\varphi}_\gamma \rangle^\gamma. \quad (2.6.28)$$

En esta ecuación $\varepsilon_\gamma = V_\gamma/V$ es la fracción volumétrica de la fase- γ en la región de promediado, la cual, en general, puede ser función de la posición. Sustituyendo la ecuación (2.6.28) en el teorema del promediado espacial da lugar a la siguiente expresión

$$\langle \nabla \cdot \boldsymbol{\varphi}_\gamma \rangle^\gamma = \varepsilon_\gamma^{-1} \nabla \cdot (\varepsilon_\gamma \langle \boldsymbol{\varphi}_\gamma \rangle^\gamma) + \frac{1}{V_\gamma} \sum_{i=1}^{i=n} \int_{\mathcal{A}_{\gamma i}} \mathbf{n}_{\gamma i} \cdot \boldsymbol{\varphi}_\gamma dA. \quad (2.6.29)$$

En casos en los que ε_γ sea constante, la ecuación anterior se reduce a

$$\langle \nabla \cdot \boldsymbol{\varphi}_\gamma \rangle^\gamma = \nabla \cdot \langle \boldsymbol{\varphi}_\gamma \rangle^\gamma + \frac{1}{V_\gamma} \sum_{i=1}^{i=n} \int_{\mathcal{A}_{\gamma i}} \mathbf{n}_{\gamma i} \cdot \boldsymbol{\varphi}_\gamma dA. \quad (2.6.30)$$

Esta expresión se conoce como la *forma modificada del teorema del promediado espacial* ([Gray, 1975](#)). Como puede notarse, los desarrollos se han presentado para el operador de divergencia, en el ejercicio 2.13 se deduce la aplicación al operador gradiente. Ambas versiones del teorema del promediado espacial se usarán en el capítulo 6.

Ejercicio 2.13 — Teorema del promediado espacial para un gradiente. Siguiendo la forma de trabajo usada en el ejercicio 2.9, sustituya en la ecuación (2.6.25) $\boldsymbol{\varphi}_\gamma = \mathbf{c}\phi_\gamma$, donde \mathbf{c} es un vector constante y ϕ_γ es una función tensorial de orden menor al de $\boldsymbol{\varphi}_\gamma$. Lleve a cabo las operaciones algebraicas correspondientes y deduzca la siguiente forma del teorema del promediado espacial

$$\langle \nabla \phi_\gamma \rangle = \nabla \langle \phi_\gamma \rangle + \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{n-1} \int_{\mathcal{A}_{\gamma_i}} \mathbf{n}_{\gamma_i} \phi_\gamma dA. \quad (2.6.31)$$

■

2.7 Comentarios finales

En este capítulo se presentó el herramental matemático que aporta muchos elementos necesarios para el desarrollo del resto del material en este texto. Se comenzó distinguiendo propiedades escalares, vectoriales y tensoriales en función de la cantidad de información que se requiere para entender su significado. Posteriormente, se presentaron las operaciones básicas que pueden llevarse a cabo con este tipo de propiedades como es el producto diádico y el producto interno. En ambos casos, se incluyó la aplicación a operaciones de diferenciación espacial, lo que llevó a la definición de los operadores gradiente y divergencia. Posteriormente, se definieron las derivadas parcial, total y material de una función, en función del movimiento de un observador. Por último, se presentaron los principales teoremas integrales que se usarán en este texto. Los teoremas de la divergencia y general del transporte se aplicarán en los tres capítulos siguientes, mientras que el teorema del promediado espacial se utilizará en el capítulo 6. Cabe mencionar que a lo largo del texto se incluirán otros elementos matemáticos conforme vayan siendo necesarios, en especial en el capítulo 7. Esta elección se hace con la intención de facilitar la lectura del texto. Por último, es importante mencionar que hay muchas más operaciones y teoremas importantes asociados a vectores y tensores, aquí solo se presentaron aquellas que serán usados directamente en el texto, al lector interesado en un conocimiento más profundo se le recomiendan textos como los de [Aris \(1989\)](#) y [Simmonds \(1994\)](#).



3. Transporte de masa

3.1 Introducción

En los capítulos anteriores se presentaron algunos conceptos fundamentales, así como el herramienta matemático, que serán de especial utilidad para los desarrollos del texto y en especial para este capítulo y los dos siguientes. El interés ahora está en la deducción de las formas microscópica y macroscópica de las ecuaciones de conservación de masa (total y por especies químicas), cantidad de movimiento y de energía. Además se deducen las condiciones de frontera correspondientes y se discuten algunas aplicaciones sencillas de modelado. Como puede notarse, esta filosofía de modelado matemático corresponde al modelado determinista basado en principios fundamentales de conservación (ver sección 1.4). El capítulo está organizado como sigue: en la sección 3.2 se deduce el modelo macroscópico de la conservación de masa total a partir de un principio de conservación expresado en palabras. Más adelante, en la sección 3.3 se aplica la forma matemática de este principio en un par de ejemplos específicos. Posteriormente, en la sección 3.4 se deduce la forma microscópica del principio de conservación que lleva a la conocida ecuación de continuidad y a la respectiva condición de salto entre fases. Además, en las secciones 3.5 y 3.6 se deducen las versiones macroscópica y microscópica del principio de conservación de masa de una especie, incluyendo la correspondiente condición de salto entre fases. Por último, en la sección 3.7 se discuten algunos problemas de aplicación a escala macroscópica para el principio de conservación de una especie.

3.2 Modelo macroscópico de la conservación de masa total

Considere una región arbitraria \mathcal{V}_A la cual contiene a una fase fluida (fase- β). Al nivel de escala macroscópico, la experiencia y la intuición indican que la masa total del fluido contenida en esta región solo puede cambiar con el tiempo si ingresa o sale masa por sus fronteras. Esto se debe a que, aún si tuvieran lugar reacciones químicas dentro de \mathcal{V}_A , éstas no alterarían la masa total ya que la suma de la masa de los reactivos debe ser igual a la de los productos. Con base en lo anterior, se puede escribir la siguiente ecuación con palabras

Principio de conservación de masa total (ecuación con palabras)

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{La razón de cambio en el tiempo} \\ \text{de la masa en una región arbitraria} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Flujo neto de entrada de masa} \\ \text{por las fronteras de la región} \end{array} \right\}. \quad (3.2.1)$$

Ya que esta ecuación está referida a una región de integración arbitraria, \mathcal{V}_A , se deduce que su aplicación corresponde a un nivel de escala macroscópico y se aplica a una fase. Para traducir la ecuación (3.2.1) al lenguaje matemático, se recurre al resultado dado en la ecuación (3.2.11) del ejercicio 3.1, el cual expresa que la masa, m , contenida en la región arbitraria se puede definir en función de la densidad ρ de la fase en cada punto de la escala microscópica, como sigue

$$m = \int_{\mathcal{V}_A} \rho \, dV. \quad (3.2.2)$$

Para poder avanzar en el proceso de traducción del lenguaje ordinario al matemático, es pertinente recordar que las palabras *razón de cambio en el tiempo* se refieren a la operación de derivación con respecto del tiempo. Ya que la ecuación (3.2.1) está referida a una región arbitraria, la derivada temporal que corresponde usar es la derivada total. Entonces, el lado izquierdo de la ecuación (3.2.1) puede escribirse como sigue,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{La razón de cambio en el tiempo} \\ \text{de la masa en una región arbitraria} \end{array} \right\} = \frac{dm}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \rho \, dV. \quad (3.2.3)$$

Dirigiendo ahora la atención al lado derecho de la ecuación (3.2.1), el flujo neto de entrada de masa por las fronteras de la región se refiere a los kilogramos por segundo que pasan a través de la superficie de \mathcal{V}_A ; es decir, \mathcal{A}_A . En consecuencia, se debe considerar una integral de superficie cuyo integrando debe contener al producto de la densidad del fluido por la velocidad. Aunque esta idea es dimensionalmente correcta pues lleva a un resultado que tiene las unidades de kg/s, presenta al menos dos problemas:

1. Las fronteras de \mathcal{V}_A no están fijas, sino que se mueven a una velocidad arbitraria \mathbf{w} (ver definición 2.6.2). Esto quiere decir que si sólo se considera el producto de la densidad por la velocidad no se estará cuantificando de manera correcta al flujo neto de entrada.
2. La velocidad es un vector que no necesariamente está dirigido en dirección perpendicular a la superficie \mathcal{A}_A y por tanto no se puede tener certidumbre de que se trate del flujo de entrada. Además, el producto de la velocidad con la densidad y el diferencial de superficie da como resultado un vector, mientras que en la ecuación (3.2.3) se tiene un escalar.

Para atender el primer problema se cuantifica la velocidad relativa a la velocidad de las fronteras, esto es $\mathbf{v} - \mathbf{w}$. Para atender al segundo problema, es necesario proyectar a dicha diferencia de velocidades en la dirección del vector normal a la superficie de la región arbitraria; esto es, $\mathbf{n} \cdot \rho(\mathbf{v} - \mathbf{w})$. Sin embargo, el resultado ahora es la proyección hacia afuera de la región debido a la orientación que tiene el vector \mathbf{n} . Como el interés está en el flujo neto de entrada de masa, es necesario hacer un cambio de signo e integrar en la superficie de la región. El resultado es entonces

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Flujo neto de entrada de masa} \\ \text{por las fronteras de la región} \end{array} \right\} = - \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \rho(\mathbf{v} - \mathbf{w}) \, dA. \quad (3.2.4)$$

Sustituyendo la ecuación anterior, así como la ecuación (3.2.3), en la ecuación (3.2.1), se deduce que el principio de conservación de masa en una región arbitraria puede expresarse en forma matemática como

Forma macroscópica del principio de conservación de masa total

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \rho \, dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \rho(\mathbf{v} - \mathbf{w}) \, dA = 0. \quad (3.2.5)$$

Como se mostró en la sección 2.6.2, una vez que se tiene un resultado aplicable para una región arbitraria, basta con modificar los valores del vector \mathbf{w} y el tipo de derivada temporal para deducir las expresiones correspondientes a las otras regiones de integración. Este proceso de equivalencia entre regiones es deseable, ya que la región de integración corresponde al instrumento de medición que se utilice en el laboratorio para medir, en este caso, la masa contenida en una porción del

sistema bajo estudio. Para una región material, la velocidad de desplazamiento de las fronteras de la región de integración corresponde a la velocidad del fluido (esto es, $\mathbf{w} = \mathbf{v}$) y la derivada total se convierte en una derivada material. Para esta región de integración, el resultado anterior se expresa como sigue

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \rho \, dV = 0. \quad (3.2.6)$$

Esta expresión es consistente con la definición de derivada material, ya que este tipo de dominio de integración no permite entrada ni salida de materia a través de sus fronteras. Más aún, en la literatura (ver, por ejemplo, [Aris, 1989](#); [Lai y col., 2010](#)) se suele asociar el concepto de *cuerpo* con una región material. Por ello, el principio de conservación de masa para un cuerpo se suele expresar como sigue:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{La razón de cambio en el tiempo} \\ \text{de la masa en un cuerpo} \end{array} \right\} = 0. \quad (3.2.7)$$

Esta expresión es perfectamente consistente con la ecuación (3.2.6).

Por último, para el caso de una región de integración fija, la velocidad de desplazamiento de las fronteras es nula y la derivada temporal corresponde a una derivada parcial. Entonces, la ecuación (3.2.5) adquiere la siguiente forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}_f} \rho \, dV + \int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v} \, dA = 0. \quad (3.2.8)$$

Las ecuaciones (3.2.5), (3.2.6) y (3.2.8) son equivalentes y representan en forma matemática al principio de conservación de masa total como se demuestra en la sección 3.4.1. La elección del tipo de ecuación a utilizar está directamente asociada con el tipo de región de integración que sea mas conveniente para estudiar un problema dado.

Ejercicio 3.1 — Definición de la masa en una región arbitraria. Al nivel de escala molecular, la densidad de un conjunto de N partículas, cada una con masa m_j ($j = 1, \dots, N$), se define como ([Piña-Garza y de la Selva-Monroy, 2018](#))

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{j=1}^{j=N} \rho_j(\mathbf{r}, t) = \sum_{j=1}^{j=N} m_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j(t)). \quad (3.2.9)$$

En esta expresión, el vector de posición \mathbf{r}_j localiza la posición de la j -ésima partícula y δ es la función delta de Dirac, la cual se define como

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \begin{cases} \infty & \mathbf{r} = \mathbf{r}_0 \\ 0 & \mathbf{r} \neq \mathbf{r}_0 \end{cases}. \quad (3.2.10)$$

Note que $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) [=] \text{m}^{-3}$, es una función simétrica ya que $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r})$ y tiene la siguiente *propiedad de filtración*:

$$\int_{\mathcal{V}(\mathbf{r})} f(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \, dV = \begin{cases} f(\mathbf{r}_0) & \mathbf{r}_0 \in \mathcal{V} \\ 0 & \mathbf{r}_0 \notin \mathcal{V} \end{cases}. \quad (3.2.11)$$

En donde $f(\mathbf{r})$ es una función definida en cada punto de la región de integración \mathcal{V} . Cabe agregar que la delta de Dirac también puede expresarse en función del tiempo y la propiedad de filtración puede extenderse a este caso como se muestra más adelante (ver ejercicio 7.6).

Aplique estas definiciones para demostrar que la masa de las partículas contenidas en una

región \mathcal{V} se define como

$$m = \int_{\mathcal{V}(\mathbf{r})} \rho \, dV = \sum_{j=1}^{j=M} m_j, \quad (3.2.12)$$

donde M es, en general, menor que N y sólo es igual a N si todas las partículas están dentro de \mathcal{V} .

3.3 Aplicaciones del modelo macroscópico de conservación de masa

3.3.1 Extracción de agua de un cilindro

En la figura 3.1 se muestra un dispositivo para extracción de agua que consiste en introducir un cilindro de diámetro ℓ_σ a una velocidad constante v_σ en un cilindro de diámetro ℓ_β y largo L que inicialmente estaba lleno de agua. Este problema lo propuso Whitaker (1992) y se desea deducir una expresión de la velocidad promedio de salida del fluido.

Para cumplir el objetivo del problema, es conveniente comenzar eligiendo la región de integración a usar ya que de esta decisión depende la forma del modelo macroscópico. Considerando como el sistema al agua contenida en el cilindro (ilustrada con líneas discontinuas en la figura 3.1), es claro que no puede usarse una región material ya que hay salida de masa y, como la cantidad de agua es variable, no es conveniente usar una región fija. Por ello, debe usarse la ecuación (3.2.5), la cual, bajo la suposición de flujo incompresible (esto es, densidad constante, ver sección 1.7.1), se reduce a

$$\frac{dV_A}{dt} + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{w}) \, dA = 0. \quad (3.3.1)$$

En esta ecuación, V_A es el volumen de agua en cualquier instante en el cilindro, el cual se puede calcular como la diferencia entre el volumen inicial (es decir, el volumen del cilindro de diámetro ℓ_β) y el volumen del cilindro sólido, esto es

$$V_A = V_\beta - V_\sigma = \frac{\pi}{4} \ell_\beta^2 L - \frac{\pi}{4} \ell_\sigma^2 v_\sigma t. \quad (3.3.2)$$

Derivando ambos lados de esta ecuación respecto al tiempo y sustituyendo la ecuación resultante en la ecuación (3.3.1) se obtiene que

$$-\frac{\pi}{4} \ell_\sigma^2 v_\sigma + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{w}) \, dA = 0. \quad (3.3.3)$$

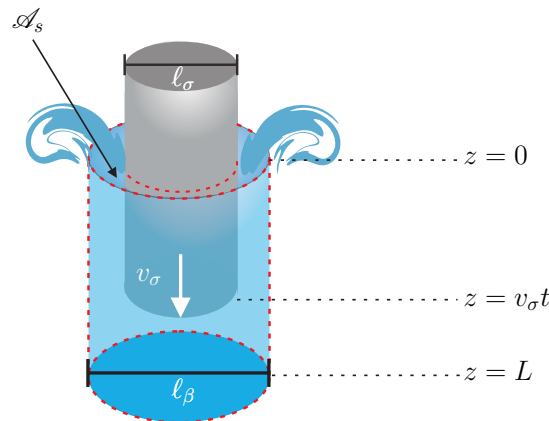


Figura 3.1: Esquema de la extracción de agua de un cilindro de altura L y diámetro ℓ_β mediante la introducción de un cilindro de diámetro ℓ_σ a una velocidad vertical v_σ . En la figura se identifica con líneas discontinuas el dominio \mathcal{V}_A y además se señala la superficie de salida, \mathcal{A}_s .

Tabla 3.1: Valores de \mathbf{v} y \mathbf{w} en las superficies que componen a \mathcal{A}_A para la situación física mostrada en la figura 3.1.

\mathcal{A}_A	\mathcal{A}_w	$\mathcal{A}_{\beta\sigma}$	\mathcal{A}_s
\mathbf{v}	$\mathbf{0}$	\mathbf{v}_σ	\mathbf{v}
\mathbf{w}	$\mathbf{0}$	\mathbf{v}_σ	$\mathbf{0}$

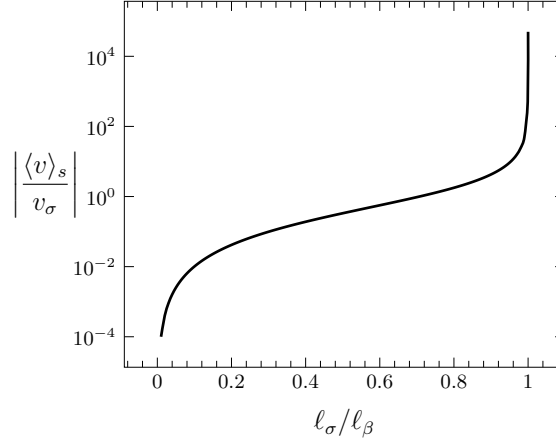


Figura 3.2: Dependencia del valor absoluto de la razón de la velocidad de salida de agua respecto a la velocidad de penetración del cilindro con la razón del diámetro del cilindro respecto al diámetro del orificio.

En la ecuación anterior, la superficie \mathcal{A}_A puede descomponerse en la superficie en contacto con las paredes del cilindro externo (\mathcal{A}_w), la interfase con el cilindro interno ($\mathcal{A}_{\beta\sigma}$) y la superficie de salida (\mathcal{A}_s). Los valores de \mathbf{v} y \mathbf{w} en cada superficie se presentan en la tabla 3.1. Como puede notarse, en las superficies con las paredes ambas velocidades son iguales y nulas, mientras que en la interfase con el cilindro interno las velocidades son iguales y no nulas. Por último, ya que la superficie de salida no se mueve, se tiene que $\mathbf{w} = \mathbf{0}$, mientras que la velocidad del fluido es $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$. Con base en estos valores, la única contribución relevante en la integral en el lado derecho de la ecuación (3.3.3) corresponde a la superficie de salida y la ecuación adquiere la siguiente forma

$$-\frac{\pi}{4}\ell_\sigma^2 v_\sigma + \int_{\mathcal{A}_s} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dA = 0. \quad (3.3.4)$$

Más aún, ya que en \mathcal{A}_s , $\mathbf{n} = -\mathbf{e}_z$, el resultado anterior puede escribirse como sigue:

$$-\frac{\pi}{4}\ell_\sigma^2 v_\sigma = \int_{\mathcal{A}_s} v_z dA. \quad (3.3.5)$$

Para expresar a esta ecuación en una forma más compacta, se define a la velocidad promedio de salida como

$$\langle v \rangle_s = \frac{1}{A_s} \int_{\mathcal{A}_s} v_z dA, \quad (3.3.6)$$

donde el área de salida es $A_s = \frac{\pi}{4}(\ell_\beta^2 - \ell_\sigma^2)$. De esta forma, la ecuación (3.3.5) puede usarse para deducir el resultado buscado para la velocidad a la salida del sistema

$$\langle v \rangle_s = -\frac{\ell_\sigma^2 v_\sigma}{\ell_\beta^2 - \ell_\sigma^2}. \quad (3.3.7)$$

El signo negativo se justifica ya que la velocidad en la superficie de salida está orientada en dirección contraria al eje z . Como puede notarse, conforme el diámetro del cilindro, ℓ_σ , tiende

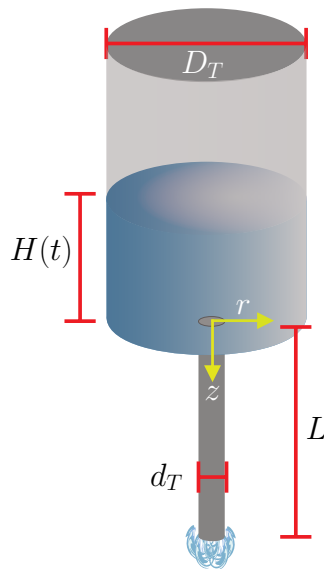


Figura 3.3: Esquema del vaciado de un tanque de diámetro interno D_T mediante un tubo de sección transversal circular de diámetro d_T y longitud L . La altura del líquido en el tanque es H y es una función del tiempo.

al diámetro del orificio, ℓ_β , la velocidad de salida aumenta rápidamente. Más aún, a partir de la ecuación anterior se deduce que para valores de $\ell_\sigma/\ell_\beta > \sqrt{2}/2$, la velocidad de salida del fluido será mayor que la velocidad de penetración del cilindro. Estas observaciones se pueden corroborar con los resultados mostrados en la figura 3.2, los cuales resultan de evaluar a la ecuación (3.3.7). Note que para valores de ℓ_σ/ℓ_β cercanos a uno, la velocidad del fluido crece infinitamente, lo cual carece de sentido físico. Por ello, debe tenerse cuidado con el uso de este modelo bajo estas condiciones.

3.3.2 Vaciado de un tanque

Considere la situación mostrada en la figura 3.3 en donde se esquematiza un tanque de almacenamiento de agua de diámetro interno D_T , el cual permite su vaciado por medio de un tubo circular recto de longitud L y diámetro interno d_T ubicado en su superficie inferior. Se desea desarrollar una expresión que prediga el cambio del nivel del líquido en el tanque con el tiempo y el tiempo de descarga del tanque. El flujo del fluido puede considerarse incompresible (es decir, de densidad constante, ver sección 1.7.1) y newtoniano.

Considerando como el sistema a la masa de agua en el tanque de almacenamiento y el tubo de vaciado, se deduce que no puede usarse una región material (pues hay pérdida de masa) ni una fija (pues el nivel de agua en el tanque cambia con el tiempo). Ya que el fluido se supone incompresible, la ecuación (3.3.1) puede usarse para analizar este problema. El volumen de agua en el sistema (es decir, el volumen de la región arbitraria, V_A) en cualquier instante puede calcularse mediante la siguiente expresión

$$V_A = \frac{\pi}{4} (D_T^2 H(t) + d_T^2 L). \quad (3.3.8)$$

Derivando ambos lados de la ecuación anterior respecto al tiempo y sustituyendo la expresión resultante en la ecuación (3.3.1), se obtiene que

$$\frac{\pi}{4} D_T^2 \frac{dH}{dt} = - \int_{\mathcal{S}_A} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{w}) dA. \quad (3.3.9)$$

Como puede notarse en esta expresión no se incluyen los cambios en el tiempo del líquido en el tubo de descarga pues el interés está solo en el vaciado del tanque. En otras palabras, en un experimento se dejaría de cuantificar el tiempo en el momento en el que se vacía el tanque, no el

Tabla 3.2: Valores de \mathbf{v} y \mathbf{w} en las superficies que componen a \mathcal{A}_A para la situación física mostrada en la figura 3.3.

\mathcal{A}_A	\mathcal{A}_w	\mathcal{A}_{sup}	\mathcal{A}_s
\mathbf{v}	$\mathbf{0}$	\mathbf{v}_{sup}	\mathbf{v}
\mathbf{w}	$\mathbf{0}$	\mathbf{v}_{sup}	$\mathbf{0}$

tubo de descarga. Para avanzar en los desarrollos es conveniente notar que, a partir del esquema mostrado en la figura 3.3, la superficie \mathcal{A}_A se compone de: 1) la superficie del líquido en contacto con las paredes internas del tanque y del tubo (\mathcal{A}_w) en donde $\mathbf{v} = \mathbf{w} = \mathbf{0}$; 2) la superficie superior del fluido en el tanque (\mathcal{A}_{sup}) en donde la velocidad del fluido es igual a la velocidad de desplazamiento de la interfase (\mathbf{v}_{sup}) y 3) la superficie de salida (\mathcal{A}_s), la cual es fija ($\mathbf{w} = \mathbf{0}$) y la velocidad del fluido no es nula. Los valores de \mathbf{v} y \mathbf{w} en cada superficie se muestran en la tabla 3.2. Como puede notarse, la única contribución que permanece en la integral del lado derecho de la ecuación (3.3.9) corresponde a \mathcal{A}_s . En esta superficie la velocidad y la normal van en la misma dirección, por lo que la proyección normal de \mathbf{v} (tomando $\mathbf{n} = \mathbf{e}_z$) es v_z . Entonces, la ecuación (3.3.9) puede expresarse como

$$\frac{\pi}{4} D_T^2 \frac{dH}{dt} = - \int_{\mathcal{A}_s} v_z dA = - \frac{\pi}{4} d_T^2 \langle v_z \rangle. \quad (3.3.10)$$

En la última igualdad $\langle v_z \rangle$ es la velocidad promedio del fluido en la superficie de salida del tubo (cuya área es $\pi d_T^2/4$), la cual, como primera aproximación, puede representarse mediante la ecuación de Hagen-Poiseuille (ver, por ejemplo la sección 2.3 en [Bird y col., 2014](#)):

$$\langle v_z \rangle = \frac{(p_0 - p_L + \rho g L) d_T^2}{32 \mu L}. \quad (3.3.11)$$

En esta expresión, la presión en la superficie de salida es igual a la presión atmosférica (esto es, $p_L = p_A$) y la presión en la superficie del agua en el tanque es $p_0 = p_A + \rho g H$. Este resultado es una aproximación basada en la ecuación fundamental de la hidrostática. En otras palabras, se está suponiendo que a cada instante en el tiempo el fluido en el tanque se puede representar como si estuviera bajo condiciones hidrostáticas. El uso de la ecuación de Hagen-Poiseuille representa una aproximación adicional debido a que sólo puede usarse bajo condiciones de flujo laminar en estado estacionario suficientemente lejos de las entradas y salidas del tubo ([Bird y col., 2014](#)). Esto último quiere decir que el transporte de cantidad de movimiento en el tubo de descarga se supone que tiene lugar en estado cuasi-estacionario mientras que el transporte de masa se da en estado transitorio. En el ejercicio 3.2 se examina la pertinencia de esta suposición. Los desarrollos se continuarán bajo estas suposiciones ya que permiten desarrollar el modelo más simple. Sin embargo, no deben perderse de vista las suposiciones mencionadas arriba pues limitan la aplicabilidad del modelo.

Sustituyendo la ecuación (3.3.11) en la ecuación (3.3.10), el modelo macroscópico de conservación de masa se escribe como:

$$- \frac{D_T^2}{d_T^2} \frac{dH}{dt} = \frac{\rho g (H + L) d_T^2}{32 \mu L}. \quad (3.3.12)$$

Suponiendo conocida la altura inicial del agua en el tanque, H_0 , se impone la siguiente condición inicial:

$$\text{cuando } t = 0, \quad H = H_0. \quad (3.3.13)$$

Llevando a cabo los pasos de integración correspondientes, se deduce el siguiente resultado

$$\ln \left(\frac{\frac{H}{L} + 1}{\frac{H_0}{L} + 1} \right) = - \frac{\rho g d_T^2}{32 \mu L D_T^2} t. \quad (3.3.14)$$

Esta expresión puede usarse para predecir la altura del tanque como función del tiempo si se despeja a la variable H como sigue:

$$\frac{H}{L} = \left(\frac{H_0}{L} + 1 \right) \exp(-t^*) - 1. \quad (3.3.15)$$

En esta ecuación se utilizó la siguiente definición del tiempo adimensional

$$t^* = \frac{\rho g d_T^4}{32 \mu L D_T^2} t. \quad (3.3.16)$$

Note que cuando $t^* \rightarrow \infty$ esta expresión predice que $H \rightarrow -L$, lo cual no tiene sentido físico. A pesar de este inconveniente, la ecuación (3.3.14) puede usarse para predecir el tiempo de descarga del tanque al despejar el valor del tiempo correspondiente para $H = 0$.

$$t_D^* = \ln \left(\frac{H_0}{L} + 1 \right). \quad (3.3.17)$$

Como puede deducirse, esta expresión predice que el tiempo adimensional de descarga se incrementa rápidamente cuando $H_0 > L$. No debe perderse de vista que el uso de la expresión dada en la ecuación (3.3.17) está limitado por las suposiciones adoptadas en su deducción.

Ejercicio 3.2 — Suposición de estado cuasiestacionario. Para evaluar la pertinencia de la suposición de estado cuasiestacionario considere la siguiente expresión para la velocidad promedio en el tubo, la cual resulta de no suponer condiciones de flujo en estado estacionario:

$$\langle v_z \rangle = \frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L) d_T^2}{32 \mu L} \left[1 - 32 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_n^4} \exp \left(-\lambda_n^2 \frac{\mu t}{\rho R^2} \right) \right]. \quad (3.3.18)$$

En donde λ_n son las raíces de $J_0(\lambda_n) = 0$ y pueden aproximarse mediante $\lambda_n = 2.4 + 3.13(n-1)$. Esta expresión se deduce en el ejercicio 7.9. Reformule la expresión anterior de manera adimensional y evalúe la dinámica de la velocidad y determine el valor del tiempo adimensional a partir del cual es razonable suponer que la velocidad promedio se encuentra en estado estacionario. Posteriormente sustituya los valores de la densidad y viscosidad del agua y considere un diámetro de tubo de dos pulgadas y calcule el valor dimensional de dicho tiempo. Compare este valor con el tiempo de descarga del tanque y evalúe si es razonable o no adoptar la suposición de estado cuasiestacionario en este problema. ■

Ejercicio 3.3 — Predicción de la altura del tanque considerando la dinámica de la velocidad. En este ejercicio se busca comparar las predicciones de la dinámica de la altura en el tanque resultantes de usar la ecuación (3.3.14) con las que se obtienen de resolver la ecuación resultante de sustituir la expresión de la velocidad dada en la ecuación (3.3.18) en la ecuación (3.3.10). Compare las dinámicas de las alturas que predicen ambos modelos y discuta sus observaciones. ■

Ejercicio 3.4 — Tubo de descarga horizontal. Repita el análisis presentado en esta sección pero ahora suponiendo que el tubo de descarga es horizontal. Demuestre que en este caso la expresión para el nivel de agua en el tanque es

$$H = H_0 \exp(-t^*). \quad (3.3.19)$$

Utilice esta expresión para predecir el tiempo de descarga y compare los resultados con los que se obtienen con la ecuación (3.3.17). ¿En qué configuración se vacía más rápido el tanque? ■

3.4 Modelo de conservación de masa total a escala microscópica

3.4.1 Ecuación de continuidad

En la sección 3.2 se dedujeron las siguientes tres formas del modelo macroscópico de conservación de masa dependiendo de la región de integración que sea pertinente usar:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \rho \, dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \rho(\mathbf{v} - \mathbf{w}) \, dA = 0, \quad (3.4.1a)$$

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \rho \, dV = 0, \quad (3.4.1b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}_f} \rho \, dV + \int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v} \, dA = 0. \quad (3.4.1c)$$

A primera vista pareciera que estas tres expresiones son diferentes; sin embargo son equivalentes. Para demostrar lo anterior, puede sustituirse el teorema general del transporte (ver ecuación 2.6.8) en el primer término de la ecuación (3.4.1a) para obtener

$$\int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \rho}{\partial t} \, dV + \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v} \, dA = 0. \quad (3.4.2)$$

Note que en la ecuación anterior se prescindió del subíndice A para \mathcal{V} y \mathcal{A} ya que este mismo resultado se recupera al aplicar el teorema del transporte de Reynolds (ver ecuación 2.6.9) a la ecuación (3.4.1b) y la relación dada en la ecuación (2.6.7) a la ecuación (3.4.1c). Con la intención de juntar los dos términos de la ecuación (3.4.2) dentro de una sola integral de volumen se aplica el teorema de la divergencia (ver ecuación 2.6.1) en el segundo término para así obtener

$$\int_{\mathcal{V}} \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \right] \, dV = 0. \quad (3.4.3)$$

Al ser los límites de integración no nulos y arbitrarios, se puede extraer la siguiente ecuación diferencial parcial a partir de la ecuación anterior

Forma microscópica del principio de conservación de masa (ecuación de continuidad)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (3.4.4)$$

Para casos en los que la densidad sea constante tanto en el tiempo como en la posición (ver sección 1.7.1), la ecuación (3.4.4) se reduce a

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (3.4.5)$$

a este tipo de flujo se le llama *flujo incompresible*. Como se explicó al final de la sección 2.4, la velocidad en este tipo de flujo se le conoce como *velocidad solenoidal*.

Ejercicio 3.5 Utilice la definición de la derivada material (ver ecuación 2.5.3) para demostrar que el principio de conservación de masa a la escala microscópica puede expresarse como sigue:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho(\nabla \cdot \mathbf{v}) = 0. \quad (3.4.6)$$

Ejercicio 3.6 — Teorema modificado de Reynolds. Sustituya $A = \rho\varphi$, donde φ es una función escalar continua, en la ecuación (2.6.18) y tome en cuenta el resultado del ejercicio

anterior para obtener la *forma especial del teorema del transporte de Reynolds*:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \rho \varphi dV = \int_{\mathcal{V}_M} \rho \frac{D\varphi}{Dt} dV. \quad (3.4.7)$$

Ejercicio 3.7 Utilice la definición de la derivada material (ver ecuación 2.5.3) y a la forma microscópica del principio de conservación de masa dada en la ecuación (3.4.4) para demostrar que, para una función escalar continua φ , se satisface la siguiente identidad

$$\rho \frac{D\varphi}{Dt} = \frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\varphi\mathbf{v}). \quad (3.4.8)$$

3.4.2 Condición de salto de masa en una interfase

Los desarrollos presentados hasta el momento han estado limitados al transporte de masa en una fase. El interés ahora está en estudiar el transporte cerca de la frontera entre dos fases fluidas β y γ para desarrollar una condición de frontera que describa la transferencia de masa. Como es de esperarse, si hay transporte entre las fases, la densidad cambia cerca de la frontera y no corresponde exactamente a la densidad de alguna de las dos fases. Para atender esta situación, se define una densidad ρ que sea válida tanto en las fases como en la zona fronteriza entre ellas. De hecho, ρ debe recuperar los valores de las densidades de las fases (ρ_β) y (ρ_γ) suficientemente lejos de la frontera. Para cuantificar la masa contenida en la frontera (y un poco mas lejos de ella), se define una región de integración material \mathcal{V}_M como la mostrada en la figura 3.4. Esta región de integración puede dividirse en las subregiones \mathcal{V}_β y \mathcal{V}_γ . Sin embargo, no debe perderse de vista que la densidad no corresponde exactamente a ρ_β en todo el espacio comprendido por \mathcal{V}_β y lo mismo ocurre con ρ_γ . De esta forma, la masa total contenida en \mathcal{V}_A puede cuantificarse como

$$\int_{\mathcal{V}_M} \rho dV = \int_{\mathcal{V}_\beta} \rho dV + \int_{\mathcal{V}_\gamma} \rho dV. \quad (3.4.9)$$

Aunque esta expresión es correcta, resulta útil encontrar la manera de escribir su lado derecho en términos de las densidades de cada fase. Con este fin, se define a la *densidad superficial* en términos de la diferencia de las masas predichas con ρ y con las densidades de cada fase. Esto es,

$$\int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \rho_s dA = \int_{\mathcal{V}_M} \rho dV - \int_{\mathcal{V}_\beta} \rho_\beta dV - \int_{\mathcal{V}_\gamma} \rho_\gamma dV = \int_{\mathcal{V}_\beta} (\rho - \rho_\beta) dV + \int_{\mathcal{V}_\gamma} (\rho - \rho_\gamma) dV. \quad (3.4.10)$$

Note que $\rho_s [=] \text{ kg/m}^2$ no tiene las mismas unidades que ρ y es una *propiedad de exceso* en el sentido de Gibbs (1928). A partir de la ecuación anterior, puede descomponerse la masa total contenida en \mathcal{V}_M como sigue

$$\int_{\mathcal{V}_M} \rho dV = \int_{\mathcal{V}_\beta} \rho_\beta dV + \int_{\mathcal{V}_\gamma} \rho_\gamma dV + \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \rho_s dA. \quad (3.4.11)$$

Este resultado puede sustituirse en la forma macroscópica del principio de conservación de masa aplicado a esta región de integración:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \rho dV = 0, \quad (3.4.12)$$

para obtener

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_\beta} \rho_\beta dV + \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_\gamma} \rho_\gamma dV + \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \rho_s dA = 0. \quad (3.4.13)$$

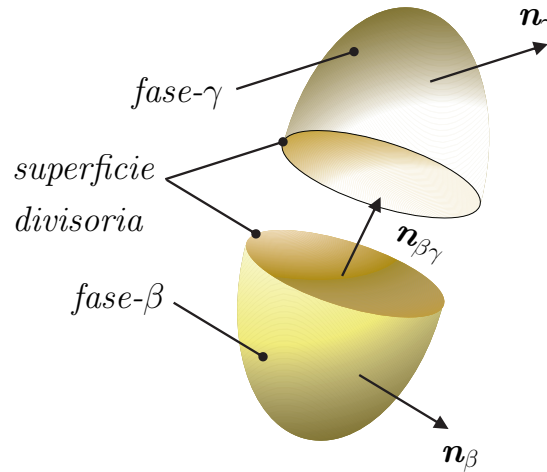


Figura 3.4: Esquema de un sistema bifásico identificando a las fases, a la superficie divisoria y los vectores unitarios correspondientes.

Esta ecuación no implica suposiciones adicionales y es tan válida como la ecuación (3.4.12). Con la intención de avanzar en los desarrollos se consideran ahora las formas macroscópicas del principio de conservación de masa en las subregiones \mathcal{V}_β y \mathcal{V}_γ :

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_\gamma} \rho_\gamma dV = 0, \quad (3.4.14a)$$

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_\beta} \rho_\beta dV = 0. \quad (3.4.14b)$$

El uso de estas ecuaciones en porciones cercanas a la frontera es una aproximación y solo es adecuado en el caso en el que no hay transferencia de masa entre las fases ya que entonces $\rho = \rho_\alpha$ en \mathcal{V}_α ($\alpha = \beta, \gamma$). Sumando las ecuaciones (3.4.14) y restando la ecuación resultante a la ecuación (3.4.13) se obtiene que

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \rho_s dA = 0. \quad (3.4.15)$$

Se desea expresar esta ecuación como una sola integral de superficie, para lo cual se requiere intercambiar las operaciones de diferenciación temporal e integración espacial. Dado que la integral es superficial en lugar de volumétrica no es posible usar el teorema general del transporte. Para superar esta dificultad, se recurre al *teorema del transporte superficial* (ver sección 1.3.4 en [Slattery y col., 2006](#)):

Teorema 3.4.1 — Teorema del transporte superficial. Sea ψ_s una función continua y definida en la superficie divisoria, la derivada material de la integral en dicha superficie obedece la siguiente expresión

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \psi_s dA = \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \left[\frac{D_s \psi_s}{Dt} + \psi_s \nabla_s \cdot \mathbf{v}^\sigma - [\psi_\beta (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}^\sigma) - \psi_\gamma (\mathbf{v}_\gamma - \mathbf{v}^\sigma)] \cdot \mathbf{n}_{\beta\gamma} \right] dA, \quad (3.4.16)$$

donde \mathbf{v}^σ es la velocidad de la superficie divisoria y el operador gradiente superficial se define como ([Slattery y col., 2006](#))

$$\nabla_s = \nabla \cdot \mathbf{P}. \quad (3.4.17)$$

Mientras que \mathbf{P} el tensor de proyección tangencial a la superficie divisoria y su definición es

$$\mathbf{P} = \mathbf{I} - \mathbf{n}_{\beta\gamma}\mathbf{n}_{\beta\gamma}. \quad (3.4.18)$$

Además, en la ecuación (3.4.16) se utilizó la derivada material superficial, la cual se define como

$$\frac{D_s \psi_s}{Dt} = \frac{\partial \psi_s}{\partial t} + \nabla_s \psi_s \cdot \dot{\mathbf{y}}, \quad (3.4.19)$$

En esta expresión, $\dot{\mathbf{y}}$ es el vector de la velocidad superficial intrínseca de la superficie divisoria. Comparando este teorema con el teorema general del transporte (ecuación 2.6.8), puede notarse que el intercambio de diferenciación temporal e integración espacial ahora incluye dos términos de corrección. El primer término en el lado derecho de la ecuación (3.4.16) representa la acumulación superficial, mientras que el término $\nabla_s \cdot (\psi_s \mathbf{v}_s)$ está asociado con el transporte superficial de ψ_s y el último término toma en cuenta las contribuciones por el movimiento y deformación de la superficie divisoria.

Utilizando el teorema del transporte superficial, la ecuación (3.4.15) puede escribirse como sigue:

$$\int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \left\{ \frac{D_s \rho_s}{Dt} + \rho_s \nabla_s \cdot \mathbf{v}^\sigma - \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot [\rho_\beta (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}^\sigma) - \rho_\gamma (\mathbf{v}_\gamma - \mathbf{v}^\sigma)] \right\} dA = 0. \quad (3.4.20)$$

De donde es posible extraer la siguiente condición de frontera:

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \nabla_s \rho_s \cdot \dot{\mathbf{y}} + \rho_s \nabla_s \cdot \mathbf{v}^\sigma = \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot [\rho_\beta (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}^\sigma) - \rho_\gamma (\mathbf{v}_\gamma - \mathbf{v}^\sigma)], \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}. \quad (3.4.21)$$

Más aún, cuando la forma de la superficie divisoria sea tal que permita descomponer a la velocidad \mathbf{v}^σ en sus componentes perpendicular y tangencial a la superficie divisoria

$$\mathbf{v}^\sigma = \underbrace{\mathbf{w}}_{\text{perpendicular}} + \underbrace{\mathbf{v}_s}_{\text{tangencial}}, \quad (3.4.22)$$

puede entonces asociarse $\dot{\mathbf{y}} \equiv \mathbf{v}_s = \mathbf{v}^\sigma \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{n}_{\beta\gamma}\mathbf{n}_{\beta\gamma})$ y $\mathbf{w} = (\mathbf{v}^\sigma \cdot \mathbf{n}_{\beta\gamma})\mathbf{n}_{\beta\gamma}$. De esta forma, se tiene que

$$\rho_s \nabla_s \cdot \mathbf{v}^\sigma = \rho_s (\mathbf{w} \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma}) (\nabla_s \cdot \mathbf{n}_{\beta\gamma}) + \rho_s \nabla_s \cdot \mathbf{v}_s. \quad (3.4.23)$$

En esta expresión se tomó en cuenta que $\mathbf{v}^\sigma \cdot \mathbf{n}_{\beta\gamma} = \mathbf{w} \cdot \mathbf{n}_{\beta\gamma}$ y que $\nabla_s \psi_s \cdot \mathbf{n}_{\beta\gamma} = 0$. Slattery y col. (2006), define a la curvatura media de la superficie divisoria como

$$H = -\frac{1}{2} \nabla_s \cdot \mathbf{n}_{\beta\gamma}. \quad (3.4.24)$$

De esta forma, la condición de salto de masa puede expresarse como sigue

Condición de salto del flujo de masa total

$$\underbrace{\frac{\partial \rho_s}{\partial t}}_{\text{acumulación superficial}} + \underbrace{\nabla_s \cdot (\rho_s \mathbf{v}_s)}_{\text{transporte superficial}} - \underbrace{2H \rho_s (\mathbf{w} \cdot \mathbf{n}_{\beta\gamma})}_{\text{efectos de cambios en la superficie divisoria}} = \underbrace{\mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot [\rho_\beta (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{w}) - \rho_\gamma (\mathbf{v}_\gamma - \mathbf{w})]}_{\text{flujo interfacial desde las fases hacia la superficie divisoria}}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}. \quad (3.4.25)$$

Note que el significado físico de cada término de la ecuación anterior ha sido identificado con claridad. Se dice que la ecuación anterior es una *condición de salto* ya que predice una discontinuidad del flujo de masa. Para situaciones en las cuales los términos del lado izquierdo de la ecuación anterior sean despreciables, el resultado se reduce a la condición de continuidad del flujo de masa a través de una superficie divisoria:

$$\mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \rho_\gamma (\mathbf{v}_\gamma - \mathbf{w}) = \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \rho_\beta (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{w}), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}. \quad (3.4.26)$$

Ejercicio 3.8 — Observación experimental de interfases. Un experimento casero y sencillo para observar la aparición y dinámica de interfases es el siguiente: coloque en un recipiente dos o más lunetas de dulce de diferentes colores. Posteriormente, agregue suficiente agua que cubra aproximadamente la mitad del alto de las lunetas. Después de un tiempo se pueden apreciar tanto las interfases como los puntos de contacto entre varias fases y sus curvaturas. ■

Ejercicio 3.9 — Caso sin transferencia de masa interfacial. Demuestre que, si no hay transferencia de masa, la condición de salto se reduce a $\mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \rho_\gamma (\mathbf{v}_\gamma - \mathbf{w}) = \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \rho_\beta (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{w})$ y que esta expresión puede simplificarse aún mas para dar lugar a la siguiente condición de continuidad de las velocidades de cada fase:

$$\mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \mathbf{v}_\beta = \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \mathbf{v}_\gamma, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}. \quad (3.4.27)$$

Ejercicio 3.10 En muchos casos de estudio es aceptable imponer la condición de no deslizamiento, la cual implica que:

$$\mathbf{t}_{\beta\gamma} \cdot \mathbf{v}_\beta = \mathbf{t}_{\beta\gamma} \cdot \mathbf{v}_\gamma, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}, \quad (3.4.28)$$

donde $\mathbf{t}_{\beta\gamma}$ es el vector unitario tangente a la superficie divisoria. Suponiendo que la fase β es un sólido fijo e impermeable a la transferencia de masa, explique bajo qué condiciones puede deducirse que

$$\mathbf{v}_\gamma = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}.$$

Note que la ecuación anterior aplica al vector velocidad y no sólo a su componente normal o tangencial. ■

Ejercicio 3.11 En algunos casos (por ejemplo en flujos de gases a través de conductos estrechos) la condición de no deslizamiento dejar de ser válida y [Navier \(1822\)](#) propuso la siguiente expresión para calcular la velocidad de deslizamiento:

$$\mathbf{t}_{\beta\gamma} \cdot \mathbf{v}_\gamma = -\xi \frac{\lambda_\gamma}{\mu_\gamma} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{t}_{\beta\gamma}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}, \quad (3.4.29)$$

donde λ_γ es la trayectoria libre media, ξ es un parámetro relacionado con el coeficiente de acomodo de transferencia de cantidad de movimiento, μ_γ es la viscosidad del fluido y $\boldsymbol{\tau}$ es el tensor de esfuerzos viscosos. Suponiendo que la fase sólida es impermeable a la transferencia de masa, demuestre que las condiciones de frontera para las componentes normal y tangencial de la velocidad están contenidas en la siguiente expresión:

$$\mathbf{v}_\gamma = -\xi \frac{\lambda_\gamma}{\mu_\gamma} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \boldsymbol{\tau} \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{n}_{\beta\gamma} \mathbf{n}_{\beta\gamma}), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}, \quad (3.4.30)$$

donde \mathbf{I} es el tensor identidad. Esta misma expresión ha sido propuesta para modelar el flujo alrededor de superficies rugosas (ver, por ejemplo, [Zampogna y col., 2018](#)). ■

3.5 Modelo macroscópico de conservación de masa de una especie

El principio de conservación de masa en su forma macroscópica es muy similar al de masa total visto en la sección 3.2 con la diferencia de que ahora se debe considerar la posibilidad de consumo o producción de masa por reacciones químicas. La forma en palabras del principio de conservación

de masa de una especie química en una región arbitraria es

Principio de conservación de masa de una especie (ecuación con palabras)

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{La razón de cambio en el tiempo} \\ \text{de la masa de una especie} \\ \text{en una región arbitraria} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Flujo neto de entrada de masa de la especie} \\ \text{por las fronteras de la región arbitraria} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Tasa de generación o consumo de masa de la especie} \\ \text{por reacciones químicas en la región arbitraria} \end{array} \right\}. \quad (3.5.1)$$

Siguiendo los mismos argumentos usados para la deducción de la forma macroscópica del principio de conservación de masa, se deduce que cada término puede traducirse al lenguaje matemático como sigue

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{La razón de cambio en el tiempo} \\ \text{de la masa de una especie} \\ \text{en una región arbitraria} \end{array} \right\} = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \rho_A dV, \quad (3.5.2a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Flujo neto de entrada de masa de la especie} \\ \text{por las fronteras de la región arbitraria} \end{array} \right\} = - \int_{\mathcal{S}_A} \mathbf{n} \cdot \rho_A (\mathbf{v}_A - \mathbf{w}) dA, \quad (3.5.2b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Tasa de generación o consumo de masa de la especie} \\ \text{por reacciones químicas en la región arbitraria} \end{array} \right\} = \int_{\mathcal{V}_A} r_A dV, \quad (3.5.2c)$$

donde ρ_A , \mathbf{v}_A y r_A representan la densidad de la especie A , su velocidad y su tasa de generación (si $r_A > 0$) o consumo ($r_A < 0$) por unidad de volumen, respectivamente. Sustituyendo las expresiones dadas en las ecuaciones (3.5.2) en la ecuación (3.5.1), dan lugar a la forma macroscópica del principio de conservación de masa para una especie química en una región arbitraria:

Forma macroscópica del principio de conservación de masa de una especie

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \rho_A dV + \int_{\mathcal{S}_A} \mathbf{n} \cdot \rho_A (\mathbf{v}_A - \mathbf{w}) dA = \int_{\mathcal{V}_A} r_A dV. \quad (3.5.3)$$

A partir de este resultado, pueden deducirse las expresiones correspondientes para las otras dos regiones de integración. Para el caso de una región material, el término del flujo de masa por las fronteras debe eliminarse, ya que, por definición esta región de integración no permite intercambio de masa con los alrededores. Por esta razón, en las fronteras de esta región se debe cumplir ahora que $\mathbf{w} = \mathbf{v}_A$. Además, la derivada total debe transformarse en una derivada material relativa al movimiento de la especie A . Esto es,

$$\frac{D_A}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \rho_A dV = \int_{\mathcal{V}_M} r_A dV, \quad (3.5.4)$$

donde la derivada material de ρ_A se define ahora como

$$\frac{D_A \rho_A}{Dt} = \frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \mathbf{v}_A \cdot \nabla \rho_A. \quad (3.5.5)$$

Para esta variante de la derivada material aplica la siguiente versión del teorema del transporte de Reynolds

$$\frac{D_A}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \rho_A dV = \int_{\mathcal{V}_M} \frac{\partial \rho_A}{\partial t} dV + \int_{\mathcal{S}_M} \mathbf{n} \cdot \rho_A \mathbf{v}_A dA. \quad (3.5.6)$$

Por último, la forma macroscópica del principio de conservación de masa de una especie química para una región fija se expresa como

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}_f} \rho_A dV + \int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} \cdot \rho_A \mathbf{v}_A dA = \int_{\mathcal{V}_f} r_A dV. \quad (3.5.7)$$

Las ecuaciones anteriores se escribieron en base másica y aplican para $A = 1, \dots, N$, siendo N el número de especies químicas presentes en la fase. De hecho, las tasas de reacción satisfacen la siguiente restricción

$$\sum_{A=1}^{A=N} \int_{\mathcal{V}} r_A dV = 0. \quad (3.5.8)$$

Esta expresión indica simplemente que la suma de las tasas de generación y consumo de todas las especies químicas en una fase debe dar cero. Note que se prescindió del subíndice de la región de promediado ya que la ecuación anterior aplica igualmente para \mathcal{V}_A , \mathcal{V}_M o \mathcal{V}_f . En el ejercicio 3.12 se toma en cuenta la ecuación anterior para demostrar que es posible recuperar las formas macroscópicas del principio de conservación de masa total a partir de sus formas equivalentes para el transporte de especies.

En este momento es pertinente comentar que algunos autores (por ejemplo [Gray y Gray, 2017](#)) sugieren sumar y restar la velocidad del fluido en el segundo término en el lado izquierdo de la ecuación (3.5.3) para obtener la siguiente relación:

$$\underbrace{\int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \rho_A (\mathbf{v}_A - \mathbf{w}) dA}_{\text{convección}} = \underbrace{\int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \rho_A (\mathbf{v} - \mathbf{w}) dA}_{\text{advección}} + \underbrace{\int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \rho_A (\mathbf{v}_A - \mathbf{v}) dA}_{\text{dispersión}}. \quad (3.5.9)$$

Como puede notarse, el flujo de masa por las fronteras de la región arbitraria se asocia con el flux convectivo, el cual se puede descomponer en sus contribuciones advectiva y dispersiva. El flux advectivo sólo tiene que ver con la velocidad del fluido relativa a la velocidad de desplazamiento de la superficie \mathcal{A}_A , mientras que el flux dispersivo se refiere a la velocidad de la especie química relativa a la velocidad del fluido. Note que estos conceptos son macroscópicos y se retoman más adelante en la discusión de la forma microscópica de este principio de conservación.

Por último, en muchas aplicaciones es deseable contar con la forma molar del principio de conservación de masa. Para ello, se definen la concentración molar y la tasa de reacción en base molar como

$$c_A = \frac{\rho_A}{M_A}; \quad R_A = \frac{r_A}{M_A}, \quad (3.5.10)$$

donde M_A es el peso molecular de la especie A y es una constante. Tomando en cuenta estas definiciones, el resultado de dividir las ecuaciones (3.5.3), (3.5.4) y (3.5.7) entre M_A puede expresarse como

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} c_A dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot c_A (\mathbf{v}_A - \mathbf{w}) dA = \int_{\mathcal{V}_A} R_A dV, \quad (3.5.11a)$$

$$\frac{D_A}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} c_A dV = \int_{\mathcal{V}_M} R_A dV, \quad (3.5.11b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}_f} c_A dV + \int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} \cdot c_A \mathbf{v}_A dA = \int_{\mathcal{V}_f} R_A dV. \quad (3.5.11c)$$

Las cuales corresponden a las versiones en base molar de la forma macroscópica del principio de conservación de masa de una especie. Antes de proceder a examinar algunas aplicaciones del modelo macroscópico, es conveniente deducir las formas microscópicas de este principio de conservación y las condiciones de frontera correspondientes.

Ejercicio 3.12 — Equivalencia con los modelos de masa total. Lleve a cabo las operaciones algebraicas correspondientes y demuestre que al aplicar la sumatoria de $A = 1, \dots, N$ en las ecuaciones (3.5.3), (3.5.4) y (3.5.7) se recuperan las expresiones dadas en las ecuaciones (3.4.1a), (3.4.1b) y (3.4.1c), respectivamente. ■

3.6 Forma microscópica de conservación de masa de una especie

3.6.1 Ecuación diferencial a escala microscópica

Para deducir la versión del principio de conservación de masa de una especie que aplica al nivel de escala microscópico se procede de manera análoga a los desarrollos que llevaron a la ecuación de continuidad. De esta forma, al aplicar el teorema general del transporte a la ecuación (3.5.3) resulta la siguiente expresión

$$\int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \rho_A}{\partial t} dV + \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot \rho_A \mathbf{v}_A dA = \int_{\mathcal{V}} r_A dV. \quad (3.6.1)$$

Aquí se prescindió del subíndice A en los límites de integración ya que esta misma expresión resulta de aplicar la variante del teorema del transporte de Reynolds dada en la ecuación (3.5.6) a la ecuación (3.5.4) y también de aplicar la relación integral dada en la ecuación (2.6.7) a la ecuación (3.5.7). Para continuar con los desarrollos se aplica el teorema de la divergencia en el término de transporte a través de las fronteras de las regiones y se agrupan todos los términos dentro de una sola integral de volumen como sigue:

$$\int_{\mathcal{V}} \left[\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_A \mathbf{v}_A) - r_A \right] dV = 0. \quad (3.6.2)$$

A partir de esta ecuación se deduce la forma microscópica del principio de conservación de una especie en base másica como

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_A \mathbf{v}_A) = r_A. \quad (3.6.3)$$

La velocidad de una especie, \mathbf{v}_A , puede descomponerse en la velocidad convectiva (es decir, la velocidad \mathbf{v} del fluido) y la velocidad difusiva de la especie (\mathbf{u}_A) como sigue:

$$\mathbf{v}_A = \mathbf{v} + \mathbf{u}_A. \quad (3.6.4)$$

Esta expresión puede interpretarse como una descomposición de la velocidad de una especie en términos de la velocidad del fluido y sus fluctuaciones alrededor de ella. En otras palabras, la velocidad difusiva de una especie se refiere a la velocidad que lleva la especie A relativa a la velocidad del fluido. Usando esta descomposición, la ecuación (3.6.3) toma la siguiente forma

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_A \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho_A \mathbf{u}_A) = r_A. \quad (3.6.5)$$

De esta forma, el producto $\rho_A \mathbf{v}$ define al flux convectivo, mientras que $\rho_A \mathbf{u}_A \equiv \mathbf{j}_A$ es el flux difusivo. Para comprender más acerca del flux difusivo, es conveniente multiplicar ambos lados de la ecuación (3.6.4) por ρ_A y llevar a cabo la sumatoria desde $A = 1, \dots, N$ para obtener la siguiente expresión

$$\sum_{A=1}^{A=N} \rho_A \mathbf{v}_A = \left(\sum_{A=1}^{A=N} \rho_A \right) \mathbf{v} + \sum_{A=1}^{A=N} \mathbf{j}_A. \quad (3.6.6)$$

Dado que la suma de las densidades de las especies da como resultado la densidad de la mezcla,

$$\rho = \sum_{A=1}^{A=N} \rho_A, \quad (3.6.7a)$$

y la velocidad del fluido puede calcularse a partir de las velocidades de las especies que lo componen como

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\sum_{A=1}^{A=N} \rho_A} \sum_{A=1}^{A=N} \rho_A \mathbf{v}_A, \quad (3.6.7b)$$

se deduce de la ecuación (3.6.6) que la suma de los fluxes difusivos de las especies químicas que componen a la fase debe ser cero. Eso es,

$$\sum_{A=1}^{A=N} \mathbf{j}_A = \mathbf{0}. \quad (3.6.8)$$

Para calcular el flux difusivo de cada especie, se puede utilizar la ecuación de conservación de cantidad de movimiento para cada especie a la escala microscópica, cuya versión simplificada es la ecuación de Stefan-Maxwell (ver, por ejemplo Whitaker, 2009), la cual bajo la suposición de solución diluida se reduce a la ley de Fick (ver ejercicio 3.13)

$$\mathbf{j}_A = -\mathcal{D}_A \nabla \rho_A, \quad (3.6.9)$$

donde \mathcal{D}_A es el coeficiente de difusión de la especie A en la mezcla que compone a la fase donde se encuentra disuelta. Entonces, la versión final de la forma microscópica del principio de conservación de masa de una especie es, en base másica,

Formas microscópicas del principio de conservación de masa de una especie

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_A \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\mathcal{D}_A \nabla \rho_A) + r_A. \quad (3.6.10a)$$

La ecuación anterior puede expresarse en base molar al dividir ambos lados entre el peso molecular de la especie A , para así obtener la versión correspondiente en base molar

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \nabla \cdot (c_A \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\mathcal{D}_A \nabla c_A) + R_A. \quad (3.6.10b)$$

En ambas ecuaciones el primer término en el lado izquierdo representa la acumulación de masa en cada punto de la fase, mientras que el segundo término representa el transporte de masa por convección. Por su parte, el primer término del lado derecho representa el transporte de masa por difusión y el último término es la tasa de generación o consumo de la especie en cada punto de la fase.

Ejercicio 3.13 — Ley de Fick a partir de la ecuación de Stefan-Maxwell. Bajo ciertas condiciones, la ecuación de Stefan-Maxwell puede escribirse como

$$\mathbf{0} = -\nabla w_A + \sum_{B=1}^{B=N} \frac{w_A w_B (\mathbf{v}_B - \mathbf{v}_A)}{\mathcal{D}_{AB}}, \quad (3.6.11)$$

donde la fracción másica es $w_A = \rho_A / \rho$ y \mathcal{D}_{AB} es el coeficiente de difusión de la especie A en B . Comenzando por la ecuación anterior, proponga suposiciones y definiciones razonables que permitan deducir a la ley de Fick dada en la ecuación (3.6.9). ■

Ejercicio 3.14 Lleve a cabo la suma desde $A = 1, \dots, N$ de las ecuaciones (3.6.10b) y recupere la siguiente expresión

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c \mathbf{v}) = \sum_{A=1}^{A=N} R_A, \quad (3.6.12)$$

donde

$$c = \sum_{A=1}^{A=N} c_A. \quad (3.6.13)$$

Explique bajo qué condiciones el lado derecho de la ecuación (3.6.12) es cero. ■

3.6.2 Versión adimensional de la forma microscópica del principio de conservación de masa de una especie

En los párrafos anteriores se dedujo la forma microscópica del principio de conservación de masa de una especie en sus bases másica y molar. En el análisis y solución de varios problemas específicos de fenómenos de transporte es, a menudo, conveniente reformular estas ecuaciones en términos de variables y números adimensionales. Para ilustrar esto, considere por ahora solo la versión en base molar dada en la ecuación (3.6.10b), para expresarla en forma adimensional se proponen las siguientes definiciones

$$c_A^* = \frac{c_A}{c_{ref}}; \quad \mathbf{v}^* = \frac{\mathbf{v}}{v_{ref}}; \quad R_A^* = \frac{R_A \ell_{ref}^2}{\mathcal{D}_A c_{ref}}; \quad \nabla^* = \ell_{ref} \nabla; \quad t^* = \frac{t \mathcal{D}_A}{\ell_{ref}^2}; \quad Pe = \frac{v_{ref} \ell_{ref}}{\mathcal{D}_A}. \quad (3.6.14)$$

En las ecuaciones anteriores, c_{ref} , ℓ_{ref} y v_{ref} representan la concentración, longitud y magnitud de la velocidad de referencia, respectivamente. Más aún, en la última definición, Pe es el número de Péclet definido en la sección 1.7.5 y relaciona la tasa de transferencia de masa por convección con el transporte por difusión dentro de la fase. Llevando a cabo los cambios de variables correspondientes, se deduce la siguiente forma adimensional del principio de conservación de masa a escala microscópica y en base molar

$$\frac{\partial c_A^*}{\partial t^*} + Pe \nabla^* \cdot (c_A^* \mathbf{v}^*) = \nabla^{*2} c_A^* + R_A^*. \quad (3.6.15)$$

Como puede notarse, para deducir esta ecuación, se supuso que el coeficiente de difusión es constante; en el ejercicio 3.15 se explora un caso más general. Suponiendo que los parámetros de referencia se eligen de forma tal que el orden de magnitud de cada término de la ecuación anterior es uno, puede deducirse que cuando $Pe \ll 1$, el transporte difusivo es mucho mayor que el convectivo y la ecuación anterior se reduce a

$$\frac{\partial c_A^*}{\partial t^*} = \nabla^{*2} c_A^* + R_A^*. \quad (3.6.16)$$

En el extremo opuesto, cuando el transporte por convección es mucho mayor que por difusión ($Pe \gg 1$), el término difusivo podría, en principio, ser descartado en la ecuación (3.6.15). Sin embargo, desde el punto de vista de la estabilidad de la solución de la ecuación, el contar con un término difusivo es conveniente. Por ello, es que se recomienda, en la medida de lo posible no descartar a este término.

Dirigiendo la atención al término reactivo, cuando la reacción es de consumo y de primer orden ($R_A = -k_1 c_A$), el término adimensional se expresa como

$$R_A^* = -\Phi_1^2 c_A^*. \quad (3.6.17)$$

En donde se recuperó la definición del módulo de Thiele dada en la ecuación (1.7.9)

$$\Phi_1^2 = \frac{k_1 \ell_{ref}^2}{\mathcal{D}_A}. \quad (3.6.18)$$

Este número adimensional relaciona la tasa de reacción respecto a la tasa de difusión. De esta forma, en un sistema en el cual $\Phi_1^2 \ll 1$, es natural pensar que la especie química tendrá mayor oportunidad de transportarse por medio de la difusión que ser consumida (o producida) por una

reacción química. Mientras que cuando $\Phi_1^2 \gg 1$ la tasa de consumo (o producción) de la especie es mucho mayor que su tasa de transporte de difusión, por lo que la especie no podrá avanzar mucho en el sistema sin ser afectada por la reacción química. En el ejercicio 3.16 se exploran alternativas del módulo de Thiele para otro tipo de cinéticas de reacción. Cabe mencionar que a lo largo del texto se suponen conocidas las cinéticas de reacción involucradas en diversas aplicaciones. El adquirir esta información suele involucrar llevar a cabo experimentos a distintos niveles de escala (ver, por ejemplo Hill y Root, 2014) y trasciende los alcances de este texto.

Ejercicio 3.15 — Forma adimensional para difusividad variable. Reconsidere los pasos que llevaron a la adimensionalización de la ecuación (3.6.10b), pero en esta ocasión no suponga que el coeficiente de difusión es constante. Proponga las modificaciones pertinentes a las definiciones adimensionales dadas en la ecuación (4.3.31) y deduzca el modelo adimensional correspondiente. ■

Ejercicio 3.16 Considere el caso en el que la reacción química tenga las siguientes cinéticas:

1. Orden cero $R_A = -k_0$.
2. Michaelis Menten $R_A = -v_{\text{máx}}c_A/(K_M + c_A)$.

Deduzca en cada caso la expresión resultante para R_A^* y para el módulo de Thiele. ■

Ejercicio 3.17 — Uso del número de Damköhler. El módulo de Thiele relaciona la tasa de reacción con la tasa de difusión, o bien el tiempo característico de la difusión ($t_{\mathcal{D}} = \ell_{\text{ref}}^2/\mathcal{D}_A$) con el tiempo característico de la reacción. Sin embargo, esta descripción puede no ser del todo adecuada cuando hay más de un mecanismo de transporte involucrado. Como se explicó en la sección 1.7.7, el número de Damköhler se define como la relación entre el tiempo característico del transporte y la reacción. Considere una cinética de primer orden y suponga que el transporte de masa se da por difusión y convección para deducir la definición correspondiente del número de Damköhler para esta situación. ■

3.6.3 Condición interfacial para la transferencia de masa de una especie

Las condiciones de frontera para la transferencia de masa entre especies son de dos tipos: una relativa al flux de las especies y la segunda aplica a la concentración interfacial. Para deducir la condición de frontera del flux considere de nuevo una región material que contiene porciones de dos fases fluidas como la mostrada en la figura 3.4. En esta región de integración se aplica la forma macroscópica del principio de conservación de masa de una especie en la forma molar dada en la ecuación (3.5.11b):

$$\frac{D_A}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} c_A dV = \int_{\mathcal{V}_A} R_A dV. \quad (3.6.19)$$

Al igual que en el caso de la conservación de masa total, es conveniente expresar la masa molar y la tasa de reacción de las especies en términos de sus contrapartes en cada fase. Esto puede hacerse mediante el uso de funciones de exceso de acuerdo con la siguiente descomposición

$$\int_{\mathcal{V}_M} \psi dV = \int_{\mathcal{V}_\beta} \psi_\beta dV + \int_{\mathcal{V}_\gamma} \psi_\gamma dV + \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \psi_s dA; \quad \psi = c_A, R_A. \quad (3.6.20)$$

De esta forma, la ecuación (3.6.19) puede expresarse de la siguiente manera

$$\frac{D_A}{Dt} \int_{\mathcal{V}_\beta} c_{A\beta} dV + \frac{D_A}{Dt} \int_{\mathcal{V}_\gamma} c_{A\gamma} dV + \frac{D_A}{Dt} \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} c_{As} dA = \int_{\mathcal{V}_\beta} R_{A\beta} dV + \int_{\mathcal{V}_\gamma} R_{A\gamma} dV + \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} R_{As} dA. \quad (3.6.21)$$

Más aún, extendiendo el uso de las propiedades de cada fase a la zona de frontera que las separa ambas fases, los modelos macroscópicos de conservación de la especie A en cada fase pueden expresarse de la siguiente forma

$$\frac{D_A}{Dt} \int_{\mathcal{V}_\beta} c_{A\beta} dV = \int_{\mathcal{V}_\beta} R_{A\beta} dV, \quad (3.6.22a)$$

$$\frac{D_A}{Dt} \int_{\mathcal{V}_\gamma} c_{A\gamma} dV = \int_{\mathcal{V}_\gamma} R_{A\gamma} dV. \quad (3.6.22b)$$

Vale la pena insistir en que el uso de las ecuaciones (3.6.22) solo se justifica cuando no hay transporte de masa entre las fases, por lo que deben entenderse, en general, como una aproximación. Restando la suma de las ecuaciones (3.6.22) a la ecuación (3.6.21) resulta que

$$\frac{D_A}{Dt} \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} c_{As} dA = \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} R_{As} dA. \quad (3.6.23)$$

Para intercambiar diferenciación e integración se recurre, en este caso, a la siguiente forma modificada del teorema del transporte superficial

$$\frac{D_A}{Dt} \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \psi_s dA = \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \left[\frac{D_{As} \psi_s}{Dt} + \psi_s \nabla_s \cdot \mathbf{v}_A^\sigma - \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot [\psi_\beta (\mathbf{v}_{A\beta} - \mathbf{v}^\sigma) - \psi_\gamma (\mathbf{v}_{A\gamma} - \mathbf{v}^\sigma)] \right] dA. \quad (3.6.24)$$

En donde, \mathbf{v}_A^σ es la velocidad superficial de la especie A . La cual, cuando la topología de la superficie divisoria lo permite, puede expresarse en términos de la velocidad normal de desplazamiento de la superficie divisoria (\mathbf{w}) y de la velocidad tangencial de movimiento de la especie A (\mathbf{v}_{As}) como sigue

$$\mathbf{v}_A^\sigma = \mathbf{w} + \mathbf{v}_{As}. \quad (3.6.25)$$

Además, la derivada material superficial referida a la especie A puede expresarse como sigue

$$\frac{D_{As} \psi_s}{Dt} = \frac{\partial \psi_s}{\partial t} + \nabla_s \psi_s \cdot \mathbf{v}_{As}. \quad (3.6.26)$$

De esta forma, aplicando el teorema del transporte superficial a la ecuación (3.6.23), agrupando todos los términos dentro de una misma integral de superficie y extrayendo al integrando se obtiene la siguiente condición de frontera

$$\frac{\partial c_{As}}{\partial t} + \nabla_s c_{As} \cdot \mathbf{v}_{As} + c_{As} \nabla_s \cdot \mathbf{v}_A^\sigma = \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot [c_{A\beta} (\mathbf{v}_{A\beta} - \mathbf{v}^\sigma) - c_{A\gamma} (\mathbf{v}_{A\gamma} - \mathbf{v}^\sigma)] + R_{As}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}. \quad (3.6.27)$$

Sustituyendo en el último término en el lado izquierdo de la ecuación anterior la descomposición dada en la ecuación (3.6.25) y tomando en cuenta que $c_{As} \nabla_s \cdot \mathbf{w} = -2H c_{As} (\mathbf{w} \cdot \mathbf{n}_{\beta\gamma})$, resulta la siguiente forma de la condición de salto:

Condiciones de salto del flux de masa

$$\underbrace{\frac{\partial c_{As}}{\partial t}}_{\text{Acumulación superficial}} + \underbrace{\nabla_s \cdot (c_{As} \mathbf{v}_{As})}_{\text{Transporte superficial}} - \underbrace{2H c_{As} (\mathbf{w} \cdot \mathbf{n}_{\beta\gamma})}_{\text{Efecto del cambio de la superficie}} = \underbrace{\mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot [c_{A\beta} (\mathbf{v}_{A\beta} - \mathbf{w}) - c_{A\gamma} (\mathbf{v}_{A\gamma} - \mathbf{w})]}_{\text{Fluxes interfaciales desde las fases hacia la interfase}} + \underbrace{R_{As}}_{\text{reacción superficial}}. \quad (3.6.28a)$$

Para obtener la forma másica de esta condición de frontera, basta con multiplicar ambos lados de la ecuación anterior por el peso molecular de la especie A para así obtener

$$\frac{\partial \rho_{As}}{\partial t} + \nabla_s \cdot (\rho_{As} \mathbf{v}_{As}) - 2H \rho_{As} (\mathbf{w} \cdot \mathbf{n}_{\beta\gamma}) = \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot [\rho_{A\beta} (\mathbf{v}_{A\beta} - \mathbf{w}_{\beta\gamma}) - \rho_{A\gamma} (\mathbf{v}_{A\gamma} - \mathbf{w}_{\beta\gamma})] + r_{As}. \quad (3.6.28b)$$

Esta última ecuación puede usarse para recuperar la condición de salto de masa total deducida en la sección 3.4.2 como se muestra en el ejercicio 3.18. Como puede notarse, las ecuaciones (3.6.28) son dos versiones de la misma condición de frontera que relaciona los fluxes interfaciales con los fenómenos de transporte que ocurren en la interfase. Cuando sólo hay transporte en una fase y se conoce el valor del flux de masa en las fronteras puede usarse esta ecuación para completar el planteamiento del problema. En ocasiones se conoce la concentración y no el flux de la especie en alguna frontera, en cuyo caso se puede prescindir de la condición de frontera anterior. Sin embargo, cuando hay transporte entre dos fases resulta imprescindible contar con una condición de frontera adicional a la anterior. La otra condición de frontera interfacial tiene que ver con compactar la información contenida en las capas límite de ambas fases y se suele expresar en la forma de la *ley de enfriamiento de Newton*

$$\mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot c_{A\beta} \mathbf{v}_{A\beta} = k_M (H_{\beta\gamma} c_{A\beta} - c_{A\infty}), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}, \quad (3.6.29a)$$

donde k_M es el coeficiente interfacial de transferencia de masa, $H_{\beta\gamma}$ es el coeficiente de partición y $c_{A\infty}$ es la concentración lejos de la superficie divisoria como es $c_{A\gamma}$. La versión en base másica de esta ecuación resulta de multiplicar ambos lados por el peso molecular de la especie y está dada por la siguiente expresión:

$$\mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \rho_{A\beta} \mathbf{v}_{A\beta} = k_M (H_{\beta\gamma} \rho_{A\beta} - \rho_{A\infty}), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}. \quad (3.6.29b)$$

Con estas dos condiciones de frontera se puede estudiar una buena cantidad de problemas de transferencia de masa. Más aún, la ley de enfriamiento de Newton (la cual es una condición de tipo Robin o Cauchy) permite identificar dos casos límite como se muestra a continuación. Llevando a cabo un análisis de orden de magnitud en ambos lados de la ecuación (3.6.29a) se obtiene que

$$k_M = \mathbf{O} \left(\frac{c_{A\beta} v_{A\beta}}{(H_{\beta\gamma} c_{A\beta} - c_{A\infty})} \right), \quad (3.6.30)$$

donde $v_{A\beta} = \mathbf{O}(\mathbf{v}_{A\beta})$. Para el caso en el que el transporte en la frontera sea principalmente difusivo y pueda aplicarse la ley de Fick (esto es, cuando $c_{A\beta} \mathbf{v}_{A\beta} = -\mathcal{D}_{A\beta} \nabla c_{A\beta}$), la ecuación anterior puede expresarse como

$$k_M = \mathbf{O} \left(\frac{\mathcal{D}_{A\beta} c_{A\beta}}{\ell (H_{\beta\gamma} c_{A\beta} - c_{A\infty})} \right). \quad (3.6.31)$$

En esta expresión ℓ representa la longitud característica del gradiente de concentración. Suponiendo que $c_{A\beta} = \mathbf{O}(H_{\beta\gamma} c_{A\beta} - c_{A\infty})$, la ecuación anterior permite concluir que la ley de enfriamiento de Newton puede expresarse en la forma dada en la ecuación (3.6.29a) cuando $k_M = \mathbf{O}(\mathcal{D}_{A\beta}/\ell)$. Sin embargo, cuando

$$Bi = \frac{k_M \ell}{\mathcal{D}_{A\beta}} \ll 1, \quad (3.6.32)$$

se tiene una situación en la que el transporte de masa en la frontera es mucho menor que en la fase- β y la condición de frontera se reduce a

$$\mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla c_A = 0, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}. \quad (3.6.33)$$

La cual es una condición de frontera de tipo Neumann que indica la ausencia de transporte de masa. Note que en la ecuación (3.6.32) se recuperó la definición del número de Biot (ver sección 1.7.6). El extremo opuesto, es decir cuando $Bi \gg 1$ corresponde al caso en el que no hay resistencias a la transferencia de masa en la frontera y por tanto el término en el lado derecho de la ecuación (3.6.29a) se puede suponer mucho mayor que el izquierdo y la condición de frontera se reduce a la siguiente condición tipo Dirichlet

$$H_{\beta\gamma} c_{A\beta} = c_{A\gamma}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}. \quad (3.6.34)$$

La cual justifica la continuidad de la concentración cuando $H_{\beta\gamma} = 1$. Como puede notarse, los casos límite mostrados en las ecuaciones (3.6.33) y (3.6.34) son formas particulares de la ley de enfriamiento de Newton. En los siguientes párrafos se exploran algunas aplicaciones de las formas macroscópicas y microscópicas de los modelos de conservación de masa de una especie.

Ejercicio 3.18 — Consistencia con la condición de salto para masa total. Demuestre que la ecuación (3.6.28b) puede usarse para recuperar la condición de salto de masa total dada en la ecuación (3.4.25). Para ello, lleve a cabo la sumatoria desde $A = 1, \dots, N$ de cada término de la ecuación (3.6.28b) y utilice las siguientes expresiones

$$\rho_s = \sum_{A=1}^{A=N} \rho_{As}; \quad \mathbf{v}_s = \frac{1}{\rho_s} \sum_{A=1}^{A=N} \rho_{As} \mathbf{v}_{As}; \quad \sum_{A=1}^{A=N} r_{As} = 0, \quad (3.6.35)$$

junto con las definiciones dadas en las ecuaciones (3.6.7) para recuperar el resultado deseado. ■

Ejercicio 3.19 — Análisis alternativo no limitado al transporte difusivo. Repita el análisis que permitió simplificar la ley de enfriamiento de Newton a condiciones de transporte nulo (ecuación 3.6.33) y de continuidad de la concentración (ecuación 3.6.34) en la frontera sin recurrir a suponer que el transporte de masa en la frontera se da predominantemente de manera difusiva. Proponga los casos límite en función de la velocidad de la especie A , la cual es la suma de las velocidades difusiva y convectiva como se muestra en la ecuación (3.6.4). ■

Ejercicio 3.20 Los sistemas celulares consisten en arreglos de células rodeados por un medio exo-polimérico (la fase- β) (ver figura 2.2). Si se denota al medio intracelular como la fase- σ y se considera a la membrana celular como una superficie. Explique, bajo qué circunstancias la condición de frontera interfacial puede escribirse como

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla c_{A\beta} = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\sigma} \nabla c_{A\sigma}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (3.6.36a)$$

$$-\mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathcal{D}_{A\sigma} \nabla c_{A\sigma} = k(c_{A\sigma} - K_{eq}c_{A\beta}), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (3.6.36b)$$

donde k se conoce como la permeabilidad de la membrana celular. Estas condiciones de frontera son adecuadas para modelar, por ejemplo, el transporte de oxígeno en sistemas celulares. Sin embargo, para modelar el transporte de sustrato, se requieren considerar mecanismos de acarreo por la membrana celular como lo ilustran Wood y Whitaker (1998). ■

3.7 Aplicaciones del modelo macroscópico de conservación de masa

3.7.1 Aplicación del balance macroscópico a un CSTR

Considere un reactor continuo tipo tanque agitado (o CSTR por sus siglas en inglés) como el mostrado en la figura 3.5 al cual ingresa una corriente de un fluido incompresible (fase- β), que acarrea a un reactivo (especie A) en solución diluida. Dentro del reactor se encuentran partículas

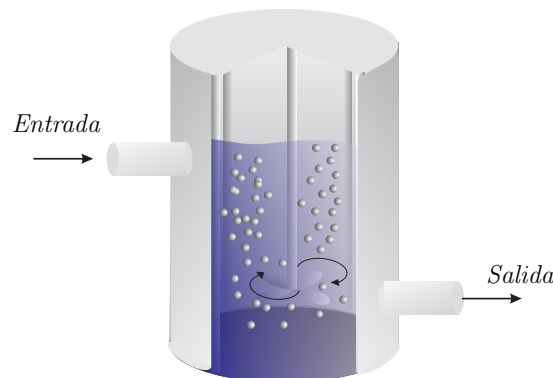


Figura 3.5: Esquema de un reactor continuo tipo tanque agitado que contiene una fase fluida y una fase dispersa.

catalíticas porosas (en donde hay una distribución de Np tamaños de partículas) en donde se consume la especie A siguiendo una cinética de primer orden. Se desea desarrollar un modelo macroscópico para la concentración de la especie A en el fluido contenido en el tanque.

Como se mostrará en el capítulo 6, el modelo de transporte de una especie en un medio poroso bajo condiciones de difusión y reacción posee una estructura similar a la dada en la ecuación (3.6.10b), con la diferencia de que la ecuación es de medio efectivo, por lo que la concentración $c_{A\omega}$ es de hecho una concentración promedio por lo que no se distingue entre las fases fluida y sólida en el medio poroso. El modelo de medio efectivo puede escribirse como sigue:

$$\frac{\partial c_{A\omega}}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{D}_{Aef} \cdot \nabla c_{A\omega}) - k_{ef} c_{A\omega}, \quad (3.7.1)$$

donde \mathbf{D}_{ef} y k_{ef} son los coeficientes efectivos de difusión y reacción y pueden predecirse a partir de las soluciones de los problemas de cerradura asociados como se ilustra en el capítulo 6. Como puede notarse, en el modelo anterior se supuso que el transporte de masa dentro de las partículas catalíticas se da principalmente por difusión. Este es un caso en el que hay transporte entre dos medios que es el fluido afuera y dentro de las partículas catalíticas. Por ello, se deben aplicar dos condiciones de frontera en la superficie $\mathcal{A}_{\beta\omega}$. Despreciando las contribuciones de la acumulación, transporte y reacción superficiales y tomando en cuenta que las partículas no sufren cambios en su superficie, dan lugar a la siguiente expresión de continuidad de los fluxes:

$$\mathbf{n}_{\beta\omega} \cdot c_{A\beta} (\mathbf{v}_{A\beta} - \mathbf{w}_{\beta\omega,i}) = \mathbf{n}_{\beta\omega} \cdot c_{A\omega,i} (\mathbf{v}_{A\omega,i} - \mathbf{w}_{\beta\omega,i}), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\omega}; i = 1, \dots, Np. \quad (3.7.2a)$$

Además, dado que existen resistencias a la transferencia de masa, la ley de enfriamiento de Newton puede expresarse ahora como sigue:

$$\mathbf{n}_{\omega\beta} \cdot c_{A\omega,i} (\mathbf{v}_{A\omega,i} - \mathbf{w}) = k_{mi} (c_{A\omega,i} - c_{A\beta}), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\omega}; i = 1, \dots, Np. \quad (3.7.2b)$$

Es necesario reconocer que estas condiciones de frontera son particulares para cada tipo de partícula, por ello el subíndice i , el cual va de 1 hasta el número de tamaños de partículas que estén en el sistema. Note que la ecuación anterior no contiene un coeficiente de partición ya que es el mismo fluido el que se encuentra dentro y fuera de las partículas catalíticas.

No es necesario llevar a cabo más desarrollos en esta región, por lo que el resto del análisis se centra en el fluido contenido en el tanque. En dicha zona del sistema, la forma macroscópica y en base molar del principio de conservación de masa asociado a una región arbitraria es

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_\beta} c_{A\beta} dV + \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n} \cdot c_{A\beta} (\mathbf{v}_{A\beta} - \mathbf{w}) dA = 0. \quad (3.7.3)$$

El objetivo ahora es expresar a esta ecuación en términos de la concentración promedio en todo el tanque:

$$c_A^\eta = \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{V}_\beta} c_{A\beta} dV, \quad (3.7.4)$$

donde \mathcal{V}_β representa el dominio ocupado por el fluido en el tanque y su volumen V_β puede, en general, ser función del tiempo. Sustituyendo esta definición en el primer término de la ecuación (3.7.3) se obtiene la siguiente expresión

$$\frac{d(c_A^\eta V_\beta)}{dt} + \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n} \cdot c_{A\beta} (\mathbf{v}_{A\beta} - \mathbf{w}) dA = 0. \quad (3.7.5)$$

Para determinar la dependencia temporal de V_β se recurre a la forma macroscópica del principio de conservación de masa total para una región arbitraria

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_\beta} \rho_\beta dV + \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n} \cdot \rho_\beta (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{w}) dA = 0. \quad (3.7.6)$$

Bajo la suposición de flujo incompresible la densidad del fluido puede suponerse constante (ver sección 1.7.1) y la ecuación anterior se reduce a:

$$\frac{dV_{\beta}}{dt} + \int_{\mathcal{A}_{\beta}} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v}_{\beta} - \mathbf{w}) dA = 0. \quad (3.7.7)$$

La superficie del fluido en el tanque puede descomponerse como sigue:

$$\mathcal{A}_{\beta} = \mathcal{A}_{entrada} + \mathcal{A}_{salida} + \mathcal{A}_{\beta\omega} + \mathcal{A}_{agitador} + \mathcal{A}_{paredes} + \mathcal{A}_{superior}. \quad (3.7.8)$$

Los valores de \mathbf{v}_{β} y \mathbf{w} en cada una de estas superficies son:

	$\mathcal{A}_{entrada}$	\mathcal{A}_{salida}	$\mathcal{A}_{\beta\omega}$	$\mathcal{A}_{agitador}$	$\mathcal{A}_{paredes}$	$\mathcal{A}_{superior}$
\mathbf{v}_{β}	$\mathbf{v}_{\beta,e}$	$\mathbf{v}_{\beta,s}$	\mathbf{v}_{β}	$\mathbf{v}_{\beta,a}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$
\mathbf{w}	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$	\mathbf{v}_{β}	$\mathbf{v}_{\beta,a}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$

De acuerdo con esta tabla, la velocidad del fluido y de las fronteras es la misma tanto en las partículas como en el agitador. Bajo estas condiciones, la versión macroscópica de la ecuación de conservación de masa total es:

$$\frac{dV_{\beta}}{dt} + \int_{\mathcal{A}_{\beta,e}} \mathbf{n}_{\beta,e} \cdot \mathbf{v}_{\beta,e} dA + \int_{\mathcal{A}_{\beta,s}} \mathbf{n}_{\beta,s} \cdot \mathbf{v}_{\beta,s} dA = 0. \quad (3.7.9)$$

Ya que en la superficie de entrada la velocidad del fluido y el vector normal van en sentidos opuestos, se tiene que $\mathbf{n}_{\beta,e} \cdot \mathbf{v}_{\beta,e} = -v_{\beta,e}$; mientras que en la superficie de salida se tiene el caso contrario y por ello $\mathbf{n}_{\beta,s} \cdot \mathbf{v}_{\beta,s} = v_{\beta,s}$. Tomando esto en cuenta, la ecuación anterior toma su forma final:

$$\frac{dV_{\beta}}{dt} = \dot{Q}_e - \dot{Q}_s, \quad (3.7.10)$$

donde \dot{Q}_e y \dot{Q}_s representan los flujos volumétricos de entrada y salida y están definidos como:

$$\dot{Q}_e = \int_{\mathcal{A}_{\beta,e}} v_{\beta,e} dA; \quad \dot{Q}_s = \int_{\mathcal{A}_{\beta,s}} v_{\beta,s} dA. \quad (3.7.11)$$

Evidentemente, bajo condiciones de estado estacionario, el flujo volumétrico de entrada es igual al flujo volumétrico de salida. Note que si ese fuera el caso, entonces podría usarse una región de integración fija en lugar de una región arbitraria. Con este resultado disponible, se puede regresar la atención al primer término de la ecuación (3.7.5) para obtener:

$$\frac{d(V_{\beta} c_A^{\eta})}{dt} = V_{\beta} \frac{dc_A^{\eta}}{dt} + c_A^{\eta} \frac{dV_{\beta}}{dt} = V_{\beta} \frac{dc_A^{\eta}}{dt} + c_A^{\eta} (\dot{Q}_e - \dot{Q}_s). \quad (3.7.12)$$

Para trabajar con el término del transporte interfacial de la ecuación (3.7.5), es conveniente considerar la siguiente descomposición:

	$\mathcal{A}_{entrada}$	\mathcal{A}_{salida}	$\mathcal{A}_{\beta\omega}$	$\mathcal{A}_{agitador}$	$\mathcal{A}_{paredes}$	$\mathcal{A}_{superior}$
$\mathbf{v}_{A\beta}$	$\mathbf{v}_{\beta,e}$	$\mathbf{v}_{\beta,s}$	$\mathbf{v}_{A\beta,p}$	$\mathbf{v}_{\beta,a}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$

Aquí se supuso que en las superficies de entrada, salida y en la superficie con el agitador, la velocidad de la especie A es predominantemente la velocidad convectiva, es decir, la velocidad del fluido. Bajo estas condiciones, la ecuación (3.7.5) toma la siguiente forma:

$$V_{\beta} \frac{dc_A^{\eta}}{dt} + c_A^{\eta} (\dot{Q}_e - \dot{Q}_s) + \int_{\mathcal{A}_{\beta,e}} \mathbf{n}_{\beta,e} \cdot c_{A\beta,e} \mathbf{v}_{\beta,e} dA + \int_{\mathcal{A}_{\beta,s}} \mathbf{n}_{\beta,s} \cdot c_{A\beta,s} \mathbf{v}_{\beta,s} dA + \int_{\mathcal{A}_{\beta\omega}} \mathbf{n}_{\beta\omega} \cdot c_{A\beta} (\mathbf{v}_{A\beta} - \mathbf{w}) dA = 0. \quad (3.7.13)$$

Para simplificar esta expresión, se supone que a la entrada del sistema la concentración es constante y que existen condiciones de mezclado perfecto. Esto último tiene como consecuencia que la concentración en la superficie de salida del tanque puede aproximarse como la concentración promedio en el mismo. De esta forma, la ecuación anterior se reduce a:

$$V_{\beta} \frac{dc_A^{\eta}}{dt} + \int_{\mathcal{A}_{\beta\omega}} \mathbf{n}_{\beta\omega} \cdot c_{A\beta} (\mathbf{v}_{A\beta} - \mathbf{w}) dA = \dot{Q}_e (c_{A\beta,e} - c_A^{\eta}). \quad (3.7.14)$$

O bien, usando las condiciones de frontera en la superficie entre el medio poroso y el fluido dadas en las ecuaciones (3.7.2):

$$V_{\beta} \frac{dc_A^{\eta}}{dt} = \dot{Q}_e (c_{A\beta,e} - c_A^{\eta}) + \sum_{i=1}^{i=Np} \int_{\mathcal{A}_{\beta\omega,i}} k_{m,i} (c_{A\omega,i} - c_{A\beta}) dA. \quad (3.7.15)$$

Para simplificar esta expresión, se aproxima la concentración interfacial por la concentración en el fluido. Si además se suponen como constantes el coeficiente interfacial de transferencia de masa $k_{m,i}$ y la concentración en la superficie de las partículas porosas, se tiene entonces:

$$\frac{dc_{A\eta}}{dt} = \frac{\dot{Q}_e}{V_{\beta}} (c_{A\beta,e} - c_{A\eta}) + \sum_{i=1}^{i=Np} \frac{k_{m,i} A_{\beta\omega,i}}{V_{\beta}} (c_{A\omega,i} - c_{A\eta}). \quad (3.7.16)$$

O bien, multiplicando la ecuación anterior por la fracción volumétrica del fluido en el tanque ($\epsilon_{\beta} = V_{\beta}/V$):

$$\epsilon_{\beta} \frac{dc_{A\eta}}{dt} = t_R^{-1} (c_{A\beta,e} - c_{A\eta}) + \sum_{i=1}^{i=Np} k_{m,i} a_{\beta\omega,i} (c_{A\omega,i} - c_{A\eta}). \quad (3.7.17)$$

En esta ecuación, se definió al tiempo de residencia como $t_R = V/\dot{Q}_e$ y al área interfacial por unidad de volumen como $a_{\beta\omega,i} = A_{\beta\omega,i}/V$. La ecuación anterior debe resolverse de manera acoplada con las ecuaciones para las partículas (ecuación 3.7.1). Este es el tipo de modelos de reactores químicos heterogéneos continuos de tipo tanque agitado reportados en la literatura (ver, por ejemplo, Hill y Root, 2014). Una alternativa es el sistema discontinuo o *batch*, en el cual se elimina el primer término del lado derecho de la ecuación anterior ya que no hay un flujo volumétrico de entrada.

En un reactor químico homogéneo no hay otras fases presentes y la reacción química se lleva a cabo en la fase fluida en el tanque. En este caso, no es difícil deducir que el modelo macroscópico correspondiente es

$$\frac{dc_A^{\eta}}{dt} = \frac{\dot{Q}_e}{V_{\beta}} (c_{A\beta,e} - c_A^{\eta}) - kc_A^{\eta}. \quad (3.7.18)$$

La cual debe resolverse sujeta a la condición inicial correspondiente.

Ejercicio 3.21 — Formulaciones alternativas.

1. Muestre cómo se modificaría el resultado si no se despreciara la tasa de reacción en la superficie entre el medio poroso y el fluido.
2. Simplifique el modelo para el caso en el que no hay distribución de tamaño de partículas.
3. Estudie el caso en el que la reacción química se da sólo en la superficie de las partículas.

Ejercicio 3.22 Demuestre que, si la velocidad de la superficie de las partículas es igual a la velocidad del fluido, la condición de frontera dada en la ecuación (3.7.2b) se puede escribir como $-\mathbf{n}_{\omega\beta} \cdot \mathbf{D}_{Aef,i} \cdot \nabla c_{A\omega i} = k_{mi} (c_{A\omega,i} - c_{A\beta})$.

Ejercicio 3.23 — Coeficiente interfacial de transferencia de masa variable. En los desarrollos presentados arriba se supuso que el coeficiente interfacial de transferencia de masa es constante en la superficie de cada partícula. Sin embargo, esta suposición puede no ser necesaria. Para demostrarlo, muestre de qué manera se puede recuperar una expresión con la misma estructura que la de la ecuación (3.7.16) sólo adoptando la suposición de mezclado perfecto. ■

3.7.2 Modelado del transporte de contaminantes en un lago

Considere un lago no eutrofizado el cual tiene varias corrientes de entrada y de salida a través de sus superficies con el subsuelo. Estas corrientes contienen un contaminante (especie A), el cual puede ser consumido por seres vivos móviles como peces, anfibios, etc. (región ω_m) o bien pueden adsorberse por superficies fijas en el lago como piedras o pastos (región ω_f), los cuales tienen N_m y N_f distribuciones de tamaños, respectivamente. Considere además que ingresa agua al lago por precipitaciones (aunque éstas no contienen al contaminante) y que el agua (y el contaminante) puede abandonar al lago por evaporación. Se desea desarrollar un modelo macroscópico que describa la dinámica de la concentración promedio del contaminante en el lago.

Para comenzar los desarrollos se considera una región arbitraria \mathcal{V}_β que comprende al agua contenida en el lago y es función del tiempo. Los modelos macroscópicos de masa total y de la concentración molar de la especie A en esta región, bajo la suposición de flujo incompresible (es decir, de densidad constante, ver sección 1.7.1) se escriben como sigue

$$\frac{dV_\beta}{dt} + \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{w}) dA = 0, \quad (3.7.19a)$$

$$\frac{d(c_A^\eta V_\beta)}{dt} + \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n} \cdot c_{A\beta} (\mathbf{v}_{A\beta} - \mathbf{w}) dA = 0. \quad (3.7.19b)$$

En el primer término de la ecuación (3.7.19b), c_A^η es la concentración promedio en el lago y tiene una definición idéntica a aquella dada en la ecuación (3.7.4). En este caso, la superficie \mathcal{A}_β se descompone en las superficies de entrada \mathcal{A}_e , de salida \mathcal{A}_s referentes al subsuelo, la superficie del lago que recibe precipitación \mathcal{A}_{pre} , la superficie en la que hay evaporación \mathcal{A}_{eva} , así como las superficies fijas en el fondo y alrededor del lago \mathcal{A}_f y por último las interfases con seres vivos fijos ($\mathcal{A}_{\beta\omega_f}$) y móviles ($\mathcal{A}_{\beta\omega_m}$). Los valores de \mathbf{v}_β , $\mathbf{v}_{A\beta}$ y \mathbf{w} en estas superficies son:

	\mathcal{A}_e	\mathcal{A}_s	\mathcal{A}_{pre}	\mathcal{A}_{eva}	\mathcal{A}_f	$\mathcal{A}_{\beta\omega_f}$	$\mathcal{A}_{\beta\omega_m}$
\mathbf{v}_β	$\mathbf{v}_{\beta e}$	$\mathbf{v}_{\beta s}$	\mathbf{v}_{pre}	\mathbf{v}_{eva}	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$	\mathbf{v}_ω
\mathbf{w}	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$	\mathbf{w}_{pre}	\mathbf{w}_{eva}	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$	\mathbf{v}_ω
$\mathbf{v}_{A\beta}$	$\mathbf{v}_{\beta e}$	$\mathbf{v}_{\beta s}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{v}_{A\beta}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{u}_{A\beta}$	$\mathbf{v}_{A\beta}$

Note que aquí se consideró que la velocidad de desplazamiento de la interfase puede no ser la misma que la velocidad de cada gota durante los eventos de precipitación y una situación similar se consideró en los eventos de evaporación. Además, se consideró que en las interfases con seres vivos fijos, la velocidad de la especie es predominantemente difusiva ($\mathbf{u}_{A\beta}$). Sustituyendo estos resultados en las ecuaciones (3.7.19) se obtiene que

$$\frac{dV_\beta}{dt} + \int_{\mathcal{A}_e} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_{\beta e} dA + \int_{\mathcal{A}_s} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_{\beta s} dA + \int_{\mathcal{A}_{pre}} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v}_{pre} - \mathbf{w}_{pre}) dA + \int_{\mathcal{A}_{eva}} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v}_{eva} - \mathbf{w}_{eva}) dA = 0, \quad (3.7.20a)$$

$$\begin{aligned} \frac{d(c_A^\eta V_\beta)}{dt} + \int_{\mathcal{A}_e} \mathbf{n} \cdot c_{A\beta} \mathbf{v}_{\beta e} dA + \int_{\mathcal{A}_s} \mathbf{n} \cdot c_{A\beta} \mathbf{v}_{\beta s} dA + \int_{\mathcal{A}_{eva}} \mathbf{n} \cdot c_{A\beta} (\mathbf{v}_{A\beta} - \mathbf{w}_{eva}) dA \\ + \int_{\mathcal{A}_{\beta\omega_f}} \mathbf{n} \cdot c_{A\beta} \mathbf{u}_{A\beta} dA + \int_{\mathcal{A}_{\beta\omega_m}} \mathbf{n} \cdot c_{A\beta} \mathbf{u}_{A\beta} dA = 0. \end{aligned} \quad (3.7.20b)$$

Al igual que en el problema anterior $\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_{\beta e} = -v_e$ y $\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_{\beta s} = v_s$ por lo que las ecuaciones anteriores pueden escribirse como

$$\frac{dV_\beta}{dt} = \dot{Q}_e - \dot{Q}_s + \dot{Q}_{pre} - \int_{\mathcal{A}_{eva}} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v}_{eva} - \mathbf{w}_{eva}) dA, \quad (3.7.21a)$$

$$\begin{aligned} V_\beta \frac{dc_A^\eta}{dt} + c_A^\eta \frac{dV_\beta}{dt} - c_{Ae} \dot{Q}_e + c_A^\eta \dot{Q}_s + c_A^\eta \int_{\mathcal{A}_{eva}} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v}_{A\beta} - \mathbf{w}_{eva}) dA + \int_{\mathcal{A}_{\beta\omega f}} \mathbf{n} \cdot c_{A\beta} \mathbf{u}_{A\beta} dA \\ + \int_{\mathcal{A}_{\beta\omega m}} \mathbf{n} \cdot c_{A\beta} \mathbf{u}_{A\beta} dA = 0. \end{aligned} \quad (3.7.21b)$$

En donde se utilizaron las siguientes definiciones de los flujos volumétricos

$$\dot{Q}_e = \int_{\mathcal{A}_e} v_e dA; \quad \dot{Q}_s = \int_{\mathcal{A}_s} v_s dA; \quad \dot{Q}_{pre} = - \int_{\mathcal{A}_{pre}} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v}_{pre} - \mathbf{w}_{pre}) dA. \quad (3.7.22)$$

Además, note que en la ecuación (3.7.21b) se supuso que la concentración de la especie A es constante en la superficie de entrada y que hay condiciones de mezclado perfecto, por lo que la concentración de la especie A en las superficies \mathcal{A}_s y \mathcal{A}_{eva} se supuso constante e igual a la concentración promedio en el lago. Sustituyendo la ecuación (3.7.21a) en la ecuación (3.7.21b), resulta que

$$V_\beta \frac{dc_A^\eta}{dt} + \int_{\mathcal{A}_{eva}} \mathbf{n} \cdot c_A^\eta \mathbf{u}_{A\beta} dA + \int_{\mathcal{A}_{\beta\omega f}} \mathbf{n} \cdot c_{A\beta} \mathbf{u}_{A\beta} dA + \int_{\mathcal{A}_{\beta\omega m}} \mathbf{n} \cdot c_{A\beta} \mathbf{u}_{A\beta} dA = \dot{Q}_e (c_{Ae} - c_A^\eta) - \dot{Q}_{pre} c_A^\eta. \quad (3.7.23)$$

Para cerrar el modelo se supone conocido el flux difusivo de evaporación:

$$\mathbf{n} \cdot c_A^\eta \mathbf{u}_{A\beta} = -\mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla c_{A\beta} = j_{Aeva}. \quad (3.7.24)$$

De esta forma, definiendo el flux promedio de evaporación como

$$\langle j_{Aeva} \rangle_{eva} = \frac{1}{A_{eva}} \int_{\mathcal{A}_{eva}} j_{Aeva} dA, \quad (3.7.25)$$

puede escribirse la ecuación (3.7.23) ahora como sigue

$$V_\beta \frac{dc_A^\eta}{dt} + \int_{\mathcal{A}_{\beta\omega f}} \mathbf{n} \cdot c_{A\beta} \mathbf{u}_{A\beta} dA + \int_{\mathcal{A}_{\beta\omega m}} \mathbf{n} \cdot c_{A\beta} \mathbf{u}_{A\beta} dA = \dot{Q}_e (c_{Ae} - c_A^\eta) - \dot{Q}_{pre} c_A^\eta - \langle j_{Aeva} \rangle_{eva} A_{eva}. \quad (3.7.26)$$

Por último, suponiendo conocidas las tasas de consumo de la especie A en las superficies fijas y móviles de los seres vivos y que obedecen cinéticas de primer orden, se tienen las siguientes relaciones

$$\text{en } \mathcal{A}_{\beta\omega fi}, \quad \mathbf{n} \cdot c_{A\beta} \mathbf{u}_{A\beta i} = -\mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_{A\beta i} \nabla c_{A\beta} = k_{fi} c_{A\beta}, \quad i = 1, \dots, Nf, \quad (3.7.27a)$$

$$\text{en } \mathcal{A}_{\beta\omega mi}, \quad \mathbf{n} \cdot c_{A\beta} \mathbf{u}_{A\beta i} = -\mathbf{n} \cdot \mathcal{D}_{A\beta i} \nabla c_{A\beta} = k_{mi} c_{A\beta}, \quad i = 1, \dots, Nm. \quad (3.7.27b)$$

En las últimas igualdades de las ecuaciones anteriores, k_{fi} y k_{mi} denotan a los coeficientes de adsorción y de reacción superficiales en el i -ésimo tamaño de superficies fijas o móviles. Bajo la suposición de mezclado perfecto, los valores de las concentraciones en las superficies $\mathcal{A}_{\beta\omega f}$ y $\mathcal{A}_{\beta\omega m}$ pueden suponerse iguales a la concentración promedio en el lago y la ecuación (3.7.26) toma la siguiente forma:

$$V_\beta \frac{dc_A^\eta}{dt} = \dot{Q}_e (c_{Ae} - c_A^\eta) - \dot{Q}_{pre} c_A^\eta - \langle j_{Aeva} \rangle_{eva} A_{eva} - (k_f A_{\beta\omega f} + k_m A_{\beta\omega m}) c_A^\eta. \quad (3.7.28)$$

En la ecuación anterior se usaron las siguientes definiciones

$$k_f = \frac{1}{A\beta\omega_f} \sum_{i=1}^{i=Nf} \int_{\mathcal{A}_{\beta\omega_{fi}}} k_{fi} dA; \quad k_m = \frac{1}{A\beta\omega_m} \sum_{i=1}^{i=Nm} \int_{\mathcal{A}_{\beta\omega_{mi}}} k_{mi} dA. \quad (3.7.29)$$

La ecuación (3.7.28) puede simplificarse más si se restringe el análisis a condiciones en las que sea razonable suponer que $\mathbf{v}_{pre} = \mathbf{w}_{pre}$, lo que anula el flujo volumétrico de precipitación. Bajo esta suposición y dividiendo ambos lados de la ecuación anterior entre el volumen del lago resulta la forma final del modelo:

$$\varepsilon_\beta \frac{dc_A^\eta}{dt} = t_R^{-1} (c_{Ae} - c_A^\eta) - \langle j_{Aeva} \rangle_{eva} a_{eva} - (k_f a_{\beta\omega_f} + k_m a_{\beta\omega_m}) c_A^\eta, \quad (3.7.30)$$

donde $\varepsilon_\beta = V_\beta/V$ es la fracción volumétrica ocupada por agua en el lago, mientras que el tiempo de residencia es $t_R = V/\dot{Q}_e$. Por último, las áreas interfaciales por unidad de volumen son $a_j = A_j/V$ donde $j = eva, \beta\omega_f$ y $\beta\omega_m$. Bajo estas condiciones, el primer término toma en cuenta las contribuciones de entrada y salida de la especie A por el subsuelo, el segundo término cuantifica las pérdidas por evaporación y el último término considera el consumo por los seres vivos.

Ejercicio 3.24 — Sobre la suposición de mezclado perfecto. Reconsidere el modelo desarrollado aquí pero no imponga la suposición de mezclado perfecto. En su lugar descomponga a la concentración en términos de c_A^η y sus desviaciones espaciales \tilde{c}_A . Proponga una metodología (teórica o experimental) para cuantificar las desviaciones. ■

Ejercicio 3.25 — Tasas de evaporación y de consumo. Como puede notarse el modelo dado en la ecuación (3.7.30) requiere del conocimiento de las tasas de evaporación y de consumo de la especie A. Proponga técnicas para cuantificar estas cantidades ya sea de manera teórica o experimental. ■

Ejercicio 3.26 — Transferencia del virus SARS-CoV-2. Considere un vagón del metro con Nc pasajeros que son portadores del virus SARS-CoV-2 y Ns pasajeros sanos. El vagón tiene encendidos los ventiladores y las ventanas también están abiertas. Suponiendo que el virus forma una solución diluida en el aire, desarrolle un modelo macroscópico que describa la transferencia de masa del virus en el vagón de las personas contagiadas hacia las personas sanas y superficies inertes. Describa cuidadosamente los pasos de sus desarrollos así como sus suposiciones. ■

3.8 Comentarios finales

En este capítulo se dedujeron las formas macroscópica y microscópica de los principios de conservación de masa total y de una especie química. En ambos casos se comenzó la deducción con una ecuación con palabras que representa a un principio fundamental en una región de integración arbitraria y después se tradujo esta ecuación al lenguaje matemático. Ciertamente, el principio de conservación con palabras se pudo haber formulado para otros tipos de regiones; sin embargo, fue conveniente hacerlo para una región arbitraria, ya que a partir de la ecuación resultante es sencillo deducir las ecuaciones correspondientes en las otras dos regiones de integración. De esta manera, se dedujeron tres versiones del mismo principio de conservación en forma macroscópica. Esto es conveniente ya que el tipo de región a utilizar en diversas aplicaciones depende del sistema bajo estudio, lo cual se ilustró con algunos ejemplos.

Posteriormente, se usaron los teoremas integrales (ver sección 2.6) para recuperar una versión convergente del principio de conservación a la escala macroscópica. Es a partir de esta versión convergente que se dedujo la forma microscópica de los principios de conservación de masa. Tanto las formas macroscópica como microscópica de los principios de conservación de masa total y por

especie tienen un término de acumulación y un término de transporte. En el caso del principio de conservación por especies se incluye el término adicional de generación o consumo por reacción química.

La forma macroscópica del principio de conservación de masa aplicada a una región material también se utilizó como punto de partida para la deducción de las condiciones de frontera para el flux interfacial de masa. En la deducción de esta condición de frontera se utilizaron funciones de exceso para cuantificar las diferencias entre las propiedades en las fronteras y en las fases homogéneas. En el caso del transporte de masa por especies se presentó a la ley de enfriamiento de Newton como una condición de frontera adicional que es necesaria en muchos casos de aplicación. De esta forma, se cuenta con condiciones de frontera tanto para la concentración como para el flux de masa entre fases. Estos elementos se aplicaron en el modelado macroscópico de un reactor continuo tipo tanque agitado y en el transporte de contaminantes en un lago. La forma de trabajo presentada en este capítulo para la deducción y análisis de modelos de transferencia de masa se utilizará en los dos capítulos siguientes para el estudio del transporte de cantidad de movimiento y de calor.



4. Transporte de cantidad de movimiento

4.1 Introducción

Este capítulo está dedicado a revisar algunos conceptos fundamentales del transporte de cantidad de movimiento en fluidos. Para ello, en la sección 4.2 se presentan las formas general y particulares del principio de conservación de cantidad de movimiento. La forma microscópica y la condición de salto entre fases de este principio de conservación se deducen en la sección 4.3. Subsecuentemente, las formas macroscópica y microscópica de la conservación de cantidad de movimiento se contrastan mediante el análisis de la fuerza de un fluido en un codo de sección transversal circular en la sección 4.4. Las últimas secciones de este capítulo están dedicadas a la deducción de las formas macroscópica y microscópica de la ecuación de energía mecánica, incluyendo un breve apartado sobre el cálculo del coeficiente de pérdidas por disipación viscosa.

4.2 Forma macroscópica de conservación de cantidad de movimiento

La cantidad de movimiento es el producto de la masa por la velocidad y puede ser de dos tipos: lineal o angular. El principio que rige su conservación es, en esencia, un balance de fuerzas y se deduce a partir de las dos *leyes de la mecánica del continuo* que se atribuyen a [Euler \(1750\)](#):

1. La razón de cambio en el tiempo de la cantidad de movimiento lineal de un cuerpo es igual a la fuerza que actúa sobre el cuerpo.
2. La razón de cambio en el tiempo de la cantidad de movimiento angular de un cuerpo es igual al torque que actúa sobre el cuerpo.

Dirigiendo por el momento la atención a la primera ley de Euler, si se entiende por *cuerpo* a una región material, entonces resulta más conveniente (para ganar generalidad) expresar a la primera ley de Euler para una región arbitraria en forma de la siguiente ecuación con palabras ([Gray y Gray, 2017](#)):

Primera ley de Euler

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{La razón de cambio en el tiempo de} \\ \text{la cantidad de movimiento lineal en} \\ \text{una región arbitraria} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Flujo neto de entrada de} \\ \text{cantidad de movimiento por} \\ \text{las fronteras de la región} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Fuerzas volumétricas que actúan} \\ \text{dentro de la región arbitraria} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Fuerzas superficiales que actúan en} \\ \text{las fronteras de la región arbitraria} \end{array} \right\}. \quad (4.2.1)$$

Al igual que como se hizo en el capítulo anterior, el siguiente paso es traducir cada término al lenguaje matemático. Siguiendo las mismas ideas usadas en el estudio de la transferencia de masa, el término de acumulación de la ecuación anterior puede escribirse como sigue:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{La razón de cambio en el tiempo de} \\ \text{la cantidad de movimiento lineal en} \\ \text{una región arbitraria} \end{array} \right\} = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \rho \mathbf{v} dV. \quad (4.2.2a)$$

Por su parte, el flujo neto de entrada de cantidad de movimiento por las fronteras de la región de integración está dado por la siguiente expresión

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Flujo neto de entrada de} \\ \text{cantidad de movimiento por} \\ \text{las fronteras de la región} \end{array} \right\} = - \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{w}) \rho \mathbf{v} dA. \quad (4.2.2b)$$

Al comparar las dos ecuaciones anteriores con las ecuaciones (3.2.3) y (3.2.4), puede notarse que el único cambio que se hizo fue reemplazar a ρ por $\rho \mathbf{v}$. Para avanzar con el proceso de traducir cada término de la ecuación (4.2.1) al lenguaje matemático, se dirige la atención ahora al término de fuerzas volumétricas y se define al vector \mathbf{b} para denotar las fuerzas volumétricas por unidad de masa al nivel de escala microscópica. Este tipo de fuerzas pueden representar por ejemplo aquellas debidas a la gravedad o a campos electromagnéticos que ejercen una influencia sobre todo el fluido (y no solo sobre sus fronteras). Con base en esta definición, se puede proponer la siguiente expresión

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Fuerzas volumétricas que actúan} \\ \text{dentro de la región arbitraria} \end{array} \right\} = \int_{\mathcal{V}_A} \rho \mathbf{b} dV, \quad (4.2.2c)$$

donde el hecho de que el lado derecho esté en una integral volumétrica tiene sentido debido al significado físico de este término. Siguiendo estas mismas ideas, el término de fuerzas superficiales debe representarse mediante una integral de superficie, cuyo integrando es el vector de esfuerzos \mathbf{t}_n . Este vector representa las fuerzas superficiales por unidad de área y su dirección está definida por el vector unitario normal a la superficie. Para tener mayor claridad respecto a esto último puede utilizarse el siguiente teorema:

Teorema 4.2.1 — Teorema fundamental de Cauchy. El vector de esfuerzos en cada punto de la superficie de una región de integración arbitraria que actúa sobre un fluido puede expresarse en términos del vector unitario normal a la superficie (\mathbf{n}) y el tensor total de esfuerzos (\mathbf{T}) de acuerdo con la siguiente identidad:

$$\mathbf{t}_n = \mathbf{n} \cdot \mathbf{T}. \quad (4.2.2d)$$

Tomando en cuenta lo anterior, el término de fuerzas superficiales en la ecuación (4.2.1) puede escribirse como sigue

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Fuerzas superficiales que actúan en} \\ \text{las fronteras de la región arbitraria} \end{array} \right\} = \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} dA. \quad (4.2.2e)$$

Sustituyendo las ecuaciones (4.2.2) en la ecuación (4.2.1), se obtiene la siguiente primera expresión para la forma macroscópica del principio de conservación de cantidad de movimiento:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \rho \mathbf{v} dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{w}) \rho \mathbf{v} dA = \int_{\mathcal{V}_A} \rho \mathbf{b} dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} dA. \quad (4.2.3)$$

En este punto, es importante mencionar que una consecuencia de la segunda ley de Euler es que el tensor de esfuerzos es un tensor simétrico (ver, por ejemplo el capítulo 4 de [Whitaker, 1992](#)):

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^T. \quad (4.2.4)$$

La ecuación anterior se conoce como la *segunda ecuación de Cauchy*. Más aún, para un fluido en movimiento, el tensor total de esfuerzos puede expresarse en términos de sus contribuciones perpendicular ($-p\mathbf{l}$) y tangencial ($\boldsymbol{\tau}$), sobre la superficie de un fluido. Esto es:

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{l} + \boldsymbol{\tau}. \quad (4.2.5)$$

Note que el primer término de la ecuación anterior es siempre simétrico, mientras que, para que se satisfaga la segunda ecuación de Cauchy, es necesario que el tensor de esfuerzos tangenciales (también conocidos como esfuerzos cortantes o viscosos) también sea simétrico. Sustituyendo las ecuaciones (4.2.2d) y (4.2.5) en la ecuación (4.2.3) resulta que

Forma macroscópica del principio de conservación de cantidad de movimiento

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \rho \mathbf{v} dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{w}) \rho \mathbf{v} dA = \int_{\mathcal{V}_A} \rho \mathbf{b} dV - \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} p dA + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} dA. \quad (4.2.6a)$$

Con esta ecuación pueden deducirse las expresiones correspondientes a las otras dos regiones de integración. En el caso de una región material la derivada temporal debe reemplazarse por una derivada material y la velocidad de desplazamiento de la superficie de la región corresponde a la velocidad del fluido. En consecuencia, el segundo término en el lado izquierdo de la ecuación anterior desaparece y la expresión resultante puede escribirse como sigue

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \rho \mathbf{v} dV = \int_{\mathcal{V}_M} \rho \mathbf{b} dV - \int_{\mathcal{A}_M} \mathbf{n} p dA + \int_{\mathcal{A}_M} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} dA. \quad (4.2.6b)$$

Esta expresión tiene sentido físico pues un cuerpo de fluido, aunque no intercambie masa con los alrededores, es influenciado por las fuerzas (volumétricas y superficiales) que se ejercen sobre de él y que provocan su movimiento. Para el caso de una región fija, la derivada temporal en la ecuación (4.2.6a) se convierte en una derivada parcial y la velocidad de desplazamiento de sus fronteras es nula por lo que dicha ecuación adquiere la forma siguiente

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}_f} \rho \mathbf{v} dV + \int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} dA = \int_{\mathcal{V}_f} \rho \mathbf{b} dV - \int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} p dA + \int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} dA. \quad (4.2.6c)$$

Note que estas expresiones no están limitadas a flujos compresibles o incompresibles y pueden usarse igualmente para estudiar fluidos newtonianos y no newtonianos. En los siguientes párrafos se deducirá la forma microscópica de este principio de conservación a partir de su contraparte macroscópica así como la condición de frontera entre fases.

Ejercicio 4.1 — Gases en glaciares. Muchos gases de efecto invernadero se encuentran capturados como burbujas en glaciares. Debido al cambio climático los glaciares se han ido derritiendo y liberando estos gases a la atmósfera. Elija la región de integración más conveniente para estudiar este fenómeno y explique las suposiciones que sean pertinentes adoptar. ■

Ejercicio 4.2 — Hidrostática. Demuestre que, bajo condiciones hidrostáticas, las diferentes versiones de la forma macroscópica del principio de conservación de cantidad de movimiento se reducen a la siguiente expresión

$$\mathbf{0} = \int_{\mathcal{V}} \rho \mathbf{b} dV - \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} p dA. \quad (4.2.7)$$

4.3 Forma microscópica de conservación de cantidad de movimiento

4.3.1 Ecuación de Navier-Stokes

El objetivo de esta sección es deducir la forma microscópica del principio de conservación de cantidad de movimiento. Para ello, se aplica el teorema general del transporte (ecuación 2.6.8) a la ecuación (4.2.6a) para obtener

$$\int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} dV + \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} dA = \int_{\mathcal{V}} \rho \mathbf{b} dV - \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} p dA + \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} dA. \quad (4.3.1)$$

En la ecuación anterior se prescindió del uso del subíndice A , ya que este mismo resultado se obtiene al aplicar el teorema del transporte de Reynolds (ecuación 2.6.9) a la ecuación (4.2.6b). Además, esta misma expresión resulta de aplicar la relación integral dada en la ecuación (2.6.7) a la ecuación (4.2.6c). Más aún, con la intención de agrupar todos los términos de la ecuación (4.3.1) en una sola integral volumétrica, se aplica el teorema de la divergencia (ver ecuaciones 2.6.1 y 2.6.5) a los términos que contienen integrales superficiales para obtener la siguiente expresión

$$\int_{\mathcal{V}} \left[\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) - \rho \mathbf{b} + \nabla p - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \right] dV = \mathbf{0}. \quad (4.3.2)$$

Note que, al considerar la forma microscópica de la ecuación de conservación de masa (ecuación 3.4.4) los dos primeros términos en el integrando de la ecuación anterior pueden escribirse como

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = \mathbf{v} \underbrace{\left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \right)}_{=0} + \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}. \quad (4.3.3)$$

Tomando en cuenta esta identidad, junto con el hecho de que la integral en la ecuación (4.3.2) es cero debido a que el integrando es cero, se deduce la siguiente expresión válida al nivel de escala microscópico

Ecuación de movimiento de Cauchy

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p + \rho \mathbf{b} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}. \quad (4.3.4)$$

Esta expresión, al igual que las ecuaciones (4.2.6) no está limitada a un tipo particular de condición de flujo. Sin embargo, la ecuación (4.3.4) requiere de dos relaciones de cerradura, la primera es sobre las fuerzas volumétricas y la segunda es sobre el esfuerzo cortante. Para atender a la primera, puede restringirse el análisis a situaciones en las que la única fuerza volumétrica sea la gravedad y por tanto $\mathbf{b} = \mathbf{g}$, ya que esta es la fuerza volumétrica más comúnmente encontrada en el flujo de fluidos en aplicaciones de ingeniería. Para la segunda, puede tomarse en cuenta que, cuando el flujo es newtoniano e incompresible, el esfuerzo cortante se relaciona con el gradiente de velocidad mediante la ley de la viscosidad de Newton:

$$\boldsymbol{\tau} = \mu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T). \quad (4.3.5)$$

Ahora bien, aplicando el operador de divergencia en ambos lados de la ecuación anterior se deduce que

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = \mu [\nabla^2 \mathbf{v} + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v})]. \quad (4.3.6)$$

Ya que se ha supuesto flujo incompresible (es decir, que la densidad del fluido es constante), el último término de la ecuación anterior es cero ya que la velocidad es solenoidal. Sustituyendo la ecuación anterior en la ecuación (4.3.4) se obtiene la ecuación de Navier (1822)-Stokes (1880):

Ecuación de Navier-Stokes

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \mu \nabla^2 \mathbf{v}. \quad (4.3.7)$$

El primer término del lado izquierdo de esta ecuación representa la acumulación de cantidad de movimiento, el segundo término representa la contribución de los esfuerzos inerciales, o bien el transporte por convección. El primer y último término en el lado derecho están asociados con los esfuerzos superficiales perpendiculares y tangenciales, respectivamente, que experimenta el fluido. Por último, el término $\rho \mathbf{g}$ representa la influencia de la fuerza volumétrica de la gravedad sobre el fluido. Como puede notarse, el significado físico de estos términos es consistente con los términos que constituyen la forma macroscópica del principio de conservación de cantidad de movimiento dada en la ecuación (4.2.6a).

Como puede notarse, el uso de la ecuación de Navier-Stokes está limitado a flujo incompresible y newtoniano. En el ejercicio 4.3 se desarrolla una expresión que no tenga la primera limitación. Respecto a la segunda limitación, la ley de Newton de la viscosidad supone que existe una relación lineal e instantánea entre el esfuerzo cortante y la deformación del fluido. Aunque muchos fluidos satisfacen estas condiciones, existen muchos otros que no lo hacen. En este tipo de casos se puede usar una versión más general de la ley de Newton como la siguiente

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu(\Gamma)\mathbf{D}, \quad (4.3.8)$$

donde $\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)$ es el tensor de deformación y el escalar Γ se define como

$$\Gamma = \sqrt{2\mathbf{D} : \mathbf{D}}. \quad (4.3.9)$$

Por ejemplo, un modelo sencillo es la de ley de potencias de Ostwald-de Waele

$$\mu(\Gamma) = m\Gamma^{n-1}, \quad (4.3.10a)$$

donde las constantes m y n determinan la naturaleza no newtoniana del fluido. Otra propuesta es el modelo de Carreau (1972):

$$\mu(\Gamma) = \mu_\infty + (\mu_0 - \mu_\infty) [1 + (\lambda\Gamma)^2]^{(N-1)/2}. \quad (4.3.10b)$$

En esta expresión, μ_0 , μ_∞ , λ y N son los coeficientes de viscosidad asociados a tasas de corte cero e infinito, así como el tiempo de relajación del fluido y el grado de adelgazamiento del fluido debido al esfuerzo cortante.

Un modelo alternativo que no supone una relación instantánea entre el esfuerzo y la deformación lo propuso Maxwell

$$t_m \left(\frac{D\boldsymbol{\tau}}{Dt} - [\boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \cdot \boldsymbol{\tau}] \right) = \mu (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T) - \boldsymbol{\tau}, \quad (4.3.10c)$$

donde t_m es el tiempo de relajación del fluido. Este tipo de modelos se han usado para describir por ejemplo el flujo sanguíneo (Truskey y col., 2004). Note que cuando $t_m = 0$, se recupera la ley de Newton de la viscosidad. Este resultado también se recupera, al tomar $m = \mu$ y $n = 1$ en la ecuación (4.3.10a) y al fijar $\mu_\infty = 0$ y $N = 1$ en el modelo de Carreau.

Al lector interesado en la historia detrás de la deducción de esta ecuación, se le recomienda revisar el trabajo de Darrigol (2002). De acuerdo con este autor, cuando la ecuación de Navier-Stokes se formuló no fue muy popular en la comunidad científica ya que, hasta la fecha, no es posible resolverla de forma exacta analíticamente. Fue en el siglo XX cuando se propusieron algunas soluciones aproximadas en capas límite y, más adelante, con el desarrollo de los métodos numéricos y capacidades computacionales que fue posible resolver esta ecuación numéricamente. Sin embargo, a pesar de las capacidades de cómputo actuales, la solución de esta ecuación bajo condiciones de flujo turbulento no es un tema del todo resuelto.

Ejercicio 4.3 — Ecuación de movimiento para flujo compresible. La versión de la ley de Newton de la viscosidad para flujo compresible es la siguiente

$$\boldsymbol{\tau} = \mu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) + \lambda \left(\kappa - \frac{2}{3} \mu \right) (\nabla \cdot \mathbf{v}), \quad (4.3.11)$$

donde μ es el coeficiente de viscosidad dinámica, κ es la viscosidad de dilatación (o viscosidad de volumétrica) y ambos coeficientes son escalares para fluidos de estructura isótropa y son tensores de cuarto orden cuando este no es el caso (Batchelor, 2000) cuyas unidades son Pa·s. Sustituya esta expresión en la ecuación de movimiento de Cauchy y desarrolle la forma cerrada de la ecuación de cantidad de movimiento correspondiente. Muestre que dicha expresión se reduce a la ecuación de Navier-Stokes para el caso de flujo incompresible. ■

4.3.2 Versión adimensional de la ecuación de Navier-Stokes

Como se explicó en la sección 3.6.2, el análisis de los términos presentes en las ecuaciones a la escala microscópica se facilita al hacer reformulaciones en términos de variables y parámetros adimensionales. En el caso de la ecuación de Navier-Stokes existen al menos dos maneras de formular el modelo en forma adimensional. Como primera opción, se proponen las siguientes definiciones

$$\mathbf{v}^* = \frac{\mathbf{v}}{v_{ref}}; \quad p^* = \frac{p}{p_{ref}}; \quad \nabla^* = \ell_{ref} \nabla; \quad t^* = \frac{t \mu}{\rho \ell_{ref}^2}; \quad Re = \frac{\rho v_{ref} \ell_{ref}}{\mu}. \quad (4.3.12)$$

En la última igualdad se utilizó la definición del número de Reynolds el cual relaciona las fuerzas inerciales con las viscosas como se explicó en la sección 1.7.2. Sustituyendo estas definiciones en la ecuación (4.3.7) da como resultado la siguiente versión adimensional de la ecuación de Navier-Stokes

$$\frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial t^*} + Re \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* = -\frac{\ell_{ref} p_{ref}}{\mu v_{ref}} \nabla^* p^* + \frac{Re g \ell_{ref}}{v_{ref}^2} \mathbf{e}_g + \nabla^{*2} \mathbf{v}^*, \quad (4.3.13)$$

donde $\mathbf{e}_g = \mathbf{g}/g$ es un vector unitario en la dirección del vector de gravedad. Para simplificar esta ecuación puede definirse a la velocidad de referencia como $v_{ref} = p_{ref} \ell_{ref} / \mu$ y al número de Froude como

$$Fr^2 = \frac{v_{ref}^2}{g \ell_{ref}}. \quad (4.3.14)$$

Note que este número relaciona las fuerzas inerciales con las fuerzas gravitacionales. Con estos elementos disponibles, la ecuación (4.3.13) puede escribirse como sigue

$$\frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial t^*} + Re \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* = -\nabla^* p^* + \frac{Re}{Fr^2} \mathbf{e}_g + \nabla^{*2} \mathbf{v}^*. \quad (4.3.15)$$

Antes de discutir las ventajas y casos límite que permite identificar esta formulación, es conveniente deducir la otra forma adimensional de la ecuación (4.3.7). Para ello, note que en la ecuación (4.3.15) el término asociado con los esfuerzos viscosos quedó multiplicado por la unidad. La otra alternativa consiste en adimensionar la ecuación generando un uno frente al término de esfuerzos inerciales. Para conseguir este objetivo, se propone ahora que el tiempo adimensional se defina como sigue

$$t^* = \frac{t v_{ref}}{\ell_{ref}}, \quad (4.3.16)$$

y que la velocidad de referencia sea ahora $v_{ref} = \sqrt{p_{ref} / \rho}$. Tomando esto en cuenta, la otra forma adimensional de la ecuación de Navier-Stokes es

$$\frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial t^*} + \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* = -\nabla^* p^* + \frac{\mathbf{e}_g}{Fr^2} + \frac{1}{Re} \nabla^{*2} \mathbf{v}^*. \quad (4.3.17)$$

Como puede notarse, más que una cuestión estética, la diferencia entre las ecuaciones (4.3.15) y (4.3.17) es la definición del tiempo adimensional y de la velocidad de referencia. Para llegar a la ecuación (4.3.15) se tomó como tiempo de referencia el tiempo característico del transporte de esfuerzos viscosos ($\ell_{ref}^2 \rho / \mu$). Esto sugiere que la ecuación (4.3.15) debe usarse para describir flujos caracterizados por esfuerzos viscosos. Esto es, para condiciones de flujo reptante y laminar. En contraste, para llegar a la ecuación (4.3.17), se consideró como tiempo de referencia el tiempo característico de los esfuerzos inerciales (ℓ_{ref} / v_{ref}), lo que la hace más apropiada para estudiar flujos en transición y turbulentos.

Ejercicio 4.4 — Ecuaciones gobernantes en diferentes condiciones de flujo . Utilice las ecuaciones (4.3.15) y (4.3.17) para deducir las ecuaciones adimensionales correspondientes a condiciones de flujo reptante ($Re \rightarrow 0$), laminar, transición, turbulento y potencial ($Re \rightarrow \infty$).

4.3.3 Condición de frontera entre fases

Al igual que en el capítulo anterior, es conveniente completar al modelo microscópico con la deducción de la condición de frontera entre fases. Para ello, reconsidere el sistema de la frontera entre dos fases ilustrado en la figura 3.4. Se pueden comenzar los desarrollos escribiendo la forma macroscópica del principio de conservación de cantidad de movimiento dado en la ecuación (4.2.6b) para la región material de integración ilustrada en la figura 3.4 como sigue

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \rho \mathbf{v} dV = \int_{\mathcal{V}_M} \rho \mathbf{b} dV + \int_{\mathcal{A}_M} \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} dA, \quad (4.3.18)$$

donde la región de integración contiene porciones de las dos fases fluidas (fases β y γ). Para expresar a los términos relacionados con la acumulación de cantidad de movimiento y las fuerzas (volumétricas y superficiales) en términos de las propiedades en cada fase, se recurre a las siguientes descomposiciones que hacen uso de propiedades de exceso

$$\int_{\mathcal{V}_M} \rho \mathbf{v} dV = \int_{\mathcal{V}_\beta} \rho_\beta \mathbf{v}_\beta dV + \int_{\mathcal{V}_\gamma} \rho_\gamma \mathbf{v}_\gamma dV + \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \rho_s \mathbf{v}^\sigma dA, \quad (4.3.19a)$$

$$\int_{\mathcal{V}_M} \rho \mathbf{b} dV = \int_{\mathcal{V}_\beta} \rho_\beta \mathbf{b}_\beta dV + \int_{\mathcal{V}_\gamma} \rho_\gamma \mathbf{b}_\gamma dV + \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \rho_s \mathbf{b}_s dA, \quad (4.3.19b)$$

$$\int_{\mathcal{A}_M} \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} dA = \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n}_\beta \cdot \mathbf{T}_\beta dA + \int_{\mathcal{A}_\gamma} \mathbf{n}_\gamma \cdot \mathbf{T}_\gamma dA + \oint_{\mathcal{C}} \mathbf{n}_s \cdot \mathbf{T}_s d\sigma. \quad (4.3.19c)$$

En el último término de la ecuación (4.3.19c), se utilizó \mathcal{C} para denotar a la curva que rodea a la interfase $\mathcal{A}_{\beta\gamma}$ y \mathbf{n}_s representa el vector normal a dicha curva. Para expresar a este término como una integral de superficie se utiliza el *teorema de la divergencia superficial* (ver ecuación A.6.3.7 en [Slattery y col., 2006](#))

$$\oint_{\mathcal{C}} \mathbf{n}_s \cdot \mathbf{T}_s d\sigma = \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \nabla_s \cdot \mathbf{T}_s dA. \quad (4.3.20)$$

De esta forma, la ecuación (4.3.18) puede escribirse como sigue

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_\beta} \rho_\beta \mathbf{v}_\beta dV + \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_\gamma} \rho_\gamma \mathbf{v}_\gamma dV + \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \rho_s \mathbf{v}^\sigma dA &= \int_{\mathcal{V}_\beta} \rho_\beta \mathbf{b}_\beta dV + \int_{\mathcal{V}_\gamma} \rho_\gamma \mathbf{b}_\gamma dV \\ &+ \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \rho_s \mathbf{b}_s dA + \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n}_\beta \cdot \mathbf{T}_\beta dA + \int_{\mathcal{A}_\gamma} \mathbf{n}_\gamma \cdot \mathbf{T}_\gamma dA + \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \nabla_s \cdot \mathbf{T}_s dA. \end{aligned} \quad (4.3.21)$$

La ecuación (4.3.21) es exacta ya que no involucra suposiciones o aproximaciones que limiten su aplicabilidad. Ahora bien, para el desarrollo de la condición de salto es necesario considerar las

siguientes formas macroscópicas del principio de conservación de cantidad de movimiento que aplican en cada fase, las cuales son expresiones aproximadas y pueden escribirse como sigue:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_\beta} \rho_\beta \mathbf{v}_\beta dV = \int_{\mathcal{V}_\beta} \rho_\beta \mathbf{b}_\beta dV + \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n}_\beta \cdot \mathbf{T}_\beta dA + \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \mathbf{T}_\beta dA, \quad (4.3.22a)$$

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_\gamma} \rho_\gamma \mathbf{v}_\gamma dV = \int_{\mathcal{V}_\gamma} \rho_\gamma \mathbf{b}_\gamma dV + \int_{\mathcal{A}_\gamma} \mathbf{n}_\gamma \cdot \mathbf{T}_\gamma dA + \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\gamma\beta} \cdot \mathbf{T}_\gamma dA. \quad (4.3.22b)$$

Sumando las dos ecuaciones anteriores y restando la ecuación resultante a la ecuación (4.3.21), se obtiene la siguiente expresión

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \rho_s \mathbf{v}^\sigma dA = \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} [\rho_s \mathbf{b}_s + \nabla_s \cdot \mathbf{T}_s - \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot (\mathbf{T}_\beta - \mathbf{T}_\gamma)] dA. \quad (4.3.23)$$

Aplicando ahora el teorema del transporte superficial (ver ecuación 3.4.16), la ecuación anterior puede expresarse como sigue:

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \left[\frac{D_s \rho_s \mathbf{v}^\sigma}{Dt} + \rho_s \mathbf{v}^\sigma \nabla_s \cdot \mathbf{v}^\sigma - [\rho_\beta \mathbf{v}_\beta (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}^\sigma) - \rho_\gamma \mathbf{v}_\gamma (\mathbf{v}_\gamma - \mathbf{v}^\sigma)] \cdot \mathbf{n}_{\beta\gamma} \right] dA \\ & = \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} [\rho_s \mathbf{b}_s + \nabla_s \cdot \mathbf{T}_s - \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot (\mathbf{T}_\beta - \mathbf{T}_\gamma)] dA. \end{aligned} \quad (4.3.24)$$

A partir de esta ecuación y usando la definición de la derivada material superficial dada en la ecuación (3.4.19) se puede deducir la condición de salto de cantidad de movimiento entre dos fluidos como sigue:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho_s \mathbf{v}^\sigma}{\partial t} + \nabla_s \rho_s \mathbf{v}^\sigma \cdot \mathbf{v}_s + \rho_s \mathbf{v}^\sigma \nabla_s \cdot \mathbf{v}^\sigma = \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot [\rho_\beta (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}^\sigma) \mathbf{v}_\beta - \rho_\gamma (\mathbf{v}_\gamma - \mathbf{v}^\sigma) \mathbf{v}_\gamma] \\ & + \rho_s \mathbf{b}_s + \nabla_s \cdot \mathbf{T}_s - \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot (\mathbf{T}_\beta - \mathbf{T}_\gamma), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}. \end{aligned} \quad (4.3.25)$$

Note que se usó la relación dada en la ecuación (3.4.22) que permite suponer que $\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{v}_s$. En este momento es conveniente multiplicar ambos lados de la ecuación (3.4.21) por \mathbf{v}^σ para obtener

$$\mathbf{v}^\sigma \frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \mathbf{v}^\sigma \nabla_s \rho_s \cdot \mathbf{v}_s + \mathbf{v}^\sigma \rho_s \nabla_s \cdot \mathbf{v}^\sigma = \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot [\rho_\beta (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}^\sigma) \mathbf{v}^\sigma - \rho_\gamma (\mathbf{v}_\gamma - \mathbf{v}^\sigma) \mathbf{v}^\sigma], \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}. \quad (4.3.26)$$

Restando esta ecuación a la ecuación (4.3.25) resulta que

$$\begin{aligned} & \rho_s \frac{\partial \mathbf{v}^\sigma}{\partial t} + \rho_s \nabla_s \mathbf{v}^\sigma \cdot \mathbf{v}_s = \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot [\rho_\beta (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}^\sigma) (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}^\sigma) - \rho_\gamma (\mathbf{v}_\gamma - \mathbf{v}^\sigma) (\mathbf{v}_\gamma - \mathbf{v}^\sigma)] \\ & + \rho_s \mathbf{b}_s + \nabla_s \cdot \mathbf{T}_s - \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot (\mathbf{T}_\beta - \mathbf{T}_\gamma), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}. \end{aligned} \quad (4.3.27)$$

Por último, el tensor de esfuerzos superficiales puede expresarse, según el modelo de fluido superficial de Boussinesq, como sigue (ver sección 4.9.5 en [Slattery y col., 2006](#))

$$\mathbf{T}_s = [\gamma + (\kappa_s - \mu_s)(\nabla_s \cdot \mathbf{v}^\sigma)] \mathbf{P} + \mu_s (\nabla_s \mathbf{v}^\sigma + \nabla_s \mathbf{v}^{\sigma T}). \quad (4.3.28)$$

En donde \mathbf{P} es el tensor de proyección tangencial definido en la ecuación (3.4.18), γ es la tensión superficial, mientras que κ_s y μ_s son las viscosidades superficiales de dilatación y de corte, respectivamente. Sustituyendo esta expresión en la ecuación (4.3.27) resulta la siguiente forma de la condición de salto:

Condición de salto de cantidad de movimiento

$$\underbrace{\rho_s \frac{\partial \mathbf{v}^\sigma}{\partial t}}_{\text{acumulación superficial}} + \underbrace{\rho_s \nabla_s \mathbf{v}^\sigma \cdot \mathbf{v}_s}_{\text{transporte superficial}} = \underbrace{\mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot [\rho_\beta (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}^\sigma)(\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}^\sigma) - \rho_\gamma (\mathbf{v}_\gamma - \mathbf{v}^\sigma)(\mathbf{v}_\gamma - \mathbf{v}^\sigma)]}_{\text{flujo de momento desde las fases hacia la superficie divisoria}}$$

$$+ \underbrace{\rho_s \mathbf{b}_s}_{\text{esfuerzos volumétricos superficiales}} + \underbrace{\nabla_s \gamma + 2H\gamma \mathbf{n}_{\beta\gamma} + \nabla_s \cdot \boldsymbol{\tau}_s}_{\text{contribución por esfuerzos superficiales}} - \underbrace{\mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot (\mathbf{T}_\beta - \mathbf{T}_\gamma)}_{\text{esfuerzos superficiales interfaciales hacia la superficie divisoria}}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}.$$

(4.3.29)

En esta ecuación, se utilizó la siguiente definición de los esfuerzos cortantes superficiales

$$\boldsymbol{\tau}_s = (\kappa_s - \mu_s)(\nabla_s \cdot \mathbf{v}^\sigma) \mathbf{P} + \mu_s(\nabla_s \mathbf{v}^\sigma + \nabla_s \mathbf{v}^{\sigma T}). \quad (4.3.30)$$

La ecuación (4.3.29) puede simplificarse para casos en los que no hay transporte de masa entre las fases y los esfuerzos cortantes superficiales sean despreciables respecto a las contribuciones por tensión superficial en la siguiente expresión

$$\nabla_s \gamma + 2H\gamma \mathbf{n}_{\beta\gamma} = \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot (\mathbf{T}_\beta - \mathbf{T}_\gamma), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}, \quad (4.3.31)$$

Claramente, la ecuación anterior solo puede reducirse a la continuidad de los esfuerzos superficiales cuando no hay curvatura de la interfase y cuando las contribuciones por la tensión superficial son despreciables. Sin embargo, es posible deducir otras expresiones como la ecuación de Young-Laplace como se discute en el ejercicio 4.5.

Ejercicio 4.5 — Ecuación de Young-Laplace. Considere ahora la ecuación (4.3.31) y extraiga su componente normal al aplicar el producto punto en ambos lados con el vector $\mathbf{n}_{\beta\gamma}$ para obtener

$$2H\gamma = p_\gamma - p_\beta + \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot (\boldsymbol{\tau}_\beta - \boldsymbol{\tau}_\gamma) \cdot \mathbf{n}_{\beta\gamma}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}. \quad (4.3.32)$$

Utilice la ley de Newton de la viscosidad y compare el orden de magnitud de la contribución viscosa con la del término de curvatura y deduzca una restricción de escala que permita reducir a la ecuación anterior a la ecuación de Young-Laplace:

$$2H\gamma = p_\gamma - p_\beta, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}. \quad (4.3.33)$$

■

4.4 Ejemplo de aplicación: Fuerza de un fluido en un codo

En las secciones anteriores se dedujeron las versiones microscópica y macroscópica del principio de conservación de cantidad de movimiento. El modelo macroscópico es una ecuación diferencial ordinaria que en estado estacionario se reduce a una expresión algebraica, mientras que el modelo microscópico es una ecuación diferencial parcial que solo puede, en general, resolverse numéricamente. El propósito de esta sección es comparar las predicciones que aportan ambos enfoques de modelado en el estudio del flujo de un fluido a través de un codo. En principio, tal comparación es innecesaria pues ambos modelos contienen la misma cantidad de información. Por ello, se adoptarán algunas suposiciones en el modelo macroscópico que le hagan perder su exactitud pero que permitan predecir la fuerza que ejerce el fluido sobre las paredes del codo. Posteriormente, la pertinencia de las suposiciones hechas se ponderará al hacer comparaciones con la solución numérica de las ecuaciones gobernantes a escala microscópica.

Considere un codo de sección transversal circular como el mostrado en la figura 4.1 por donde se hace pasar un fluido newtoniano e incompresible en estado estacionario. Suponiendo que el material que compone al codo es rígido, es razonable utilizar una región de integración fija para llevar a cabo el análisis al nivel de escala macroscópico. De acuerdo con la ecuación (3.2.8), la

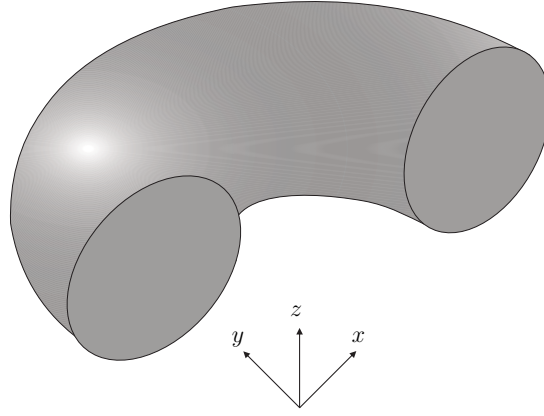


Figura 4.1: Esquema de un codo de 180°.

forma macroscópica del principio de conservación de masa para esta situación se simplifica a

$$\int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dA = 0. \quad (4.4.1)$$

En la ecuación anterior, \mathcal{A}_f puede descomponerse en las superficies de entrada (\mathcal{A}_e), salida (\mathcal{A}_s) y paredes internas (\mathcal{A}_w , donde $\mathbf{v} = \mathbf{0}$). A lo largo de estos desarrollos se supone que la velocidad del fluido va en la misma dirección y en el sentido contrario que el vector normal en la superficie de entrada y que en la superficie de salida ambos vectores van en la misma dirección y sentido. Bajo estas suposiciones, es razonable proponer que

$$\text{en } \mathcal{A}_e, \quad \mathbf{n}_e \cdot \mathbf{v}_e = \mathbf{n}_e \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{v}_e} \|\mathbf{v}_e\| = -v_e, \quad (4.4.2a)$$

$$\text{en } \mathcal{A}_s, \quad \mathbf{n}_s \cdot \mathbf{v}_s = \mathbf{n}_s \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{v}_s} \|\mathbf{v}_s\| = v_s. \quad (4.4.2b)$$

En las ecuaciones anteriores se usó $v_\alpha = \|\mathbf{v}_\alpha\|$ ($\alpha = e, s$) para simplificar la notación.

Tomando en cuenta esta descomposición, se deduce que

$$-\int_{\mathcal{A}_e} v_e dA + \int_{\mathcal{A}_s} v_s dA = 0. \quad (4.4.3)$$

Ya que la sección transversal es constante, es conveniente definir el siguiente operador de promedio

$$\langle \psi \rangle = \frac{1}{A_e} \int_{\mathcal{A}_e} \psi dA = \frac{1}{A_s} \int_{\mathcal{A}_s} \psi dA = \frac{1}{A} \int_{\mathcal{A}} \psi dA. \quad (4.4.4)$$

Usando esta definición, la ecuación (4.4.3) puede escribirse como sigue

$$\langle v_e \rangle = \langle v_s \rangle. \quad (4.4.5)$$

Dirigiendo ahora la atención a la forma macroscópica del principio de conservación de cantidad de movimiento en la forma dada en la ecuación (4.2.6c), bajo la suposición de flujo incompresible en estado estacionario, se obtiene la siguiente expresión

$$\int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} dA = \int_{\mathcal{V}_f} \rho \mathbf{g} dV - \int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} p_m dA + \int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} dA. \quad (4.4.6)$$

En la ecuación anterior $p_m = p + p_s$, siendo p_s la presión en la superficie de salida del codo, la cual se supone constante (ver ejercicio 4.6). Como se muestra en el ejercicio 4.7, para condiciones en

las que el número de Froude es mucho mayor que uno, la contribución debida a la gravedad puede despreciarse respecto a las contribuciones inerciales y la ecuación anterior se reduce a

$$\int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} \cdot (p_m \mathbf{l} + \rho \mathbf{v} \mathbf{v} - \boldsymbol{\tau}) dA = \mathbf{0}. \quad (4.4.7)$$

Descomponiendo a \mathcal{A}_f en las superficies de entrada, salida y paredes internas, la ecuación anterior puede reescribirse como sigue

$$\int_{\mathcal{A}_w} \mathbf{n}_w \cdot (p_w \mathbf{l} - \boldsymbol{\tau}_w) dA + \int_{\mathcal{A}_e} \mathbf{n}_e \cdot (p_e \mathbf{l} + \rho \mathbf{v}_e \mathbf{v}_e - \boldsymbol{\tau}_e) dA + \int_{\mathcal{A}_s} \mathbf{n}_s \cdot (\rho \mathbf{v}_s \mathbf{v}_s - \boldsymbol{\tau}_s) dA = \mathbf{0}. \quad (4.4.8)$$

Note que en el primer término del lado izquierdo se tomó en cuenta que la velocidad del fluido es cero en la superficie interna del tubo y en el último término no aparece la contribución de la presión ya que $p_m = 0$ en \mathcal{A}_s . Para simplificar el modelo se impone la suposición de que en las superficies de entrada y salida el flujo es tal que los esfuerzos inerciales son mucho mayores que las contribuciones por esfuerzos viscosos. Lo anterior se traduce en suponer que los valores del número de Reynolds en estas superficies son mucho mayores que la unidad. Con base en esto, se justifican las siguientes suposiciones

$$\boldsymbol{\tau}_e \ll \rho \mathbf{v}_e \mathbf{v}_e; \quad \boldsymbol{\tau}_s \ll \rho \mathbf{v}_s \mathbf{v}_s, \quad (4.4.9)$$

y la ecuación (4.4.8) se reduce a

$$\int_{\mathcal{A}_w} \mathbf{n}_w \cdot (p_w \mathbf{l} - \boldsymbol{\tau}_w) dA + \int_{\mathcal{A}_e} \mathbf{n}_e \cdot (p_e \mathbf{l} + \rho \mathbf{v}_e \mathbf{v}_e) dA + \int_{\mathcal{A}_s} \mathbf{n}_s \cdot (\rho \mathbf{v}_s \mathbf{v}_s) dA = \mathbf{0}. \quad (4.4.10)$$

Tomando en cuenta los resultados dados en las ecuaciones (4.4.2) así como la suposición de que los vectores unitarios \mathbf{e}_{v_α} ($\alpha = e, s$) son constantes, la ecuación anterior puede escribirse como

$$\int_{\mathcal{A}_w} \mathbf{n}_w \cdot (p_w \mathbf{l} - \boldsymbol{\tau}_w) dA = \mathbf{e}_{v_e} \int_{\mathcal{A}_e} (p_e + \rho v_e^2) dA - \mathbf{e}_{v_s} \int_{\mathcal{A}_s} \rho v_s^2 dA. \quad (4.4.11)$$

El término del lado izquierdo representa el vector de fuerza que ejerce el fluido sobre las paredes del codo y se denota como \mathbf{f} . Esto es,

$$\mathbf{f} = \int_{\mathcal{A}_w} \mathbf{n}_w \cdot (p_w \mathbf{l} - \boldsymbol{\tau}_w) dA. \quad (4.4.12)$$

Usando el operador de promediado definido en la ecuación (4.4.4) en la ecuación (4.4.11) se obtiene la siguiente expresión

$$\mathbf{f} = A [\mathbf{e}_{v_e} (\langle p_e \rangle + \rho \langle v_e^2 \rangle) - \mathbf{e}_{v_s} \rho \langle v_s^2 \rangle]. \quad (4.4.13)$$

Este resultado puede simplificarse aún más con suposiciones adicionales como se explora en el ejercicio 4.8. Evidentemente este es un modelo aproximado debido a las suposiciones que se impusieron en su deducción. Para evaluar su validez, se llevará a cabo la solución numérica del problema al nivel de escala microscópico. Bajo la suposición de flujo newtoniano e incompresible en estado estacionario, las formas microscópicas de los principios de conservación de masa y cantidad de movimiento se escriben como sigue

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (4.4.14a)$$

$$\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p_m + \mu \nabla^2 \mathbf{v}. \quad (4.4.14b)$$

Note que en esta última ecuación, se consideró la suposición de que el número de Froude debe ser mucho mayor que la unidad, lo que permite despreciar la contribución de la fuerza de gravedad

respecto a las fuerzas inerciales. Más aún, en la superficie de entrada se supone conocido el flujo másico, (\dot{m}); esto es:

$$\text{en } \mathcal{A}_e, \quad - \int_{\mathcal{A}_e} \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v} \, dA = \dot{m}. \quad (4.4.14c)$$

Por supuesto, el flujo másico es constante a lo largo del sistema, lo cual es consistente con la forma macroscópica del principio de conservación de masa. Mientras que en la superficie de salida $p_m = 0$ y por tanto

$$\text{en } \mathcal{A}_s, \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} = -\mathbf{n} p_m + \mu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) = \mathbf{0}. \quad (4.4.14d)$$

Por último, la velocidad del fluido es cero en la superficie interna del codo debido a la condición de no deslizamiento:

$$\text{en } \mathcal{A}_w, \quad \mathbf{v} = \mathbf{0}. \quad (4.4.14e)$$

Con la solución numérica de este problema se pueden calcular las formas exacta (ecuación 4.4.12) y aproximada (ecuación 4.4.13) del vector de fuerzas. A continuación se listan los pasos para llevar a cabo la solución numérica del problema dado en las ecuaciones (4.4.14) mediante Comsol Multiphysics.

Solución numérica del problema de flujo en un codo.

1. Haga click en *Model Wizard* y elija 3D en el menú siguiente.
2. Agregue a la física el módulo de *Laminar Flow*, elija un estudio en estado estacionario y por último presione el botón *Done*.
3. En el apartado de *Parameters* defina al ángulo del codo como alfa y asigne un valor de 180[deg]. Además, defina el flujo másico de entrada como entrada y en *Expression* escriba 0.1 [kg/min].
4. Haga click derecho en *Geometry 1* y seleccione *More Primitives/Torus*. Defina al radio mayor como 10 cm y al radio menor como 5 cm. Por último, en *Revolution angle* escriba alfa.
5. Haga click derecho en *Materials* y elija *Add Material from Library*, en el menú que se despliega elija *Built in/Water, liquid*. Haga click derecho en este material y elija *Add to Component 1*. Con esto, el programa adquiere los valores de la temperatura y densidad del agua a 20 °C.
6. Haga click derecho en *Laminar Flow* y seleccione *Inlet*. En el menú de *Boundary condition*, seleccione *Mass flow* y en el valor de *Normal mass flow rate* escriba entrada.
7. Haga click derecho en *Laminar Flow* y seleccione *Outlet*. No es necesario hacer cambio alguno ya que el valor por default es que el esfuerzo es cero.
8. En *Mesh 1* seleccione *Fine* y presione el botón *Build All*.
9. Haga click derecho en *Study 1* y elija *Parametric Sweep*. En *Parameter Name* presione el signo de + y automáticamente aparecerá alfa. Elija entrada y en la columna siguiente presiones el botón de *Range*, en *entry method* elija *Logarithmic* y file el inicio en 1e-3, el fin en 1e-1 y asigne diez pasos por década. Asegúrese de que las unidades sean kg/min.
10. Asegúrese de usar un resolovedor directo y presione el botón *Compute*.
11. Una vez que hayan concluido las simulaciones, haga click derecho en *Derived values* y seleccione *Surface Integration* y seleccione las fronteras 2-9 y en *Expression* escriba lo siguiente para calcular a las tres componentes del vector de fuerza en forma exacta:

$$\begin{aligned} & \text{nx*p-spf} \cdot \mu * (2 * \text{nx} * \text{ux} + \text{ny} * (\text{uy} + \text{vx}) + \text{nz} * (\text{uz} + \text{wx})) \\ & \text{ny*p-spf} \cdot \mu * (\text{nx} * (\text{vx} + \text{uy}) + 2 * \text{ny} * \text{vy} + \text{nz} * (\text{vz} + \text{wy})) \\ & \text{nz*p-spf} \cdot \mu * (\text{nx} * (\text{wx} + \text{uz}) + \text{ny} * (\text{wy} + \text{vz}) + 2 * \text{nz} * \text{wz}) \end{aligned}$$

12. Para calcular los valores de las componentes de la expresión aproximada del vector de fuerza, haga click derecho en *Derived values* y elija *Surface average*, seleccione la

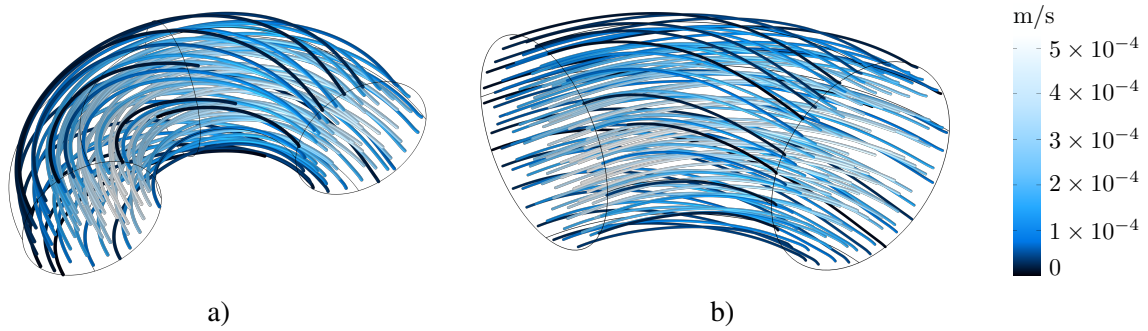


Figura 4.2: Líneas de corriente de la velocidad para codos de a) 180° y b) 90°. En ambos casos el flujo másico es de 0.1 kg/min

frontera 1 y calcule los valores de:

$$\begin{aligned} & -n_x \cdot (p + \text{spf} \cdot \rho \cdot \text{spf} \cdot U^2) \\ & -n_y \cdot (p + \text{spf} \cdot \rho \cdot \text{spf} \cdot U^2) \\ & -n_z \cdot (p + \text{spf} \cdot \rho \cdot \text{spf} \cdot U^2) \end{aligned}$$

Repita esta operación en la frontera 10 pero cambie el signo de los integrandos. Posteriormente sume los resultados de ambas operaciones.

13. Repita esta operación para un codo de 90°.

Usando este programa se resolvió el problema de flujo al nivel de escala microscópico para diferentes flujos másicos de entrada. En la figura 4.2 se muestran las líneas de corriente de la velocidad para codos de 180° y 90° para el flujo másico máximo del programa que fue de 0.1 kg/min. Como es de esperarse, la velocidad máxima se encuentra en la superficie de entrada (superficie izquierda de los codos). Más aún, es de interés calcular los cambios en el número de Reynolds en cada caso, para ello, se define este número adimensional como

$$Re = \frac{\rho v_{ref} D}{\mu}, \quad (4.4.15)$$

donde $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$, $D = 0.1 \text{ m}$, $\mu = 10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ y la velocidad de referencia se define como

$$v_{ref} = \frac{D p_e}{\mu}. \quad (4.4.16)$$

Más aún, el vector de fuerza adimensional se define de la siguiente manera

$$\mathbf{f}^* = \frac{4\mathbf{f}}{\pi D^2 p_e}. \quad (4.4.17)$$

Como es de esperarse, en el codo de 180°, la única componente relevante de este vector es la componente y , mientras que en el codo de 90° el interés está en las componentes x y y . Por esta razón, en la figura 4.3 se reporta la magnitud de la versión adimensional del vector de fuerza para ambos tipos de codo para diferentes valores del número de Reynolds predicha con los modelos exacto y aproximado. Como puede notarse, la fuerza que ejerce el fluido sobre las paredes del codo se incrementa con el número de Reynolds en ambos casos y las capacidades predictivas del modelo aproximado disminuyen conforme disminuye el ángulo del codo. De hecho, para el codo de 180°, el máximo porcentaje de error de la solución aproximada relativa a la solución exacta es de aproximadamente 1%, mientras que cuando el ángulo del codo se reduce a la mitad el error aumenta en casi un orden de magnitud. Esto puede atribuirse al hecho de que al disminuir el ángulo del codo también disminuye la distancia entre las superficies de entrada y salida, lo cual hace que la suposición de que los esfuerzos viscosos son despreciables en las superficies de entrada y salida sea cuestionable. Con esta metodología se pueden estimar las fuerzas que ejercen fluidos sobre

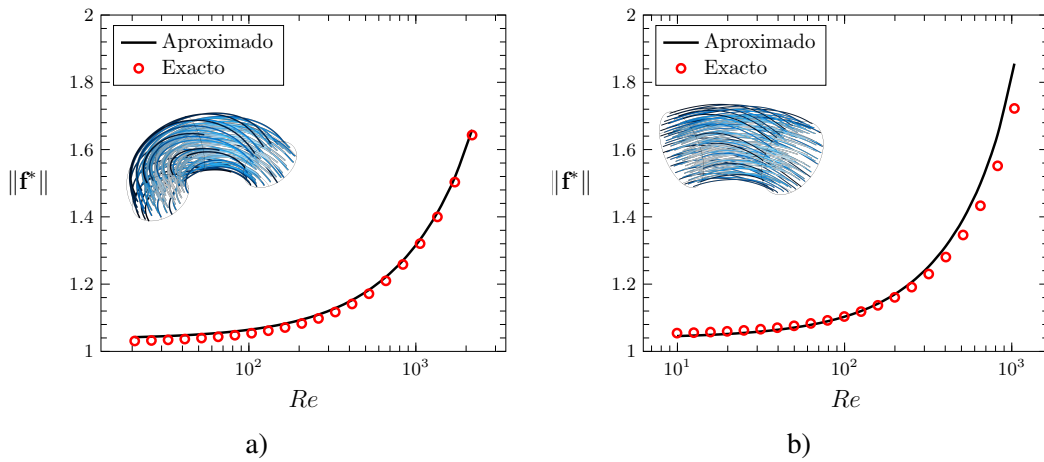


Figura 4.3: Dependencia de la magnitud adimensional del vector de fuerza que ejerce el agua sobre las paredes de codos de a) 180° y b) 90° con el número de Reynolds predicha por los modelos exacto y aproximado.

distintos accesorios. De hecho, en el ejercicio 4.10 se explora el uso en una bifurcación con forma de y. Esta forma de análisis proporciona una alternativa al uso de coeficientes heurísticos como suele hacerse en algunos textos (ver, por ejemplo, [Ocón y Tojo, 1971](#)).

Ejercicio 4.6 El objetivo de este ejercicio es deducir la ecuación (4.4.6). Para ello, considere el principio de conservación de cantidad de movimiento para una región arbitraria en la forma deducida en la sección 4.2:

$$\int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} \, dA = \int_{\mathcal{V}_f} \rho \mathbf{g} \, dV - \int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} p \, dA + \int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} \, dA. \quad (4.4.18)$$

Sustituya la descomposición $p = p_m - p_s$ en el segundo término en el lado derecho. Posteriormente use el teorema de la divergencia en el término resultante que contiene a la presión en la superficie de salida, la cual se supone constante para recuperar el resultado dado en la ecuación (4.4.6).

Ejercicio 4.7 — Análisis del número de Froude. Lleve a cabo análisis de orden de magnitud en los términos macroscópicos y de fuerza volumétrica y compruebe que son válidas las siguientes expresiones

$$\int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} \, dA = \mathbf{O}(\rho v^2 A) \quad (4.4.19a)$$

$$\int_{\mathcal{V}_f} \rho \mathbf{g} \, dV = \mathbf{O}(\rho g L A). \quad (4.4.19b)$$

En las ecuaciones anteriores, v es el valor máximo de la velocidad en el sistema, A es el área de la sección transversal y L es el largo equivalente del codo. Tomando este valor como ℓ_{ref} y a v como v_{ref} , utilice la definición del número de Froude dada en la ecuación (4.3.14) y demuestre que cuando $Fr^2 \gg 1$, es razonable suponer que

$$\int_{\mathcal{V}_f} \rho \mathbf{g} \, dV \ll \int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} \, dA. \quad (4.4.20)$$

Ejercicio 4.8 — Aproximación de la velocidad en las superficies de entrada y salida.

Con la intención de simplificar el lado derecho de la ecuación (4.4.13), descomponga a la velocidad en las superficies de entrada y salida en sus valores promedio y desviaciones de acuerdo con la siguiente expresión

$$v_{\alpha} = \langle v_{\alpha} \rangle + \tilde{v}_{\alpha}, \quad \alpha = e, s. \quad (4.4.21)$$

Explique bajo qué condiciones es razonable suponer que $\tilde{v}_{\alpha} \ll \langle v_{\alpha} \rangle$, por lo que $v_{\alpha} \approx \langle v_{\alpha} \rangle$ ($\alpha = e, s$). Bajo esta suposición, la ecuación (4.4.13) puede expresarse en la siguiente forma

$$\mathbf{f} = A [\mathbf{e}_{v_e} (\langle p_e \rangle + \rho \langle v_e \rangle^2) - \mathbf{e}_{v_s} (\langle p_s \rangle + \rho \langle v_s \rangle^2)]. \quad (4.4.22)$$

Compare las predicciones que aporta esta ecuación con las que resultan de la ecuación (4.4.13) para así decidir acerca de la pertinencia de la aproximación propuesta en este problema. ■

Ejercicio 4.9 Repita las simulaciones numéricas presentadas en esta sección para otros fluidos como aceite comestible, aire o incluso fluidos no newtonianos. Compare y discuta sus resultados con los presentados en esta sección. ■

Ejercicio 4.10 — Aplicación a otros accesorios. En hidráulica de tuberías existe una amplia variedad de accesorios que van más allá de los codos considerados en esta sección. Considere una unión en la que de una tubería se bifurcan dos corrientes (unión en forma de y). Suponga que el diámetro de las bifurcaciones es el mismo y corresponde a la mitad del diámetro de entrada. Revise los desarrollos de los modelos microscópico y macroscópico y haga las adecuaciones pertinentes para predecir la fuerza que ejerce el agua sobre las paredes de este accesorio considerando diferentes ángulos de separación entre las bifurcaciones que vayan de los 10° a los 90° . ■

4.5 Ecuación macroscópica de energía mecánica

4.5.1 Deducción del modelo

En las secciones anteriores de este capítulo se dedujeron las versiones macroscópica y microscópica del principio de conservación de cantidad de movimiento. Estas ecuaciones se fundamentan en la conservación de fuerzas que actúan sobre un fluido. Sin embargo, en muchas aplicaciones de interés práctico no basta con conocer la fuerza sino también la energía que experimenta un fluido. Por ello, las últimas secciones de este capítulo están dedicadas a la deducción y análisis de las versiones macroscópica y microscópica de la ecuación de la energía mecánica. Esta ecuación es de especial importancia para los desarrollos que se presentan en el siguiente capítulo el cual está dedicado a la ecuación de energía térmica. Brevemente, la suma de las ecuaciones de energía mecánica y térmica dan como resultado la ecuación de energía total. Por ello, es conveniente prestar especial atención en este capítulo a la ecuación de energía mecánica.

Para comenzar se centra la atención en la forma macroscópica del principio de conservación de energía mecánica. La ecuación con palabras que rige a este principio es similar a la usada en la sección 4.2 para la conservación de cantidad de movimiento, con la diferencia de que la cantidad que se conserva es la energía cinética. Además, se deben incluir términos relacionados con la expansión y compresión del fluido así como por las pérdidas debidas a la disipación viscosa. Tomando en cuenta lo anterior, este principio de conservación puede expresarse, para una región de integración arbitraria, como sigue:

Principio de conservación de energía mecánica

$$\begin{aligned}
& \left\{ \begin{array}{l} \text{Razón de cambio en el tiempo} \\ \text{la energía cinética en} \\ \text{una región arbitraria} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Flujo neto de entrada de} \\ \text{energía cinética por} \\ \text{las fronteras de la región arbitraria} \end{array} \right\} \\
& + \left\{ \begin{array}{l} \text{Potencia debida a} \\ \text{fuentes volumétricas dentro} \\ \text{de la región arbitraria} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Potencia debida a} \\ \text{fuentes superficiales en las} \\ \text{fronteras de la región arbitraria} \end{array} \right\} \\
& + \left\{ \begin{array}{l} \text{Potencia debida a} \\ \text{expansión o compresión del fluido} \\ \text{dentro de la región arbitraria} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Pérdidas por} \\ \text{disipación viscosa} \\ \text{dentro de la región arbitraria} \end{array} \right\}.
\end{aligned} \tag{4.5.1}$$

Para traducir al lenguaje matemático cada término de esta ecuación, es conveniente notar que la energía cinética por unidad de volumen se define como $\rho v^2/2$, por lo que siguiendo el mismo tipo de razonamiento hecho en otras ocasiones, los términos asociados a la acumulación y al transporte por las fronteras de la región pueden expresarse como sigue:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Razón de cambio en el tiempo} \\ \text{la energía cinética en} \\ \text{una región arbitraria} \end{array} \right\} = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \frac{\rho}{2} v^2 dV, \tag{4.5.2a}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Flujo neto de entrada de} \\ \text{energía cinética por} \\ \text{las fronteras de la región arbitraria} \end{array} \right\} = - \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \frac{\rho}{2} v^2 (\mathbf{v} - \mathbf{w}) dA. \tag{4.5.2b}$$

Dirigiendo la atención a los términos de potencia por fuentes volumétricas y superficiales, es conveniente recordar que al llevar a cabo el producto punto de un vector de fuerza con la velocidad, el resultado es la potencia. Tomando en cuenta esto, resulta razonable proponer que $\rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v}$ y $\mathbf{n} \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{v}$ representen la potencia debida a fuentes volumétricas y superficiales en la escala microscópica por unidad de volumen y área, respectivamente. Llevando a cabo los pasos de integración correspondientes, se deducen las siguientes expresiones:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Potencia debida a} \\ \text{fuentes volumétricas dentro} \\ \text{de la región arbitraria} \end{array} \right\} = \int_{\mathcal{V}_A} \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} dV, \tag{4.5.2ca}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Potencia debida a} \\ \text{fuentes superficiales en las} \\ \text{fronteras de la región arbitraria} \end{array} \right\} = \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) dA. \tag{4.5.2cb}$$

Más aún, el término asociado a la potencia debida a la expansión o compresión del fluido está relacionado con la divergencia de la velocidad. Como se revisó en la sección 2.4, cuando $\nabla \cdot \mathbf{v} > 0$ el fluido se expande y cuando la divergencia es negativa el fluido se comprime. La fuerza asociada a la expansión y compresión es la presión, por lo que es razonable proponer la siguiente equivalencia:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Potencia debida a} \\ \text{expansión o compresión del fluido} \\ \text{dentro de la región arbitraria} \end{array} \right\} = \int_{\mathcal{V}_A} p \nabla \cdot \mathbf{v} dV. \tag{4.5.2d}$$

Por último, el término de disipación viscosa se refiere a las pérdidas irreversibles que experimenta un fluido al realizar un trabajo en forma de calor. Como se mostrará en el capítulo siguiente, estas pérdidas son ganadas en la ecuación de energía térmica, por lo que este término no juega un papel

en la ecuación de energía total. Estas pérdidas pueden darse dentro de toda la región arbitraria y se calculan mediante la siguiente expresión

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Pérdidas por} \\ \text{disipación viscosa} \\ \text{dentro de la región arbitraria} \end{array} \right\} = - \int_{\mathcal{V}_A} \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} \, dV. \quad (4.5.2e)$$

Con estos elementos disponibles, la ecuación (4.5.1) puede escribirse en forma matemática como sigue:

Forma macroscópica del principio de conservación de energía mecánica

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \frac{\rho}{2} v^2 \, dV = & - \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \frac{\rho}{2} v^2 (\mathbf{v} - \mathbf{w}) \, dA + \int_{\mathcal{V}_A} \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \, dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) \, dA \\ & + \int_{\mathcal{V}_A} p \nabla \cdot \mathbf{v} \, dV - \int_{\mathcal{V}_A} \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} \, dV. \end{aligned} \quad (4.5.4a)$$

Ya que este resultado se dedujo para una región arbitraria, puede usarse para deducir las expresiones correspondientes a regiones material y fija, las cuales se listan a continuación

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \frac{\rho}{2} v^2 \, dV = \int_{\mathcal{V}_M} \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \, dV + \int_{\mathcal{A}_M} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) \, dA + \int_{\mathcal{V}_M} p \nabla \cdot \mathbf{v} \, dV - \int_{\mathcal{V}_M} \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} \, dV, \quad (4.5.4b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}_f} \frac{\rho}{2} v^2 \, dV = & - \int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} \cdot \frac{\rho}{2} v^2 \mathbf{v} \, dA + \int_{\mathcal{V}_f} \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \, dV + \int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) \, dA \\ & + \int_{\mathcal{V}_f} p \nabla \cdot \mathbf{v} \, dV - \int_{\mathcal{V}_f} \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} \, dV. \end{aligned} \quad (4.5.4c)$$

Con estas ecuaciones se puede analizar una amplia variedad de problemas. En los siguientes párrafos se detalla su aplicación al problema del flujo en el codo estudiado en la sección 4.4.

Ejercicio 4.11 — Forma alternativa de la ecuación de energía mecánica. La ecuación (4.5.4a) está expresada en términos de la energía cinética, sin embargo a menudo es conveniente expresarla en términos de las energías cinética y potencial. Para ello, suponga que la única fuerza volumétrica es la gravedad, la cual puede expresarse en términos de la energía potencial por unidad de masa a la escala microscópica como sigue:

$$\mathbf{g} = -\nabla \hat{\phi}, \quad (4.5.5)$$

donde $\hat{\phi}$ no depende del tiempo. Utilice la forma microscópica del principio de conservación de masa dada en la ecuación (3.4.4) para demostrar que la potencia debida a fuentes volumétricas puede escribirse como sigue

$$\int_{\mathcal{V}_A} \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \, dV = - \int_{\mathcal{V}_A} \nabla \cdot (\rho \hat{\phi} \mathbf{v}) \, dV - \int_{\mathcal{V}_A} \frac{\partial \rho \hat{\phi}}{\partial t} \, dV. \quad (4.5.6)$$

Utilice los teoremas general del transporte y de la divergencia para llegar a la siguiente versión alternativa de la ecuación de energía mecánica a la escala macroscópica

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \left(\frac{1}{2} \rho v^2 + \rho \hat{\phi} \right) \, dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \left[\left(\frac{1}{2} \rho v^2 + \rho \hat{\phi} \right) (\mathbf{v} - \mathbf{w}) \right] \, dA = \\ \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) \, dA + \int_{\mathcal{V}_A} (p \nabla \cdot \mathbf{v} - \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v}) \, dV. \end{aligned} \quad (4.5.7)$$

Discuta acerca del significado físico de los términos del lado izquierdo de la ecuación anterior. ■

Ejercicio 4.12 — Ecuación de Bernoulli. Existen formas simplificadas de la ecuación de la energía mecánica que valen la pena considerar. Una de ellas es la ecuación de Bernoulli, la cual se estudia en este ejercicio. Con este fin comience con la ecuación (4.5.7) y defina las energías cinética y potencial macroscópicas como:

$$K = \int_{\mathcal{V}_A} \left(\frac{1}{2} \rho v^2 \right) dV, \quad (4.5.8a)$$

$$\phi = \int_{\mathcal{V}_A} (\rho \hat{\phi}) dV. \quad (4.5.8b)$$

Además, defina las pérdidas macroscópicas por compresión (E_c) y por disipación viscosa (E_v) como siguen:

$$E_c = - \int_{\mathcal{V}_A} p(\nabla \cdot \mathbf{v}) dV, \quad (4.5.8c)$$

$$E_v = \int_{\mathcal{V}_A} \boldsymbol{\tau}^T : \nabla \mathbf{v} dV. \quad (4.5.8d)$$

Suponga que las superficies de la región arbitraria solo se descomponen en: superficies fijas (\mathcal{A}_f donde $\mathbf{v} = \mathbf{w} = \mathbf{0}$), móviles (\mathcal{A}_m donde $\mathbf{v} = \mathbf{w} \neq \mathbf{0}$) y de entradas y salidas (\mathcal{A}_{es}). Estas últimas se suponen fijas, por lo que $\mathbf{w} = \mathbf{0}$. Tomando en cuenta lo anterior, muestre que la ecuación (4.5.7) puede escribirse como sigue

$$\frac{d}{dt} (K + \phi) + \int_{\mathcal{A}_{es}} \mathbf{n} \cdot \left(\frac{1}{2} \rho v^2 + \rho \hat{\phi} \right) \mathbf{v} dA = \int_{\mathcal{A}_{es}} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) dA + W_m - E_c - E_v, \quad (4.5.9)$$

donde la tasa a la cual las superficies móviles ejercen trabajo sobre el fluido se definió como:

$$W_m = \int_{\mathcal{A}_m} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) dA. \quad (4.5.10)$$

La ecuación (4.5.9) puede simplificarse aún mas bajo condiciones de flujo incompresible y en estado estacionario y suponiendo que en las superficies de entrada y salida los esfuerzos viscosos son despreciables respecto a los esfuerzos inerciales y que además la velocidad del fluido puede aproximarse por su valor promedio para recuperar la *ecuación de Bernoulli para ingeniería* (Deen, 2016):

$$\left(\frac{1}{2} \langle v \rangle_s^2 + gh_s + \frac{p_s}{\rho} \right) - \left(\frac{1}{2} \langle v \rangle_e^2 + gh_e + \frac{p_e}{\rho} \right) = \hat{W}_m - \hat{E}_c - \hat{E}_v, \quad (4.5.11)$$

donde $\hat{W}_m = W_m/\dot{m}$, $\hat{E}_c = E_c/\dot{m}$ y $\hat{E}_v = E_v/\dot{m}$. Para casos en los que el término en el lado derecho de la ecuación anterior puede ser despreciado respecto a los términos del lado izquierdo, la ecuación anterior se reduce, a la bien conocida *ecuación de Bernoulli*:

$$\frac{1}{2} \rho \langle v \rangle_e^2 + \rho gh_e + p_e = \frac{1}{2} \rho \langle v \rangle_s^2 + \rho gh_s + p_s. \quad (4.5.12)$$

■

Ejercicio 4.13 — Aplicación el flujo turbulento en un tanque agitado. Considere un tanque agitado con una sola fase fluida. El agitador produce remolinos en el fluido, los cuales tienen una cascada de tamaños en la cual los remolinos más grandes (cuya longitud característica es L) se mueven por inercia y los remolinos más pequeños (cuya longitud característica es ℓ) se disipan por inercia.

1. Demuestre que el orden de magnitud de la potencia por unidad de masa de los remolinos mas grandes es $\mathbf{O}(u^3/L)$. Donde u representa el orden de magnitud de la velocidad de dichos remolinos.
2. Demuestre que el orden de magnitud de la potencia por unidad de masa de los remolinos mas pequeños es $\mathbf{O}(\mu v^2/(\rho \ell^2))$. Donde v representa el orden de magnitud de la velocidad de los remolinos más pequeños.
3. Suponiendo que la energía de los remolinos más grandes es igual a la que se disipa en los remolinos más pequeños y que en éstos el número de Reynolds ($Re_\mu = \rho v \ell / \mu$) es de orden de magnitud de uno, deduzca los siguientes estimados de orden de magnitud

$$\ell = \mathbf{O}\left(\frac{L}{Re^{3/4}}\right), \quad (4.5.13a)$$

$$v = \mathbf{O}\left(\frac{u}{Re^{1/4}}\right). \quad (4.5.13b)$$

En estas ecuaciones $Re = \rho u L / \mu$ es el número de Reynolds de los remolinos más grandes.

4. Muestre que el estimado de orden de magnitud de la tasa de disipación viscosa por unidad de masa (ε) de los remolinos más pequeños es

$$\varepsilon = \mathbf{O}\left(\frac{\mu v^2}{\rho \ell^2}\right). \quad (4.5.13c)$$

Utilice este estimado para deducir las siguientes aproximaciones

$$\ell = \mathbf{O}\left(\frac{v^3}{\varepsilon}\right)^{1/4}, \quad (4.5.13d)$$

$$v = \mathbf{O}(v\varepsilon)^{1/4}, \quad (4.5.13e)$$

donde $\nu = \mu / \rho$ es la viscosidad cinemática del fluido. ■

4.5.2 Aplicación al problema de flujo en un codo

En el caso del flujo de agua en un codo estudiado anteriormente, es conveniente usar la ecuación (4.5.4c), la cual corresponde a una región de integración fija. Bajo las condiciones físicas del problema (flujo incompresible, newtoniano, estado estacionario y $Fr \gg 1$), esta ecuación se reduce a

$$0 = - \int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} \cdot \left(\frac{\rho}{2} v^2 \mathbf{v} - \mathbf{T} \cdot \mathbf{v} \right) dA - \int_{\mathcal{V}_f} \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} dV. \quad (4.5.14)$$

La superficie \mathcal{A}_f se descompone en las superficies de entrada (\mathcal{A}_e), salida (\mathcal{A}_s) y paredes internas (\mathcal{A}_w). Ya que la velocidad del fluido es cero en \mathcal{A}_w , la ecuación anterior puede expresarse como

$$0 = - \int_{\mathcal{A}_e} \mathbf{n}_e \cdot \left(\frac{\rho}{2} v_e^2 \mathbf{v}_e - \mathbf{T}_e \cdot \mathbf{v}_e \right) dA - \int_{\mathcal{A}_s} \mathbf{n}_s \cdot \left(\frac{\rho}{2} v_s^2 \mathbf{v}_s - \mathbf{T}_s \cdot \mathbf{v}_s \right) dA - \int_{\mathcal{V}_f} \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} dV. \quad (4.5.15)$$

Siendo consistentes con el análisis que se hizo en la sección 4.4, en las superficies de entrada y salida se desprecian los esfuerzos viscosos respecto a los esfuerzos inerciales, por lo que $\mathbf{T}_\alpha = -p_\alpha \mathbf{I}$

($\alpha = e, s$) y la ecuación anterior se reduce a

$$\int_{\mathcal{A}_e} \left(\frac{\rho}{2} v_e^2 + p_e \right) v_e dA - \int_{\mathcal{A}_s} \frac{\rho}{2} v_s^3 dA = \int_{\mathcal{V}_f} \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} dV, \quad (4.5.16)$$

donde se tomó en cuenta que $\mathbf{n}_e \cdot \mathbf{v}_e = -v_e$ y $\mathbf{n}_s \cdot \mathbf{v}_s = v_s$ y que la presión modificada en la superficie de salida es nula. De esta forma, la diferencia entre la potencia que lleva el fluido en las superficies de entrada y salida es igual al término de disipación viscosa. Sin embargo, para las condiciones de flujo estudiadas aquí, esta contribución no es relevante como se examina en el ejercicio 4.14. Lo anterior, no debe tomarse como una regla general, ya que hay sistemas de flujo (como intercambiadores de calor) o arreglos de tuberías hidráulicas en donde se incurre en un error significativo si no se incluyen las pérdidas por disipación viscosa en accesorios.

Como comentario final, vale la pena mencionar que tradicionalmente se estiman las pérdidas por disipación viscosa usando correlaciones y nomogramas de datos experimentales (ver, por ejemplo [Ocón y Tojo, 1971](#); [Crane, 1982](#)). Aunque esta opción es fácil de usar y práctica puede llevar a errores considerables si se utiliza esta información más allá de las condiciones experimentales en las que se obtuvo. Más aún, si se desearan estudiar configuraciones que no están contenidas en los datos de la literatura, entonces el llevar simulaciones numéricas como las presentadas aquí es una opción atractiva y viable. Por ejemplo, [Paéz-García y Valdés-Parada \(2019\)](#) utilizaron las formas macroscópicas de los principios de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía mecánica para estudiar turbinas eólicas de eje horizontal.

Ejercicio 4.14 — Cálculo de la pérdida por disipación viscosa. El propósito de este ejercicio es analizar las pérdidas por disipación viscosa usando la solución numérica en Comsol desarrollada anteriormente. Para ello siga estos pasos tanto para el codo de 180° como para el de 90° :

1. Haga click derecho en *Derived values* y seleccione *Integration/Volume integration* y en el integrando escriba

```
spf.Qvd_tot
```

Con este comando se calcula la integral en el lado derecho de la ecuación (4.5.16).

2. Para ponderar si estos valores son relevantes se calcula ahora la potencia de entrada en el codo. Para ello, haga de nuevo click derecho en *Derived values* y seleccione *Integration/Surface integration* y en el integrando escriba:

```
500*spf.U^2+p)*spf.U
```

3. Calcule la división entre los resultados de los numerales anteriores y decida si el término de pérdidas por disipación viscosa es relevante o no en este problema. ■

4.6 Versión microscópica de la ecuación de energía mecánica

Para concluir este capítulo se deduce la versión microscópica de la ecuación de energía mecánica. Para ello, se comienza con su versión macroscópica aplicable a una región arbitraria dada en la ecuación (4.5.4a):

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \frac{\rho}{2} v^2 dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \frac{\rho}{2} v^2 (\mathbf{v} - \mathbf{w}) dA = \int_{\mathcal{V}_A} \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) dA + \int_{\mathcal{V}_A} p \nabla \cdot \mathbf{v} dV - \int_{\mathcal{V}_A} \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} dV. \quad (4.6.1)$$

Aplicando los teoremas general del transporte en el primer término y de la divergencia en todos los términos que involucren integrales superficiales de la ecuación anterior se consigue expresar a toda

la ecuación como la siguiente integral volumétrica

$$\int_{\gamma_A} \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho}{2} v^2 \right) + \nabla \cdot \left(\frac{\rho}{2} v^2 \mathbf{v} \right) - \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} - \nabla \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) - p \nabla \cdot \mathbf{v} + \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} \right] dV = 0. \quad (4.6.2)$$

Esta ecuación se satisface debido a que el integrando es cero, por lo que tomando en cuenta la identidad dada en la ecuación (3.4.8), se obtiene la siguiente expresión

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{v^2}{2} \right) = \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) + p \nabla \cdot \mathbf{v} - \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v}. \quad (4.6.3)$$

Este resultado también puede deducirse a partir de la ecuación de movimiento de Cauchy como se discute en el ejercicio 4.15. Para expresar a los últimos dos términos en el lado derecho en función del tensor total de esfuerzos, es conveniente notar que

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \mathbf{I} : \nabla \mathbf{v}, \quad (4.6.4)$$

por lo que, la ecuación (4.6.3) se puede escribir en su forma final como

Forma microscópica de la ecuación de energía mecánica

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{v^2}{2} \right) = \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) - \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v}. \quad (4.6.5)$$

Ejercicio 4.15 — Deducción alternativa. En este ejercicio se explora una forma alternativa de deducir la forma microscópica de la ecuación de energía mecánica dada en la ecuación (4.6.3). Para ello, comience con la ecuación de movimiento de Cauchy (ecuación 4.3.4) y lleve a cabo el producto punto en ambos lados de la ecuación con el vector de velocidad. Lleve a cabo las operaciones algebraicas correspondientes para obtener el resultado deseado. ■

4.7 Comentarios finales

En este capítulo se revisaron los principios fundamentales que rigen el transporte de cantidad de movimiento. Se mostró que éste es un balance de las fuerzas que actúan sobre un fluido y se dedujeron sus formas macroscópica y microscópica, así como la correspondiente condición de frontera entre fases. En el caso de la versión microscópica, se hizo hincapié que la versión más general es la ecuación de movimiento de Cauchy, la cual, para flujo newtoniano e incompresible se reduce a la bien conocida ecuación de Navier-Stokes. Cabe destacar que se comentó acerca de las variantes no newtonianas de la relación entre el esfuerzo y deformación del fluido así como del papel que juegan algunos números adimensionales en el transporte de cantidad de movimiento. Además, se dedujeron las formas macroscópica y microscópica de la ecuación de la energía mecánica, las cuales son de utilidad para los desarrollos del próximo capítulo. Estos conceptos se aplicaron en el análisis del flujo de agua en un codo y se contrastaron las predicciones que ofrecen los modelos microscópicos y macroscópicos. A lo largo del capítulo se señalaron con claridad las suposiciones asociadas a cada tipo de modelo. Es importante no perder de vista estas observaciones ya que acotan el uso de los modelos presentados aquí.

Por último, vale la pena recordar que los contenidos de este capítulo son meramente una revisión rápida de la mecánica de fluidos. Este es un tema realmente amplio y al lector interesado en un conocimiento más profundo se le recomiendan textos como los de Whitaker (1992), Batchelor (2000) y Deen (2016).



5. Transferencia de calor

5.1 Introducción

En este capítulo se presentan los aspectos esenciales del modelado de la transferencia de calor en las escalas macroscópica y microscópica. Para ello, en la sección 5.2 se parte de la forma de la primera ley de la termodinámica comúnmente encontrada en libros introductorios de termodinámica y fisicoquímica para después deducir la forma macroscópica de la ecuación de la energía total. Esta ecuación es el resultado de la suma de la ecuación de energía mecánica deducida en el capítulo anterior y la ecuación de energía térmica. Por ello, en la sección 5.3 se deducen las formas macroscópica y microscópica de la ecuación de la energía térmica. La relación de cerradura de esta ecuación es la ley de Fourier, la cual se presenta en la sección 5.4. Al igual que en capítulos anteriores, se discuten las condiciones de frontera asociadas a la transferencia de calor en la sección 5.5. Por último, se presenta un ejemplo sencillo de aplicación de los conceptos revisados en el capítulo para modelar macroscópicamente el enfriamiento de una hamburguesa recién servida. Con este tipo de fenómeno de transporte se concluye la presentación de las ecuaciones fundamentales, por lo que en los capítulos siguientes se utilizarán los modelos deducidos aquí para estudiar el transporte en medios porosos (capítulo 6) y para ilustrar algunos casos de aplicación que implican la solución analítica de ecuaciones diferenciales parciales (capítulo 7).

5.2 Primera ley de la termodinámica

El principio fundamental que rige la conservación de energía es la primera ley de la termodinámica y puede enunciarse para una región material (es decir, para un sistema aislado) como sigue

Primera ley de la termodinámica (expresada en palabras)

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{El cambio de energía interna,} \\ \text{cinética y potencial de un sistema} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Suma del calor y trabajo que actúan} \\ \text{sobre las superficies del sistema} \end{array} \right\}. \quad (5.2.1)$$

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

$$\Delta U + \Delta E_c + \Delta E_p = Q + W. \quad (5.2.2)$$

Esta es una ecuación macroscópica donde los cambios de energía interna, cinética y potencial se refieren a la diferencia entre los estados final e inicial de dichas propiedades. Dichos estados pueden asociarse a instantes de tiempo específicos de un proceso bajo estudio, los cuales se denotan como t_1 y t_2 , respectivamente. De esta forma, se tiene que

$$\Delta\psi = \psi(t_2) - \psi(t_1) = \int_{t=t_1}^{t=t_2} \frac{D\psi}{Dt} Dt; \quad \psi = U, E_c, E_p. \quad (5.2.3a)$$

En esta ecuación se utilizaron las derivadas materiales debido a que la región de integración es material. Por su parte, el calor y trabajo que se aplican en las superficies (esto es, Q y W) pueden expresarse también como integrales temporales de las tasas a las cuales se suministra calor (por conducción y radiación) y trabajo al sistema en cada instante, esto es,

$$Q = \int_{t=t_1}^{t=t_2} \dot{Q} Dt, \quad (5.2.3b)$$

$$W = \int_{t=t_1}^{t=t_2} \dot{W} Dt. \quad (5.2.3c)$$

Note que Q y W tienen unidades de J, mientras que en el caso de \dot{Q} y \dot{W} las unidades son W. Por lo tanto, la primera ley de la termodinámica también puede escribirse como una sola integral temporal:

$$\int_{t=t_1}^{t=t_2} \left[\frac{DU}{Dt} + \frac{DE_c}{Dt} + \frac{DE_p}{Dt} - (\dot{Q} + \dot{W}) \right] Dt = 0. \quad (5.2.4)$$

Ya que los límites de integración son arbitrarios, se puede extraer la siguiente ecuación diferencial ordinaria que es válida a cada instante de tiempo:

$$\frac{DU}{Dt} + \frac{DE_c}{Dt} + \frac{DE_p}{Dt} = \dot{Q} + \dot{W}. \quad (5.2.5)$$

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 aislado, que en este contexto se refiere a un cuerpo o bien a una región material. Por ello, no debe sorprender que las derivadas que aparecen en la ecuación anterior sean 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

$$U = \int_{\mathcal{V}_M} \rho \hat{e} dV, \quad (5.2.6a)$$

$$E_c = \int_{\mathcal{V}_M} \rho \frac{v^2}{2} dV, \quad (5.2.6b)$$

$$E_p = \phi = \int_{\mathcal{V}_M} \rho \hat{\phi} dV, \quad (5.2.6c)$$

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

Dirigiendo la atención al primer término en el lado derecho de la ecuación (5.2.5), 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) por conducción y radiación hacia el cuerpo, respectivamente, se tiene entonces que

$$\dot{Q} = \left\{ \begin{array}{l} \text{La tasa a la cual se suministra energía} \\ \text{al cuerpo por calor y radiación} \end{array} \right\} = - \int_{\mathcal{A}_M} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_R) dA, \quad (5.2.7)$$

donde el signo negativo se debe a que el vector unitario, \mathbf{n} , está dirigido hacia fuera 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 como la siguiente integral de superficie:

$$\dot{W} = \int_{\mathcal{A}_M} \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{v} \, dA. \quad (5.2.8)$$

Usando estas definiciones en la ecuación (5.2.5), la forma instantánea de la primera ley de la termodinámica es ahora:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \left(\rho \hat{e} + \frac{1}{2} \rho v^2 + \rho \hat{\phi} \right) dV = \int_{\mathcal{A}_M} \mathbf{n} \cdot (-\mathbf{q} - \mathbf{q}_R + \mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) \, dA. \quad (5.2.9)$$

Dirigiendo la atención al último término del lado izquierdo de la ecuación anterior se tiene, con la ayuda del teorema modificado de Reynolds (ver ejercicio 3.6):

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \rho \hat{\phi} \, dV = \int_{\mathcal{V}_M} \rho \frac{D\hat{\phi}}{Dt} \, dV, \quad (5.2.10)$$

la siguiente expresión

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \rho \hat{\phi} \, dV = \int_{\mathcal{V}_M} \rho \frac{D\hat{\phi}}{Dt} \, dV = \int_{\mathcal{V}_M} \rho \left(\frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \hat{\phi} \right) dV. \quad (5.2.11)$$

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

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \rho \hat{\phi} \, dV = \int_{\mathcal{V}_M} \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \hat{\phi} \, dV = - \int_{\mathcal{V}_M} \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \, dV. \quad (5.2.12)$$

En la última igualdad se utilizó la definición del vector de fuerzas volumétricas por unidad de masa (ver ejercicio 4.11):

$$\mathbf{b} = -\nabla \hat{\phi}. \quad (5.2.13)$$

De esta forma, la ecuación (5.2.9) puede escribirse como:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \left(\rho \hat{e} + \frac{1}{2} \rho v^2 \right) dV = \int_{\mathcal{A}_M} \mathbf{n} \cdot (-\mathbf{q} - \mathbf{q}_R + \mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) \, dA + \int_{\mathcal{V}_M} \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \, dV. \quad (5.2.14)$$

Como es evidente, la ecuación (5.2.14) 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

Ecuación de energía total (forma macroscópica)

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \left(\rho \hat{e} + \frac{1}{2} \rho v^2 \right) dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \left(\rho \hat{e} + \frac{1}{2} \rho v^2 \right) (\mathbf{v} - \mathbf{w}) \, dA = \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot (-\mathbf{q} - \mathbf{q}_R + \mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) \, dA + \int_{\mathcal{V}_A} \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \, dV. \quad (5.2.15)$$

Como puede notarse, para el caso de una región material $\mathbf{w} = \mathbf{v}$ y se recupera la ecuación (5.2.14). El segundo término en el lado izquierdo de la ecuación representa el flujo neto de entrada de energía interna y cinética por las fronteras de la región arbitraria. La ecuación anterior es el punto de partida para el desarrollo de las formas macroscópica y microscópica de la ecuación de energía térmica.

Ejercicio 5.1 Reflexione sobre el significado físico de cada término de la ecuación (5.2.15) y exprese esta ecuación en la forma de ecuación con palabras. ■

Ejercicio 5.2 Partiendo de la ecuación (5.2.15), deduzca la expresión correspondiente para una región fija. Exprese el resultado tanto en forma matemática como en forma de ecuación con palabras. ■

Ejercicio 5.3 — Forma microscópica de la ecuación de energía total. Utilice los teoremas general del transporte y de la divergencia para deducir la siguiente forma microscópica de la ecuación de energía total

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \hat{e} + \frac{1}{2} \rho v^2 \right) + \nabla \cdot \left[\left(\rho \hat{e} + \frac{1}{2} \rho v^2 \right) \mathbf{v} \right] = \nabla \cdot (-\mathbf{q} - \mathbf{q}_R + \mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) + \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v}. \quad (5.2.16)$$

5.3 Ecuación de energía térmica: Formas macroscópica y microscópica

La ecuación (5.2.15) es una forma instantánea y macroscópica de expresar la primera ley de la termodinámica y obviamente puede utilizarse para estudiar una amplia variedad de problemas. Sin embargo, en este capítulo, la atención se centra en los cambios espacio-temporales de la energía térmica. Para aislar las contribuciones térmicas de la primera ley de la termodinámica es conveniente retomar la forma macroscópica de la ecuación de energía mecánica deducida en el capítulo anterior y que puede expresarse para una región arbitraria como sigue

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \frac{\rho}{2} v^2 dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \frac{\rho}{2} v^2 (\mathbf{v} - \mathbf{w}) dA = \int_{\mathcal{V}_A} \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) dA - \int_{\mathcal{V}_A} \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v} dV. \quad (5.3.1)$$

Al restar la ecuación (5.3.1) a la ecuación de energía total (ver ecuación 5.2.15) se deduce la siguiente expresión

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} (\rho \hat{e}) dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot (\rho \hat{e}) (\mathbf{v} - \mathbf{w}) dA = - \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_R) dA + \int_{\mathcal{V}_A} \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v} dV. \quad (5.3.2)$$

La cual es la primera forma macroscópica de la ecuación de energía térmica. Esta versión de la ecuación de energía térmica no es la forma final a usar aquí ya que se busca una expresión en términos de la temperatura. Para lograr esto, es conveniente recordar la definición de entalpía

$$H = E + pV, \quad (5.3.3)$$

o bien, dividiendo ambos lados de esta ecuación entre la masa, resulta la siguiente relación:

$$\hat{h} = \hat{e} + \frac{p}{\rho}. \quad (5.3.4)$$

Despejando a la energía interna por unidad de masa de esta ecuación y sustituyendo el resultado en la ecuación (5.3.2) se obtiene la siguiente expresión

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} (\rho \hat{h} - p) dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot (\rho \hat{h} - p) (\mathbf{v} - \mathbf{w}) dA = - \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_R) dA + \int_{\mathcal{V}_A} \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v} dV. \quad (5.3.5)$$

Para avanzar hacia expresar la ecuación de la energía térmica en términos de la temperatura, es conveniente deducir su forma microscópica. Para ello, se usan los teoremas general del transporte y

de la divergencia para obtener la siguiente expresión

$$\int_{V_A} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho \hat{h} - p) + \nabla \cdot [(\rho \hat{h} - p) \mathbf{v}] + \nabla \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_R) - \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v} \right] dV = 0. \quad (5.3.6)$$

Usando la siguiente identidad (ver ejercicio 3.7)

$$\frac{\partial(\rho A)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho A \mathbf{v}) = \rho \frac{DA}{Dt}, \quad (5.3.7)$$

y tomando en cuenta que los límites de integración son arbitrarios, se deduce la siguiente expresión a la escala microscópica

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(\hat{h} - \frac{p}{\rho} \right) = -\nabla \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_R) + \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v}. \quad (5.3.8)$$

Desarrollando las derivadas temporales en el lado izquierdo resulta que

$$\rho \frac{D\hat{h}}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} + \frac{p}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} = -\nabla \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_R) + \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v}. \quad (5.3.9)$$

Ahora bien, la entalpía es una propiedad que depende de la presión y la temperatura por lo que usando la regla de la cadena se deduce la siguiente expresión

$$\frac{D\hat{h}}{Dt} = \frac{D\hat{h}}{DT} \bigg|_p \frac{DT}{Dt} + \frac{D\hat{h}}{Dp} \bigg|_T \frac{Dp}{Dt} = C_p \frac{DT}{Dt} + \frac{1}{\rho} (1 - \alpha T) \frac{Dp}{Dt}, \quad (5.3.10)$$

donde C_p y α son la capacidad calorífica a presión constante y el coeficiente de expansión térmica, respectivamente (ver ejercicio 5.4). Este último coeficiente se define en términos de la densidad como sigue

$$\alpha = -\frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{DT} \bigg|_p. \quad (5.3.11)$$

Sustituyendo la ecuación (5.3.10) en la ecuación (5.3.9) resulta la ecuación de energía térmica

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} - \alpha T \frac{Dp}{Dt} + \frac{p}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} = -\nabla \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_R) + \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v}. \quad (5.3.12)$$

Más aún, de la ecuación de continuidad, se tiene que

$$\frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} = -\nabla \cdot \mathbf{v} = -\mathbf{l} : \nabla \mathbf{v}. \quad (5.3.13)$$

De esta forma, la ecuación (5.3.12) se transforma, con la ayuda de la definición de la derivada material (ecuación 2.5.3), en

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \mathbf{v} \cdot \nabla T = -\nabla \cdot \mathbf{q} - \nabla \cdot \mathbf{q}_R + \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} + \alpha T \frac{Dp}{Dt}. \quad (5.3.14)$$

Con la intención de expresar en una forma mas breve esta ecuación se define al término fuente como sigue

$$\Phi = -\nabla \cdot \mathbf{q}_R + \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} + \alpha T \frac{Dp}{Dt}. \quad (5.3.15)$$

De esta manera, puede expresarse la forma microscópica de la ecuación de energía térmica como

Forma microscópica y no cerrada de la ecuación de energía térmica

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \Phi. \quad (5.3.16)$$

Como en el caso de la conservación de masa para una especie química (ver sección 3.6.1), 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. Más aún, desde el punto de vista de la ecuación de energía mecánica la disipación viscosa es una pérdida en forma de calor al producir trabajo, mientras que desde el punto de vista de la ecuación de la energía térmica, este término es una ganancia en el término fuente.

La ecuación (5.3.16) significa un considerable progreso hacia un modelo cerrado en el que la incógnita sea la temperatura, ya que la presión y la velocidad se obtienen de las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento. Sin embargo, aún permanecen dos incógnitas más que deben determinarse, estas son la densidad de flujo de calor por conducción y radiación (\mathbf{q} y \mathbf{q}_R , respectivamente). La segunda puede determinarse a partir del conocimiento de la potencia de la fuente radiativa. En la siguiente sección se presenta la relación de cerradura entre el *flux* conductivo y el gradiente de la temperatura mediante la ley de Fourier.

Antes de proceder hacia la forma cerrada de la ecuación de energía térmica a escala microscópica, es conveniente deducir una forma macroscópica alternativa a aquella dada en la ecuación (5.3.2). Para ello, se integra la ecuación (5.3.16) en una región arbitraria para obtener

$$\int_{\mathcal{V}_A} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} dV + \int_{\mathcal{V}_A} \rho C_p \mathbf{v} \cdot \nabla T dV = - \int_{\mathcal{V}_A} \nabla \cdot \mathbf{q} dV + \int_{\mathcal{V}_A} \Phi dV. \quad (5.3.17)$$

Suponiendo que C_p es constante, la siguiente identidad es aplicable

$$\rho C_p \mathbf{v} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\rho C_p \mathbf{v} T) - \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) C_p T. \quad (5.3.18)$$

O bien, tomando en cuenta la forma microscópica de la ecuación de continuidad (ecuación 3.4.4) en el último término en el lado derecho, resulta la siguiente identidad

$$\rho C_p \mathbf{v} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\rho C_p \mathbf{v} T) + C_p T \frac{\partial \rho}{\partial t}. \quad (5.3.19)$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación (5.3.17) se obtiene la siguiente expresión macroscópica

$$\int_{\mathcal{V}_A} \frac{\partial \rho C_p T}{\partial t} dV + \int_{\mathcal{V}_A} \nabla \cdot (\rho C_p T \mathbf{v}) dV = - \int_{\mathcal{V}_A} \nabla \cdot \mathbf{q} dV + \int_{\mathcal{V}_A} \Phi dV. \quad (5.3.20)$$

Usando los teoremas general del transporte (ecuación 2.6.8) y de la divergencia (ecuación 2.6.1), la ecuación anterior toma la estructura buscada de la forma macroscópica de la ecuación de energía térmica

Forma macroscópica y no cerrada de la ecuación de energía térmica

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \rho C_p T dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot [\rho C_p T (\mathbf{v} - \mathbf{w}) + \mathbf{q}] dA = \int_{\mathcal{V}_A} \Phi dV. \quad (5.3.21a)$$

Las versiones de esta ecuación correspondientes a las regiones material y fija se deducen al sustituir $\mathbf{w} = \mathbf{v}$ y $\mathbf{w} = \mathbf{0}$ en la ecuación anterior y pueden expresarse como sigue:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \rho C_p T dV + \int_{\mathcal{A}_M} \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} dA = \int_{\mathcal{V}_M} \Phi dV, \quad (5.3.21b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}_f} \rho C_p T dV + \int_{\mathcal{A}_f} \mathbf{n} \cdot (\rho C_p T \mathbf{v} + \mathbf{q}) dA = \int_{\mathcal{V}_f} \Phi dV. \quad (5.3.21c)$$

Al igual que en los dos capítulos anteriores, la versión a usar de la forma macroscópica de la energía térmica está determinada por el sistema bajo estudio. Por esta razón es importante contar con las tres formas mostradas arriba. En los siguientes párrafos se procede con la deducción de la forma cerrada de la ecuación de energía térmica y más adelante se dirige la atención hacia las condiciones de frontera entre fases.

Ejercicio 5.4 — 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),

$$Dh = TDs + \frac{Dp}{\rho}, \quad (5.3.22)$$

y tomando en cuenta que

$$\left. \frac{Ds}{Dp} \right|_T = - \left. \frac{D\rho^{-1}}{DT} \right|_P, \quad (5.3.23)$$

demuestre que

$$\left. \frac{Dh}{Dp} \right|_T = \frac{1}{\rho}(1 - \alpha T). \quad (5.3.24)$$

Ejercicio 5.5 — Deducción alternativa de la forma microscópica de la ecuación de energía térmica. El objetivo de este problema es encontrar otra forma de deducir la ecuación de energía térmica dada en la ecuación (5.3.16). Para ello, reste a la forma microscópica de la ecuación de energía total deducida en el ejercicio 5.3, su contraparte para la ecuación de energía mecánica (ver ecuación 4.6.5). Lleve a cabo las manipulaciones algebraicas correspondientes y justifique cuidadosamente sus desarrollos.

5.4 Ley de Fourier

En la sección anterior se dedujeron las formas macroscópica y microscópica de la ecuación de energía térmica dadas en las ecuaciones (5.3.21a) y (5.3.16), respectivamente. En ambos casos es necesario especificar tanto al término fuente Φ como al flux conductivo de calor \mathbf{q} . El término fuente se especifica en función del problema particular bajo estudio, mientras que la relación entre \mathbf{q} y T está dada por la ley de Fourier. Esta ecuación establece que existe una relación lineal entre el flux de calor \mathbf{q} y el gradiente de temperatura y puede escribirse en forma vectorial como sigue

Ley de Fourier (forma vectorial)

$$\mathbf{q} = -k\nabla T. \quad (5.4.1)$$

En la ecuación anterior k es la conductividad térmica de la fase bajo estudio. Para materiales anisótropos, la conductividad térmica es un tensor de segundo orden y la ley de Fourier se expresa en una forma más general como:

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K} \cdot \nabla T. \quad (5.4.2)$$

Los valores de la conductividad térmica de los materiales se obtienen de experimentos, correlaciones o bien a partir de teoría. Utilizando la forma de la ley de Fourier dada en la ecuación (5.4.1), las formas microscópica y macroscópica de la ecuación de energía térmica se expresan en forma cerrada como sigue:

Forma microscópica de la ecuación de energía térmica

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (k\nabla T) + \Phi. \quad (5.4.3a)$$

Forma macroscópica de la ecuación de energía térmica

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \rho C_p T dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot [\rho C_p T (\mathbf{v} - \mathbf{w})] dA = \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot k \nabla T dA + \int_{\mathcal{V}_A} \Phi dV. \quad (5.4.3b)$$

En ambas ecuaciones el significado físico de los términos es equivalente, la única diferencia es el nivel de escala al que se refieren. De esta forma, el primer término del lado izquierdo representa la acumulación de calor, el segundo término representa el transporte por convección de calor. Más aún, el primer término del lado derecho representa la conducción de calor (note que en el caso macroscópico, los términos de convección y conducción aplican en las fronteras de la región arbitraria). Por último, el segundo término en el lado derecho se refiere a la fuente o sumidero de calor en la fase. Siempre que este último término sea conocido, las ecuaciones anteriores están cerradas pues la única incógnita es la temperatura. Note que, cuando los cambios de temperatura no se traducen en cambios en la densidad y viscosidad del fluido, puede resolverse el problema de flujo para así determinar la presión y velocidad y sustituir estos resultados en las ecuaciones (5.4.3). Lo anterior es típico en la *convección forzada*, en donde se utilizan medios mecánicos para inducir el flujo convectivo. Por el contrario, en la *convección natural* la densidad del fluido cambia con la temperatura y esto se traduce en un movimiento global del fluido (como ocurre en el mar o en una taza de té). En ambos casos, las ecuaciones de mecánica de fluidos y de transferencia de calor deben resolverse de forma acoplada.

La versión adimensional de la ecuación de energía térmica es similar a la analizada en la sección 3.6.2 para transferencia de masa de una especie. En el ejercicio 5.7 se deduce la forma adimensional y se examinan los casos límite correspondientes. En la siguiente sección se deducen las condiciones de frontera correspondientes a la transferencia de calor.

Ejercicio 5.6 — Difusividad térmica. El coeficiente de difusividad térmica se define como sigue

$$\alpha_T = \frac{k}{\rho C_p}. \quad (5.4.4)$$

Con base en las unidades de k , ρ y C_p deduzca las unidades de α_T y exprese a la ecuación de energía térmica en función de la difusividad térmica. ■

Ejercicio 5.7 — Versión adimensional de la ecuación de energía térmica a la escala microscópica. Para deducir la forma adimensional de la ecuación (5.4.3a), considere las siguientes definiciones adimensionales

$$T^* = \frac{T - T_{\min}}{T_{\max} - T_{\min}}; \quad \mathbf{v}^* = \frac{\mathbf{v}}{v_{ref}}; \quad \Phi^* = \frac{\Phi \ell_{ref}^2}{(T_{\max} - T_{\min})k} \quad \nabla^* = \ell_{ref} \nabla; \quad t^* = \frac{t}{t_{ref}}. \quad (5.4.5)$$

La definición de T^* es adecuada cuando se conocen las temperaturas máxima y mínima del sistema. Cuando este no es el caso, puede usarse simplemente $T^* = T/T_{ref}$. Muestre que usando estas definiciones la forma adimensional de la ecuación de energía térmica es

$$\frac{1}{Fo} \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + Pec \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* T^* = \nabla^{*2} T^* + \Phi^*. \quad (5.4.6)$$

En esta expresión se usó la definición del número de Péclet dada en la ecuación (1.7.6a) y del número de Fourier $Fo = t_{ref} \alpha / (\ell_{ref}^2)$. Examine los casos límite de la ecuación anterior cuando $Fo \gg 1$, $Fo \ll 1$, $Pe \gg 1$ y $Pe \ll 1$. ■

Ejercicio 5.8 — Ecuación de Cattaneo-Vernotte. La ley de Fourier supone que el gradiente de temperatura se propaga a una velocidad infinita, de tal manera que instantáneamente se produce un flux conductivo de calor. Para atender esta situación Maxwell (1867), y más recientemente Cattaneo (1958) y Vernotte (1958) propusieron la siguiente modificación a la ley de Fourier

$$t_r \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{q} = -k \nabla T, \quad (5.4.7)$$

donde t_r es una constante de tiempo que se conoce como el tiempo de relajación. Evidentemente, cuando esta constante es cero, se recupera la ley de Fourier. Demuestre que si se usa la ecuación de Cattaneo-Vernotte como ecuación de cerradura, entonces la forma cerrada de la ecuación de energía térmica puede escribirse como sigue

$$\rho C_p t_r \left(\frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{\partial (\mathbf{v} \cdot \nabla T)}{\partial t} \right) + \rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \Phi + t_r \frac{\partial \Phi}{\partial t}. \quad (5.4.8)$$

5.5 Condiciones de frontera

5.5.1 Condición de salto del flux de calor

Al igual que en los capítulos anteriores, el contar con las ecuaciones diferenciales que gobiernan el transporte dentro de las fases no es suficiente para describir del todo a un sistema, pues es necesario describir el transporte en las fronteras. Para deducir la condición de frontera correspondiente al flux de calor, considere un sistema de dos fases (fases β y γ) como el mostrado en la figura 3.4. Es conveniente comenzar el análisis considerando una región de integración material, \mathcal{V}_M que contenga porciones de ambas fases así como la zona de cambio entre ellas. En términos de esta región de integración, puede usarse la forma macroscópica de la ecuación de energía térmica dada en la ecuación (5.3.21b):

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_M} \rho C_p T dV + \int_{\mathcal{A}_M} \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} dA = \int_{\mathcal{V}_M} \Phi dV. \quad (5.5.1)$$

Note que no se usaron subíndices indicativos de las fases para las diferentes propiedades y variables de la ecuación anterior, ya que se suponen dependientes de la posición, de tal manera que describan la transferencia de calor en cada punto de \mathcal{V}_M . Los términos fuente, de conducción en la frontera y de acumulación de energía térmica pueden expresarse en términos de las propiedades en cada fase mediante las siguientes descomposiciones que hacen uso de las propiedades de exceso:

$$\int_{\mathcal{V}_M} \rho C_p T dV = \int_{\mathcal{V}_\beta} \rho_\beta C_{p\beta} T_\beta dV + \int_{\mathcal{V}_\gamma} \rho_\gamma C_{p\gamma} T_\gamma dV + \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \rho_s C_{ps} T_s dA, \quad (5.5.2a)$$

$$\int_{\mathcal{A}_M} \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} dA = \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n}_\beta \cdot \mathbf{q}_\beta dA + \int_{\mathcal{A}_\gamma} \mathbf{n}_\gamma \cdot \mathbf{q}_\gamma dA + \oint_{\mathcal{C}} \mathbf{n}_s \cdot \mathbf{q}_s d\sigma \quad (5.5.2b)$$

$$\int_{\mathcal{V}_M} \Phi dV = \int_{\mathcal{V}_\beta} \Phi_\beta dV + \int_{\mathcal{V}_\gamma} \Phi_\gamma dV + \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \Phi_s dA, \quad (5.5.2c)$$

donde el subíndice s se utiliza para denotar propiedades superficiales. Sustituyendo estas descomposiciones en la ecuación (5.5.1) da lugar a la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_\beta} \rho_\beta C_{p\beta} T_\beta dV + \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_\gamma} \rho_\gamma C_{p\gamma} T_\gamma dV + \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \rho_s C_{ps} T_s dA + \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n}_\beta \cdot \mathbf{q}_\beta dA \\ + \int_{\mathcal{A}_\gamma} \mathbf{n}_\gamma \cdot \mathbf{q}_\gamma dA + \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \nabla_s \cdot \mathbf{q}_s dA = \int_{\mathcal{V}_\beta} \Phi_\beta dV + \int_{\mathcal{V}_\gamma} \Phi_\gamma dV + \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \Phi_s dA. \end{aligned} \quad (5.5.3)$$

Note que se usó el teorema de la divergencia superficial, el cual llevó a la siguiente identidad

$$\oint_{\mathcal{C}} \mathbf{n}_s \cdot \mathbf{q}_s d\sigma = \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \nabla_s \cdot \mathbf{q}_s dA \quad (5.5.4)$$

Con el fin de aislar las contribuciones que aplican en la interfase, se extiende el uso de las propiedades y variables válidas en cada fase hasta la zona de cambios, lo cual es una aproximación. Teniendo esto en mente, las versiones macroscópicas de la ecuación de energía térmica en cada fase pueden expresarse como sigue

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_\beta} \rho_\beta C_{p\beta} T_\beta dV + \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n}_\beta \cdot \mathbf{q}_\beta dA + \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \mathbf{q}_\beta dA = \int_{\mathcal{V}_\beta} \Phi_\beta dV, \quad (5.5.5a)$$

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}_\gamma} \rho_\gamma C_{p\gamma} T_\gamma dV + \int_{\mathcal{A}_\gamma} \mathbf{n}_\gamma \cdot \mathbf{q}_\gamma dA + \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\gamma\beta} \cdot \mathbf{q}_\gamma dA = \int_{\mathcal{V}_\gamma} \Phi_\gamma dV. \quad (5.5.5b)$$

Restando la suma de estas ecuaciones a la ecuación (5.5.3) da como resultado la siguiente expresión

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \rho_s C_{ps} T_s dA = \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} [-\nabla_s \cdot \mathbf{q}_s + \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot (\mathbf{q}_\beta - \mathbf{q}_\gamma) + \Phi_s] dA. \quad (5.5.6)$$

Como puede notarse, casi toda la ecuación puede agruparse dentro de una integral de superficie, excepto por el término de acumulación en el lado izquierdo. Para hacer frente a esta situación, se recurre al teorema del transporte superficial (ver ecuación 3.4.16) para que la ecuación (5.5.6) tome la siguiente forma

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \left[\frac{D_s \rho_s C_{ps} T_s}{Dt} + \rho_s C_{ps} T_s \nabla_s \cdot \mathbf{v}^\sigma - [\rho_\beta C_{p\beta} T_\beta (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}^\sigma) - \rho_\gamma C_{p\gamma} T_\gamma (\mathbf{v}_\gamma - \mathbf{v}^\sigma)] \cdot \mathbf{n}_{\beta\gamma} \right] dA \\ & = \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} [-\nabla_s \cdot \mathbf{q}_s + \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot (\mathbf{q}_\beta - \mathbf{q}_\gamma) + \Phi_s] dA. \end{aligned} \quad (5.5.7)$$

Ya que los límites de integración son arbitrarios, es posible extraer la siguiente condición de frontera interfacial

Condición de salto del flux calor

$$\begin{aligned} & \underbrace{\frac{\partial \rho_s C_{ps} T_s}{\partial t}}_{\text{acumulación superficial}} + \underbrace{\nabla_s \cdot (\rho_s C_{ps} T_s \mathbf{v}_s)}_{\text{transporte por convección superficial}} + \underbrace{\nabla_s \cdot \mathbf{q}_s}_{\text{transporte por conducción superficial}} - \underbrace{2H \rho_s C_{ps} T_s (\mathbf{w} \cdot \mathbf{n}_{\beta\gamma})}_{\text{efecto de cambios en la superficie divisoria}} \\ & = \underbrace{\mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot [\rho_\beta C_{p\beta} T_\beta (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{v}^\sigma) - \rho_\gamma C_{p\gamma} T_\gamma (\mathbf{v}_\gamma - \mathbf{v}^\sigma) - (k_\beta \nabla T_\beta - k_\gamma \nabla T_\gamma)]}_{\text{Fluxes (convectivo y conductivo) desde las fases hacia la superficie}} + \underbrace{\Phi_s}_{\text{Fuente superficial}}. \end{aligned} \quad (5.5.8)$$

Aquí se usó la ley de Fourier (ecuación 5.4.1) en el flux conductivo de calor de cada fase y la descomposición dada en la ecuación (3.4.22). Como puede notarse, la ecuación anterior es una condición de salto (es decir, de discontinuidad) para el flux de calor y tiene una estructura similar a la expresión deducida para el transporte de masa de especies químicas dada en la ecuación (3.6.28a).

Ejercicio 5.9 — Forma alternativa de la condición de salto. Suponga que C_{ps} es constante en la ecuación (5.5.8) y utilice la fórmula de derivada de un producto para deducir que

$$\frac{\partial \rho_s C_{ps} T_s}{\partial t} = C_{ps} \left(\rho_s \frac{\partial T_s}{\partial t} + T_s \frac{\partial \rho_s}{\partial t} \right). \quad (5.5.9)$$

Sustituya en esta expresión la condición de salto de masa total (ecuación (3.4.25)) y posterior-

mente sustituya la expresión resultante en la ecuación (5.5.8) para obtener una forma alternativa. ■

Ejercicio 5.10 — Forma simplificada de la condición de salto. Muestre que, cuando no hay transferencia de masa entre las fases, la condición de salto dada en la ecuación (5.5.8) se reduce a la siguiente forma

$$-\mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot (k_{\beta} \nabla T_{\beta} - k_{\gamma} \nabla T_{\gamma}) = \Phi_s, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}. \quad (5.5.10)$$

Esta expresión se reduce a la condición de continuidad del flux conductivo de calor cuando no hay una fuente interfacial de transferencia de calor, o bien cuando la contribución de este término es despreciable respecto al transporte por conducción. ■

5.5.2 Condición de salto de la temperatura

El complemento a la condición de frontera del flux de calor es la *ley de enfriamiento de Newton*, la cual establece una discontinuidad entre la temperatura de una superficie y la de una fase fluida circundante. Al lector interesado en la historia del desarrollo de esta condición de frontera se le recomienda revisar el trabajo de Besson (2012). La ley de enfriamiento de Newton puede expresarse en forma matemática como sigue:

Ley de enfriamiento de Newton

$$\mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \mathbf{q}_{\beta} = h_{\beta\gamma} (T_{\beta} - T_{\gamma}), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\gamma}, \quad (5.5.11)$$

donde $h_{\beta\gamma} [=] \text{ W/m}^2\text{K}$ es el coeficiente interfacial de transferencia de calor. Esta condición de frontera puede deducirse a partir del estudio de las capas límite hidrodinámica y térmica. De hecho, es posible deducir expresiones para predecir al coeficiente de salto $h_{\beta\gamma}$ o bien, es posible usar formulaciones basadas en la observación (ver Capítulo 14 de Bird y col., 2006). Este coeficiente es inversamente proporcional a las resistencias interfaciales a la transferencia de calor. De esta forma, cuando $h_{\beta\gamma}$ tiende a cero, es porque existen considerables resistencias a la transferencia de calor y la ecuación anterior se reduce a una condición de aislamiento térmico (esto es, el flux de calor interfacial es cero). Por el contrario, cuando este coeficiente es suficientemente grande, la ecuación anterior se reduce a una condición de continuidad de la temperatura entre las fases. De acuerdo con Bergman y col. (2017), es posible combinar la ley de enfriamiento de Newton con la ecuación de Stefan-Boltzmann para el caso en que la superficie emita calor, el resultado es

$$\mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \mathbf{q}_{\beta} = h_{\beta\gamma} (T_{\beta} - T_{\gamma}) + \varepsilon \sigma (T_{\beta}^4 - T_{\gamma}^4). \quad (5.5.12)$$

Ejercicio 5.11 Desarrolle la forma adimensional de la ecuación (5.5.11) y examine los casos límite en términos del número de Biot para la transferencia de calor (ver sección 1.7.6). ■

5.6 Aplicación: Enfriamiento de una hamburguesa

En la figura 5.1 se muestra un dibujo de una hamburguesa sencilla que solo consiste en dos rebanadas de pan y una pieza de carne. Ya que tanto el pan como la carne son medios porosos, no se refiere a ellos como fases, sino como *regiones* pues están compuestas de más de una fase. En el siguiente capítulo se discute acerca de la deducción de ecuaciones de transporte en sistemas que tengan más de una fase. De esta forma, la tapa y base del pan se denotan como las regiones t y b , respectivamente, mientras que la carne es la región- c . Por el momento, se considera que en todas las regiones no hay convección y que solo en la carne hay una fuente de generación de calor, Φ_c . Esta fuente se utiliza para representar la situación en la que la carne esté recién salida de la

parrilla. Bajo estas consideraciones, las ecuaciones de transporte de calor en cada región en estado transitorio son las siguientes

$$\rho_b C_{pb} \frac{\partial T_b}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{K}_b \cdot \nabla T_b), \quad \text{en la región } -b, \quad (5.6.1a)$$

$$\rho_c C_{pc} \frac{\partial T_c}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{K}_c \cdot \nabla T_c) + \Phi_c, \quad \text{en la región } -c, \quad (5.6.1b)$$

$$\rho_t C_{pt} \frac{\partial T_t}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{K}_t \cdot \nabla T_t), \quad \text{en la región } -t. \quad (5.6.1c)$$

Note que en las ecuaciones anteriores se utilizó la forma de la ley de Fourier dada en la ecuación (5.4.2) ya que no se tiene certidumbre acerca de la isotropía de las regiones. Más aún, suponiendo que no hay transferencia de masa entre las regiones y que la fuente interfacial de transferencia de calor es mucho menor que los fluxes normales hacia las fronteras, es razonable reducir la condición de frontera dada en la ecuación (5.5.8) a las siguientes condiciones de continuidad del flux de calor

$$\mathbf{n}_{bc} \cdot \mathbf{K}_b \cdot \nabla T_b = \mathbf{n}_{bc} \cdot \mathbf{K}_c \cdot \nabla T_c, \quad \text{en } \mathcal{A}_{bc}, \quad (5.6.1d)$$

$$\mathbf{n}_{ct} \cdot \mathbf{K}_c \cdot \nabla T_c = \mathbf{n}_{ct} \cdot \mathbf{K}_t \cdot \nabla T_t, \quad \text{en } \mathcal{A}_{bc}. \quad (5.6.1e)$$

Más aún, en las mismas fronteras se supone que no existen resistencias a la transferencia de calor, por lo que es razonable proponer las siguientes condiciones de continuidad de la temperatura

$$T_b = T_c, \quad \text{en } \mathcal{A}_{bc}, \quad (5.6.1f)$$

$$T_c = T_t, \quad \text{en } \mathcal{A}_{bc}. \quad (5.6.1g)$$

En las superficies laterales ($\mathcal{A}_{\alpha a}$, $\alpha = b, c, t$) de las regiones (y en el caso de la región- t también en la superficie superior) es razonable considerar resistencias a la transferencia de calor y pueden imponerse las siguientes condiciones de frontera

$$-\mathbf{n}_{ba} \cdot \mathbf{K}_b \nabla T_b = h_{ba}(T_b - T_a), \quad \text{en } \mathcal{A}_{ba}, \quad (5.6.1h)$$

$$-\mathbf{n}_{ca} \cdot \mathbf{K}_c \nabla T_c = h_{ca}(T_c - T_a), \quad \text{en } \mathcal{A}_{ca}, \quad (5.6.1i)$$

$$-\mathbf{n}_{ta} \cdot \mathbf{K}_t \nabla T_t = h_{ta}(T_t - T_a), \quad \text{en } \mathcal{A}_{ta}. \quad (5.6.1j)$$

Además, en la base de la región- b (\mathcal{A}_{bp}) puede imponerse la siguiente ley de enfriamiento respecto a la temperatura del plato (T_p)

$$-\mathbf{n}_{bp} \cdot \mathbf{K}_b \cdot \nabla T_b = h_{bp}(T_b - T_p), \quad \text{en } \mathcal{A}_{bp}. \quad (5.6.1k)$$

Por último, se imponen las siguientes condiciones iniciales

$$T_\alpha = T_{\alpha 0}, \quad \alpha = b, c, t; \quad \text{cuando } t = 0. \quad (5.6.1l)$$

Ya que se busca un modelo que describa la temperatura de la hamburguesa se puede proceder de dos maneras:



Figura 5.1: Esquema de una hamburguesa que consiste en dos rebanadas de pan (regiones- b y t) y una pieza de carne (región- c).

1. **Modelo de tres dominios:** Pueden desarrollarse modelos para la temperatura promedio en cada región y posteriormente combinarse para producir un modelo para la temperatura promedio de todo el sistema. Este modelo es deseable cuando se busca además contar con modelos para la temperatura promedio en cada región.
2. **Modelo de un dominio:** Considerar temperaturas y propiedades dependientes de la posición y desarrollar un modelo promedio válido en las tres regiones directamente.

Ambos enfoques son equivalentes en situaciones como la actual en la que hay condiciones de continuidad de la temperatura y del flux en las inter-regiones (ver, por ejemplo, [d'Hueppe y col., 2012](#)). Por ello, en los siguientes párrafos se sigue el segundo enfoque por la sencillez que implica. Con este fin, se propone que la región de integración sea fija; entonces, se define a una región \mathcal{V} que contenga a las tres regiones ($\mathcal{V} = \mathcal{V}_b + \mathcal{V}_c + \mathcal{V}_t$). En términos de esta región fija se puede definir al siguiente operador de promediado

$$\langle T \rangle = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}} T dV. \quad (5.6.2)$$

En la ecuación anterior, la temperatura T adquiere los siguientes valores

$$T = \begin{cases} T_b, & \text{en } \mathcal{V}_b \\ T_c, & \text{en } \mathcal{V}_c \\ T_t, & \text{en } \mathcal{V}_t \end{cases}. \quad (5.6.3)$$

De esta forma, la ecuación (5.6.2) puede también expresarse como sigue

$$\langle T \rangle = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}_b} T_b dV + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}_c} T_c dV + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}_t} T_t dV = \langle T_b \rangle_b + \langle T_c \rangle_c + \langle T_t \rangle_t. \quad (5.6.4)$$

En la última igualdad se definió el siguiente operador de promediado por cada región

$$\langle T_\alpha \rangle_\alpha = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}_\alpha} T_\alpha dV. \quad (5.6.5)$$

Tomando en cuenta estas definiciones, puede utilizarse la forma macroscópica de la ecuación de energía térmica dada en la ecuación (5.3.21c), recordando que no hay convección en el sistema para obtener

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}} \rho C_p T dV = \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot \mathbf{K} \cdot \nabla T dA + \int_{\mathcal{V}_c} \Phi_c dV. \quad (5.6.6)$$

Note que en el último término del lado derecho se tomó en cuenta el hecho de que sólo en la región- c hay una fuente de calor. Más aún, en la ecuación anterior, se conocen los cambios espaciales de ρC_p y \mathbf{K} en V . De hecho, puede proponerse una transición suave de las propiedades entre las regiones o bien cambios en escalón. Ya que en el segundo caso es cuando hay una correspondencia con el modelo de tres dominios, se propone que

$$\rho C_p = \begin{cases} \rho_b C_{pb}, & \text{en } \mathcal{V}_b \\ \rho_c C_{pc}, & \text{en } \mathcal{V}_c \\ \rho_t C_{pt}, & \text{en } \mathcal{V}_t \end{cases}; \quad \mathbf{K} = \begin{cases} \mathbf{K}_b, & \text{en } \mathcal{V}_b \\ \mathbf{K}_c, & \text{en } \mathcal{V}_c \\ \mathbf{K}_t, & \text{en } \mathcal{V}_t \end{cases}. \quad (5.6.7)$$

De esta forma, el producto ρC_p puede descomponerse en su valor promedio y desviaciones espaciales como sigue

$$\rho C_p = \langle \rho C_p \rangle + \widetilde{\rho C_p}. \quad (5.6.8)$$

Sustituyendo la descomposición en el término en el lado izquierdo de la ecuación (5.6.6) y dividiendo ambos lados de la ecuación entre V resulta que

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \rho C_p \rangle \langle T \rangle + \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}} \widetilde{\rho C_p T} dV = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot \mathbf{K} \cdot \nabla T dA + \langle \Phi_c \rangle_c. \quad (5.6.9)$$

Ya que las desviaciones espaciales de ρC_p son solo no nulas en las inter-regiones, resulta razonable proponer que

$$\frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}} \widetilde{\rho C_p T} dV \ll \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho C_p \rangle \langle T \rangle, \quad (5.6.10)$$

y entonces la ecuación (5.6.9) se reduce a

$$\langle \rho C_p \rangle \frac{d\langle T \rangle}{dt} = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}} \mathbf{n} \cdot \mathbf{K} \cdot \nabla T dA + \langle \Phi_c \rangle_c. \quad (5.6.11)$$

Note que en el lado izquierdo de la ecuación anterior, se tomó en cuenta el hecho de que $\langle \rho C_p \rangle$ no dependen del tiempo y que $\langle T \rangle$ sólo es función de t . Dirigiendo la atención al primer término en el lado derecho de la ecuación anterior, haciendo las descomposiciones geométricas correspondientes, resulta la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \langle \rho C_p \rangle \frac{d\langle T \rangle}{dt} &= \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{bp}} \mathbf{n}_{bp} \cdot \mathbf{K}_b \cdot \nabla T_b dA + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{ba}} \mathbf{n}_{ba} \cdot \mathbf{K}_b \cdot \nabla T_b dA + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{ca}} \mathbf{n}_{ca} \cdot \mathbf{K}_c \cdot \nabla T_c dA \\ &\quad + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{ta}} \mathbf{n}_{ta} \cdot \mathbf{K}_t \cdot \nabla T_t dA + \langle \Phi_c \rangle_c. \end{aligned} \quad (5.6.12)$$

Sustituyendo las condiciones de frontera dadas en las ecuaciones (5.6.1h)-(5.6.1k) la ecuación anterior adquiere la siguiente forma

$$\begin{aligned} \langle \rho C_p \rangle \frac{d\langle T \rangle}{dt} &= \langle \Phi_c \rangle_c - \frac{1}{V} \left[\int_{\mathcal{A}_{bp}} h_{bp} (T_b - T_p) dA + \int_{\mathcal{A}_{ba}} h_{ba} (T_b - T_a) dA + \int_{\mathcal{A}_{ca}} h_{ca} (T_c - T_a) dA \right. \\ &\quad \left. + \int_{\mathcal{A}_{ta}} h_{ta} (T_t - T_a) dA \right]. \end{aligned} \quad (5.6.13)$$

Para avanzar en los desarrollos, se propone ahora la siguiente descomposición para la temperatura en cada región

$$T_\alpha = \langle T \rangle + \tilde{T}_\alpha; \quad \alpha = b, c, t. \quad (5.6.14)$$

Para determinar las desviaciones espaciales de la temperatura es necesario contar con un esquema de cerradura como el que se detalla en el capítulo siguiente. Como primera aproximación se propone que $\tilde{T}_\alpha \ll \langle T \rangle$ en cada frontera. Bajo estas condiciones, la ecuación (5.6.13) adquiere la siguiente forma

$$\langle \rho C_p \rangle \frac{d\langle T \rangle}{dt} = \langle \Phi_c \rangle_c - a_{vp} h_p (\langle T \rangle - T_p) - a_{va} h_a (\langle T \rangle - T_a). \quad (5.6.15)$$


En donde, para simplificar la notación, se definieron los siguientes coeficientes

$$a_{vp} h_p = \frac{h_{bp} A_{bp}}{V}; \quad a_{va} h_a = \frac{h_{ba} A_{ba} + h_{ca} A_{ca} + h_{ta} A_{ta}}{V}. \quad (5.6.16a)$$

El término en el lado izquierdo de la ecuación (5.6.15) representa la acumulación de calor en el sistema, mientras que el primer término en el lado derecho representa la contribución por la fuente de calor. Los últimos dos términos del lado derecho de esta ecuación representan las pérdidas por intercambio con el plato y el ambiente, respectivamente. No debe perderse de vista que para obtener este modelo se hicieron varias suposiciones, las cuales acotan la validez del modelo.

5.7 Comentarios finales

En este capítulo se revisaron los fundamentos de la transferencia de calor. Para ello se partió de la primera ley de la termodinámica en la forma típicamente encontrada en textos introductorios de ingeniería. Posteriormente, se dedujo la forma macroscópica de la ecuación de energía total. Más adelante, se le substrajo a esta ecuación, la forma macroscópica de la ecuación de la energía mecánica deducida en el capítulo anterior para aislar la contribución debida a la energía térmica. A partir de esta ecuación se consiguió obtener una forma cerrada de la ecuación de energía térmica que puede usarse en los niveles de escala microscópico y macroscópico. Además, se desarrollaron las condiciones de frontera correspondientes al flux de calor y la temperatura. Las ecuaciones desarrolladas en este capítulo se utilizaron para deducir un modelo sencillo del enfriamiento de una hamburguesa recién servida. En el desarrollo de este modelo fue evidente que es necesario contar con ecuaciones para describir el transporte en medios porosos, así como tener maneras de predecir las desviaciones espaciales de la temperatura. Estos temas se abordan en el siguiente capítulo, el cual está dedicado al desarrollo de modelos de transporte en medios porosos.



6. Transporte en medios porosos

6.1 Introducción

El estudio del transporte en medios porosos es un tema que ha interesado a un considerable número de investigadores ya que se busca describir el transporte de masa, calor y cantidad de movimiento en un sistema que es, al menos, bifásico. Actualmente, la deducción de modelos matemáticos en sistemas que involucran transporte con multiplicidad de fases y escalas características puede llevarse a cabo por diferentes alternativas como son el método del promedio volumétrico (Whitaker, 1999), el método de homogenización (Auriault y col., 2009; Mei y Vernescu, 2010), el método de promediado restringido por la termodinámica (Gray y Miller, 2014), entre muchos otros (ver, por ejemplo, la revisión hecha por Battiato y col., 2019). En este capítulo, se deducen modelos macroscópicos usando tanto al método del promedio volumétrico como al método de homogenización y se hace hincapié en varios aspectos del método de homogenización adjunta propuesto por Bottaro (2019). Para ello, se adoptan las siguientes suposiciones de entrada:

1. Flujo newtoniano, incompresible y en estado estacionario.
2. Medio poroso rígido y espacialmente homogéneo.
3. Condición de no deslizamiento en la interfase sólido-fluido.
4. Concentración de las especies químicas en solución diluida para poder usar la ley de Fick.

La suposición de medio poroso rígido quiere decir que la fase sólida no se deforma ni se desplaza por el flujo del fluido. Por su parte, la suposición de medio espacialmente homogéneo significa que las propiedades geométricas del medio poroso (como la porosidad) son independientes del espacio.

En los siguientes párrafos se detallan los elementos que están presentes en los métodos del promedio volumétrico y de homogenización y se discute acerca de las diferencias y similitudes entre ambas metodologías. Tomando elementos de ambas metodologías y respetando las suposiciones listadas arriba se estudiará el flujo inercial en medios porosos (sección 6.3), así como la transferencia de masa (sección 6.4) y calor (sección 6.5) en medios porosos homogéneos. En el caso de transferencia de masa, además de la deducción del modelo y la predicción de los coeficientes de medio efectivo, se incluye un apartado sobre la validación del modelo mediante simulaciones numéricas directas. Además, en la sección 6.5, dedicada a la transferencia de calor en medios porosos, se exploran tres tipos de modelos que son el de equilibrio y los modelos de no equilibrio de una y dos ecuaciones.

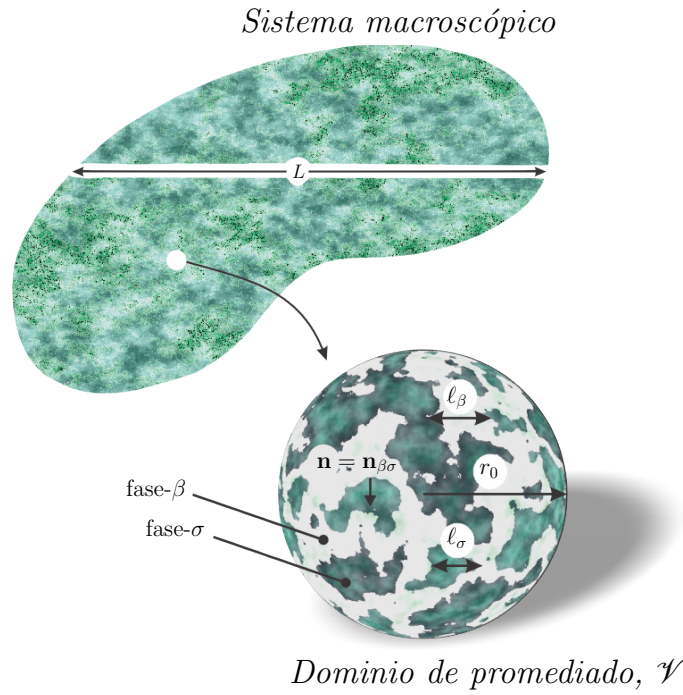


Figura 6.1: Esquema de un medio poroso (sistema macroscópico), incluyendo una muestra del dominio de promediado, \mathcal{V} , que incluye a las fases y longitudes características del sistema.

6.2 Elementos para llevar a cabo el escalamiento

6.2.1 Definiciones fundamentales

El propósito de esta sección es proporcionar el herramental usado en los métodos del promedio volumétrico y de homogenización para posteriormente comparar dichos métodos y usarlos en el resto del capítulo. Para llevar a cabo el proceso de promediado se define una región (o dominio) de promediado, \mathcal{V} (de volumen V) como la mostrada en la figura 6.1, la cual, en principio puede ser arbitraria, material o fija. Para los propósitos de este texto se considera como una región fija, aunque hay autores que han propuesto regiones que cambian con la posición (ver, por ejemplo, Cushman, 1997). Ya que este dominio de promediado se utilizará para generar nuevos continuos, es necesario que sea *representativo* del sistema bajo estudio. De acuerdo con Bear (2018), para el caso del transporte en medios porosos, la longitud característica r_0 de \mathcal{V} debe ser mucho mayor que la máxima longitud característica del transporte a escala de poro (ℓ_p) y, al mismo tiempo, debe ser mucho menor que la mínima longitud característica (L) del sistema a escala macroscópica. De esta forma, un dominio de promediado es representativo cuando su longitud característica satisface la siguiente separación de longitudes de escala

$$\ell_p \ll r_0 \ll L. \quad (6.2.1)$$

En términos de este dominio de integración representativo, puede definirse el siguiente operador de promediado para una propiedad (escalar, vectorial o tensorial) ψ , la cual está definida tanto en la fase fluida (fase- β , donde $\psi = \psi_\beta$) como en la fase sólida (fase- σ , donde $\psi = \psi_\sigma$):

$$\langle \psi \rangle = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}} \psi \, dV = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}_\beta} \psi_\beta \, dV + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}_\sigma} \psi_\sigma \, dV. \quad (6.2.2)$$

Note que en la última igualdad se tomó en cuenta el hecho que $\mathcal{V} = \mathcal{V}_\beta + \mathcal{V}_\sigma$ y que ψ_α que es suave por tramos y que está definida en cualquier punto de la fase- α ($\alpha = \beta, \sigma$). Para facilitar la notación, se propone la siguiente definición

Definición 6.2.1 — Promedio superficial.

$$\langle \psi_\alpha \rangle_\alpha = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}_\alpha} \psi_\alpha dV; \quad \alpha = \beta, \sigma. \quad (6.2.3)$$

De esta forma, la ecuación (6.2.2) puede expresarse como sigue

$$\langle \psi \rangle = \langle \psi_\beta \rangle_\beta + \langle \psi_\sigma \rangle_\sigma. \quad (6.2.4)$$

El operador de promedio superficial se usa tradicionalmente para representar a la velocidad promedio en medios porosos (Whitaker, 1999). Sin embargo, para otras propiedades como la temperatura, densidad, concentración molar de una especie o la presión, se prefiere usar al siguiente operador

Definición 6.2.2 — Promedio intrínseco.

$$\langle \psi_\alpha \rangle^\alpha = \frac{1}{V_\alpha} \int_{\mathcal{V}_\alpha} \psi_\alpha dV; \quad \alpha = \beta, \sigma. \quad (6.2.5)$$

Las definiciones de promedio superficial e intrínseco se propusieron en la sección 2.6.3 para una sola fase, por lo que las definiciones de arriba pueden verse como una generalización a varias fases.

Más aún, la *porosidad*, ε , se define como (Bear, 2018)

Definición 6.2.3 — Porosidad. El espacio vacío por unidad de volumen del medio poroso.

Esto es, la porosidad representa la fracción volumétrica disponible para el flujo en un medio poroso. Ya que en los casos considerados en este capítulo solo hay una fase fluida, la porosidad corresponde a la fracción volumétrica de dicha fase en el dominio de promediado. En forma matemática, lo anterior se expresa como

$$\varepsilon_\beta = \frac{V_\beta}{V}. \quad (6.2.6)$$

De la misma forma, puede definirse a la fracción volumétrica ocupada por la fase sólida como $\varepsilon_\sigma = V_\sigma/V$. Con base en estas definiciones, se deduce que los operadores de promediado superficial e intrínseco están acoplados mediante la siguiente definición (Nield y Bejan, 2017)

Definición 6.2.4 — Relación de Dupuit-Forchheimer.

$$\langle \psi_\alpha \rangle_\alpha = \varepsilon_\alpha \langle \psi_\alpha \rangle^\alpha; \quad \alpha = \beta, \sigma. \quad (6.2.7)$$

De esta forma, la ecuación (6.2.4) puede escribirse como sigue

$$\langle \psi \rangle = \varepsilon_\beta \langle \psi_\beta \rangle^\beta + \varepsilon_\sigma \langle \psi_\sigma \rangle^\sigma. \quad (6.2.8)$$

Note que cuando sólo hay transporte en una fase, la ecuación anterior se reduce a la relación de Dupuit-Forchheimer. Por ello, en las secciones de este capítulo en las que este sea el caso, se prescinde del subíndice que indica la fase para ψ y para ε con la intención de relajar la notación.

Antes de continuar, es pertinente notar que en los casos de estudio de los capítulos anteriores las propiedades promedio perdían su dependencia espacial ya que se integraba en todo el dominio espacial de la variable independiente. Como se muestra en la figura 6.1, el dominio de promediado no cubre todo el dominio espacial del medio poroso, por lo que las variables promedio aún dependen de la posición.

Para tener más claro lo anterior, en la figura 6.2 se muestra que el vector de posición \mathbf{r} localiza puntos en la fase- β respecto a un sistema coordenado fijo. Por lo tanto, es razonable suponer que $\psi = \psi(\mathbf{r})$. Más aún, en la figura 6.2 se muestra que el vector \mathbf{x} localiza el centro geométrico (o centroide) del dominio de promediado, el cual puede ubicarse en la fase fluida o en la fase sólida.

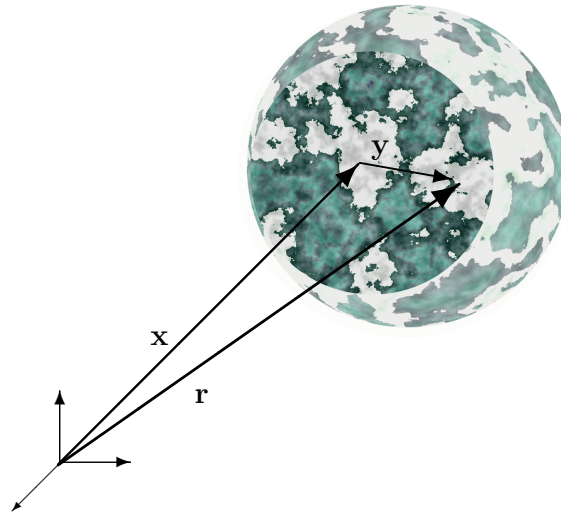


Figura 6.2: Vectores de posición asociados con el operador de promediado.

Por lo tanto, puede definirse al vector \mathbf{y} para localizar el mismo punto en la fase fluida que ubica el vector \mathbf{r} respecto al centroide del dominio de promediado. Esto es,

$$\mathbf{r} = \mathbf{x} + \mathbf{y}. \quad (6.2.9)$$

Entonces, cuando se lleva a cabo el paso de integración en los operadores definidos en las ecuaciones (6.2.3) y (6.2.5) la dependencia que se elimina de la variable ψ es \mathbf{y} . Por lo tanto, las variables promedio son, en general, funciones del vector de posición \mathbf{x} , a menos que se indique explícitamente lo contrario. De hecho, dado que V_β puede cambiar respecto a \mathbf{x} , se deduce que ε_β también es función de la posición. Sin embargo, debido a la suposición de homogeneidad espacial, ε_β se considera independiente de la posición. En los siguientes párrafos se utilizan también a los vectores \mathbf{r} y \mathbf{y} para localizar puntos en la fase sólida. Más aún, en el método de homogenización se utiliza la descomposición dada en la ecuación anterior para expresar al operador gradiente como sigue

$$\nabla_{\mathbf{r}} = \nabla_{\mathbf{x}} + \nabla_{\mathbf{y}}, \quad (6.2.10)$$

y pueden proponerse expresiones equivalentes para los operadores de divergencia y laplaciano. En la ecuación anterior, $\nabla_{\mathbf{x}}$ debe entenderse como una derivada de cambios espaciales *lentos*, mientras que $\nabla_{\mathbf{y}}$ captura los cambios *rápidos* de las propiedades. En este contexto, las palabras *lento* y *rápido* se asocian a la macroescala y a la microescala, respectivamente.

6.2.2 Adaptación de los teoremas integrales

Anteriormente se estableció que \mathcal{V} es una región de integración fija y que \mathcal{V}_β es constante, por lo que \mathcal{V}_σ también lo es. Esto permite dividir ambos lados de la relación integral dada en la ecuación (2.6.7) entre V_α para concluir la siguiente relación para el promedio intrínseco de una derivada temporal

$$\left\langle \frac{\partial \psi_\alpha}{\partial t} \right\rangle^\alpha = \frac{\partial \langle \psi_\alpha \rangle^\alpha}{\partial t}; \quad \alpha = \beta, \sigma. \quad (6.2.11)$$

Más aún, cuando se desean intercambiar las operaciones de diferenciación e integración espacial, se utiliza el teorema del promediado espacial deducido en la sección 2.6.3. Para el sistema bifásico bajo estudio en este capítulo, este teorema, aplicado al operador gradiente, puede expresarse para cada fase como sigue

$$\langle \nabla_{\mathbf{r}} \psi_\beta \rangle_\beta = \nabla_{\mathbf{x}} \langle \psi_\beta \rangle_\beta + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \psi_\beta \, dA, \quad (6.2.12a)$$

$$\langle \nabla_{\mathbf{r}} \psi_\sigma \rangle_\sigma = \nabla_{\mathbf{x}} \langle \psi_\sigma \rangle_\sigma - \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \psi_\sigma \, dA. \quad (6.2.12b)$$

En las ecuaciones anteriores se tomó en cuenta el hecho que $\mathbf{n}_{\beta\sigma} = -\mathbf{n}_{\sigma\beta}$. Para el operador de divergencia aplicado a una función vectorial o tensorial $\boldsymbol{\varphi}_\alpha$ ($\alpha = \beta, \sigma$), el teorema del promediado espacial se expresa como

$$\langle \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \boldsymbol{\varphi}_\beta \rangle_\beta = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \boldsymbol{\varphi}_\beta \rangle_\beta + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \boldsymbol{\varphi}_\beta \, dA, \quad (6.2.13a)$$

$$\langle \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \boldsymbol{\varphi}_\sigma \rangle_\sigma = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \boldsymbol{\varphi}_\sigma \rangle_\sigma - \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \boldsymbol{\varphi}_\sigma \, dA. \quad (6.2.13b)$$

Note que, a diferencia de las versiones de este teorema deducidas en la sección (2.6.3), ahora se hace explícita la naturaleza (lenta o rápida) del operador ∇ . Más aún, ya que las fracciones volumétricas de ambas fases se suponen constantes en la región de promediado, puede usarse la relación de Dupuit-Frochheimer en las ecuaciones anteriores para obtener las siguientes formas modificadas del teorema del promediado espacial

$$\langle \nabla_{\mathbf{r}} \psi_\beta \rangle^\beta = \nabla_{\mathbf{x}} \langle \psi_\beta \rangle^\beta + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \psi_\beta \, dA, \quad (6.2.14a)$$

$$\langle \nabla_{\mathbf{r}} \psi_\sigma \rangle^\sigma = \nabla_{\mathbf{x}} \langle \psi_\sigma \rangle^\sigma - \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \psi_\sigma \, dA, \quad (6.2.14b)$$

$$\langle \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \boldsymbol{\varphi}_\beta \rangle^\beta = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \boldsymbol{\varphi}_\beta \rangle^\beta + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \boldsymbol{\varphi}_\beta \, dA, \quad (6.2.14c)$$

$$\langle \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \boldsymbol{\varphi}_\sigma \rangle^\sigma = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \boldsymbol{\varphi}_\sigma \rangle^\sigma - \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \boldsymbol{\varphi}_\sigma \, dA. \quad (6.2.14d)$$

6.2.3 Descomposición espacial y expansión en series de Taylor y de potencias

Como puede notarse, el uso del teorema del promediado espacial lleva a la aparición de integrales de las propiedades a escala microscópica. Estas integrales juegan el papel de *filtros de información* desde la microescala hacia la macroescala (Whitaker, 1999). Esto motiva a encontrar una forma de expresar a las cantidades a escala de poro en términos de sus correspondientes promedios intrínsecos. Para ello se recurre a la siguiente definición

Definición 6.2.5 — Descomposición espacial de Gray (1975).

$$\psi_\alpha|_{\mathbf{r}} = \langle \psi_\alpha \rangle^\alpha|_{\mathbf{r}} + \tilde{\psi}_\alpha|_{\mathbf{r}}; \quad \alpha = \beta, \sigma. \quad (6.2.15)$$

Note que cada propiedad en la ecuación anterior está evaluada en el mismo lugar en el espacio. En el método del promedio volumétrico se suelen usar expansiones en series de Taylor para expresar propiedades promedio que originalmente estaban evaluadas en \mathbf{r} para que se aproximen en la posición del centroide del dominio de promediado. A continuación se explica este procedimiento y para ello se comienza con la siguiente definición

Definición 6.2.6 — Expansión en series de Taylor de una propiedad promedio. Sea φ una cantidad (escalar, vectorial o tensorial) promedio evaluada en \mathbf{r} (o en \mathbf{y}) y continua en la posición; esta propiedad puede expresarse evaluada en la posición \mathbf{x} como sigue

$$\varphi|_{\mathbf{r}} = \varphi|_{\mathbf{x}} + \mathbf{y} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \varphi|_{\mathbf{x}} + \frac{1}{2} \mathbf{y} \mathbf{y} : \nabla_{\mathbf{x}} \nabla_{\mathbf{x}} \varphi|_{\mathbf{x}} + \dots \quad (6.2.16)$$

En esta expresión se tomó en cuenta que $\mathbf{y} = \mathbf{r} - \mathbf{x}$.

Más aún, ya que $\mathbf{y} = \mathbf{O}(r_0)$ y la longitud característica de los cambios espaciales de las cantidades promedio (y de sus subsecuentes derivadas) suele asociarse con L , se pueden proponer los siguientes

estimados de orden de magnitud

$$\varphi|_{\mathbf{x}} = \mathbf{O}(\varphi), \quad (6.2.17a)$$

$$\mathbf{y} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \varphi|_{\mathbf{x}} = \mathbf{O}\left(\frac{r_0}{L} \varphi\right), \quad (6.2.17b)$$

$$\frac{1}{2} \mathbf{y} \mathbf{y} : \nabla_{\mathbf{x}} \nabla_{\mathbf{x}} \varphi|_{\mathbf{x}} = \mathbf{O}\left(\frac{r_0^2}{L^2} \varphi\right). \quad (6.2.17c)$$

De esta forma, con base en la restricción de escala $r_0 \ll L$, es razonable suponer que

$$\mathbf{y} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \varphi|_{\mathbf{x}} \ll \varphi|_{\mathbf{x}}; \quad \frac{1}{2} \mathbf{y} \mathbf{y} : \nabla_{\mathbf{x}} \nabla_{\mathbf{x}} \varphi|_{\mathbf{x}} \ll \varphi|_{\mathbf{x}}, \quad (6.2.18)$$

y por tanto la ecuación (6.2.16) se reduce a

$$\varphi|_{\mathbf{r}} = \varphi|_{\mathbf{x}}. \quad (6.2.19)$$

Note que el mismo resultado aplica si $\mathbf{r} = \mathbf{y}$. Al sustituir $\varphi = \langle \psi_{\alpha} \rangle^{\alpha}$ en la ecuación anterior y sustituyendo la expresión resultante en la ecuación (6.2.15), se obtiene la siguiente expresión aproximada

$$\psi_{\alpha}|_{\mathbf{r}} = \langle \psi_{\alpha} \rangle^{\alpha}|_{\mathbf{x}} + \tilde{\psi}_{\alpha}|_{\mathbf{r}}; \quad \alpha = \beta, \sigma. \quad (6.2.20)$$

Como corolario de este resultado se tiene que las cantidades promedio pueden suponerse constantes dentro de la región de promediado. Tomando en cuenta esto puede aplicarse el operador de promedio intrínseco en ambos lados de la ecuación anterior para obtener

$$\langle \psi_{\alpha} \rangle^{\alpha} = \underbrace{\langle \langle \psi_{\alpha} \rangle^{\alpha} \rangle^{\alpha}}_{\langle \psi_{\alpha} \rangle^{\alpha}} + \langle \tilde{\psi}_{\alpha} \rangle^{\alpha}; \quad \alpha = \beta, \sigma, \quad (6.2.21)$$

de donde se deduce de inmediato que

$$\langle \tilde{\psi}_{\alpha} \rangle^{\alpha} = 0; \quad \alpha = \beta, \sigma. \quad (6.2.22)$$

Esta expresión promedio sirve para acotar los valores de las desviaciones espaciales, como se muestra más adelante en las aplicaciones.

La expansión en series de Taylor es un paso que solo está en el método del promedio volumétrico y lo diferencia del método de homogenización, en el cual se utilizan métodos de perturbación. Este tipo de métodos requiere que el problema de transporte se formule primeramente en forma adimensional, para posteriormente proponer la siguiente expansión en series de potencias

$$\psi^*(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \psi_0^*(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \phi \psi_1^*(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \phi^2 \psi_2^*(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \dots \quad (6.2.23)$$

En la ecuación anterior $\psi_i^* = \mathbf{O}(1)$ ($i = 0, 1, 2, \dots$) y $\phi = \ell_p/L \ll 1$. Los métodos de perturbación pueden clasificarse en perturbaciones *regulares* y *singulares*. En las perturbaciones regulares, así como en las series de Taylor, el primer término de la serie es el término líder y representa una aproximación razonable de toda la serie. En contraste, en las perturbaciones singulares se pueden obtener predicciones confiables al tomar a los primeros términos de la serie y no solo al primero. Por tanto estos métodos son recomendables cuando $\phi \rightarrow 0$, el cual es el caso de los medios porosos. Además de esta diferencia en el tipo de expansiones, existen otros puntos que permiten diferenciar los métodos del promedio volumétrico y homogenización como se detalla a continuación.

6.2.4 Métodos del promedio volumétrico y homogenización

El método del promedio volumétrico consiste en los siguientes pasos:

1. Plantear el problema de transporte a escala de poro en todo el sistema.
2. Aplicar el operador de promediado superficial a las ecuaciones diferenciales gobernantes en la escala de poro.

3. Intercambiar las operaciones de diferenciación (temporal y espacial) con la operación de integración (espacial) mediante los teoremas general del transporte y del promediado espacial. En ocasiones, en este paso es posible sustituir las condiciones de frontera interfaciales.
4. Utilizar la descomposición espacial de Gray para conseguir llegar a una ecuación promedio en términos de variables promedio y desviaciones espaciales. A este modelo se le conoce como el *modelo no cerrado*, ya que contiene más incógnitas que ecuaciones. Si se utiliza la descomposición de Gray en la forma dada en la ecuación (6.2.15), puede decirse que el modelo es promedio pero no escalado pues no ha implicado ninguna pérdida de información respecto al modelo a escala de poro. Simplemente la información se llevó, en forma integral, de la escala de poro a la escala macroscópica sin sufrir pérdidas. Si las desviaciones espaciales se calculan mediante experimentos (de laboratorio o numéricos), puede desarrollarse un modelo promedio particular de las condiciones experimentales estudiadas. Sin embargo, a menudo se prefiere contar con un modelo promedio cerrado que no tenga esta especificidad, aunque implique el costo de usar suposiciones.
5. Para determinar las desviaciones espaciales mediante un esquema de cerradura se siguen estos pasos:
 - a) Se deducen las ecuaciones gobernantes de las desviaciones al restarle a las ecuaciones de transporte a escala de poro el modelo no cerrado. En este caso, se acepta la aproximación dada en la ecuación (6.2.19). Además, se suelen imponer suposiciones para simplificar la ecuación resultante por medio de estimados de orden de magnitud y restricciones de escala.
 - b) Se sustituye la descomposición de Gray (en la forma aproximada dada en la ecuación (6.2.20) en las condiciones de frontera interfaciales.
 - c) Se propone que el dominio de solución sea una celda unitaria periódica y representativa de la geometría del sistema bajo estudio. De esta forma, el problema de las desviaciones se completa con la imposición de condiciones de periodicidad de las variables de desviación y con la restricción promedio dada en la ecuación (6.2.22).
 - d) Se identifican a los términos no homogéneos del problema como fuentes y se propone una solución formal del problema de las desviaciones. De esta forma se proponen variables de cerradura que mapean la influencia de cada fuente sobre las variables de desviación. Estas variables de hecho pueden expresarse en términos de funciones de Green como lo propusieron Wood y Valdés-Parada (2013). Los problemas de valor a la frontera que satisfacen las variables de cerradura pueden usarse para determinar sus correspondientes estimados de orden de magnitud.
6. Se sustituye la solución formal del problema de las desviaciones en los filtros integrales del modelo no cerrado. En ocasiones, la ecuación resultante puede simplificarse a partir de los estimados de orden de magnitud de las variables de cerradura obtenidas en el paso anterior.
7. Se definen coeficientes de medio efectivo que contengan la influencia de las integrales de las variables de cerradura.

Como puede notarse, en el método del promedio volumétrico la pérdida de información tiene lugar en el paso 5 que corresponde al proceso de cerradura. Esto se hace deliberadamente ya que se considera aceptable imponer suposiciones en las variables de desviación pues como se sustituirán en filtros integrales, éstos se encargarán de suavizar los errores en los que se incurra debido al uso de aproximaciones. Este método ha sido aplicado para el estudio de una amplia variedad de problemas que no se limitan a medios porosos e incluyen por ejemplo sistemas biológicos (Wood y Ford, 2007), sistemas fisiológicos (Nicholson, 2001), transporte de contaminantes en zonas densamente urbanas (Valdés-Parada y col., 2012), entre muchas otras. Este método ha mostrado que es comparable con el método de promedio de ensamble (Wood y col., 2003) y con el método de homogenización (Davit y col., 2010b). De hecho, Miller y col. (2018) mostraron que el esquema de cerradura del método del promedio volumétrico puede usarse en la teoría de promediado restringida termodinámicamente.

El método de homogenización consiste en los siguientes pasos

1. Se supone que la geometría del medio poroso puede representarse por un arreglo periódico de

- celdas unitarias y se escribe el problema de transporte directamente en una celda periódica.
2. Se reformula el problema en forma adimensional para poder usar el método de perturbaciones.
 3. Se utiliza la descomposición dada en la ecuación (6.2.10) en forma adimensional y la expansión propuesta en la ecuación (6.2.23) en el problema adimensional.
 4. Se agrupan términos en las diferentes potencias de ϕ para producir diferentes problemas de valor a la frontera. Normalmente solo se requieren de los primeros dos o tres términos de las expansiones.
 5. Usualmente el primer término de la serie está relacionado con variables macroscópicas ya que es independiente de y y se convierte en la fuente del problema resultante en el segundo término de la serie. Este problema es equivalente al problema de las variables de desviación en el método del promedio volumétrico.
 6. Se propone la solución formal del problema en el primer término de la serie, la cual puede promediarse en el caso del transporte de cantidad de movimiento para obtener el modelo deseado. Para transferencia de calor y masa, se usa el tercer término de la serie para encontrar una ecuación que relaciona a las variables microscópicas y macroscópicas, la cual, al ser promediada lleva al modelo macroscópico cerrado.

El método de homogenización fue propuesto bajo un contexto típico de matemáticas aplicadas, mientras que el método del promedio volumétrico tiene orígenes mas bien en el contexto de la ingeniería. Estos orígenes se han traducido en que, tras varias décadas de su uso se formen dos escuelas que no siempre compaginan en la estructura de los modelos y los problemas de cerradura a resolver (ver, por ejemplo [Bourbatache y col., 2020](#)). De hecho hay una gran comunidad de investigadores con formación de ingeniería que prefieren usar el método de homogenización debido a la formalidad y rigor matemático que ofrece, en contraste con los argumentos intuitivos, aunque físicamente convincentes del método del promedio volumétrico. Por ello, no es difícil concluir que el método de homogenización sea el mas ampliamente usado actualmente. Más aún, recientemente [Bottaro \(2019\)](#) contribuyó notablemente al método de homogenización al incorporar elementos como la fórmula de Green para la deducción de la solución formal de los problemas de valor a la frontera resultantes de este método. Por ello, en las secciones que siguen se utilizan ambas metodologías con el fin de estudiar problemas asociados con el transporte de cantidad de movimiento, calor y masa en medios porosos.

6.3 Flujo inercial en medios porosos

En el siglo XIX [Darcy \(1856\)](#) desarrolló de manera empírica una expresión que relaciona a la velocidad promedio del fluido en el medio poroso con el gradiente de presión promedio a partir de una constante de proporcionalidad que depende de la permeabilidad y la viscosidad del fluido. Fue hasta la segunda mitad del siglo XX cuando tanto [Whitaker \(1966\)](#) como [Marle \(1967\)](#) y otros dedujeron por primera vez la ley de Darcy a partir de los principios fundamentales de conservación de masa y cantidad de movimiento. La propuesta de Whitaker fue mejorada posteriormente usando el método del promedio volumétrico incluyendo un esquema de cerradura ([Whitaker, 1986](#)). Más aún, la ley de Darcy también se ha deducido usando el método de homogenización ([Sanchez-Palencia, 1980](#)), el método de promediado restringido por la termodinámica ([Gray y Miller, 2014](#)), el reciente método de homogenización adjunta ([Bottaro, 2019](#)), entre otros. Al lector interesado en una revisión histórica de la ley de Darcy y sus modificaciones se le sugiere revisar el texto de [Darrigol \(2005\)](#), así como los trabajos de [Rose \(2000\)](#), [Brown \(2002\)](#), [Zerner \(2011\)](#) y [Lasseux y Valdés-Parada \(2017\)](#). En los siguientes párrafos se utiliza el método del promedio volumétrico para deducir la ecuación macroscópica de conservación de masa y se utiliza el método de homogenización para deducir la ley de Darcy en el caso de flujo monofásico en medios porosos.

En la figura 6.1 se presenta un esquema del medio poroso, el cual consiste en una matriz sólida (fase- σ) de estructura complicada cuya longitud característica es ℓ_σ . La matriz sólida está saturada por una fase fluida (fase- β) cuya longitud característica se denota como ℓ_β . Con base en las suposiciones listadas al inicio del capítulo, las ecuaciones que gobiernan el transporte de masa y

de cantidad de movimiento al nivel de escala de poro en la fase fluida son

$$\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} = 0, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.3.1a)$$

$$\rho \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{v} = -\nabla_{\mathbf{r}} \mathcal{P} + \mu \nabla_{\mathbf{r}}^2 \mathbf{v}, \quad \text{en la fase-}\beta. \quad (6.3.1b)$$

En la ecuación (6.3.1b) el gradiente de la presión dinámica se define como

$$\nabla_{\mathbf{r}} \mathcal{P} = \nabla_{\mathbf{r}} p - \rho \mathbf{g}. \quad (6.3.1c)$$

La condición de frontera en la interfase sólido-fluido es de no deslizamiento y por tanto se tiene que

$$\mathbf{v} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}. \quad (6.3.1d)$$

Estas ecuaciones se complementan con las condiciones de frontera en las entradas y salidas del sistema macroscópico; sin embargo, esta información no es necesaria para el desarrollo del modelo y por ello no se presenta aquí. En este momento vale la pena remarcar que, debido a la compleja geometría del medio poroso, no es posible, en general, obtener una solución analítica de las ecuaciones de transporte a escala de poro. Actualmente, es una línea de investigación el desarrollo de soluciones numéricas a escala de poro usando dinámica de fluidos computacional; sin embargo, esta opción aporta más información que la requerida en aplicaciones industriales a un alto costo computacional. Por ello, es más conveniente desarrollar las ecuaciones de transporte de masa y cantidad de movimiento en términos de cantidades promedio.

6.3.1 Promediado de la ecuación de continuidad

Aplicando el operador de promediado superficial a la ecuación de continuidad se obtiene la siguiente expresión

$$\langle \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} \rangle = 0. \quad (6.3.2)$$

Para intercambiar las operaciones de integración y diferenciación espacial se utiliza la forma del teorema del promediado espacial dada en la ecuación (6.2.13a) para obtener la siguiente expresión

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \mathbf{v} \rangle + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \, dA = 0. \quad (6.3.3)$$

Tomando en cuenta la condición de frontera interfacial dada en la ecuación (6.3.1d) la ecuación anterior se reduce a

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \mathbf{v} \rangle = 0. \quad (6.3.4)$$

Este resultado es la forma final macroscópica de la ecuación de conservación de masa ya que está expresada en términos del promedio superficial de la velocidad. Este mismo resultado puede obtenerse a partir de la formulación macroscópica del principio de conservación de masa como se discute en el ejercicio 6.1.

Ejercicio 6.1 — Dedución alternativa de la forma macroscópica de la ecuación de continuidad. El propósito de este ejercicio es deducir a la ecuación (6.3.4) a partir de la forma macroscópica del principio de conservación de masa para una región de integración fija dada en la ecuación (3.2.8). ■

6.3.2 Escalamiento de la ecuación de conservación de cantidad de movimiento

El promediado de la ecuación de cantidad de movimiento puede llevarse a cabo siguiendo un procedimiento similar al usado arriba para deducir la forma macroscópica de la ecuación de continuidad como lo reporta Whitaker (1996). Sin embargo, es posible llegar al mismo resultado

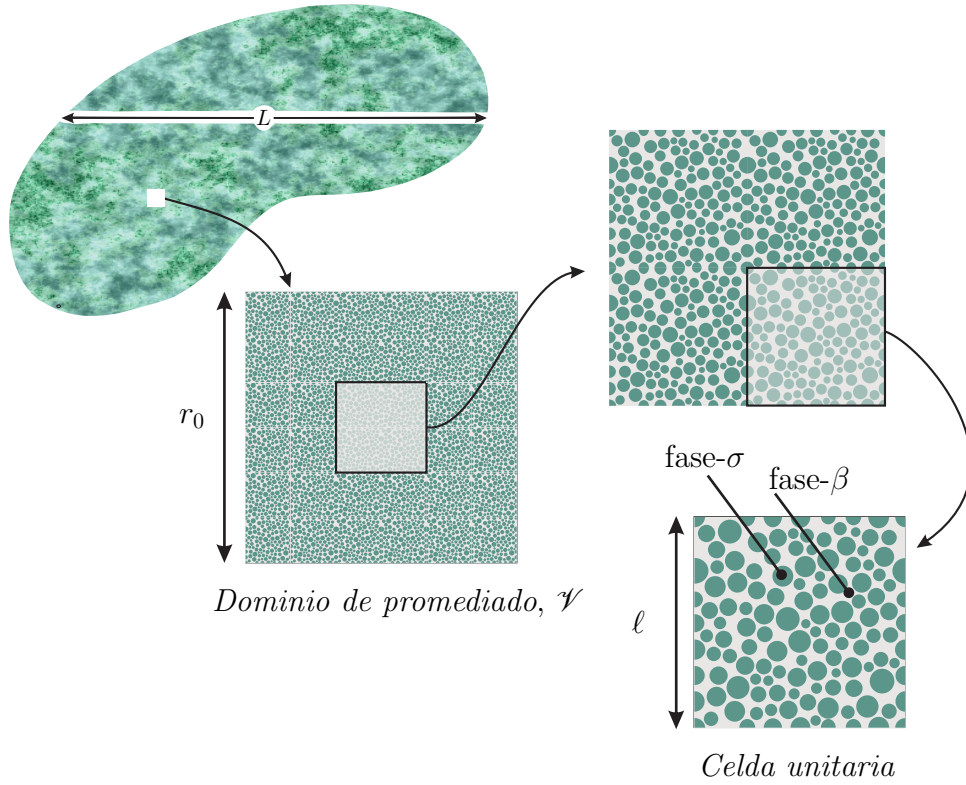


Figura 6.3: Esquema de una celda unitaria periódica con una geometría sencilla para representar a la fase sólida.

usando un método más corto como se muestra a continuación, el cual está basado en el método de homogenización.

Considere la representación del medio poroso mostrada en la figura 6.3 en la cual la geometría de la matriz sólida se representa como un conjunto de celdas unitarias periódicas. En estas celdas es razonable suponer que la velocidad es la misma en las superficies de entrada y salida de la celda unitaria; esto es, la velocidad se supone periódica; sin embargo, la misma suposición no puede aplicarse a la presión. Entonces, el problema de flujo en una celda periódica se escribe como sigue

$$\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} = 0, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.3.5a)$$

$$\rho \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{v} = -\nabla_{\mathbf{r}} \mathcal{P} + \mu \nabla_{\mathbf{r}}^2 \mathbf{v}, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.3.5b)$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.3.5c)$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{v}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3. \quad (6.3.5d)$$

En donde \mathbf{l}_i son los vectores de celda cuya magnitud es la longitud l de la celda unitaria. Para usar el método de homogenización, el primer paso es escribir el problema en forma adimensional, para ello se proponen las siguientes definiciones

$$\mathbf{r}^* = \frac{\mathbf{r}}{l}; \quad \mathbf{v}^* = \frac{\mathbf{v}}{v_{ref}}; \quad p^* = \frac{l^2 \mathcal{P}}{\mu v_{ref} L}; \quad \phi = \frac{l}{L}; \quad Re^* = \frac{\rho v_{ref} l}{\mu}. \quad (6.3.6)$$

La elección para la forma adimensional de la presión viene motivada por el gradiente de presión macroscópico como se discute en el ejercicio 6.2. Con base en estas definiciones, la forma adimensional de las ecuaciones (6.3.5) es

$$\nabla_{\mathbf{r}^*} \cdot \mathbf{v}^* = 0, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.3.7a)$$

$$Re^* \mathbf{v}^* \cdot \nabla_{\mathbf{r}^*} \mathbf{v}^* = -\frac{1}{\phi} \nabla_{\mathbf{r}^*} p^* + \nabla_{\mathbf{r}^*}^2 \mathbf{v}^*, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.3.7b)$$

$$\mathbf{v}^* = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.3.7c)$$

$$\mathbf{v}^*(\mathbf{r}^* + \mathbf{l}_i^*) = \mathbf{v}^*(\mathbf{r}^*), \quad i = 1, 2, 3. \quad (6.3.7d)$$

Como puede notarse, en las ecuaciones anteriores se usó la siguiente definición del operador gradiente adimensional referido a un sistema coordenado fijo

$$\nabla_{\mathbf{r}}^* = \ell \nabla_{\mathbf{r}}. \quad (6.3.8a)$$

Ciertamente, se pudo haber usado a L para adimensionar a este operador ya que el vector de posición \mathbf{r} puede usarse para localizar tanto a variables al nivel de escala microscópico como macroscópico. En contraste, el operador $\nabla_{\mathbf{x}}$ describe cambios *lentos*, es decir los cambios de espaciales a la escala macroscópica, mientras que $\nabla_{\mathbf{y}}$ describe los cambios *rápidos* que ocurren a la escala microscópica. Por ello, es razonable proponer las siguientes definiciones adimensionales

$$\nabla_{\mathbf{x}}^* = L \nabla_{\mathbf{x}}, \quad (6.3.8b)$$

$$\nabla_{\mathbf{y}}^* = \ell \nabla_{\mathbf{y}}. \quad (6.3.8c)$$

De esta forma, la descomposición dada en la ecuación (6.2.10) puede expresarse como sigue

$$\nabla_{\mathbf{r}}^* = \phi \nabla_{\mathbf{x}}^* + \nabla_{\mathbf{y}}^*. \quad (6.3.9)$$

A partir de este resultado se deduce que el operador laplaciano adimensional se escribe como

$$\nabla_{\mathbf{r}}^{*2} = \phi^2 \nabla_{\mathbf{x}}^{*2} + \phi (\nabla_{\mathbf{x}}^* \cdot \nabla_{\mathbf{y}}^* + \nabla_{\mathbf{y}}^* \cdot \nabla_{\mathbf{x}}^*) + \nabla_{\mathbf{y}}^{*2}. \quad (6.3.10)$$

Usando estas descomposiciones en las ecuaciones (6.3.7) se obtiene la siguiente forma del problema de flujo

$$\phi \nabla_{\mathbf{x}}^* \cdot \mathbf{v}^* + \nabla_{\mathbf{y}}^* \cdot \mathbf{v}^* = 0, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.3.11a)$$

$$\begin{aligned} \phi Re^* \mathbf{v}^* \cdot \nabla_{\mathbf{x}}^* \mathbf{v}^* + Re^* \mathbf{v}^* \cdot \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{v}^* &= -\nabla_{\mathbf{x}}^* p^* - \frac{1}{\phi} \nabla_{\mathbf{y}}^* p^* + \phi^2 \nabla_{\mathbf{x}}^{*2} \mathbf{v}^* \\ + \phi (\nabla_{\mathbf{x}}^* \cdot \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{v}^* + \nabla_{\mathbf{y}}^* \cdot \nabla_{\mathbf{x}}^* \mathbf{v}^*) + \nabla_{\mathbf{y}}^{*2} \mathbf{v}^*, &\quad \text{en la fase-}\beta, \end{aligned} \quad (6.3.11b)$$

$$\mathbf{v}^* = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.3.11c)$$

$$\mathbf{v}^*(\mathbf{r}^* + \mathbf{I}_i^*) = \mathbf{v}^*(\mathbf{r}^*), \quad i = 1, 2, 3. \quad (6.3.11d)$$

Siguiendo con los pasos del método de homogenización, en este momento es pertinente sustituir las siguientes expansiones

$$\mathbf{v}^* = \mathbf{v}_0^* + \phi \mathbf{v}_1^* + \dots, \quad (6.3.12a)$$

$$p^* = p_0^* + \phi p_1^* + \dots, \quad (6.3.12b)$$

en las ecuaciones (6.3.11) para obtener

$$\phi (\nabla_{\mathbf{x}}^* \cdot \mathbf{v}_0^* + \nabla_{\mathbf{y}}^* \cdot \mathbf{v}_1^*) + \nabla_{\mathbf{y}}^* \cdot \mathbf{v}_0^* + \dots = 0, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.3.13a)$$

$$\begin{aligned} \phi Re^* (\mathbf{v}_0^* \cdot \nabla_{\mathbf{x}}^* \mathbf{v}_0^* + \mathbf{v}_0^* \cdot \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{v}_1^* + \mathbf{v}_1^* \cdot \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{v}_0^*) + Re^* \mathbf{v}_0^* \cdot \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{v}_0^* &= -\nabla_{\mathbf{x}}^* p_0^* - \phi \nabla_{\mathbf{x}}^* p_1^* - \frac{1}{\phi} \nabla_{\mathbf{y}}^* p_0^* - \nabla_{\mathbf{y}}^* p_1^* \\ - \phi \nabla_{\mathbf{y}}^* p_2^* + \phi (\nabla_{\mathbf{x}}^* \cdot \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{v}_0^* + \nabla_{\mathbf{y}}^* \cdot \nabla_{\mathbf{x}}^* \mathbf{v}_0^*) + \nabla_{\mathbf{y}}^{*2} \mathbf{v}_0^* + \phi \nabla_{\mathbf{y}}^{*2} \mathbf{v}_1^* + \dots, &\quad \text{en la fase-}\beta, \end{aligned} \quad (6.3.13b)$$

$$\mathbf{v}_0^* + \phi \mathbf{v}_1^* + \dots = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.3.13c)$$

$$\mathbf{v}_0^*(\mathbf{r}^* + \mathbf{I}_i^*) + \phi \mathbf{v}_1^*(\mathbf{r}^* + \mathbf{I}_i^*) + \dots = \mathbf{v}_0^*(\mathbf{r}^*) + \phi \mathbf{v}_1^*(\mathbf{r}^*) + \dots, \quad i = 1, 2, 3. \quad (6.3.13d)$$

Como puede notarse, en las expresiones anteriores solo se escribieron términos hasta el orden de magnitud ϕ , los demás términos de la serie están contenidos en los puntos suspensivos. A partir de las ecuaciones anteriores se deducen las siguientes expresiones

Orden (ϕ^{-1})

$$\nabla_{\mathbf{y}}^* p_0^* = \mathbf{0}, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.3.14)$$

Orden (1)

$$\nabla_{\mathbf{y}}^* \cdot \mathbf{v}_0^* = 0, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.3.15a)$$

$$Re^* \mathbf{v}_0^* \cdot \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{v}_0^* = -\nabla_{\mathbf{x}}^* p_0^* - \nabla_{\mathbf{y}}^* p_1^* + \nabla_{\mathbf{y}}^{*2} \mathbf{v}_0^*, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.3.15b)$$

$$\mathbf{v}_0^* = \mathbf{0}; \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.3.15c)$$

$$\psi(\mathbf{r}^* + \mathbf{l}_i^*) = \psi(\mathbf{r}^*), \quad i = 1, 2, 3; \psi = \mathbf{v}_0^*, p_1^* \quad (6.3.15d)$$

Orden (ϕ)

$$\nabla_{\mathbf{x}}^* \cdot \mathbf{v}_0^* + \nabla_{\mathbf{y}}^* \cdot \mathbf{v}_1^* = 0, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.3.16a)$$

$$Re^* (\mathbf{v}_0^* \cdot \nabla_{\mathbf{x}}^* \mathbf{v}_0^* + \mathbf{v}_0^* \cdot \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{v}_1^* + \mathbf{v}_1^* \cdot \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{v}_0^*) = -\nabla_{\mathbf{x}}^* p_1^* - \nabla_{\mathbf{y}}^* p_2^* + \nabla_{\mathbf{x}}^* \cdot \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{v}_0^* + \nabla_{\mathbf{y}}^* \cdot \nabla_{\mathbf{x}}^* \mathbf{v}_0^* + \nabla_{\mathbf{y}}^{*2} \mathbf{v}_1^*, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.3.16b)$$

$$\mathbf{v}_1^* = \mathbf{0}; \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.3.16c)$$

$$\psi(\mathbf{r}^* + \mathbf{l}_i^*) = \psi(\mathbf{r}^*), \quad i = 1, 2, 3; \psi = \mathbf{v}_1^*, p_2^* \quad (6.3.16d)$$

A partir de la ecuación (6.3.14) se deduce que p_0^* es una variable macroscópica pues no depende de \mathbf{y} . Por su parte, \mathbf{v}_0 y p_1^* son variables microscópicas que resuelven el problema de valor a la frontera dado en las ecuaciones (6.3.15). Note que $-\nabla_{\mathbf{x}}^* p_0^*$ en la ecuación (6.3.15b) es el término fuente de este problema. En este momento vale la pena notar que la estructura matemática de este problema es prácticamente la misma que la del problema original dado en las ecuaciones (6.3.5), excepto por el término fuente. Más aún, en el ejercicio 6.3 se demuestran las siguientes equivalencias a partir de la descomposición espacial de Gray (1975)

$$\mathbf{v}_0 = \mathbf{v}, \quad (6.3.17a)$$

$$p_0 = \langle \mathcal{P} \rangle^\beta, \quad (6.3.17b)$$

$$p_1 \frac{\ell}{L} = \widetilde{\mathcal{P}}. \quad (6.3.17c)$$

Con base en la última relación, es razonable imponer la restricción promedio dada en la ecuación (6.2.22), la cual, adaptada a p_1 , se escribe como

$$\langle p_1 \rangle^\beta = 0. \quad (6.3.18)$$

Con esta condición el problema está bien planteado, sin embargo, debido a su naturaleza no lineal no es posible usar el principio de superposición para desarrollar su solución formal. Para atender esta situación, es conveniente seguir las ideas de Wood y Valdés-Parada (2013) y de Bottaro (2019) y proceder mediante formulaciones integrales basadas en la fórmula de Green.

Antes de continuar es pertinente definir a una función de Green como una función que se encarga de mapear la influencia de una fuente concentrada en un punto dado \mathbf{y}_0 sobre la variable dependiente localizada en \mathbf{y} (Haberman, 2012). El problema de las funciones de Green se construye a partir del problema original reemplazando cualquier fuente en las condiciones de frontera por su versión homogénea, mientras que en la ecuación diferencial se reemplaza la fuente por una delta de Dirac (ver ejercicio 3.1). En el caso del problema de flujo para la velocidad y la presión, al tener dos variables y dos ecuaciones diferenciales es natural pensar que existan dos funciones de Green, sin embargo, la delta de Dirac podría colocarse, en principio en cualquiera de las dos ecuaciones diferenciales. De acuerdo con Choi y Dong (2021), cuando la delta de Dirac se localiza en la ecuación de continuidad, el par de funciones de Green llevan a una solución para la presión, mientras que cuando esta función se ubica en la ecuación de movimiento, el par de funciones de Green se usan para determinar a la velocidad. Por el momento se centra la atención en este segundo

caso y se propone el siguiente problema adjunto de las funciones de Green

$$\nabla_{\mathbf{y}}^* \cdot \mathbf{G}_v^{ad} = \mathbf{0}, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.3.19a)$$

$$-Re^* \mathbf{v}_0^* \cdot \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{G}_v^{ad} = -\nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{g}_p^{ad} + \nabla_{\mathbf{y}}^{*2} \mathbf{G}_v^{ad} + \delta(\mathbf{y} - \mathbf{y}_0) \mathbf{I}, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.3.19b)$$

$$\mathbf{G}_v^{ad} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.3.19c)$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i), \quad i = 1, 2, 3, \psi = \mathbf{G}_v^{ad}, \mathbf{g}_p^{ad}, \quad (6.3.19d)$$

$$\mathbf{g}_p^{ad} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathbf{r} = \mathbf{r}_a. \quad (6.3.19e)$$

En las ecuaciones anteriores, \mathbf{G}_v^{ad} y \mathbf{g}_p^{ad} son el par de funciones de Green adjuntas asociadas al problema de la velocidad, además \mathbf{r}_a es un punto arbitrario en la fase fluida. Note que la ecuación (6.3.19b) es lineal y que el término inercial tiene el signo contrario al de la ecuación (6.3.15b). Este cambio de signo es normal al lidiar con problemas transitorios y con términos convectivos (Haberman, 2012) y es conveniente para el uso de la fórmula de Green como se muestra a continuación.

Ya que se desea relacionar a la velocidad (que es un vector) con la función de Green adjunta \mathbf{G}_v^{ad} (que es un tensor de segundo orden), es conveniente usar la fórmula de Green en la forma dada en la ecuación (2.6.6d). Tomando en cuenta la naturaleza solenoidal de \mathbf{v}_0^* y \mathbf{G}_v^{ad} , esta ecuación se expresa como

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{V}_{\beta}} \left[\mathbf{v}_0^* \cdot \left(Re^* \mathbf{v}_0^* \cdot \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{G}_v^{ad} - \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{g}_p^{ad} + \nabla_{\mathbf{y}}^{*2} \mathbf{G}_v^{ad} \right) - \left(-Re^* \mathbf{v}_0^* \cdot \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{v}_0^* - \nabla_{\mathbf{y}}^* p_1^* + \nabla_{\mathbf{y}}^{*2} \mathbf{v}_0^* \right) \cdot \mathbf{G}_v^{ad} \right] dV \\ & = \int_{\mathcal{A}_{\beta}} \left[\mathbf{v}_0^* \cdot \left(\mathbf{n} \cdot \left(-\mathbf{l}_{g_p}^{ad} + \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{G}_v^{ad} + \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{G}_v^{adT} \right) \right) - \mathbf{n} \cdot \left(-Re^* \mathbf{v}_0^* \mathbf{v}_0^* - \mathbf{l}_{p_1}^* + \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{v}_0^* + \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{v}_0^{*T} \right) \cdot \mathbf{G}_v^{ad} \right] dA. \end{aligned} \quad (6.3.20)$$

Ya que tanto \mathbf{v}_0^* como \mathbf{G}_v^{ad} satisfacen condiciones de frontera homogéneas, la ecuación anterior se reduce a

$$\int_{\mathcal{V}_{\beta}} \left[\mathbf{v}_0^* \cdot \left(Re^* \mathbf{v}_0^* \cdot \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{G}_v^{ad} - \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{g}_p^{ad} + \nabla_{\mathbf{y}}^{*2} \mathbf{G}_v^{ad} \right) - \left(-Re^* \mathbf{v}_0^* \cdot \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{v}_0^* - \nabla_{\mathbf{y}}^* p_1^* + \nabla_{\mathbf{y}}^{*2} \mathbf{v}_0^* \right) \cdot \mathbf{G}_v^{ad} \right] dV = \mathbf{0}. \quad (6.3.21)$$

Ahora bien, al sustituir las ecuaciones diferenciales correspondientes, resulta la siguiente expresión

$$\mathbf{v}_0^* = - \int_{\mathcal{V}_{\beta}} \nabla_{\mathbf{x}}^* p_0^* \cdot \mathbf{G}_v^{ad} dV. \quad (6.3.22)$$

O bien, ya que p_0^* es una variable macroscópica y puede considerarse constante en el dominio de integración, la ecuación anterior puede reformularse como sigue

$$\mathbf{v}_0^* = - \int_{\mathcal{V}_{\beta}} \mathbf{G}_v^{adT} dV \cdot \nabla_{\mathbf{x}}^* p_0^*. \quad (6.3.23)$$

Como lo explica Haberman (2012), el problema adjunto de las funciones de Green solo se utiliza con el fin de construir la solución, pero no es la versión final del problema que debe resolverse. Esta versión es la siguiente:

$$\nabla_{\mathbf{y}}^* \cdot \mathbf{G}_v = \mathbf{0}, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.3.24a)$$

$$Re^* \mathbf{v}_0^* \cdot \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{G}_v = -\nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{g}_p + \nabla_{\mathbf{y}}^{*2} \mathbf{G}_v + \delta(\mathbf{y} - \mathbf{y}_0) \mathbf{I}, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.3.24b)$$

$$\mathbf{G}_v = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.3.24c)$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i), \quad i = 1, 2, 3, \psi = \mathbf{G}_v, \mathbf{g}_p, \quad (6.3.24d)$$

$$\mathbf{g}_p = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathbf{r} = \mathbf{r}_a. \quad (6.3.24e)$$

Para encontrar la relación entre la función de Green adjunta y la nueva función de Green, se recurre a la fórmula de Green en la forma dada en la ecuación (2.6.6e), la cual adaptada a estas variables se escribe como sigue

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{V}_\beta} \left[\mathbf{G}_v^T \cdot \left(Re^* \mathbf{v}_0^* \cdot \nabla_y^* \mathbf{G}_v^{ad} - \nabla_y^* \mathbf{g}_p^{ad} + \nabla_y^{*2} \mathbf{G}_v^{ad} \right) - \left(-Re^* \mathbf{v}_0^* \cdot \nabla_y^* \mathbf{G}_v - \nabla_y^* \mathbf{g}_p + \nabla_y^{*2} \mathbf{G}_v \right)^T \cdot \mathbf{G}_v^{ad} \right] dV \\ &= \int_{\mathcal{A}_\beta} \left[\mathbf{G}_v^T \cdot \left(\mathbf{n} \cdot \left(-\mathbf{l} \mathbf{g}_p^{ad} + \nabla_y^* \mathbf{G}_v^{ad} + \nabla_y^* \mathbf{G}_v^{adT1} \right) \right) \right. \\ & \quad \left. - \left(\mathbf{n} \cdot \left(-Re^* \mathbf{v}_0^* \mathbf{G}_v - \mathbf{l} \mathbf{g}_p + \nabla_y^* \mathbf{G}_v + \nabla_y^* \mathbf{G}_v^{T1} \right) \right)^T \cdot \mathbf{G}_v^{ad} \right] dA. \end{aligned} \quad (6.3.25)$$

Sustituyendo las ecuaciones diferenciales y condiciones de frontera correspondientes, la ecuación anterior lleva a la siguiente identidad

$$\mathbf{G}_v^T = \mathbf{G}_v^{ad}. \quad (6.3.26)$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación (6.3.23), se obtiene que

$$\mathbf{v}_0^* = -\mathbf{D}^* \cdot \nabla_x^* p_0^*. \quad (6.3.27)$$

Para simplificar la notación, en la ecuación anterior se utilizó la siguiente definición

$$\mathbf{D}^* = \int_{\mathcal{V}_\beta} \mathbf{G}_v dV. \quad (6.3.28)$$

Note que el paso de integración se hace respecto a \mathbf{y}_0 para que el tensor \mathbf{D}^* solo dependa de \mathbf{y} . En el contexto del método del promedio volumétrico a esta variable se le denomina *variable de cerradura*. Para deducir el problema que resuelve esta variable solo hace falta aplicar el operador de integración de la ecuación anterior a las ecuaciones (6.3.24). Las ecuaciones resultantes constituyen el *problema de cerradura* y se expresan como sigue

$$\nabla_y^* \cdot \mathbf{D}^* = \mathbf{0}, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.3.29a)$$

$$Re^* \mathbf{v}_0^* \cdot \nabla_y^* \mathbf{D}^* = -\nabla_y^* \mathbf{d}^* + \nabla_y^{*2} \mathbf{D}^* + \mathbf{I}, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.3.29b)$$

$$\mathbf{D}^* = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.3.29c)$$

$$\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\psi}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i), \quad i = 1, 2, 3, \boldsymbol{\psi} = \mathbf{D}^*, \mathbf{d}^*, \quad (6.3.29d)$$

$$\langle \mathbf{d}^* \rangle^\beta = \mathbf{0}. \quad (6.3.29e)$$

En las ecuaciones anteriores se utilizó la siguiente definición

$$\mathbf{d}^* = \int_{\mathcal{V}_\beta} \mathbf{g}_p dV. \quad (6.3.30)$$

Note que $\mathbf{D}^* = \mathbf{D}/\ell^2$ y $\mathbf{d}^* = \mathbf{d}/\ell$. Antes de continuar, es importante mencionar que la forma dada en la ecuación (6.3.29b) no es la más conveniente, pues indica que es necesario resolver primero el problema de flujo y posteriormente sustituirlo en el problema de cerradura. Para resolver esta situación se sustituye la ecuación (6.3.27) en el término inercial de la ecuación (6.3.29b) para obtener

$$-Re e_{\nabla(\mathcal{P})^\beta} \cdot \mathbf{D}^{*T} \cdot \nabla_y^* \mathbf{D}^* = -\nabla_y^* \mathbf{d}^* + \nabla_y^{*2} \mathbf{D}^* + \mathbf{I}, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.3.31)$$

donde $Re = Re^* \|\nabla_x^* p_0^*\| = \rho \ell^3 \|\nabla(\mathcal{P})^\beta\| / \mu^2$ y $\mathbf{e}_{\nabla(\mathcal{P})^\beta}$ es el vector unitario dirigido en la dirección del gradiente de presión macroscópico y está definido como

$$\mathbf{e}_{\nabla(\mathcal{P})^\beta} = \frac{\nabla_x^* p_0^*}{\|\nabla_x^* p_0^*\|}. \quad (6.3.32)$$

Tomando en cuenta lo anterior y sustituyendo las definiciones dadas en las ecuaciones (6.3.6) y (6.3.8b), así como las identidades listadas en las ecuaciones (6.3.17), en la solución formal dada en la ecuación (6.3.27), se deduce la siguiente expresión para la velocidad del fluido a escala de poro

$$\mathbf{v} = -\frac{\mathbf{D}}{\mu} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle \mathcal{P} \rangle^{\beta}. \quad (6.3.33)$$

Para obtener el modelo macroscópico solo es necesario aplicar el operador de promedio superficial en ambos lados de la ecuación anterior. La ecuación resultante se expresa como sigue

$$\langle \mathbf{v} \rangle = -\frac{\mathbf{H}}{\mu} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle \mathcal{P} \rangle^{\beta}, \quad (6.3.34)$$

donde el tensor de permeabilidad aparente \mathbf{H} se define como

$$\mathbf{H} = \langle \mathbf{D} \rangle. \quad (6.3.35)$$

El resultado dado en la ecuación (6.3.34) fue deducido por Whitaker (1996) usando el método del promedio volumétrico y ha sido deducido también por el método de homogenización (ver por ejemplo, Auriault y col., 2007). Más aún, Whitaker (1996) propuso hacer el siguiente cambio de variables:

$$\mathbf{H}^{-1} = \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{F} + \mathbf{K}^{-1}, \quad (6.3.36)$$

donde \mathbf{K} es el tensor de permeabilidad intrínseca y \mathbf{F} es el tensor de corrección de Forchheimer. Para usar este cambio de variables se hace el producto punto en ambos lados de la ecuación (6.3.34) con el tensor \mathbf{H}^{-1} para obtener

$$\mathbf{H}^{-1} \cdot \langle \mathbf{v} \rangle = -\frac{\mathbf{I}}{\mu} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle \mathcal{P} \rangle^{\beta}. \quad (6.3.37)$$

Sustituyendo en la ecuación anterior la descomposición dada en la ecuación (6.3.36) resulta que

$$\mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{F} \cdot \langle \mathbf{v} \rangle + \mathbf{K}^{-1} \cdot \langle \mathbf{v} \rangle = -\frac{\mathbf{I}}{\mu} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle \mathcal{P} \rangle^{\beta}. \quad (6.3.38)$$

Por último, se toma ahora el producto punto en ambos lados de esta ecuación con el tensor de permeabilidad intrínseca y se obtiene la siguiente expresión

$$\langle \mathbf{v} \rangle = -\frac{\mathbf{K}}{\mu} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle \mathcal{P} \rangle^{\beta} - \mathbf{F} \cdot \langle \mathbf{v} \rangle. \quad (6.3.39)$$

Esta es la *ecuación de Darcy-Forchheimer* ya que el primer término corresponde a la ley de Darcy y es independiente de los esfuerzos inerciales en el fluido y el segundo término es la corrección de Forchheimer, el cual exhibe una dependencia no trivial con la velocidad a escala de poro. Para el caso de flujo reptante, la corrección de Forchheimer es cero y $\mathbf{H} \rightarrow \mathbf{K}$. De esta forma, se recupera la ley de Darcy:

$$\langle \mathbf{v} \rangle = -\frac{\mathbf{K}}{\mu} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle \mathcal{P} \rangle^{\beta}. \quad (6.3.40)$$

Para predecir el tensor de permeabilidad intrínseca basta con fijar $Re^* = 0$ en la ecuación (6.3.29b) y resolver el problema de valor a la frontera resultante.

De esta forma, el modelo macroscópico se compone de la ecuación de continuidad dada en la ecuación (6.3.4) y por la ecuación (6.3.34) que representa la forma macroscópica del principio de conservación de cantidad de movimiento. Existen varias modificaciones a la ley de Darcy como su adaptación al flujo multifásico (Blunt, 2017), a flujos no newtonianos (Auriault y Bottaro, 2020), flujo en estado transitorio (Lasseux y col., 2019), entre muchas otras. En los siguientes párrafos se discute acerca de la solución del problema de cerradura.

Ejercicio 6.2 — Orden de magnitud del gradiente de presión. Presente argumentos bajo los cuales se justifican los siguientes estimados de orden de magnitud

$$\nabla_{\mathbf{r}} \mathcal{P} = \mathbf{O} \left(\frac{\Delta \langle \mathcal{P} \rangle^\beta}{L} \right), \quad (6.3.41a)$$

$$\mu \nabla_{\mathbf{r}}^2 \mathbf{v} = \mathbf{O} \left(\frac{\mu v_{ref}}{\ell^2} \right). \quad (6.3.41b)$$

Ya que en el análisis presentado en esta sección, los esfuerzos viscosos son del mismo orden de magnitud que el gradiente de presión, deduzca el orden de magnitud del cambio de presión macroscópico $(\Delta \langle \mathcal{P} \rangle^\beta)$ y utilice este valor como presión de referencia para adimensionar a la presión.

Ejercicio 6.3 — Equivalencia con variables en el promedio volumétrico. El propósito de este objetivo es deducir la relación entre las variables de la expansión en series de potencias con las que resultan en el contexto del promedio volumétrico. Para ello, utilice las definiciones dadas en la ecuaciones (6.3.6) y (6.3.8) para expresar a la ecuación (6.3.15b) como sigue

$$\rho \mathbf{v}_0 \cdot \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{v}_0 = -\nabla_{\mathbf{x}} p_0 - \frac{\ell}{L} \nabla_{\mathbf{y}} p_1 + \nabla_{\mathbf{y}}^2 \mathbf{v}_0, \quad \text{en la fase-}\beta. \quad (6.3.42)$$

Posteriormente, aplique la descomposición de Gray (1975) dada en la ecuación (6.2.20) al gradiente de presión para deducir la siguiente expresión

$$\nabla_{\mathbf{r}} \mathcal{P} = \nabla_{\mathbf{x}} \langle \mathcal{P} \rangle^\beta + \nabla_{\mathbf{y}} \widetilde{\mathcal{P}}. \quad (6.3.43)$$

Sustituya este resultado en la ecuación (6.3.5b) y a partir de la ecuación resultante deduzca las equivalencias dadas en las ecuaciones (6.3.17).

6.3.3 Solución del problema de cerradura

Solución numérica del problema de cerradura con inercia

1. Haga click en *Model wizard* y posteriormente elija 3D en la dimensión espacial.
2. Seleccione *Laminar flow* en el menú de física. Presione el botón *Add* y posteriormente el botón *Study* para posteriormente elegir un estudio en estado estacionario y presione el botón *Done*.
3. En *Parameters* escriba: e y de nuevo fije su valor en 0.8; posteriormente, defina a ls como

$$(3*(1-e)/(4*pi))^{(1/3)}$$

Además, defina a *Re* y fije el valor de 1000. En problema se resolverá para el caso en el que el flujo está alineado con el eje x.

4. Haga click derecho en *Geometry 1/Block* y fije su centro en el origen.
5. Haga click derecho en *Geometry 1/Sphere*, e indique que su radio sea ls.
6. Haga click derecho en *Geometry 1/Booleans and partitions/Difference* y sustraiga al bloque la esfera.
7. Haga click en *Definitions/Nonlocal couplings/Average* y seleccione el dominio 1. Establezca que el nombre del operador es av.
8. En *Laminar Flow/Fluid Properties 1* y defina que la densidad es Re y la viscosidad es 1.
9. Haga click derecho en *Laminar Flow/Volume force*, seleccione al dominio 1 y especifique que las componentes del vector de fuerza volumétrica son (1,0,0).
10. En *Laminar Flow/Periodic Flow Condition* elija a las fronteras 1 y 14. Repita el paso anterior para las fronteras 2 y 5 y por último para las fronteras 3 y 4.

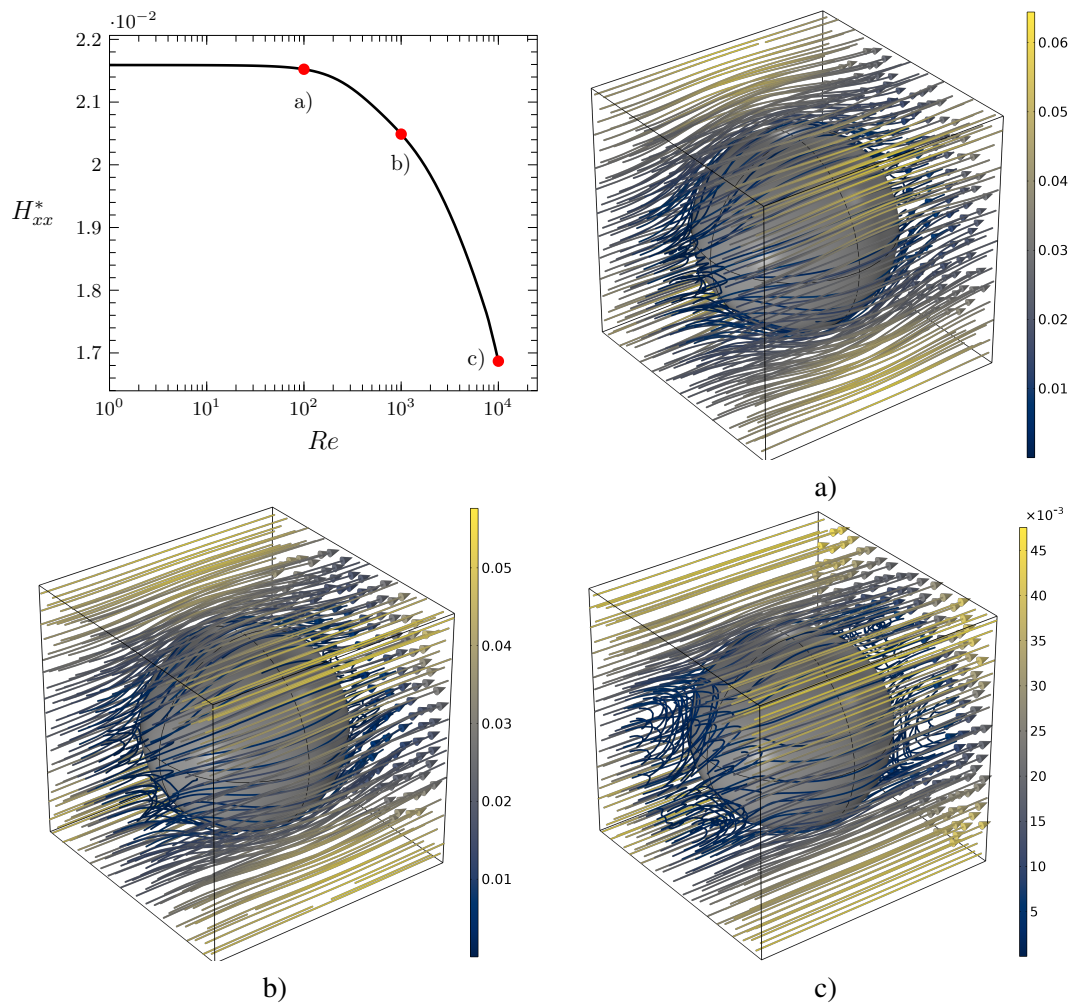


Figura 6.4: Dependencia de la componente xx del tensor de permeabilidad aparente contra el número de Reynolds para una porosidad de 0.8. Además, se muestran las líneas de corriente de la variable de cerradura para: a) $Re = 10^2$, b) $Re = 10^3$ y c) $Re = 10^4$. En todos los casos las barras de color están referidas a la magnitud de la variable de cerradura.

11. En *laminar Flow/Global/Global Constraint* y defina que expresión de la restricción es $av(p)$ y en *Constraint force expression* escriba $test(av(p))$.
12. Haga una malla normal.
13. Haga click derecho en *Study 1/Parametric Sweep* y elija como parámetro al número de Reynolds en *Range* elija como entrada *Logarithmic* y especifique en *Start* 1, en *Stop* $1e4$ y en *Steps per decade* escriba 10. Presione el botón *Add*. Presione el botón *Compute*. **Nota:** se recomienda usar un resolvidor directo.

Al seguir los pasos anteriores se obtiene que las componentes fuera de la diagonal del tensor de permeabilidad aparente son mucho menores que sus contrapartes en la diagonal. Por ello, en la figura 6.4 se presentan únicamente las predicciones de la dependencia de H_{xx}^* con el número de Reynolds así como las líneas de corriente de la variable de cerradura. Como puede notarse, H_{xx}^* disminuye al aumentar el número de Reynolds; en otras palabras, el medio poroso es menos permeable al incrementar el número de Reynolds, lo cual es consistente con las observaciones reportadas por Lasseux y col. (2011). Más aún, las líneas de corriente se vuelven más planas al aumentar el número de Reynolds y las zonas de recirculación son más evidentes conforme se incrementan los esfuerzos inerciales. Es debido a estas zonas de recirculación que disminuye la permeabilidad aparente.

Ejercicio 6.4 — Problema de cerradura sin inercia. Vuelva a resolver el problema de cerradura pero ahora fijando $Re = 0$ para diferentes valores de la porosidad. Compare sus resultados con las predicciones de la ecuación de [Chai y col. \(2011\)](#)

$$K^* = \frac{1}{8\pi} \left[-\ln(1 - \varepsilon) - \frac{3}{2} + 2(1 - \varepsilon) - \frac{(1 - \varepsilon)^2}{2} \right]. \quad (6.3.44)$$

Ejercicio 6.5 — Influencia de la geometría. El concepto de celda unitaria no restringe a que dentro de ella los obstáculos deban ser tan sencillos como la esfera considerada en esta sección. Para explorar el efecto de la geometría, dibuje una serie de obstáculos en forma aleatoria y resuelva el problema de cerradura para diferentes números de Reynolds. Compare sus resultados con los que corresponden a la geometría sencilla usada aquí. ¿Bajo qué condiciones tiene más relevancia la geometría de los obstáculos usados en la celda unitaria?

6.4 Convección, difusión y reacción en medios porosos

6.4.1 Promediado

Considere la transferencia de masa de una especie química, la cual se encuentra diluida en la fase fluida (que es newtoniana e incompresible) que satura el espacio hueco de un medio poroso rígido y homogéneo. En la interfase sólido-fluido suponga que se lleva a cabo una reacción de primer orden. Las ecuaciones a escala de poro que gobiernan este proceso son

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} c_A = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} c_A), \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.4.1a)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} c_A = k c_A, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.4.1b)$$

donde \mathbf{v} es la velocidad del fluido a escala de poro, \mathcal{D} es el coeficiente de difusión molecular y k es la constante de reacción de primer orden. Se desea desarrollar un modelo macroscópico de medio efectivo para esta situación física usando el método del promedio volumétrico ([Whitaker, 1999](#)). Por supuesto, el análisis también puede llevarse a cabo usando el método de homogenización para distintos regímenes de transporte y reacción como lo explica con detalle [Mauri \(1991\)](#).

El modelo promedio no cerrado puede obtenerse al menos de dos maneras: una forma es aplicando el operador de promediado superficial a la ecuación de conservación en la escala microscópica (ver ejercicio 6.6). Otra forma es partir de la forma integral del principio de conservación de masa de una especie, la cual se expresa en forma molar como sigue:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_{\beta}} c_A dV + \int_{\mathcal{A}_{\beta}} \mathbf{n} \cdot c_A (\mathbf{v}_A - \mathbf{w}_{\beta}) dA = \int_{\mathcal{V}_{\beta}} R_A dV, \quad (6.4.2)$$

donde \mathcal{V}_{β} se refiere al espacio ocupado por la fase fluida dentro de la región de promediado \mathcal{V} . Si se supone que el medio poroso es rígido y homogéneo, entonces \mathcal{V}_{β} es una región fija. Además, tomando en cuenta que no hay una reacción homogénea, la ecuación anterior se reduce a

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle_{\beta}}{\partial t} + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta}} \mathbf{n} \cdot c_A \mathbf{v}_A dA = 0, \quad (6.4.3)$$

donde además se dividieron ambos lados de la ecuación entre V y la definición del promedio superficial dada en la ecuación (6.2.3). La superficie \mathcal{A}_{β} de la región de promediado se puede descomponer en la interfase sólido fluido y la superficie de entrada y salida; esto es

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle_{\beta}}{\partial t} + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta eys}} \mathbf{n}_{\beta,e} \cdot c_A \mathbf{v}_A dA + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot c_A \mathbf{v}_A dA = 0. \quad (6.4.4)$$

El teorema del promediado espacial indica que (ver ecuación 2.6.24),

$$\frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\text{eys}}} \mathbf{n}_{\beta,e} \cdot c_A \mathbf{v}_A dA = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle c_A \mathbf{v}_A \rangle_{\beta}. \quad (6.4.5)$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación (6.4.4), tomando en cuenta la descomposición de la velocidad de una especie en su velocidad difusiva (\mathbf{u}_A) y convectiva (\mathbf{v}), da como resultado la siguiente expresión

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle_{\beta}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle c_A \mathbf{u}_A \rangle_{\beta} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle c_A \mathbf{v} \rangle_{\beta} + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot c_A \mathbf{u}_A dA + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot c_A \mathbf{v} dA = 0. \quad (6.4.6)$$

Sustituyendo a la ley de Fick ($c_A \mathbf{u}_A = -\mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} c_A$) y tomando en cuenta la condición de no deslizamiento en $\mathcal{A}_{\beta\sigma}$ la ecuación anterior se reduce a

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle_{\beta}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle c_A \mathbf{v} \rangle_{\beta} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} c_A \rangle_{\beta} + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} c_A dA. \quad (6.4.7)$$

Si ahora se sustituye la condición de frontera interfacial, el resultado es

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle_{\beta}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle c_A \mathbf{v} \rangle_{\beta} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} c_A \rangle_{\beta} - \frac{k}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} c_A dA. \quad (6.4.8)$$

Usando la relación de Dupuit-Forchheimer y aplicando de nuevo el teorema del promediado espacial en el término difusivo se obtiene la siguiente expresión

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle_{\beta}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle c_A \mathbf{v} \rangle_{\beta} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[\mathcal{D} \left(\nabla_{\mathbf{x}} \langle c_A \rangle_{\beta} + \frac{1}{V_{\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} c_A dA \right) \right] - \frac{k}{V_{\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} c_A dA, \quad (6.4.9)$$

donde se supuso constante el coeficiente de difusión molecular, \mathcal{D} . Para avanzar en los desarrollos es conveniente sustituir la descomposición espacial de Gray (1975)

$$c_A = \langle c_A \rangle_{\beta} + \tilde{c}_A, \quad (6.4.10)$$

en los términos integrales de la ecuación (6.4.9) (los cuales sirven como filtros de información de la microescala) para obtener:

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle_{\beta}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle c_A \rangle_{\beta} \langle \mathbf{v} \rangle_{\beta} \right) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \tilde{c}_A \mathbf{v} \rangle_{\beta} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[\mathcal{D} \left(\nabla_{\mathbf{x}} \langle c_A \rangle_{\beta} + \frac{1}{V_{\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{c}_A dA \right) \right] - k a_v \varepsilon^{-1} \langle c_A \rangle_{\beta} - \frac{k}{V_{\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \tilde{c}_A dA. \quad (6.4.11)$$

En donde $a_v = A_{\beta\sigma}/V$; además, para obtener esta última ecuación se tomó en cuenta que

$$\frac{1}{V_{\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \langle c_A \rangle_{\beta} dA = \frac{\langle c_A \rangle_{\beta}}{V_{\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} dA = \mathbf{0}. \quad (6.4.12)$$

La última igualdad se demuestra en el ejercicio 6.7, lo cual se sustenta en la suposición de un medio poroso espacialmente homogéneo. En este momento vale la pena reflexionar sobre los modelos dados en las ecuaciones (6.4.9) y (6.4.11). La primera ecuación no posee suposiciones adicionales a las impuestas en el planteamiento del modelo en la escala de poro y cada término integral cumple el

rol de *filtro* de información proveniente de dicha escala. Así, pueden identificarse filtros *convectivo*, *difusivo* y *reactivo*. Como puede notarse, cada uno de estos filtros contiene a la concentración. Si dichos valores se obtienen de experimentos de laboratorio o a partir de simulaciones numéricas a escala de poro (experimentos *in silico*), se puede tener una versión cerrada del modelo promedio. Sin embargo, esta versión será particular para las condiciones experimentales específicas consideradas. Bajo este punto de vista, el modelo resultante puede clasificarse como un modelo *a posteriori*. Con la intención de obtener un modelo predictivo (o *a priori*) es que se utilizó la descomposición de Gray (1975) para así llegar a la ecuación (6.4.11), la cual se denota de aquí en adelante como el *modelo promedio no cerrado*. Esta ecuación, de entrada solo parece traspasar el problema de predecir la concentración a predecir sus desviaciones espaciales. Sin embargo, es en la predicción de las desviaciones espaciales que es razonable imponer varias suposiciones, las cuales si bien le pueden restar generalidad al modelo resultante, le permiten alcanzar un carácter predictivo. Este proceso de *cerradura* se describe en los párrafos siguientes y puede resumirse en los siguientes tres pasos: 1) Deducción de las ecuaciones gobernantes de las variables de desviación, 2) Simplificación del problema a partir de la imposición de suposiciones y restricciones espacio-temporales y 3) Deducción de su solución formal. Este proceso de cerradura se muestra con detalle en los siguientes párrafos.

Ejercicio 6.6 — Deducción alternativa del modelo no cerrado. En este ejercicio se busca deducir en modelo promedio dado en la ecuación (6.4.9) a partir de las ecuaciones que gobiernan el transporte en la escala microscópica. Para ello, aplique el operador de promedio superficial a la ecuación (6.4.1a), utilice dos veces el teorema del promediado espacial y considere la condición de frontera interfacial, así como la relación de Dupuit-Forchheimer para recuperar el resultado deseado. ■

Ejercicio 6.7 — Demostración de la ecuación (6.4.12). Partiendo del teorema del promediado espacial aplicado a la unidad, demuestre que se deduce la siguiente identidad:

$$\frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} dA = -\nabla \varepsilon. \quad (6.4.13)$$

Argumente bajo qué condiciones el lado derecho de la ecuación anterior es nulo. ■

6.4.2 Cerradura

Como se describió arriba, el primer paso del proceso de cerradura consiste en la deducción de la ecuación diferencial y condiciones de frontera que gobiernan a las desviaciones espaciales de la concentración. Con este fin, se utiliza la descomposición espacial de Gray (1975) en cada término de la ecuación (6.4.1a) para obtener

$$\frac{\partial \tilde{c}_A}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{c}_A + \frac{\partial \langle c_A \rangle^\beta}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle c_A \rangle^\beta = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{c}_A) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathcal{D} \nabla_{\mathbf{x}} \langle c_A \rangle^\beta), \quad \text{en la fase-}\beta. \quad (6.4.14)$$

O bien, sustituyendo a la ecuación (6.4.11)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{c}_A}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{c}_A - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\langle c_A \rangle^\beta \langle \mathbf{v} \rangle^\beta) - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \tilde{c}_A \mathbf{v} \rangle^\beta + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle c_A \rangle^\beta &= \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{c}_A) \\ - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\frac{\mathcal{D}}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{c}_A dA \right) + k a_v \varepsilon^{-1} \langle c_A \rangle^\beta + \frac{k}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \tilde{c}_A dA, &\quad \text{en la fase-}\beta. \end{aligned} \quad (6.4.15)$$

Ya que el fluido se supuso incompresible y aplica la condición de no deslizamiento en $\mathcal{A}_{\beta\sigma}$, se tiene, a partir de los desarrollos presentados en la sección anterior, que $\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \mathbf{v} \rangle^\beta = 0$. Por lo tanto,

aplica la siguiente identidad

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle c_A \rangle^\beta \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \right) = \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle c_A \rangle^\beta. \quad (6.4.16)$$

Sustituyendo esta expresión en la ecuación (6.4.15), tomando en cuenta que $\tilde{\mathbf{v}} = \mathbf{v} - \langle \mathbf{v} \rangle^\beta$, se obtiene la siguiente ecuación diferencial

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{c}_A}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{c}_A + \tilde{\mathbf{v}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle c_A \rangle^\beta - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \tilde{c}_A \mathbf{v} \rangle^\beta &= \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{c}_A) \\ - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\frac{\mathcal{D}}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{c}_A dA \right) + ka_v \varepsilon^{-1} \langle c_A \rangle^\beta + \frac{k}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \tilde{c}_A dA, &\text{ en la fase-}\beta. \end{aligned} \quad (6.4.17)$$

Con la intención de simplificar esta ecuación, es conveniente comparar los estimados de órdenes de magnitud de los términos de transporte convectivo y difusivo locales y no locales; estos estimados son:

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{c}_A = \mathbf{O} \left(\frac{\tilde{c}_A v}{\ell} \right), \quad (6.4.18a)$$

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \tilde{c}_A \mathbf{v} \rangle^\beta = \mathbf{O} \left(\frac{\tilde{c}_A v}{L} \right), \quad (6.4.18b)$$

$$\nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{c}_A) = \mathbf{O} \left(\frac{\mathcal{D} \tilde{c}_A}{\ell^2} \right), \quad (6.4.18c)$$

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\frac{\mathcal{D}}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{c}_A dA \right) = \mathbf{O} \left(\frac{\mathcal{D} \tilde{c}_A}{\ell L} \right). \quad (6.4.18d)$$

En las ecuaciones (6.4.18a) y (6.4.18b), $v = \mathbf{O}(v)$. De esta forma, con base en la restricción de escala $\ell \ll L$, es razonable suponer que

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \tilde{c}_A \mathbf{v} \rangle^\beta \ll \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{c}_A; \quad \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\frac{\mathcal{D}}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{c}_A dA \right) \ll \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{c}_A). \quad (6.4.19)$$

Entonces, la ecuación (6.4.17) se reduce a

$$\frac{\partial \tilde{c}_A}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{c}_A + \tilde{\mathbf{v}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle c_A \rangle^\beta = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{c}_A) + ka_v \varepsilon^{-1} \langle c_A \rangle^\beta + \frac{k}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \tilde{c}_A dA, \quad \text{en la fase-}\beta. \quad (6.4.20)$$

Para determinar las condiciones bajo las cuales es posible suponer un estado cuasi-estacionario es conveniente comparar los estimados de orden de magnitud de los términos homogéneos¹ de la ecuación diferencial anterior. Los estimados de orden de magnitud de los términos de acumulación y reacción son

$$\frac{\partial \tilde{c}_A}{\partial t} = \mathbf{O} \left(\frac{\tilde{c}_A}{t^*} \right), \quad (6.4.21a)$$

$$\frac{k}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \tilde{c}_A dA = \mathbf{O} \left(\frac{k \tilde{c}_A}{\ell} \right), \quad (6.4.21b)$$

¹Un término homogéneo es todo aquel que contiene a la variable dependiente o a sus derivadas.

los cuales, junto con los estimados dados en las ecuaciones (6.4.18a) y (6.4.18c), llevan a la siguiente restricción temporal

$$\frac{\ell^2/\mathcal{D}}{1 + \frac{v\ell}{\mathcal{D}} + \frac{k\ell}{\mathcal{D}}} \ll t^*. \quad (6.4.22)$$

Como puede notarse, esta restricción es más fácil de satisfacer bajo condiciones en las que el transporte convectivo sea mucho mayor que el difusivo ($v\ell \gg \mathcal{D}$) y cuando la tasa de consumo de la especie sea mucho mayor que la tasa de difusión ($k\ell \gg \mathcal{D}$). Por ello, una forma más exigente de la desigualdad anterior corresponde al caso en el que el transporte por difusión sea del mismo orden de magnitud, o incluso mayor, que el transporte por convección y que el consumo por reacción. De esta forma, es conveniente considerar a la desigualdad anterior para condiciones en las que $\mathbf{O}\left(\frac{v\ell}{\mathcal{D}}\right) \leq 1$ y $\mathbf{O}\left(\frac{k\ell}{\mathcal{D}}\right) \leq 1$, lo cual permite expresarla como

$$\frac{\ell^2}{\mathcal{D}} \ll t^*. \quad (6.4.23)$$

Esta restricción indica que cuando el tiempo característico del proceso sea mucho mayor que el tiempo característico de la difusión, es razonable considerar el problema de las desviaciones en estado cuasiestacionario. Bajo estas condiciones, la ecuación diferencial (6.4.20) se reduce a

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{c}_A + \underbrace{\tilde{\mathbf{v}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle c_A \rangle^\beta}_{\text{fuente}} = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{c}_A) + \underbrace{ka_v \varepsilon^{-1} \langle c_A \rangle^\beta}_{\text{fuente}} + \frac{k}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \tilde{c}_A dA, \quad \text{en la fase-}\beta. \quad (6.4.24a)$$

La cual está sujeta a la siguiente condición de frontera interfacial, que resulta de usar la descomposición espacial de Gray (1975) en la ecuación (6.4.1b)

$$-\mathbf{n} \cdot \mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{c}_A = \underbrace{\mathbf{n} \cdot \mathcal{D} \nabla_{\mathbf{x}} \langle c_A \rangle^\beta}_{\text{fuente}} + \underbrace{k \langle c_A \rangle^\beta}_{\text{fuente}}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}. \quad (6.4.24b)$$

Por último, el planteamiento del problema se completa con las condiciones de periodicidad, las cuales se imponen en las fronteras de la celda unitaria

$$\tilde{c}_A(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \tilde{c}_A(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3, \quad (6.4.24c)$$

y con la restricción para los campos de las desviaciones espaciales de la concentración

$$\langle \tilde{c}_A \rangle^\beta = 0. \quad (6.4.24d)$$

Dada la linealidad del problema, es posible expresar su solución formal como sigue (ver ejercicio 6.8)

$$\tilde{c}_A = \mathbf{b} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle c_A \rangle^\beta + s \langle c_A \rangle^\beta. \quad (6.4.25)$$

En donde \mathbf{b} y s son variables de cerradura y son, a su vez, integrales de la función de Green asociada a este problema. Note que esta expresión es una muestra de la linealidad del problema dado en las ecuaciones (6.4.24), ya que exhibe la superposición resultante por las fuentes del problema. Al sustituir la ecuación anterior en las ecuaciones (6.4.24), resultan los siguientes dos problemas de cerradura:

Problema-I

$$\tilde{\mathbf{v}} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{b} = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{b}) + \frac{k}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{b} dA, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.4.26a)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{b} = \mathbf{n} \mathcal{D} + k\mathbf{b}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.4.26b)$$

$$\mathbf{b}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{b}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3, \quad (6.4.26c)$$

$$\langle \mathbf{b} \rangle^\beta = \mathbf{0}. \quad (6.4.26d)$$

Problema-II

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} s = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} s) + ka_v \varepsilon^{-1} + \frac{k}{V_{\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} s \, dA, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.4.27a)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} s = ks + k, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.4.27b)$$

$$s(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = s(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3, \quad (6.4.27c)$$

$$\langle s \rangle^{\beta} = 0. \quad (6.4.27d)$$

Ejercicio 6.8 — Deducción de la solución formal del problema de las desviaciones espaciales. Para deducir la solución formal del problema de las desviaciones espaciales de la concentración comience por considerar el siguiente problema de la función de Green:

$$-\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} G = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} G) + \frac{k}{V_{\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} G \, dA + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.4.28a)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} G = kG, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.4.28b)$$

$$G(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = G(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3, \quad (6.4.28c)$$

$$\langle G \rangle^{\beta} = 0. \quad (6.4.28d)$$

Utilice la fórmula de Green dada en la siguiente forma:

$$\int_{\mathcal{V}_{\beta}} [\tilde{c}_A \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} G) - G \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{c}_A)] \, dV = \int_{\mathcal{A}_{\beta}} \mathbf{n} \cdot (\tilde{c}_A \mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} G - G \mathcal{D} \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{c}_A) \, dA, \quad (6.4.29)$$

y lleve a cabo los pasos algebraicos para demostrar que la solución formal del problema está dada por la ecuación (6.4.25), en donde las variables de cerradura \mathbf{b} y s son de hecho integrales de la función de Green como lo anticipó Valdés-Parada (2010). ■

6.4.3 Modelo cerrado

Sustituyendo la solución formal dada en la ecuación (6.4.25) en el modelo no cerrado dado en la ecuación (6.4.11) da como resultado la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle c_A \rangle^{\beta}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\langle c_A \rangle^{\beta} \langle \mathbf{v} \rangle^{\beta}) &= \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left\{ \left[\mathcal{D} \left(\mathbf{1} + \frac{1}{V_{\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b} \, dA \right) - \langle \mathbf{v} \mathbf{b} \rangle^{\beta} \right] \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle c_A \rangle^{\beta} \right\} \\ + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[\left(\frac{\mathcal{D}}{V_{\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} s \, dA - \langle s \mathbf{v} \rangle^{\beta} \right) \langle c_A \rangle^{\beta} \right] &- \frac{k}{V_{\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{b} \, dA \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle c_A \rangle^{\beta} - \frac{k}{V_{\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} (s+1) \, dA \langle c_A \rangle^{\beta}. \end{aligned} \quad (6.4.30)$$

Para simplificar esta ecuación, es conveniente considerar los siguientes estimados de órdenes de magnitud, los cuales resultan de examinar los problemas de cerradura dados en las ecuaciones (6.4.26) y (6.4.27)

En la interfase sólido-fluido

$$\mathbf{b} = \mathbf{O} \left(\frac{\ell}{1 + k\ell/\mathcal{D}} \right), \quad (6.4.31a)$$

$$s = \mathbf{O} \left(\frac{k\ell/\mathcal{D}}{1 + k\ell/\mathcal{D}} \right). \quad (6.4.31b)$$

En la fase fluida

$$\mathbf{b} = \mathbf{O} \left(\frac{\frac{v\ell}{\mathcal{D}}}{1 + \frac{v\ell}{\mathcal{D}} + \frac{k\ell}{\mathcal{D}}} \right), \quad (6.4.32a)$$

$$s = \mathbf{O} \left(\frac{k\ell/\mathcal{D}}{1 + \frac{v\ell}{\mathcal{D}} + \frac{k\ell}{\mathcal{D}}} \right). \quad (6.4.32b)$$

De esta forma, es posible proponer los siguientes estimados de orden de magnitud

$$\frac{k}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{b} \, dA \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle c_A \rangle^\beta = \mathbf{O} \left(\frac{k \langle c_A \rangle^\beta}{(1 + k\ell/\mathcal{D})L} \right), \quad (6.4.33a)$$

$$\frac{k}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} (s+1) \, dA \langle c_A \rangle^\beta = \mathbf{O} \left(\frac{k \langle c_A \rangle^\beta}{\ell} \right), \quad (6.4.33b)$$

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[\left(\frac{\mathcal{D}}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} s \, dA - \langle s\mathbf{v} \rangle^\beta \right) \langle c_A \rangle^\beta \right] = \mathbf{O} \left(\frac{k \langle c_A \rangle^\beta}{L} \right). \quad (6.4.33c)$$

Entonces, con base en la restricción de escala $\ell \ll L$, se proponen las siguientes simplificaciones

$$\frac{k}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{b} \, dA \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle c_A \rangle^\beta \ll \frac{k}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} (s+1) \, dA, \quad (6.4.34a)$$

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[\left(\frac{\mathcal{D}}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} s \, dA - \langle s\mathbf{v} \rangle^\beta \right) \langle c_A \rangle^\beta \right] \ll \frac{k}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} (s+1) \, dA. \quad (6.4.34b)$$

Bajo estas condiciones el modelo cerrado se reduce a

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle^\beta}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle c_A \rangle^\beta \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \right) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\mathbf{D}^* \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle c_A \rangle^\beta \right) - \frac{k}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} (s+1) \, dA \langle c_A \rangle^\beta, \quad (6.4.35)$$

donde se definió el tensor de dispersión total como

$$\mathbf{D}^* = \mathcal{D} \left(\mathbf{I} + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b} \, dA \right) - \langle \mathbf{v}\mathbf{b} \rangle^\beta. \quad (6.4.36)$$

Nótese que este coeficiente depende, en general, de la tasa de reacción. Sin embargo, para condiciones en las cuales $k\ell/\mathcal{D} \ll 1$, esta dependencia puede ignorarse y además se cumple que $s \ll 1$ (ver detalles en [Valdés-Parada y col., 2020](#)). En este caso, la ecuación anterior se simplifica a

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle^\beta}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle c_A \rangle^\beta \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \right) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\mathbf{D}^* \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle c_A \rangle^\beta \right) - ka_v \varepsilon^{-1} \langle c_A \rangle^\beta. \quad (6.4.37)$$

Como puede notarse, este modelo sólo tiene al tensor de dispersión total como coeficiente a determinar, lo cual puede hacerse a partir de la solución del problema de cerradura dado en las ecuaciones (6.4.26) como se detalla en los siguientes párrafos.

6.4.4 Solución del problema de cerradura

El objetivo de esta sección es llevar a cabo la solución numérica del problema de cerradura para así predecir los valores del coeficiente de dispersión total. Para cumplir este objetivo, es conveniente retomar la solución del problema de flujo deducida anteriormente y dada en la ecuación (6.3.33), la cual puede expresarse en forma adimensional como sigue

$$\mathbf{v}^* = -\mathbf{D}^* \cdot \mathbf{e}_{\nabla_{\mathbf{x}} \langle \mathcal{P} \rangle^\beta}. \quad (6.4.38)$$

En donde \mathbf{D}^* se obtiene de resolver las ecuaciones (6.3.29), además se usaron las siguientes definiciones

$$\mathbf{v}^* = \frac{\mathbf{v}}{v_{ref}}; \quad \mathbf{D}^* = \frac{\mathbf{D}}{\ell^2}; \quad \mathbf{e}_{\nabla_{\mathbf{x}} \langle \mathcal{P} \rangle^\beta} = \frac{\nabla_{\mathbf{x}} \langle \mathcal{P} \rangle^\beta}{\|\nabla_{\mathbf{x}} \langle \mathcal{P} \rangle^\beta\|}. \quad (6.4.39)$$

Note que la velocidad de referencia es $v_{ref} = \frac{\ell^2}{\mu} \|\nabla \langle \mathcal{P} \rangle^\beta\|$. Aplicando el operador de promedio intrínseco en ambos lados de la ecuación (6.4.38) resulta la siguiente expresión

$$\langle \mathbf{v}^* \rangle^\beta = -\langle \mathbf{D}^* \rangle^\beta \cdot \mathbf{e}_{\nabla_{\mathbf{x}} \langle \mathcal{P} \rangle^\beta} \quad (6.4.40)$$

Restando esta ecuación a la ecuación (6.4.38), permite obtener el siguiente resultado para las desviaciones espaciales de la velocidad

$$\tilde{\mathbf{v}}^* = -\tilde{\mathbf{D}}^* \cdot \mathbf{e}_{\nabla_{\mathbf{x}} \langle \mathcal{P} \rangle^\beta}. \quad (6.4.41)$$

Dirigiendo ahora la atención a la ecuación (6.4.26a), y localizando el sistema coordenado en el centro geométrico de la celda unitaria, su forma adimensional es

$$Pe \tilde{\mathbf{v}}^* + Pe \mathbf{v}^* \cdot \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{b}^* = \nabla_{\mathbf{y}}^{*2} \mathbf{b}^* + \frac{\phi^2}{V_\beta^*} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{b}^* dA^*, \quad \text{en la fase-}\beta. \quad (6.4.42)$$

En donde se usaron las siguientes definiciones

$$\nabla_{\mathbf{y}}^* = \ell \nabla_{\mathbf{y}}; \quad \mathbf{b}^* = \frac{\mathbf{b}}{\ell}; \quad Pe = \frac{v_{ref} \ell}{\mathcal{D}} = Re \underbrace{Sc}_{v/\mathcal{D}}; \quad \phi^2 = \frac{k\ell}{\mathcal{D}}. \quad (6.4.43)$$

Sustituyendo en la ecuación (6.4.42) las expresiones dadas en las ecuaciones (6.4.38) y (6.4.41) se obtiene la siguiente ecuación diferencial

$$-Pe \tilde{\mathbf{D}}^* \cdot \mathbf{e}_{\nabla_{\mathbf{x}} \langle \mathcal{P} \rangle^\beta} - Pe \mathbf{e}_{\nabla_{\mathbf{x}} \langle \mathcal{P} \rangle^\beta} \cdot \mathbf{D}^{*T} \cdot \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{b}^* = \nabla_{\mathbf{y}}^{*2} \mathbf{b}^* + \frac{\phi^2}{V_\beta^*} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{b}^* dA^*, \quad \text{en la fase-}\beta. \quad (6.4.44a)$$

Utilizando las definiciones adimensionales dadas en la ecuación (6.4.43) en las ecuaciones (6.4.26b)-(6.4.26d), se deduce el resto del problema de cerradura adimensional

$$\mathbf{n} \cdot \nabla_{\mathbf{y}}^* \mathbf{b}^* = -\mathbf{n} - \phi^2 \mathbf{b}^*, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.4.44b)$$

$$\mathbf{b}^*(\mathbf{r}^* + \mathbf{I}_i^*) = \mathbf{b}^*(\mathbf{r}^*), \quad i = 1, 2, 3, \quad (6.4.44c)$$

$$\langle \mathbf{b}^* \rangle^\beta = \mathbf{0}. \quad (6.4.44d)$$

Esta formulación del problema de cerradura es conveniente pues solo involucra variables de cerradura y no campos de velocidad y es equivalente a la propuesta hecha por [Valdés-Parada y col. \(2016\)](#). Por último, el tensor de dispersión se expresa en términos de las variables adimensionales como sigue

$$\frac{\mathbf{D}^*}{\mathcal{D}} = \mathbf{I} + \frac{1}{V_\beta^*} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b}^* dA^* + \mathbf{e}_{\nabla_{\mathbf{x}} \langle \mathcal{P} \rangle^\beta} \cdot \langle \mathbf{D}^{*T} \mathbf{b}^* \rangle^\beta Pe. \quad (6.4.45)$$

A continuación se listan los pasos a seguir para resolver el problema de flujo y el problema de cerradura en Comsol Multiphysics partiendo del programa desarrollado en la sección anterior y así predecir la componente xx del tensor de dispersión total.

Cálculo de las componentes del tensor de dispersión

1. Tome el programa escrito previamente para la solución del problema para \mathbf{D}^* y elimine el estudio. Esto se hace ya que se agregará otro módulo de física y se cambiará de estrategia de solución.
2. Haga click derecho en *Component 1* y seleccione *Add physics*. En el menú que aparece seleccione *Chemical Species Transport/Transport of Diluted Species* y elija *Add to Component 1*. Por último, en el módulo de *Transport of Diluted Species* cambie el nombre de la variable dependiente a b .
3. En *Parameters* agregue al módulo de Thiele como til y asígnele el valor de 1 por el momento. Además defina al número de Péclet (Pe) como 10 veces el número de Reynolds.
4. Haga click derecho en *Definitions/Selections/Explicit*. En *Geometric entity level* elija *Boundary* y seleccione a las fronteras sólido-fluido, esto es, a las fronteras 6-13. Por último en *label* escriba *interfase*.
5. Haga click derecho en *Definitions/Nonlocal couplings/Integration*, en *Geometric entity level* elija *Boundary* y en *Selection* elija *interfase*. Por último, en *Operator name* escriba *surf*.
6. Haga click derecho en *Definitions/Variables* y defina a D_{xx} como $1 + \text{surf}(nx*b)/e - Pe*av(u*b)$.
7. En *Transport of Diluted Species/Transport Properties 1*, en el término convectivo, especifique que las componentes de la velocidad son $Pe*u$, $Pe*v$ y $Pe*w$. Además, especifique que el valor del coeficiente de difusión es uno.
8. Haga click derecho en *Transport of Diluted Species* y elija *Reactions/Reactions*, seleccione al dominio 1 y escriba lo siguiente en el término de reacción: $\text{til}^2/e*\text{surf}(b) - Pe*(u - av(u))$
9. Haga click derecho en *Transport of Diluted Species* y elija *Flux*. En *Selection* elija *interfase*; además en *Inward Flux* habilite la casilla que dice *Species b* y escriba $-nx - \text{til}^2*b$.
10. Haga click derecho en *Transport of Diluted Species* y elija *Periodic Condition* y seleccione a las fronteras 1 y 14. Repita la operación para las fronteras 2 y 5, así como para las fronteras 3 y 4.
11. Haga click derecho en *Transport of Diluted Species* y elija *Global/Global Constraint*. En *Apply reaction terms on*, elija *User defined* y en *Constraint expression* escriba $av(b)$. Por último, en *Constraint force expression* escriba $\text{test}(av(b))$.
12. Agregue un nuevo estudio en estado estacionario y deshabilite el módulo de transporte de especies diluidas. Esto se hace para que se resuelva primeramente el problema de flujo de fluidos.
13. Haga click derecho en *Study 1* y seleccione un nuevo estudio en estado estacionario y deshabilite ahora la casilla de *Laminar Flow*. Además, desarrolle la pestaña que dice *Values of Dependent Variables*, en *Values of variables not solved for* elija *User controlled*, en *Method* elija *Solution*, en *Study* elija *Study 1, Stationary* y en *Selection* elija *Last*.

Usando esta serie de pasos se obtuvieron los resultados mostrados en la figura 6.5. En esta figura se reporta la dependencia de la componente xx del tensor de dispersión contra el número de Péclet de partícula, el cual se define como

$$Pe_p = Pe \|\mathbf{v}^*\| = \frac{\|\mathbf{v}\| \ell}{\mathcal{D}}, \quad (6.4.46)$$

el cual es comúnmente usado en el estudio en medios porosos (ver, por ejemplo el capítulo 3 de Whitaker, 1999). Como es de esperarse, el coeficiente de dispersión aumenta con el número de Péclet. Note que, para condiciones de transporte difusivo (es decir, para $Pe_p < 1$), los campos de la variable de cerradura b_x^* tienen la forma de un dipolo (ver figura 6.5a). En estas condiciones, el incrementar el módulo de Thiele se reduce en un incremento en el coeficiente de dispersión, mientras que para valores mayores del número de Péclet se observa un comportamiento opuesto. En otras palabras, para condiciones de transferencia de masa plenamente convectivas, un incremento en la tasa de reacción respecto al transporte difusivo se traduce en una disminución en el coeficiente de dispersión total de masa. Estas observaciones son consistentes con los resultados reportados por Valdés-Parada y col. (2011). Más aún, observando la dirección de las líneas de corriente en el

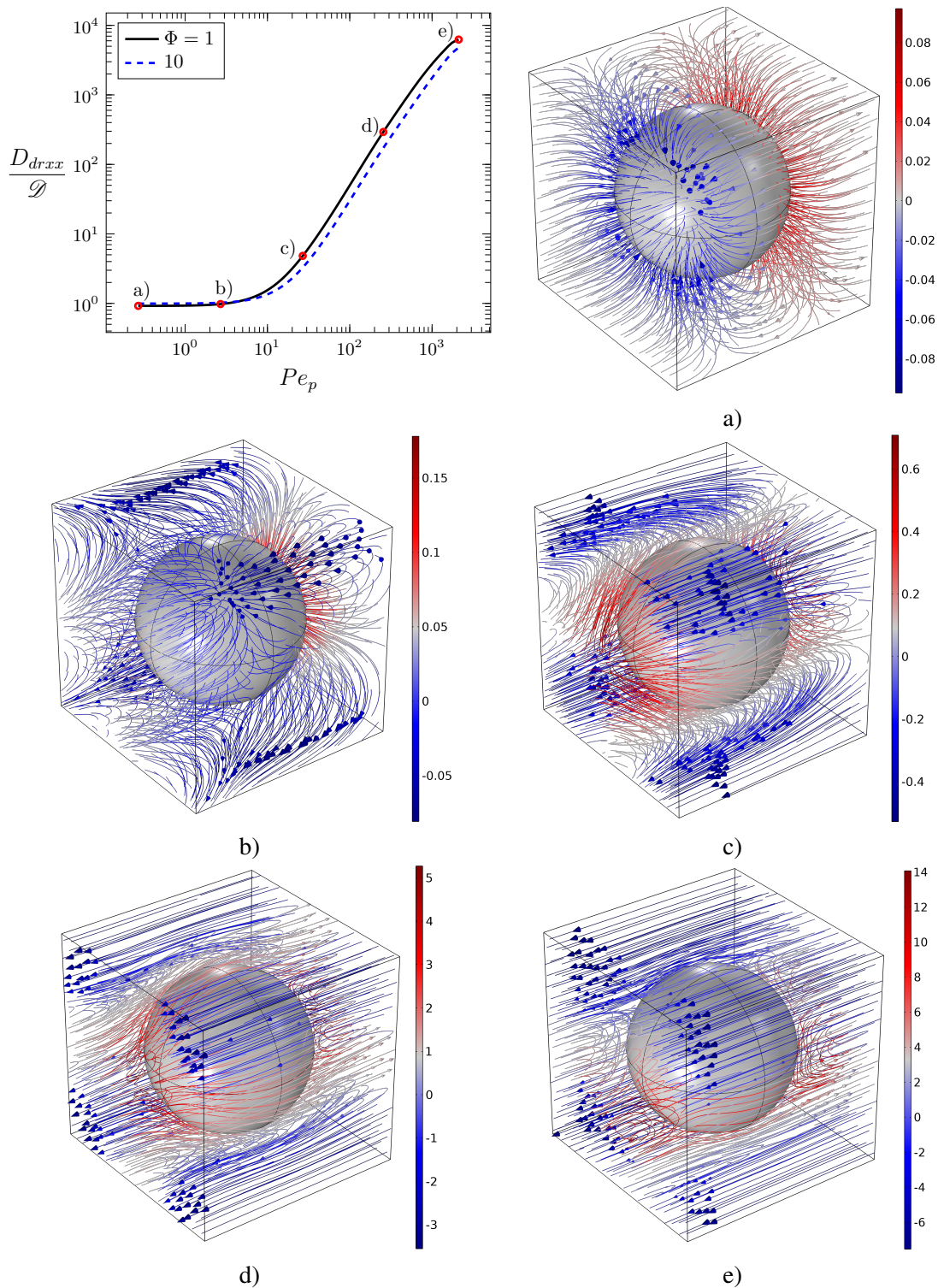


Figura 6.5: Dependencia de la componente xx del tensor de dispersión total como función del número de Péclet de partícula para una porosidad de 0.8 y dos valores del módulo de Thiele. Además, se muestran las líneas de corriente de la variable de cerradura asociadas al problema de transporte de masa para a) $Re = 10^{-2}$, b) $Re = 10^1$, c) $Re = 10^2$, d) $Re = 10^3$ y e) $Re = 10^4$. En todos los casos las barras de color representan la magnitud del flux total de la variable de cerradura.

resto de las gráficas reportadas en la figura 6.5, puede notarse el creciente efecto de la convección sobre la difusión al aumentar el número de Reynolds. De hecho, es interesante apreciar las formas de las líneas de corriente de las figuras 6.5b) y c) en donde hay una competencia entre ambos mecanismos de transporte. Mientras que en las gráficas mostradas en las figuras 6.5d) y e), es claro que el transporte de masa se da predominantemente por convección.

Para finalizar esta sección, en los siguientes párrafos se presenta un esquema de validación numérica para el caso del transporte plenamente difusivo. Cabe mencionar que esta es una primera forma de validación de los resultados que no sustituye a la necesidad de validación con datos de laboratorio.

Ejercicio 6.9 En esta sección se hicieron cálculos de solo una de las nueve componentes del tensor de dispersión total. Lleve a cabo las modificaciones pertinentes al código de Comsol listado arriba para calcular las otras componentes de este tensor. ■

Ejercicio 6.10 Compare los resultados obtenidos en esta sección con los que se obtienen al tomar una porosidad de 0.5. Explique además los cambios en relación a la dependencia del tensor de dispersión total con el módulo de Thiele. ■

6.4.5 Validación de modelos macroscópicos de transporte reactivo de una especie química en medios porosos

Bajo condiciones de transporte plenamente difusivo, el problema que describe la transferencia de masa de una especie en la escala microscópica es

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = \mathcal{D} \nabla^2 c_A, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.4.47a)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \mathcal{D} \nabla c_A = k c_A, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}. \quad (6.4.47b)$$

Tanto el modelo microscópico como el macroscópico requieren de condiciones de frontera en las entradas y salidas del sistema macroscópico y de una condición inicial para estar completamente planteados. Para ello, considere como dominio de solución a un conjunto horizontal de N celdas unitarias periódicas. En el extremo izquierdo ($x = 0$) se impone una condición de simetría, lo que implica que la solución se está llevando a cabo solo en la mitad del sistema, mientras que en el extremo derecho ($x = L$) se supone conocida y constante la concentración. Lo anterior se expresa como:

$$\text{en } x = 0, \quad \frac{\partial c_A}{\partial x} = 0, \quad (6.4.47c)$$

$$\text{en } x = L, \quad c_A = c_{en}. \quad (6.4.47d)$$

Además, en las fronteras faltantes se imponen condiciones de periodicidad, lo cual justifica resolver el problema en solo un arreglo horizontal:

$$c_A(x, 0, z, t) = c_A(x, \ell, z, t); \quad c_A(x, y, 0, t) = c_A(x, y, \ell, t). \quad (6.4.47e)$$

Por último, al inicio se supone conocida y constante la concentración en el sistema:

$$\text{cuando } t = 0, \quad c_A = c_0. \quad (6.4.47f)$$

El modelo macroscópico deducido usando el método del promedio volumétrico y bajo condiciones de transporte plenamente difusivas, es

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle^\beta}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{D}_A \cdot \nabla \langle c_A \rangle^\beta) - \varepsilon^{-1} a_v k \langle c_A \rangle^\beta. \quad (6.4.48)$$

En donde $\mathbf{D}_A = \lim_{Pe \rightarrow 0} \mathbf{D}^*$ es el tensor de difusividad efectiva. La ecuación anterior puede simplificarse ya que el dominio de solución del modelo se considera como un arreglo de celdas unitarias periódicas. Tomando esto en cuenta, el modelo anterior se reduce a una sola dimensión espacial como sigue

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle^\beta}{\partial t} = D_{xx} \frac{\partial^2 \langle c_A \rangle^\beta}{\partial x^2} - \varepsilon^{-1} a_v k \langle c_A \rangle^\beta. \quad (6.4.49a)$$

La cual está sujeta a las siguientes condiciones de frontera e inicial:

$$\text{en } x = 0, \quad \frac{\partial \langle c_A \rangle^\beta}{\partial x} = 0, \quad (6.4.49b)$$

$$\text{en } x = L, \quad \langle c_A \rangle^\beta = c_{en}, \quad (6.4.49c)$$

$$\text{cuando } t = 0, \quad \langle c_A \rangle^\beta = c_0. \quad (6.4.49d)$$

Antes de proceder con la solución de los modelos, es conveniente reformularlos en términos de las siguientes variables y parámetros adimensionales

$$c_A^* = \frac{c_A}{c_{en}}; \quad \nabla^* = \ell \nabla; \quad t^* = \frac{t \mathcal{D}_A}{\ell^2}; \quad \phi^2 = \frac{k\ell}{\mathcal{D}}; \quad a_v^* = \ell a_v. \quad (6.4.50)$$

Con base en estas definiciones, las ecuaciones (6.4.47) y (6.4.49) pueden reescribirse como sigue:
Modelo adimensional a la escala microscópica

$$\frac{\partial c_A^*}{\partial t^*} = \nabla^{*2} c_A^*, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.4.51a)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \nabla^* c_A^* = \phi^2 c_A^*, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.4.51b)$$

$$\text{en } x^* = 0, \quad \frac{\partial c_A^*}{\partial x^*} = 0, \quad (6.4.51c)$$

$$\text{en } x^* = L^*, \quad c_A^* = 1, \quad (6.4.51d)$$

$$c_A^*(x^*, 0, z^*, t^*) = c_A^*(x^*, 1, z^*, t^*); \quad c_A^*(x^*, y^*, 0, t^*) = c_A^*(x^*, y^*, 1, t^*), \quad (6.4.51e)$$

$$\text{cuando } t^* = 0, \quad c_A^* = c_0^*. \quad (6.4.51f)$$

Modelo adimensional a la escala macroscópica

$$\frac{\partial \langle c_A^* \rangle^\beta}{\partial t^*} = \frac{D_{xx}}{\mathcal{D}} \frac{\partial^2 \langle c_A^* \rangle^\beta}{\partial x^{*2}} - \varepsilon^{-1} a_v^* \phi^2 \langle c_A^* \rangle^\beta, \quad (6.4.52a)$$

$$\text{en } x^* = 0, \quad \frac{\partial \langle c_A^* \rangle^\beta}{\partial x^*} = 0, \quad (6.4.52b)$$

$$\text{en } x^* = L^*, \quad \langle c_A^* \rangle^\beta = 1, \quad (6.4.52c)$$

$$\text{cuando } t^* = 0, \quad \langle c_A^* \rangle^\beta = c_0^*. \quad (6.4.52d)$$

En las ecuaciones anteriores $L^* = N$ y $c_0^* = c_0/c_{en}$. La comparación de los modelos involucra entonces tres etapas: 1) solución numérica del problema a la escala microscópica, 2) solución numérica del problema de cerradura para predecir D_{xx}/\mathcal{D} y 3) solución del modelo macroscópico. La tercera parte puede llevarse a cabo de manera analítica o numérica. En el siguiente capítulo se discute acerca de la solución analítica de ecuaciones parciales, por lo que por ahora solo se presentan las soluciones numéricas. A continuación se detallan los pasos a seguir para llevar a cabo cada una de estas etapas usando Comsol Multiphysics. Para reducir el número de grados de libertad, las simulaciones se llevan a cabo sólo para el caso en el que $c_0^* = 0$.

Etapas 1: solución numérica del problema a escala microscópica

1. Haga click en *Model Wizard* y elija 3D. Posteriormente, seleccione como física *Transport of diluted species* y especifique que se hará un estudio en estado transitorio.
2. Especifique como parámetros al módulo de Thiele (til) y al número de celdas (N) y, por el momento asigne valores de 0.1 y 10, respectivamente, por ahora. Además, defina a la porosidad (e) como 0.8 y al radio de la esfera (a) como

$$(3*(1-e)/(4*pi))^{(1/3)}$$

3. Haga click derecho en *Geometry*, elija *Block*. Posteriormente, dibuje una esfera de radio a y cuyo centro está en (0.5, 0.5, 0.5).
4. Haga click derecho en *Geometry/Booleans and Partitions/Difference* y reste al cubo la esfera.

5. En *Transport of diluted species*, deshabilite la casilla de *Convection*. Posteriormente en *Transport properties* especifique que el coeficiente de difusión es uno.
6. Haga click derecho en *Transport of diluted species/Periodic Condition* y elija a las fronteras 3 y 4. repita esta operación para las fronteras 2 y 5.
7. Haga click derecho en *Transport of diluted species/Flux* y seleccione a las fronteras 6-13. En *Inward flux*, habilite la casilla que dice *Species c* y escriba $-til^2*c$.
8. Haga click derecho en *Geometry/Transforms/Array*, seleccione a dif1, especifique que el tamaño del arreglo es (N,1,1) y que el desplazamiento es (1,0,0). Note que al hacer este paso, las condiciones de periodicidad y del flux aplican a cada una de las repeticiones.
9. Haga click derecho en *Transport of diluted species/Symmetry* y seleccione a la frontera 1.
10. Haga click derecho en *Transport of diluted species/Concentration* y seleccione a la frontera 131. Habilite la casilla de *Species c* y especifique su valor en uno.
11. En malla elija *Extremely fine* y en el estudio especifique un rango de tiempo logarítmico que vaya de $1e-4$ a 100 con diez pasos por década.

Para la **Etapa 2**, puede usarse el programa desarrollado en la sección 6.4.4 para predecir al tensor de dispersión total. La única modificación que debe hacerse es eliminar al término convectivo, para recuperar entonces al tensor de difusión efectiva. Usando este programa, se obtienen, para la porosidad de 0.8, los siguientes resultados

ϕ^2	D_{xx}/\mathcal{D}
0.1	0.91016
1.0	0.92055

Además, con este programa, se obtiene que $a_v^* = 1.6473$. Con esta información se puede proceder a la *Etapa 3*, cuyos pasos se detallan a continuación.

Etapa 3: Solución numérica del modelo macroscópico

1. Haga click en *Model wizard*, seleccione 1D, elija como física *Transport of diluted species* en un estudio en estado transitorio.
2. En *Parameters* defina al módulo de Thiele (til) como 0.1, al coeficiente de difusión efectiva (Def) como 0.91016, al área interfacial por unidad de volumen (av) como 1.6473 y a la porosidad (e) como 0.8.
3. Haga click derecho en *Geometry* y elija *interval* y especifique que el intervalo va de 0 a 10.
4. En *Transport of diluted species* deshabilite la casilla de convección. Además, en *Transport properties 1* especifique al coeficiente de difusión efectiva como Def.
5. Haga click derecho en *Transport of diluted species/Symmetry* y elija a la frontera 1.
6. Haga click derecho en *Transport of diluted species/Concentration*, elija a la frontera 2 y asigne el valor de la concentración en uno.
7. Haga click derecho en *Transport of diluted species/Reactions/Reactions*, seleccione al dominio 1 y escriba lo siguiente para el término de reacción

$$-av*til^2*c/e$$
8. Haga click derecho en *Mesh* y elija *Edit Physics-Induced Sequence* y en *Size*, en *Maximum Element Size* escriba 0.01.
9. En *Study 1/Step 1 Time dependent* especifique un rango de tiempo logarítmico que vaya de $1e-4$ a 100 con diez pasos por década.

En la figura 6.6 se muestra la comparación de la dinámica de los perfiles de la concentración macroscópica obtenidos con el modelo escalado y su comparación con simulaciones numéricas tomando un arreglo de 50 celdas periódicas. Como puede notarse, el modelo promedio reproduce adecuadamente los resultados de las simulaciones numéricas a escala de poro, lo cual sirve como una primera validación del modelo para diversos valores del tiempo adimensional. Por supuesto,

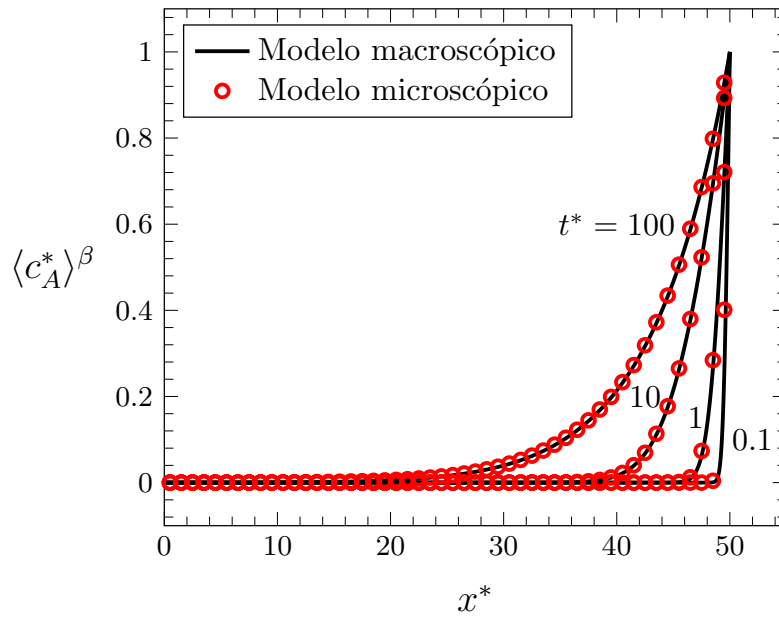


Figura 6.6: Comparación de la dinámica de los perfiles de la concentración macroscópica resultante de la solución del modelo escalado y de simulaciones numéricas a escala de poro para $\varepsilon = 0.8$, $\phi^2 = 0.1$ y $N = 50$.

esto no reemplaza la necesidad de validación experimental. Sin embargo, si esta primera validación fallara, no tendría sentido dar el siguiente paso hacia una comparación con experimentos.

Ejercicio 6.11 Extienda el análisis de comparación entre el modelo promedio y las simulaciones numéricas para los siguientes casos:

1. Considere $N = 10$ y $N = 100$, manteniendo a $\varepsilon = 0.8$ y $\phi^2 = 0.1$.
2. Considere $\phi^2 = 1$ y 10 manteniendo $N = 50$ y $\varepsilon = 0.8$.
3. Considere $\varepsilon = 0.4$ manteniendo $N = 50$ y $\phi^2 = 0.1$.

En cada caso analice y discuta suficientemente sus resultados. ■

6.5 Transferencia de calor en medios porosos

6.5.1 Planteamiento del modelo

Como último caso de estudio de este capítulo considere la transferencia de calor en un medio poroso rígido y homogéneo saturado por una sola fase fluida (fase- β). En dicha fase, el transporte de calor se da por conducción y convección, mientras que en la fase sólida (fase- σ) el transporte se da únicamente por conducción. De esta forma, las ecuaciones que gobiernan la transferencia de calor a escala de poro en cada fase son:

$$\rho_\beta C_{p\beta} \left(\frac{\partial T_\beta}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathbf{v}_\beta T_\beta) \right) = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (k_\beta \nabla_{\mathbf{r}} T_\beta), \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.5.1a)$$

$$\rho_\sigma C_{p\sigma} \frac{\partial T_\sigma}{\partial t} = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} T_\sigma), \quad \text{en la fase-}\sigma. \quad (6.5.1b)$$

En la interfase sólido-fluido se desprecian las resistencias a la transferencia de calor y se supone continuidad de la temperatura y del flux de calor. Bajo estas condiciones, se pueden imponer las siguientes condiciones de frontera:

$$T_\beta = T_\sigma, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.5.1c)$$

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla_{\mathbf{r}} T_\beta = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} T_\sigma, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}. \quad (6.5.1d)$$

6.5.2 Promediado

Este es el primer caso abordado en este capítulo en el que hay transporte en más de una fase, por lo que hay varias alternativas de escalamiento. El propósito de esta sección es deducir tres modelos de medio efectivo que son: el modelo de no-equilibrio de dos ecuaciones; el modelo de equilibrio y el modelo de no-equilibrio de una ecuación. Cada uno de ellos se abordan más adelante y tienen en común el uso de la forma macroscópica de la ecuación de energía térmica:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} \rho C_p T dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot [\rho C_p T (\mathbf{v} - \mathbf{w}) + \mathbf{q}] dA = \int_{\mathcal{V}_A} \Phi dV. \quad (6.5.2)$$

Ya que solo hay una fase fluida y el medio poroso es rígido, puede utilizarse una región fija para cada fase. Tomando en cuenta que no hay generación de calor en ninguna de las fases se tiene, para la fase fluida, la siguiente expresión:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}_\beta} \rho_\beta C_{p\beta} T_\beta dV + \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n}_\beta \cdot [\rho_\beta C_{p\beta} T_\beta \mathbf{v}_\beta + \mathbf{q}_\beta] dA = 0. \quad (6.5.3a)$$

Por su parte, en la fase sólida no hay movimiento y por tanto $\mathbf{v}_\sigma = \mathbf{w} = \mathbf{0}$ y la ecuación (6.5.2) se reduce a:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}_\sigma} \rho_\sigma C_{p\sigma} T_\sigma dV + \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_\sigma \cdot \mathbf{q}_\sigma dA = 0. \quad (6.5.3b)$$

Suponiendo constantes a las propiedades térmicas de las fases en las regiones de promediado y dividiendo ambos lados de las ecuaciones anteriores entre V , resulta que

$$\rho_\beta C_{p\beta} \frac{\partial \langle T_\beta \rangle_\beta}{\partial t} + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_\beta} \mathbf{n}_\beta \cdot [\rho_\beta C_{p\beta} T_\beta \mathbf{v}_\beta + \mathbf{q}_\beta] dA = 0, \quad (6.5.4a)$$

$$\rho_\sigma C_{p\sigma} \frac{\partial \langle T_\sigma \rangle_\sigma}{\partial t} + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_\sigma \cdot \mathbf{q}_\sigma dA = 0. \quad (6.5.4b)$$

O bien, separando las superficies en entradas y salidas e interfaces y tomando en cuenta a la forma del teorema del promediado espacial dada en la ecuación (6.4.5), resulta que

$$\rho_\beta C_{p\beta} \frac{\partial \langle T_\beta \rangle_\beta}{\partial t} + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle T_\beta \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \mathbf{q}_\beta \rangle_\beta + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{q}_\beta dA = 0, \quad (6.5.5a)$$

$$\rho_\sigma C_{p\sigma} \frac{\partial \langle T_\sigma \rangle_\sigma}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \mathbf{q}_\sigma \rangle_\sigma + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathbf{q}_\sigma dA = 0. \quad (6.5.5b)$$

En el último término de la ecuación (6.5.5a) se tomó en cuenta la condición de no deslizamiento del fluido en la interfase sólido-fluido. Utilizando la ley de Fourier en los fluxes conductivos de las ecuaciones (6.5.5), pueden escribirse ahora como

$$\rho_\beta C_{p\beta} \frac{\partial \langle T_\beta \rangle_\beta}{\partial t} + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle T_\beta \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (k_\beta \langle \nabla_{\mathbf{r}} T_\beta \rangle_\beta) + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla_{\mathbf{r}} T_\beta dA, \quad (6.5.6a)$$

$$\rho_\sigma C_{p\sigma} \frac{\partial \langle T_\sigma \rangle_\sigma}{\partial t} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (k_\sigma \langle \nabla_{\mathbf{r}} T_\sigma \rangle_\sigma) + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} T_\sigma dA. \quad (6.5.6b)$$

Usando ahora el teorema del promediado espacial en la forma dada en la ecuación (6.2.13a) en los términos conductivos de las ecuaciones anteriores, permite llegar a las siguientes expresiones

$$\rho_{\beta} C_{p\beta} \frac{\partial \langle T_{\beta} \rangle_{\beta}}{\partial t} + \rho_{\beta} C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle T_{\beta} \mathbf{v}_{\beta} \rangle_{\beta} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[k_{\beta} \left(\nabla_{\mathbf{x}} \langle T_{\beta} \rangle_{\beta} + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} T_{\beta} dA \right) \right] + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_{\beta} \nabla_{\mathbf{r}} T_{\beta} dA, \quad (6.5.7a)$$

$$\rho_{\sigma} C_{p\sigma} \frac{\partial \langle T_{\sigma} \rangle_{\sigma}}{\partial t} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[k_{\sigma} \left(\nabla_{\mathbf{x}} \langle T_{\sigma} \rangle_{\sigma} + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} T_{\sigma} dA \right) \right] + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot k_{\sigma} \nabla_{\mathbf{r}} T_{\sigma} dA. \quad (6.5.7b)$$

Este conjunto de ecuaciones son el punto de partida para los tres tipos de modelos macroscópicos que se consideran en los siguientes párrafos.

6.5.3 Modelo de no equilibrio y dos ecuaciones

Este modelo parte de las ecuaciones (6.5.7) y utiliza la descomposición espacial de Gray (1975) aplicada a la temperatura de cada fase en los filtros integrales para obtener las siguientes expresiones:

$$\rho_{\beta} C_{p\beta} \frac{\partial \langle T_{\beta} \rangle_{\beta}}{\partial t} + \rho_{\beta} C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle T_{\beta} \rangle_{\beta} \langle \mathbf{v}_{\beta} \rangle_{\beta} \right) + \rho_{\beta} C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \tilde{T}_{\beta} \mathbf{v}_{\beta} \rangle_{\beta} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[k_{\beta} \left(\nabla_{\mathbf{x}} \langle T_{\beta} \rangle_{\beta} + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{T}_{\beta} dA \right) \right] + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_{\beta} \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_{\beta} dA, \quad (6.5.8a)$$

$$\rho_{\sigma} C_{p\sigma} \frac{\partial \langle T_{\sigma} \rangle_{\sigma}}{\partial t} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[k_{\sigma} \left(\nabla_{\mathbf{x}} \langle T_{\sigma} \rangle_{\sigma} + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \tilde{T}_{\sigma} dA \right) \right] + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot k_{\sigma} \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_{\sigma} dA. \quad (6.5.8b)$$

Note que se tomó en cuenta la suposición de homogeneidad espacial y que el tamaño de la región de promediado, r_0 , debe satisfacer la siguiente restricción de escala

$$\text{máx}(\ell_{\sigma}, \ell_{\beta}) \ll r_0 \ll L, \quad (6.5.9)$$

lo cual permite suponer que las cantidades promedio son constantes dentro de los filtros integrales. De esta forma, se justifican las siguientes expresiones

$$\frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \langle T_{\beta} \rangle_{\beta} dA = \frac{\langle T_{\beta} \rangle_{\beta}}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} dA = -\langle T_{\beta} \rangle_{\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \varepsilon_{\beta} = \mathbf{0}, \quad (6.5.10a)$$

$$\frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_{\beta} \nabla_{\mathbf{r}} \langle T_{\beta} \rangle_{\beta} dA = \left(\frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} dA \right) \cdot \left(k_{\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_{\beta} \rangle_{\beta} \right) = -\nabla_{\mathbf{x}} \varepsilon_{\beta} \cdot \left(k_{\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_{\beta} \rangle_{\beta} \right) = 0. \quad (6.5.10b)$$

Por supuesto, aplican resultados similares para la fase sólida. Utilizando la relación de Dupuit-Forchheimer en las ecuaciones (6.5.8) y tomando en cuenta que tanto ε_{β} como ε_{σ} se suponen

constantes, se tiene que

$$\begin{aligned} & \rho_\beta C_{p\beta} \frac{\partial \langle T_\beta \rangle^\beta}{\partial t} + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle T_\beta \rangle^\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \right) + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \tilde{T}_\beta \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \\ &= \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[k_\beta \left(\nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\beta \rangle^\beta + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{T}_\beta dA \right) \right] + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\beta dA, \end{aligned} \quad (6.5.11a)$$

$$\rho_\sigma C_{p\sigma} \frac{\partial \langle T_\sigma \rangle^\sigma}{\partial t} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[k_\sigma \left(\nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\sigma \rangle^\sigma + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \tilde{T}_\sigma dA \right) \right] + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\sigma dA. \quad (6.5.11b)$$

Las cuales son las ecuaciones promedio no cerradas correspondientes a cada fase. Para cerrar estas ecuaciones se sigue un procedimiento similar al usado en la sección anterior para transferencia de masa. Esto es: deben deducirse y simplificarse las ecuaciones diferenciales de las desviaciones de la temperatura en cada fase, así como las condiciones de frontera correspondientes. Por último, se lleva a cabo la solución formal del problema correspondiente en una celda unitaria periódica. Con este esquema de cerradura en mente, se restan las ecuaciones (6.5.11) a las ecuaciones (6.5.1a) y (6.5.1b) para obtener

$$\begin{aligned} & \rho_\beta C_{p\beta} \frac{\partial \tilde{T}_\beta}{\partial t} + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left(\langle T_\beta \rangle^\beta \tilde{\mathbf{v}}_\beta \right) + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left(\tilde{T}_\beta \mathbf{v}_\beta \right) - \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \tilde{T}_\beta \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \\ &= \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left[k_\beta \left(\nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\beta - \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{T}_\beta dA \right) \right] - \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\beta dA, \end{aligned} \quad (6.5.12a)$$

$$\rho_\sigma C_{p\sigma} \frac{\partial \tilde{T}_\sigma}{\partial t} = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left[k_\sigma \left(\nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\sigma - \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \tilde{T}_\sigma dA \right) \right] - \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\sigma dA. \quad (6.5.12b)$$

Con la intención de simplificar las ecuaciones anteriores, es conveniente considerar los siguientes estimados de orden de magnitud

$$k_i \nabla_{\mathbf{r}}^2 \tilde{T}_i = \mathbf{O} \left(\frac{k_i \tilde{T}_i}{\ell_i^2} \right), \quad i = \beta, \sigma, \quad (6.5.13a)$$

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\frac{k_i}{V_i} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{T}_i dA \right) = \mathbf{O} \left(\frac{k_i \tilde{T}_i}{\ell_i L} \right), \quad i = \beta, \sigma, \quad (6.5.13b)$$

$$\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left(\tilde{T}_\beta \mathbf{v}_\beta \right) = \mathbf{O} \left(\frac{\tilde{T}_\beta v_\beta}{\ell_\beta} \right), \quad (6.5.13c)$$

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \tilde{T}_\beta \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta = \mathbf{O} \left(\frac{\tilde{T}_\beta v_\beta}{L} \right), \quad (6.5.13d)$$

Entonces, con base en la separación de longitudes características dada en (6.5.9), los términos no locales pueden despreciarse respecto a sus contrapartes locales y así simplificar a las ecuaciones (6.5.12) como sigue

$$\rho_\beta C_{p\beta} \frac{\partial \tilde{T}_\beta}{\partial t} + \rho_\beta C_{p\beta} \tilde{\mathbf{v}}_\beta \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\beta \rangle^\beta + \rho_\beta C_{p\beta} \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\beta = k_\beta \nabla_{\mathbf{r}}^2 \tilde{T}_\beta - \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\beta dA, \quad (6.5.14a)$$

$$\rho_\sigma C_{p\sigma} \frac{\partial \tilde{T}_\sigma}{\partial t} = k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}}^2 \tilde{T}_\sigma - \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\sigma dA. \quad (6.5.14b)$$

Note que en el lado izquierdo de la ecuación (6.5.14a) se tomó en cuenta la naturaleza solenoidal de \mathbf{v}_β y $\tilde{\mathbf{v}}_\beta$. Como simplificación adicional se supone que las ecuaciones anteriores pueden considerarse en estado cuasiestacionario, lo cual es razonable cuando se cumple la siguiente restricción de escala temporal:

$$\text{máx} \left(\frac{\ell_\sigma^2}{\alpha_\sigma}, \frac{\ell_\beta^2/\alpha_\beta}{1 + \frac{v_\beta \ell_\beta}{\alpha_\beta}} \right) \ll t^*. \quad (6.5.15)$$

En donde $\alpha_i = k_i/\rho_i C_{pi}$ ($i = \beta, \sigma$) representa a la difusividad térmica en cada fase. Ya que el valor máximo de $\mathbf{O} \left(\frac{\ell_\beta^2/\alpha_\beta}{1 + \frac{v_\beta \ell_\beta}{\alpha_\beta}} \right)$ es $\mathbf{O}(\ell_\beta^2/\alpha_\beta)$, la desigualdad anterior indica que el estado cuasiestacionario se alcanza cuando el tiempo característico del proceso sea mucho mayor que el máximo tiempo característico de la difusión en ambas fases. Bajo estas condiciones, las ecuaciones (6.5.14) se reducen a

$$\rho_\beta C_{p\beta} \tilde{\mathbf{v}}_\beta \cdot \underbrace{\nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\beta \rangle^\beta}_{\text{fuente}} + \rho_\beta C_{p\beta} \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\beta = k_\beta \nabla_{\mathbf{r}}^2 \tilde{T}_\beta - \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\beta dA, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.5.16a)$$

$$0 = k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}}^2 \tilde{T}_\sigma - \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\sigma dA, \quad \text{en la fase-}\sigma. \quad (6.5.16b)$$

Estas ecuaciones están sujetas a las siguientes condiciones de frontera, las cuales resultan de sustituir la descomposición espacial en las ecuaciones (6.5.1c) y (6.5.1d):

$$\tilde{T}_\beta + \underbrace{\left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right)}_{\text{fuente}} = \tilde{T}_\sigma, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.5.16c)$$

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\beta - \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \underbrace{\nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\beta \rangle^\beta}_{\text{fuente}} = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\sigma - \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\sigma \underbrace{\nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\sigma \rangle^\sigma}_{\text{fuente}}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}. \quad (6.5.16d)$$

Restringiendo el dominio de solución del problema de las desviaciones a una celda unitaria periódica, es razonable imponer la siguiente condición de frontera en las entradas y salidas de este dominio de solución simplificado:

$$\tilde{T}_j(\mathbf{r}) = \tilde{T}_j(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i), \quad i = 1, 2, 3; j = \beta, \sigma. \quad (6.5.16e)$$

Por último, los campos de las desviaciones de la temperatura están acotados como lo indica la siguiente restricción promedio

$$\langle \tilde{T}_i \rangle^i = 0, \quad i = \beta, \sigma. \quad (6.5.16f)$$

Como puede notarse, existen tres fuentes en este problema de valor a la frontera, las cuales son constantes al nivel de escala de una celda unitaria. Ya que el problema es lineal, su solución formal puede expresarse como una superposición de las fuentes como sigue:

$$\tilde{T}_\beta = \mathbf{b}_{\beta\beta} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\beta \rangle^\beta + \mathbf{b}_{\beta\sigma} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\sigma \rangle^\sigma + s_\beta \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right), \quad (6.5.17a)$$

$$\tilde{T}_\sigma = \mathbf{b}_{\sigma\beta} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\beta \rangle^\beta + \mathbf{b}_{\sigma\sigma} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\sigma \rangle^\sigma + s_\sigma \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right). \quad (6.5.17b)$$

En donde las variables de cerradura satisfacen los siguientes tres problemas de valor a la frontera en donde el eje coordenado se ha localizado en el centro geométrico de la celda unitaria:

Problema-I (fuente $\nabla_{\mathbf{x}}\langle T_{\beta} \rangle^{\beta}$)

$$\rho_{\beta} C_{p\beta} \tilde{\mathbf{v}}_{\beta} + \rho_{\beta} C_{p\beta} \mathbf{v}_{\beta} \cdot \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{b}_{\beta\beta} = k_{\beta} \nabla_{\mathbf{y}}^2 \mathbf{b}_{\beta\beta} - \frac{1}{V_{\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_{\beta} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{b}_{\beta\beta} dA, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.5.18a)$$

$$\mathbf{0} = k_{\sigma} \nabla_{\mathbf{y}}^2 \mathbf{b}_{\sigma\beta} - \frac{1}{V_{\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot k_{\sigma} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{b}_{\sigma\beta} dA, \quad \text{en la fase-}\sigma, \quad (6.5.18b)$$

$$\mathbf{b}_{\beta\beta} = \mathbf{b}_{\sigma\beta}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.5.18c)$$

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_{\beta} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{b}_{\beta\beta} - \mathbf{n}_{\beta\sigma} k_{\beta} = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_{\sigma} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{b}_{\sigma\beta}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.5.18d)$$

$$\mathbf{b}_{j\beta}(\mathbf{r}) = \mathbf{b}_{j\beta}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i), \quad i = 1, 2, 3; j = \beta, \sigma, \quad (6.5.18e)$$

$$\langle \mathbf{b}_{i\beta} \rangle^i = \mathbf{0}, \quad i = \beta, \sigma. \quad (6.5.18f)$$

Problema-II (fuente $\nabla_{\mathbf{x}}\langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma}$)

$$\rho_{\beta} C_{p\beta} \mathbf{v}_{\beta} \cdot \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{b}_{\beta\sigma} = k_{\beta} \nabla_{\mathbf{y}}^2 \mathbf{b}_{\beta\sigma} - \frac{1}{V_{\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_{\beta} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{b}_{\beta\sigma} dA, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.5.19a)$$

$$\mathbf{0} = k_{\sigma} \nabla_{\mathbf{y}}^2 \mathbf{b}_{\sigma\sigma} - \frac{1}{V_{\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot k_{\sigma} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{b}_{\sigma\sigma} dA, \quad \text{en la fase-}\sigma, \quad (6.5.19b)$$

$$\mathbf{b}_{\beta\sigma} = \mathbf{b}_{\sigma\sigma}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.5.19c)$$

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_{\beta} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{b}_{\beta\sigma} = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_{\sigma} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{b}_{\sigma\sigma} - \mathbf{n}_{\beta\sigma} k_{\sigma}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.5.19d)$$

$$\mathbf{b}_{j\sigma}(\mathbf{r}) = \mathbf{b}_{j\sigma}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i), \quad i = 1, 2, 3; j = \beta, \sigma, \quad (6.5.19e)$$

$$\langle \mathbf{b}_{i\sigma} \rangle^i = \mathbf{0}, \quad i = \beta, \sigma, \quad (6.5.19f)$$

Problema-III (fuente $\langle T_{\beta} \rangle^{\beta} - \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma}$)

$$\rho_{\beta} C_{p\beta} \mathbf{v}_{\beta} \cdot \nabla_{\mathbf{y}} s_{\beta} = k_{\beta} \nabla_{\mathbf{y}}^2 s_{\beta} - \frac{1}{V_{\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_{\beta} \nabla_{\mathbf{y}} s_{\beta} dA, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.5.20a)$$

$$0 = k_{\sigma} \nabla_{\mathbf{y}}^2 s_{\sigma} - \frac{1}{V_{\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot k_{\sigma} \nabla_{\mathbf{y}} s_{\sigma} dA, \quad \text{en la fase-}\sigma, \quad (6.5.20b)$$

$$s_{\beta} + 1 = s_{\sigma}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.5.20c)$$

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_{\beta} \nabla_{\mathbf{y}} s_{\beta} = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_{\sigma} \nabla_{\mathbf{y}} s_{\sigma}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.5.20d)$$

$$s_j(\mathbf{r}) = s_j(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i), \quad i = 1, 2, 3; j = \beta, \sigma, \quad (6.5.20e)$$

$$\langle s_i \rangle^i = 0, \quad i = \beta, \sigma. \quad (6.5.20f)$$

A partir de estos problemas, se deducen los siguientes estimados de órdenes de magnitud ($i = \beta, \sigma$)

$$\mathbf{b}_i = \mathbf{O}(\ell_i), \quad (6.5.21a)$$

$$s_i = \mathbf{O}(1). \quad (6.5.21b)$$

Con los desarrollos hechos aquí puede regresarse la atención al modelo promedio no cerrado. El resultado de sustituir las ecuaciones (6.5.17) en las ecuaciones (6.5.11) son las siguientes ecuaciones

macroscópicas

$$\begin{aligned}
& \rho_\beta C_{p\beta} \frac{\partial \langle T_\beta \rangle^\beta}{\partial t} + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle T_\beta \rangle^\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \right) + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \mathbf{v}_\beta \mathbf{b}_{\beta\beta} \rangle^\beta \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\beta \rangle^\beta \right) \\
& + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle \mathbf{v}_\beta \mathbf{b}_{\beta\sigma} \rangle^\beta \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[\langle \mathbf{v}_\beta s_\beta \rangle^\beta \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) \right] \\
& = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[k_\beta \left(\nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\beta \rangle^\beta + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b}_{\beta\beta} dA \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\beta \rangle^\beta + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b}_{\beta\sigma} dA \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} s_\beta dA \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) \right) \right] + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{b}_{\beta\beta} dA \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\beta \rangle^\beta \\
& + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{b}_{\beta\sigma} dA \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\sigma \rangle^\sigma + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla_{\mathbf{r}} s_\beta dA \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right), \quad (6.5.22a)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\rho_\sigma C_{p\sigma} \frac{\partial \langle T_\sigma \rangle^\sigma}{\partial t} & = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[k_\sigma \left(\nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\sigma \rangle^\sigma + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \mathbf{b}_{\sigma\beta} dA \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\beta \rangle^\beta \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \mathbf{b}_{\sigma\sigma} dA \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\sigma \rangle^\sigma + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} s_\sigma dA \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) \right) \right] \\
& + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{b}_{\sigma\beta} dA \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\beta \rangle^\beta + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{b}_{\sigma\sigma} dA \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\sigma \rangle^\sigma \\
& + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} s_\sigma dA \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right). \quad (6.5.22b)
\end{aligned}$$

Con la intención de simplificar las ecuaciones anteriores se proponen las siguientes definiciones

$$\mathbf{v}_{eff}^{\beta\beta} = \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta + \langle \mathbf{v}_\beta s_\beta \rangle^\beta - \frac{\alpha_\beta}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\mathbf{l}_\beta + \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{b}_{\beta\beta}) dA, \quad (6.5.23a)$$

$$\mathbf{v}_{eff}^{\beta\sigma} = \langle \mathbf{v}_\beta s_\beta \rangle^\beta - \frac{\alpha_\beta}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\mathbf{l}_\beta - \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{b}_{\beta\sigma}) dA, \quad (6.5.23b)$$

$$\mathbf{K}_{\beta\beta}^* = k_\beta \left(\mathbf{I} + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b}_{\beta\beta} dA - \alpha_\beta^{-1} \langle \mathbf{v}_\beta \mathbf{b}_{\beta\beta} \rangle^\beta \right), \quad (6.5.23c)$$

$$\mathbf{K}_{\beta\sigma}^* = k_\beta \left(\frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b}_{\beta\sigma} dA - \alpha_\beta^{-1} \langle \mathbf{v}_\beta \mathbf{b}_{\beta\sigma} \rangle^\beta \right), \quad (6.5.23d)$$

$$h = -\frac{1}{A_{\beta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla_{\mathbf{r}} s_\beta dA = \frac{1}{A_{\beta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} s_\sigma dA, \quad (6.5.23e)$$

$$av = \frac{A_{\beta\sigma}}{V}, \quad (6.5.23f)$$

$$\mathbf{v}_{eff}^{\sigma\beta} = \frac{\alpha_\sigma}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot (\mathbf{l}_{s_\sigma} + \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{b}_{\sigma\beta}) dA, \quad (6.5.24a)$$

$$\mathbf{v}_{eff}^{\sigma\sigma} = \frac{\alpha_\sigma}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot (\mathbf{l}_{s_\sigma} - \alpha_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{b}_{\sigma\sigma}) dA, \quad (6.5.24b)$$

$$\mathbf{K}_{\sigma\beta} = \frac{k_\sigma}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \mathbf{b}_{\sigma\beta} dA, \quad (6.5.24c)$$

$$\mathbf{K}_{\sigma\sigma} = k_\sigma \left(\mathbf{I} + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \mathbf{b}_{\sigma\sigma} dA \right). \quad (6.5.24d)$$

Entonces, las ecuaciones (6.5.22) pueden expresarse como sigue:

$$\rho_\beta C_{p\beta} \frac{\partial \langle T_\beta \rangle^\beta}{\partial t} + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle T_\beta \rangle^\beta \mathbf{v}_{eff}^{\beta\beta} - \langle T_\sigma \rangle^\beta \mathbf{v}_{eff}^{\beta\sigma} \right) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\mathbf{K}_{\beta\beta}^* \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\beta \rangle^\beta + \mathbf{K}_{\beta\sigma}^* \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) - a_v h \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right), \quad (6.5.25a)$$

$$\rho_\sigma C_{p\sigma} \frac{\partial \langle T_\sigma \rangle^\sigma}{\partial t} + \rho_\sigma C_{p\sigma} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle T_\sigma \rangle^\sigma \mathbf{v}_{eff}^{\sigma\sigma} - \langle T_\beta \rangle^\sigma \mathbf{v}_{eff}^{\sigma\beta} \right) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\mathbf{K}_{\sigma\sigma} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\sigma \rangle^\sigma + \mathbf{K}_{\sigma\beta} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\beta \rangle^\beta \right) + a_v h \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right). \quad (6.5.25b)$$

Esta es la forma final del modelo de no equilibrio. Este resultado es consistente con el modelo deducido por [Quintard y col. \(1997\)](#). Este modelo es adecuado cuando se tiene interés en conocer la temperatura promedio de cada fase del sistema. Como puede notarse, en este caso es necesario resolver dos problemas de cerradura para determinar los valores de los numerosos coeficientes de medio efectivo definidos en las ecuaciones (6.5.24). Esta cantidad de coeficientes se reduce cuando el interés no está en contar con ecuaciones promedio en cada fase, sino en solo una temperatura promedio para todo el sistema como se muestra a continuación.

6.5.4 Modelo de equilibrio

Este modelo parte de la siguiente definición de la temperatura promedio (ver la ecuación 6.2.2)

$$\langle T \rangle = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}} T dV = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}_\beta} T_\beta dV + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}_\sigma} T_\sigma dV = \langle T_\beta \rangle_\beta + \langle T_\sigma \rangle_\sigma = \varepsilon_\beta \langle T_\beta \rangle^\beta + \varepsilon_\sigma \langle T_\sigma \rangle^\sigma. \quad (6.5.26)$$

La suposición de equilibrio local térmico no debe confundirse con la condición de equilibrio termodinámico en la cual no ocurre ningún cambio espacio-temporal de temperatura (ver sección 1.6.3). La suposición de equilibrio local térmico consiste en la siguiente aproximación

$$\langle T_\beta \rangle^\beta \approx \langle T_\sigma \rangle^\sigma. \quad (6.5.27)$$

En otras palabras, en un modelo de equilibrio local térmico si hay transferencia de calor en ambas fases, pero se hace la suposición que la temperatura promedio resultante del transporte en cada fase es aproximadamente la misma. Al sustituir esta aproximación en la última igualdad de la ecuación (6.5.26) se deduce que $\langle T_\beta \rangle^\beta \approx \langle T_\sigma \rangle^\sigma = \langle T \rangle$ y una aproximación análoga se supone para el flux. Aplicando esta aproximación a las ecuaciones (6.5.16) se deduce el siguiente problema para las

desviaciones espaciales de la temperatura.

$$\rho_\beta C_{p\beta} \tilde{\mathbf{v}}_\beta \cdot \underbrace{\nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle^\beta}_{\text{fuente}} + \rho_\beta C_{p\beta} \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\beta = k_\beta \nabla_{\mathbf{r}}^2 \tilde{T}_\beta - \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\beta dA, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.5.28a)$$

$$0 = k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}}^2 \tilde{T}_\sigma - \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_\sigma \cdot k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\sigma dA, \quad \text{en la fase-}\sigma, \quad (6.5.28b)$$

$$\tilde{T}_\beta = \tilde{T}_\sigma, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.5.28c)$$

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\beta - \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (k_\beta - k_\sigma) \underbrace{\nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle}_{\text{fuente}} = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\sigma, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.5.28d)$$

$$\tilde{T}_j(\mathbf{r}) = \tilde{T}_j(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i), \quad i = 1, 2, 3; j = \beta, \sigma, \quad (6.5.28e)$$

$$\langle \tilde{T}_i \rangle^i = 0, \quad i = \beta, \sigma. \quad (6.5.28f)$$

A diferencia del problema dado en las ecuaciones (6.5.16), el problema anterior solo tiene una fuente y su solución formal puede expresarse como sigue:

$$\tilde{T}_\beta = \mathbf{b}_\beta \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle, \quad (6.5.29a)$$

$$\tilde{T}_\sigma = \mathbf{b}_\sigma \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle. \quad (6.5.29b)$$

En donde las variables de cerradura \mathbf{b}_β y \mathbf{b}_σ satisfacen el siguiente problema de valor a la frontera

$$\rho_\beta C_{p\beta} \tilde{\mathbf{v}}_\beta + \rho_\beta C_{p\beta} \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{b}_\beta = k_\beta \nabla_{\mathbf{r}}^2 \mathbf{b}_\beta - \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{b}_\beta dA, \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.5.30a)$$

$$\mathbf{0} = k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}}^2 \mathbf{b}_\sigma - \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_\sigma \cdot k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{b}_\sigma dA, \quad \text{en la fase-}\sigma, \quad (6.5.30b)$$

$$\mathbf{b}_\beta = \mathbf{b}_\sigma, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.5.30c)$$

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{b}_\beta - \mathbf{n}_{\beta\sigma} (k_\beta - k_\sigma) = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{b}_\sigma, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.5.30d)$$

$$\mathbf{b}_j(\mathbf{r}) = \mathbf{b}_j(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i), \quad i = 1, 2, 3; j = \beta, \sigma, \quad (6.5.30e)$$

$$\langle \mathbf{b}_i \rangle^i = \mathbf{0}, \quad i = \beta, \sigma. \quad (6.5.30f)$$

En este momento, es conveniente regresar la atención a las ecuaciones (6.5.11) y reformularlas multiplicando ambos lados por la fracción volumétrica en cada fase para así obtener las siguientes expresiones

$$\begin{aligned} & \varepsilon_\beta \rho_\beta C_{p\beta} \frac{\partial \langle T_\beta \rangle^\beta}{\partial t} + \varepsilon_\beta \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle T_\beta \rangle^\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \right) + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \tilde{T}_\beta \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta \\ &= \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[k_\beta \left(\varepsilon_\beta \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\beta \rangle^\beta + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{T}_\beta dA \right) \right] + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\beta dA, \end{aligned} \quad (6.5.31a)$$

$$\begin{aligned} & \varepsilon_\sigma \rho_\sigma C_{p\sigma} \frac{\partial \langle T_\sigma \rangle^\sigma}{\partial t} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[k_\sigma \left(\varepsilon_\sigma \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\sigma \rangle^\sigma + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{T}_\sigma dA \right) \right] + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\sigma dA. \end{aligned} \quad (6.5.31b)$$

O bien, bajo la suposición de equilibrio local térmico

$$\begin{aligned} & \varepsilon_\beta \rho_\beta C_{p\beta} \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\langle T \rangle \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta) + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \tilde{T}_\beta \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta \\ &= \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[k_\beta \left(\varepsilon_\beta \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{T}_\beta dA \right) \right] + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\beta dA, \end{aligned} \quad (6.5.32a)$$

$$\varepsilon_\sigma \rho_\sigma C_{p\sigma} \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[k_\sigma \left(\varepsilon_\sigma \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \tilde{T}_\sigma dA \right) \right] + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\sigma dA. \quad (6.5.32b)$$

Note que, usando la condición de frontera dada en la ecuación (6.5.28d), se deduce que

$$\frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\beta dA = - \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} \tilde{T}_\sigma dA - \underbrace{\frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} dA}_{-\nabla \varepsilon_\beta = 0} \cdot (k_\beta - k_\sigma) \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle. \quad (6.5.33)$$

Tomando en cuenta este resultado y sumando las ecuaciones (6.5.32) se obtiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} & (\varepsilon_\beta \rho_\beta C_{p\beta} + \varepsilon_\sigma \rho_\sigma C_{p\sigma}) \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + \varepsilon_\beta \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\langle T \rangle \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta) + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \tilde{T}_\beta \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta \\ &= \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[(\varepsilon_\beta k_\beta + \varepsilon_\sigma k_\sigma) \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle + \frac{k_\beta - k_\sigma}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{T}_\beta dA \right]. \end{aligned} \quad (6.5.34)$$

En el último término se utilizó la condición de frontera dada en la ecuación (6.5.28c). Sustituyendo la solución formal reportada en la ecuación (6.5.29a) en los filtros integrales de la ecuación anterior, se obtiene

$$\begin{aligned} & (\varepsilon_\beta \rho_\beta C_{p\beta} + \varepsilon_\sigma \rho_\sigma C_{p\sigma}) \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + \varepsilon_\beta \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\langle T \rangle \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta) \\ &= \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[(\varepsilon_\beta k_\beta + \varepsilon_\sigma k_\sigma) \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle + \frac{k_\beta - k_\sigma}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b}_\beta dA \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle - \rho_\beta C_{p\beta} \langle \mathbf{v}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle_\beta \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle \right]. \end{aligned} \quad (6.5.35)$$

Para simplificar esta expresión se define el siguiente tensor de dispersión total de calor

$$\mathbf{K}_{eq}^* = (\varepsilon_\beta k_\beta + \varepsilon_\sigma k_\sigma) \mathbf{I} + \frac{k_\beta - k_\sigma}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b}_\beta dA - \rho_\beta C_{p\beta} \langle \mathbf{v}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle_\beta. \quad (6.5.36)$$

Usando esta definición, se obtiene la siguiente forma del modelo de equilibrio:

$$(\varepsilon_\beta \rho_\beta C_{p\beta} + \varepsilon_\sigma \rho_\sigma C_{p\sigma}) \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + \varepsilon_\beta \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\langle T \rangle \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{K}_{eq}^* \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle). \quad (6.5.37)$$

Ya que las fracciones volumétricas y las propiedades térmicas de cada fase se supusieron constantes, la ecuación anterior puede escribirse en la siguiente forma más sencilla

$$\frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + \varphi_\beta \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\langle T \rangle \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{K}_{eq} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle). \quad (6.5.38)$$

En donde, para simplificar la notación, se usaron las siguientes definiciones

$$\varphi_\beta = \frac{\varepsilon_\beta \rho_\beta C_{p\beta}}{\varepsilon_\beta \rho_\beta C_{p\beta} + \varepsilon_\sigma \rho_\sigma C_{p\sigma}}, \quad (6.5.39a)$$

$$\mathbf{K}_{eq} = \frac{\mathbf{K}_{eq}^*}{\varepsilon_\beta \rho_\beta C_{p\beta} + \varepsilon_\sigma \rho_\sigma C_{p\sigma}}. \quad (6.5.39b)$$

El modelo de equilibrio es claramente más sencillo que el modelo de no equilibrio y dos ecuaciones dado en las ecuaciones (6.5.25). Sin embargo, el modelo de equilibrio tiene más suposiciones que el de no equilibrio y esto limita su aplicación. De hecho, como lo muestran *Golfier y col. (2009)* en su estudio de transporte y reacción en medios porosos recubiertos de biopelículas, el modelo de equilibrio es adecuado cuando los mecanismos de transporte en ambas fases son prácticamente los mismos. Esto quiere decir que cuando el transporte convectivo en la fase fluida es mucho mayor que el transporte por conducción, hay razones para pensar que el modelo de equilibrio no aportará predicciones confiables. Lo anterior sugiere el desarrollo de un modelo de no equilibrio y de una ecuación, lo cual se presenta en los siguientes párrafos.

6.5.5 Modelo de no equilibrio y una ecuación

El planteamiento de este modelo comienza con las ecuaciones (6.5.7), las cuales se reescriben aquí como sigue

$$\begin{aligned} \rho_\beta C_{p\beta} \frac{\partial \langle T_\beta \rangle_\beta}{\partial t} + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle T_\beta \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta &= \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[k_\beta \left(\nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\beta \rangle_\beta + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} T_\beta dA \right) \right] \\ + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla_{\mathbf{r}} T_\beta dA, \end{aligned} \quad (6.5.40a)$$

$$\rho_\sigma C_{p\sigma} \frac{\partial \langle T_\sigma \rangle_\sigma}{\partial t} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[k_\sigma \left(\nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\sigma \rangle_\sigma + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} T_\sigma dA \right) \right] + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}} T_\sigma dA. \quad (6.5.40b)$$

Sumando las ecuaciones anteriores tomando en cuenta las condiciones de continuidad del flux de calor y de la temperatura interfacial lleva a

$$\begin{aligned} \rho_\beta C_{p\beta} \frac{\partial \langle T_\beta \rangle_\beta}{\partial t} + \rho_\sigma C_{p\sigma} \frac{\partial \langle T_\sigma \rangle_\sigma}{\partial t} + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle T_\beta \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta \\ = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(k_\beta \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\beta \rangle_\beta + k_\sigma \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_\sigma \rangle_\sigma + \frac{k_\beta - k_\sigma}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} T_\beta dA \right). \end{aligned} \quad (6.5.41)$$

En este modelo, se define una nueva descomposición espacial respecto del promedio de la temperatura definido en la ecuación (6.5.26):

$$T_\beta = \langle T \rangle + \hat{T}_\beta, \quad (6.5.42a)$$

$$T_\sigma = \langle T \rangle + \hat{T}_\sigma. \quad (6.5.42b)$$

Aplicando los operadores de promedio superficial correspondientes a cada fase en las ecuaciones anteriores se obtiene que

$$\langle T_\beta \rangle_\beta = \varepsilon_\beta \langle T \rangle + \langle \hat{T}_\beta \rangle_\beta, \quad (6.5.43a)$$

$$\langle T_\sigma \rangle_\sigma = \varepsilon_\sigma \langle T \rangle + \langle \hat{T}_\sigma \rangle_\sigma. \quad (6.5.43b)$$

Sumando las ecuaciones anteriores, se deduce la siguiente restricción promedio para las nuevas desviaciones espaciales

$$\langle \hat{T} \rangle = \langle \hat{T}_\beta \rangle_\beta + \langle \hat{T}_\sigma \rangle_\sigma = 0. \quad (6.5.44)$$

Sustituyendo las ecuaciones (6.5.42) y (6.5.43) en la ecuación (6.5.41) se obtiene que

$$\begin{aligned} & (\varepsilon_\beta \rho_\beta C_{p\beta} + \varepsilon_\sigma \rho_\sigma C_{p\sigma}) \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + \rho_\beta C_{p\beta} \frac{\partial \langle \hat{T}_\beta \rangle_\beta}{\partial t} + \rho_\sigma C_{p\sigma} \frac{\partial \langle \hat{T}_\sigma \rangle_\sigma}{\partial t} \\ & + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\langle T \rangle \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta) + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \hat{T}_\beta \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta \\ & = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left((\varepsilon_\beta k_\beta + \varepsilon_\sigma k_\sigma) \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle + k_\beta \nabla_{\mathbf{x}} \langle \hat{T}_\beta \rangle_\beta + k_\sigma \nabla_{\mathbf{x}} \langle \hat{T}_\sigma \rangle_\sigma + \frac{k_\beta - k_\sigma}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \hat{T}_\beta dA \right). \end{aligned} \quad (6.5.45)$$

Para abreviar la ecuación anterior puede usarse el teorema del promediado espacial para obtener:

$$k_\beta \nabla_{\mathbf{x}} \langle \hat{T}_\beta \rangle_\beta + k_\sigma \nabla_{\mathbf{x}} \langle \hat{T}_\sigma \rangle_\sigma + \frac{k_\beta - k_\sigma}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \hat{T}_\beta dA = k_\beta \langle \nabla_{\mathbf{r}} \hat{T}_\beta \rangle_\beta + k_\sigma \langle \nabla_{\mathbf{r}} \hat{T}_\sigma \rangle_\sigma. \quad (6.5.46)$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación (6.5.45) se obtiene que

$$\begin{aligned} & (\varepsilon_\beta \rho_\beta C_{p\beta} + \varepsilon_\sigma \rho_\sigma C_{p\sigma}) \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + \rho_\beta C_{p\beta} \frac{\partial \langle \hat{T}_\beta \rangle_\beta}{\partial t} + \rho_\sigma C_{p\sigma} \frac{\partial \langle \hat{T}_\sigma \rangle_\sigma}{\partial t} \\ & + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\langle T \rangle \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta) + \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \hat{T}_\beta \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta \\ & = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot [(\varepsilon_\beta k_\beta + \varepsilon_\sigma k_\sigma) \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle + k_\beta \langle \nabla_{\mathbf{r}} \hat{T}_\beta \rangle_\beta + k_\sigma \langle \nabla_{\mathbf{r}} \hat{T}_\sigma \rangle_\sigma]. \end{aligned} \quad (6.5.47)$$

La anterior es la forma no cerrada del modelo de no-equilibrio. Restando la ecuación anterior a las ecuaciones diferenciales que gobiernan el transporte de calor en cada fase a la escala de poro (ecuaciones 6.5.1a y 6.5.1b) resultan las siguientes expresiones

$$\begin{aligned} & \varepsilon_\sigma (\rho_\beta C_{p\beta} - \rho_\sigma C_{p\sigma}) \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + \rho_\beta C_{p\beta} \frac{\partial \hat{T}_\beta}{\partial t} - \rho_\beta C_{p\beta} \frac{\partial \langle \hat{T}_\beta \rangle_\beta}{\partial t} - \rho_\sigma C_{p\sigma} \frac{\partial \langle \hat{T}_\sigma \rangle_\sigma}{\partial t} \\ & + \rho_\beta C_{p\beta} \left[\varepsilon_\sigma \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle + \tilde{\mathbf{v}}_\beta \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\hat{T}_\beta \mathbf{v}_\beta) - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \hat{T}_\beta \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta \right] \\ & = k_\beta \nabla_{\mathbf{r}}^2 \hat{T}_\beta + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot [\varepsilon_\sigma (k_\beta - k_\sigma) \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle - k_\beta \langle \nabla_{\mathbf{r}} \hat{T}_\beta \rangle_\beta - k_\sigma \langle \nabla_{\mathbf{r}} \hat{T}_\sigma \rangle_\sigma], \end{aligned} \quad (6.5.48a)$$

$$\begin{aligned} & \varepsilon_\beta (\varepsilon_\sigma \rho_\sigma C_{p\sigma} - \rho_\beta C_{p\beta}) \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} - \rho_\beta C_{p\beta} \frac{\partial \langle \hat{T}_\beta \rangle_\beta}{\partial t} + \rho_\sigma C_{p\sigma} \frac{\partial \hat{T}_\sigma}{\partial t} - \rho_\sigma C_{p\sigma} \frac{\partial \langle \hat{T}_\sigma \rangle_\sigma}{\partial t} \\ & - \rho_\beta C_{p\beta} \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle - \rho_\beta C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \hat{T}_\beta \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta \\ & = k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}}^2 \hat{T}_\sigma + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot [\varepsilon_\beta (k_\sigma - k_\beta) \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle - k_\beta \langle \nabla_{\mathbf{r}} \hat{T}_\beta \rangle_\beta - k_\sigma \langle \nabla_{\mathbf{r}} \hat{T}_\sigma \rangle_\sigma]. \end{aligned} \quad (6.5.48b)$$

Las cuales se pueden simplificar bajo condiciones de estado cuasi-estacionario y despreciando las contribuciones de los términos no locales respecto a sus contrapartes locales como se hizo en secciones anteriores para dar lugar a las siguientes expresiones

$$\begin{aligned} & \varepsilon_\sigma (\rho_\beta C_{p\beta} - \rho_\sigma C_{p\sigma}) \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} - \rho_\beta C_{p\beta} \frac{\partial \langle \hat{T}_\beta \rangle_\beta}{\partial t} - \rho_\sigma C_{p\sigma} \frac{\partial \langle \hat{T}_\sigma \rangle_\sigma}{\partial t} \\ & + \rho_\beta C_{p\beta} \left[\varepsilon_\sigma \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle + \tilde{\mathbf{v}}_\beta \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\hat{T}_\beta \mathbf{v}_\beta) \right] \\ & = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot [\varepsilon_\sigma (k_\beta - k_\sigma) \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle] + k_\beta \nabla_{\mathbf{r}}^2 \hat{T}_\beta, \end{aligned} \quad (6.5.49a)$$

$$\begin{aligned} & \varepsilon_\beta (\varepsilon_\sigma \rho_\sigma C_{p\sigma} - \rho_\beta C_{p\beta}) \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} - \rho_\beta C_{p\beta} \frac{\partial \langle \hat{T}_\beta \rangle_\beta}{\partial t} - \rho_\sigma C_{p\sigma} \frac{\partial \langle \hat{T}_\sigma \rangle_\sigma}{\partial t} \\ & - \rho_\beta C_{p\beta} \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot [\varepsilon_\beta (k_\sigma - k_\beta) \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle] + k_\sigma \nabla_{\mathbf{r}}^2 \hat{T}_\sigma. \end{aligned} \quad (6.5.49b)$$

Más aún, para situaciones en las cuales se cumplen las siguientes suposiciones

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot [\varepsilon_{\sigma}(k_{\beta} - k_{\sigma})\nabla\langle T \rangle] \ll k_{\beta}\nabla_{\mathbf{r}}^2\hat{T}_{\beta}, \quad (6.5.50a)$$

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot [\varepsilon_{\beta}(k_{\sigma} - k_{\beta})\nabla\langle T \rangle] \ll k_{\sigma}\nabla_{\mathbf{r}}^2\hat{T}_{\sigma}, \quad (6.5.50b)$$

$$\varepsilon_{\sigma}(\rho_{\beta}C_{p\beta} - \rho_{\sigma}C_{p\sigma})\frac{\partial\langle T \rangle}{\partial t} - \rho_{\beta}C_{p\beta}\frac{\partial\langle\hat{T}_{\beta}\rangle_{\beta}}{\partial t} - \rho_{\sigma}C_{p\sigma}\frac{\partial\langle\hat{T}_{\sigma}\rangle_{\sigma}}{\partial t} \ll k_{\beta}\nabla_{\mathbf{r}}^2\hat{T}_{\beta}, \quad (6.5.50c)$$

$$\varepsilon_{\beta}(\varepsilon_{\sigma}\rho_{\sigma}C_{p\sigma} - \rho_{\beta}C_{p\beta})\frac{\partial\langle T \rangle}{\partial t} - \rho_{\beta}C_{p\beta}\frac{\partial\langle\hat{T}_{\beta}\rangle_{\beta}}{\partial t} - \rho_{\sigma}C_{p\sigma}\frac{\partial\langle\hat{T}_{\sigma}\rangle_{\sigma}}{\partial t} \ll k_{\sigma}\nabla_{\mathbf{r}}^2\hat{T}_{\sigma}, \quad (6.5.50d)$$

las ecuaciones para las desviaciones se reducen a

$$\rho_{\beta}C_{p\beta} \left[\varepsilon_{\sigma}\langle\mathbf{v}_{\beta}\rangle^{\beta} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}\langle T \rangle + \tilde{\mathbf{v}}_{\beta} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}\langle T \rangle + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\hat{T}_{\beta}\mathbf{v}_{\beta}) \right] = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (k_{\beta}\nabla_{\mathbf{r}}\hat{T}_{\beta}), \quad (6.5.51a)$$

$$-\rho_{\beta}C_{p\beta}\langle\mathbf{v}_{\beta}\rangle_{\beta} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}\langle T \rangle = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (k_{\sigma}\nabla_{\mathbf{r}}\hat{T}_{\sigma}). \quad (6.5.51b)$$

Aplicando las descomposiciones espaciales definidas en las ecuaciones (6.5.42) en las ecuaciones (6.5.1c) y (6.5.1d), se deducen las siguientes condiciones de frontera:

$$\hat{T}_{\beta} = \hat{T}_{\sigma}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.5.51c)$$

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_{\beta}\nabla_{\mathbf{r}}\hat{T}_{\beta} - \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (k_{\beta} - k_{\sigma})\nabla_{\mathbf{x}}\langle T \rangle = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_{\sigma}\nabla_{\mathbf{r}}\hat{T}_{\sigma}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}. \quad (6.5.51d)$$

El planteamiento del problema se completa con la condición de periodicidad

$$\hat{T}_j(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \hat{T}_j(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3; j = \beta, \sigma, \quad (6.5.51e)$$

y con la restricción promedio dada en la ecuación (6.5.44). Ya que el problema es lineal y solo se cuenta con una fuente, se puede proponer la siguiente solución formal

$$\hat{T}_{\beta} = \mathbf{f}_{\beta} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}\langle T \rangle, \quad (6.5.52a)$$

$$\hat{T}_{\sigma} = \mathbf{f}_{\sigma} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}\langle T \rangle. \quad (6.5.52b)$$

Las variables de cerradura satisfacen el siguiente problema de cerradura

$$\rho_{\beta}C_{p\beta} \left[\varepsilon_{\sigma}\langle\mathbf{v}_{\beta}\rangle^{\beta} + \tilde{\mathbf{v}}_{\beta} + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathbf{f}_{\beta}\mathbf{v}_{\beta}) \right] = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (k_{\beta}\nabla_{\mathbf{r}}\mathbf{f}_{\beta}), \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.5.53a)$$

$$-\rho_{\beta}C_{p\beta}\langle\mathbf{v}_{\beta}\rangle_{\beta} = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot (k_{\sigma}\nabla_{\mathbf{r}}\mathbf{f}_{\sigma}), \quad \text{en la fase-}\sigma, \quad (6.5.53b)$$

$$\mathbf{f}_{\beta} = \mathbf{f}_{\sigma}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.5.53c)$$

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_{\beta}\nabla_{\mathbf{r}}\mathbf{f}_{\beta} - \mathbf{n}_{\beta\sigma}(k_{\beta} - k_{\sigma}) = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_{\sigma}\nabla_{\mathbf{r}}\mathbf{f}_{\sigma}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma}, \quad (6.5.53d)$$

$$\mathbf{f}_j(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{f}_j(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3; j = \beta, \sigma, \quad (6.5.53e)$$

$$\langle\mathbf{f}_{\beta}\rangle_{\beta} + \langle\mathbf{f}_{\sigma}\rangle_{\sigma} = \mathbf{0}. \quad (6.5.53f)$$

Ya que las desviaciones espaciales se supusieron en estado cuasiestacionario, el modelo no cerrado dado en la ecuación (6.5.47) se reduce a

$$\begin{aligned} & (\varepsilon_{\beta}\rho_{\beta}C_{p\beta} + \varepsilon_{\sigma}\rho_{\sigma}C_{p\sigma})\frac{\partial\langle T \rangle}{\partial t} + \rho_{\beta}C_{p\beta}\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\langle T \rangle\langle\mathbf{v}_{\beta}\rangle_{\beta}) + \rho_{\beta}C_{p\beta}\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle\hat{T}_{\beta}\mathbf{v}_{\beta}\rangle_{\beta} \\ & = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot [(\varepsilon_{\beta}k_{\beta} + \varepsilon_{\sigma}k_{\sigma})\nabla_{\mathbf{x}}\langle T \rangle + k_{\beta}\langle\nabla_{\mathbf{r}}\hat{T}_{\beta}\rangle_{\beta} + k_{\sigma}\langle\nabla_{\mathbf{r}}\hat{T}_{\sigma}\rangle_{\sigma}]. \end{aligned} \quad (6.5.54)$$

Sustituyendo en la ecuación anterior la solución dada en las ecuaciones (6.5.52), resulta la forma final de este modelo, la cual se expresa como sigue

$$(\varepsilon_{\beta}\rho_{\beta}C_{p\beta} + \varepsilon_{\sigma}\rho_{\sigma}C_{p\sigma})\frac{\partial\langle T \rangle}{\partial t} + \varepsilon^{\beta}\rho_{\beta}C_{p\beta}\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\langle T \rangle\langle\mathbf{v}_{\beta}\rangle^{\beta}) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{K}_{ne}^* \cdot \nabla_{\mathbf{x}}\langle T \rangle). \quad (6.5.55)$$

En donde se definió al tensor de dispersión total de calor para el modelo de no equilibrio como

$$\mathbf{K}_{ne}^* = (\varepsilon_{\beta}k_{\beta} + \varepsilon_{\sigma}k_{\sigma})\mathbf{I} + k_{\beta}\langle\nabla_{\mathbf{r}}\mathbf{f}_{\beta}\rangle_{\beta} + k_{\sigma}\langle\nabla_{\mathbf{r}}\mathbf{f}_{\sigma}\rangle_{\sigma} - \rho_{\beta}C_{p\beta}\langle\mathbf{v}_{\beta}\mathbf{f}_{\beta}\rangle_{\beta}. \quad (6.5.56)$$

Al igual que en el modelo de equilibrio, la ecuación (6.5.55) puede reacomodarse como sigue

$$\frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + \varphi_{\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle T \rangle \langle \mathbf{v}_{\beta} \rangle^{\beta} \right) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{K}_{ne} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle). \quad (6.5.57)$$

En la ecuación anterior, se redefinió al tensor de dispersión de calor como

$$\mathbf{K}_{ne} = \frac{\mathbf{K}_{ne}^*}{\varepsilon_{\beta} \rho_{\beta} C_{p\beta} + \varepsilon_{\sigma} \rho_{\sigma} C_{p\sigma}}. \quad (6.5.58)$$

La estructura matemática de la ecuación (6.5.57) es similar a la de la ecuación resultante en el modelo de equilibrio (ecuación 6.5.38), la principal diferencia está en el problema de cerradura a resolver y en la definición del tensor de dispersión de calor. La deducción de este modelo de no equilibrio y de una ecuación es consistente con la metodología propuesta por Davit y col. (2010a). De hecho, estos autores mostraron que el desempeño de este modelo es superior al modelo de equilibrio bajo condiciones en las que el transporte por convección en la fase fluida es mayor que la difusión.

6.5.6 Resumen de los modelos de medio efectivo

Para concluir esta sección se listan a continuación los tres modelos desarrollados aquí:

- *Modelo de no equilibrio y dos ecuaciones*

$$\rho_{\beta} C_{p\beta} \frac{\partial \langle T_{\beta} \rangle^{\beta}}{\partial t} + \rho_{\beta} C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle T_{\beta} \rangle^{\beta} \mathbf{v}_{eff}^{\beta\beta} - \langle T_{\sigma} \rangle^{\beta} \mathbf{v}_{eff}^{\beta\sigma} \right) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\mathbf{K}_{\beta\beta}^* \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_{\beta} \rangle^{\beta} + \mathbf{K}_{\beta\sigma}^* \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma} \right) - a_v h \left(\langle T_{\beta} \rangle^{\beta} - \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma} \right), \quad (6.5.59a)$$

$$\rho_{\sigma} C_{p\sigma} \frac{\partial \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma}}{\partial t} + \rho_{\sigma} C_{p\sigma} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma} \mathbf{v}_{eff}^{\sigma\sigma} - \langle T_{\beta} \rangle^{\beta} \mathbf{v}_{eff}^{\sigma\beta} \right) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\mathbf{K}_{\sigma\sigma} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma} + \mathbf{K}_{\sigma\beta} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T_{\beta} \rangle^{\beta} \right) + a_v h \left(\langle T_{\beta} \rangle^{\beta} - \langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma} \right). \quad (6.5.59b)$$

- *Modelo de equilibrio*

$$(\varepsilon_{\beta} \rho_{\beta} C_{p\beta} + \varepsilon_{\sigma} \rho_{\sigma} C_{p\sigma}) \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + \varepsilon_{\beta} \rho_{\beta} C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle T \rangle \langle \mathbf{v}_{\beta} \rangle^{\beta} \right) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{K}^* \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle). \quad (6.5.60)$$

- *Modelo de no equilibrio y una ecuación*

$$(\varepsilon_{\beta} \rho_{\beta} C_{p\beta} + \varepsilon_{\sigma} \rho_{\sigma} C_{p\sigma}) \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + \varepsilon_{\beta} \rho_{\beta} C_{p\beta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\langle T \rangle \langle \mathbf{v}_{\beta} \rangle^{\beta} \right) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{K}_{ne}^* \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \langle T \rangle). \quad (6.5.61)$$

Aunque la estructura matemática de estos modelos es similar entre sí, la cantidad de información que contienen es diferente y por tanto su rango de aplicación también es distinto. Por ello, la elección del tipo de modelo a utilizar debe estar regida por el proceso de transporte bajo estudio y la cantidad de información que busque que aporte el modelo resultante.

Ejercicio 6.12 Deduzca el modelo de no equilibrio y de una ecuación a partir del modelo de dos ecuaciones. Esto incluye no solo la deducción de la ecuación macroscópica, sino también de los problemas de cerradura correspondientes. ■

Ejercicio 6.13 Actualmente una técnica de biorremediación *in situ* de suelos contaminados con hidrocarburos consiste en agregar plantas que liberan especies químicas (especie-A) que promueven la remoción de los hidrocarburos. Como se muestra en la figura 6.7, el sistema consiste en una raíz (fase- θ), rodeada por una fase líquida (fase- β). En ambas fases, el transporte se da solo por difusión. Además, hay difusión y reacción en la materia orgánica (región- ω). Bajo estas condiciones, las ecuaciones gobernantes de la transferencia de masa en la escala

microscópica son

$$\frac{\partial c_{A\beta}}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{D}_{A\beta} \nabla c_{A\beta}) \quad \text{en la fase-}\beta, \quad (6.5.62a)$$

$$\frac{\partial c_{A\theta}}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{D}_{A\theta} \nabla c_{A\theta}) \quad \text{en la fase-}\theta, \quad (6.5.62b)$$

$$\frac{\partial c_A^\omega}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{D}_A \cdot \nabla c_A^\omega) - k_{A\omega} c_A^\omega \quad \text{en la región-}\omega. \quad (6.5.62c)$$

Además, hay una fase gaseosa (fase- γ), pero no hay transporte de masa hacia dicha fase. Por lo tanto, se tiene la siguiente condición de frontera

$$-\mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla c_{A\beta} = 0 \quad \text{en la interfase } \beta\gamma. \quad (6.5.63)$$

En la interfase entre la raíz y el líquido hay resistencias a la transferencia de masa, cambio de fase y hay posibilidad de readsorción, por lo que aplican las siguientes condiciones de frontera:

$$-\mathbf{n}_{\theta\beta} \cdot \mathcal{D}_{A\theta} \nabla c_{A\theta} = -\mathbf{n}_{\theta\beta} \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla c_{A\beta} + k_1 c_{A\beta}, \quad \text{en la interfase } \theta\beta, \quad (6.5.64a)$$

$$-\mathbf{n}_{\theta\beta} \cdot \mathcal{D}_{A\theta} \nabla c_{A\theta} = k_M (c_{A\theta} - k_{eq} c_{A\beta}) \quad \text{en la interfase } \theta\beta. \quad (6.5.64b)$$

En la frontera entre la materia orgánica y el fluido se suponen aplicables condiciones de continuidad del flux de masa y también hay resistencias a la transferencia de masa, por lo que se pueden imponer las siguientes condiciones de frontera:

$$-\mathbf{n}_{\beta\omega} \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla c_{A\beta} = -\mathbf{n}_{\beta\omega} \cdot \mathbf{D}_A \cdot \nabla c_{A\omega}, \quad \text{en la inter-región } \beta\omega, \quad (6.5.65a)$$

$$-\mathbf{n}_{\beta\omega} \cdot \mathbf{D}_A \cdot \nabla c_{A\omega} = k(c_{A\beta} - c_{A\omega}), \quad \text{en la inter-región } \beta\omega. \quad (6.5.65b)$$

Por último, el suelo también tiene partículas minerales cuya superficie puede o no tener hidrocarburo adherido. Las superficies libres de hidrocarburo se denotan como σ y las que sí contienen hidrocarburo se denotan como η . Suponiendo una cinética de consumo de primer orden, se tienen las siguientes condiciones de frontera:

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla c_{A\beta} = 0, \quad \text{en la interfase } \beta\sigma, \quad (6.5.66a)$$

$$-\mathbf{n}_{\beta\eta} \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla c_{A\beta} = k_\eta c_{A\beta}, \quad \text{en la interfase } \beta\eta. \quad (6.5.66b)$$

Desarrolle los modelos de equilibrio y no equilibrio (y de una ecuación) para esta situación física. Como en este caso hay zonas en donde no hay transporte de masa, es conveniente usar la siguiente definición del promedio ponderado:

$$\langle c_A \rangle = \frac{1}{V_h} \int_{\mathcal{V}_h} c_A dV. \quad (6.5.67)$$

En donde $\mathcal{V}_h = \mathcal{V}_\theta + \mathcal{V}_\beta + \mathcal{V}_\omega$ representa el espacio disponible para la transferencia de masa. ■

6.6 Comentarios finales

En este capítulo se abordó el tema del escalamiento de ecuaciones que gobiernan el transporte de cantidad de movimiento, especies químicas en medios porosos. Se discutieron y aplicaron los métodos de homogenización y del promedio volumétrico, los cuales comparten varios elementos en común. Desde un punto de vista de información, el proceso de promediado no implica pérdida de la información proveniente del nivel de escala microscópico, sino un reacomodo en forma de una ecuación promediada y no cerrada. Esta ecuación contiene filtros de información (en forma de integrales superficiales o volumétricas) de la microescala que es aportada por los problemas de cerradura asociados al proceso de transporte bajo estudio. Por último, se definen coeficientes

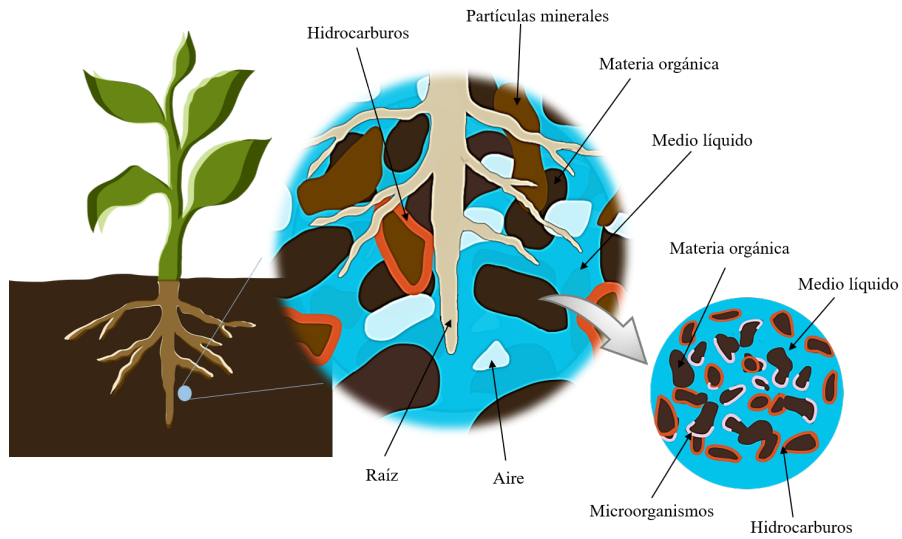


Figura 6.7: Esquema de la rizósfera de una planta.

de medio efectivo que contengan la información no redundante que aportaron los filtros. Cabe agregar que los métodos de promediado y escalamiento revisados no son los únicos que existen en la literatura y que aún existen puntos de mejora en las técnicas actuales así como muchos campos de aplicación más allá de los medios porosos donde estas técnicas pueden usarse.



7. Ecuaciones diferenciales parciales

7.1 Introducción

Este último capítulo está dedicado a ilustrar la solución de ecuaciones diferenciales parciales mediante el uso de la fórmula de Green y el método de expansiones propias. Aunque a primera vista pareciera que el material de este capítulo no encaja en contexto que es el modelado en sistemas de escalas múltiples, se mostrará que no es el caso. La razón es la siguiente: en textos dedicados a la solución de ecuaciones diferenciales parciales no se hace hincapié en la deducción del modelo ni en el análisis físico de la solución ya que el interés está en la aplicación de una técnica matemática. Además, en textos dedicados a fenómenos de transporte, se suelen obviar muchos pasos y conceptos esenciales de la solución de ecuaciones diferenciales parciales. Motivado por lo anterior es que en este capítulo se muestra que la complejidad de la ecuación diferencial parcial a utilizar depende de la cantidad de información que se necesite conservar para describir cierto fenómeno. Esto implica un proceso de promediado y escalamiento, al menos en una sola fase, como se ilustra en diversos ejemplos en este capítulo.

Por lo anterior, el capítulo está organizado como sigue: en la sección 7.2 se presentan algunos aspectos preliminares que tienen que ver con la solución de ciertos tipos de ecuaciones diferenciales ordinarias así como el problema de Sturm-Liouville y sus propiedades. Posteriormente, en la sección 7.3 se explica el uso de la fórmula de Green y la expansión en funciones propias mediante la solución de un problema unidimensional en estado estacionario cuya solución analítica es fácil de deducir. Esta técnica se utiliza en el resto del capítulo incrementando gradualmente la complejidad de los problemas a tratar. De esta forma, en la sección 7.5 se aplica esta metodología para la solución de una ecuación diferencial parabólica unidimensional. Además, se ilustra el uso del método de transformada de Laplace. Posteriormente, en la sección 7.6 se estudia la solución de una ecuación diferencial elíptica bidimensional que incluye un término no homogéneo usando funciones propias en una y dos direcciones. Todos los problemas anteriores involucran algún tipo de escalamiento que permite reducir su dimensión espacial. Por lo que el capítulo se concluye en la sección 7.7 con la solución de una ecuación diferencial parcial transitoria, tridimensional y no homogénea.

Como puede notarse, esta técnica de solución puede aplicarse tanto a la solución de problemas a escala microscópica como a problemas resultantes de un proceso de promediado. A pesar de que en la actualidad es común el uso de software para llevar a cabo la solución numérica de ecuaciones diferenciales, siempre que sea posible llevar a cabo soluciones analíticas debe hacerse ya que aportan resultados exactos a los cuales las soluciones numéricas deben converger. Más aún, incluso en casos en los que no sea posible llevar a cabo la solución analítica (por ejemplo

debido a la complejidad de la geometría), es valioso llevar a cabo soluciones analíticas de versiones aproximadas del modelo matemático para tener una guía de los resultados cualitativos que debe seguir una solución numérica del problema más completo.

7.2 Preliminares

7.2.1 Acerca de la solución de ecuaciones diferenciales de segundo orden

Considere la siguiente ecuación diferencial de segundo orden

$$\frac{d^2y}{dx^2} - \alpha y = 0, \quad (7.2.1)$$

donde α es una constante positiva conocida. Para resolver esta ecuación se propone la siguiente solución (también conocida como función de prueba)

$$y = e^{mx}, \quad (7.2.2)$$

donde m es una constante que se debe determinar. Sustituyendo esta propuesta en la ecuación (7.2.1) resulta que

$$(m^2 - \alpha) e^{mx} = 0. \quad (7.2.3)$$

Para satisfacer esta ecuación debe ser cierto que el término entre paréntesis es cero, ya que de otra forma la función de prueba sería cero y la solución del problema sería nula. Entonces, se deduce la siguiente ecuación algebraica

$$m^2 - \alpha = 0, \quad (7.2.4)$$

de donde se deduce que $m = \pm\sqrt{\alpha}$. Dado que hay dos valores de m que satisfacen la ecuación, la solución se expresa como la siguiente superposición:

$$y = c_1 e^{\sqrt{\alpha}x} + c_2 e^{-\sqrt{\alpha}x}, \quad (7.2.5)$$

donde las constantes c_1 y c_2 se determinan a partir de las condiciones de frontera. Esta forma de expresar la solución es muy útil cuando se manejan problemas en dominios semi-infinitos. Cuando el dominio de solución es finito, es conveniente recordar las definiciones del seno y el coseno hiperbólicos

$$\sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}; \quad \cosh x = \frac{e^x + e^{-x}}{2}. \quad (7.2.6)$$

Note que al combinar estas definiciones se deducen las siguientes identidades

$$\begin{aligned} e^x &= \sinh x + \cosh x, \\ e^{-x} &= \cosh x - \sinh x. \end{aligned} \quad (7.2.7)$$

Usando estos resultados en la ecuación (7.2.5) se obtiene que

$$y = A \sinh \sqrt{\alpha}x + B \cosh \sqrt{\alpha}x, \quad (7.2.8)$$

donde $A = c_1 - c_2$ y $B = c_1 + c_2$ son dos constantes a determinar mediante las condiciones de frontera.

7.2.2 Identidades de funciones trigonométricas hiperbólicas

Cuando la solución se expresa en términos de funciones hiperbólicas es conveniente considerar las siguientes identidades para simplificar los resultados

$$\sinh(x \pm y) = \sinh x \cosh y \pm \cosh x \sinh y, \quad (7.2.9a)$$

$$\cosh(x \pm y) = \cosh x \cosh y \pm \sinh x \sinh y. \quad (7.2.9b)$$

Además, las funciones hiperbólicas se relacionan con sus contrapartes trigonométricas tradicionales mediante las siguientes fórmulas

$$\sinh(ix) = i \operatorname{sen}(x), \quad (7.2.10a)$$

$$\cosh(ix) = \cos(x). \quad (7.2.10b)$$

De hecho estas dos identidades son especialmente importantes cuando se desean resolver ecuaciones diferenciales del siguiente tipo

$$\frac{d^2y}{dx^2} + \alpha y = 0. \quad (7.2.11)$$

De acuerdo con lo expuesto arriba, la solución en este caso se puede expresar como sigue

$$y = A \sinh(i\sqrt{\alpha}x) + B \cosh(i\sqrt{\alpha}x). \quad (7.2.12)$$

O bien, en términos de funciones trigonométricas

$$y = A^* \operatorname{sen}(\sqrt{\alpha}x) + B \cos(\sqrt{\alpha}x), \quad (7.2.13)$$

donde $A^* = iA$.

7.2.3 Solución de ecuaciones no homogéneas

En algunos problemas, es normal encontrar casos como el siguiente:

$$\frac{d^2y}{dx^2} - \alpha y = f(x). \quad (7.2.14)$$

Para resolver esta ecuación diferencial no homogénea, la solución se parte en dos: la solución del problema homogéneo (es decir, tomando $f(x) = 0$) y la solución del problema particular. Es decir,

$$y = y_h + y_p. \quad (7.2.15)$$

Donde en este caso $y_h = A \sinh(\sqrt{\alpha}x) + B \cosh(\sqrt{\alpha}x)$, mientras que y_p depende de la forma matemática que tenga $f(x)$. Por ejemplo, si $f(x) = ax$, en este caso corresponde a un polinomio de primer orden y se propone

$$y_p = K_0 + K_1x. \quad (7.2.16)$$

Si la función hubiera sido una constante entonces se propone simplemente $y_p = K_0$ o si hubiera sido un polinomio de segundo orden, entonces se propone $y_p = K_0 + K_1x + K_2x^2$. Volviendo al ejemplo, para determinar a K_0 y K_1 se sustituye la solución particular en la ecuación diferencial obteniendo

$$-\alpha K_0 - (\alpha K_1 + a)x = 0, \quad (7.2.17)$$

de donde se deduce que $K_0 = 0$ y $K_1 = -a/\alpha$. De esta forma, la solución del problema es

$$y = A \sinh(\sqrt{\alpha}x) + B \cosh(\sqrt{\alpha}x) - \frac{a}{\alpha}x. \quad (7.2.18)$$

7.2.4 El problema de Sturm-Liouville

Para los desarrollos que siguen, es de especial importancia el siguiente tipo de ecuación diferencial ordinaria

$$\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{d\phi}{dx} \right) + q(x)\phi + \lambda^2 \sigma(x)\phi = 0, \quad (7.2.19)$$

donde el dominio es $x \in (a, b)$, λ es una constante conocida como valor propio, mientras que $p(x)$, $q(x)$ y $\sigma(x)$ son funciones conocidas de la posición. Esta ecuación diferencial está sujeta a condiciones de frontera homogéneas y posee las siguientes propiedades (Haberman, 2012):

1. Todos los valores propios son reales.
2. Existe un número infinito de valores propios que puede ordenarse a partir del valor más pequeño:

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3 < \dots \quad (7.2.20)$$

Donde $\lambda_n \rightarrow \infty$ cuando $n \rightarrow \infty$.

3. A cada valor propio λ_n le corresponde una función propia $\phi_n(x)$, la cual tiene $n - 1$ ceros en el intervalo $a < x < b$.
4. Las funciones propias forman un conjunto completo que permite expresar a cualquier función suave por tramos, $f(x)$, como una combinación lineal de ellas:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \phi_n(x). \quad (7.2.21)$$

5. Dos funciones propias (que correspondan a diferentes valores propios) son ortogonales relativas a la función peso $\sigma(x)$, esto es

$$\int_{x=a}^{x=b} \phi_n(x) \phi_m(x) \sigma(x) dx = 0, \quad \forall n \neq m. \quad (7.2.22)$$

Como se verá más adelante, estas propiedades son cruciales en la solución de ecuaciones diferenciales parciales. Sin embargo, es conveniente comenzar a ilustrar su aplicación con ecuaciones diferenciales ordinarias, como se muestra a continuación.

7.3 Solución de ecuaciones diferenciales ordinarias usando la fórmula de Green y el problema de Sturm-Liouville

Considere el modelo macroscópico para la transferencia de calor por conducción en estado estacionario a lo largo de una placa de longitud L . En ausencia de fuentes internas, la ecuación diferencial es

$$k \frac{d^2 \langle T \rangle}{dx^2} = 0. \quad (7.3.1a)$$

En donde $\langle T \rangle$ representa el promedio de la temperatura en la sección transversal de la placa (ver ejercicio 7.1). Denotando como T_0 y T_L los valores de la temperatura en $x = 0$ y en $x = L$, respectivamente; se tienen las siguientes condiciones de frontera

$$\text{en } x = 0, \quad \langle T \rangle = T_0, \quad (7.3.1b)$$

$$\text{en } x = L, \quad \langle T \rangle = T_L. \quad (7.3.1c)$$

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

$$\langle T^* \rangle = \frac{\langle T \rangle - T_0}{T_L - T_0}; \quad x^* = \frac{x}{L}. \quad (7.3.2)$$

De esta forma, el problema puede expresarse en su forma adimensional como sigue

$$\frac{d^2 \langle T^* \rangle}{dx^{*2}} = 0, \tag{7.3.3a}$$

$$\text{en } x^* = 0, \quad \langle T^* \rangle = 0, \tag{7.3.3b}$$

$$\text{en } x^* = 1, \quad \langle T^* \rangle = 1. \tag{7.3.3c}$$

Integrando dos veces la ecuación diferencial y usando las condiciones de frontera, se deduce que la solución del problema es

$$\langle T^* \rangle = x^*. \tag{7.3.4}$$

A continuación se ilustra la solución del problema usando el método de expansiones propias y la fórmula de Green. Para ello, considere el siguiente problema de Sturm-Liouville

$$\frac{d^2 \phi}{dx^2} + \lambda^2 \phi = 0, \tag{7.3.5a}$$

$$\text{En } x^* = 0, \quad \phi = 0, \tag{7.3.5b}$$

$$\text{En } x^* = 1, \quad \phi = 0. \tag{7.3.5c}$$

Note que λ no puede valer cero, ya que de serlo, la solución del problema sería $\phi = 0$. La solución de la ecuación diferencial para $\lambda \neq 0$ es

$$\phi = A \text{sen}(\lambda x^*) + B \text{cos}(\lambda x^*). \tag{7.3.6}$$

Usando la primera condición de frontera se deduce rápidamente que $B = 0$. Por su parte, la segunda condición de frontera da lugar a la siguiente expresión

$$0 = A \text{sen}(\lambda). \tag{7.3.7}$$

Si se eligiera $A = 0$, el resultado se reduciría a $\phi = 0$. Por tanto, $A \neq 0$ y la ecuación anterior se simplifica a

$$0 = \text{sen}(\lambda). \tag{7.3.8}$$

De esta expresión se deduce que hay un número infinito de valores propios que son $\lambda_n = n\pi$, donde $n = 1, 2, 3, \dots$. Por lo tanto, puede proponerse que la solución del problema sea

$$\langle T^* \rangle(x^*) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \phi_n(x^*). \tag{7.3.9}$$

Para determinar el valor de las constantes A_n se recurre a la fórmula de Green en 1D:

$$\int_{x^*=0}^{x^*=1} \left[\langle T^* \rangle \frac{d^2 \phi_m}{dx^{*2}} - \phi_m \frac{d^2 \langle T^* \rangle}{dx^{*2}} \right] dx^* = \langle T^* \rangle \frac{d\phi_m}{dx^*} - \phi_m \frac{d\langle T^* \rangle}{dx^*} \Big|_{x^*=0}^{x^*=1}. \tag{7.3.10}$$

Sustituyendo las ecuaciones diferenciales (7.3.5a) y (7.3.3a) en el lado izquierdo de la ecuación anterior y las condiciones de frontera para $\langle T^* \rangle$ y ϕ en el lado derecho, se llega al siguiente resultado

$$-\lambda_m^2 \int_{x^*=0}^{x^*=1} \langle T^* \rangle \phi_m dx^* = \frac{d\phi_m}{dx^*} \Big|_{x^*=1}. \tag{7.3.11}$$

Sabiendo que $\phi_m = \text{sen}(\lambda_m x^*)$ y sustituyendo la solución propuesta en la ecuación (7.3.9), se deduce que

$$-\lambda_m \sum_{n=1}^{\infty} A_n \int_{x^*=0}^{x^*=1} \phi_n \phi_m dx^* = \text{cos}(\lambda_m). \tag{7.3.12}$$

Ya que las funciones propias satisfacen a un problema de Sturm-Liouville, se cumple la siguiente condición de ortogonalidad:

$$\int_{x^*=0}^{x^*=1} \phi_n \phi_m dx^* = 0, \forall n \neq m. \quad (7.3.13)$$

Por lo tanto, el único término no nulo de la sumatoria dada en la ecuación (7.3.12) es aquel en el que $n = m$, esto es

$$\int_{x^*=0}^{x^*=1} \phi_n^2 dx^* = \int_{x^*=0}^{x^*=1} \text{sen}^2(n\pi) dx^* = \frac{1}{2}. \quad (7.3.14)$$

Tomando en cuenta este resultado, junto con el hecho que $\cos(n\pi) = (-1)^n$, se deduce de la ecuación (7.3.12), el siguiente resultado

$$A_n = \frac{2(-1)^{n+1}}{n\pi}. \quad (7.3.15)$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación (7.3.9) se deduce que la solución del problema es

$$\langle T^* \rangle = \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} \text{sen}(n\pi x^*), \quad (7.3.16)$$

la cual corresponde a la serie de Fourier del seno para x^* y converge a la solución correcta para $x^* \in [0, 1)$. En $x^* = 1$ la expresión anterior lleva a $\langle T^* \rangle = 0$, por lo que en este punto en particular debe usarse el valor dado en la condición de frontera. Note que la misma función propia se obtendría aún si la ecuación diferencial fuera no homogénea como se muestra en el ejercicio 7.2.

Ejercicio 7.1 — Deducción del modelo macroscópico en una placa. Considere una placa de sección transversal rectangular cuyos extremos (en $x = 0, L$) se encuentran a temperaturas constantes conocidas T_0 y T_L , respectivamente; mientras que el resto de sus superficies (\mathcal{A}_L) se encuentran aisladas. Muestre que las ecuaciones gobernantes de la transferencia de calor en este sistema en estado estacionario al nivel de escala del continuo son las siguientes:

$$k\nabla^2 T = 0, \quad (7.3.17a)$$

$$\text{en } x = 0, \quad T = T_0, \quad (7.3.17b)$$

$$\text{en } x = L, \quad T = T_L, \quad (7.3.17c)$$

$$\text{en } \mathcal{A}_L, \quad -\mathbf{n} \cdot k\nabla T = 0. \quad (7.3.17d)$$

Definiendo la temperatura promedio como

$$\langle T \rangle = \frac{1}{A_L} \int_{\mathcal{A}_L} T dA, \quad (7.3.17e)$$

deduzca el problema de valor a la frontera dado en las ecuaciones (7.3.1). ■

Ejercicio 7.2 — Solución con una fuente interna de generación de calor. Considere el siguiente problema macroscópico adimensional

$$\frac{d^2 \langle T^* \rangle}{dx^{*2}} = \Phi, \quad (7.3.18a)$$

$$\text{en } x^* = 0, \quad \langle T^* \rangle = 0, \quad (7.3.18b)$$

$$\text{en } x^* = 1, \quad \langle T \rangle = 1. \quad (7.3.18c)$$

En donde $\Phi = -4x^*(x^* - 1)/3$ es un término fuente. Resuelva el problema por integración sencilla y usando funciones propias y muestre que las funciones propias siguen siendo $\phi_m = \text{sen}(m\pi x^*)$.

7.4 Transformada de Laplace

Al igual que el método basado en la fórmula de Green, el método de transformada de Laplace consiste en la aplicación de un operador integral, el cual se aplica en el tiempo en lugar de en el espacio. Esta transformación integral se define para una función f que depende de la posición y del tiempo como sigue

Definición 7.4.1 — Transformada de Laplace.

$$\hat{f}(\mathbf{r}, s) \equiv \mathcal{L}\{f(\mathbf{r}, t)\} = \int_0^{\infty} e^{-st} f(\mathbf{r}, t) dt. \quad (7.4.1)$$

Como puede apreciarse, los límites de integración comprenden todo el dominio del tiempo y por ello el resultado ya no depende de t , sino de la variable de Laplace s , la cual es un número complejo que tiene unidades de s^{-1} . Como lo explica Kreyszig (2011), esta operación matemática lleva a la función f al espacio de Laplace mediante una operación de integración con la *función kernel* e^{-st} , la cual depende de las variables tanto en el dominio original (el del tiempo) como en el nuevo (el de Laplace). Note además que la dependencia espacial de la función no se ve alterada al pasar del dominio del tiempo al dominio de Laplace. Esto quiere decir que las operaciones de diferenciación e integración espaciales no se ven alteradas por la aplicación de la transformada de Laplace. Con base a lo anterior, se pueden escribir las siguientes identidades para funciones escalares (f) o vectoriales (\mathbf{a}) que son funciones continuas de la posición y el tiempo:

$$\mathcal{L}\{\nabla f\} = \nabla \mathcal{L}\{f\} = \nabla \hat{f}, \quad (7.4.2a)$$

$$\mathcal{L}\{\nabla \cdot \mathbf{a}\} = \nabla \cdot \mathcal{L}\{\mathbf{a}\} = \nabla \cdot \hat{\mathbf{a}}, \quad (7.4.2b)$$

$$\mathcal{L}\{\nabla^2 f\} = \nabla^2 \mathcal{L}\{f\} = \nabla^2 \hat{f}. \quad (7.4.2c)$$

Sin embargo, la transformada de Laplace de una derivada parcial temporal no es igual de directa como las expresiones anteriores y está dada por la siguiente fórmula (ver ejercicio 7.3)

$$\mathcal{L}\left\{\frac{\partial f}{\partial t}\right\} = s\hat{f}(\mathbf{r}, s) - f(\mathbf{r}, 0). \quad (7.4.3)$$

En donde $f(\mathbf{r}, 0)$ corresponde a la condición inicial. Esta fórmula puede utilizarse para deducir la transformada de Laplace de una segunda derivada temporal como se discute en el ejercicio 7.3. Estos resultados son de especial importancia en la solución de ecuaciones diferenciales, pues la dependencia temporal de una función se traduce a términos algebraicos en el dominio de Laplace, los cuales son más sencillos que tratar que las derivadas temporales. Una vez resuelto un problema en el dominio de Laplace, es necesario regresar al dominio del tiempo. Esto puede hacerse mediante la siguiente definición

Definición 7.4.2 — Transformada inversa de Laplace.

$$f(\mathbf{r}, t) = \mathcal{L}^{-1}\{\hat{f}(\mathbf{r}, s)\} \equiv \frac{1}{2\pi i} \lim_{\zeta \rightarrow \infty} \int_{\gamma - i\zeta}^{\gamma + i\zeta} e^{st} \hat{f}(\mathbf{r}, s) ds. \quad (7.4.4)$$

En la ecuación anterior, la variable real γ se fija con el fin de garantizar la convergencia del resultado en el tiempo.

Actualmente existe una amplia variedad de valores tabulados de transformadas de Laplace de funciones de interés en problemas de ciencias e ingeniería (ver, por ejemplo, el capítulo 33 en Spiegel y col., 2009). Algunos ejemplos se listan en la tabla 7.1.

Tabla 7.1: Transformadas de Laplace (\hat{f}) de algunas funciones del tiempo ($f(t)$)

	$\hat{f}(s)$	$f(t)$
1)	$\frac{1}{s}$	1
2)*	$\frac{1}{s^n}$	$\frac{t^{n-1}}{(n-1)!}$
3)	$\frac{1}{s^2 + a^2}$	$\text{sen}(at)$
4)	$\frac{s}{s^2 + a^2}$	$\text{cos}(at)$
5)	$\frac{\text{senh}(x\sqrt{s})}{s\text{senh}(a\sqrt{s})}$	$\frac{x}{a} + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \exp\left(-\frac{n^2\pi^2 t}{a^2}\right)$
6)	$\frac{\text{cosh}(x\sqrt{s})}{s\text{cosh}(a\sqrt{s})}$	$1 + \frac{4}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{2n-1} \text{cos}\left(\frac{(2n-1)\pi x}{2a}\right) \exp\left(-\frac{(2n-1)^2\pi^2 t}{4a^2}\right)$

* n es un número entero positivo.

Al ser el operador de transformada de Laplace un operador integral, está sujeto a las mismas propiedades de las integrales. Por ejemplo, la transformada de Laplace de una suma o resta de funciones del tiempo (f y g) puede expresarse como sigue

$$\mathcal{L}\{af(t) \pm bg(t)\} = a\hat{f}(s) \pm b\hat{g}(s), \quad (7.4.5)$$

donde a y b son constantes. En contraste, la transformada de Laplace de una multiplicación de funciones no puede separarse en la multiplicación de funciones en el dominio de Laplace:

$$\mathcal{L}\{f(t)g(t)\} \neq \hat{f}(s)\hat{g}(s). \quad (7.4.6)$$

Sin embargo, la transformada inversa del producto de dos funciones sí está definida y constituye el siguiente teorema

Teorema 7.4.1 — Teorema de la convolución.

$$\mathcal{L}^{-1}\{\hat{f}(s)\hat{g}(s)\} = \int_{t_0=0}^{t_0=t} f(t_0)g(t-t_0) dt_0 = \int_{t_0=0}^{t_0=t} f(t-t_0)g(t_0) dt_0 \equiv (f * g)(t). \quad (7.4.7)$$

Este teorema es muy útil en numerosas aplicaciones. Por ejemplo, en el ejercicio 7.4 se utiliza para deducir la fórmula de la transformada de Laplace de una integral temporal.

Regresando la atención a la transformada de Laplace del producto de dos funciones, si bien el resultado dado en la ecuación (7.4.6) es cierto, se cuenta con los siguientes teoremas que pueden usarse para tratar con casos particulares de productos de funciones en el dominio de Laplace

Teorema 7.4.2 — Teoremas del desplazamiento.

1. Primer teorema del desplazamiento:

$$\mathcal{L}\{e^{at}f(t)\} = \hat{f}(s-a). \quad (7.4.8)$$

En donde a es una constante.

2. Segundo teorema del desplazamiento

$$\mathcal{L}\{f(t-a)u(t-a)\} = e^{-as}\hat{f}(s). \quad (7.4.9)$$

En donde $u(t - a)$ es la función *escalón unitario* o de Heaviside, la cual está definida como sigue

$$u(t - a) = \begin{cases} 0, & t < a \\ 1, & t > a \end{cases}. \quad (7.4.10)$$

En los ejercicios (7.5) y (7.6) se ilustran dos aplicaciones de estos teoremas del desplazamiento. El método de la transformada de Laplace es muy útil siempre que puedan encontrarse tanto las fórmulas de transformada como de transformada inversa de las funciones involucradas. En este sentido, una fórmula bastante útil en la práctica es la siguiente

$$\mathcal{L} \left\{ \frac{\hat{p}(s)}{\hat{q}(s)} \right\} = \sum_{k=1}^{k=n} \frac{P(\alpha_k)}{\left. \frac{dQ}{ds} \right|_{s=\alpha_k}} e^{\alpha_k t}. \quad (7.4.11)$$

En donde $\hat{q}(s)$ es un polinomio de orden n cuyas raíces son $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$, mientras que $\hat{p}(s)$ es un polinomio de orden menor a n .

Ejercicio 7.3 — Transformada de Laplace de una derivada temporal. Utilice la fórmula de integración por partes para deducir el siguiente resultado

$$\mathcal{L} \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} \right\} = e^{-st} f(\mathbf{r}, t) \Big|_0^\infty + s \int_0^\infty e^{-st} f(\mathbf{r}, t) dt. \quad (7.4.12)$$

Lleve a cabo las operaciones algebraicas correspondientes para recuperar el resultado dado en la ecuación (7.4.3). Además, utilice esta fórmula para deducir la siguiente expresión la cual corresponde a la transformada de Laplace de una segunda derivada temporal

$$\mathcal{L} \left\{ \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \right\} = s^2 \hat{f}(\mathbf{r}, s) - sf(\mathbf{r}, 0) - \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{\mathbf{r}, 0}. \quad (7.4.13)$$

Ejercicio 7.4 — Transformada de Laplace de una integral en el tiempo. Utilice el teorema de la convolución para demostrar la siguiente identidad

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{s} \hat{f}(s) \right\} = \int_{t_0=0}^{t_0=t} f(t_0) dt_0. \quad (7.4.14a)$$

De donde se deduce la siguiente fórmula

$$\mathcal{L} \left\{ \int_{t_0=0}^{t_0=t} f(t_0) dt_0 \right\} = \frac{1}{s} \hat{f}(s). \quad (7.4.14b)$$

Ejercicio 7.5 — Aplicación del primer teorema del desplazamiento. Utilice el primer

teorema del desplazamiento para demostrar las siguientes identidades

$$\mathcal{L}\{e^{at}\} = \frac{1}{s-a}, \quad (7.4.15a)$$

$$\mathcal{L}\left\{\frac{t^{n-1}e^{at}}{(n-1)!}\right\} = \frac{1}{(s-a)^n}, \quad (7.4.15b)$$

$$\mathcal{L}\left\{\frac{e^{bt}\operatorname{sen}(at)}{a}\right\} = \frac{1}{(s^2-2bs+a^2+b^2)}. \quad (7.4.15c)$$

En la ecuación (7.4.15b) n es un número entero positivo. ■

Ejercicio 7.6 — Aplicación del segundo teorema del desplazamiento: Delta de Dirac.

La función delta de Dirac se definió en el ejercicio 3.1 en términos de vectores de posición. Esta función puede también estar definida en términos del tiempo como sigue

$$\delta(t-t_0) = \begin{cases} \infty, & t = t_0 \\ 0, & t \neq t_0 \end{cases}. \quad (7.4.16)$$

Al igual que en el caso espacial, esta función posee la siguiente propiedad de filtración

$$\int_{t=t_1}^{t=t_2} f(t)\delta(t-t_0) dt = f(t_0), \quad (7.4.17)$$

siempre y cuando $t_0 \in [t_1, t_2]$. Además, la delta de Dirac está relacionada con la función Heaviside como se indica a continuación

$$\delta(t-a) = \frac{d}{dt}u(t-a). \quad (7.4.18)$$

Utilice esta propiedad y el segundo teorema del desplazamiento para demostrar la siguiente identidad

$$\mathcal{L}\{\delta(t-a)\} = e^{-as}. \quad (7.4.19)$$

Note que este mismo resultado se obtiene al usar la propiedad de filtración de la delta de Dirac en la definición de la transformada de Laplace dada en la ecuación (7.4.1). ■

7.5 Solución de ecuaciones diferenciales parciales

Como primer caso de aplicación de solución de ecuaciones diferenciales parciales considere ahora la versión transitoria del problema definido en las ecuaciones (7.3.3), la cual puede escribirse como sigue

$$\frac{\partial \langle T^* \rangle}{\partial t^*} = \frac{\partial^2 \langle T^* \rangle}{\partial x^{*2}}, \quad (7.5.1a)$$

$$\text{en } x^* = 0, \quad \langle T^* \rangle = 0, \quad (7.5.1b)$$

$$\text{en } x^* = 1, \quad \langle T^* \rangle = 1, \quad (7.5.1c)$$

$$\text{cuando } t^* = 0, \quad \langle T^* \rangle = T_{in}^*. \quad (7.5.1d)$$

En las ecuaciones anteriores $t^* = kt/(\rho C_p L^2)$ y $T_{in}^* = (T_{in} - T_0)/(T_L - T_0)$, siendo T_{in} el valor dimensional de la temperatura inicial. Se explorará la solución del problema utilizando tanto el método de expansión en funciones propias junto con la fórmula de Green y también con el método de la transformada de Laplace.

7.5.1 Solución por el método de expansión en funciones propias y la fórmula de Green

El problema de Sturm-Liouville sigue siendo el mismo que en el caso estacionario; sin embargo, la solución propuesta dada en la ecuación (7.3.9) ya no es del todo adecuada pues A_n son constantes. Para permitir que la temperatura dependa de la posición y del tiempo, se modifica dicha ecuación de la siguiente forma

$$\langle T^* \rangle(x^*, t^*) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n(t^*) \phi_n(x^*). \quad (7.5.2)$$

De nuevo, para determinar a las funciones $A_n(t^*)$ se recurre a la fórmula de Green

$$\int_{x^*=0}^{x^*=1} \left[\langle T^* \rangle \frac{d^2 \phi_m}{dx^{*2}} - \phi_m \frac{\partial^2 \langle T^* \rangle}{\partial x^{*2}} \right] dx^* = \langle T^* \rangle \frac{d\phi_m}{dx^*} - \phi_m \frac{\partial \langle T^* \rangle}{\partial x^*} \Big|_{x^*=0}^{x^*=1}. \quad (7.5.3)$$

La cual, tras la sustitución de las ecuaciones diferenciales y condiciones de frontera, toma la siguiente forma

$$\int_{x^*=0}^{x^*=1} \left[\lambda_m^2 \langle T^* \rangle \phi_m + \phi_m \frac{\partial \langle T^* \rangle}{\partial t^*} \right] dx^* = - \frac{d\phi_m}{dx^*} \Big|_{x^*=1} = (-1)^{m+1} \lambda_m. \quad (7.5.4)$$

Sustituyendo en el lado izquierdo de la ecuación anterior la solución propuesta dada en la ecuación (7.5.2), se deduce lo siguiente:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{dA_n}{dt^*} + \lambda_m^2 A_n \right) \int_{x^*=0}^{x^*=1} \phi_n \phi_m dx^* = (-1)^{m+1} \lambda_m. \quad (7.5.5)$$

Al igual que en el caso anterior, se utiliza la condición de ortogonalidad para eliminar la sumatoria ya que el único término no nulo es aquel en el que $n = m$. Además, tomando en cuenta que en este caso

$$\int_{x^*=0}^{x^*=1} \phi_n^2 dx^* = \frac{1}{2}, \quad (7.5.6)$$

se deduce la siguiente ecuación diferencial ordinaria

$$\frac{dA_n}{dt^*} + \lambda_n^2 A_n = 2(-1)^{n+1} \lambda_n. \quad (7.5.7)$$

Para resolver esta ecuación es necesario contar con una condición inicial para A_n . Para deducir dicha condición inicial, se sustituye la solución propuesta dada en la ecuación (7.5.2) en la ecuación (7.5.1d) para obtener:

$$T_{in}^* = \sum_{n=1}^{\infty} A_n(0) \phi_n(x^*). \quad (7.5.8)$$

Para despejar a $A_n(0)$ de esta ecuación, se multiplican ambos lados por la función propia $\phi_m(x^*)$ y se lleva a cabo la integración desde $x^* = 0$ hasta $x^* = 1$ para obtener

$$\int_{x^*=0}^{x^*=1} T_{in}^* \phi_m(x^*) dx^* = \sum_{n=1}^{\infty} A_n(0) \int_{x^*=0}^{x^*=1} \phi_n(x^*) \phi_m(x^*) dx^*. \quad (7.5.9)$$

La cual, tras usar la condición de ortogonalidad, tomando en cuenta el resultado dado en la ecuación (7.5.6) da lugar a la siguiente condición inicial:

$$A_n(0) = 2 \int_{x^*=0}^{x^*=1} T_{in}^* \phi_m(x^*) dx^* \equiv A_{n0}. \quad (7.5.10)$$

Regresando la atención a la ecuación (7.5.7), utilizando el método del factor integrante se puede expresar como sigue

$$\frac{de^{\lambda_n^2 t^*} A_n}{dt^*} = 2(-1)^{n+1} \lambda_n e^{\lambda_n^2 t^*}. \quad (7.5.11)$$

Integrando semidefinidamente la ecuación anterior desde $t^* = 0$ hasta cualquier tiempo da como resultado:

$$A_n(t^*) = A_{n0} e^{-\lambda_n^2 t^*} + \frac{2(-1)^{n+1}}{\lambda_n} (1 - e^{-\lambda_n^2 t^*}) = \frac{2(-1)^{n+1}}{\lambda_n} + \left(A_{n0} - \frac{2(-1)^{n+1}}{\lambda_n} \right) e^{-\lambda_n^2 t^*}. \quad (7.5.12)$$

Sustituyendo esta expresión en la solución propuesta, se deduce la forma final de la solución:

$$\begin{aligned} \langle T^* \rangle(x^*, t^*) &= \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} A_{n0} \phi_n(x^*) e^{-\lambda_n^2 t^*}}_{\text{Contribución de la condición inicial}} + \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} \frac{2(-1)^{n+1}}{\lambda_n} (1 - e^{-\lambda_n^2 t^*}) \phi_n(x^*)}_{\text{Contribución de la condición de frontera}} \\ &= \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} \frac{2(-1)^{n+1}}{\lambda_n} \phi_n(x^*)}_{\text{Solución estacionaria}} + \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} \left(A_{n0} - \frac{2(-1)^{n+1}}{\lambda_n} \right) \phi_n(x^*) e^{-\lambda_n^2 t^*}}_{\text{Solución transitoria}}. \end{aligned} \quad (7.5.13)$$

Note que en la primera forma de representar la solución se ubicaron las contribuciones de las fuentes que son la condición inicial y la condición de frontera. Por su parte, en la segunda expresión se identificaron las contribuciones estacionaria y transitoria de la solución. A continuación se examina la forma de llevar a cabo la solución usando el método de transformada de Laplace.

7.5.2 Solución mediante la transformada de Laplace

Una alternativa atractiva de solución de este problema consiste en usar el método de la transformada de Laplace pues permite trabajar con una ecuación diferencial ordinaria en el dominio de Laplace en lugar de una ecuación diferencial parcial en el dominio del tiempo. Aplicando el operador de transformada de Laplace en ambos lados de la ecuación (7.5.1a), tomando en cuenta la condición inicial dada en la ecuación (7.5.1d) da como resultado la siguiente expresión

$$s \langle \hat{T}^* \rangle - T_{in}^* = \frac{d^2 \langle \hat{T}^* \rangle}{dx^{*2}}. \quad (7.5.14)$$

Para simplificar el análisis se considerará únicamente el caso en el que la temperatura inicial es constante. Bajo esta suposición, la solución general de la ecuación diferencial (7.5.14) es (ver sección 7.2.3)

$$\langle \hat{T}^* \rangle = A \operatorname{senh}(\sqrt{s} x^*) + B \operatorname{cosh}(\sqrt{s} x^*) + \frac{T_{in}^*}{s}. \quad (7.5.15)$$

Para determinar las constantes de integración, es necesario aplicar el operador de transformada de Laplace a las ecuaciones (7.5.1b) y (7.5.1c) para obtener las siguientes condiciones de frontera

$$\text{en } x^* = 0, \quad \langle \hat{T}^* \rangle = 0, \quad (7.5.16a)$$

$$\text{en } x^* = 1, \quad \langle \hat{T}^* \rangle = \frac{1}{s}. \quad (7.5.16b)$$

De esta forma, se deduce que $B = -\frac{T_{in}^*}{s}$ y

$$A = \frac{1}{s \operatorname{senh}(\sqrt{s})} - \frac{T_{in}^*}{s \operatorname{senh}(\sqrt{s})} + \frac{T_{in}^*}{s \operatorname{senh}(\sqrt{s})} \operatorname{cosh}(\sqrt{s}), \quad (7.5.17)$$

Entonces la solución particular del problema es

$$\langle \hat{T}^* \rangle = \frac{(1 - T_{in}^*) \operatorname{senh}(\sqrt{s} x^*)}{s \operatorname{senh}(\sqrt{s})} - \frac{T_{in}^* \operatorname{senh}(\sqrt{s}(1 - x^*))}{s \operatorname{senh}(\sqrt{s})} + \frac{T_{in}^*}{s}. \quad (7.5.18)$$

Para regresar este resultado al dominio del tiempo se aplica el operador de transformada inversa de Laplace en ambos lados de la ecuación anterior, tomando en consideración las fórmulas 1 y 5 de la tabla 7.1, para obtener

$$\langle T^* \rangle = T_{in}^* + (1 - T_{in}^*) \left[x^* + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \operatorname{sen}(n\pi x^*) \exp(-n^2 \pi^2 t^*) \right] - T_{in}^* \left[1 - x^* + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \operatorname{sen}(n\pi(1 - x^*)) \exp(-n^2 \pi^2 t^*) \right]. \quad (7.5.19)$$

Este resultado puede demostrarse que es equivalente al obtenido previamente (ver ejercicio 7.7). Aunque el procedimiento fue notablemente más sencillo que con el método de expansión en funciones propias, no debe perderse de vista que se pudo avanzar ya que se contaba con las fórmulas correspondientes a este problema en la tabla 7.1. Cuando este no es el caso, el proceso de regresar el resultado obtenido en el dominio de Laplace al dominio del tiempo puede ser mucho más complicado.

Ejercicio 7.7 — Equivalencia de soluciones. Lleve a cabo los pasos algebraicos correspondientes para verificar que las soluciones obtenidas por el método de transformada de Laplace y con el método de expansión en funciones propias son equivalente. Para esto puede utilizar identidades trigonométricas y no perder de vista la suposición de que la temperatura inicial es constante. ■

Ejercicio 7.8 — Condiciones de simetría. Resuelva de nuevo el problema por el método de su elección modificando la primera condición de frontera por la siguiente

$$\text{en } x^* = 0, \quad \frac{\partial \langle T^* \rangle}{\partial x^*} = 0. \quad (7.5.20)$$

Esta condición de frontera indica que $x^* = 0$ es un eje de simetría de la temperatura o bien que dicha frontera está aislada a la transferencia de calor. Para evaluar y validar la solución puede compararla con la solución numérica del problema de la Etapa 3 estudiado en la sección 6.4.5. ■

7.6 Uso de la fórmula de Green en problemas no homogéneos

Considere de nuevo la viga de los párrafos anteriores, pero ahora suponga que solo dos de sus caras laterales están aisladas, mientras que la superficie localizada en $y = 0$ está expuesta a un flux constante de calor, mientras que aquella ubicada en $y = w$ presenta resistencias a la transferencia de calor con el ambiente. Además, suponga que la placa contiene una fuente interna y constante de calor. Bajo condiciones de estado estacionario, el problema de valor a la frontera que describe a esta situación física es el siguiente

$$0 = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{\Phi}{k}, \quad (7.6.1a)$$

$$\text{en } x = 0, \quad T = T_0, \quad (7.6.1b)$$

$$\text{en } x = L, \quad T = T_L, \quad (7.6.1c)$$

$$\text{en } y = 0, \quad k \frac{\partial T}{\partial y} = q_0, \quad (7.6.1d)$$

$$\text{en } y = w, \quad -k \frac{\partial T}{\partial y} = h(T - T_a), \quad (7.6.1e)$$

$$\text{en } z = 0, h \quad k \frac{\partial T}{\partial z} = 0. \quad (7.6.1f)$$

Para simplificar el problema es conveniente utilizar el siguiente promedio en la dirección z :

$$\langle T \rangle = \frac{1}{h} \int_{z=0}^{z=h} T dz. \quad (7.6.2)$$

Aplicando el operador de promediado a las ecuaciones (7.6.1), el problema se simplifica a la siguiente forma

$$0 = \frac{\partial^2 \langle T \rangle}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \langle T \rangle}{\partial y^2} + \frac{\langle \Phi \rangle}{k}, \quad (7.6.3a)$$

$$\text{en } x = 0, \quad \langle T \rangle = T_0, \quad (7.6.3b)$$

$$\text{en } x = L, \quad \langle T \rangle = T_L, \quad (7.6.3c)$$

$$\text{en } y = 0, \quad k \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial y} = \langle q_0 \rangle, \quad (7.6.3d)$$

$$\text{en } y = w, \quad -k \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial y} = h(\langle T \rangle - T_a). \quad (7.6.3e)$$

Aquí se supuso que T_a es constante. Antes de proceder con la solución del problema, es conveniente reformularlo en términos de las siguientes definiciones adimensionales

$$T^* = \frac{\langle T \rangle - T_a}{T_L - T_a}; \quad \mathbf{r}^* = \frac{\mathbf{r}}{L}; \quad \Phi^* = \frac{\langle \Phi \rangle L^2}{k(T_L - T_a)}; \quad q_0^* = \frac{\langle q_0 \rangle L}{k(T_L - T_a)}; \quad Bi = \frac{hL}{k}, \quad (7.6.4)$$

como sigue

$$0 = \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial y^{*2}} + \Phi^*, \quad (7.6.5a)$$

$$\text{en } x^* = 0, \quad T^* = T_0^*, \quad (7.6.5b)$$

$$\text{en } x^* = 1, \quad T^* = 1, \quad (7.6.5c)$$

$$\text{en } y^* = 0, \quad \frac{\partial T^*}{\partial y^*} = q_0^*, \quad (7.6.5d)$$

$$\text{en } y^* = w^*, \quad -\frac{\partial T^*}{\partial y^*} = Bi T^*. \quad (7.6.5e)$$

En la ecuación (7.6.5b), $T_0^* = (T_0 - T_a)/(T_L - T_a)$. Este problema puede resolverse considerando funciones propias en una o dos direcciones. A continuación se explican ambas alternativas.

7.6.1 Solución con funciones propias en una sola dirección

Este caso no es muy distinto de los estudiados anteriormente. Se comienza proponiendo que la solución en términos de las funciones propias en x^* sea

$$T^* = \sum_{n=1}^{\infty} A_n(y^*) \phi_n(x^*). \quad (7.6.6)$$

En donde $\phi_n = \text{sen}(n\pi x^*)$ ya que la dependencia en x^* en la ecuación diferencial y las condiciones de frontera no han cambiado. Utilizando la fórmula de Green en la dirección x^* :

$$\int_{x^*=0}^{x^*=1} \left[T^* \frac{d^2 \phi_m}{dx^{*2}} - \phi_m \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} \right] dx^* = T^* \frac{d\phi_m}{dx^*} - \phi_m \frac{\partial T^*}{\partial x^*} \Big|_{x^*=0}^{x^*=1}, \quad (7.6.7)$$

se obtiene, al sustituir las ecuaciones diferenciales y condiciones de frontera correspondientes, la siguiente expresión

$$\int_{x^*=0}^{x^*=1} \left[-\lambda_m^2 \phi_m T^* + \phi_m \frac{\partial^2 T^*}{\partial y^{*2}} \right] dx^* = \frac{d\phi_m}{dx^*} \Big|_{x^*=1} - T_0^* \frac{d\phi_m}{dx^*} \Big|_{x^*=0} = \lambda_m [(-1)^m - T_0^*]. \quad (7.6.8)$$

O bien, tras sustituir la solución propuesta,

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{d^2 A_n}{dy^{*2}} - \lambda_n^2 A_n \right) \int_{x^*=0}^{x^*=1} \phi_n \phi_m dx^* = \lambda_m [(-1)^m - T_0^*]. \quad (7.6.9)$$

Como en los casos anteriores, esta ecuación se simplifica debido a la ortogonalidad de las funciones propias y da lugar a la siguiente expresión

$$\frac{d^2 A_n}{dy^{*2}} - \lambda_n^2 A_n = 2\lambda_n [(-1)^n - T_0^*]. \quad (7.6.10)$$

Para resolver esta ecuación diferencial ordinaria se requieren dos condiciones de frontera, las cuales resultan de sustituir la solución formal en las ecuaciones (7.6.5d) y (7.6.5e)

$$\text{en } y^* = 0, \quad \sum_{n=1}^{\infty} \frac{dA_n}{dy^*} \Big|_{y^*=0} \phi_n = q_0^*, \quad (7.6.11a)$$

$$\text{en } y^* = w^*, \quad - \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{dA_n}{dy^*} \Big|_{y^*=w^*} + BiA_n \right) \phi_n = 0. \quad (7.6.11b)$$

Multiplicando ambas ecuaciones por ϕ_m , llevando a cabo el paso de integración en la dirección x^* y tomando en cuenta la condición de ortogonalidad, se deduce que

$$\text{en } y^* = 0, \quad \frac{dA_n}{dy^*} \Big|_{y^*=0} = 2 \int_{x^*=0}^{x^*=1} q_0^* \phi_n dx^* \equiv q_n, \quad (7.6.12a)$$

$$\text{en } y^* = w^*, \quad - \frac{dA_n}{dy^*} \Big|_{y^*=w^*} = BiA_n. \quad (7.6.12b)$$

La solución general de la ecuación diferencial (7.6.10) es

$$A_n = C_n \sinh(\lambda_n y^*) + D_n \cosh(\lambda_n y^*) - \frac{2[(-1)^n - T_0^*]}{\lambda_n}. \quad (7.6.13)$$

Usando la condición de frontera en $y^* = 0$, se deduce que

$$C_n = \frac{q_n}{\lambda_n}. \quad (7.6.14)$$

Para determinar a la constante faltante se utiliza la condición de frontera en $y^* = w^*$, lo que da lugar a la siguiente ecuación

$$\frac{q_n}{\lambda_n} \cosh(\lambda_n w^*) + D_n \sinh(\lambda_n w^*) = - \frac{Bi}{\lambda_n} \left[\frac{q_n}{\lambda_n} \sinh(\lambda_n w^*) + D_n \cosh(\lambda_n w^*) - \frac{2[(-1)^n - T_0^*]}{\lambda_n} \right]. \quad (7.6.15)$$

De aquí se puede despejar a D_n como sigue

$$D_n = \frac{- \frac{Bi}{\lambda_n} \left[\frac{q_n}{\lambda_n} \sinh(\lambda_n w^*) - \frac{2[(-1)^n - T_0^*]}{\lambda_n} \right] - \frac{q_n}{\lambda_n} \cosh(\lambda_n w^*)}{\sinh(\lambda_n w^*) + \frac{Bi}{\lambda_n} \cosh(\lambda_n w^*)}. \quad (7.6.16)$$

Tomando en cuenta este resultado, la solución del problema se puede expresar como

$$T^* = \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{q_n}{\lambda_n} \sinh(\lambda_n y^*) + D_n \cosh(\lambda_n y^*) - \frac{2[(-1)^n - T_0^*]}{\lambda_n} \right] \phi_n(x^*). \quad (7.6.17)$$

Como puede notarse, el resultado anterior se obtuvo al utilizar las funciones propias correspondientes a la dirección x^* . Una alternativa es considerar las funciones propias en y^* o bien considerar funciones propias en ambas direcciones. Esta última opción se explora a continuación.

7.6.2 Solución utilizando funciones propias en dos direcciones

Una alternativa a la solución desarrollada arriba es la siguiente

$$T^* = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} A_{nm} \Psi_{nm}(x^*, y^*). \quad (7.6.18)$$

En donde A_{nm} es una constante y $\Psi_{nm}(x^*, y^*)$ es una función propia en dos direcciones. Esta función satisface el siguiente problema de Sturm-Liouville en dos direcciones:

$$\frac{\partial^2 \Psi_{nm}}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 \Psi_{nm}}{\partial y^{*2}} + (\lambda_n^2 + \beta_m^2) \Psi_{nm} = 0, \quad (7.6.19a)$$

que debe ser resuelta sujeta a las condiciones de frontera homogéneas

$$\text{en } x^* = 0, 1; \quad \Psi_{nm} = 0, \quad (7.6.19b)$$

$$\text{en } y^* = 0, \quad \frac{\partial \Psi_{nm}}{\partial y^*} = 0, \quad (7.6.19c)$$

$$\text{en } y^* = w^*, \quad -\frac{\partial \Psi_{nm}}{\partial y^*} = Bi \Psi_{nm}. \quad (7.6.19d)$$

Note que las ecuaciones anteriores son las versiones homogéneas de las ecuaciones (7.6.5). Más aún, esta función propia satisface la siguiente condición de ortogonalidad:

$$\int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} \Psi_{nm} \Psi_{kp} dx^* dy^* = 0, \quad \text{si } n \neq k \text{ o } m \neq p. \quad (7.6.20)$$

Para resolver este problema de Sturm-Liouville, se propone la siguiente separación de variables

$$\Psi_{nm}(x^*, y^*) = \phi_n(x^*) \varphi_m(y^*). \quad (7.6.21)$$

Sustituyendo esta expresión en el problema definido en las ecuaciones (7.6.19) da lugar a los siguientes dos problemas de Sturm-Liouville unidimensionales

Problema-I

$$\frac{d^2 \phi_n}{dx^{*2}} + \lambda_n^2 \phi_n = 0, \quad (7.6.22a)$$

$$\text{en } x^* = 0, 1; \quad \phi_n = 0. \quad (7.6.22b)$$

Problema-II

$$\frac{d^2 \varphi_m}{dy^{*2}} + \beta_m^2 \varphi_m = 0, \quad (7.6.23a)$$

$$\text{en } y^* = 0, \quad \frac{d\varphi_m}{dy^*} = 0, \quad (7.6.23b)$$

$$\text{en } y^* = w^*, \quad -\frac{d\varphi_m}{dy^*} = Bi \varphi_m. \quad (7.6.23c)$$

Las soluciones de estos problemas son

$$\phi_n(x^*) = \text{sen}(\lambda_n x^*), \quad (7.6.24a)$$

$$\varphi_m(y^*) = \text{cos}(\beta_m y^*). \quad (7.6.24b)$$

En donde $\lambda_n = n\pi$, mientras que los valores propios β_m son las raíces de la ecuación:

$$\beta_m \text{sen}(\beta_m w^*) = Bi \text{cos}(\beta_m w^*). \quad (7.6.25)$$

De lo anterior, se deduce que la función propia bidimensional está dada por

$$\Psi_{nm}(x^*, y^*) = \text{sen}(\lambda_n x^*) \cos(\beta_m y^*). \quad (7.6.26)$$

Para continuar con la solución del problema se utiliza la fórmula de Green en dos dimensiones:

$$\begin{aligned} \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} [T^* \nabla^2 \Psi_{kp} - \Psi_{kp} \nabla^2 T^*] dx^* dy^* &= \int_{x^*=0}^{x^*=1} \left[T^* \frac{\partial \Psi_{kp}}{\partial y^*} - \Psi_{kp} \frac{\partial T^*}{\partial y^*} \right]_{y^*=0}^{y^*=w^*} dx^* \\ &+ \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \left[T^* \frac{\partial \Psi_{kp}}{\partial x^*} - \Psi_{kp} \frac{\partial T^*}{\partial x^*} \right]_{x^*=0}^{x^*=1} dy^*. \end{aligned} \quad (7.6.27)$$

En la expresión anterior, el operador laplaciano está usado en dos dimensiones. Sustituyendo las ecuaciones diferenciales y condiciones de frontera para T^* y Ψ_{nm} , se obtiene que

$$\begin{aligned} - \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} [T^* (\lambda_k^2 + \beta_p^2) \Psi_{kp} - \Phi^* \Psi_{kp}] dx^* dy^* &= q_0^* \int_{x^*=0}^{x^*=1} \Psi_{kp} |_{y^*=0} dx^* \\ &+ \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \left[\frac{\partial \Psi_{kp}}{\partial x^*} \Big|_{x^*=1} - T_0^* \frac{\partial \Psi_{kp}}{\partial x^*} \Big|_{x^*=0} \right] dy^*. \end{aligned} \quad (7.6.28)$$

Sustituyendo la solución propuesta dada en la ecuación (7.6.18) en la expresión anterior da lugar a

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} A_{nm} (\lambda_k^2 + \beta_p^2) \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} \Psi_{nm} \Psi_{kp} dx^* dy^* &= \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} \Phi^* \Psi_{kp} dx^* dy^* \\ - q_0^* \int_{x^*=0}^{x^*=1} \Psi_{kp} |_{y^*=0} dx^* - \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \left[\frac{\partial \Psi_{kp}}{\partial x^*} \Big|_{x^*=1} - T_0^* \frac{\partial \Psi_{kp}}{\partial x^*} \Big|_{x^*=0} \right] dy^*. \end{aligned} \quad (7.6.29)$$

Aplicando la condición de ortogonalidad, dada por la ecuación (7.6.20), lleva al siguiente resultado

$$A_{nm} = \frac{\int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} \Phi^* \Psi_{nm} dx^* dy^* - q_0^* \int_{x^*=0}^{x^*=1} \Psi_{nm} |_{y^*=0} dx^* - \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \left[\frac{\partial \Psi_{nm}}{\partial x^*} \Big|_{x^*=1} - T_0^* \frac{\partial \Psi_{nm}}{\partial x^*} \Big|_{x^*=0} \right] dy^*}{(\lambda_n^2 + \beta_m^2) \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} \Psi_{nm}^2 dx^* dy^*}. \quad (7.6.30)$$

Con este resultado se concluye la solución del problema. A diferencia del resultado que aporta el considerar funciones propias en una sola dirección, en este caso la evaluación es más demandante debido a que la solución implica una doble sumatoria. Sin embargo, hay casos en los que es inevitable usar funciones propias multidimensionales como se ilustra en el caso de estudio siguiente.

Ejercicio 7.9 — Modelo de Hagen-Poiseuille transitorio. Considere el flujo desarrollado (es decir, lejos de las superficies de entrada y salida) de un fluido newtoniano e incompresible en un tubo de sección transversal circular de radio R y largo L . Demuestre que en este caso la ecuación de conservación de cantidad de movimiento a escala microscópica se reduce a

$$\rho \frac{\partial v_z}{\partial t} = \frac{\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L}{L} + \frac{\mu}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right). \quad (7.6.31)$$

En la ecuación anterior $\mathcal{P}(z) = p(z) - \rho g z$ es la presión modificada del fluido. Suponiendo condiciones de simetría en $r = 0$ y de no deslizamiento en las paredes del tubo, las condiciones

de frontera son

$$\text{en } r = 0, \quad \frac{\partial v_z}{\partial r} = 0, \quad (7.6.32)$$

$$\text{en } r = R, \quad v_z = 0. \quad (7.6.33)$$

Por último, suponga que el fluido se encontraba inicialmente en reposo. Resuelva analíticamente este problema usando el método de expansión en funciones propias y deduzca que la solución es

$$v_z = \frac{R^2(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)}{4\mu L} \left[1 - \frac{r^2}{R^2} - 8 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0(\lambda_n r/R)}{\lambda_n^3 J_1(\lambda_n)} \exp\left(-\lambda_n^2 \frac{\mu t}{\rho R^2}\right) \right]. \quad (7.6.34)$$

En donde λ_n son las raíces de la ecuación $J_0(\lambda_n) = 0$. Demuestre que la velocidad promedio está dada por la ecuación (3.3.18). ■

7.7 Solución de un problema tridimensional y transitorio

Como último caso de estudio se reconsidera ahora a la placa de los ejemplos anteriores, solo que ahora la superficie ubicada en $z = 0$ está a la temperatura T_0 , mientras que la superficie ubicada en $z = h$ presenta resistencias a la transferencia de calor con el ambiente. Además de ello, se supone que la barra se encontraba inicialmente a una temperatura constante T_{in} y se desea deducir una solución que describa la dinámica de los perfiles tridimensionales de la temperatura.

Se comienza con el planteamiento del problema dimensional. De acuerdo con la situación física descrita arriba, se tiene el siguiente problema de valor inicial y a la frontera:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \Phi, \quad (7.7.1a)$$

$$\text{en } x = 0, \quad T = T_0, \quad (7.7.1b)$$

$$\text{en } x = L, \quad T = T_L, \quad (7.7.1c)$$

$$\text{en } y = 0, \quad k \frac{\partial T}{\partial y} = q_0, \quad (7.7.1d)$$

$$\text{en } y = w, \quad -k \frac{\partial T}{\partial y} = h(T - T_a), \quad (7.7.1e)$$

$$\text{en } z = 0, \quad T = T_0, \quad (7.7.1f)$$

$$\text{en } z = h \quad -k \frac{\partial T}{\partial z} = h(T - T_a), \quad (7.7.1g)$$

$$\text{cuando } t = 0, \quad T = T_{in}. \quad (7.7.1h)$$

En este caso, no es necesario llevar a cabo simplificaciones al problema mediante un proceso de promediado por lo que puede procederse a reformularlo en términos de las siguientes definiciones adimensionales:

$$T^* = \frac{T - T_a}{T_L - T_a}; \quad \mathbf{r}^* = \frac{\mathbf{r}}{L}; \quad t^* = \frac{kt}{\rho C_p L^2}; \quad \Phi^* = \frac{\Phi L^2}{k(T_L - T_a)}; \quad q_0^* = \frac{q_0 L}{k(T_L - T_a)}; \quad Bi = \frac{hL}{k}, \quad (7.7.2)$$

para obtener así las siguientes ecuaciones

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} = \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial z^{*2}} + \Phi^*, \quad (7.7.3a)$$

$$\text{en } x^* = 0, \quad T^* = T_0^*, \quad (7.7.3b)$$

$$\text{en } x^* = 1, \quad T^* = 1, \quad (7.7.3c)$$

$$\text{en } y^* = 0, \quad \frac{\partial T^*}{\partial y^*} = q_0^*, \quad (7.7.3d)$$

$$\text{en } y^* = w^*, \quad -\frac{\partial T^*}{\partial y^*} = BiT^*, \quad (7.7.3e)$$

$$\text{en } z^* = 0, \quad T^* = T_0^*, \quad (7.7.3f)$$

$$\text{en } z^* = h^* \quad -\frac{\partial T^*}{\partial z^*} = BiT^*, \quad (7.7.3g)$$

$$\text{cuando } t^* = 0, \quad T^* = T_{in}^*. \quad (7.7.3h)$$

Para resolver este problema, se propone la siguiente expansión en términos de una función propia en tres dimensiones

$$T^* = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{o=1}^{\infty} A_{nmo}(t^*) \Psi_{nmo}(x^*, y^*, z^*). \quad (7.7.4)$$

En donde A_{nmo} es una función del tiempo que debe determinarse, mientras que la función propia Ψ satisface al siguiente problema de Sturm-Liouville:

$$\frac{\partial^2 \Psi_{nmo}}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 \Psi_{nmo}}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 \Psi_{nmo}}{\partial z^{*2}} + (\lambda_n^2 + \beta_m^2 + \alpha_o^2) \Psi_{nmo} = 0, \quad (7.7.5a)$$

$$\text{en } x^* = 0, 1 \quad \Psi_{nmo} = 0, \quad (7.7.5b)$$

$$\text{en } y^* = 0, \quad \frac{\partial \Psi_{nmo}}{\partial y^*} = 0, \quad (7.7.5c)$$

$$\text{en } y^* = w^*, \quad -\frac{\partial \Psi_{nmo}}{\partial y^*} = Bi \Psi_{nmo}, \quad (7.7.5d)$$

$$\text{en } z^* = 0, \quad \Psi_{nmo} = 0, \quad (7.7.5e)$$

$$\text{en } z^* = h^* \quad -\frac{\partial \Psi_{nmo}}{\partial z^*} = Bi \Psi_{nmo}. \quad (7.7.5f)$$

La solución de este problema puede expresarse como

$$\Psi_{nmo}(x^*, y^*, z^*) = \phi_n(x^*) \varphi_m(y^*) \psi_o(z^*). \quad (7.7.6)$$

En donde las funciones propias en cada dirección satisfacen los siguientes problemas de Sturm-Liouville:

Problema-I

$$\frac{d^2 \phi_n}{dx^{*2}} + \lambda_n^2 \phi_n = 0, \quad (7.7.7a)$$

$$\text{en } x^* = 0, 1; \quad \phi_n = 0. \quad (7.7.7b)$$

Problema-II

$$\frac{d^2 \varphi_m}{dy^{*2}} + \beta_m^2 \varphi_m = 0, \quad (7.7.8a)$$

$$\text{en } y^* = 0, \quad \frac{d\varphi_m}{dy^*} = 0, \quad (7.7.8b)$$

$$\text{en } y^* = w^*, \quad -\frac{d\varphi_m}{dy^*} = Bi \varphi_m. \quad (7.7.8c)$$

Problema-III

$$\frac{d^2 \psi_o}{dz^{*2}} + \alpha_o^2 \psi_o = 0, \quad (7.7.9a)$$

$$\text{en } z^* = 0, \quad \psi_o = 0, \quad (7.7.9b)$$

$$\text{en } z^* = h^*, \quad -\frac{d\psi_o}{dz^*} = Bi\psi_o. \quad (7.7.9c)$$

Los problemas *I* y *II* son los mismos que se resolvieron en el caso anterior y su solución está dada por

$$\phi_n(x^*) = \text{sen}(\lambda_n x^*), \quad (7.7.10a)$$

$$\varphi_m(y^*) = \text{cos}(\beta_m y^*). \quad (7.7.10b)$$

Mientras que para el *Problema-III* la solución es

$$\psi_o(z^*) = \text{sen}(\alpha_o z^*). \quad (7.7.10c)$$

En las ecuaciones anteriores λ_n , β_m y α_o son los valores propios que resultan de resolver las siguientes ecuaciones

$$\text{sen}(\lambda_n) = 0, \quad (7.7.11a)$$

$$\beta_m \text{sen}(\beta_m w^*) = Bi \text{cos}(\beta_m w^*), \quad (7.7.11b)$$

$$-\alpha_o \text{cos}(\alpha_o h^*) = Bi \text{sen}(\alpha_o h^*). \quad (7.7.11c)$$

Con base en estas soluciones se deduce que la función propia es

$$\Psi_{nmo}(x^*, y^*, z^*) = \text{sen}(\lambda_n x^*) \text{cos}(\beta_m y^*) \text{sen}(\alpha_o z^*). \quad (7.7.12)$$

Para llevar a cabo la solución del problema se usa la fórmula de Green en su versión tridimensional

$$\begin{aligned} & \int_{z^*=0}^{z^*=h^*} \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} [T^* \nabla^2 \Psi_{pqr} - \Psi_{pqr} \nabla^2 T^*] dx^* dy^* dz^* \\ &= \int_{z^*=0}^{z^*=h^*} \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \left[T^* \frac{\partial \Psi_{pqr}}{\partial x^*} - \Psi_{pqr} \frac{\partial T^*}{\partial x^*} \right]_{x^*=0}^{x^*=1} dy^* dz^* \\ &+ \int_{z^*=0}^{z^*=h^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} \left[T^* \frac{\partial \Psi_{pqr}}{\partial y^*} - \Psi_{pqr} \frac{\partial T^*}{\partial y^*} \right]_{y^*=0}^{y^*=w^*} dx^* dz^* \\ &+ \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} \left[T^* \frac{\partial \Psi_{pqr}}{\partial z^*} - \Psi_{pqr} \frac{\partial T^*}{\partial z^*} \right]_{z^*=0}^{z^*=h^*} dx^* dy^*. \end{aligned} \quad (7.7.13)$$

La cual, al sustituir las ecuaciones diferenciales y condiciones de frontera para la temperatura y la función propia, toma la siguiente forma

$$\begin{aligned} & \int_{z^*=0}^{z^*=h^*} \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} \left[\Psi_{pqr} \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + T^* (\lambda_p^2 + \beta_q^2 + \alpha_r^2) \Psi_{pqr} \right] dx^* dy^* dz^* \\ &= - \int_{z^*=0}^{z^*=h^*} \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \left[\frac{\partial \Psi_{pqr}}{\partial x^*} \Big|_{x^*=1} - T_0^* \frac{\partial \Psi_{pqr}}{\partial x^*} \Big|_{x^*=0} \right] dy^* dz^* - \int_{z^*=0}^{z^*=h^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} \Psi_{pqr} \Big|_{y^*=0} q_0^* dx^* dz^* \\ &+ \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} T_0^* \frac{\partial \Psi_{pqr}}{\partial z^*} \Big|_{z^*=0} dx^* dy^* + \int_{z^*=0}^{z^*=h^*} \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} \Psi_{pqr} \Phi^* dx^* dy^* dz^*. \end{aligned} \quad (7.7.14)$$

O bien, tras sustituir la solución propuesta en la ecuación (7.7.4),

$$\begin{aligned}
& \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{o=1}^{\infty} \left[\frac{dA_{nmo}}{dt^*} + (\lambda_p^2 + \beta_q^2 + \alpha_r^2) A_{nmo} \right] \int_{z^*=0}^{z^*=h^*} \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} \Psi_{nmo} \Psi_{pqr} dx^* dy^* dz^* \\
&= - \int_{z^*=0}^{z^*=h^*} \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \left[\frac{\partial \Psi_{pqr}}{\partial x^*} \Big|_{x^*=1} - T_0^* \frac{\partial \Psi_{pqr}}{\partial x^*} \Big|_{x^*=0} \right] dy^* dz^* - \int_{z^*=0}^{z^*=h^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} \Psi_{pqr} \Big|_{y^*=0} q_0^* dx^* dz^* \\
&+ \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} T_0^* \frac{\partial \Psi_{pqr}}{\partial z^*} \Big|_{z^*=0} dx^* dy^* + \int_{z^*=0}^{z^*=h^*} \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} \Psi_{pqr} \Phi^* dx^* dy^* dz^*. \quad (7.7.15)
\end{aligned}$$

Usando la condición de ortogonalidad de las funciones propias se deduce la siguiente ecuación diferencial ordinaria

$$\frac{dA_{nmo}}{dt^*} + \gamma_{nmo}^2 A_{nmo} = \Omega_{nmo}. \quad (7.7.16)$$

En donde, para abreviar la notación, se definió $\gamma_{nmo}^2 = \lambda_n^2 + \beta_m^2 + \alpha_o^2$, así como

$$\begin{aligned}
\Omega_{nmo} = & \left[- \int_{z^*=0}^{z^*=h^*} \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \left[\frac{\partial \Psi_{nmo}}{\partial x^*} \Big|_{x^*=1} - T_0^* \frac{\partial \Psi_{nmo}}{\partial x^*} \Big|_{x^*=0} \right] dy^* dz^* \right. \\
& - \int_{z^*=0}^{z^*=h^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} \Psi_{nmo} \Big|_{y^*=0} q_0^* dx^* dz^* + \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} T_0^* \frac{\partial \Psi_{nmo}}{\partial z^*} \Big|_{z^*=0} dx^* dy^* \\
& \left. + \int_{z^*=0}^{z^*=h^*} \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} \Psi_{nmo} \Phi^* dx^* dy^* dz^* \right] \left[\int_{z^*=0}^{z^*=h^*} \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} \Psi_{nmo}^2 dx^* dy^* dz^* \right]^{-1}. \quad (7.7.17)
\end{aligned}$$

Para resolver la ecuación (7.7.16), se necesita una condición inicial, la cual resulta de sustituir la solución formal en la ecuación (7.7.3h):

$$T_{in}^* = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{o=1}^{\infty} A_{nmo}(0) \Psi_{nmo}(x^*, y^*, z^*). \quad (7.7.18)$$

Multiplicando ambos lados de la ecuación anterior por Ψ_{pqr} e integrando volumétricamente da como resultado:

$$A_{nmo}(0) = \frac{\int_{z^*=0}^{z^*=h^*} \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} T_{in}^* \Psi_{nmo} dx^* dy^* dz^*}{\int_{z^*=0}^{z^*=h^*} \int_{y^*=0}^{y^*=w^*} \int_{x^*=0}^{x^*=1} \Psi_{nmo}^2 dx^* dy^* dz^*}. \quad (7.7.19)$$

La solución de la ecuación (7.7.16) es

$$A_{nmo}(t^*) = A_{nmo}(0) e^{-\gamma_{nmo}^2 t^*} + \frac{\Omega_{nmo}}{\gamma_{nmo}^2} \left[1 - e^{-\gamma_{nmo}^2 t^*} \right]. \quad (7.7.20)$$

De esta forma, la solución del problema se puede escribir como sigue:

$$T^* = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{o=1}^{\infty} \left[A_{nmo}(0) \Psi_{nmo}(x^*, y^*, z^*) e^{-\gamma_{nmo}^2 t^*} + \Psi_{nmo}(x^*, y^*, z^*) \frac{\Omega_{nmo}}{\gamma_{nmo}^2} \left(1 - e^{-\gamma_{nmo}^2 t^*} \right) \right]. \quad (7.7.21)$$

En donde el primer término representa la influencia de la condición inicial y el segundo la de las condiciones de frontera. Con esta expresión se concluye la solución del problema.

Ejercicio 7.10 — Transporte por difusión y convección. En esta sección se revisó la solución de varios problemas en donde el principal mecanismo de transporte era la difusión. En este problema se aborda el caso del transporte por difusión y convección. Para ello, demuestre primero que la siguiente ecuación diferencial

$$\frac{\partial w}{\partial t} = f(x) \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + g(x) \frac{\partial w}{\partial x} + h(x)w + \Phi(x, t), \quad (7.7.22)$$

puede transformarse a la siguiente forma difusiva

$$s(x) \frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[p(x) \frac{\partial w}{\partial x} \right] - q(x)w + s(x)\Phi(x, t), \quad (7.7.23)$$

al utilizar los siguientes cambios de variable

$$p(x) = \exp \left[\int \frac{g(x)}{f(x)} dx \right]; \quad s(x) = \frac{p(x)}{f(x)}; \quad q(x) = -s(x)h(x). \quad (7.7.24)$$

Posteriormente, utilice esta información para resolver el siguiente problema de transferencia de calor en estado transitorio:

$$\rho C_p \left(\frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + \langle v_z \rangle \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial z} \right) = k \frac{\partial^2 \langle T \rangle}{\partial z^2} + \Phi, \quad (7.7.25a)$$

$$\text{en } z = 0, \quad \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial z} = 0, \quad (7.7.25b)$$

$$\text{en } z = L, \quad -k \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial z} = h(T - T_a), \quad (7.7.25c)$$

$$\text{cuando } t = 0, \quad T = T_m. \quad (7.7.25d)$$

En las ecuaciones anteriores $\langle v_z \rangle$ representa el promedio de la componente z de la velocidad y es constante al igual que la fuente Φ . Resuelva analíticamente este problema usando el método de expansión en funciones propias junto con la fórmula de Green. ■

7.8 Resumen del capítulo

En este capítulo se presentó una breve discusión acerca de la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales. El énfasis se centró en aquellas ecuaciones que se encuentran típicamente en aplicaciones asociadas con fenómenos de transporte y no en hacer una discusión exhaustiva de la solución de ecuaciones diferenciales en general. Con esta visión en mente se examinó el uso del método de expansión en funciones propias (el cual aprovecha los fundamentos del método de separación de variables y del problema de Sturm-Liouville) junto con la fórmula de Green así como el método de la transformada de Laplace. Como comentario final, vale la pena recalcar que, a pesar del extenso uso de las soluciones numéricas en la actualidad, el contar con soluciones analíticas, cada vez que esto sea posible, es una labor que no debe perderse. Lo anterior se debe a que este tipo de soluciones no tienen las aproximaciones que involucran las soluciones numéricas y son, por tanto, más confiables.



Comentarios finales

En este texto se abordaron de manera integral los tres tipos de fenómenos de transporte. El enfoque que se adoptó fue el de enfatizar la relación que tienen los procesos que ocurren a un nivel de escala macroscópica con los que tienen lugar a la escala microscópica. Como pudo notarse, las ecuaciones gobernantes a la escala macroscópica (y de hecho las condiciones de frontera entre fases) se deducen a partir de los principios de conservación a escala macroscópica. Más aún, con los métodos del promedio volumétrico y de homogenización se establece, en el proceso de cerradura, el vínculo que guardan los fenómenos de transporte a escala microscópica con los que ocurren a escala macroscópica. Por último, el filtrado sistemático de información entre escalas determina la complejidad del modelo matemático a resolver. El cual, en algunos casos es susceptible de ser resuelto de manera analítica como se ilustró en el último capítulo de este texto.

Espero sinceramente que el material cubierto aquí haya sido de interés para el lector y que esta visión le sirva para ver desde una perspectiva un poco distinta a la clásica los fenómenos de transporte. Un último punto que deseo enfatizar en este párrafo es que los fenómenos de transporte son un tema de investigación boyante que motiva a llevar a cabo actividades de docencia e investigación que tienen una amplia variedad de aplicaciones. Es por ello que su estudio hace prácticamente imposible resistirse a desear dar lo mejor de uno mismo y hacer estudios en los que se trabaja no solo con la razón sino con el corazón. Espero haber contagiado de ese entusiasmo al lector.

Sinceramente

Francisco J. Valdés-Parada
Ciudad de México, 2022



Bibliografía

- Airiau, C., Bottaro, A. (2020). Flow of shear-thinning fluids through porous media. *Advances in Water Resources* **143**, 103658.
- Anderson, T.B., Jackson, R. (1967). Fluid mechanical description of fluidized beds. equations of motion. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* **6**, 527–539.
- Aris, R. (1989). *Vectors, Tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics*. Dover Publications Inc.
- Auriault, J.L., Boutin, C., Geindreau, C. (2009). *Homogenization of Coupled Phenomena in Heterogenous Media*. ISTE & Wiley.
- Auriault, J.L., Geindreau, C., Orgéas, L. (2007). Upscaling forchheimer law. *Transport in Porous Media* **70**, 213–229.
- Batchelor, G.K. (2000). *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press.
- Battiato, I., V, P.T.F., Malley, D.O., Miller, C.T., Takhar, P.S., Valdés-Parada, F.J., Wood, B.D. (2019). Theory and applications of macroscale models in porous media. *Transport in Porous Media* **130**, 5–76.
- Bear, J. (2018). *Modeling Phenomena of Flow and Transport in Porous Media*. Springer International Publishing.
- Bergman, T.L., Lavine, A.S., Incropera, F.P., DeWitt, D.P. (2017). *Fundamentals of Heat and Mass Transfer, 8th Edition*. Wiley.
- Besson, U. (2012). The history of the cooling law: When the search for simplicity can be an obstacle. *Science & Education* **21**, 1085–1110.
- 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.
- Blunt, M.J. (2017). *Multiphase Flow in Permeable Media*. Cambridge University Press.

- Bottaro, A. (2019). Flow over natural or engineered surfaces: an adjoint homogenization perspective. *Journal of Fluid Mechanics* **877**, 1–91.
- Bourbatache, M.K., Millet, O., Moyne, C. (2020). Upscaling diffusion-reaction in porous media. *Acta Mechanica* **231**, 2011–2031.
- Brown, G.O. (2002). Henry darcy and the making of a law. *Water Resources Research* **38**, 11–1–11–12.
- Carreau, P.J. (1972). Rheological equations from molecular network theories. *Transactions of the Society of Rheology* **16**, 99–127.
- Cattaneo, C. (1958). Sur une forme de l'équation de la chaleur éliminant le paradoxe d'une propagation instantanée. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences* **247**, 431–433.
- Chai, Z., Lu, J., Shi, B., Guo, Z. (2011). Gas slippage effect on the permeability of circular cylinders in a square array. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **54**, 3009–3014.
- Choi, J., Dong, H. (2021). Green functions for the pressure of stokes systems. *International Mathematics Research Notices* **2021**, 1699–1759.
- Crane (1982). *Flow of Fluids Through Valves, Fittings and Pipe*. Vervante.
- Cushman, J.H. (1997). *The Physics of Fluids in Hierarchical Porous Media: Angstroms to Miles*. Springer Netherlands.
- 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).
- Darrigol, O. (2002). Between hydrodynamics and elasticity theory: The first five births of the Navier-Stokes equation. *Archive for History of Exact Sciences* **56**, 95–150.
- Darrigol, O. (2005). *Worlds of Flow: A History of Hydrodynamics from the Bernoullis to Prandtl*. Oxford University Press.
- Davit, Y., Debenest, G., Wood, B.D., Quintard, M. (2010a). Modeling non-equilibrium mass transport in biologically reactive porous media. *Advances in Water Resources* **33**, 1075–1093.
- Davit, Y., Quintard, M., Debenest, G. (2010b). Equivalence between volume averaging and moments matching techniques for mass transport models in porous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **53**, 4985–4993.
- Deen, W.M. (1998). *Analysis of Transport Phenomena (Topics in Chemical Engineering)*. Oxford University Press.
- Deen, W.M. (2016). *Introduction to Chemical Engineering Fluid Mechanics*. Cambridge University Press.
- d'Hueppe, A., Chandesris, M., Jamet, D., Goyeau, B. (2012). Coupling a two-temperature model and a one-temperature model at a fluid-porous interface. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **55**, 2510–2523.
- Dirac, P. (1951). Is there an aether? *Nature* **168**, 906–907.
- Einstein, A. (1916). Die grundlage der allgemeinen relativitäts theorie. *Annalen der Physik* **354**, 769–822.
- Euler, L. (1750). Découverte d'un nouveau principe de mécanique. *Mémoires de l'académie des sciences de Berlin* **6**, 185–217.

- Gibbs, J. (1928). *The Collected Works of J. Willard Gibbs in Two Volumes. Volume 1: Thermodynamics*. Longmans Green and Co.
- Golfier, F., Wood, B.D., Orgogozo, L., Quintard, M., Buès, M. (2009). Biofilms in porous media: Development of macroscopic transport equations via volume averaging with closure for local mass equilibrium conditions. *Advances in Water Resources* **32**, 463–485.
- 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.
- Gray, W.G., Miller, C.T. (2013). A generalization of averaging theorems for porous medium analysis. *Advances in Water Resources* **62**, 227–237.
- Gray, W.G., Miller, C.T. (2014). *Introduction to the Thermodynamically Constrained Averaging Theory for Porous Medium Systems*. Springer International Publishing.
- Haberman, R. (2012). *Applied Partial Differential Equations with Fourier Series and Boundary Value Problems (Featured Titles for Partial Differential Equations)*. Pearson. fifth edición.
- Hill, C., Root, T. (2014). *Introduction to Chemical Engineering Kinetics and Reactor Design*. John Wiley & Sons, Inc.
- Howes, F.A., Whitaker, S. (1985). The spatial averaging theorem revisited. *Chemical Engineering Science* **40**, 1387–1392.
- Kreyszig, E. (2011). *Advanced Engineering Mathematics*. Wiley.
- Lai, W.M., Krempl, E., Rubin, D.H. (2010). *Introduction to Continuum Mechanics*. Elsevier Science & Technology. fourth edición.
- Lasseux, D., Arani, A.A.A., Ahmadi, A. (2011). On the stationary macroscopic inertial effects for one phase flow in ordered and disordered porous media. *Physics of Fluids* **23**, 073103.
- Lasseux, D., Valdés-Parada, F.J. (2017). On the developments of Darcy's law to include inertial and slip effects. *Comptes Rendus Mécanique* **345**, 660–669.
- Lasseux, D., Valdés-Parada, F.J., Bellet, F. (2019). Macroscopic model for unsteady flow in porous media. *Journal of Fluid Mechanics* **862**, 283–311.
- Lasseux, D., Valdés-Parada, F.J., Porter, M.L. (2016). An improved macroscale model for gas slip flow in porous media. *Journal of Fluid Mechanics* **805**, 118–146.
- Marle, C. (1967). Écoulements monophasiques en milieu poreux. *Revue de l'Institut Français du Pétrole* **22**, 1471–1509.
- Mauri, R. (1991). Dispersion, convection, and reaction in porous media. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics* **3**, 743–756.
- Maxwell, J.C. (1867). On the dynamical theory of gases. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* **157**, 49–88.
- Mei, C.C., Vernescu, B. (2010). *Homogenization Methods For Multiscale Mechanics*. World Scientific Publishing Company.
- Miller, C.T., Valdés-Parada, F.J., Ostvar, S., Wood, B.D. (2018). A priori parameter estimation for the thermodynamically constrained averaging theory: Species transport in a saturated porous medium. *Transport in Porous Media* **122**, 611–632.

- Navier, M. (1822). *Mémoire sur les lois du mouvement des fluides*. volumen 6. l'Académie Royale des Sciences.
- Nicholson, C. (2001). Diffusion and related transport mechanisms in brain tissue. *Reports on Progress in Physics* **64**, 815–884.
- Nield, D.A., Bejan, A. (2017). *Convection in Porous Media*. Springer International Publishing.
- Ocón, J., Tojo, G. (1971). *Problemas de Ingeniería Química tomos I y II*. Aguilar.
- Paéz-García, C., Valdés-Parada, F. (2019). An upscaling approach for the Betz-Joukowsky theory. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* **18**, 681–699.
- Piña-Garza, E., de la Selva-Monroy, S.M. (2018). *Dinámica de Fluidos*. Editorial Trillas, Ciudad de México.
- Quintard, M., Kaviany, M., Whitaker, S. (1997). Two-medium treatment of heat transfer in porous media: numerical results for effective properties. *Advances in Water Resources* **20**, 77–94.
- Rose, W. (2000). Myths about later-day extensions of Darcy's law. *Journal of Petroleum Science and Engineering* **26**, 187–198.
- Sanchez-Palencia, E. (1980). *Non-Homogeneous Media and Vibration Theory*. volumen 127 de *Lecture Notes in Physics*. Springer Berlin Heidelberg.
- Simmonds, J.G. (1994). *A Brief on Tensor Analysis*. Springer New York.
- Slattery, J.C. (1967). Flow of viscoelastic fluids through porous media. *AIChE Journal* **13**, 1066–1071.
- 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.
- Spiegel, M.R., Lipschutz, S., Liu, J. (2009). *Mathematical handbook of formulas and tables*. Schaum's outline series; McGraw Hill professional, McGraw-Hill. 3rd ed edición.
- 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.
- Swaney, R., Bird, R. (2017). A connection between transport phenomena and thermodynamics. *Chemical Engineering Education* **51**, 83–87.
- Tanaka, M., Takahashi, Y., Yamaguchi, N., Kim, K.W., Zheng, G., Sakamitsu, M. (2013). The difference of diffusion coefficients in water for arsenic compounds at various pH and its dominant factors implied by molecular simulations. *Geochimica et Cosmochimica Acta* **105**, 360–371.
- Truskey, G.A., Yuan, F., Katz, D.F. (2004). *Transport Phenomena in Biological Systems*. Prentice Hall. first edición.
- Valdés-Parada, F. (2010). Formulación integral para la solución de problemas de cerradura en procesos de escalamiento. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* **9**, 53–66.
- Valdés-Parada, F., Aguilar-Madera, C., Álvarez-Ramírez, J. (2011). On diffusion, dispersion and reaction in porous media. *Chemical Engineering Science* **66**, 2177–2190.
- 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. (2020). Upscaling reactive transport under hydrodynamic slip conditions in homogeneous porous media. *Water Resources Research* **56**.
- Valdés-Parada, F.J., Varela, J.R., Alvarez-Ramirez, J. (2012). Upscaling pollutant dispersion in the Mexico City Metropolitan Area. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **391**, 606–615.
- Valdés-Parada, F.J. (2014). *Breviario sobre Modelado Matemático*. Universidad Autónoma Metropolitana.
- Valdés-Parada, F.J. (2019). Two challenges in teaching transport phenomena. *Chemical Engineering Education* **53**, 22. Submitted: October 1, 2018 Accepted: October 29, 2018.
- Vernotte, P. (1958). Les paradoxes de la théorie continue de l'équation de la chaleur. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences* **246**, 3154–3155.
- Whitaker, S. (1966). The equations of motion in porous media. *Chemical Engineering Science* **21**, 291–300.
- Whitaker, S. (1967). Diffusion and dispersion in porous media. *AIChE Journal* **13**, 420–427.
- 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). Derivation and application of the Stefan-Maxwell equations. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* **18**, 213–243.
- Wood, B.D. (2009). The role of scaling laws in upscaling. *Advances in Water Resources* **32**, 723–736.
- Wood, B.D. (2013). Technical note: Revisiting the geometric theorems for volume averaging. *Advances in Water Resources* **62**, 340–352.
- Wood, B.D., Cherblanc, F., Quintard, M., Whitaker, S. (2003). Volume averaging for determining the effective dispersion tensor: Closure using periodic unit cells and comparison with ensemble averaging. *Water Resources Research* **39**.
- Wood, B.D., Ford, R.M. (2007). Biological processes in porous media: From the pore scale to the field. *Advances in Water Resources* **30**, 1387–1391.
- Wood, B.D., Valdés-Parada, F.J. (2013). Volume averaging: Local and nonlocal closures using a Green's function approach. *Advances in Water Resources* **51**, 139–167.
- Wood, B.D., Whitaker, S. (1998). Diffusion and reaction in biofilms. *Chemical Engineering Science* **53**, 397–425.
- Wood, B.D., Whitaker, S. (1999). Cellular growth in biofilms. *Biotechnology and Bioengineering* **64**, 656–670.
- Zampogna, G.A., Magnaudet, J., Bottaro, A. (2018). Generalized slip condition over rough surfaces. *Journal of Fluid Mechanics* **858**, 407–436.
- Zerner, M. (2011). Aux origines de la loi de Darcy (1856). *Documents pour l'histoire des techniques* **20**, 29–40.