



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

PROGRAMA DE MAESTRIA Y DOCTORADO EN  
INGENIERIA

FACULTAD DE INGENIERIA

COMBUSTIÓN CATALÍTICA DE UN GAS A  
TRAVÉS DE UN ARREGLO DE ALAMBRES .

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

DOCTOR EN INGENIERIA CAMPO DE CONOCIMIENTO MÉCANICA

P R E S E N T A

JOSÉ JOAQUÍN LIZARDI DEL ANGEL

TUTOR: DR. CÉSAR TREVIÑO TREVIÑO



2006

---

# Índice general

Resumen . . . . .	V
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Combustión Catalítica . . . . .	1
1.2. El Hidrógeno . . . . .	3
1.3. Ventajas y desventajas del uso de hidrógeno como fuente de energía	5
1.3.1. Ventajas . . . . .	5
1.3.2. Desventajas . . . . .	6
1.4. Aplicaciones de la combustión catalítica del Hidrógeno . . . . .	6
1.5. Breve historia sobre la catálisis . . . . .	7
<b>2. Fluidodinámica de un gas</b>	<b>10</b>
2.1. Introducción . . . . .	10
2.2. Planteamiento del problema . . . . .	13
2.3. Leyes básicas de conservación de la dinámica de un flujo de gas . .	14
2.3.1. Ecuación de conservación de masa . . . . .	14
2.3.2. Ecuaciones de balance de cantidad de movimiento . . . . .	15
2.4. Adimensionalización de las ecuaciones y condiciones de frontera . .	16
2.5. Formulación de la ecuaciones en términos de la vorticidad y de la función de corriente . . . . .	18
2.6. Esquema numérico . . . . .	19
2.6.1. Solución numérica de sistemas elípticos . . . . .	19
2.6.2. Método de solución de ecuaciones diferenciales elípticas por medio de un sistema de tridiagonales acopladas . . . . .	20
2.6.3. Generación de Mallas Computacionales . . . . .	20
2.6.4. Métodos para la generación de mallas . . . . .	21
2.6.5. Ecuaciones para la generación de mallas elípticas . . . . .	23
2.6.6. Ecuaciones en el sistema $\xi$ y $\eta$ . . . . .	26
2.6.7. Método numérico de generación de malla . . . . .	28
2.7. Resultados de la fluidodinámica . . . . .	29

2.8. Resultados de la vorticidad . . . . .	30
<b>3. Análisis térmico</b>	<b>38</b>
3.1. Introducción . . . . .	38
3.2. Planteamiento del problema térmico . . . . .	39
3.3. Ecuación de la energía . . . . .	39
3.4. Adimensionalización de la ecuación y condiciones de frontera . . . . .	40
3.5. Análisis a bajo número de Peclet . . . . .	42
3.6. Esquema numérico . . . . .	44
3.7. Resultados . . . . .	44
3.7.1. Número de Peclet pequeño comparado con la unidad . . . . .	45
3.7.2. Número de Peclet de orden unidad . . . . .	45
3.7.3. Número de Peclet de orden 10 . . . . .	45
3.7.4. Número de Nusselt . . . . .	46
<b>4. Proceso de combustión catalítica de un gas (Hidrógeno-Aire) que cruza un arreglo de alambres.</b>	<b>52</b>
4.1. Introducción . . . . .	52
4.2. Planteamiento del problema . . . . .	54
4.3. Leyes básicas de conservación de especies en la dinámica de un flujo de gas . . . . .	55
4.4. Modelado de la reacción catalítica . . . . .	58
4.5. Ignición a pequeños valores del número de Peclet . . . . .	60
4.6. Esquema numérico . . . . .	62
4.7. Resultados . . . . .	63
4.7.1. Resultados caso $Pe = 0.72$ . . . . .	63
4.7.2. Resultados caso $Pe = 1.44$ . . . . .	63
4.7.3. Resultados caso $Pe = 2.88$ . . . . .	64
4.7.4. Resultados caso $Pe = 7.2$ . . . . .	64
4.7.5. Resultados caso $Pe = 14.4$ . . . . .	65
4.7.6. Resultados caso $Pe = 28.8$ . . . . .	65
<b>5. Análisis de resultados</b>	<b>79</b>
<b>6. Conclusiones</b>	<b>86</b>
<b>A. Deducción de sistema Vorticidad-Función de corriente</b>	<b>95</b>
<b>B. Condiciones de frontera en región no lejana</b>	<b>102</b>

# Índice de figuras

2.1.	Esquema físico del flujo que cruza a través de un arreglo de alambres.	13
2.2.	Malla utilizada para los calculos numéricos . . . . .	29
2.3.	Se muestra el campo de la función de corriente para los casos donde los números de Reynolds son: $Re = 0.1$ , $Re = 0.5$ y $Re = 1$ , con un $\epsilon = 0.2$ . . . . .	32
2.4.	Se muestra el campo de la función de corriente para los casos donde los números de Reynolds son: $Re = 2$ , $Re = 3$ , $Re = 4$ y $Re = 4$ , con un $\epsilon = 0.2$ . . . . .	33
2.5.	Se muestra el campo de la función de corriente para los casos donde los números de Reynolds son: $Re = 10$ , $Re = 15$ , $Re = 20$ , $Re = 30$ y $Re = 40$ , con un $\epsilon = 0.2$ . . . . .	34
2.6.	Se muestra el campo de la vorticidad para los casos donde los números de Reynolds son: $Re = 0.1$ , $Re = 0.5$ y $Re = 1$ , con un $\epsilon = 0.2$ . . . . .	35
2.7.	Se muestra el campo de la vorticidad para los casos donde los números de Reynolds son: $Re = 2$ , $Re = 3$ , $Re = 4$ y $Re = 5$ , con un $\epsilon = 0.2$ . . . . .	36
2.8.	Se muestra el campo de la vorticidad para los casos donde los números de Reynolds son: $Re = 10$ , $Re = 15$ , $Re = 20$ , $Re = 30$ y $Re = 40$ , con un $\epsilon = 0.2$ . . . . .	37
3.1.	Se muestra el campo de temperatura para los casos donde los números de Reynolds son: $Pe = 0.072$ , $Pe = 0.36$ y $Pe = 0.72$ , con un $\epsilon = 0.2$ . . . . .	47
3.2.	Se muestra el campo de temperatura para los casos donde los números de Peclet son: $Pe = 1.44$ , $Pe = 2.16$ , $Pe = 2.88$ y $Pe = 3.60$ , con un $\epsilon = 0.2$ . . . . .	48
3.3.	Se muestra el campo de temperatura para los casos donde los números de Reynolds son: $Pe = 7.2$ , $Pe = 10.6$ , $Pe = 14.4$ , $Pe = 21.6$ y $Pe = 28.8$ , con un $\epsilon = 0.2$ . . . . .	49

3.4.	función del número de Peclet, los cuadros oscuros representan los resultados obtenidos mediante la simulación numérica, los círculos muestran el resultado de la solución asintótica y la línea gruesa la correlación obtenida del análisis de datos. . . . .	50
3.5.	Se muestra la relación los números Nusselt numérico y asintótico sobre la superficie, en función de ángulo. . . . .	51
4.1.	Campo de concentración de hidrógeno para el caso donde el $Pe = 0.72$ , y con número de Lewis $L_F = 0.3$ a distintas temperaturas. . .	67
4.2.	Campo de concentración de oxígeno para el caso donde el $Pe = 0.72$ , y con número de Lewis $L_O = 1$ a distintas temperaturas. . . . .	68
4.3.	Campo de concentración de hidrógeno para el caso donde el $Pe = 1.44$ , y con número de Lewis $L_F = 0.3$ a distintas temperaturas. . .	69
4.4.	Campo de concentración de oxígeno para el caso donde el $Pe = 1.44$ , y con número de Lewis $L_O = 1$ a distintas temperaturas . . . . .	70
4.5.	Campo de concentración de hidrógeno para el caso donde el $Pe = 2.88$ , y con número de Lewis $L_F = 0.3$ a distintas temperaturas. . .	71
4.6.	Campo de concentración de oxígeno para el caso donde el $Pe = 2.88$ , y con número de Lewis $L_O = 1$ a distintas temperaturas . . . . .	72
4.7.	Campo de concentración de hidrógeno para el caso donde el $Pe = 7.2$ , y con número de Lewis $L_F = 0.3$ a distintas temperaturas. . . . .	73
4.8.	Campo de concentración de oxígeno para el caso donde el $Pe = 7.2$ , y con número de Lewis $L_O = 1$ a distintas temperaturas . . . . .	74
4.9.	Campo de concentración de hidrógeno para el caso donde el $Pe = 14.4$ , y con número de Lewis $L_F = 0.3$ a distintas temperaturas. . .	75
4.10.	Campo de concentración de oxígeno para el caso donde el $Pe = 14.4$ , y con número de Lewis $L_O = 1$ a distintas temperaturas . . . . .	76
4.11.	Campo de concentración de hidrógeno para el caso donde el $Pe = 28.8$ , y con número de Lewis $L_F = 0.3$ a distintas temperaturas. . .	77
4.12.	Campo de concentración de oxígeno para el caso donde el $Pe = 28.8$ , y con número de Lewis $L_O = 1$ a distintas temperaturas . . . . .	78
5.1.	La figura muestra la temperatura de ignición $T_{wig}$ y de la temperatura del alambre $T_{w0ig}$ , como función del número de Peclet. Los círculos muestran el resultado asintótico, mientras que los cuadros, la solución numérica. . . . .	80
5.2.	La figura muestra a la velocidad de tasa de reacción como función de la temperatura para distintos números de Peclet. . . . .	81
5.3.	Energía externa necesaria para la combustión como función de la temperatura del alambre para distintos números de Peclet. . . . .	82

---

5.4. Energía externa necesaria en forma adimensional como una función del número de Peclet. Los resultados numéricos son representados a través de los cuadros, mientras que la solución asintótica es graficada como círculos. . . . .	83
5.5. Se muestra la eficiencia de conversión total como una función de la temperatura del alambre para distintos números de Peclet. . . . .	84
5.6. La figura muestra la eficiencia terminal para cada uno de los arreglos de hilos catalíticos como función del número de Peclet. . . . .	85

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Combustión Catalítica

El proceso de combustión catalítica es un tópico de gran importancia dentro del desarrollo de nuevas tecnologías para la producción de energía no-contaminante. Una de sus aplicaciones más importantes es la del convertidor catalítico utilizado en los automóviles. Éste consiste en una placa con propiedades catalíticas, es decir, de transformación química a nivel molecular, ésta recibe los gases de la combustión provenientes del motor, los disocia y asocia en moléculas de composición más sencilla tales como agua, bióxido de carbono, etc., que resultan más fáciles de asimilar para el ambiente.

Existen sistemas de combustión catalítica en los que la geometría del diseño es sencilla; sin embargo, esto no siempre es así, y en ocasiones se requiere de geometrías complejas que ayuden a una maximización en el uso de la energía o a una mejor disociación de las concentraciones de los compuestos químicos que actúan en el sistema. Debido a ello resulta importante conocer la manera en que se comporta el sistema cuando las condiciones actúan sobre geometrías complejas. De allí, que el problema a estudiar sea la caracterización del proceso de combustión catalítica que ocurre en un flujo de gas hidrógeno-aire, que pasa a través de un arreglo de alambres, dispuesto en forma de malla.

Esta investigación se enmarca dentro del área científica de la transferencia de

calor y la combustión, que son campos de carácter interdisciplinar donde confluyen ramas de la ciencia como la termodinámica, la cinética química, la mecánica de fluidos, la matemática aplicada, el diseño mecánico y el transporte de calor y masa, necesarias todas ellas para la resolución integral del problema que se presenta a continuación.

Este problema en particular resulta complejo debido a que involucra aspectos específicos en su solución: por un lado, centra su idea en el estudio de la convección forzada que cruza un arreglo de alambres catalíticos; dentro de este sistema, el proceso de transferencia de calor dará la pauta para entender la manera en que se da proceso de combustión y la ignición de una mezcla de hidrógeno - aire que incide en la placa catalítica.

El problema de la transferencia de calor en un sistema por convección forzada, se da porque el flujo de gas viene a una velocidad y una temperatura impuestas aguas arriba del sistema, mientras que los alambres se encuentran suspendidos a una temperatura también constante, pero diferente a la del flujo. Esto provocará que haya un flujo de calor hacia el gas dependiendo de la diferencia de temperaturas entre ambos. La evolución de este proceso estará regida por distintas propiedades físicas (velocidad, densidad, viscosidad, etc.) del campo fluido en todo el sistema, por las ecuaciones que rigen la fluidodinámica y la ecuación de la energía.

La obtención del número de Nusselt y la determinación del campo fluido nos permitirán conocer las distribuciones de los campos de concentraciones de las especies del gas sobre la superficie del arreglo de alambres catalíticos.

Ahora bien, dado el aspecto físico y geométrico del sistema, el espacio donde vive la solución, de los procesos descritos en el párrafo anterior, es complejo, por lo que resulta imperativo obtener una distribución de malla que sea capaz de reflejar los aspectos físicos del sistema. Será necesario, entonces, entender cómo es que se construyen sistemas de distribución de mallas numéricas para geometrías complejas, donde las premisas principales sean: el mantener la ortogonalidad del sistema numérico y conservar una razón de aspecto adecuada para cada uno de los nodos de la malla. De allí, que se haga obvio, que el punto de partida para solucionar el problema ya planteado sea generar una malla numérica adecuada.

Estos tres aspectos se conjugan para alcanzar una solución que predice el com-



portamiento del sistema de una manera cercana a la realidad, es decir, se desarrolla un modelo en el que se tomaron en cuenta materiales y condiciones cercanas a una realidad física.

En la introducción de los subsecuentes capítulos se presentará la revisión bibliográfica para cada una de partes de la investigación doctoral, lo que permite conocer la evolución del estudio de problemas similares al que aquí se investiga, ésta se hará de manera separada para cada uno de las facetas del problema. Iniciando con la fluidodinámica del arreglo de hilos, continuando por el problema de convección forzada, que incluye el estudio de la transferencia de calor en arreglos de tubos y alambres; dedicando también un capítulo al estudio del proceso de catalisis.,

## 1.2. El Hidrógeno

El hidrógeno es el elemento químico más sencillo. Su número atómico es 1 y su símbolo es H. Fue descubierto por Cavendish en el siglo *XVI*, pero su nombre se lo dio Lavoisier un tiempo después. La palabra hidrógeno se forma a partir de hydro(agua) y genoman (hacer) ya que cuando el hidrógeno se quema se obtiene agua. Es el elemento más ligero y abundante del Universo (más del 90% de los átomos y 3/4 partes de la masa total).

Se formó pocos segundos después del "Big Bang" que se cree según esta teoría, fue el comienzo del universo. Se encuentra en el Sol y la mayoría de las estrellas. Se piensa que es el componente principal de Júpiter y que en las profundidades del planeta la presión es tan grande que el hidrógeno sólido molecular está como hidrógeno metálico sólido. En la corteza terrestre existe en una proporción del 0,14% en peso.

Por más de un siglo el hidrógeno se ha considerado como un combustible conveniente y limpio. Puesto que puede obtenerse de una diversa gama de fuentes domésticas, el hidrógeno podría reducir los costos económicos, políticos y ambientales de los sistemas de energía. Por otra parte, en áreas urbanas, a causa de la contaminación del aire, los costos relacionados con la preservación de la salud son un problema creciente, tanto para las sociedades desarrolladas como las que se encuentran en vías de desarrollo. En el largo plazo, el hidrógeno obtenido de fuentes

renovables ofrece un potencial de energía que sería sostenible en todos sentidos.

El hidrógeno es un portador de energía y puede producirse a partir de una amplia variedad de fuentes, tales como: el gas natural, el carbón, la biomasa, el agua, etc., así como de las aguas negras, de los residuos sólidos, llantas y desechos de petróleo.

Las ventajas y desventajas del hidrógeno derivan de sus propiedades físicas básicas. La molécula de hidrógeno es la más ligera, la más pequeña y está entre las moléculas más simples, además, es relativamente estable. El hidrógeno tiene más alto contenido de energía por unidad de peso que cualquier otro combustible y, en caso de accidente, se dispersaría rápidamente. También permite la combustión a altas relaciones de compresión y altas eficiencias en máquinas de combustión interna. Cuando se le combina con el oxígeno en celdas de combustible electroquímicas, el hidrógeno puede producir electricidad directamente, rebasando los límites de eficiencia del ciclo de Carnot obtenidos actualmente en plantas generadoras de potencia.

Como desventajas, el hidrógeno tiene una temperatura de licuefacción extremadamente baja (20 K) y una energía muy baja por unidad de volumen como gas o como líquido (más o menos una tercera parte de la del gas natural o gasolina, respectivamente). Otras desventajas son: la obtención del hidrógeno líquido requiere de un proceso altamente consumidor de energía, el transporte de hidrógeno gaseoso por ductos es menos eficiente que para otros gases, los contenedores para su almacenaje son grandes y el almacenamiento de cantidades adecuadas de hidrógeno a bordo de un vehículo todavía representa un problema significativo. El hidrógeno no es tóxico y no es contaminante, pero es difícil de detectar sin sensores adecuados ya que es incoloro, inodoro y su flama en el aire es casi invisible.

Por numerosas razones, el punto de introducción para la energía con base en el hidrógeno es el sector transporte. Los consumidores pagan considerablemente mucho más por la energía utilizada en el transporte que por la electricidad o el gas empleado para fines domésticos (esta relación podría ser, conservadoramente, hasta de 8 a 1 para una familia de clase media). Más aún, el sector transporte tiene también un gran potencial de ganancias por eficiencia de combustible. En efecto, la eficiencia de los automóviles modernos es de alrededor del 13 por ciento durante el ciclo de manejo urbano, en tanto que los vehículos a hidrógeno, ya sean híbrido-eléctricos o de celdas de combustible, podrían alcanzar eficiencias del orden de entre 35 y 45

por ciento. Los vehículos impulsados por hidrógeno también pueden cumplir con la demanda creciente de bajas o cero emisiones.

En diferentes países industrializados se están llevando a cabo investigaciones para el uso del hidrógeno en el transporte.

### 1.3. Ventajas y desventajas del uso de hidrógeno como fuente de energía

#### 1.3.1. Ventajas

Las ventajas del uso del hidrógeno son las siguientes:

- El hidrógeno es un combustible extraído del agua, la cual es un recurso muy abundante e inagotable en el mundo.
- La combustión del hidrógeno con el aire es limpia, evitando así la contaminación del medio ambiente.
- Los productos de la combustión son, en su mayoría, vapores de agua, los cuales son productos no contaminantes.

Las razones por las cuales se considera la combustión del hidrógeno como una combustión limpia, son las siguientes:

- Los productos de la combustión del hidrógeno con aire son: vapor de agua y residuos insignificantes donde la máxima temperatura es limitada. Algunos óxidos de nitrógeno son creados a muy altas temperaturas de combustión ( $2300K$ ), afortunadamente, la temperatura de autoignición del hidrógeno es solamente de  $900K$ .
- Una máquina de combustión interna que utiliza hidrógeno como combustible puede ser ajustada para que la emisión de  $NO_x$  sea 200 veces menor que la de los vehículos actuales. Una forma práctica para controlar la temperatura de combustión consiste en inducir agua a la mezcla hidrógeno-aire. Con la

inyección de agua, el escape de los vehículos manejados con hidrógeno es simplemente vapor de agua que retorna a la atmósfera sin contaminar el aire ni producir lluvia ácida.

### 1.3.2. Desventajas

Las desventajas del uso del hidrógeno son las siguientes:

- Como no es un combustible primario entonces se incurre en un gasto para su obtención.
- Requiere de sistemas de almacenamiento costosos y aún poco desarrollados.
- Elevado gasto de energía en la licuefacción del hidrógeno.
- Elevado precio del hidrógeno puro.

Debido a la necesidad que se tiene actualmente de reducir el nivel de contaminantes presentes en la atmósfera, por los problemas que éstos ocasionan, como el efecto invernadero, la variación de los regímenes climatológicos, entre otros, que afectan seriamente a la humanidad, es de gran importancia buscar nuevas alternativas que contribuyan a la solución de estos problemas sin recurrir a limitaciones en la producción de energía, ya que esto implicaría un retraso tanto en el desarrollo económico, cultural, tecnológico e investigativo de nuestro país.

## 1.4. Aplicaciones de la combustión catalítica del Hidrógeno

La combustión catalítica del hidrógeno se basa en que el hidrógeno y el oxígeno se pueden combinar a bajas temperaturas mediante un catalizador adecuado produciéndose, únicamente en esta reacción, vapor de agua que puede ser empleado por quemadores o calentadores en aplicaciones domésticas como por ejemplo en las estufas y calentadores de agua, etc.

Combustión del hidrógeno en máquinas de combustión interna. Consiste básicamente en la modificación de estos motores diseñados para quemar combustibles fósiles (gasolina, diesel, gas natural, etc) basándose en dos aspectos básicos: el diseño de la cámara de combustión y diversos ajustes en los sistemas del motor para que sea eficiente el uso de hidrógeno como combustible. Una de las características de los motores que utilizan hidrógeno como combustible es que tienen una eficiencia 20% mayor que los motores que emplean combustibles fósiles. Otra característica es que producen pocas emisiones contaminantes, arrojan únicamente vapor de agua y pequeñas cantidades de NOx.

## 1.5. Breve historia sobre la catálisis

En 1814 Kirchhoff reportó que los ácidos ayudan a la hidrólisis del almidón a glucosa. La oxidación del hidrógeno por el aire sobre el platino fue observada por H. Davy en 1817 y 1820, y también por Döbereiner (1823) quien construyó una yesca que producía una flama cuando una pequeña dosis de hidrógeno producido por la reacción del zinc y del ácido clorhídrico, reaccionaba en presencia de platino. Su dispositivo fue vendido con mucha facilidad a principios del siglo XIX cuando los encendedores aún no habían sido inventados. Encontró también que el platino ayudaba a la oxidación del monóxido de carbono y del etanol.

Faraday fue el primero en llevar a cabo experimentos y analizar porqué el platino facilitaba la oxidación de diferentes moléculas. Encontró que la adsorción del etileno desactivaba la superficie de platino temporalmente, mientras que la adsorción del sulfuro desactivaba al platino permanentemente. Midió la velocidad de oxidación del hidrógeno, sugirió un mecanismo de reacción y observó la desactivación y regeneración del catalizador. De esta manera, Faraday se convirtió en el primer científico en estudiar las reacciones catalíticas. En 1836 Berzelius definió al fenómeno y lo llamó catálisis, sugiriendo la existencia de una fuerza catalítica asociada a la acción del catalizador.

Las bases de la tecnología catalítica fueron introducidas en la segunda parte del siglo XIX. El proceso Deacon fue descubierto en 1860 y la oxidación de  $\text{SO}_2$  y  $\text{SO}_3$  mediante platino fue descubierta por Messel en 1875. Mond introdujo la reacción

de metano y vapor de agua con un catalizador de níquel. A principios del siglo XX, Ostwald desarrolló el proceso de oxidación del amoníaco para formar óxido nítrico, el precursor para la fabricación de ácido nítrico en 1902. Ese mismo año Sebatier desarrolló un proceso de hidrogenación de etileno. En 1905 Ipatieff usó la acción catalítica de arcillas para obtener diferentes reacciones orgánicas como la deshidrogenización, isomerización, hidrogenación y polimerización.

Un mejor entendimiento de la termodinámica llevó a conocer los límites de las velocidades de reacción en la reacción catalizadas. Un catalizador promueve una reacción hacia el equilibrio pero no produce moléculas en exceso de las existentes en las concentraciones en equilibrio. Gracias a la síntesis del amoníaco a partir del nitrógeno y del hidrógeno, se logró crear una prueba estándar que ayudó al desarrollo de la tecnología de la catálisis.

La calidad de un catalizador puede ser medida con base en qué tan cerca se encuentra del equilibrio químico y qué tanto se mantiene allí. Reactores de alta presión fueron diseñados para mantener el equilibrio químico durante la producción de amoníaco catalizado.

Las reacciones catalíticas del monóxido de carbono y del hidrógeno fueron utilizadas para producir metanol en 1923, así como hidrocarburos líquidos de alto peso molecular en 1930. La producción de motores diesel fue una de las principales aplicaciones de la catálisis durante el periodo de 1930 a 1950. El rompimiento de largas cadenas de hidrocarburos sirvió para obtener productos de menor peso molecular, los cuales eran obtenidos mediante óxidos catalizadores compuestos principalmente de aluminio y silicio.

El descubrimiento de petróleo de manera abundante en Arabia, a principios de los años cincuenta, enfocó el desarrollo de los procesos catalíticos en la acción de convertir petróleo crudo en combustibles y químicos. El aceite y los derivados intermedios del aceite como el etanol y el propanol se convirtieron en la materia prima dominante del mercado.

Los procesos catalizados usando el metal platino y el óxido como ácido, fueron desarrollados para convertir el petróleo en combustibles de alto octanaje. La catálisis de hidrodesulfuración removía al sulfuro del crudo y prevenía la desactivación catalítica.

El descubrimiento de silicatos de alumina cristalizados microporosos (zeolites) proveía de catalizadores más selectivos y con mayor actividad para muchas reacciones, incluyendo la ruptura, la hidroruptura, la alcalinización, la isomerización y la oligomerización.

La crisis energética en la década de los setenta del siglo *XX*, renovó el interés por la química y los combustibles, produciendo tecnologías que usaban materias primas alternativas al petróleo crudo. Intensas investigaciones fueron realizadas utilizando carbón, gas natural y aceite, para desarrollar nuevas tecnologías que proveyeran de mayor actividad y selectividad en los antiguos procesos catalíticos. Se incrementó lo concerniente a la calidad ambiental, lo cual llevó al desarrollo de los convertidores catalíticos en los automóviles, que producen la oxidación del monóxido de carbono y la reducción del óxido de nitrógeno.

# Capítulo 2

## Fluidodinámica de un gas

### 2.1. Introducción

En el siglo XIX, las ecuaciones de un flujo viscoso fueron estudiadas, de manera concreta, para resolver todo tipo de problemas relacionados con la mecánica de fluidos; en específico, el estudio de los flujos alrededor de cuerpos, fue simplificado al caso de círculos a partir de los trabajos de Stokes en 1851, quien analizó el flujo alrededor de un cilindro y una esfera para el caso de un número de Reynolds muy bajo con respecto a la unidad. En su aproximación, él considera que existe un plano de simetría con respecto al diámetro del cilindro y toma en cuenta que el número de Reynolds en primera aproximación tiende a cero, con lo que desprecia las fuerzas inerciales. Para 1910, Ossen realiza una aproximación diferente pero que toma como base la hecha por Stokes. Ossen reconoce la discrepancia que se halla implícita en la aproximación de Stokes, para el caso en el que el cilindro es visto como un cuerpo sumergido en un campo lejano. Él nota que la aproximación de Stokes corresponde al caso donde la convección no existe porque la velocidad es cero, y se da cuenta que bajo esta idea, el flujo se observa como de velocidad libre; por esta razón Ossen propone linealizar las ecuaciones de Navier-Stokes utilizando como velocidad característica la velocidad libre de flujo.

Los estudios mencionados en el párrafo anterior, dieron la pauta para una serie de análisis que se centraron en el estudio del flujo para el caso en el que el número de Reynolds es alto, ya que, por lo antes dicho, se dio por bien conocido el caso



de números de Reynolds muy bajos. El desarrollo de la aviación, generó que el estudio de los flujos a altos números de Reynolds se transformaran en análisis de gran importancia. El estudio de los esfuerzos generados sobre superficies, del cambio de la presión, de la sustentación alrededor de cuerpos, generó todo un nuevo campo de investigación donde la turbulencia se convirtió en el eje central de los análisis. Si bien estos trabajos resultan importantes, también es cierto que existen otras áreas de análisis que también tienen relevancia tecnológica, pero de las que existen pocos estudios; tal es el caso de la combustión catalítica donde la eficiencia del proceso está directamente relacionada con los casos donde el número de Reynolds es bajo o del orden de la unidad, que es precisamente, lo que se estudia en esta tesis.

El primer intento por resolver las ecuaciones que describen el movimiento de un fluido que cruza a través de un arreglo fue realizado por Kovasznay [1]. Él presentó una solución exacta simple para el caso bidimensional de las ecuaciones de Navier-Stokes, la cual consistía en una descripción del flujo de agua debajo de un fluido que incidía normalmente sobre un arreglo de barras igualmente separadas. Este mismo problema, pero utilizando cilindros circulares, se estudia, inicialmente, con el trabajo de Tamada y Fujikawa [2] quienes retomarán el sistema de ecuaciones utilizado por Ossen, dando una solución a números de Reynolds pequeños en comparación a la unidad. El trabajo de ellos fue continuado por Miyagi [3] quien realizó una simplificación realizando la suposición de flujo incompresible. Hasimoto [8] consideró, además, a la ecuación de Stokes y soluciones periódicas descritas a través de series de Fourier, que dieron resultado para arreglos cuadrados en el caso de cilindros circulares. Happel y Kuwabara [4] - [5], emplearon modelos de región cercana para hacer predicciones del flujo viscoso relativo a arreglos de cilindros. Estos resultados dan pie al desarrollo de una base de solución que funciona para dos cilindros concéntricos y que, a su vez, sirve para representar un modelo de frontera no uniforme. Estas soluciones son válidas para casos donde el número de Reynolds es pequeño comparado con la unidad y son muy útiles para describir el problema de filtración de gases vía filtros viscosos.

Los primeros trabajos analizados numéricamente se enfocaron, de manera principal, en flujos viscosos que pasaban alrededor de cilindros circulares suspendidos en medios infinitos. Thom [7] dio la fundamentación para una representación numérica,

utilizando transformación conforme de la mitad superior del plano físico exterior del cilindro, a una barra rectangular semiinfinita. El obtuvo una solución para número de Reynolds de 10 y 20 y calculó los valores del esfuerzo sobre el cilindro, que tuvieron muy buena similitud con resultados experimentales. Kawaguti estudió el flujo cerca de los números de Reynolds críticos basándose en el método de Thom y demostró la existencia de una solución permanente para este caso. Apelt dio soluciones para el caso de números de Reynolds del 40 al 44, la primera solución tuvo una muy buena correspondencia con la de Kawaguti [6] en la zona cercana a la superficie del cilindro; aunque mostró discrepancias para zonas más alejadas del mismo. Una formulación mucho más refinada, en función de las condiciones de frontera, fue lograda por Keller y Takami [10], quienes utilizaron soluciones asintóticas desarrolladas por Imai para valores de la función de corriente y de la vorticidad en regiones muy distantes del cilindro. Ellos calcularon las soluciones para números de Reynolds 2, 4, 10 y 15.

Hamielec y Raal [9] obtuvieron, también, soluciones "estacionarias" para números de Reynolds mayores a 100, posteriormente, Muzimoto resolvió el flujo alrededor de un obstáculo cilíndrico arbitrario; los resultados de estos autores, aunque contribuyeron al método numérico, no son del todo aplicables en la realidad, porque se conoce que para flujos de números de Reynolds mayores a 50, el flujo se vuelve inestable.

Una de las bases de esta investigación, es el trabajo de Gordon [17] que resuelve las ecuaciones de Continuidad y de Navier-Stokes de un flujo que cruza un arreglo de alambres, utilizando soluciones locales alrededor del cilindro del campo de la función de corriente y de la vorticidad, y acoplándolo a soluciones numéricas para las regiones más lejanas. Su estudio se centra en la idea de obtener las líneas de corriente y de vorticidad para los casos de número de Reynolds entre 20 y 100, lo cual representa una gran contribución para el caso donde la relación entre los términos difusivos y convectivos de las ecuaciones de Navier-Stokes tienen relevancia.

## 2.2. Planteamiento del problema

Se considera un gas que se mueve a una velocidad  $U_0$  que incide sobre un arreglo de alambres. Sobre la superficie de éstos la velocidad del flujo es cero por condición de no deslizamiento; mientras que en dirección perpendicular a éstos, la velocidad también es cero porque no existe transporte de gas del alambre hacia el flujo y viceversa. Además, se tiene en cuenta que existe una caída de presión entre la entrada del sistema y la salida; por lo que la presión inicial del sistema está denominada por  $p_0$  y la presión de salida es  $p_\infty$ . Por simplicidad, se considera que la densidad y la viscosidad del flujo de gas son constantes, tal como lo muestra la figura 2.1.

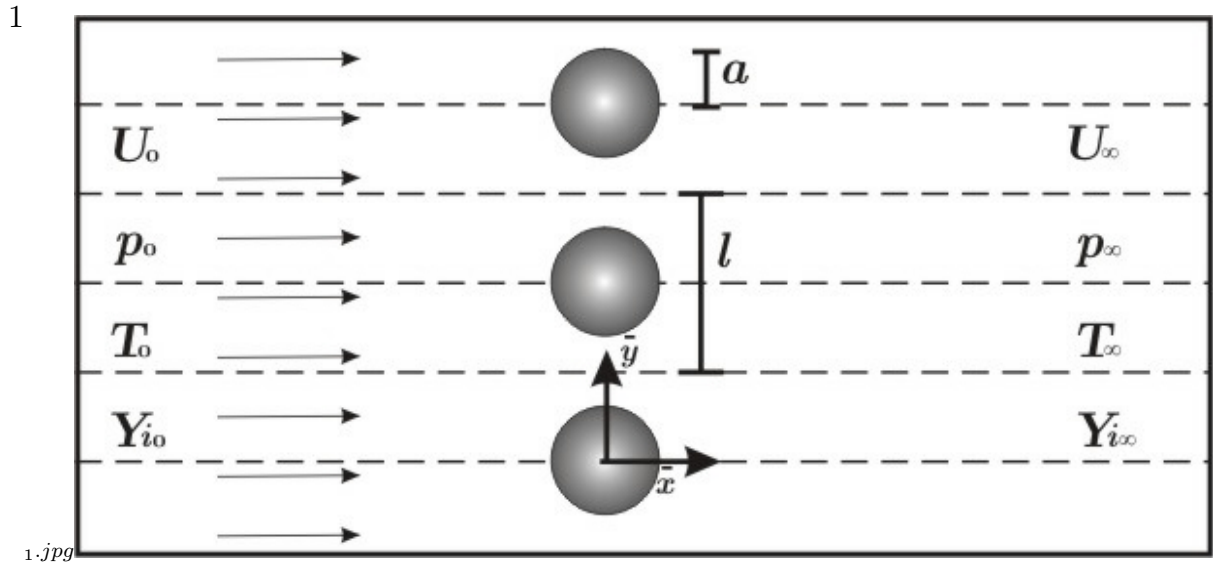


Figura 2.1: Esquema físico del flujo que cruza a través de un arreglo de alambres.

Como puede verse en esta figura, cuando  $\bar{y}$  es igual a cero, sobre todo el eje  $\bar{x}$  existe una línea de simetría; lo mismo sucede en el caso en el cual  $\bar{y}$  es igual a  $1/2$ ; este hecho implica la posibilidad de simplificar el esquema físico del problema.

Es importante recalcar las longitudes características del problema, por lo que  $a$  está definido como el radio del alambre; mientras  $l$  es la longitud que existe entre los centros de dos alambres consecutivos. De estos dos parámetros se deriva una razón de aspecto denominada  $\epsilon = l/a$  que se utilizará para el análisis a bajo número

de Peclet que se definirá más adelante. Una vez explicadas las características que para este problema presenta la dinámica del flujo de gas a través de los alambres, es posible invocar a las ecuaciones que describen este proceso y hacer una descripción eficaz del comportamiento del gas sobre el sistema, teniendo en cuenta los efectos de la caída de la presión y la disminución de la velocidad del flujo cuando cruza el arreglo, de tal manera que se favorezcan los procesos de transferencia de calor y de transporte de masa, todo esto con el fin de obtener la mayor eficiencia del sistema.

### 2.3. Leyes básicas de conservación de la dinámica de un flujo de gas

Las leyes que permiten explicar la conservación de masa, energía y momento están descritas en un sistema lagrangeano, pero es necesario describir a éstas a través de un sistema euleriano, que centra su idea en la conservación de los flujos a través de un volumen de control, la transformación que nos lleva a este resultado está descrita a través del teorema de transporte de Reynolds y se encuentra referenciada comunmente en la bibliografía referente a la mecánica de fluidos.

#### 2.3.1. Ecuación de conservación de masa

La ecuación de continuidad se deriva de la ecuación de conservación de masa, también conocida como la primera ley de Newton. Descrita en dos dimensiones y para un sistema estacionario, la ecuación de continuidad es:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{y}} = 0. \quad (2.1)$$

donde  $\bar{u}$  y  $\bar{v}$  representan las velocidades en dirección longitudinal y transversal de manera dimensional y  $\rho_g$  representa la densidad del gas del problema ya descrito en el planteamiento.

Para este problema, en particular, se considera que la densidad del gas es constante, por lo que el tercer y cuarto término de la ecuación anterior son cero.

Con esto la ecuación de continuidad queda reducida a dos términos que no son distintos de cero, de ella es posible derivar la función de corriente que fue desarrollada

por el matemático francés J. L. Lagrange en 1755, y que la retomaré más adelante.

### 2.3.2. Ecuaciones de balance de cantidad de movimiento

La ecuación de balance de cantidad de movimiento se deriva de la segunda ley de Newton, lo que nos lleva a describir al flujo, a través de la conservación de la cantidad de movimiento que actúa sobre el volumen de control dentro del sistema euleriano. La derivada material del momento queda descrita a través de las velocidades longitudinales y transversales del flujo y el cambio de la presión dentro del sistema.

Se muestra a continuación la ecuación de conservación de momento de manera bidimensional, en el caso no estacionario, donde  $\bar{p}$  es la presión en el sistema,  $\mu_g$  es la viscosidad del gas, los términos de las derivadas de primer orden son conocidos como los términos convectivos; mientras que los que involucran a la segunda derivada son llamados difusivos.

Reescribiendo la ecuación para el caso en el cual el flujo es estacionario las derivadas temporales de las velocidades longitudinales y transversales  $\bar{u}$  y  $\bar{v}$  son cero como puede verse a continuación:

$$\bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{x}} + \bar{v} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{y}} = -\frac{1}{\rho_g} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{x}} + \mu_g \left[ \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \bar{y}^2} \right], \quad (2.2)$$

$$\bar{u} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{x}} + \bar{v} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{y}} = -\frac{1}{\rho_g} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{y}} + \mu_g \left[ \frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial \bar{y}^2} \right]. \quad (2.3)$$

Las ecuaciones de cantidad de movimiento son una aplicación de la segunda ley de Newton. Cada una de ellas establece que la fuerza de inercia (debida a la aceleración del fluido) es igual a la fuerza neta externa que actúa sobre el fluido. Los primeros términos constituyen la aceleración convectiva y son términos no lineales (convección forzada). Los dos primeros términos del lado derecho de la igualdad son las fuerzas superficiales, motriz y viscosa, respectivamente.

Para cerrar el problema, es necesario establecer las condiciones de frontera del sistema, primero, aguas arriba del sistema, donde

$$\bar{x} \rightarrow -\infty : \bar{u} - U_0 = \bar{v} = \bar{p} = 0, \quad (2.4)$$

por otro lado, las condiciones de frontera en infinito son:

$$\bar{x} \rightarrow \infty : \bar{u} - U_0 = \bar{v} = 0.$$

Sobre el eje de simetría, las condiciones de frontera en dirección trasversal son las que se muestran a continuación:

$$\bar{y} = \pm \frac{l}{2} \rightarrow \bar{v} = \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} = 0. \quad (2.5)$$

## 2.4. Adimensionalización de las ecuaciones y condiciones de frontera

El sistema de ecuaciones descrito en las secciones anteriores se encuentra en forma dimensional, lo que correspondería a un problema concreto; sin embargo, es necesario hacer la descripción universal del problema, por lo que, se propone un sistema de cambio de variables que adimensionalice las ecuaciones para resolver a éste en cualquier condición, solamente en función del número de Reynolds. Las escalas de longitud las adimensionalizamos con la longitud entre cilindros  $l$ , las velocidades con la velocidad libre de flujo,  $U_0$  y la diferencia de presión, en relación a la presión aguas arriba, con la presión dinámica  $\rho_g U_0$ .

Al sistema de ecuaciones le realizamos el siguiente cambio de variables para obtener el nuevo sistema físico adimensional:

$$\begin{aligned} x &= \frac{\bar{x}}{l}, y = \frac{\bar{y}}{l} \\ u &= \frac{\bar{u}}{U_0}, v = \frac{\bar{v}}{U_0}, p = \frac{\bar{p} - p_0}{\rho_g U_0} \end{aligned}$$

La ecuación de conservación de masa queda descrita como se muestra a continuación:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (2.6)$$

la ecuación de conservación de cantidad de movimiento, en ambas direcciones es:

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\text{Re}} \left[ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right], \quad (2.7)$$

$$u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{\text{Re}} \left[ \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right]. \quad (2.8)$$

Donde el número de Reynolds se define de la siguiente forma

$$\text{Re} = \frac{\rho_g U_0 l}{\mu_g}.$$

Para poder resolver el problema presentado anteriormente, es necesario plantear condiciones de frontera que satisfagan la física del sistema. En los ejes de simetría las condiciones son la siguientes:

$$y = \pm \frac{1}{2} \rightarrow v = \frac{\partial u}{\partial y} = 0. \quad (2.9)$$

Lo que implica que, por simetría, no existe transferencia de masa sobre el eje de simetría, esto es, que el flujo de gas siempre es paralelo al eje.

Sobre la superficie del cilindro la condición de deslizamiento implica que las velocidades, tanto perpendiculares como tangenciales, deben ser cero, además que no existe transporte de masa hacia adentro o fuera del cilindro; por lo que la condición de frontera queda descrita de la siguiente manera:

$$u = v = 0|_{r=\epsilon}. \quad (2.10)$$

Las condiciones de frontera aguas arriba y abajo en el sistema son:

$$\begin{aligned} x \rightarrow -\infty : u - 1 = v = p = 0, \\ x \rightarrow \infty : u - U_0 = v = 0. \end{aligned} \quad (2.11)$$

## 2.5. Formulación de la ecuaciones en términos de la vorticidad y de la función de corriente

De lo desarrollado en la sección anterior, se han obtenido las ecuaciones que rigen al movimiento del fluido, éstas están descritas en términos de la velocidad longitudinal  $v$ , la velocidad transversal  $u$  y presión  $p$  del fluido. además de tres ecuaciones, que son la ecuación de conservación de masa y las ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento en ambas direcciones [2.7-2.8], con esta información el sistema se encuentra cerrado, esto implica que la solución a sistema es única, aunque con el fin de obtener un sistema integrador numérico en la literatura se recomienda establecer un sistema de ecuaciones dependiente de la función de corriente y la vorticidad en esta sección se presenta la deducción de sistema en función de estas dos nuevas variables.

De la deducción mostrada en el apéndice A, la descripción vorticidad y función de corriente queda reducida a dos ecuaciones que se muestran a continuación:

$$\Omega = - \left[ \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right]. \quad (2.12)$$

Esta ecuación de vorticidad establece que la rapidez de cambio de la vorticidad de un elemento de fluido depende del gradiente de velocidad y de su difusión por efectos viscosos.

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \Omega}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \Omega}{\partial y} = \frac{1}{Re} \left[ \frac{\partial^2 \Omega}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Omega}{\partial x^2} \right], \quad (2.13)$$

con sus correspondientes condiciones de frontera en la entrada y en la salida del sistema:

$$\begin{aligned} x \rightarrow -\infty : \psi - y = \Omega = 0, \\ x \rightarrow \infty : \frac{\partial \psi}{\partial y} = \frac{\partial \Omega}{\partial x} = 0. \end{aligned} \quad (2.14)$$

En los ejes de simetría las condiciones son la siguientes:

$$y = \pm \frac{1}{2} \rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial y} = \Omega = 0. \quad (2.15)$$



## 2.6. Esquema numérico

### 2.6.1. Solución numérica de sistemas elípticos

Las ecuaciones que rigen al sistema son diferenciales parciales de segundo orden, por lo que es necesario conocer las técnicas numéricas básicas para resolver estos problemas.

El método más comunmente utilizado por los investigadores en décadas anteriores, es el de Gauss-Seidel, que consiste en proponer una solución e iterar sobre ella hasta que las funciones convergan, la ventaja de este método, es que requiere de poca carga en memoria, pues todo se carga en procesador.

Un método derivado de Gauss-Seidel, son los sistemas de descomposición LU (Lower-Upper Band), éste consiste en construir una matriz de bandas a través de la vectorización de las ecuaciones diferenciales en el espacio numérico, la cual es resuelta al invertir el sistema completo y obtener una solución única.

La ventaja de estos sistemas es que toman a las ecuaciones completas y la resuelven en un solo paso, por lo que el número de iteraciones cuando el sistema es acoplado disminuye. Razón por la que en un principio, se trabajó con este método para tratar de solucionar el problema planteado.

Sin embargo, se debe considerar que se tiene que construir una matriz del tamaño  $(m_i * n_j)^2$  la cantidad de memoria utilizada para resolver el sistema es excesiva, por lo que se necesita de un equipo de cómputo con características especiales para obtener una buena resolución del problema.

Las ecuaciones de Navier-Stokes, de la energía y de las concentraciones de hidrógeno y de oxígeno, escritas en un sistema vorticidad-función de corriente, se resolvieron a través de este método, pero considerando el costo computacional que implicaba, se buscó un método alternativo para solucionar el sistema de ecuaciones diferenciales.

### 2.6.2. Método de solución de ecuaciones diferenciales elípticas por medio de un sistema de tridiagonales acopladas

Dentro de los métodos numéricos utilizados para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias, uno de los más socorridos para ecuaciones de segundo orden es el de tridiagonales.

Existe una forma de utilizar este sistema para resolver ecuaciones diferenciales parciales elípticas, que fue propuesto en el año de 1976 para resolver ecuaciones de Poisson, este método no goza de mucha popularidad dentro de la dinámica de fluidos computacionales, afirmación que puede sostenerse con base en que, durante el análisis bibliográfico que se realizó, no se encontraron trabajos que utilizaran esta clase de método. No por ello

### 2.6.3. Generación de Mallas Computacionales

La primer complicación a la que se enfrenta el investigador, al intentar resolver el problema del flujo que pasa a través de un arreglo de alambres, es el de la geometría, que es compleja. Esto porque se encuentra sumergida en un sistema rectangular impuesto por las condiciones de frontera dentro de un círculo delimitado por un alambre.

Como se observa, por la geometría del problema, el realizar una simple transformación de coordenadas sobre el cilindro, acoplándole un sistema de coordenadas cartesianas aguas arriba y aguas abajo (que fue la primera opción para resolver el problema) no resulta suficiente. Esto porque el sistema de ecuaciones que rigen al flujo es elíptico, lo que provoca que se den cambios abruptos en la continuidad de la malla, que generan errores numéricos, que se verán reflejados directamente en el flujo, sin importar el método de solución que se utilice.

Debido a lo anterior, se pensó en la utilización de mallas computacionales para tener un escenario más cercano al real, donde las variables físicas en el espacio tengan cambios graduales, no tan bruscos. Esto porque, la idea principal, en los muchos intentos por generar una malla, es asegurarse de que el dominio computacional corresponda al dominio físico de la condición de frontera, a este hecho se le denomina en la literatura adaptación geométrica [18] que, como es obvio, se ve reflejada en

una mayor cantidad de nodos utilizados para generar ésta, de tal manera que se cumpla con la condición mencionada en líneas anteriores.

Ahora bien, las mallas computacionales deben cumplir con ciertos lineamientos específicos, para que el problema en el que se va a utilizar sea resuelto de manera correcta, sin fuentes de errores numéricos. Estos son:

1. Minimizar errores numéricos. La resolución y la orientación de la malla con respecto a la dirección del flujo, así como el no considerar los errores de truncación, puede llegar a convertirse en fuente de errores numéricos.

2. Proporcionar estabilidad numérica. En ciertos métodos numéricos de resolución de ecuaciones, ya sean implícitos o explícitos, su estabilidad, depende del tamaño del elemento discretizado, por lo que se debe tener cuidado al diseñar la malla.

3. Lograr un ahorro en los cálculos computacionales. Obviamente, a mayor número de nodos en la malla, son necesarios más cálculos numéricos, lo que puede ocasionar una corrida de programa lenta y que utilice demasiados recursos.

4. Disponer de un fácil manejo en las condiciones de frontera. Es común que las condiciones de frontera invoquen a derivadas normales, en consecuencia el tener líneas de malla que se ajusten a la condición de frontera física, resulta ser muy ventajoso a la hora de solucionar el problema físico.

#### **2.6.4. Métodos para la generación de mallas**

En la literatura existe una extensa cantidad de métodos para generar mallas, en esta sección se considerarán aquellos que son clásicos para resolver el flujo sobre superficies complejas y en forma de arreglos.

##### **Método algebraico**

Éste, también llamado bilineal, consiste en una transformación de coordenadas a través de funciones algebraicas. Es un tipo de transformación bidimensional que ha sido utilizada sobre todo en espacios físicos cuadrilaterales. Un método derivado de esa transformación es el de interpolación transfinita, que toma en consideración las fronteras físicas del problema para generar un espacio coordenado cartesiano.

La ventaja, que se encontró el primer método mencionado, es la rapidez en la generación de la malla. Sin embargo, como se trata de una transformación lineal, las derivadas en el sistema de ecuaciones diferenciales del flujo eran discontinuas, por lo que el método perdía precisión y estabilidad. Utilizando una interpolación transfinita, el resultado era semejante al de método bilineal, por lo que también se desechó.

### **Método de interpolación a través de los polinomios de Hermite**

La utilización de polinomios de Hermite como método de transformación de coordenadas para la generación de mallas, es bastante útil, pues provee de una rapidez de cálculo en su generación, además de que da estabilidad al sistema de resolución de ecuaciones diferenciales. Dicho método fue utilizado por Vera y Liñán para resolver el problema de catálisis sobre un arreglo de alambres.

Dentro de las desventajas que tiene, se encuentra el hecho de que las singularidades generadas por las esquinas de las condiciones de frontera, se propagan con cierta facilidad hacia dentro de la malla, cosa que puede resolverse redondeando las esquinas y adaptando las condiciones de frontera sobre esa región.

Atendiendo a esta idea, se consideró un método que fuera capaz de dar una descripción de las derivadas de manera suave, tomando en cuenta las singularidades de las esquinas.

### **Método elíptico de generación de mallas**

Este método se desarrolló en los años 70's, Thompson fue el precursor de éste. Sus primeros usos fueron para calcular los esfuerzos del flujo sobre superficies complejas, sumergidas en medios infinitos. La idea se centra en utilizar un sistema de ecuaciones elípticas para convertirlo en un sistema coordenado cartesiano normal y ortogonal, Thompson usó en un principio la ecuación de Laplace para realizar la transformación, en trabajos más avanzados aplicó la ecuación de Poisson, donde propuso unas funciones de peso, que fueran capaces de distribuir la malla dentro del sistema, además de proveer de condiciones de frontera ortogonales en regiones donde fuera necesario.

Dentro de las ventajas que proporciona este método es que, ya que una ecuación elíptica es de clase C2, esto es, que su primera y segunda derivada siempre existen dentro del campo de la función, implicaría que las derivadas de las ecuaciones diferenciales que rigen al flujo también existen invariablemente, además que las ecuaciones de Navier-Stokes son también elípticas y de clase C2. Por otra parte, las discontinuidades en la condición de frontera generadas por las esquinas de la malla, no generan mayor problema, ya que las discontinuidades en las condiciones de frontera de un sistema de ecuaciones elíptico y de clase C2, son suavizadas hacia dentro del espacio.

### 2.6.5. Ecuaciones para la generación de mallas elípticas

Dado que la geometría del problema es compleja, resulta necesario utilizar un método para generar un espacio computacional. Thompson y Eiseman [44]-[57] proponen un método de sistemas de coordenadas curvilíneas, que consiste en convertir un sistema de coordenadas  $(x, y)$  con un forma geométrica arbitraria a un espacio cartesiano ortonormal  $(\xi, \eta)$ .

La propuesta es un sistema generador de coordenadas a través de la ecuación de Poisson:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} &= P(\xi, \eta) \\ \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} &= Q(\xi, \eta)\end{aligned}$$

Si consideramos que el sistema de ecuaciones debe de ser resuelto en un espacio computacional, entoces los términos de las variables dependientes e independientes debe ser intercambiados, esto es posible utilizando la transformación jacobiana del sistema, por lo que obtenemos un sistema de ecuaciones elípticas no lineales en el plano de la transformación:

$$\alpha \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} - 2\beta \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} = -J^2 \left( P(\xi, \eta) \frac{\partial x}{\partial \xi} + Q(\xi, \eta) \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \quad (2.16)$$

$$\alpha \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} - 2\beta \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} = -J^2 \left( P(\xi, \eta) \frac{\partial y}{\partial \xi} + Q(\xi, \eta) \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \quad (2.17)$$

donde  $J$  es el jacobiano de la transformación y  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$  son los coeficientes de la transformación escritos a continuación.

$$\alpha = \left( \frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + \left( \frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 \quad (2.18)$$

$$\beta = \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \xi} + \frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \quad (2.19)$$

$$\gamma = \left( \frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left( \frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 \quad (2.20)$$

Los parámetros  $P(\xi, \eta)$  y  $Q(\xi, \eta)$  definen la distribución de la densidad de la malla, dependen de la geometría del problema y del tipo de transformación, para este caso los parametros tomaron la siguiente forma:

$$P(\xi, \eta) = \sum -a_i \text{sign}(\xi - \xi_i) \exp(-c_i |\xi - \xi_i|) \quad (2.21)$$

$$Q(\xi, \eta) = \sum -b_i \text{sign}(\eta - \eta_i) \exp(-d_i |\eta - \eta_i|) \quad (2.22)$$

La malla computacional obtenida para estos valores de  $P(\xi, \eta)$  y  $Q(\xi, \eta)$  es la siguiente:

$$\frac{\partial x}{\partial \xi} = y - 0.5 = 0$$



$$\left[ \frac{\partial x}{\partial \xi} = y = 0 \right], [x - a \sin \phi = y - a \cos \phi = 0] \text{ y } \left[ \frac{\partial x}{\partial \xi} = y = 0 \right]$$

La ventaja de esta malla es que se encuentra bien distribuida en la frontera y tiene su mayor densidad cerca del cilindro, donde los procesos físico y químico se darán.

$$x(\xi(x, y), \eta(x, y)) = x, \quad (2.23)$$

$$y(\xi(x, y), \eta(x, y)) = y.$$

Diferenciando ambas ecuaciones con respecto a  $y$ ,

$$\begin{aligned} x_\xi \xi_x + x_\eta \eta_x &= 1, & x_\xi \xi_y + x_\eta \eta_y &= 0, \\ x_\xi \xi_x + x_\eta \eta_x &= 0, & y_\xi \xi_y + y_\eta \eta_y &= 1. \end{aligned} \quad (2.24)$$

La matriz resultante del sistema de ecuaciones presentado en estas ecuaciones es

$$\begin{bmatrix} x_\xi & x_\eta \\ y_\xi & y_\eta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi_x & \xi_y \\ \eta_x & \eta_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.25)$$

De tal manera que el jacobiano de la matriz  $J$ , para la transformación del plano  $x$ - $y$  al plano  $\xi$  -  $\eta$  es

$$J = \begin{bmatrix} x_\xi & x_\eta \\ y_\xi & y_\eta \end{bmatrix} \quad (2.26)$$

La ecuación 16.8 implica que  $J$  es una transformación invertible, por lo que la transformación inversa  $J^{-1}$  se encuentra dada por

$$J^{-1} = \begin{bmatrix} \xi_x & \xi_y \\ \eta_x & \eta_y \end{bmatrix} \quad (2.27)$$

El jacobiano  $J$  de la transformación de coordenadas se encuentra dado por el determinante de la matriz que es

$$J = \det(J) = x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi \quad (2.28)$$

De tal manera que se puede también obtener el determinante inverso de la matriz. Este se obtiene de manera muy sencilla, invirtiendo el determinante del jacobiano para el caso de una matriz de  $2 \times 2$ , obteniendo la siguiente forma alternativa

$$J^{-1} = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} y_\eta & -x_\eta \\ -y_\xi & x_\xi \end{bmatrix} \quad (2.29)$$

Comparando la ecuación anterior se pueden obtener los coeficientes geométricos de la transformación.

Resumiendo, para una función  $F$ , como forma general para cualquier ecuación diferencial parcial que describa el problema, se pueden obtener las derivadas primeras y segundas en el nuevo sistema coordenado a través del siguiente sistema matricial

$$\xi_x = \frac{y_\eta}{J}, \quad \xi_y = \frac{-x_\eta}{J}, \quad \eta_x = \frac{-y_\xi}{J}, \quad \eta_y = \frac{x_\xi}{J}. \quad (2.30)$$

La expresión geométrica para las derivadas de segundo orden queda descrita por el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} \xi_{xx} &= [-J_\xi y_\eta^2 + J y_\eta y_{\xi\eta} + J_\eta y_\xi y_\eta - J y_\xi y_{\eta\eta}] / J^3, \\ \xi_{xy} &= [J_\xi x_\eta y_\eta - J y_\eta x_{\xi\eta} - J_\eta y_\xi x_\eta + J y_\xi x_{\eta\eta}] / J^3, \\ \xi_{yy} &= [-J_\xi x_\eta^2 + J x_\eta x_{\xi\eta} + J_\eta x_\xi x_\eta - J x_\xi x_{\eta\eta}] / J^3, \\ \eta_{xx} &= [-J_\eta y_\xi^2 + J y_\xi y_{\xi\eta} + J_\xi y_\xi y_\eta - J y_\eta y_{\xi\xi}] / J^3, \\ \eta_{xy} &= [J_\eta x_\xi y_\eta - J y_\xi x_{\xi\eta} - J_\xi y_\eta x_\xi + J y_\eta x_{\xi\xi}] / J^3, \\ \eta_{yy} &= [-J_\eta x_\xi^2 + J x_\xi x_{\xi\eta} + J_\xi x_\xi x_\eta - J x_\eta x_{\xi\xi}] / J^3. \end{aligned} \quad (2.31)$$

De tal manera que agrupando el sistema de ecuaciones en las variables apropiadas el nuevo sistema queda como

$$\begin{aligned} J_\xi &= x_{\xi\xi} y_\eta + x_\xi y_{\xi\eta} - x_{\xi\eta} y_\xi - x_\eta y_{\xi\xi}, \\ J_\eta &= x_{\xi\eta} y_\eta + x_\xi y_{\eta\eta} - x_{\eta\eta} y_\xi - x_\eta y_{\xi\eta}. \end{aligned} \quad (2.32)$$

### 2.6.6. Ecuaciones en el sistema $\xi$ y $\eta$

El sistema de ecuaciones completo del problema es llevado también a través de la transformación Jacobiana a continuación se muestra las ecuaciones escritas en el espacio computacional  $(\xi, \eta)$ .

Definición de vorticidad

$$-\tau \frac{\partial \psi}{\partial \xi} - \sigma \frac{\partial \psi}{\partial \eta} = \alpha \frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} + \gamma \frac{\partial^2 \psi}{\partial \eta^2} - \left( 2\beta \frac{\partial^2 \psi}{\partial \eta \partial \xi} - J^2 \Omega \right) \quad (2.33)$$



Con sus correspondientes condiciones de frontera:

$$[\psi=y], \left[ \frac{\partial \psi}{\partial \xi} = 0 \right] \text{ y } \left[ \frac{\partial \psi}{\partial \xi} = 0 \right]$$

1,0		1,1
$\frac{\partial \psi}{\partial \xi} = 0$	$\eta$	$\frac{\partial \psi}{\partial \xi} = 0$
0,0		0,1

$\xi$

$\psi = 0$

Ecuacion de Navier en el espacio  $(\xi, \eta)$

$$\left[ J \operatorname{Re} \frac{\partial \psi}{\partial \eta} - \tau \right] \frac{\partial \Omega}{\partial \xi} + \left[ -J \operatorname{Re} \frac{\partial \psi}{\partial \xi} - \sigma \right] \frac{\partial \Omega}{\partial \eta} = \alpha \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \xi^2} + \gamma \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \eta^2} - 2\beta \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \eta \partial \xi} \quad (2.34)$$

Donde

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{1}{J} \left( \frac{\partial y}{\partial \xi} D_x - \frac{\partial x}{\partial \xi} D_y \right) \\ \tau &= \frac{1}{J} \left( \frac{\partial y}{\partial \eta} D_x - \frac{\partial x}{\partial \eta} D_y \right) \\ D_x &= \alpha \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} - 2\beta \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} \\ D_y &= \alpha \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} - 2\beta \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} \end{aligned}$$

Cuando se resuelven problemas del flujo de un fluido y de la transferencia de calor por estos métodos, es necesario la generación de un sistema coordenado que

se adapte al dominio físico complejo. El sistema coordenado  $x$  y  $y$ , es el resultado de la transformación del dominio, que es el sistema  $\xi$  y  $\eta$ , por lo que, las ecuaciones diferenciales que gobiernan al sistema, deben ser transformadas en su expresión equivalente en el espacio  $\xi$  y  $\eta$ . En esta sección se mostrará como se construyen la primera y la segunda derivada como expresiones generales para poder escribir el nuevo sistema de ecuaciones diferenciales parciales que describen el problema.

La expresión para poder describir a  $x$  y a  $y$  en función de  $\xi$  y  $\eta$  considerando su transformación inversa queda descrita por la siguiente ecuación:

### 2.6.7. Método numérico de generación de malla

Para resolver las ecuaciones del sistema  $x$  y  $y$  de generación de malla, es necesario buscar un método iterativo. Éste es implícito, y de él se utiliza la parte difusiva para iterar en las ecuaciones completas. Lo primero que se hace es generar una malla usando sólo la ecuación de Laplace, y se le deja converger hasta un factor de  $1 \times 10^{-8}$  tanto en  $x$  como en  $y$ . Después se recalculan los factores  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\sigma$  y  $\tau$  para establecer una distribución de malla consistente pero no ortogonal. Para lograr la ortogonalidad del sistema, se lee el campo coordenado dentro de éste, sin considerar las condiciones de frontera preestablecidas, por lo que se imponen nuevas condiciones de frontera, que den la forma a ésta, pero imponiendo además una condición de ortogonalidad. Por otra parte, para poder establecer la correcta distribución de los nodos dentro de la malla, se utilizan las funciones de peso  $P$  y  $Q$ , tal como se muestran a continuación:

$$P(\xi, \eta) = - \sum_{i=1}^N a_i \text{sign}(\xi - \xi_i) \exp(-c_i |\xi - \xi_i|) \quad (2.35)$$

$$Q(\xi, \eta) = - \sum_{i=1}^M b_i \text{sign}(\eta - \eta_i) \exp(-d_i |\eta - \eta_i|), \quad (2.36)$$

La formulación del espacio computacional donde se resuelve el sistema de ecuaciones se encuentra descrito, donde se muestra al sistema vorticidad-función de corriente, transformado en el espacio computacional 2.33 y 2.34. Las condiciones de frontera son transformadas también en el nuevo espacio, mientras que el sistema

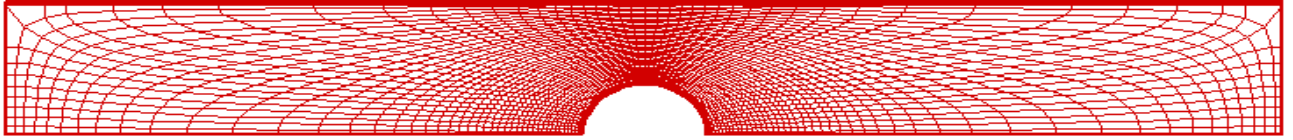


Figura 2.2: Malla utilizada para los calculos numéricos

utilizado para la generación de mallas, al ser elíptico, es el mismo para resolver la dinámica del flujo, iniciando primero con la condición de un flujo irrotacional, para luego establecer el campo de vorticidad adecuado. El sistema de ecuaciones se itera hasta el punto donde la convergencia de la diferencia del campo de la función de corriente sea del orden de  $1 \times 10^{-8}$ .

Para números de Reynolds pequeños, se utilizó la formulación de Vera y Liñán para establecer la estela que se forma aguas abajo del sistema, lo que permitió imponer la condición de frontera más adecuada para la salida del sistema. La obtención de la formulación de la estela para este caso se muestra en el apéndice C.

## 2.7. Resultados de la fluidodinámica

En esta sección se muestran los campos de la función de corriente y de la vorticidad obtenidos mediante el método numérico. Los gráficos muestran las curvas de nivel y la escala de magnitud se encuentra arriba de cada uno de ellos.

Los resultados que se presentan a continuación, muestran el campo de la función de corriente para los casos donde el número de Reynolds es menor que 1, las líneas de corriente se muestran extremadamente simétricas (ver la figura 2.3), dado que es un flujo casi de arrastre y las líneas de corriente se recuperan con mucha facilidad, en este caso el término difusivo domina sobre el convectivo.

Las siguientes figuras muestran el caso de mayor interés, pues los términos difusivos y convectivos de la ecuación de vorticidad son equiparables. Además, en el estudio de la formulación del proceso de combustión catalítica, resulta ser el caso más eficiente y más real, con fines de aplicación en el desarrollo de la ingeniería. Los resultados obtenidos en la figura 2.4, muestran ya un flujo poco parecido al flujo irrotacional como los de las anteriores, pero aun así las líneas de corriente se recu-

peran detrás del cilindro, dándole una forma bastante simétrica. Para números de Reynolds mucho mayores a la unidad 2.5, las líneas de corriente cambian drásticamente, comienza a formarse una zona detrás del cilindro, donde la línea de corriente del orden de 0.1 ya no se recupera con la facilidad con que lo hacía en los casos anteriores. Para este caso la difusión gana, mostrando que la inercia del gas se propaga detrás del cilindro. Esto para el caso de transferencia de calor, como para el caso de la combustión catalítica, es poco eficiente; pero, por otro lado, estos números de Reynolds son los más comunes dentro del desarrollo de intercambiadores de calor, así como de combustores, pues representan longitudes del orden de milímetros y centímetros en algunos casos donde se encuentran involucrados flujos de gases con transferencia de calor y transporte de masa.

## 2.8. Resultados de la vorticidad

En este apartado se muestra el campo de vorticidad acoplado al resultado obtenido con el campo de la función de corriente. Para el caso donde el número de Reynolds es pequeño en comparación con la unidad, se muestra que el esfuerzo de deformación del gas se da en la región superior del cilindro y de manera bastante simétrica, esto es algo que ya se había observado en el campo de la función de corriente. Este flujo se recupera con mucha facilidad detrás del cilindro, por lo que las líneas de vorticidad regresan casi simétricamente al hilo, como puede verse en la figura 2.6.

Los resultados muestran que para números de Reynolds de orden unidad, el campo de vorticidad pierde simetría y se empieza a generar una pequeña estela por detrás del cilindro. Los esfuerzos de deformación que muestran las líneas de vorticidad son mayores, como se nota en sus escalas (ver figuras 2.6 y 2.7). Este caso, como se había mencionado anteriormente, resulta importante porque los términos convectivos y difusivos de la ecuación son equiparables, además de útiles en términos de la eficiencia en el diseño del combustor catalítico.

En la siguiente gráfica, 2.8 , los números de Reynolds aumentan un orden de magnitud, los campos de vorticidad se ven afectados por la inercia del gas formando

una estela detrás del cilindro, hasta el punto de tocar la frontera de aguas abajo del sistema, donde se ven representadas las líneas que tienden a infinito.

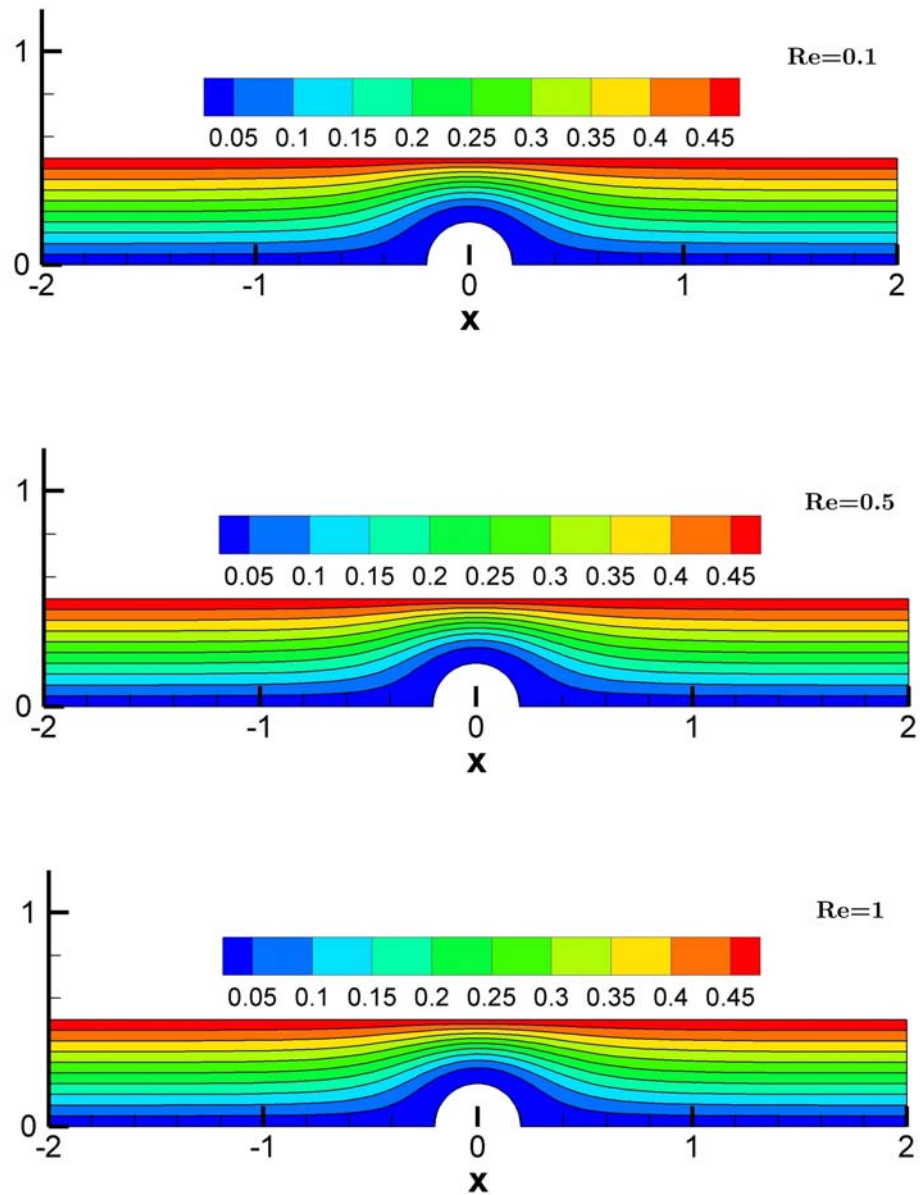


Figura 2.3: Se muestra el campo de la función de corriente para los casos donde los números de Reynolds son:  $Re = 0.1$ ,  $Re = 0.5$  y  $Re = 1$ , con un  $\epsilon = 0.2$ .

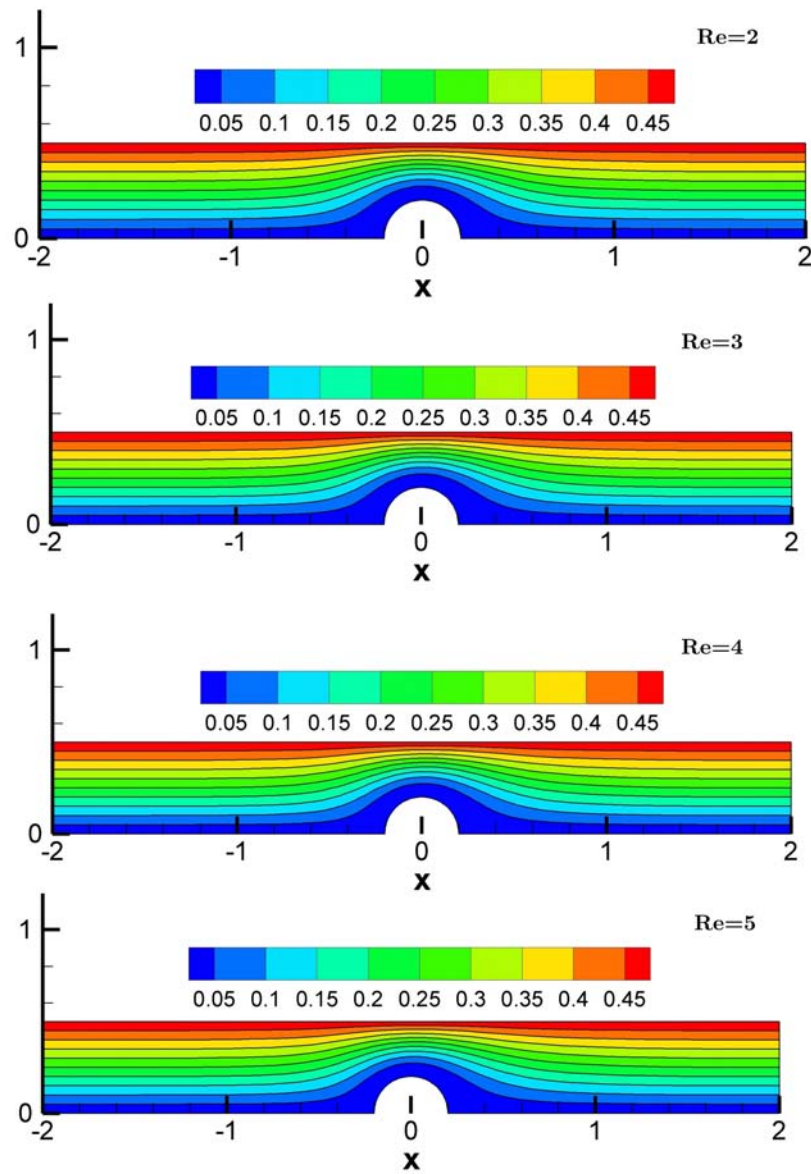


Figura 2.4: Se muestra el campo de la función de corriente para los casos donde los números de Reynolds son:  $Re = 2$ ,  $Re = 3$ ,  $Re = 4$  y  $Re = 4$ , con un  $\epsilon = 0.2$ .

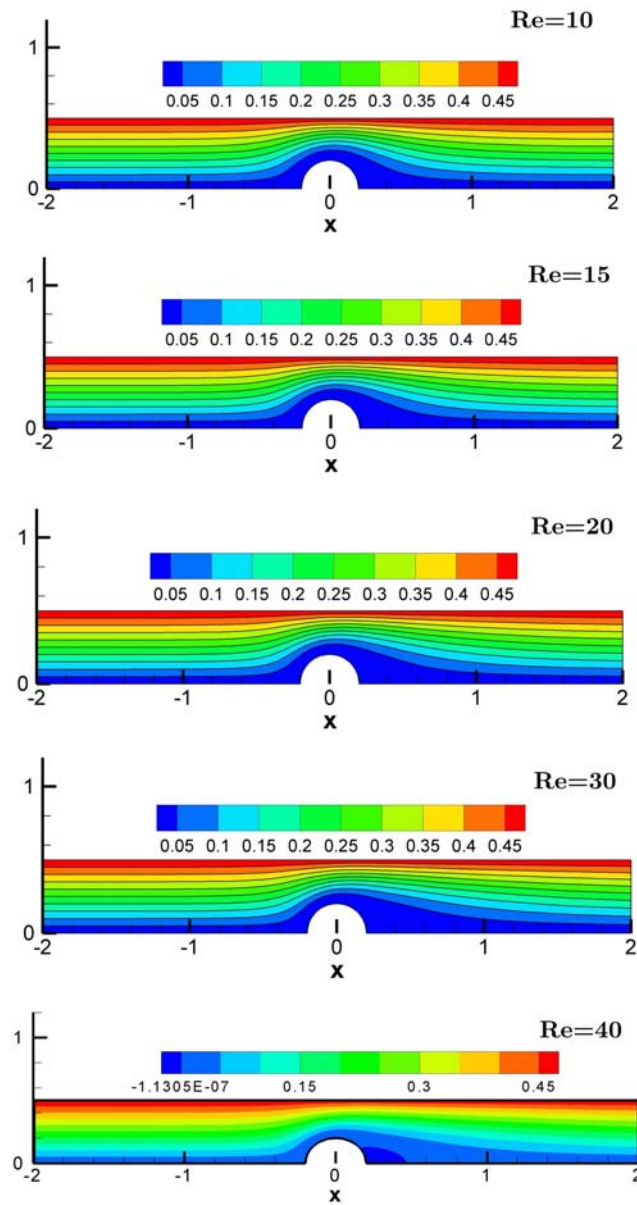


Figura 2.5: Se muestra el campo de la función de corriente para los casos donde los números de Reynolds son:  $Re = 10$ ,  $Re = 15$ ,  $Re = 20$ ,  $Re = 30$  y  $Re = 40$ , con un  $\epsilon = 0.2$ .



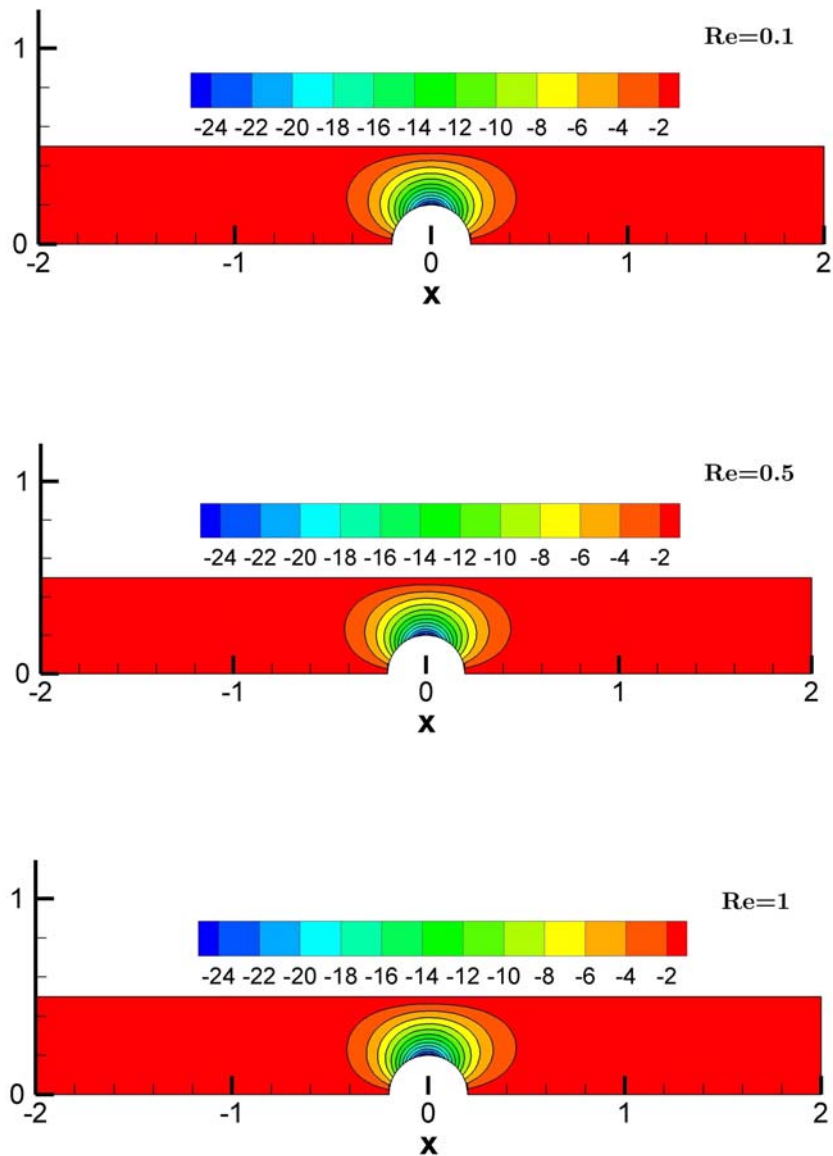


Figura 2.6: Se muestra el campo de la vorticidad para los casos donde los números de Reynolds son:  $Re = 0.1$ ,  $Re = 0.5$  y  $Re = 1$ , con un  $\epsilon = 0.2$ .

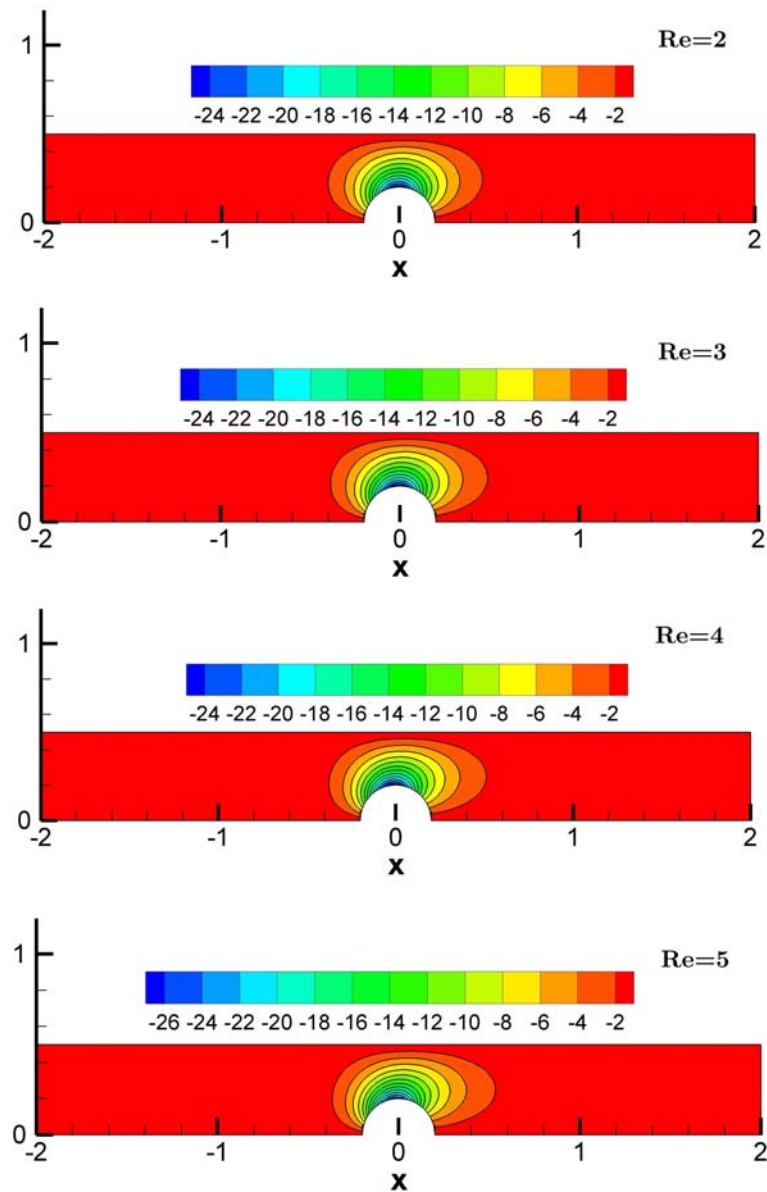


Figura 2.7: Se muestra el campo de la vorticidad para los casos donde los números de Reynolds son:  $Re = 2$ ,  $Re = 3$ ,  $Re = 4$  y  $Re = 5$ , con un  $\epsilon = 0.2$ .

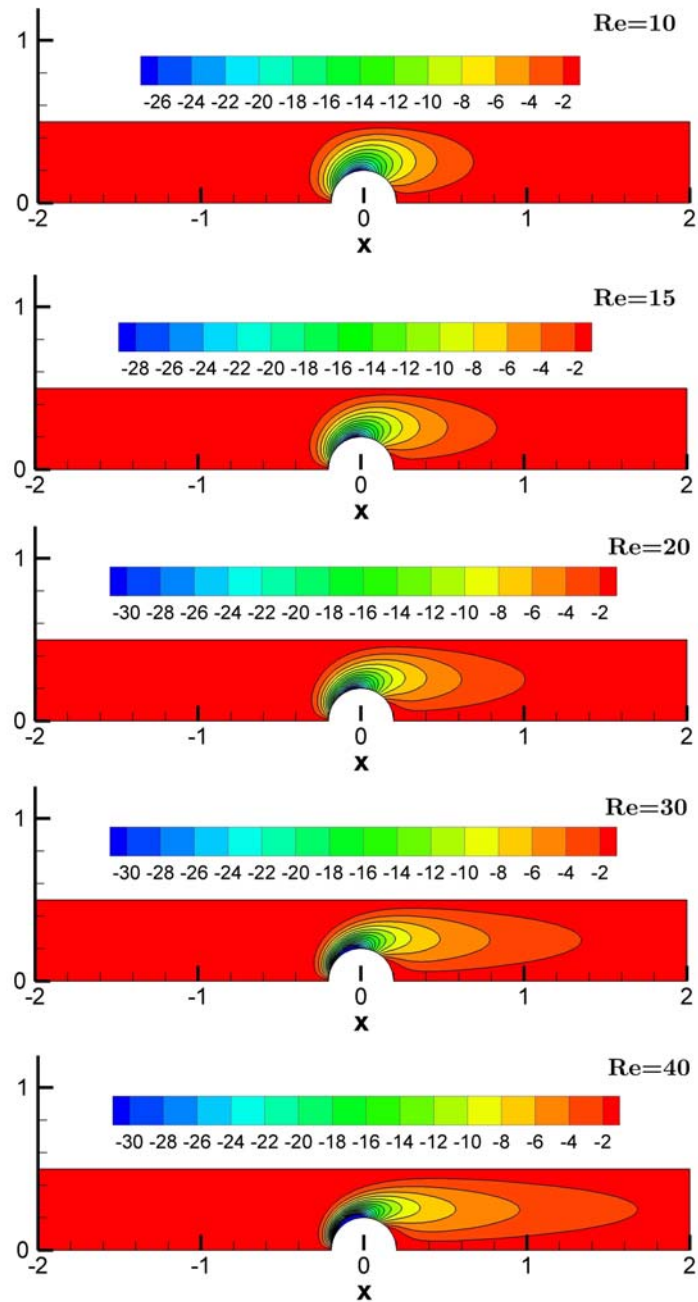


Figura 2.8: Se muestra el campo de la vorticidad para los casos donde los números de Reynolds son:  $Re = 10$ ,  $Re = 15$ ,  $Re = 20$ ,  $Re = 30$  y  $Re = 40$ , con un  $\epsilon = 0.2$ .

# Capítulo 3

## Análisis térmico

### 3.1. Introducción

El problema de la convección forzada sobre un tubo circular, a temperatura uniforme y suspendido en un medio fluido infinito, ha sido estudiado experimental y analíticamente durante las últimas décadas. En trabajos más recientes se han aplicado nuevas técnicas aproximadas, Cole y Roshko [11], utilizaron la aproximación de Oseen acoplada a la ecuación de la energía, fueron los primeros en calcular la transferencia de calor en un cilindro circular, el campo de temperaturas se obtuvo en términos de una serie infinita de funciones de Bessel y trigonométricas. Illingworth [12] obtuvo los siguientes términos de la expansión utilizando una técnica similar. Hieber y Gebhart [13] trataron el problema de la transferencia de calor en un tubo por medio de expansiones asintóticas y teoría de acoplamiento, modificando el número de Prandtl y considerando que el número de Reynolds tiende a cero. Dennis et al. [14] evaluaron distintos números de Prandtl, desarrollando cálculos con las ecuaciones de Navier-Stokes y energía completas, la precisión de estos cálculos se correlaciona muy bien con los encontrados experimentalmente por Collins y Williams [15]. Más recientemente, Kurdyumov y Fernández [16], encontraron la transferencia de calor en un tubo a bajo número de Reynolds, en un medio infinito.

Todos estos estudios se centraron en el análisis de un alambre sumergido en un medio infinito, el problema de un arreglo de alambres ha sido abordado con menor frecuencia, pero los trabajos realizados han encontrado resultados satisfactorios tal

como el de Gordon [17] que resuelve el campo fluido aplicando las soluciones de la función de corriente y de la vorticidad de manera local; por su parte Wung y Chen [18][19] obtuvieron, a través de transformaciones jacobianas, la solución del campo fluido y del campo de temperaturas, proponiendo que las condiciones de frontera tienen una solución analítica y acoplándolo a un arreglo numérico que ellos denominaron "soluciones analíticas finitas". Wang [20] encontró, por este mismo método, una serie de soluciones para un banco de tubos, obteniendo también el desarrollo del número de Nusselt sobre los tubos, además de los esfuerzos viscosos sobre el arreglo.

### 3.2. Planteamiento del problema térmico

Una vez estudiada la dinámica del gas, es posible hacer la extensión al modelo con transferencia de calor. Para este caso, las condiciones de simetría establecidas anteriormente en la dinámica del flujo se mantienen; además que la densidad y la viscosidad en el sistema se mantienen constantes. Podemos establecer que inicialmente el flujo se encuentra a una temperatura  $T_\infty$  menor que la temperatura a la que se encuentra sometido el hilo  $T_w$ . De esta manera, atendiendo a la transferencia de calor, el hilo cederá calor al flujo calentándolo. La cantidad de calor que se ceda al sistema dependerá de la velocidad, del calor específico, de la densidad y de la viscosidad del flujo de gas, tal como se verá en las secciones siguientes.

### 3.3. Ecuación de la energía

La ecuación de la energía describe la transferencia de calor que existe en un sistema, en este caso de los hilos catalíticos hacia el gas reactante, es importante hacer hincapié en la comprensión física de los términos de la ecuación, si se encuentran del lado derecho describen la transferencia de calor por convección, ésta se debe al transporte de calor vía el movimiento de flujo; como se había mencionado en la introducción de este capítulo, los términos del lado izquierdo de la ecuación dan información de la transferencia de calor, que obedece a la conducción de calor que existe en el gas, la ecuación de la energía en su forma dimensional es:

$$\rho_g C_p \left( \bar{u} \frac{\partial T_w}{\partial \bar{x}} + \bar{v} \frac{\partial T_w}{\partial \bar{y}} \right) = k_g \left[ \frac{\partial^2 T_w}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 T_w}{\partial \bar{y}^2} \right] + F \quad (3.1)$$

donde  $C_p$  es la capacidad calorífica del gas,  $k_g$  es la conductividad térmica del gas y  $F$  representa un término fuente, que para el caso de estudio que nos interesa es cero.

La ecuación es una consecuencia de la primera ley de la termodinámica. El lado izquierdo representa la rapidez de cambio de energía interna (transferencia convectiva) y el lado derecho representa la rapidez a la cual se adiciona calor por conducción. La disipación viscosa es importante para flujos muy viscosos moviéndose a altas velocidades.

Esta ecuación depende de la dinámica del flujo de gas resuelto en el capítulo anterior. Las condiciones de frontera para este problema son:

$$\begin{aligned} \bar{x} &\rightarrow -\infty : T = T_0 \\ \bar{x} &\rightarrow \infty : T = T_\infty, \end{aligned} \quad (3.2)$$

sobre el cilindro:

$$T = T_w|_{r=\epsilon}, \quad (3.3)$$

y sobre los ejes de simetría:

$$\bar{y} = \pm \frac{1}{2} \quad \frac{\partial T}{\partial \bar{y}} = 0.$$

### 3.4. Adimensionalización de la ecuación y condiciones de frontera

El anterior sistema de ecuaciones se halla descrito en forma dimensional, lo que significa que corresponde a un problema específico; sin embargo, es necesario hacer la descripción universal del problema, para ello se propone un sistema de cambio

de variables que adimensionalice las ecuaciones para resolver a éste en cualquier condición.

Se realizaron los siguientes cambios de variables en el sistema para obtener el nuevo sistema físico adimensional:

$$\begin{aligned}\varphi &= \frac{T - T_\infty}{T_w - T_\infty}, \\ \text{Pr} &= \frac{\alpha}{\nu_g} = 0.72 \\ \text{Pe} &= \text{Pr Re}\end{aligned}$$

La ecuación de energía en forma adimensional y estacionaria queda escrita de la siguiente manera:

$$u \frac{\partial \varphi}{\partial x} + v \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{1}{\text{Pe}} \left[ \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right]. \quad (3.4)$$

Sus correspondientes condiciones de frontera aguas arriba y aguas abajo del sistema son:

$$x \rightarrow -\infty \quad \varphi = 1, \quad (3.5)$$

$$x \rightarrow \infty \quad \varphi = \varphi_\infty, \quad (3.6)$$

sobre el eje de simetría

$$y = \pm \frac{1}{2} \quad \frac{\partial \varphi}{\partial y} = 0.$$

La forma de la ecuación de la energía en términos de la función de corriente queda como sigue:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial y} - \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{1}{\text{Pe}} \left[ \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right]. \quad (3.7)$$

### 3.5. Análisis a bajo número de Peclet

En el caso en el que el número de Peclet es muy pequeño comparado con la unidad, se puede realizar un análisis para obtener cierta información sobre lo que ocurre en la transferencia de calor del flujo de gas que cruza el arreglo[41]. Partimos de la ecuación de la energía, escrita adimensionalmente, y se considera que la temperatura adimensional del flujo aguas arriba es cero; mientras que la temperatura aguas abajo del sistema la denominaremos  $\varphi_\infty$

Con esta idea como base, consideramos conocido el campo de velocidades del sistema, ya que éste viene de las ecuaciones de Navier Stokes, se puede obtener el flujo de calor generado por la pérdida de calor del alambre hacia el gas por conducción

$$q_w = -2\pi\epsilon k (T_w - T_0) \left. \overline{\frac{\partial\varphi}{\partial r}} \right|_{r=\epsilon}$$

Con la idea de aumentar la eficiencia del sistema, la temperatura del gas deberá ser lo más cercana a la temperatura del cilindro, y considerando que el número de Peclet debe ser pequeño, la capa de calentado del sistema debe ser del orden  $l/Pe$ . Con base en esta idea, el campo de temperaturas tendría que ser, aproximadamente, unidimensional. Esto es, porque los gradientes del campo en dirección transversal son suaves y del orden  $l$  dentro del arreglo.

A partir de la ecuación de transferencia de calor, y realizando una primera aproximación para pequeños valores de números de Peclet, el balance entre la convección y la difusión es:

$$Pe \frac{\partial\varphi}{\partial x} = \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}$$

La solución a esta ecuación utilizando las condiciones de frontera es:

$$\varphi = \varphi_a \exp(-Pe x)$$

donde  $\varphi_a$  es el valor aparente de  $\varphi$  dentro de la capa y debe ser obtenido como parte de la solución del problema.



En la región externa de la malla donde  $x \sim 1$ , la distribución de temperaturas deja de ser unidimensional, en esta región se esperaría que se pudiera obtener  $\varphi$  a partir de  $\varphi_a$  para el orden de Peclet comparado con la unidad.

Hasta aquí, se ha obtenido un análisis de lo que ocurre en la región cercana al cilindro, ahora es necesario realizar un análisis de la zona externa. Para el caso donde existe un no tan amplio separamiento entre los alambres,  $\epsilon$  no es tan pequeño comparado con la unidad, es posible obtener una expansión de  $\varphi$  en términos de potencias de  $Pe$

$$\varphi(x, y, \epsilon, Pe) = Pe\Psi(x, y, \epsilon) + \dots$$

donde  $\Psi$  debe satisfacer

$$\Delta\Psi = 0$$

donde se mantienen las condiciones de simetría dentro del sistema para la variable auxiliar  $\Psi$ , tal como se muestra a continuación

$$y = \pm \frac{1}{2} : \frac{\partial\Psi}{\partial y} = 0$$

acoplando las condiciones con el resultado de este sistema, podemos obtener las condiciones equivalentes

$$\begin{aligned} x \rightarrow -\infty : \frac{\partial\Psi}{\partial x} - 1 &= 0 \\ x \rightarrow \infty : \frac{\partial\Psi}{\partial x} &= 0 \end{aligned}$$

Por medio de esta aproximación es posible obtener información la temperatura aguas abajo en el sistema, además de el flujo de calor de hilo hacia el gas reactante:

$$\begin{aligned} T_\infty - T_0 &= (T_w - T_0)(1 - Pe\Psi_\infty + \dots) \\ q &= \rho_g U_\infty l c_p (T_w - T_0)(1 - Pe\Psi_\infty + \dots) \end{aligned}$$

de aquí es posible obtener la eficiencia de conversión que se retomara mas adelante en la parte de la combustión catalítica.

$$\text{Nu} = \frac{\text{Pe}}{2\pi\epsilon(1 + \text{Pe}\Psi_\infty)}. \quad (3.8)$$

de donde Nu es el número de Nusselt, que dara pauta a la transferencia de calor a Peclet pequeño en comparación a la unidad.

### 3.6. Esquema numérico

De los resultados obtenidos en el capítulo anterior, la función de corriente sirve como base para resolver el campo de temperaturas, de la misma manera, es necesario ver la formulación establecida en el apéndice B para realizar una transformación conforme del espacio físico al espacio computacional. Se toma el resultado de las ecuaciones 2.33 y 2.34 y se resuelve la ecuación de la energía aplicando las condiciones de frontera adecuadas y descritas durante este capítulo, obteniendo una ecuación lineal que vía el método iterativo de las tridiagonales se resuelve.

Nuevamente, se utilizará la formulación de Vera y Liñán para establecer la estela que se forma aguas abajo del sistema con números de Peclet pequeños.

La ecuación de la enegía en el espacio computacional queda descrita de la manera:

$$\left[ JPe \frac{\partial \psi}{\partial \eta} - \tau \right] \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} + \left[ -JPe \frac{\partial \psi}{\partial \xi} - \sigma \right] \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} = \alpha \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi^2} + \gamma \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \eta^2} - 2\beta \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \eta \partial \xi}. \quad (3.9)$$

Análogamente se aplican las condiciones de frontera utilizadas en el espacio físico, utilizando tambien la descripción de análisis de frontera cercana explicado en el apéndice B.

### 3.7. Resultados

En esta sección se muestran los campos de temperatura obtenidos a través de la ecuación de la energía para distintos número de Peclet, además también se presenta la transferencia de calor para cada uno de los casos, teniendo en cuenta que el

flujo viene desde una temperatura cero aguas arriba desde infinito, e incide sobre el cilindro que se encuentra normalizado a una temperatura 1; la escala corre de menor a mayor de izquierda a derecha.

### 3.7.1. Número de Peclet pequeño comparado con la unidad

Para este caso, el número de Peclet es pequeño, por lo que la difusión se ve reflejada aguas arriba, la temperatura del flujo aguas abajo del sistema es casi la misma que la temperatura del cilindro, por lo que la transferencia de calor es muy eficiente, la diferencia de temperaturas entre la entrada del sistema y el cilindro es de apenas 0.12 para el caso donde el número de  $Pe = 0.072$ , y aumenta a 0.5 y 0.9 respectivamente, para los casos donde  $Pe = 0.36$  y  $Pe = 0.72$ .

### 3.7.2. Número de Peclet de orden unidad

Si el número de Peclet es de orden unidad, los términos difusivos y convectivos son equiparables, al igual que sucede con el número de Reynolds. El campo de temperaturas a la salida del sistema es menor que la temperatura del hilo, por lo que la eficiencia en la transferencia de calor disminuye como puede observarse en la figura 3.2, y 3.2.

### 3.7.3. Número de Peclet de orden 10

Para estos números de Peclet, las líneas de temperatura se propagan hacia atrás del flujo, lo que representa que el flujo sale a temperatura intermedia entre la de aguas arriba y la de la superficie del cilindro. Tal como se muestra en las figuras 3.3, la temperatura de salida para el caso donde el  $Pe = 28,8$  es de apenas 0,25, temperatura que se encuentra lejos de la que tiene la superficie, lo cual representa poca eficiencia en la transferencia de calor, pero, por otro lado, permite establecer la transferencia en el caso crítico antes de que el flujo se vuelva inestable.

### 3.7.4. Número de Nusselt

Como se muestra en la figura 3.4, se calculó el número de Nusselt sobre la superficie del cilindro, para después promediar y encontrar el Nusselt promedio como función del número de Peclet, como resultado del análisis numérico se obtuvo a éste en el intervalo desde 0.072 hasta 28.8, con la finalidad de tener el mayor espectro de soluciones. Del análisis teórico para cuando el número de Peclet es pequeño en comparación a la unidad, se obtuvieron, así mismo, los resultados que van desde 0.01 hasta 1, con lo que es posible corroborar que el resultado coincide, por lo que es representativo de la física del problema. La línea muestra una correlación obtenida de los datos y esta fue definida de la siguiente forma:

$$\text{Nu} = -1,4 \times 10^{-5} Pe^4 + 1,35 \times 10^{-3} Pe^3 - 4,66 \times 10^{-2} Pe^2 + 8,11 \times 10^{-1} Pe + 4,53 \times 10^{-3}$$

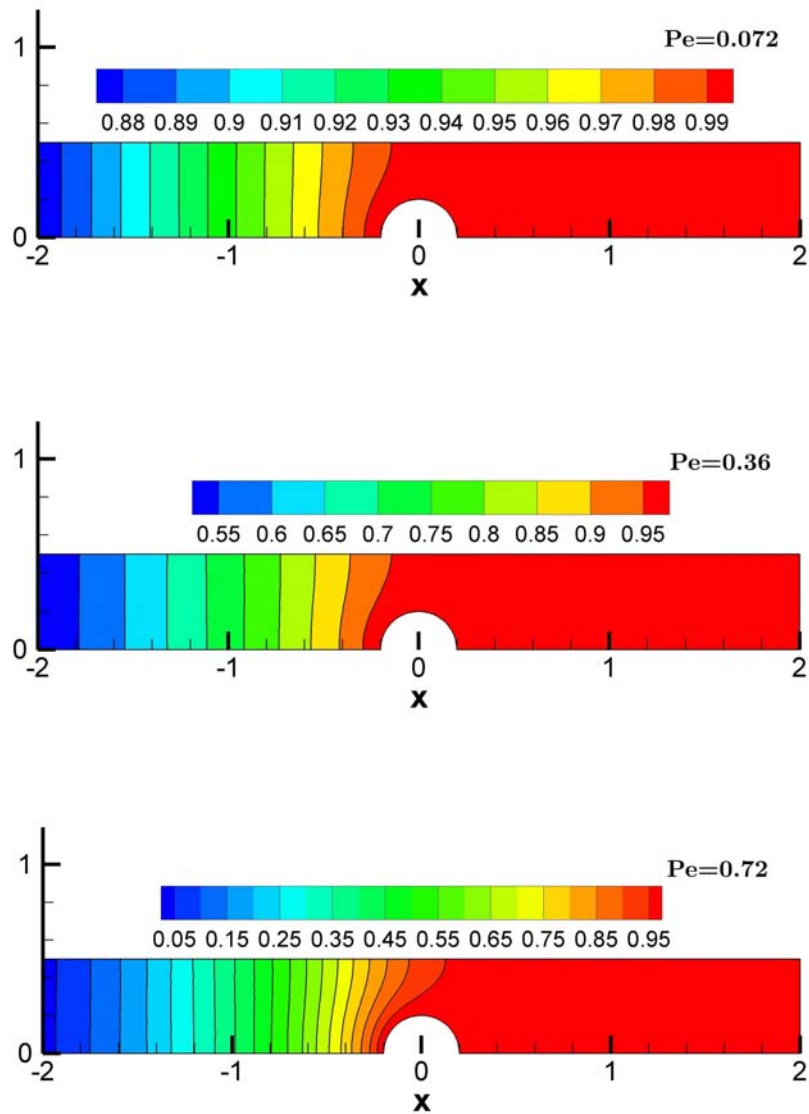


Figura 3.1: Se muestra el campo de temperatura para los casos donde los números de Reynolds son:  $Pe = 0.072$ ,  $Pe = 0.36$  y  $Pe = 0.72$ , con un  $\epsilon = 0.2$ .

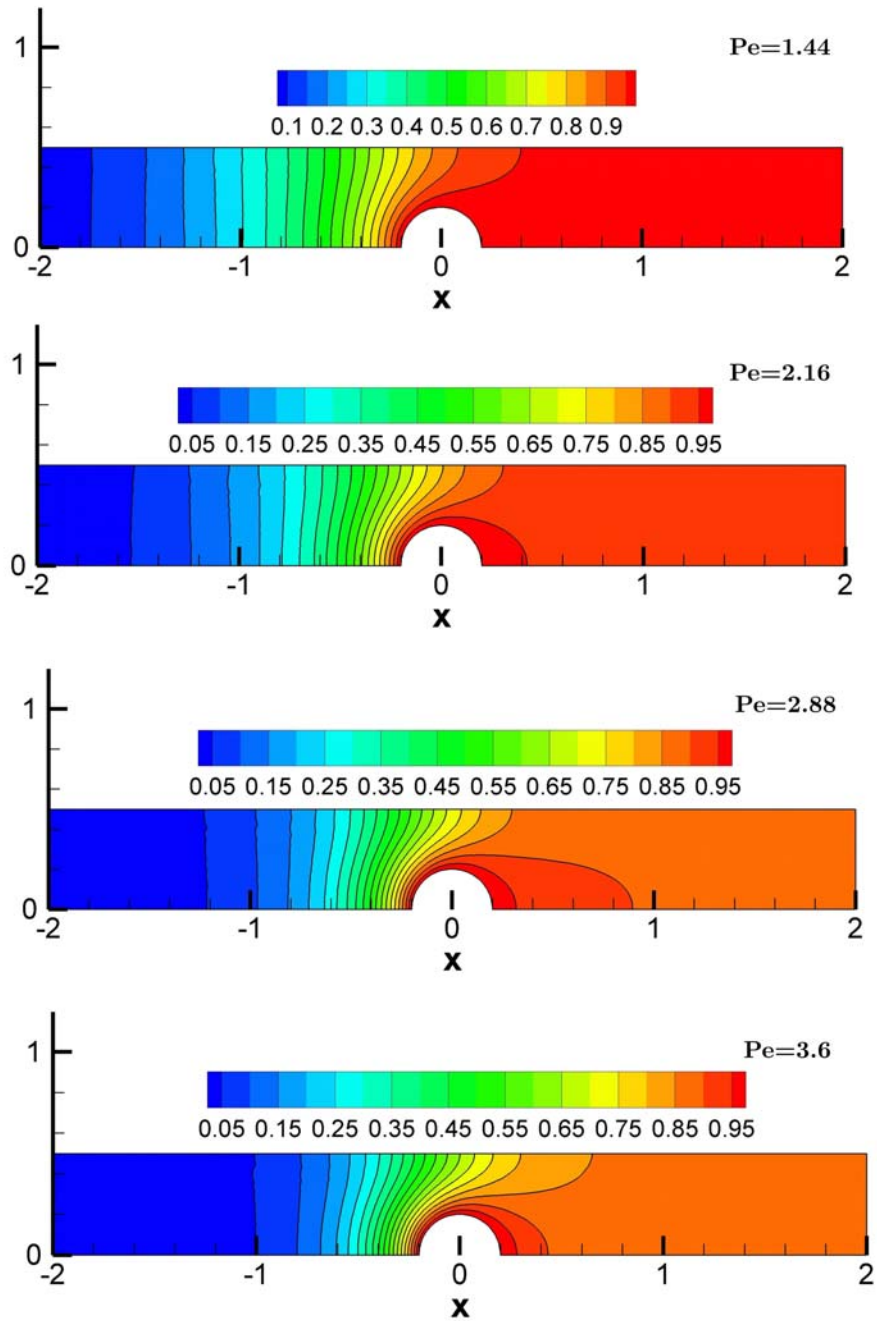


Figura 3.2: Se muestra el campo de temperatura para los casos donde los números de Peclet son:  $Pe = 1.44$ ,  $Pe = 2.16$ ,  $Pe = 2.88$  y  $Pe = 3.60$ , con un  $\epsilon = 0.2$ .

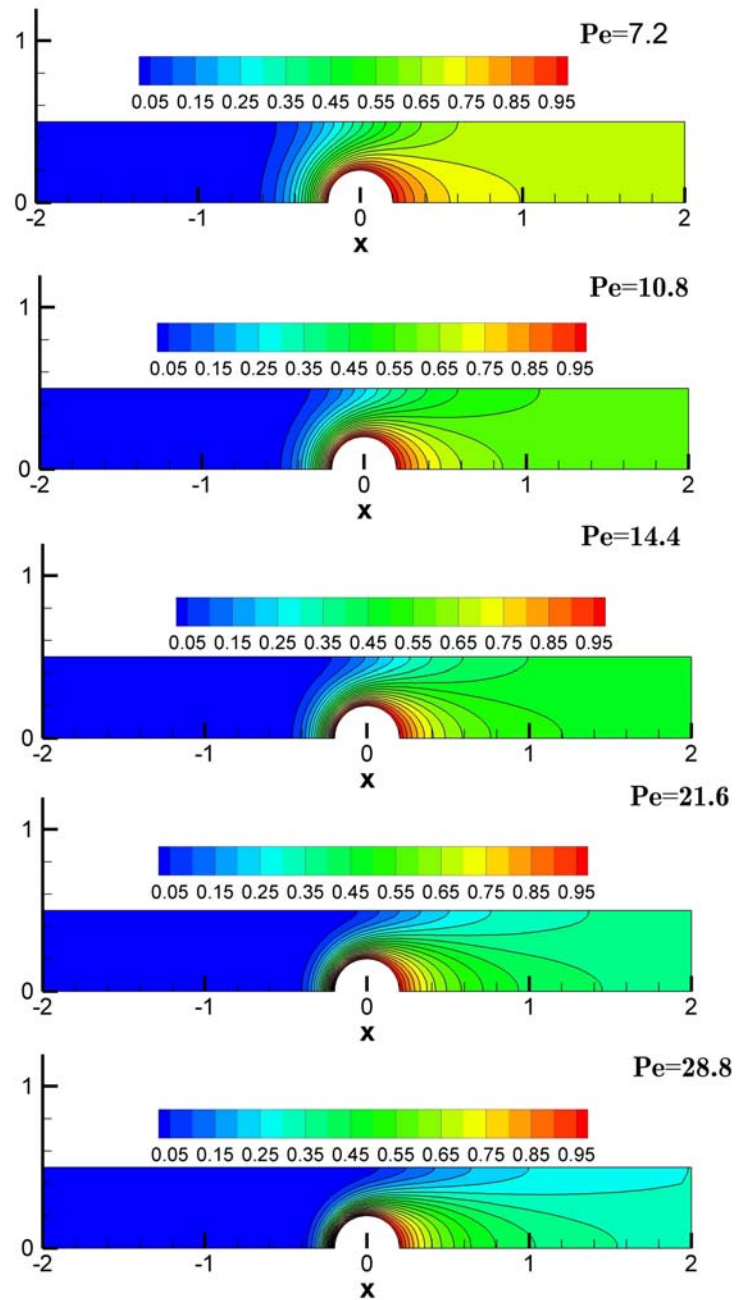


Figura 3.3: Se muestra el campo de temperatura para los casos donde los números de Reynolds son:  $Pe = 7.2$ ,  $Pe = 10.6$ ,  $Pe = 14.4$ ,  $Pe = 21.6$  y  $Pe = 28.8$ , con un  $\epsilon = 0.2$ .

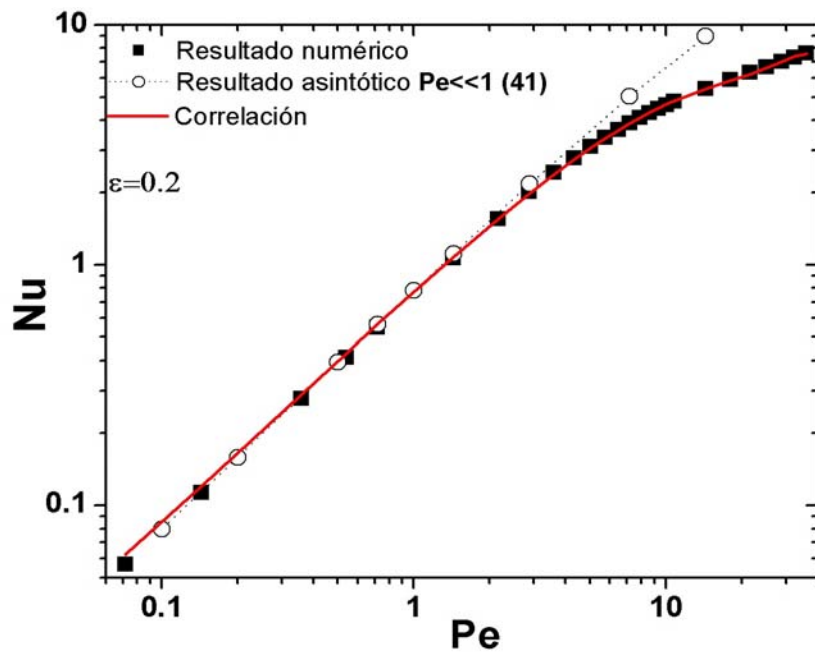


Figura 3.4: función del número de Peclet, los cuadros oscuros representan los resultados obtenidos mediante la simulación numérica, los círculos muestran el resultado de la solución asintótica y la línea gruesa la correlación obtenida del análisis de datos.



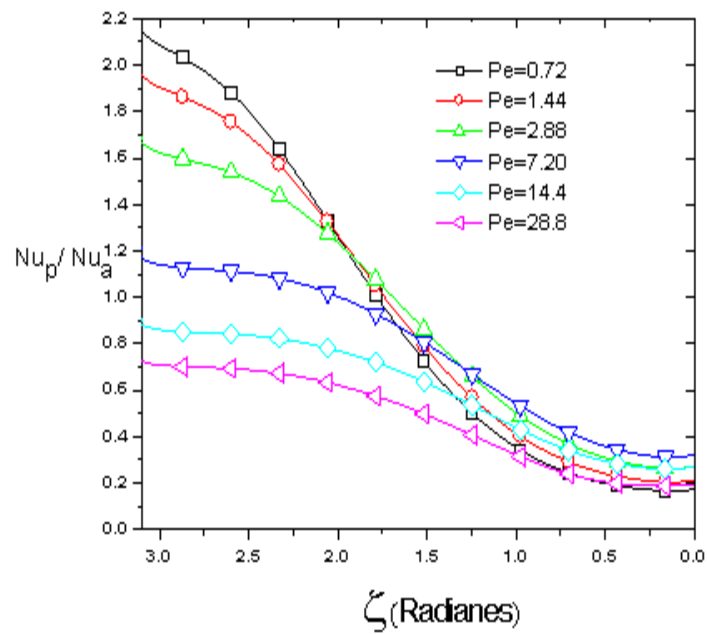


Figura 3.5: Se muestra la relación los números Nusselt numérico y asintótico sobre la superficie, en función de ángulo.

# Capítulo 4

## Proceso de combustión catalítica de un gas (Hidrógeno-Aire) que cruza un arreglo de alambres.

### 4.1. Introducción

El proceso de combustión catalítica de gases reactantes es una importante alternativa a los métodos de combustión tradicionales, dada su alta eficiencia y la baja producción de contaminantes. En el trabajo de Cho y Law [23], mediante un estudio experimental con diferentes combustibles y concentraciones del combustible y oxidante encuentran una clara distinción en el comportamiento de algunos combustibles separándolos en dos grupos: el grupo del propano (metano, etano, propano, butano) y el grupo del propileno (propileno, etileno, hidrógeno, monóxido de carbono, amoníaco). En especial, la ignición catalítica ha sido objeto de numerosas publicaciones en revistas especializadas, debido a su importante rol en el arranque de convertidores catalíticos de automóviles y en combustores catalíticos entre otros (Pfefferle y Pfefferle, [28]; Rinmeno et al. [28]; Fassihi et al., [30]; Deutschmann et al., [26]; Vesper y Schmidt, [37]; Bui et al., [25]).

Se han publicado tanto trabajos experimentales como teóricos sobre la combustión catalítica, aumentando nuestro conocimiento en este tipo de procesos críticos no-lineales. Schmidt y co-autores (Williams et al., [40]; Vesper y Schmidt, [37])

presentaron resultados experimentales de la ignición catalítica de diversos hidrocarburos en una placa de platino usando una configuración del flujo de remanso. Ellos mostraron que para el metano, la temperatura crítica de ignición disminuía al hacerse más rica la mezcla. Lo contrario sucede para el hidrógeno (Deutschmann et al., [26]).

Desde el punto de vista teórico, el proceso de ignición ha sido estudiado tanto mediante simulaciones numéricas usando la cinética química detallada (Song et al., [31]; Warnatz, [38]; Warnatz et al., [39]; Deutschmann et al., [26]; Bui et al., [24]; Bui et al., [25];) o empleando técnicas matemáticas basadas en la alta energía de activación con una reacción química global (Treviño y Fernández-Pello, [32], ; Liñán y Treviño, [33]; Treviño y Peters, [34]; Treviño y Méndez, [35]). Los principios básicos de la catálisis heterogénea han sido descritos con detalle por Ertl, [27] y en Williams et al. [40].

Williams et al. [40] presentaron por vez primera un modelo para la combustión catalítica del hidrógeno a altas temperaturas, donde expusieron los parámetros cinéticos de la química de superficie. Warnatz y co-autores (Warnatz, [38]; Warnatz et al., [38]) y Bui et al., (1997c) estudiaron en una serie de trabajos la combustión e ignición catalítica del hidrógeno usando la cinética química detallada. Warnatz et al. [38] comparó sus resultados con los reportados experimentales de Ljungström et al. [29]. Deutschmann et al. [26] estudiaron la ignición catalítica de varios combustibles. Ellos indicaron que el proceso de ignición es una transición abrupta del sistema controlado cinéticamente al controlado por difusión y que depende básicamente de los pasos de adsorción - desorción. En sus simulaciones numéricas se demostró que uno de los reactantes casi cubre la superficie del catalizador a temperaturas menores que la de ignición. Bui et al. [25] reportaron cálculos numéricos para mezclas de metano y aire, comparando sus resultados con datos experimentales. Se inició una colaboración con el grupo de la Universidad Politécnica de Madrid en el campo de la ignición catalítica de hidrógeno, Treviño et al. [43], donde se estudió el proceso de auto-ignición de una mezcla de hidrógeno y aire en contacto con un hilo con propiedades catalíticas, Vera y Liñán [41] estudiaron el proceso de combustión catalítica sobre un arreglo de alambres a número de Reynolds de orden unidad con una cinética química rápida obteniendo una química cinética global.

## 4.2. Planteamiento del problema

Como se recordará, el problema que aquí se presenta es complejo por constar de tres partes a resolver de manera encadenada. Para esto momento, ya se ha presentado la solución de la dinámica del flujo y la transferencia de calor. Ahora, con esos datos se presenta la solución de la parte medular del problema, que es la combustión catalítica. El proceso de combustión que ocurre en el sistema es denominado un sistema de reacción heterogéneo, esto es, las reacciones solamente se darán sobre la superficie del catalizador, descartando las reacciones homogéneas que se den en el gas, pues las temperaturas a las que trabaja el sistema, se encuentra por debajo de las temperaturas de reacción de los gases. El modelo físico bajo estudio se muestra en la figura 2.1, en ella se marca claramente el flujo del gas premezclado de hidrógeno - aire, con una concentración másica denotada por  $Y_{F0}$  y  $Y_{O_20}$  para hidrógeno y para oxígeno respectivamente.

Como se había mencionado en los capítulos anteriores se tiene un flujo de gas con velocidad uniforme y con temperatura aguas arriba que incide de manera perpendicular sobre un arreglo de alambres catalíticos compuestos por paladio(Pd), el radio característico de los alambres es  $a$  y la distancia entre los centros de los alambres se encuentra denotada por la longitud  $l$ . Como se había comentado en las secciones anteriores, las propiedades físicas de la mezcla diluida de gas son la densidad que es  $\rho_g$ , la viscosidad cinemática es  $\nu$ , el calor específico es  $c_p$  y la conductividad térmica del alambre es  $\lambda_w$ , así como la del gas es  $\lambda_g$ . Estas propiedades, por simplicidad, son consideradas constantes. El número de Reynolds  $Re$  queda descrito en términos de la longitud entre los centros de los alambres, y está considerado desde un orden unidad hasta el máximo de 40 con el fin de conservar las propiedades laminares y estacionarias del flujo, además se asegura una alta eficiencia de la conversión del combustible.

Las ecuaciones de concentración másica pueden ser adimensionalizadas de la misma manera en que se hizo con la ecuación de la energía, pero es importante invocar al número de Lewis para ambos reactantes que queden definidas como:

$$L_F = \alpha/D_F$$

$$L_O = \alpha/D_O$$

donde  $\alpha$  se define como la difusividad térmica y  $D_F$  y  $D_O$  como los coeficientes de difusividad másica.

### 4.3. Leyes básicas de conservación de especies en la dinámica de un flujo de gas

De esta manera, la ecuación que describe a las concentraciones másicas en términos del flujo quedan descritas de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial Y}{\partial y} - \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial Y}{\partial x} = \frac{1}{\text{Pe} L_F} \left[ \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} \right]. \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial Y_O}{\partial y} - \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial Y_O}{\partial x} = \frac{1}{\text{Pe} L_O} \left[ \frac{\partial^2 Y_O}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 Y_O}{\partial y^2} \right]. \quad (4.2)$$

Las condiciones de frontera que describen las concentraciones másicas del flujo de gas que cruza a través de un arreglo de alambres con propiedades catalíticas quedan definidas como se muestra a continuación:

$$x \rightarrow -\infty : Y - 1 = Y_O - 1 = 0 \quad (4.3)$$

$$x \rightarrow +\infty : \frac{\partial Y}{\partial x} = \frac{\partial Y_O}{\partial x} = 0 \quad (4.4)$$

$$y = \frac{1}{2} : \frac{\partial Y}{\partial y} = \frac{\partial Y_O}{\partial y} = 0 \quad (4.5)$$

$$y = 0, \quad |x| > \varepsilon : \frac{\partial Y}{\partial y} = \frac{\partial Y_O}{\partial y} = 0. \quad (4.6)$$

Sobre la superficie del alambre catalítico, también se imponen condiciones de frontera donde se involucra la difusividad másica de los reactantes.

$$r = \varepsilon : \frac{\partial Y}{\partial r} - \varpi \frac{L_F}{L_O \phi} = \frac{\partial Y_O}{\partial r} - \varpi = 0, \quad (4.7)$$

donde  $\varpi$  es la velocidad de reacción, denominada por el número de Damköhler, sobre la superficie del alambre, que se encuentra definida como:

$$\varpi = \frac{sW_O L_O l}{\rho \alpha Y_{O_2 0}} \omega. \quad (4.8)$$

donde  $s$  es el coeficiente estequiométrico molar sobre el promedio total de la reacción sobre la superficie, para este caso el tipo de reacción descrito en el material catalítico es  $F + sO_2 \rightarrow \text{productos} + Q$ . Donde  $\phi$  es la tasa de equivalencia de la mezcla de gas reactante que proviene aguas arriba del sistema, y se describe a través de la siguiente relación:

$$\phi = \frac{sW_O/W_F}{Y_{F0}/Y_{O_2 0}}$$

$W_O$  es el peso molecular del oxidante y  $\omega$  es la velocidad de reacción dimensional en moles de combustible por unidad de superficie y tiempo. De aquí es posible encontrar un valor probable de la máxima velocidad de reacción que se dará dentro del sistema y que regirá al proceso de combustión catalítica, que para el caso donde el Peclet sea pequeño implicará que todo el combustible se quemará en aguas abajo del sistema, donde la condición de salida sea  $x \rightarrow \infty$ .

$$\varpi_0 = \frac{\text{Pe} \phi L_O}{2\pi \varepsilon}. \quad (4.9)$$

La diferencia entre las concentraciones de combustible en la entrada y en la salida del sistema se encuentra relacionada con las velocidades de reacción que ocurren en el sistema, donde, del análisis de órdenes de magnitud es posible encontrar la relación que existe entre dichas concentraciones y el número de Damköhler,  $1 - \bar{Y}_\infty = \bar{\delta}$ , donde  $\bar{Y}_\infty = \lim_{x \rightarrow \infty} (1/2) \int_0^{1/2} Y_\infty(x, y) dy$  y  $\bar{\delta} = \bar{\varpi} / \varpi_0 = 1 / (\pi \varpi_0) \int_0^\pi \varpi(\varepsilon, \beta) d\beta$ , estos son los valores promedios de las concentraciones en la región de salida y la velocidad de reacción adimensional reducida sobre la superficie del alambre, respectivamente. El  $\beta$  es el ángulo formado sobre una línea radial en cualquier punto de la superficie del alambre.

Dentro de la formulación, resulta necesario hacer una descripción del número de Damköhler  $\delta$  en forma normal con  $0 \leq \delta \leq 1$ , esto nos dará información de la eficiencia de conversión total sobre el sistema, esto es, si la eficiencia fuese 0, la cantidad de combustible utilizado en el sistema no existiría; caso contrario, cuando el número de Damköhler sea 1, se presenta la eficiencia con su máximo valor, convirtiendo todo el combustible que cruza a través del arreglo de alambres en agua.

De la estequiometría total del sistema, es posible realizar una normalización de las concentraciones en términos de los reactantes aguas abajo del sistema, ésta nos lleva a que:

$$(1 - \overline{Y_\infty}) \phi = 1 - \overline{Y_{O_\infty}}$$

Por otro lado, por conservación de la energía, es posible obtener una relación que nos dé la cantidad de calor que se cede hacia el sistema, en función de la temperatura aguas abajo del mismo.

$$\varphi_w = (\text{Pe} / 2\pi\epsilon\overline{\text{Nu}})\overline{\varphi_\infty},$$

donde, el número de Nusselt promedio obtenido en el capítulo anterior es

$$\overline{\text{Nu}} = Q_w / 2\pi\epsilon\lambda(T_w - T_0)$$

donde  $Q_w$  representa a las pérdidas de calor por unidad de longitud, cedidas por el alambre.

Es necesario establecer el balance de los flujos de calor que existen dentro del sistema, uno es el dado por la temperatura del alambre y cedido hacia el gas; por otro lado, tenemos el calor absorbido o liberado por la reacción sobre la superficie catalítica. La relación entre estos se encuentra dada por el balance global establecido en la siguiente ecuación:

$$q_E = \overline{\varphi_\infty} - \overline{\delta},$$

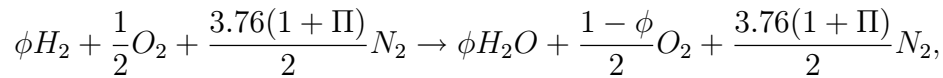
donde  $q_E$  representa el flujo de calor adimensional añadido de forma externa y definido como  $q_E = Q_E / \text{Pe} \rho \alpha c_p (T_e - T_0)$ , donde  $Q_E$  es la tasa de calor añadido por unidad de longitud en el alambre.

Nr	Reacción	S	A	E
1a, d	$H_2 + 2Pd(s) \rightleftharpoons 2H(s)$	0,70	$4.8 \times 10^{21}$	$84 - 15\theta_H$
2a, d	$O_2 + 2Pd(s) \rightleftharpoons 2O(s)$	0,4	$7.1 \times 10^{21}$	230
3r	$H(s) + O(s) \rightarrow OH(s) + Pd(s)$	–	$6.5 \times 10^{21}$	11.5
4r	$H(s) + OH(s) \rightarrow H_2O(s) + Pd(s)$	–	$6.5 \times 10^{21}$	17.4
5r	$OH(s) + OH(s) \rightarrow H_2O(s) + O(s)$	–	$3.7 \times 10^{21}$	48.2
6a, d	$H_2O + Pd(s) \rightleftharpoons H_2O(s)$	0,75	$1.3 \times 10^{13}$	44

Cuadro 4.1: Modelo de reacción heterogénea. Unidades: A (mol,cm,s), E (KJ/mol)

#### 4.4. Modelado de la reacción catalítica

Es necesario establecer la reacción que se da sobre la superficie del paladio. El modelo de reacción es presentado en la tabla 4.1 que se muestra, en la cual debemos tomar en cuenta que se trata de una mezcla de aire e hidrógeno diluido, donde el modelo de reacción global está dado por:



donde  $\Pi$  corresponde a la dilución del nitrógeno en la mezcla. Para este caso estamos considerando valores de dilución relativamente moderados, lo que nos implicaría temperaturas de operación del sistema no muy altas, con el fin de mantener la heterogeneidad del proceso de reacción. Considerando el aspecto físico-químico del problema, tenemos ya un sistema global que permite establecer las condiciones del proceso de combustión catalítica heterogénea que existe dentro de la formulación, así como los parámetros que describen las temperaturas adecuadas de operación para el antes mencionado sistema.

Con el propósito de describir el mecanismo simplificado de reacción del hidrógeno y el oxígeno sobre el paladio, establecemos el modelo más sencillo descrito en la naturaleza y que se encuentra establecido en la tabla 4.1 [39]. Se considera que el paladio,  $Pd$ , contiene sitios libres o huecos sobre la superficie, y que las concentraciones de especie que son absorbidas sobre la superficie catalítica, se representan como  $\theta_i$ , donde  $i$  representa al número de reacciones de las especies en el total de sitios disponibles.



Las reacciones 1,2 y 6 son de absorción y desorción. El factor pre-exponencial y la energía de activación en las columnas, representan los términos de la cinética de Arrhenius y se denominan  $1d$ ,  $2d$  and  $6d$ , éstas están descritas en unidades de  $1/s$

$$k_{id} = \Gamma A_{id} \exp\left(-\frac{E_{id}}{RT_w}\right), \text{ para } i = 1, 2, 6. \quad (4.10)$$

Donde  $\Gamma \simeq 1,6603 \cdot 10^{-9}$  mol/cm<sup>2</sup> es la concentración molar sobre la superficie de los sitios activados y  $R$  es la constante universal de los gases. La columna  $E_{id}$  corresponde a las energías de activación relacionados a cada reacción, de la misma manera que la columna  $A_{id}$  establece los factores preexponenciales. De las reacciones  $3r$  a la  $5r$  se establece que son reacciones de superficie del tipo de Langmuir-Hinshelwood, pero son consideradas demasiado rápidas en comparación a la reacción de absorción y desorción, por lo que, en términos de los tiempos característicos, se desprecian. the adsorption-desorption reactions.

Por otro lado, las velocidades de reacción de absorción se encuentran, directamente ligadas a las probabilidades de adherencia y a los coeficientes de acomodo sobre la superficie  $S_i$ , que representa la fracción de colisiones que se dan sobre la superficie con una absorción exitosa. La tasa de colisiones de las especies  $i$  se encuentran descritas por  $Z_w = p_i/\sqrt{2\pi m_i kT}$ , de la teoría clásica cinética, donde  $p_i$  y  $m_i$  representan la presión parcial y la masa de las especies, y donde  $k$  es la constante de Boltzmann,  $k = 1.38 \times 10^{23}$  J/K. La tasa de desorción de las reacciones son  $\omega_{1a} = k_{1a}\theta_v^2$ ,  $\omega_{2a} = k_{2a}\theta_v^2$ , y  $\omega_{6a} = k_{6a}\theta_v$ , donde  $\theta_v$  es la fracción de sitios vacantes y

$$k_{ia} = \frac{S_i p Y_{iw} W}{\Gamma W_i^{3/2} \sqrt{2\pi R T_w}}, \text{ para } i = 1, 2, 6. \quad (4.11)$$

Para el caso de mezclas no muy pobres, la velocidad de reacción sobre la superficie catalítica se encuentra descrita por [42, 43]

$$\omega = \frac{2\Gamma k_{2a} K^2}{(1 + K)^2}, \quad (4.12)$$

donde  $K$  se encuentra dada por  $K = \sqrt{k_{1d}/(k_{1a} - 2k_{2a})}$ . Esta formulación es válida solamente para el caso de mezclas no muy pobres, con una tasa de desorción de hidrógeno muy grande comparada con la tasa de reacción del oxígeno, por lo

que  $k_{1a} \gg 2k_{2a}$ , sobre cualquier punto de la superficie del alambre catalítico. Los parámetros adecuados para la mezcla de hidrógeno en este caso, son:  $L_F = 0.3$ ,  $L_O = 1$ ,  $W_F = 2$ ,  $W_O = 32$ ,  $Q = 2.3781 \times 10^5$  J/mol y  $s = 1/2$ .

## 4.5. Ignición a pequeños valores del número de Peclet

Para pequeños valores del número de Peclet comparados con la unidad, es posible encontrar una relación de las concentraciones de ambos reactantes sobre la superficie del alambre catalítico, que se encuentra basada en el trabajo de Vera[41]:

$$Y_w = 1 - \delta(1 + \text{Pe } L_F \Psi_\infty) \quad (4.13)$$

$$Y_{Ow} = 1 - \delta\phi(1 + \text{Pe } \Psi_\infty), \quad (4.14)$$

donde  $\Psi_\infty$  fue obtenido en el trabajo de Vera [41] y es, únicamente, función de  $\epsilon$ . Para pequeños valores de  $\epsilon$ , la función  $\Psi_\infty$  toma la siguiente forma

$$\Psi_\infty = \frac{1}{2\pi} \ln \left( \frac{1}{2\pi\epsilon} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{3\pi\epsilon^2}{3 + (\pi\epsilon)^2} \right). \quad (4.15)$$

Utilizando la misma descripción para la transferencia de calor, encontramos el número de Nusselt característico

$$\text{Nu} = \frac{\text{Pe}}{2\pi\epsilon(1 + \text{Pe } \Psi_\infty)}. \quad (4.16)$$

Retomando la relación que existe entre la temperatura del alambre y la temperatura formada en la estela aguas abajo sobre la condición de frontera, podemos hacer una descripción del campo de temperaturas, que se encuentra dado por:

$$\varphi_\infty = \frac{\varphi_w}{(1 + \text{Pe } \Psi_\infty)}.$$

El balance de energía total de la ecuación  $q_E = \varphi_\infty - \delta$ , quedaría reducido a

$$q_E = \frac{\varphi_w}{(1 + \text{Pe } \Psi_\infty)} - \delta. \quad (4.17)$$

La ignición para mezclas no tan pobres estaría dada para el caso donde la velocidad de absorción molecular del hidrógeno es grande en comparación a la velocidad de absorción del oxígeno molecular, que está dada por la ecuación (4.12), la cual se encuentra reducida al número de Damköhler característico para el análisis a número de Peclet pequeño.

$$\delta = \frac{2\pi S_2}{4 \text{Pe} \phi S_1} \frac{Y_{Ow}}{Y_w} \frac{\Gamma^2 A_{1d} a W_{H_2}}{\alpha_g \rho_g Y_{F0}} \exp \left[ -\frac{E_{1d}}{RT_w} \right], \quad (4.18)$$

donde  $Y_{Ow}$  y  $Y_w$ , se encuentran descritas por las ecuaciones (4.13) y (4.14). Para energías de activación relativamente grandes de reacción de desorción para el caso de la desorción de hidrógeno, el régimen de ignición puede ser descrito vía métodos de perturbación para condiciones de muy baja temperatura. Sin reacción, la temperatura sobre la superficie catalítica del alambre, se encuentra dada por la ecuación (4.17),  $q_E = \varphi_{w0}/(1 + \text{Pe} \Psi_\infty)$ . Por lo que ésta se reduce a

$$\delta_0 \exp \left[ \frac{E_{1d}}{RT_w T_{w0}} (T_w - T_{w0}) \right] = \frac{1}{(1 + \text{Pe} \Psi_\infty)} \left[ \frac{T_w - T_{w0}}{T_e - T_0} \right], \quad (4.19)$$

donde

$$\delta_0 = \frac{2\pi S_2}{4 \text{Pe} \phi S_1} \frac{Y_{Ow}}{Y_w} \frac{\Gamma^2 A_{1d} a W_{H_2}}{\alpha_g \rho_g Y_{F0}} \exp \left[ -\frac{E_{1d}}{RT_{w0}} \right] \quad (4.20)$$

y

$$T_{w0} = T_0 + (T_e - T_0) \varphi_{w0}. \quad (4.21)$$

Para valores grande de  $E_{1d}/RT_{w0}$  comparado con la unidad, la ecuación (4.19) muestra el comportamiento crítico que caracteriza a la ignición heterogénea para valores de Damköhler dados bajo la siguiente condición:

$$\delta_{0ig} = \frac{1}{(1 + \text{Pe} \Psi_\infty) \beta \exp(1)} \ll 1, \quad (4.22)$$

donde  $\beta$  corresponde al número de Zeldovich dado por  $\beta = E_{1d}(T_e - T_0)/RT_{w0}^2$ . Al tiempo que los valores de  $\delta$  son pequeños comparados con la unidad para la ignición, les corresponde también los valores donde las concentraciones se reducen muy cerca del mínimo para el caso de los alambres catalíticos. Que se encuentran descritos en las ecuaciones (4.13) y (4.14). La ecuación (4.22) nos da la relación de la temperatura de ignición del alambre  $T_{wig} = T_{w0}$  en términos del número de

Peclet. De la definición del número de Damköhler,  $\delta_0$ , dada en la ecuación (4.20), podemos obtener un valor de número de Peclet crítico ( $Pe^*$ ), para el cual se produce la autoignición que ocurre a temperatura ambiente. Utilizando las ecuaciones (4.20) y (4.22), obtenemos

$$Pe^* = \frac{Pe_0}{1 - Pe_0 \Psi_\infty},$$

donde

$$Pe_0 = \beta_0 \frac{2\pi S_2 \Gamma^2 A_{1d} a W_{H_2}}{4\phi S_1 \alpha_g \rho_g Y_{F0}} \exp \left[ 1 - \frac{E_{1d}}{RT_0} \right] \text{ con } \beta_0 = \frac{E_{1d}(T_e - T_0)}{RT_0^2}.$$

De esta manera, es posible hacer una descripción que nos lleve a números de Peclet grandes, en términos del valor del radio del alambre y del tipo de mezcla que deseemos.

## **4.6. Esquema numérico**

Para establecer un código numérico que fuera capaz de hacer la simulación física del proceso de combustión catalítica que cruza a través de un arreglo de alambres, fue necesario retomar las soluciones del campo de la dinámica del fluido y de la transferencia de calor obtenidos en los capítulos anteriores. Primero se determina la función de corriente que se ve involucrada en las ecuaciones de concentraciones de masa de las distintas especies; al igual que en los demás capítulos, éstas son transformadas al espacio computacional, de la solución de la transferencia de calor se retoma únicamente el número de Nusselt (Nu), que se utiliza para calcular el valor apropiado de la  $q_e$ . Para cada uno de los campos obtenidos del número de Peclet (Pe) se obtiene el campo de concentraciones para distintas temperaturas, iniciando desde los  $280K$  e iterando cada  $0.2K$  hasta encontrar la temperatura donde la velocidad de reacción  $\omega$  alcanza su máximo valor es, precisamente, en esta temperatura donde se vuelve constante; por lo que se le aplica una función asintótica con variaciones mínimas, con la finalidad de encontrar los valores característicos del campo de concentraciones en la salida, tanto para el hidrógeno como para el oxígeno, con el objetivo de establecer la temperatura de operación del sistema.

Ecuaciones de las concentraciones de hidrógeno y oxígeno e

$$\left[ JPeL_H \frac{\partial \psi}{\partial \eta} - \tau \right] \frac{\partial Y}{\partial \xi} + \left[ -JPeL_H \frac{\partial \psi}{\partial \xi} - \sigma \right] \frac{\partial Y}{\partial \eta} = \alpha \frac{\partial^2 Y}{\partial \xi^2} + \gamma \frac{\partial^2 Y}{\partial \eta^2} - 2\beta \frac{\partial^2 Y}{\partial \eta \partial \xi} \quad (4.23)$$

$$\left[ JPeL_o \frac{\partial \psi}{\partial \eta} - \tau \right] \frac{\partial Y_o}{\partial \xi} + \left[ -JPeL_o \frac{\partial \psi}{\partial \xi} - \sigma \right] \frac{\partial Y_o}{\partial \eta} = \alpha \frac{\partial^2 Y_o}{\partial \xi^2} + \gamma \frac{\partial^2 Y_o}{\partial \eta^2} - 2\beta \frac{\partial^2 Y_o}{\partial \eta \partial \xi} \quad (4.24)$$

## 4.7. Resultados

### 4.7.1. Resultados caso $Pe = 0.72$

En este caso en particular es donde coinciden los resultados numéricos con los asintóticos obtenidos del análisis de Vera, a temperatura ambiente, el hidrógeno que reacciona sobre el convertidor catalítico es muy poco, por lo que la cantidad de hidrógeno y oxígeno que resulta del proceso de combustión catalítica es apenas escaso(ver figuras 4.1 y 4.2).

Si aumentamos la temperatura a  $350K$  la cantidad de combustible que se consume con el oxígeno en la superficie comienza a ser más considerable; sin embargo, aún es escasa del orden del 1%, a esa temperatura el catalizador no se encuentra listo. Cuando el gas reactante se encuentra ya a  $400K$  se comienza a ver los efectos de la combustión catalítica, ya que cerca del 60% del combustible de hidrógeno inicia a consumirse con el oxígeno, generando agua. A esta temperatura, el catalizador está a punto de alcanzar su máxima velocidad de conversión. A  $446K$  los alambres catalíticos han alcanzado la máxima velocidad de reacción en la superficie y están quemando el 99% de la mezcla de gas de hidrógeno-aire, generando que la conversión sea óptima, pensando en el diseño de un dispositivo, aunque aún faltaría por determinar la temperatura de operación en términos de la energía externa.

### 4.7.2. Resultados caso $Pe = 1.44$

A temperatura ambiente, el catalizador casi no funciona, su velocidad de reacción es muy baja, por lo que tanto para el oxígeno como para el hidrógeno(ver figuras

4.3 y 4.4), es muy poco el gas que reacciona, técnicamente imperceptible. Menos del 1% del total del gas reactante introducido al sistema es el que reacciona, el catalizador está todavía muy frío para poder catalizar las reacciones. Ya a una temperatura de  $400K$ , el catalizador comienza a funcionar, a esta temperatura la ignición del sistema ya se dio, como se mostrará más adelante. El 40% del gas reactante ya hace reacción sobre la superficie catalítica. A  $450K$  el catalizador ya está alcanzando su máxima conversión, cerca del 93% del gas se está consumiendo. Cuando el catalizador alcanza los  $459K$  con un  $Pe = 1,44$ , su tasa de reacción es la máxima y se encuentra convirtiendo el 95% del gas.

#### **4.7.3. Resultados caso $Pe = 2.88$**

Como en los casos anteriores, a temperatura ambiente el catalizador está desactivado, no hay conversión del hidrógenos y del oxígeno a agua, aunque existen pequeñas variaciones. En las figuras 4.5 y 4.6, el catalizador aún no está preparado aunque se encuentra cerca de la temperatura de ignición para este Peclet, la eficiencia del sistema todavía es muy baja. Aunque ya se alcanzó la temperatura de ignición a los  $400K$ , el sistema aún no quema eficientemente, el catalizador comienza a estar listo, aunque dado que se trata de un número de Peclet casi tres veces más grande que la unidad, su eficiencia disminuye. Cuando el catalizador se encuentra a  $450K$ , se empieza a alcanzar la máxima velocidad de reacción y se quema. El catalizador alcanza su máximo valor para la velocidad de reacción, el sistema de alambres catalíticos tiene para este número de Peclet el 95% de eficiencia.

#### **4.7.4. Resultados caso $Pe = 7.2$**

A temperatura ambiente, el catalizador es poco eficiente y su eficiencia de conversión es del 0%. El sistema de alambres catalizadores aún se encuentra lejos de la temperatura de ignición(ver figuras 4.7 y 4.8), por lo que la eficiencia de conversión sigue siendo aún muy baja. Para esta temperatura, el catalizador ya alcanzó la ignición, pero todavía no tiene su mejor desempeño, su eficiencia aún se encuentra alrededor del 12%. La eficiencia del combustor a  $450K$  ya está alrededor del 60%, cambio considerable en comparación a lo que ocurría a  $400K$ , pero aún el sistema

no ha alcanzado su mayor tasa de conversión. A  $500K$  la eficiencia del sistema es ya cercana al 80 % y se encuentra cerca de su máxima velocidad de reacción. A esta temperatura se alcanza la máxima velocidad de reacción para un  $Pe = 7.2$ , la eficiencia de conversión es cercano al 90 %.

#### **4.7.5. Resultados caso $Pe = 14.4$**

Como era de esperarse, en las figuras 4.9 y 4.10, el catalizador no se encuentra funcionando pues su temperatura se halla muy por debajo de la temperatura de ignición, los campos de concentraciones de hidrógeno y oxígeno no se ven modificados por la presencia de los hilos catalíticos. Los hilos catalíticos a  $350K$ , se encuentran todavía lejos de alcanzar la temperatura de ignición, por lo que la eficiencia del sistema, aún es muy cercana a cero. A  $400K$  aunque se alcanzó ya la temperatura de ignición, la eficiencia del sistema aún es al 4 %, dado que el número de Peclet es relativamente alto la cantidad de gases reactantes que reaccionan en el sistema es baja. La ignición del gas sobre la superficie catalítica produce que se esté quemando cerca del 30 % del combustible, lo que implica una eficiencia relativamente alta, aunque todavía no se alcanza la máxima velocidad de reacción. La eficiencia del sistema aumenta a  $500K$  pero ya no considerablemente, ahora está cerca del 40 %. A  $548K$  el sistema de hilos catalíticos alcanza su máxima velocidad de reacción, para lo cual tiene cerca de un 44 % de eficiencia en términos de los gases quemados en el proceso de combustión.

#### **4.7.6. Resultados caso $Pe = 28.8$**

Igual que en todos los demás casos, el sistema a temperatura ambiente se encuentra inhibido (ver figuras 4.11 y 4.12). En las figuras se observa aún poca eficiencia en el quemado de los gases dentro del combustor. A los  $400K$  el combustor ya hizo ignición, pero aún no se encuentra a la temperatura óptima para obtener su máxima velocidad de reacción, por lo que su eficiencia es aún muy baja. El combustor se encuentra realizando el quemado de los gases con una eficiencia del 15 % y ha aumentado su velocidad de reacción. Para los  $500K$  la eficiencia ha aumentado apenas un 5 % con respecto a los  $450K$ . El sistema se encuentra ahora muy cerca de la

**4. Proceso de combustión catalítica de un gas (Hidrógeno-Aire) que cruza un arreglo de alambres.** **66**

---

máxima tasa de reacción, aunque la eficiencia es baja, dado que el número de Peclet es demasiado alto. El sistema ya ha alcanzado su máxima velocidad de reacción; sin embargo, la eficiencia del quemado del combustor catalítico es solamente del 25 %.



4. Proceso de combustión catalítica de un gas (Hidrógeno-Aire) que cruza un arreglo de alambres.

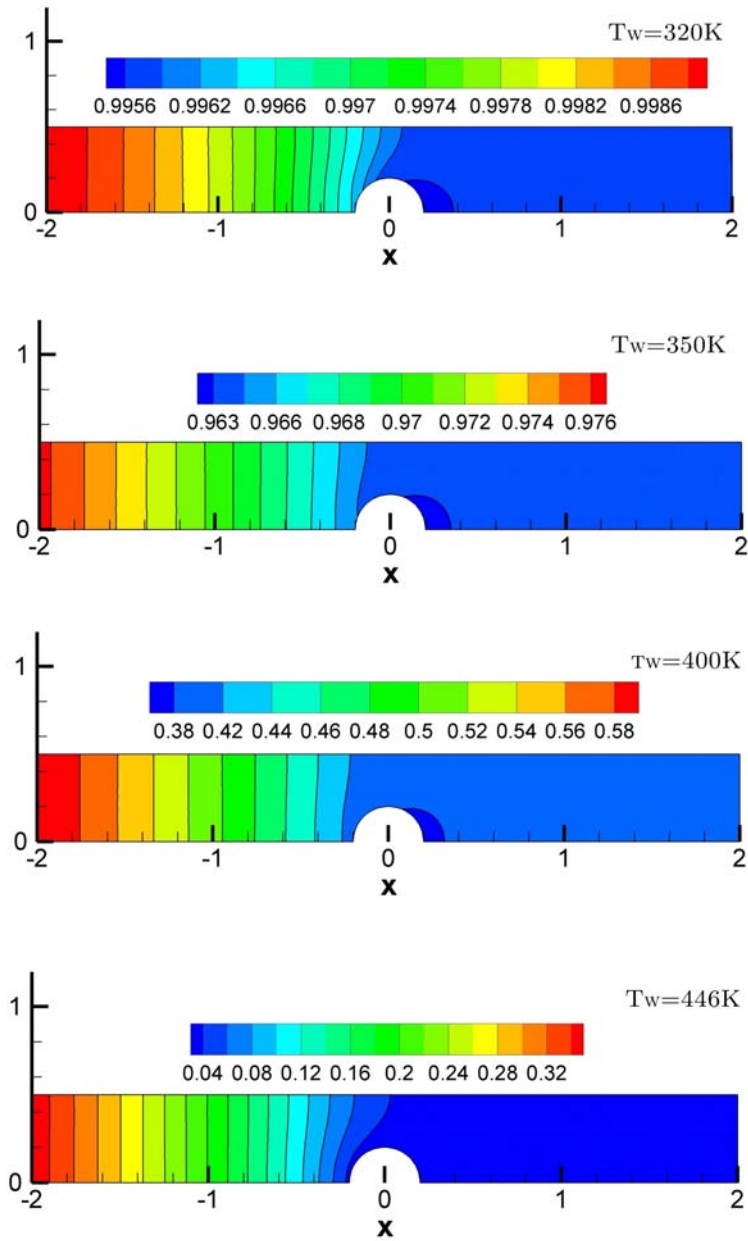


Figura 4.1: Campo de concentración de hidrógeno para el caso donde el  $Pe = 0.72$ , y con número de Lewis  $L_F = 0.3$  a distintas temperaturas.

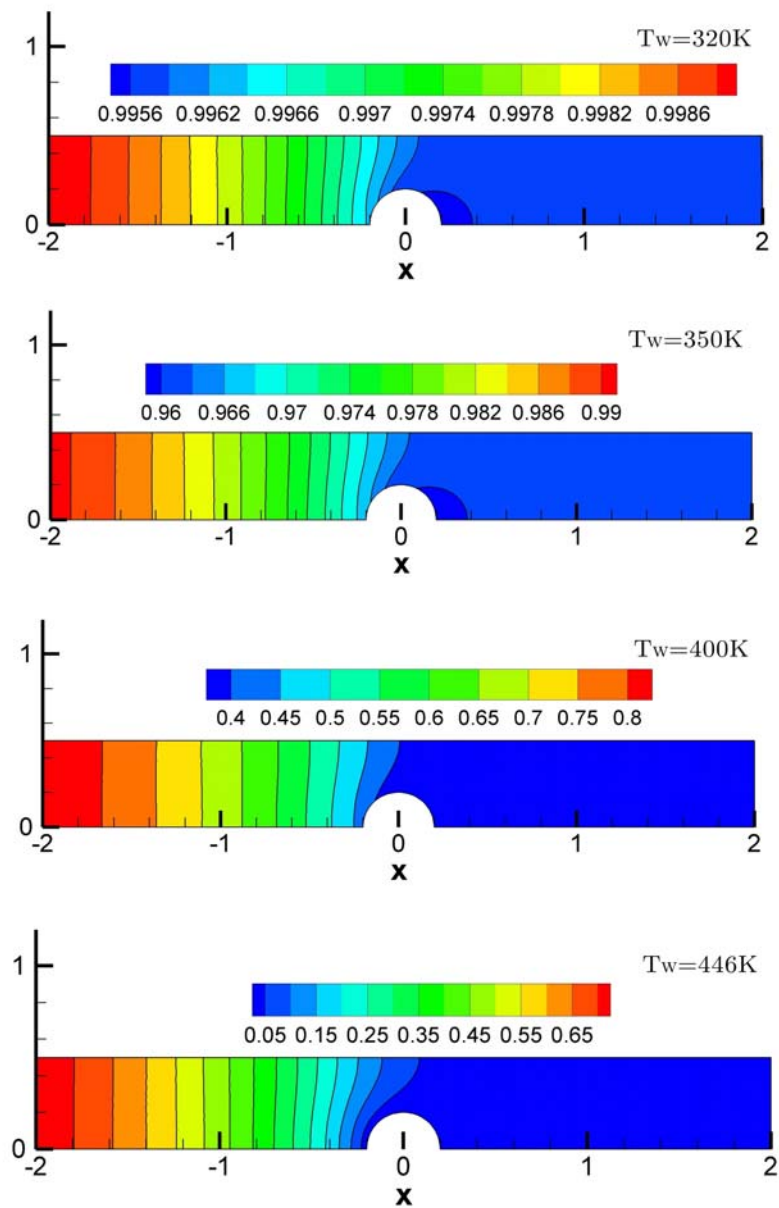


Figura 4.2: Campo de concentración de oxígeno para el caso donde el  $Pe = 0.72$ , y con número de Lewis  $L_O = 1$  a distintas temperaturas.

4. Proceso de combustión catalítica de un gas (Hidrógeno-Aire) que cruza un arreglo de alambres.

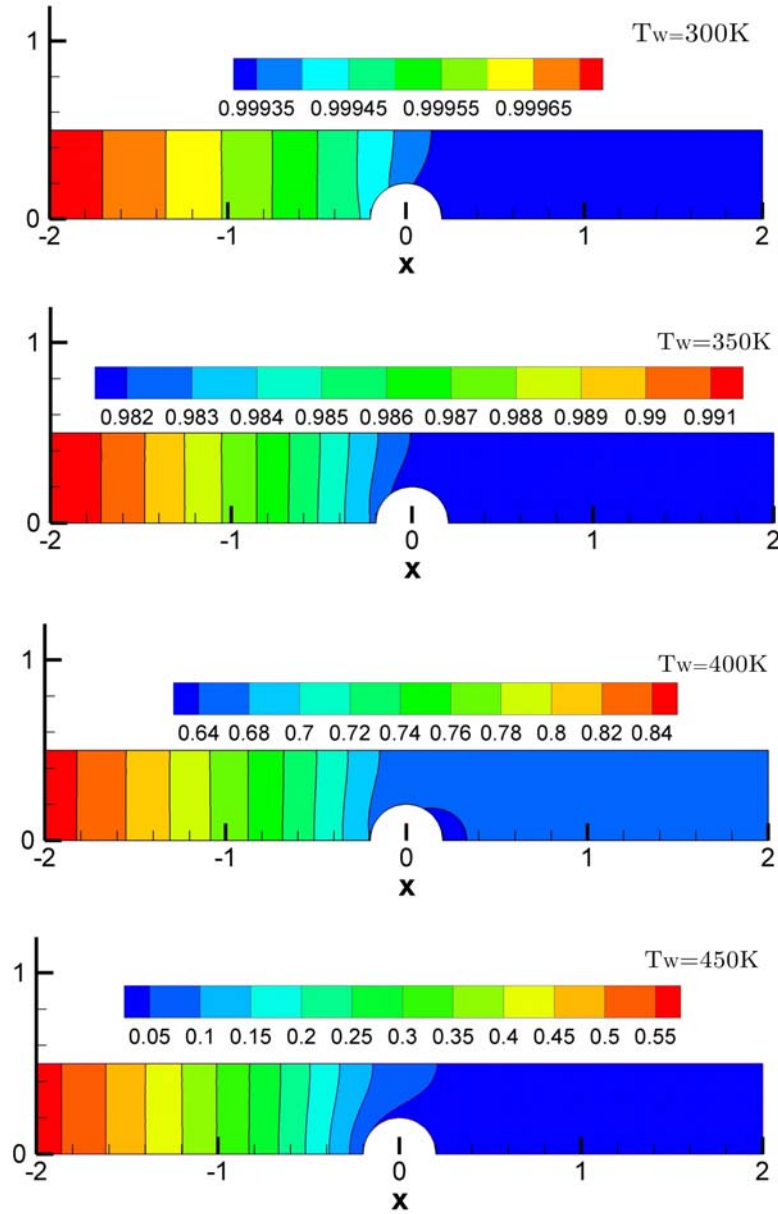


Figura 4.3: Campo de concentración de hidrógeno para el caso donde el  $Pe = 1.44$ , y con número de Lewis  $L_F = 0.3$  a distintas temperaturas.

4. Proceso de combustión catalítica de un gas (Hidrógeno-Aire) que cruza un arreglo de alambres.

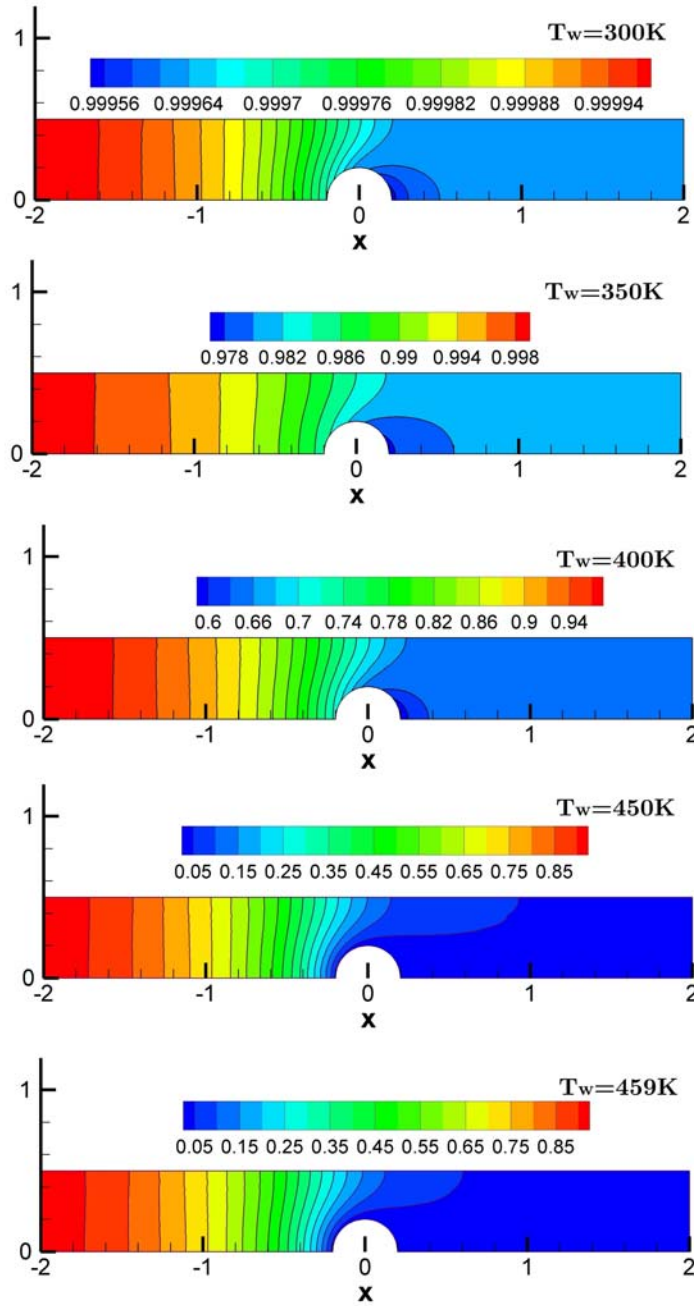


Figura 4.4: Campo de concentración de oxígeno para el caso donde el  $Pe = 1.44$ , y con número de Lewis  $L_O = 1$  a distintas temperaturas

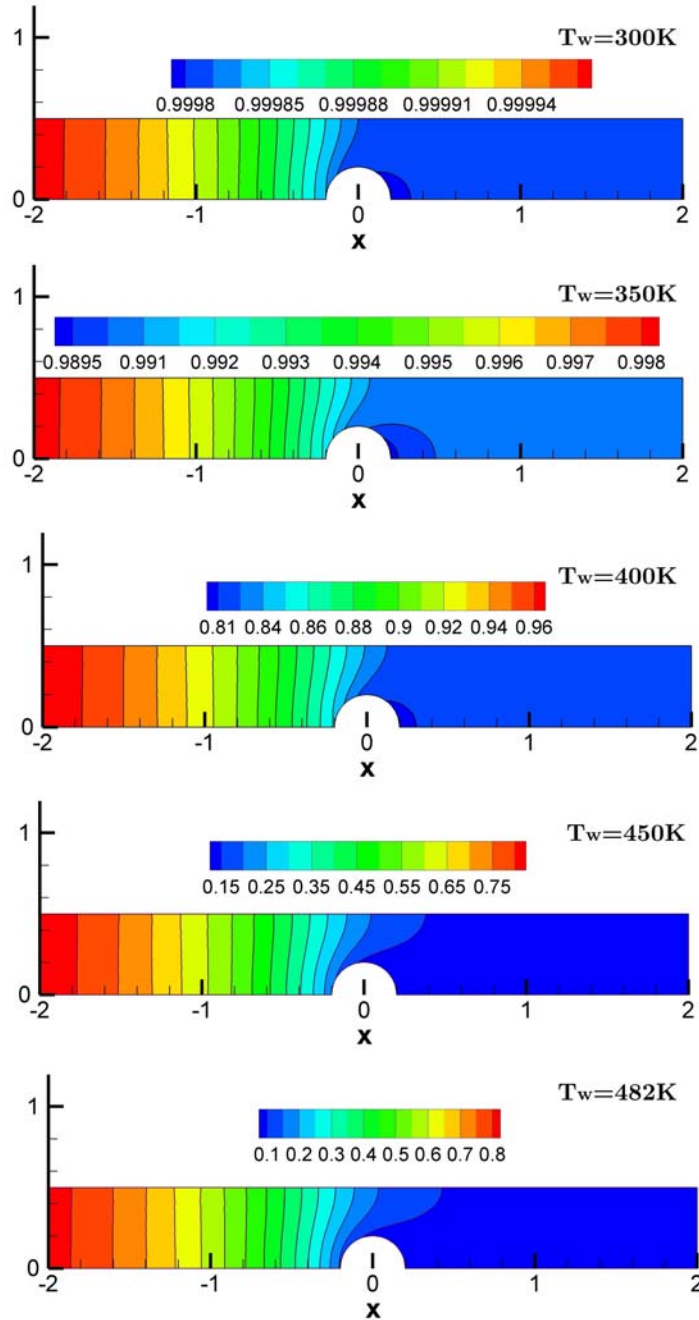


Figura 4.5: Campo de concentración de hidrógeno para el caso donde el  $Pe = 2.88$ , y con número de Lewis  $L_F = 0.3$  a distintas temperaturas.

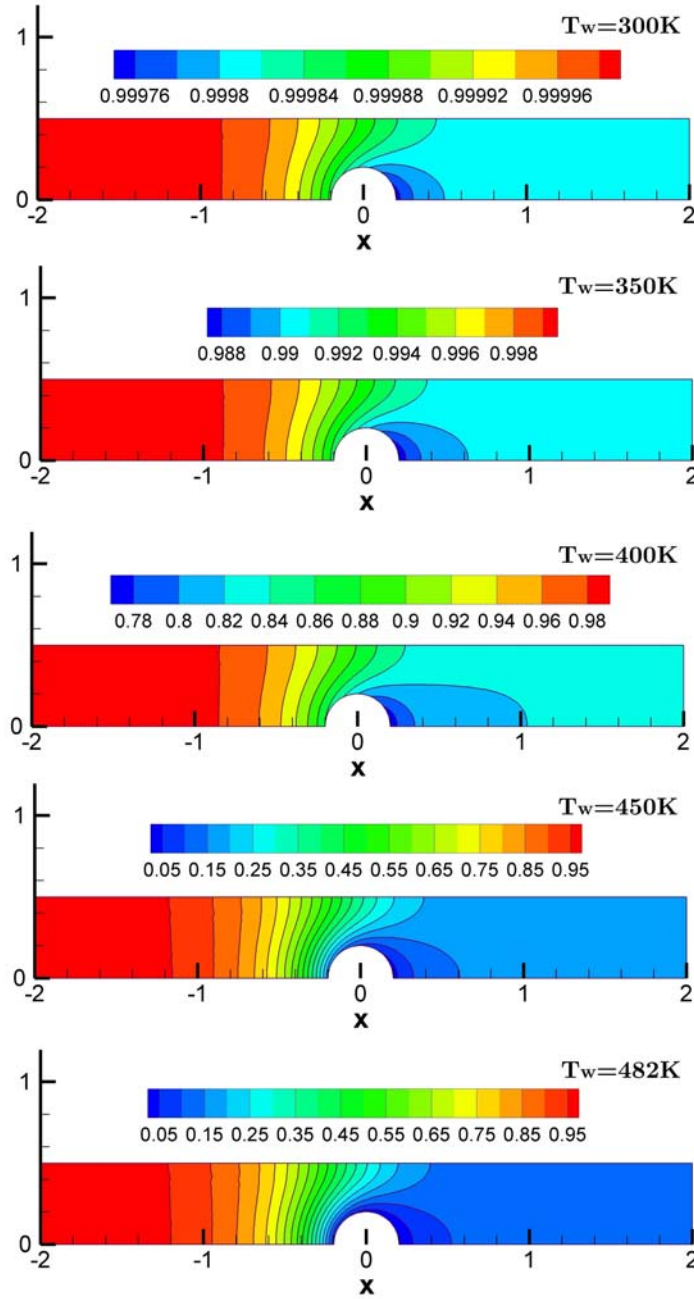


Figura 4.6: Campo de concentración de oxígeno para el caso donde el  $Pe = 2.88$ , y con número de Lewis  $L_O = 1$  a distintas temperaturas

4. Proceso de combustión catalítica de un gas (Hidrógeno-Aire) que cruza un arreglo de alambres.

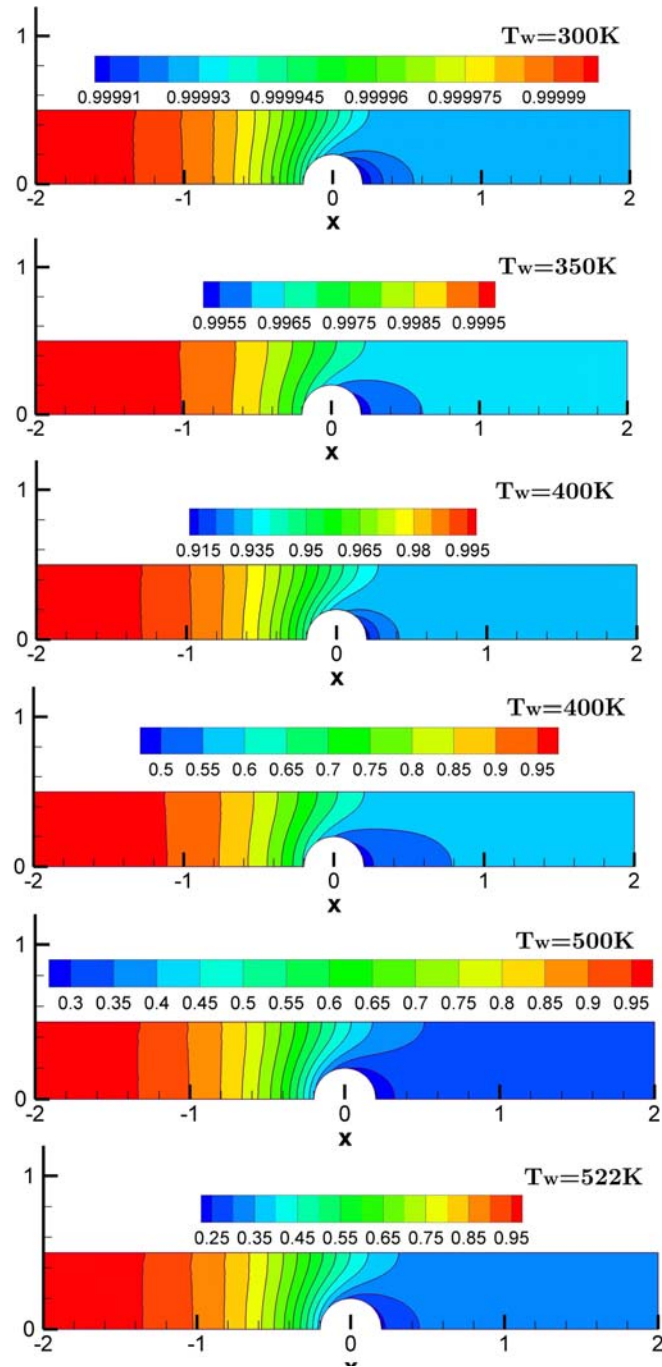


Figura 4.7: Campo de concentración de hidrógeno para el caso donde el  $Pe = 7.2$ , y con número de Lewis  $L_F = 0.3$  a distintas temperaturas.

4. Proceso de combustión catalítica de un gas (Hidrógeno-Aire) que cruza un arreglo de alambres.

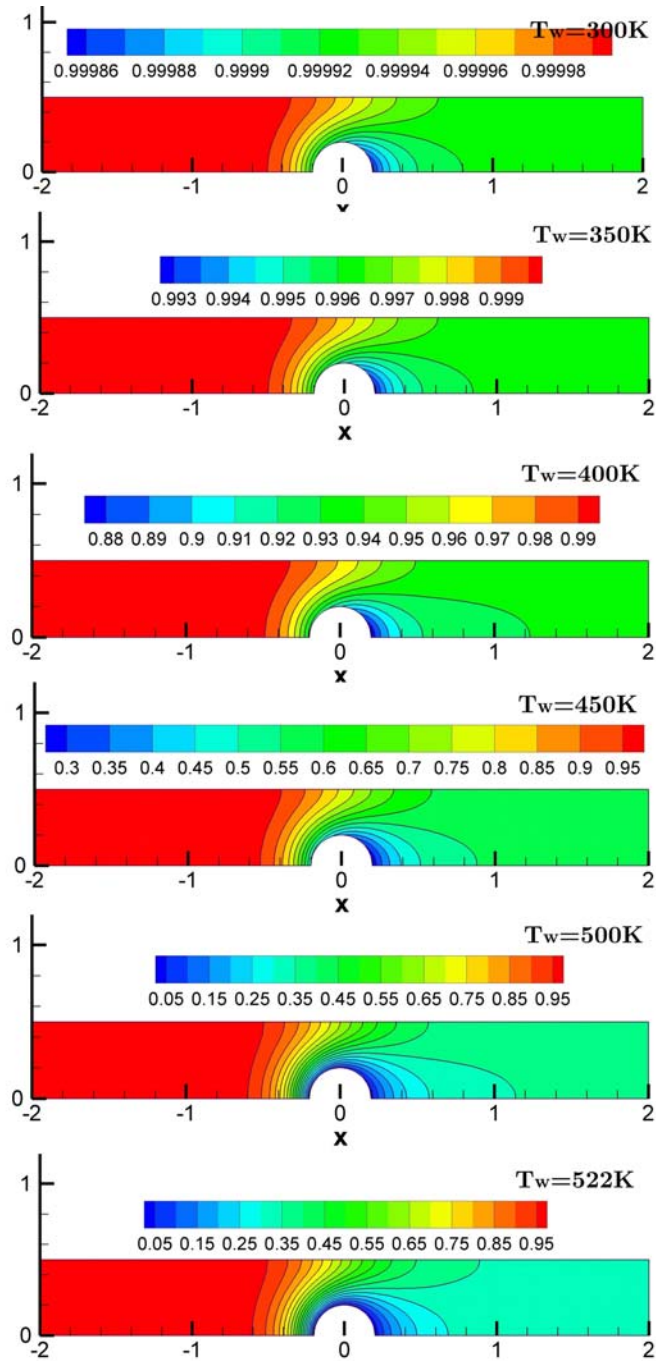


Figura 4.8: Campo de concentración de oxígeno para el caso donde el  $Pe = 7.2$ , y con número de Lewis  $L_O = 1$  a distintas temperaturas



4. Proceso de combustión catalítica de un gas (Hidrógeno-Aire) que cruza un arreglo de alambres.

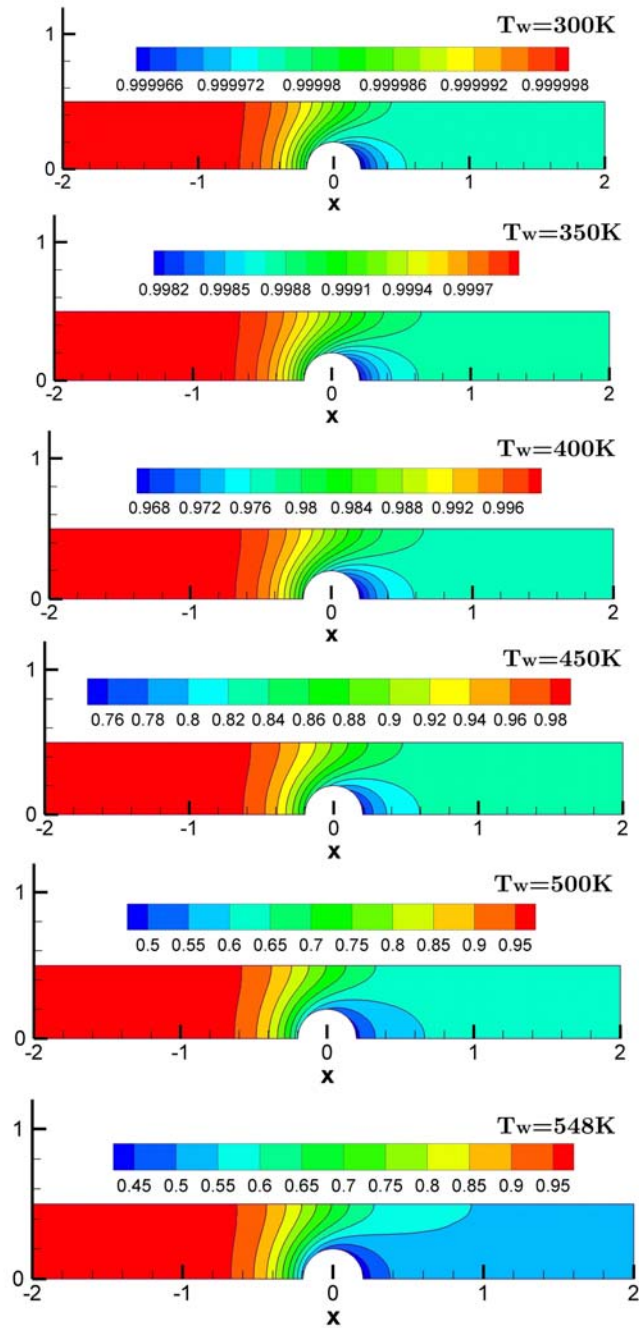


Figura 4.9: Campo de concentración de hidrógeno para el caso donde el  $Pe = 14.4$ , y con número de Lewis  $L_F = 0.3$  a distintas temperaturas.

4. Proceso de combustión catalítica de un gas (Hidrógeno-Aire) que cruza un arreglo de alambres.

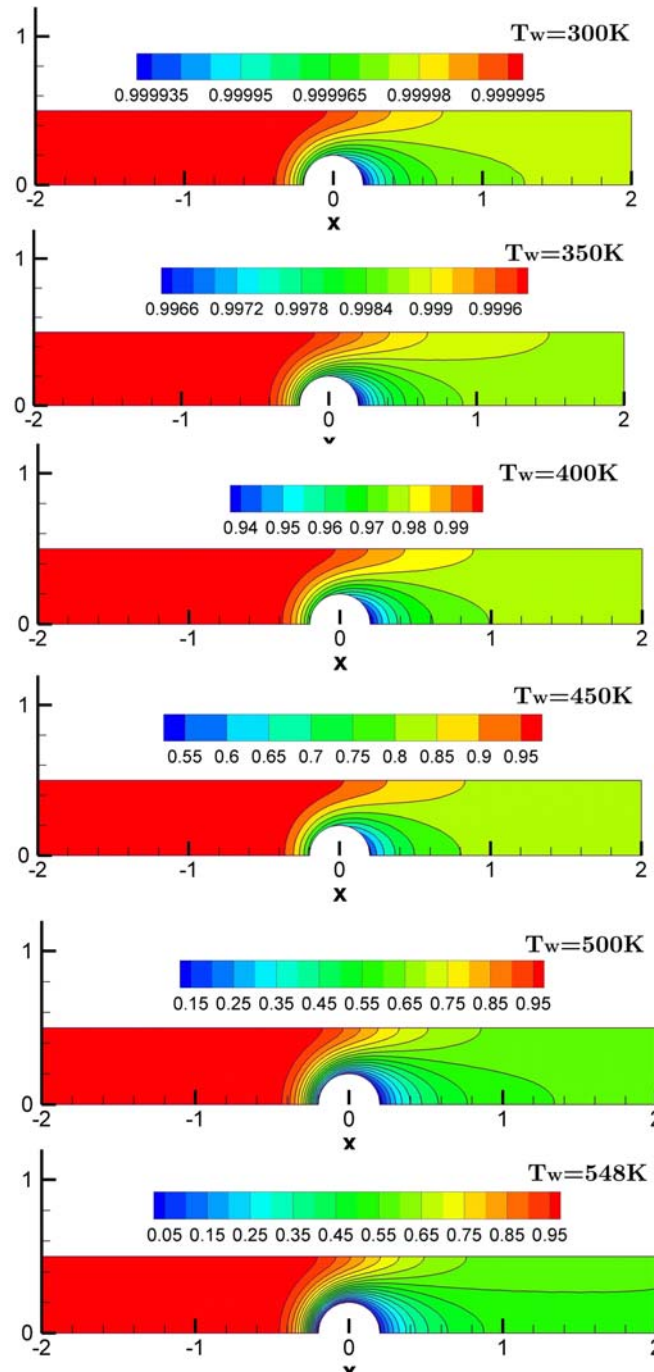


Figura 4.10: Campo de concentración de oxígeno para el caso donde el  $Pe = 14.4$ , y con número de Lewis  $L_O = 1$  a distintas temperaturas

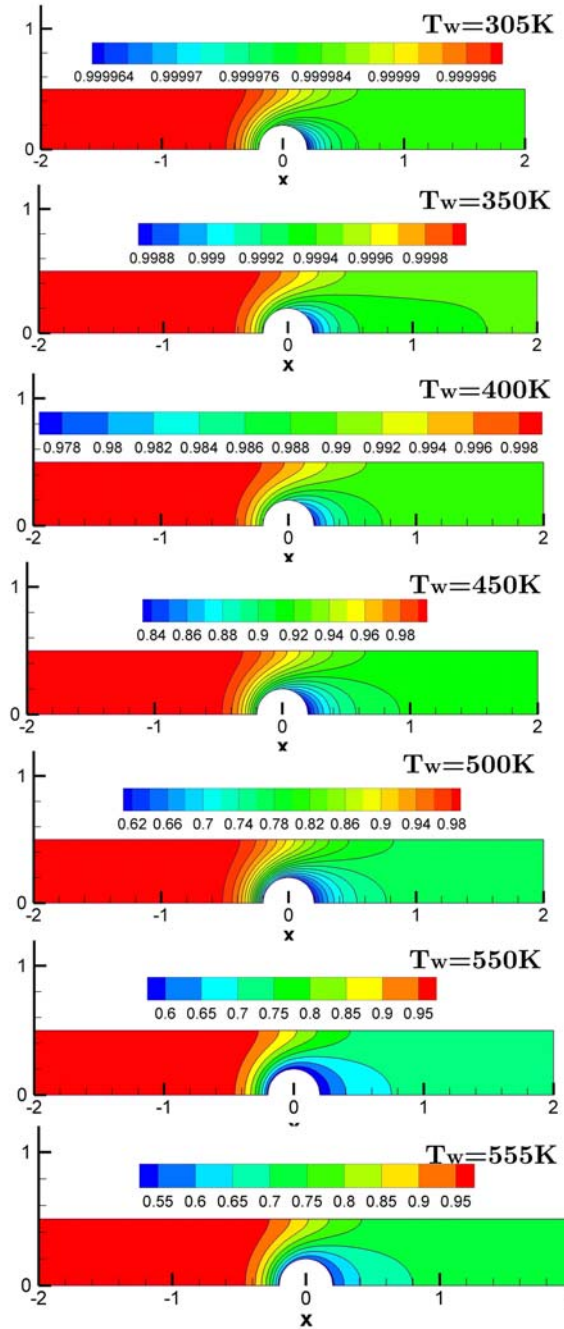


Figura 4.11: Campo de concentración de hidrógeno para el caso donde el  $Pe = 28.8$ , y con número de Lewis  $L_F = 0.3$  a distintas temperaturas.

4. Proceso de combustión catalítica de un gas (Hidrógeno-Aire) que cruza un arreglo de alambres.

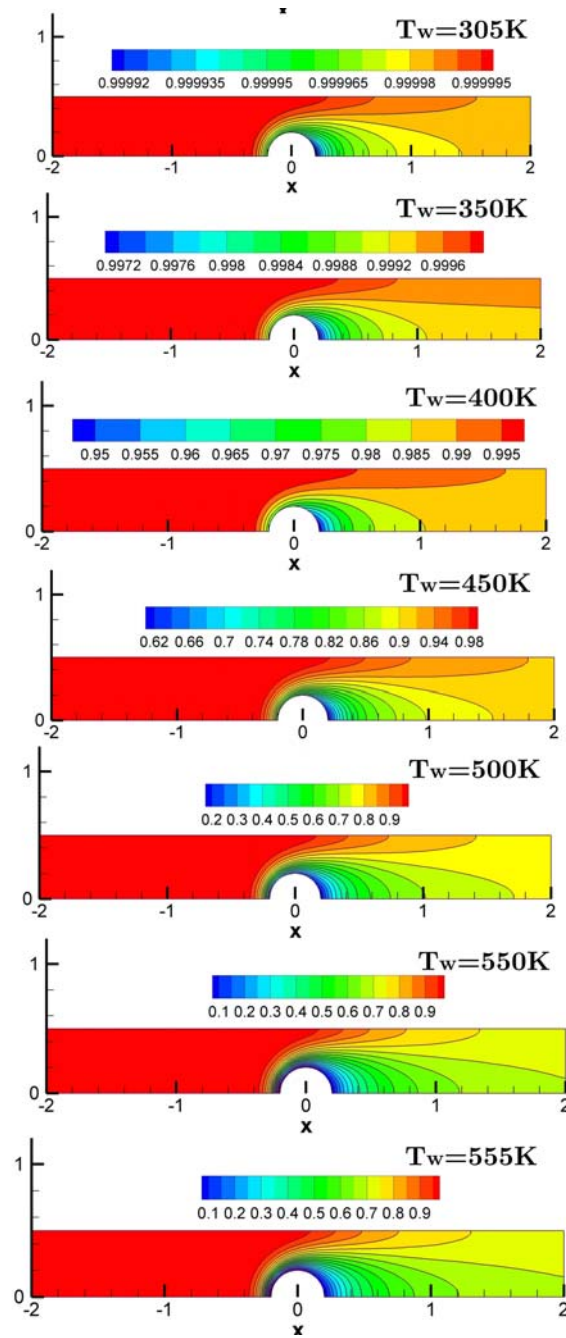


Figura 4.12: Campo de concentración de oxígeno para el caso donde el  $Pe = 28.8$ , y con número de Lewis  $L_O = 1$  a distintas temperaturas

# Capítulo 5

## Análisis de resultados

Aquí se muestran los resultados finales de este trabajo de investigación, en ellos se condensan lo obtenido de la dinámica del flujo, de la transferencia de calor y de la combustión. En la primera figura 5.1 se aprecia una comparación de la temperatura del alambre catalítico con y sin reacción, en función del número de Peclet; de la solución numérica se observa cómo la temperatura de ignición del alambre aumenta como función del número de Peclet, cuando el número de Peclet disminuye a órdenes mucho menores que la unidad, es posible intuir que la ignición se da a temperatura ambiente; aunado a esto se ve la contribución de la energía de reacción cuando solamente tenemos la temperatura del alambre. El Peclet crítico para que la ignición se dé a temperatura ambiente, como se ve en la gráfica, es de  $Pe^* = 0,056$ .

En esta figura, 5.2, se muestra a la velocidad de reacción  $\omega$  como función de la temperatura de los alambres para distintos números de Peclet, en ella es posible inferir que la velocidad de reacción aumenta con el número de Peclet para temperaturas del orden de los  $1000K$ , no obstante, el aumento en la tasa de reacción no implica el aumento en la eficiencia del sistema, sino lo contrario; a pesar de que la tasa de reacción es alta, la función de la eficiencia va en decremento con el aumento del número de Peclet.

Uno de los principales resultados de esta investigación, puede verse en la figura 5.3, donde claramente podemos observar que la energía absorbida por el sistema en el punto donde la función alcanza un máximo local, se corresponde con la temperatura

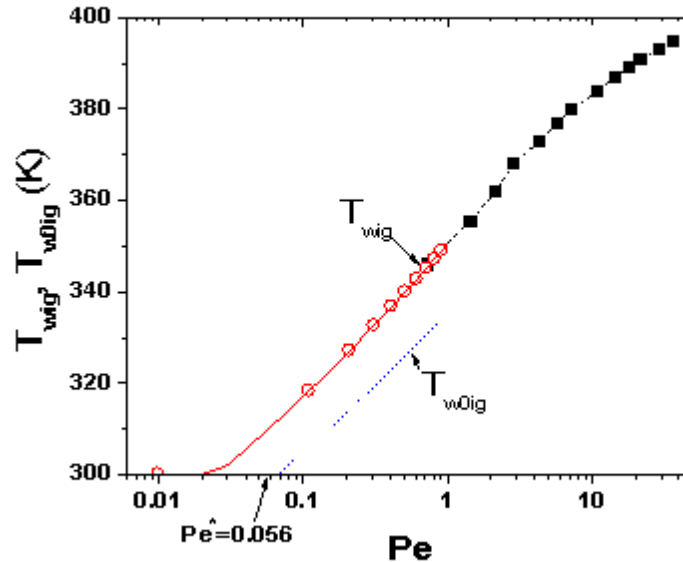


Figura 5.1: La figura muestra la temperatura de ignición  $T_{wig}$  y de la temperatura del alambre  $T_{w0ig}$ , como función del número de Peclet. Los círculos muestran el resultado asintótico, mientras que los cuadros, la solución numérica.

de ignición del sistema; la función encuentra un mínimo alrededor de los  $600K$ , para después, volver a cruzar el punto donde la energía necesaria para mantener al sistema es cero; es, precisamente, alrededor de los  $800K$ , para casi todos los números de Peclet, donde se encuentra la temperatura de operación del combustor catalítico, punto que la persona que diseñe un intercambiador deberá tomar en cuenta para mantener el máximo de combustible quemado en función de la mínima energía utilizada. Energía externa necesaria para la combustión como función de la temperatura del alambre para distintos números de Peclet.

En esta figura, 5.4, se muestra el  $q_e$  como función del número de Peclet, dado que este valor es adimensional, se ve claramente como el  $q_e$  se ve afectado en términos inversamente proporcionales al número de Peclet para la temperatura donde se da la ignición.

En la figura 5.5, se muestra la eficiencia del combustor en términos de la temper-

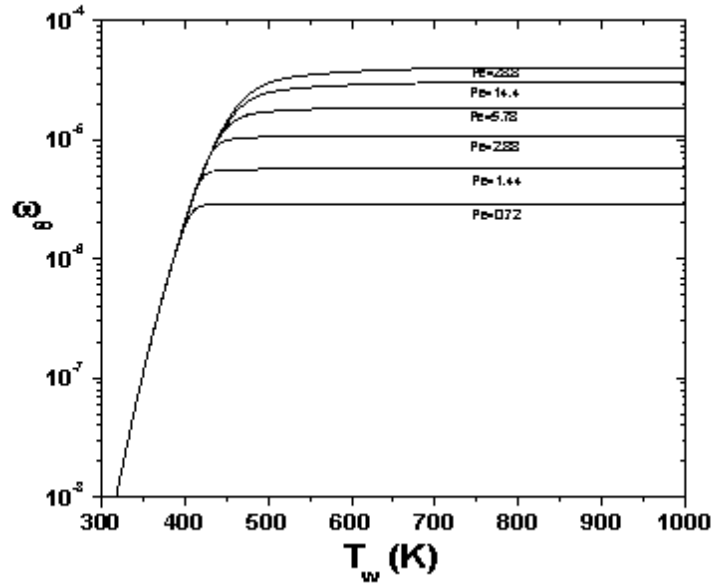


Figura 5.2: La figura muestra a la velocidad de tasa de reacción como función de la temperatura para distintos números de Peclet.

atura de los hilos para distintos números de Peclet. Como puede verse en la figura, cuando el número de Peclet es pequeño, la eficiencia terminal del sistema es casi de un 96%; en cambio, cuando el número de Peclet aumenta, su eficiencia disminuye al 30%, con lo que queda claro que el número de Peclet no puede ser muy alto cuando se considere el diseño de un buen combustor.

La figura 5.6 muestra la comparación de la eficiencia obtenida del análisis asintótico para bajos números de Peclet en comparación de las soluciones numéricas obtenidas del integrador elíptico. Se nota una ligera discrepancia que se debe a que el análisis asintótico no se acerca lo suficiente a la solución numérica, pero sí es claro que el comportamiento es muy semejante.

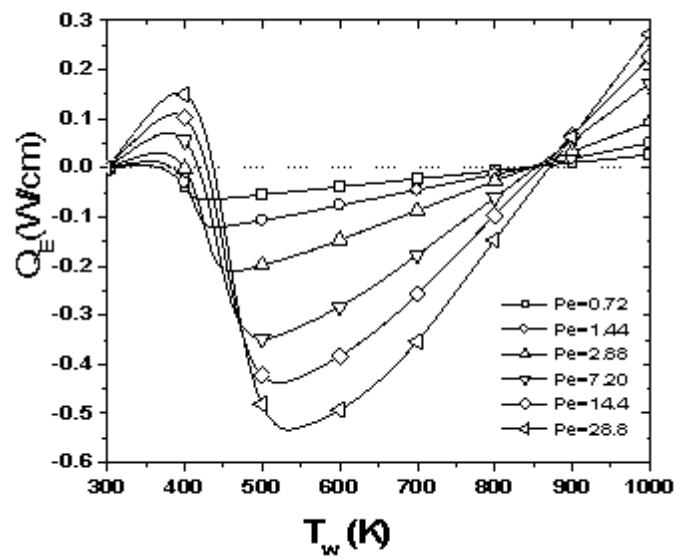


Figura 5.3: Energía externa necesaria para la combustión como función de la temperatura del alambre para distintos números de Peclet.



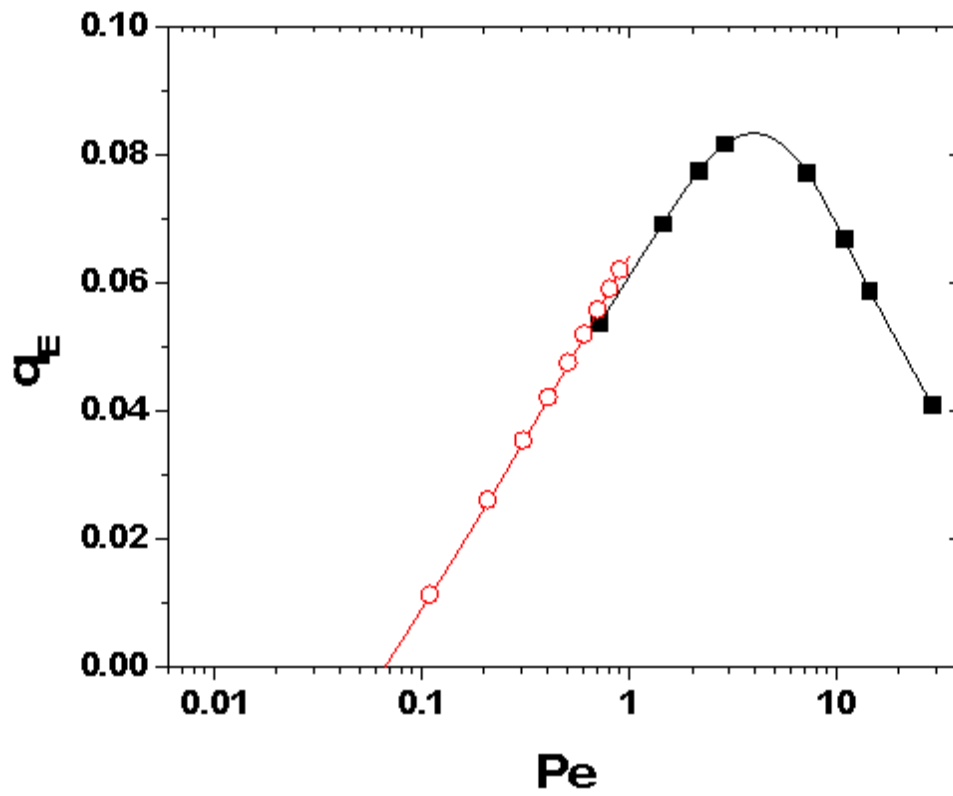


Figura 5.4: Energía externa necesaria en forma adimensional como una función del número de Peclet. Los resultados numéricos son representados a través de los cuadros, mientras que la solución asintótica es graficada como círculos.

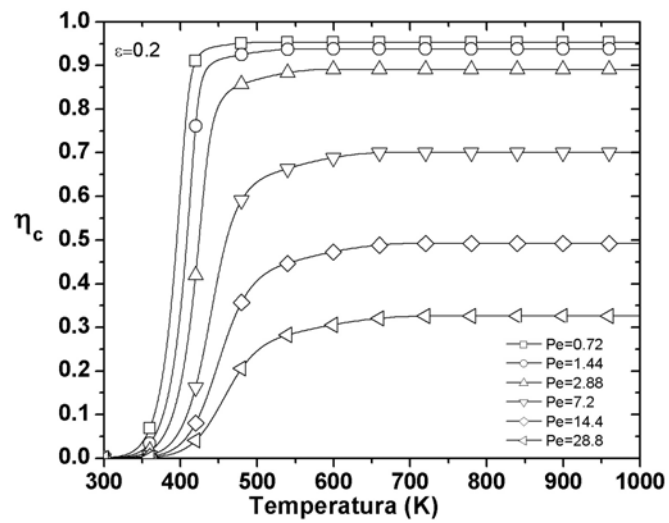


Figura 5.5: Se muestra la eficiencia de conversión total como una función de la temperatura del alambre para distintos números de Peclet.

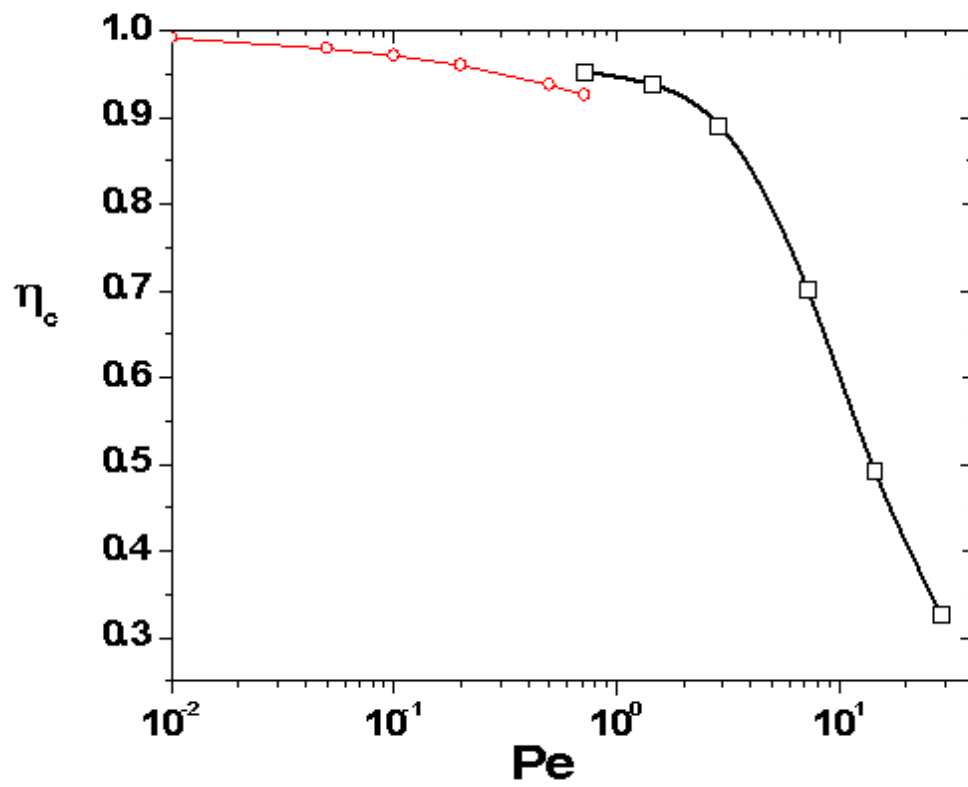


Figura 5.6: La figura muestra la eficiencia terminal para cada uno de los arreglos de hilos catalíticos como función del número de Peclet.

# Capítulo 6

## Conclusiones

El estudio del proceso de combustión catalítica en geometrías complejas, en específico, a través de un arreglo de hilos representa un campo amplio de análisis donde la comprensión del problema y el desarrollo de teoría permitan dar aportaciones al diseño y al desarrollo de combustores catalíticos con base en la mezcla de hidrógeno-aire.

A lo largo de esta investigación, se logró desarrollar un código numérico que realizara la transformación del espacio físico a un espacio computacional cartesiano normalizado a la unidad, a través de la utilización de métodos de generación de mallas elípticas. El desarrollo de este código dio la pauta para resolver las ecuaciones que rigen al flujo de gas, ya que se trata de ecuaciones diferenciales parciales no lineales, del tipo elíptico. De este proceso se obtuvieron primero el desarrollo del flujo de gas a través del cilindro por medio de líneas de corriente y líneas de vorticidad, donde para números de Reynolds de orden unidad, el flujo de gas que cruzaba el arreglo se recuperaba casi completamente, por lo que las líneas de vorticidad eran casi simétricas; para el caso donde el número de Reynolds aumentaba hasta orden 10, las líneas de corriente no se recuperaban de la misma manera, teniendo que aplicar métodos de perturbación para ajustar el desarrollo de la estela formada aguas abajo del cilindro, lo que significa que las líneas de vorticidad mostraban un mayor esfuerzo de deformación al frente del cilindro a  $115^\circ$ , al tiempo que éstas se elongaban aguas abajo del cilindro. Para números de Reynolds mayores de 30 se aplicaron las mismas técnicas que para los casos anteriores pero se encontró que para

el número de Reynolds 40, aparecía la recirculación detrás del cilindro, formando ya una estela visible; este resultado ya se había obtenido de manera teórica, numérica y experimental para el caso del cilindro y dio la pauta para demostrar que el método numérico utilizado era capaz de simular la naturaleza del problema. Para números de Reynolds más altos, aunque era posible hacer una simulación, no se realizó, dado que en el estado del arte se había ya reportado que aparecían inestabilidades que generaban, a la larga, el fenómeno conocido como la calle de Von Karman".

Una vez obtenidos los resultados anteriormente descritos, se inició con la resolución de la transferencia de calor, tomando en cuenta que se trata de un problema de convección forzada, se utilizó la ecuación de la energía para entender el proceso a resolver. Para todos los números de Peclet se obtuvo el campo de temperaturas del sistema, tomando en cuenta que la longitud de la malla computacional en el espacio en  $x$  se encontraba delimitada entre  $-2$  y  $2$ , se aplicó una corrección a la condición de frontera aguas arriba del sistema, con la finalidad de reescalar el espacio para considerar el proceso de difusión a números de Peclet de orden unidad. El parámetro que describió la transferencia de calor entre el flujo de gas y los hilos catalíticos fue el número de Nusselt. Obtenido, para el caso donde el número de Peclet es pequeño comparado con la unidad, por medio de métodos de perturbación y teoría asintótica [41], y comparado con el resultado numérico encontramos una excelente aproximación de los resultados.

Los resultados obtenidos de la dinámica del gas, junto con los de la transferencia de calor del arreglo de hilos hacia el gas, permitieron entender el proceso de combustión catalítica que se da, cuando el flujo de gas está compuesto por una mezcla de hidrógeno-aire e incide sobre la superficie de los hilos catalíticos compuestos por paladio. Se resolvieron las ecuaciones de concentraciones de especie para el hidrógeno y el oxígeno en forma acoplada, donde la reacción se daba sobre la superficie del arreglo. Se estudió, primero, el balance entre el calor liberado por el cilindro vía transferencia de calor y el calor absorbido o cedido por la reacción hasta encontrar la temperatura de ignición del sistema, que para los números de Peclet estudiados, se encontraba en el rango de los  $345K$  a los  $390K$ , la tasa de reacción del sistema tendía a ser constante para cuando la temperatura aumentaba significativamente del orden de los  $600K$ . La eficiencia que mide la relación entre el

flujo de masa entrante y el flujo de masa que reaccionaba, aumentaba para el caso en el que el número de Peclet disminuía, lo cual resulta poco útil en términos del diseño de combustores, debido a que implica escalas de alambres extremadamente pequeños, lo que significa utilizar más bien fibras o medios porosos; pero representa una muy buena opción para el caso en el que el número de Peclet es del orden de 5, caso en el que la eficiencia disminuye al 70 %, pero el dispositivo diseñado para el combustor es más factible de elaborar. La temperatura de operación del sistema se encuentra alrededor de los  $800K$ , a la cual el calor cedido por la transferencia, del hilo hacia el gas, y el absorbido por la reacción, son iguales y la flama se encuentra estable; a esa temperatura el dispositivo puede trabajar sin la necesidad de ceder más temperatura al sistema y con la seguridad de que la tasa de reacción alcanzó su máximo valor.

Todo lo enunciado hasta ahora, representa una aportación práctica al diseño de combustores; sin embargo, aún existe camino por recorrer. Así, aún es posible extrapolar estos métodos para casos de mezclas con otros gases reactantes como por ejemplo el metano u otros materiales catalíticos como el platino y los cerámicos. Además, no se encuentra considerado el cambio de la densidad en función de la temperatura, estudio que aportaría mayor precisión en el desarrollo del combustor; por otra parte, el desarrollar la funcionabilidad de estos sistemas para otro tipo de geometrías y para otras configuraciones de arreglos como el intercalar mallas permitiría aumentar la eficiencia en el quemado de los gases reactantes. Todos estos son estudios que pueden desarrollarse en un futuro tomando como base el aquí presentado, y que ayudarían a profundizar la eficiencia en el diseño de combustores.

# Bibliografía

- [1] Kovasznay, L. I. G. "Laminar flow behind a two-dimensional grid", Proc. Camb. Philos. Soc. 44, pp. 58-62, 1948
- [2] Tamada k. and h. Fujikawa, "the steady two-dimensional flow of viscous fluid at low reynolds numbers passing through an infinite row of equal parallel circular cylinders", q j mechanics appl math 1957 10: 425-432;
- [3] Miyagi T 1958 Viscous flow at low Reynolds number past an infinite row of equal circular cylinders J. Phys.Soc. Japan 13 493
- [4] Happel C.and Kuwabara C.,Viscous flow in multiparticle systems: slow motion of fluids relative to beds of spherical particles, AIChE J. 4 (1958), 197–201.
- [5] J. Happel and H. Brenner, Low Reynolds Number Hydrodynamics with Special Applications to Particulate Media, Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht, 1986
- [6] M. Kawaguti, 'Numerical Solution of the NS Equations for the Flow Around a Circular Cylinder at Reynolds Number 40', Journal of Phy. Soc. Japan, vol. 8, pp. 747-757, 1953.
- [7] A.Thom, 'The Flow Past Circular Cylinders at Low Speeds', Proc. Royal Society, A141, pp. 651-666, London, 1933
- [8] Hasimoto H 1959 On the periodic fundamental solutions of the Stokes equations and their application to viscous flow past a cubic array of spheres J. Fluid Mech. 5 317
- [9] Hamielec, A. C., and J. D. Raal, Numerical studies of viscous flow around a circular cylinder. Phys. Fluids, 12, 11–221969.
- [10] Takami, H., and H. B. Keller, 1969: Steady two-dimensional viscous flow of an incompressible fluid past a circular cylinder. Phys. Fluid, Suppl. II, 51–56.

- 
- [11] Cole, J., and Roshko, A., 1954, "Heat Transfer From Wires at Reynolds Numbers in the Oseen Range", Proceeding of Heat Transfer and fluid Mechanics Institute, University of California, Berkeley, CA, pp. 13-23.
- [12] Illingworth, C. R., 1963, "Flow at Small Reynolds Numbers", in Laminar Boundary Layers L. Rosenhead, ed., Clarendon Press, Oxford.
- [13] Hieber, C. N., and Gebhart, B., 1968, "Low Reynolds Number Heat Transfer from a Circular Cylinder", J. Fluid. Mech., Vol. 32, pp. 21-28.
- [14] Dennis, S.C. R., Hudson, J.D., and Smith, N., 1968, "Steady Laminar Forced Convection From a Circular Cylinder at Low Reynolds Numbers", Physics of Fluids, Vol. 11, pp. 933-940.
- [15] Collis, D. S., and Williams, M. J., 1959, "Two-Dimensional Convection From Heated Wires at Low Reynolds Numbers", J. Fluid Mech. Vol. 6, pp. 357-384
- [16] Kurdyumov, V. N., and Fernández, E., 1998, "Heat Transfer From a Circular Cylinder at Low Reynolds Numbers", J. Heat Transfer, Vol. 120, pp. 72-75.
- [17] D. Gordon, Numerical Calculation on viscous flow fields through cylinder arrays, Computers and Fluids, vol. 6 pp.1-13, 1978.
- [18] T.-S. Wung and C. J. Chen, Finite analytic solution of convective Heat Transfer for tube arrays in Crossflow: Part I, Flow Field Analysis, J. Heat Transfer, vol. 111, pp. 633-640, Aug. 1989.
- [19] C. J. Chen and T.-S. Wung, Finite analytic solution of convective Heat Transfer for tube Arrays in Crossflow: Part II, Heat Transfer Analysis, J. Heat Transfer, vol. 111, pp. 641-648, Aug. 1989.
- [20] Y.Q. Wang, L. A. Penner, and S. J. Ormiston, Analysis of laminar forced convection of air for crossflow in bank of staggered tubes, Numerical Heat Transfer Part A. vol. 38, pp.819-845, 2000.
- [21] E. Buyruk, M.W. Johnson and I. Owen, Numerical and experimental study of flow and heat transfer around a tube in crossflow at low Reynolds number, International Journal of Heat and Fluid Flow, Vol.19, pp. 223-232,1998.
- [22] Wang W and Sangani A S 1997 Nusselt number for flow perpendicular to arrays of cylinders in the limit of small Reynolds and large Peclet numbers Phys. Fluids 9 1529



- [23] P. Cho, C. K. Law, Catalytic Ignition of Fuel/Oxygen/Nitrogen Mixtures over Platinum. *Combustion and Flame*, **66**: 159-170 (1986)
- [24] Bui, P.-A., D. G. Vlachos and P. R. Westmoreland, "Homogeneous ignition of hydrogen-air mixtures over platinum", *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, 1763 (1996).
- [25] Bui, P.-A., D. G. Vlachos and P. R. Westmoreland, "Modeling ignition of catalytic reactors with detailed surface kinetics and transport: Oxidation of H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> mixtures over platinum surfaces", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **36**, 2558 (1997).
- [26] Deutschmann, O., R. Schmidt, F. Behrendt and J. Warnatz, J., "Numerical modeling of catalytic ignition", *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, 1747 (1996).
- [27] Ertl, G., "Chemical dynamics in surface reactions", *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, **86**, 425 (1982).
- [28] Fassihi, M., V. P. Zhdanov, M. Rinnemo, K.-E Keck and B. Kasemo, "A theoretical and experimental study of catalytic ignition in the hydrogen-oxygen reaction on platinum", *Journal of Catalysis*, **141**, 438 (1993).
- [29] Ljungström, S., B. Kasemo, A. Rosen, T. Wahnström and E. Fridell, *Surf. Sci.*, **216**, 63 (1989).
- [30] Rinnemo, M., M. Fassihi and B. Kasemo, "The critical condition for catalytic ignition. H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> on Pt", *Chemical Physics Letters*, **211(1)**, 60 (1993).
- [31] Song, X., W. R. Williams, L. D. Schmidt and Aris, R., *Twenty-third Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, 1129 (1990).
- [32] Treviño, C. and A. C. Fernández-Pello, "Catalytic flat plate boundary layer ignition", *Combust. Sci. Tech.*, **26**, 245 (1981).
- [33] Treviño, C., Gas-phase ignition of premixed fuel by catalytic bodies in stagnation flow", *Combust. Sci. Tech.*, **30**, 213 (1983).
- [34] Treviño, C., "An asymptotic analysis of the catalytic ignition in a stagnation-point flow", submitted to *Combustion Theory and Modelling* (1998).
- [35] Treviño, C. and F. Méndez, "Ignition of Catalytic reactions in a vertical plate immersed in a combustible gas", *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, 1797 (1996).

- [36] Treviño, C. and N. Peters, "Gas-Phase Boundary Layer Ignition on a Catalytic Flat Plate with Heat Loss", *Combust. Flame*, **61**, 39 (1985).
- [37] Vesper, G. and L. D. Schmidt, "Ignition and extinction in the catalytic oxidation of hydrocarbons over platinum", *AIChE Journal*, **42(4)**, 1077 (1996).
- [38] Warnatz J., Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, 553 (1992).
- [39] Warnatz, J., M. D. Allendorf, R. J. Kee and M. Coltrin, "A model of elementary chemistry and fluid mechanics in the combustion of hydrogen on platinum surfaces", *Combustion and Flame*, **96**, 393 (1994).
- [40] Williams, W. R., C. M. Marks and L. D. Schmidt, "Steps in the reaction  $H_2 + O_2 \rightleftharpoons H_2O$  on Pt:  $OH$  desorption at high temperatures", *J. Phys. Chem.*, **96**, 5922 (1992).
- [41] M.Vera and A. Liñán, Low Peclet number flow of reacting mixture past an array of catalytic wires, *Combustion Theory and Modeling*, vol. 8 pp. 97-121, 2004.
- [42] C. Treviño, A.Liñán and V. Kurdyumov, Autoignition in Hydrogen/Air mixtures by a thin catalytic wire, *Proceedings of Combustion Institute*, vol. 28 pp.1359-1364, 2000.
- [43] C. Treviño, F.J. Higuera and A. Liñán, Transient Ignition and combustion of diluted Hydrogen/Air mixtures by a thin catalytic wire, *Proceedings of Combustion Institute*, vol. 29 pp. 981-988, 2002.
- [44] Thompson, Joe F., Warsi, Z. U. A. and Mastin, C. W., "Boundary-Fitted Coordinate Systems for Numerical Solution of Partial Differential Equations – A Review", *Journal of Computational Physics*, 47, 1, 1982.
- [45] Thompson, Joe F. (Ed.) *Numerical Grid Generation*, North-Holland 1982. (Also published as Vol. 10 11 of *Applied Mathematics and Computation*, 1982).
- [46] Smith, Robert E., (Ed), *Numerical Grid Generation Techniques*, NASA Conference Publication 2166, NASA Langley Research Center, 1980.
- [47] Ghia, K. N. and Ghia, U., (Ed), *Advances in Grid Generation*, FED-Vol. 5, ASME Applied Mechanics, Bioengineering, and Fluids Engineering Conference, Houston, 1983.

- 
- [48] Thompson, Joe F., "Grid Generation Techniques in Computational Fluid Dynamics", *AIAA Journal*, 22, 1505, 1984.
- [49] Halsey, Douglas, "Conformal Grid Generation for Multi-element Airfoils", *Numerical Grid Generation*, Ed. Joe F. Thompson, North-Holland, 585, 1982.
- [50] Ives, David C., "Conformal Grid Generation", *Numerical Grid Generation*, Ed. Joe F. Thompson, North-Holland, 107, 1982.
- [51] Smith, Robert E., "Three-Dimensional Algebraic Grid Generation", *AIAA-83-1904*, *AIAA 6th Computational Fluid Dynamics Conference*, Danvers, Massachusetts, 1983.
- [52] Thompson, J. F. and Warsi, Z. U. A., "Three-Dimensional Grid Generation from Elliptic Systems", *AIAA-83-1905*, *AIAA 6th Computational Fluid Dynamics Conference*, Danvers, Massachusetts, 1983.
- [53] Coleman, Roderick M., "Generation of Boundary-Fitted Coordinate Systems Using Segmented Computational Regions", *Numerical Grid Generation*, Ed. Joe F. Thompson, North-Holland, 633, 1982.
- [54] Rubbert, P. E. and Lee, K. D., "Patched Coordinate Systems", *Numerical Grid Generation*, Ed. Joe F. Thompson, North-Holland, 235, 1982.
- [55] Thomas, P. D., "Numerical Generation of Composite Three-Dimensional by Quasilinear Elliptic Systems", *Numerical Grid Generation*, Ed. Joe F. Thompson, North-Holland, 667, 1982.
- [56] Miki, Kazuyoshi and Takagi, Toshiyuki, "A Domain Decomposition and Overlapping Method for the Generation of Three-Dimensional Boundary-Fitted Coordinate Systems", *Journal of Computational Physics*, 53, 319, 1984.
- [57] Eiseman, P. R., "Geometric Methods in Computational Fluid Dynamics", *ICASE 80-11*, NASA Langley Research Center, 1980.
- [58] White F.M., *Viscous Fluid Flow*, Second Edition, McGraw-Hill, New York, 1991
- [59] Rosner D. *Transport processes in chemically reacting flow system*, Dover publications, 2000.
- [60] Pozrikidis C 1997 *Theoretical and Computational Fluid Dynamics* (Oxford: Oxford University Press)

- [61] Anderson, D. A., J. C. Tannehill, and R. H. Pletcher, 1984: Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer. McGraw-Hill, 599 pp.
- [62] Lamb, H., 1945: Hydrodynamics. Dover, 738 pp.

# Apéndice A

## Deducción de sistema Vorticidad-Función de corriente

Si partimos de la ecuación de conservación de masa, es posible encontrar una función que satisfaga la ecuación de continuidad, esta es la denominada función de corriente y fue introducida por el matemático francés Lagrange en 1775, la función de corriente es descrita en términos de las componentes de velocidades del fluido y para el caso donde el flujo de gas es incompresible se escribe de la siguiente manera:

$$\rho u = \frac{\partial \psi}{\partial y} \quad (\text{A.1})$$

$$\rho v = -\frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (\text{A.2})$$

Donde  $\psi$  es la variable a la que llamamos función de corriente, si sustituimos los cambios de variable [A.1-A.2] en la ecuación de continuidad [2.6] es claro que se cumple.

Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho u) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) = 0$$

$$u = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial y}$$
$$v = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

Si utilizamos a la temperatura adimensional en función de la densidad del gas:

$$\varphi = \frac{1}{\rho}$$

Ecuaciones de Navier-Stokes

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(u\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v u) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\text{Re}}\frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\text{Re}}\frac{\partial u}{\partial y}\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial x}(u\rho v) + \frac{\partial}{\partial y}(v\rho v) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\text{Re}}\frac{\partial v}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\text{Re}}\frac{\partial v}{\partial y}\right)$$

Quitamos los terminos temporales

$$\frac{\partial}{\partial x}(u\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v u) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\text{Re}}\frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\text{Re}}\frac{\partial u}{\partial y}\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(u\rho v) + \frac{\partial}{\partial y}(v\rho v) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\text{Re}}\frac{\partial v}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\text{Re}}\frac{\partial v}{\partial y}\right)$$

derivamos cruzado

$$\frac{\partial}{\partial y}\left[\frac{\partial}{\partial x}(u\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v u) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\text{Re}}\frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\text{Re}}\frac{\partial u}{\partial y}\right)\right]$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial}{\partial x}(u\rho v) + \frac{\partial}{\partial y}(v\rho v) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\text{Re}}\frac{\partial v}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\text{Re}}\frac{\partial v}{\partial y}\right)\right]$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x}(u\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial y}(\rho v u) &= -\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\text{Re}}\frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\text{Re}}\frac{\partial u}{\partial y}\right) \\ &= -\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\text{Re}}\frac{\partial v}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\text{Re}}\frac{\partial v}{\partial y}\right) \end{aligned}$$

restamos la ecuaciones

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x}(u\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial y}(\rho v u) - \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}(u\rho v) - \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y}(v\rho v) \\ &= \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\text{Re}}\frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\text{Re}}\frac{\partial u}{\partial y}\right) - \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\text{Re}}\frac{\partial v}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\text{Re}}\frac{\partial v}{\partial y}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} (u\rho u) + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v u) - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} (u\rho v) - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} (v\rho v) \\
 = & \frac{1}{\text{Re}} \left[ \frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial y} + \frac{\partial^3 u}{\partial y^3} - \frac{\partial^3 v}{\partial x^3} - \frac{\partial^3 v}{\partial y^2 \partial x} \right] \\
 & \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} (u\rho u) + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v u) - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} (u\rho v) - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} (v\rho v) \\
 = & -\frac{1}{\text{Re}} \left[ \frac{\partial^2 \Omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Omega}{\partial y^2} \right]
 \end{aligned}$$

Desarrollando cada uno de los términos no-lineales de la ecuación:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} (u\rho u) &= \frac{\partial}{\partial y} \left[ u \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) + (\rho u) \frac{\partial}{\partial x} u \right] \\
 \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v u) &= \frac{\partial}{\partial y} \left[ u \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) + (\rho v) \frac{\partial}{\partial y} u \right] \\
 -\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} (u\rho v) &= -\frac{\partial}{\partial x} \left[ v \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) + (\rho u) \frac{\partial}{\partial x} v \right] \\
 -\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} (v\rho v) &= -\frac{\partial}{\partial x} \left[ v \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) + (\rho v) \frac{\partial}{\partial y} v \right]
 \end{aligned}$$

Derivado

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial y} \left[ u \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) + (\rho u) \frac{\partial}{\partial x} u \right] &= u \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) \frac{\partial u}{\partial y} + (\rho u) \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} (\rho u) \\
 \frac{\partial}{\partial y} \left[ u \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) + (\rho v) \frac{\partial}{\partial y} u \right] &= u \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) \frac{\partial u}{\partial y} + (\rho v) \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) \\
 -\frac{\partial}{\partial x} \left[ v \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) + (\rho u) \frac{\partial}{\partial x} v \right] &= -v \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) - \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) \frac{\partial v}{\partial x} - (\rho u) \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) \\
 -\frac{\partial}{\partial x} \left[ v \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) + (\rho v) \frac{\partial}{\partial y} v \right] &= -v \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) - \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) \frac{\partial v}{\partial x} - (\rho v) \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} (\rho v)
 \end{aligned}$$

La parte convectiva de la ecuación

$$\begin{aligned}
 & u \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) + u \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) - v \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) - v \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) \\
 & + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) \frac{\partial v}{\partial x} \\
 & + (\rho u) \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial x} + (\rho v) \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial y} - (\rho u) \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} - (\rho v) \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial y} \\
 & + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} (\rho u) + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) - \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) - \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} (\rho v)
 \end{aligned}$$

Ahora defino a la vorticidad en función de las velocidades [58]:

$$\begin{aligned}
& u \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) + u \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) - v \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) - v \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) \\
& + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) \left[ \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) \left[ \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right] \\
& + (\rho u) \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right] + (\rho v) \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right] \\
& + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} (\rho u) + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) - \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) - \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} (\rho v)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& u \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) + u \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) - v \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) - v \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) \\
& - \Omega \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) - \Omega \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) - (\rho u) \frac{\partial \Omega}{\partial x} - (\rho v) \frac{\partial \Omega}{\partial y} \\
& + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} (\rho u) + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) - \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) - \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} (\rho v)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& u \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} (\rho u) + u \frac{\partial^2}{\partial y^2} (\rho v) - v \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\rho u) - v \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} (\rho v) \\
& - \Omega \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) - \Omega \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) - (\rho u) \frac{\partial \Omega}{\partial x} - (\rho v) \frac{\partial \Omega}{\partial y} \\
& + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} (\rho u) + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) - \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) - \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} (\rho v) \\
& = -\frac{1}{\text{Re}} \left[ \frac{\partial^2 \Omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Omega}{\partial y^2} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& u \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} \frac{\partial \psi}{\partial y} + u \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left( -\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - v \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\partial \psi}{\partial y} - v \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \left( -\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \\
& - \Omega \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial y} - \Omega \frac{\partial}{\partial y} \left( -\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \Omega}{\partial x} - \left( -\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \frac{\partial \Omega}{\partial y} \\
& + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial \psi}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} \left( -\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} \left( -\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \\
& = -\frac{1}{\text{Re}} \left[ \frac{\partial^2 \Omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Omega}{\partial y^2} \right]
\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
& u \frac{\partial^3 \psi}{\partial x \partial y^2} - u \frac{\partial^2}{\partial y^2} \frac{\partial \psi}{\partial x} - v \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\partial \psi}{\partial y} + v \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2 \partial y} \\
& - \Omega \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} + \Omega \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \Omega}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \Omega}{\partial y} \\
& + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial y} - \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x} - \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \\
= & - \frac{1}{\text{Re}} \left[ \frac{\partial^2 \Omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Omega}{\partial y^2} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \Omega}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \Omega}{\partial y} \\
& + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \frac{\partial}{\partial x} \left( \varphi \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) - \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x} \frac{\partial}{\partial y} \left( \varphi \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \\
& - \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} \frac{\partial}{\partial x} \left( -\varphi \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \frac{\partial}{\partial y} \left( -\varphi \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \\
= & - \frac{1}{\text{Re}} \left[ \frac{\partial^2 \Omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Omega}{\partial y^2} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \Omega}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \Omega}{\partial y} \\
& + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \left( \varphi \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial y} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \\
& - \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x} \left( \varphi \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial \psi}{\partial y} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \\
& + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} \left( \varphi \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \\
& - \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \left( \varphi \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \\
= & - \frac{1}{\text{Re}} \left[ \frac{\partial^2 \Omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Omega}{\partial y^2} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial\Omega}{\partial x} + \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\Omega}{\partial y} \\
& + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}\left(\varphi\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y} + \frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x}\varphi\right) \\
& - \frac{\partial^2\psi}{\partial y\partial x}\left(\varphi\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial y}\varphi\right) \\
& + \frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y}\left(\varphi\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}\varphi\right) \\
& - \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\left(\varphi\frac{\partial^2\psi}{\partial y\partial x} + \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y}\varphi\right) \\
& = -\frac{1}{\text{Re}}\left[\frac{\partial^2\Omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Omega}{\partial y^2}\right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial\Omega}{\partial x} + \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\Omega}{\partial y} \\
& + \varphi\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}\frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial\varphi}{\partial x} - \varphi\frac{\partial^2\psi}{\partial y\partial x}\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} - \frac{\partial^2\psi}{\partial y\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial\varphi}{\partial y} \\
& + \varphi\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y}\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\varphi}{\partial x} - \varphi\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial y\partial x} - \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\varphi}{\partial y} \\
& = -\frac{1}{\text{Re}}\left[\frac{\partial^2\Omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Omega}{\partial y^2}\right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial\Omega}{\partial x} - \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\Omega}{\partial y} \\
& - \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}\frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial\varphi}{\partial x} - \frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y}\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\varphi}{\partial x} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial\varphi}{\partial y} + \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\varphi}{\partial y} \\
& = \frac{1}{\text{Re}}\left[\frac{\partial^2\Omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Omega}{\partial y^2}\right]
\end{aligned}$$

la ecuación de la vorticidad

$$\begin{aligned}
\Omega & = \frac{\partial}{\partial x}\left(-\varphi\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(\varphi\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) \\
-\Omega & = \frac{\partial}{\partial x}\left(\varphi\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\varphi\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) \\
-\Omega & = \left(\varphi\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right) + \left(\varphi\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial\psi}{\partial y} + \frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right)
\end{aligned}$$

por lo tanto las ecuaciones son

$$\begin{aligned}
 -\Omega &= \varphi \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \varphi \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \\
 &+ \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \Omega}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \Omega}{\partial y} \\
 &- \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x} \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \\
 &= \frac{1}{\text{Re}} \left[ \frac{\partial^2 \Omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Omega}{\partial y^2} \right]
 \end{aligned}$$

Para en caso donde  $\rho = 1$  las ecuaciones se reducen a:

$$\Omega = - \left[ \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right] \quad (\text{A.3})$$

Obtengo la ecuación de la vorticidad y la función de corriente:

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \Omega}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \Omega}{\partial y} = \frac{1}{\text{Re}} \left[ \frac{\partial^2 \Omega}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Omega}{\partial x^2} \right] \quad (\text{A.4})$$

En función de esta dos ecuaciones es posible hacer una descripción de la dinamica de flujo, que solamente depende de dos variables la función de corriente  $\psi$  y la vorticidad  $\Omega$ .

## Apéndice B

### Condiciones de frontera en región no lejana

Es posible hacer una formulación para valores, tanto del número de Reynolds como del número de Peclet, de orden unidad, Vera y Liñán utilizaron esta formulación para encontrar las condiciones de frontera adecuadas aguas arriba y aguas abajo del sistema, para una posición dada dentro del esquema de la malla computacional en  $x = \pm x_0$ . Para valores grandes de  $x$  comparados con la unidad, existe una solución del campo de la función de corriente y del campo de la vorticidad que puede ser escrita como se muestra a continuación.

$$\psi = y + \psi'; \quad \Omega = \Omega' \quad (\text{B.1})$$

donde  $\psi'$  y  $\Omega'$  representan la perturbación de primer orden, esta representación es válida para valores de  $x$  que se encuentran dentro del intervalo  $x < -x_0$  y  $x > x_0$ . La ecuación reescrita del sistema de ecuaciones que gobierna a la dinámica del flujo queda reescrita en forma lineal, de la siguiente manera:

$$\Omega' = -\nabla^2 \psi'; \quad \Omega'_x = \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 \Omega', \quad (\text{B.2})$$

estas ecuaciones deben resolverse con las condiciones de frontera apropiadas:

$$\psi'(\infty, y) = \psi'(x, 1/2) = \psi'(x, 0) = \Omega'(\infty, y) = \Omega'(x, 1/2) = \Omega'(x, 0) = 0. \quad (\text{B.3})$$

Las soluciones del sistema de ecuaciones acoplado con sus condiciones de frontera son:

$$\psi'(x, y) = \sum_{i=1}^{\infty} C_n \exp(\lambda_n x) \sin(2n\pi y) \quad (\text{B.4})$$

$$\Omega'(x, y) = \sum_{i=1}^{\infty} C_n [(2\pi n)^2 - \lambda_n^2] \exp(\lambda_n x) \sin(2n\pi y), \quad (\text{B.5})$$

donde  $\lambda_n^{\pm}(A) = A/2 \pm \sqrt{(A/2)^2 + (2n\pi)^2}$ , para este caso, el valor apropiado para  $A$  corresponde al número de Reynolds asociado al caso de estudio,  $A = \text{Re}$ . Se observa claramente que el signo positivo corresponde a  $x < 0$  y el signo negativo corresponde a  $x > 0$ . Donde la expansión se hace sólo a primer orden para el caso  $n = 1$ , las ecuaciones (B.4) y (B.5) describen al sistema en las posiciones  $x = \pm x_0$ :

$$\psi_x = \lambda_1^+(\text{Re}) (\psi - y); \quad \Omega_x = \lambda_1^+(\text{Re}) \Omega \quad \text{at } x = -x_0 \quad (\text{B.6})$$

$$\psi_x = \lambda_1^-(\text{Re}) (\psi - y); \quad \Omega_x = \lambda_1^-(\text{Re}) \Omega \quad \text{at } x = x_0. \quad (\text{B.7})$$

De manera análoga, es posible establecer el mismo análisis para el caso donde el número de Peclet y las difusiones de las concentraciones de especies son también de orden unidad, obteniendo la siguiente descripción de las condiciones de frontera:

$$\varphi_x = \lambda_1^+(\text{Pe}) \varphi; \quad Y_{ix} = \lambda_1^+(\text{Pe } L_i) (1 - Y_i) \quad \text{at } x = -x_0 \quad (\text{B.8})$$

$$\varphi_x = \lambda_1^-(\text{Pe}) (\varphi - \varphi_{\infty}); \quad Y_{ix} = \lambda_1^-(\text{Pe } L_i) (Y_i - Y_{i\infty}) \quad \text{at } x = x_0, \quad (\text{B.9})$$

donde  $i$  representa a las distintas difusividades de el hidrógeno y el oxígeno. De esta manera es posible establecer la corrección a las condiciones de frontera que permitan determinar, mediante un modelo teórico, la influencia de la difusión sobre las regiones lejanas del sistema, sin tener que forzar condiciones en infinito que no representen la física real del problema.