

**PREDICCIÓN DE COEFICIENTES EFECTIVOS  
DE TRANSPORTE EN MEDIOS POROSOS  
CON MICROESTRUCTURA DE COMPLEJIDAD MEDIA**

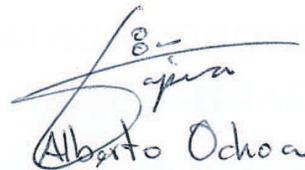
Tesis que presenta

**I.Q. Oscar Abel Luévano Rivas**

Para obtener el grado de  
**Maestro en Ciencias (Ingeniería Química)**



Dr. MAURICIO OCHOA



Alberto Ochoa

**PREDICCIÓN DE COEFICIENTES EFECTIVOS  
DE TRANSPORTE EN MEDIOS POROSOS  
CON MICROESTRUCTURA DE COMPLEJIDAD MEDIA**

Tesis que presenta

**I.Q. Oscar Abel Luévano Rivas**

Para obtener el grado de

**Maestro en Ciencias (Ingeniería Química)**





UNIDAD IZTAPALAPA

---

**PREDICCIÓN DE COEFICIENTES EFECTIVOS  
DE TRANSPORTE EN MEDIOS POROSOS  
CON MICROESTRUCTURA DE COMPLEJIDAD MEDIA**

---

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

Presenta:

**I.Q. Oscar Abel Luévano Rivas**

Asesores:

**Dr. Jesús Alberto Ochoa Tapia**

**Dr. Alfonso Mauricio Sales Cruz**



## Agradecimientos

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por su apoyo con la beca No. 20535 que permitió la realización de este trabajo de investigación y la obtención del grado de Maestro en Ciencias.

Al Dr. J. Alberto Ochoa Tapia y al Dr. A. Mauricio Sales Cruz, mis asesores de tesis, agradeciéndoles mucho su paciencia, el conocimiento que de ellos he adquirido, por sus sinceros consejos y por su amistad, que lograron que creciera como persona y permitieron que este proyecto llegará a concluirse.

A la Dra. Elizabeth Salinas Barrios y al Dr. Erick Luna Rojero, por sus valiosas observaciones que ayudaron el mejoramiento de la tesis y por el reconocimiento del mi mismo.

Agradezco especialmente a la M. en C. Helen Lugo Mendéz por todos sus consejos, su motivación y por su tiempo concedido que llevo la realización del trabajo. También, y más que nada, por su gran amistad.

Al amigo Dr. Benito Serrano Rosales por haber sido participe para iniciar la maestría. Agradeciendo sus observaciones que permitieron mejorar este trabajo.

Le agradezco finalmente a mi Familia, por su apoyo incondicional, el apoyo y el cariño de mis padres y de mis hermanas. A cada uno de mis amigos, pero principalmente a Andrés Tavizón, Gamaliel Che, Israel Negrellos, Miguel Ángel Sandoval, Alfonso Talavera y Joaquín Marcial, amigos durante la maestría.

— Oscar Abel Luévano Rivas



## Resumen

Los sistemas de varias fases se modelan normalmente en términos de ecuaciones promedio, las cuales incluyen parámetros efectivos calculados principalmente en representaciones de medios porosos con geometrías simplificadas. Los procesos de conducción de calor y de dispersión pasiva de un soluto han sido revisados mediante el método del promedio volumétrico. Con este método la predicción de los coeficientes efectivos se lleva a cabo resolviendo, para una representación de un medio poroso periódico, un problema de valores a la frontera llamada cerradura. La geometría de las representaciones periódicas, se ha limitado al uso de arreglos ordenados de partículas cilíndricas y cuadradas en 2D, y esferas y cubos en 3D.

En este trabajo, en general, se predicen los coeficientes de medio efectivo para los problemas de conducción de calor y dispersión pasiva para varias configuraciones de celdas unitarias. Los valores del coeficiente de conductividad efectiva se calcularon para un amplio intervalo de la relación de conductividades térmicas de las fases ( $10^{-3} \leq \kappa \leq 10^4$ ). Los valores del coeficiente de dispersión, tanto longitudinal como transversal, se calcularon en un intervalo del número de Péclet de  $10^{-3}$  a  $10^4$  y los valores del coeficiente de conductividad efectiva y el tensor de dispersión son calculados numéricamente usando la herramienta computacional COMSOL Multiphysics, para varios valores de porosidades. Los resultados son comparados con aproximaciones analíticas y cálculos numéricos reportados en la literatura. Diferentes configuraciones con características periódicas de geometrías simples (p. ej. cilindros y cuadrados en línea y cilindros escalonados) fueron utilizadas para representar un medio poroso, y por medio de estas se analizó el efecto de la geometría y el arreglo sobre el coeficiente de conductividad térmica y de dispersión total. En el caso de dispersión longitudinal, se encontró una consistencia razonable con estudios experimentales de arreglos cúbicos de esferas; los valores del coeficiente de dispersión igualaron los valores predichos de cálculos numéricos previos.

El cálculo de los coeficientes efectivos de conductividad efectiva y dispersión se extendió a celdas unitarias de geometrías más complejas a los arreglos de cilindros o cuadrados en línea mencionados anteriormente. Diferencias de hasta de un 30 % en los valores predichos del coeficiente de conductividad térmica efectiva fueron encontradas para  $100 \lesssim \kappa$  y  $0.5 \gtrsim \varepsilon_\beta$  entre las diferentes geometrías de celdas unitarias usadas. Predicciones del coeficiente de conductividad entre aproximaciones analíticas y valores numéricos calculados resultan equivalentes para  $10 > \kappa$  y  $0.5 < \varepsilon_\beta$ . Para el coeficiente de dispersión, una disminución en

el valor de su componente longitudinal, y de manera opuesta un incremento del coeficiente transversal fueron observados cuando el número de variaciones geométricas en la celdas unitarias se ven incrementadas (tamaño y número de partículas); diferencias entre los valores del coeficiente de dispersión longitudinal predichos mostraron diferencias de varios órdenes de magnitud para celdas unitarias de geometrías equivalentes. La comparación del coeficiente de dispersión longitudinal con datos experimentales es buena para  $1,000 > Pe_p$ .

Pruebas numéricas fueron realizadas en el cálculo de los coeficientes efectivos analizados. Las pruebas numéricas se basaron en tiempo de cómputo empleado por las herramienta COMSOL Multiphysics para la predicción de un valor del coeficiente efectivo, en un esquema de discretización por elemento finito, y una comparación del valor del coeficiente calculado fue realizado. Se establecen criterios para contemplar cuando es necesario emplear una geometría que represente razonablemente un medio poroso.

# ÍNDICE GENERAL

<b>Índice general</b>	<b>I</b>
<b>Índice de figuras</b>	<b>V</b>
<b>Índice de tablas</b>	<b>IX</b>
<b>Nomenclatura</b>	<b>XII</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Planteamiento del problema</b>	<b>5</b>
2.1. Antecedentes . . . . .	5
2.1.1. Transferencia de calor por conducción . . . . .	6
2.1.2. Dispersión de un soluto en un medio poroso . . . . .	14
2.2. Motivación y Justificación . . . . .	21
2.3. Objetivos . . . . .	22
2.3.1. General . . . . .	22
2.3.2. Objetivos Particulares . . . . .	22
<b>3. Ecuaciones de transporte de medio efectivo</b>	<b>23</b>
3.1. Transporte de calor por conducción . . . . .	23
3.2. Dispersión Pasiva . . . . .	30

<b>4. Coeficientes efectivos en celdas unitarias de geometría simple</b>	<b>37</b>
4.1. Coeficiente de conductividad térmica efectiva . . . . .	37
4.1.1. Método de solución . . . . .	38
4.1.2. Resultados del coeficiente de conductividad térmica efectiva . . . . .	40
4.1.3. Comparación con otros resultados numéricos . . . . .	48
4.2. Coeficiente de dispersión total . . . . .	50
4.2.1. Método de solución . . . . .	51
4.2.2. Resultados del coeficiente de dispersión total . . . . .	53
4.2.3. Comparación con otros resultados numéricos . . . . .	64
<b>5. Coeficientes efectivos para celdas unitarias de complejidad media</b>	<b>69</b>
5.1. Coeficiente de conductividad térmica efectiva . . . . .	69
5.1.1. Resultados para arreglos desordenados de partículas . . . . .	72
5.1.2. Resultados para representaciones de medios porosos . . . . .	82
5.1.3. Comparación con resultados experimentales . . . . .	86
5.2. Coeficiente de dispersión total . . . . .	89
5.2.1. Resultados para arreglos desordenados de partículas . . . . .	90
5.2.2. Resultados para representaciones de medios porosos . . . . .	99
5.2.3. Comparación con resultados experimentales . . . . .	103
<b>Conclusiones</b>	<b>111</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>115</b>
<b>Apéndices</b>	<b>123</b>
<b>A. Cálculo del coeficiente de conductividad térmica efectiva</b>	<b>A-1</b>
A.1. Solución para $\mathbf{b}_\beta$ y $\mathbf{b}_\sigma$ . . . . .	A-1
A.1.1. Forma de la ecuación diferencial . . . . .	A-2
A.1.2. Geometría . . . . .	A-2
A.1.3. Definición del problema de cerradura en COMSOL Multiphysics . . . . .	A-5
A.1.4. Cálculo del coeficiente de conductividad efectiva . . . . .	A-8
A.2. Cálculo del coeficiente de conductividad térmica efectiva . . . . .	A-13

---

<b>B. Cálculo del coeficiente de dispersión</b>	<b>B-1</b>
B.1. Solución para $\mathbf{f}_\beta$	B-1
B.1.1. Forma de las ecuación diferencial	B-2
B.1.2. Geometría	B-3
B.1.3. Ecuación de Stokes	B-3
B.1.4. Definición del problema de cerradura en COMSOL Multiphysics	B-4
B.1.5. Cálculo del coeficiente de dispersión pasiva	B-7
B.2. Cálculo del coeficiente de dispersión pasiva	B-13



## ÍNDICE DE FIGURAS

3.1. Sistema de dos fases. . . . .	24
3.2. Volumen promediante y longitudes características del sistema de dos fases, $\beta - \sigma$ . . . . .	25
3.3. Región representativa de celda unitaria para el sistema de dos fases $\beta - \sigma$ . .	28
3.4. Transporte convectivo-difusivo de un soluto a través de medio poroso impermeable. . . . .	31
4.1. Celda unitaria de Chang. . . . .	38
4.2. Celdas unitarias periódicas bidimensionales: (a) arreglo lineal de cuadrados; (b) arreglo lineal de cilindros; (c) arreglo escalonado con variación de radios; (c) arreglo triangular. . . . .	42
4.3. Efecto del arreglo de partícula sobre $K_{eff}/k_{\beta}$ usando un arreglo lineal, escalonado y triangular de cilindros para varias porosidades. . . . .	43
4.4. Efecto del arreglo de partícula sobre $K_{eff}/k_{\beta}$ usando en arreglo escalonado con variación de los radios de las partículas de $R_0/R_1 = 1, 2$ y $5$ , para varias porosidades. . . . .	45
4.5. Efecto de la geometría de la partícula sobre $K_{eff}/k_{\beta}$ usando un arreglo lineal de cuadrados y cilindros para varias porosidades. . . . .	46
4.6. Comparación de resultados numéricos de $K_{eff}/k_{\beta}$ , para diferentes arreglos de celdas unitarias, con datos reportados en la literatura, (Nozad <i>y col.</i> , 1995b; Perrins <i>y col.</i> ,1979). . . . .	49

4.7. Efecto de la porosidad sobre la variación de $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ con el número $Pe_p$ para las celdas unitarias con arreglo de cilindros: (a) en línea, (b) escalonados y (c) triangulares. . . . .	55
4.8. Efecto de la porosidad sobre la variación de $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ con el número $Pe_p$ para las celdas unitarias con arreglos de cilindros: (a) en línea, (b) escalonados y (c) triangulares. . . . .	57
4.9. Campo de velocidad ( $Pe_p \approx 10$ ) para las diferentes configuraciones de las celdas unitarias mostradas en la Figura 4.2, con $\varepsilon_\beta = 0.37$ . . . . .	58
4.10. Efecto del arreglo de partícula sobre $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ usando un arreglo lineal y escalonado de cilindros. . . . .	59
4.11. Efecto del arreglo de partícula sobre $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ usando un arreglo lineal y escalonado de cilindros. . . . .	60
4.12. Efecto de la geometría de la partícula sobre ambos: (a) $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ y (b) $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ usando un arreglo lineal de cuadrados y cilindros. . . . .	62
4.13. Comparación de resultados numéricos de $D_{xx}^*$ para arreglos de cilindros (2D) comparado con datos experimentales para arreglos de esferas (3D). . . . .	65
4.14. Comparación de resultados numéricos de $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ con resultados numéricos reportados en la literatura. . . . .	67
4.15. Comparación de resultados numéricos de ambos: $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ y $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ con los reportados por Eidsath <i>y col.</i> (1985). . . . .	68
5.1. Celdas unitarias de medios porosos espacialmente periódicos con distribución aleatoria de partículas cilíndricas. . . . .	71
5.2. Resultados de $K_{eff}/k_\beta$ para las configuraciones 1,2 y 3 y varias porosidades. . . . .	73
5.3. Comparación de los resultados numéricos $K_{eff}/k_\beta$ para las configuraciones 1,2 y 3 con otros resultados numéricos reportados en la literatura. . . . .	76
5.4. Comparación de los resultados numéricos de $K_{eff}/k_\beta$ con las aproximaciones analíticas de Ochoa-Tapia <i>y col.</i> ,(1994) y Hsu <i>y col.</i> ,(1995). . . . .	78
5.5. Comparación de los resultados numéricos de $K_{eff}/k_\beta$ con las aproximaciones analíticas de Ma <i>y col.</i> ,(2000) y Feng <i>y col.</i> ,(2004). . . . .	79
5.6. (a) Micrografía extraída de una muestra de suelo (Auset y Keller, 2006). (b) Celda unitaria Realista con geometría basada en la micrografía. (c) Celda unitaria con geometría equivalente a la celda Realista. . . . .	81

5.7. Resultados de $K_{eff}$ para la celda unitaria Realista comparado con la celda unitarias aproximada y la configuración 1. . . . .	82
5.8. Algoritmo para la predicción de $K_{eff}$ . . . . .	85
5.9. Comparación de resultados numéricos de $K_{eff}$ para la Configuración 1 y la celda Realista con datos experimentales de la literatura. . . . .	87
5.10. Resultados de $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ para las celdas unitarias: (a) configuración 1, (b) configuración 2 y (c) configuración 3, para varias porosidades. . . . .	91
5.11. Resultados de $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ para las celdas unitarias: (a) configuración 1, (b) configuración 2 y (c) configuración 3, para varias porosidades. . . . .	92
5.12. Perfil de velocidad ( $Pe_p \approx 10$ ) para las configuraciones 1,2 y 3, con $\varepsilon_\beta = 0.37$ . . . . .	94
5.13. Comparación de $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ y $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ entre las configuraciones 1,2 y 3. . . . .	95
5.14. Resultados del coeficiente de dispersión: (a) $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ y (b) $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ para la celda unitaria realista, (c) $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ y (d) $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ para la celda aproximada. . . . .	98
5.15. Campo de velocidad ( $Pe_p \approx 10$ ) las celdas unitarias realista y aproximada, con $\varepsilon_\beta = 0.35$ . . . . .	100
5.16. Comparación de (a) $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ y (b) $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ entre la celda unitaria realista y la celda aproximada, con $\varepsilon_\beta = 0.35$ . . . . .	101
5.17. Comparación de resultados para las configuraciones 1,2 y 3 con datos experimentales: (a) $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ y (b) $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ . Datos experimentales adaptados de Whitaker (1999). . . . .	108
5.18. Comparación de resultados para las celda realista y aproximada de un medio poroso real con datos experimentales: (a) $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ y (b) $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ . Datos experimentales adaptados de Whitaker (1999). . . . .	109
A.1. Celdas unitarias de (a) cuadrados y (b) cilindros en línea. . . . .	A-3
A.2. Algoritmo de solución para el problema de cerradura de la conductividad térmica. . . . .	A-10
A.3. Algoritmo del cálculo de la conductividad térmica efectiva. . . . .	A-16
B.1. Algoritmo de solución para el problema de cerradura de dispersión pasiva. . . . .	B-9
B.2. Algoritmo del cálculo del tensor de dispersión total. . . . .	B-20



## ÍNDICE DE TABLAS

2.1. Correlaciones para la conductividad térmica efectiva . . . . .	10
2.2. Expresiones para el coeficiente de dispersión longitudinal. . . . .	19
4.1. Resultados numéricos y analíticos de $K_{eff}/k_\beta$ para la celda de Chang. . . . .	39
4.2. Resultados numéricos de la conductividad efectiva para la celda de cuadrados en línea. . . . .	41
4.3. Resultados numéricos del coeficiente de $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ y la solución analítica de Wooding (1960). . . . .	52
4.4. Resultados numéricos de $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ para la celda cuadrados en línea. . . . .	53
4.5. Contribución de $D_{eff}$ y $D_{A\beta}$ sobre $D_{xx}^*$ como función del número de $Pe_p$ . . . . .	56
4.6. Coeficientes $\alpha$ y $\delta$ de la correlación potencial del coeficiente de dispersión longitudinal para los arreglos: lineal, escalonado y triangular. . . . .	64
4.7. Coeficiente $\delta$ reportados por varios investigadores. . . . .	64
5.1. Pruebas numéricas del cálculo de $K_{eff}/k_\beta$ para las configuraciones 1, 2 y 3. . . . .	75
5.2. Pruebas numéricas del cálculo de $K_{eff}$ para las celdas Realista y Aproximada. $\varepsilon_\beta = 0.35$ . . . . .	83
5.3. Pruebas numéricas del cálculo de $K_{eff}$ para las celdas Realista y Aproximada. $\varepsilon_\beta = 0.55$ . . . . .	86
5.4. Pruebas numéricas del cálculo de $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ para $Pe_p = 100$ y las configuraciones 1, 2 y 3. . . . .	96

---

5.5. Coeficientes $\alpha$ y $\delta$ de la correlación potencial del coeficiente de dispersión para las configuraciones 1, 2 y 3, y varias porosidades. . . . .	97
5.6. Coeficientes $\alpha$ y $\delta$ de la correlación potencial del coeficiente de dispersión para la celda Realista y Aproximada. . . . .	102
5.7. Pruebas numéricas del cálculo de $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ para $Pe_p = 100$ y las celdas Realista y Aproximada. . . . .	102
A.1. Parámetros definidos en COMSOL Multiphysics - Conductividad . . . . .	A-3
A.2. Ecuación diferencial del problema de cerradura para $\mathbf{b}_\beta$ y $\mathbf{b}_\sigma$ . . . . .	A-5
A.3. Condiciones de frontera internas - Conductividad. . . . .	A-6
A.4. Condición en las fronteras externas - Conductividad. . . . .	A-6
A.5. Condición de periodicidad - Conductividad. . . . .	A-7
A.6. Integración - Conductividad. . . . .	A-8
B.1. Parámetros definidos en COMSOL Multiphysics - Dispersión. . . . .	B-3
B.2. Variables de Integración - Dispersión. . . . .	B-4
B.3. Ecuación de Stokes. . . . .	B-4
B.4. Condiciones de frontera para el perfil de velocidad. . . . .	B-5
B.5. Ecuación diferencial del problema de cerradura para $\mathbf{f}_\beta$ . . . . .	B-5
B.6. Condiciones de frontera para internas y externas - Dispersión. . . . .	B-6
B.7. Condición de periodicidad - Dispersión. . . . .	B-6
B.8. Integración - Dispersión . . . . .	B-8



## NOMENCLATURA

$a_v$	área interfásial por unidad de volumen,	$m^{-1}$
$A_{\beta\sigma}$	superficie en la interfase $\beta - \sigma$ dentro de la región de promedio ( $V$ ),	$m^2$
$\mathcal{A}_{\beta\sigma}$	área de la interfase $\beta - \sigma$ dentro del volumen, $\mathcal{V}$ ( $m^3$ ),	$m^2$
$A_p$	área superficial de la partícula,	$m^2$
$\mathbf{b}_\sigma$	vector de cerradura: campo vectorial que mapea $\nabla\langle T \rangle$ en $\tilde{T}_\sigma$ ,	$m$
$\mathbf{b}_\beta$	vector de cerradura: campo vectorial que mapea $\nabla\langle T \rangle$ , en $\tilde{T}_\beta$ ,	$m$
$c_{A\beta}$	concentración molar de la especie $A$ en la fase $\beta$ ,	$\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$
$\langle c_{A\beta} \rangle^\beta$	promedio intrínseco de la concentración molar de la especie $A$ en la fase $\beta$ ,	$\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$
$\tilde{c}_{A\beta}$	$c_{A\beta} - \langle c_{A\beta} \rangle^\beta$ , desviación espacial de la concentración molar de la especie $A$ en la fase $\beta$ ,	$\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$
$c_p$	capacidad calorífica a presión constante	$\text{J}\cdot(\text{kg}\cdot\text{K})^{-1}$
$C_p$	$[\varepsilon_\beta(\rho c_p)_\beta + \varepsilon_\sigma(\rho c_p)_\sigma]/(\varepsilon_\beta\rho_\beta + \varepsilon_\sigma\rho_\sigma)$ capacidad calorífica ponderada con la fracción másica	$\text{J}\cdot(\text{kg}\cdot\text{K})^{-1}$
$dp$	$6V_p/A_p$ , diámetro efectivo de partícula,	$m$
$\mathcal{D}_{AB}$	coeficiente de difusión molecular binaria de las especies $A$ y $B$ ,	$\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
$\mathcal{D}_{A\beta}$	coeficiente de difusión de la mezcla para la especie $A$ en la fase $\beta$ ,	$\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
$\mathbf{D}_{eff}$	tensor de difusibilidad efectiva,	$\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
$\mathbf{D}_{A\beta}$	tensor de dispersión hidrodinámico,	$\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$

$\mathbf{D}_{A\beta}^*$	$\mathbf{D}_{eff} + \mathbf{D}_{A\beta}$ , tensor de dispersión total,	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
$D_{xx}^*$	componente longitudinal ( $xx$ ) del tensor de dispersión total,	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
$D_{yy}^*$	componente transversal ( $yy$ ) del tensor de dispersión total,	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
$D_{m,eff}$	coeficiente de difusión efectiva macroscópica para la especie, $A$ ,	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
$\mathbf{f}_\beta$	vector de cerradura: campo vectorial que mapea, $\nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta$ en $\tilde{c}_{A\beta}$	$\text{m}$
$\mathbf{g}$	aceleración gravitacional,	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
$\mathbf{I}$	tensor identidad,	
$\mathbf{i}$	vector ortonormal de la dirección $x$ de las coordenadas cartesianas,	
$\mathbf{j}$	vector ortonormal de la dirección $y$ de las coordenadas cartesianas,	
$\mathbf{k}$	vector ortonormal de la dirección $z$ de las coordenadas cartesianas,	
$k$	conductividad térmica de la fase,	$\text{W} \cdot (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$
$\mathbf{K}_{eff}$	tensor de conductividad térmica efectiva para el sistema $\beta - \sigma$ ,	$\text{W} \cdot (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$
$K_{eff}$	conductividad térmica efectiva para el sistema $\beta - \sigma$ ,	$\text{W} \cdot (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$
$\mathbf{K}_\beta$	tensor de permeabilidad de la ley de Darcy,	$\text{m}^2$
$\ell_\alpha$	longitud característica de la fase $\alpha = \beta$ y $\sigma$ ,	$\text{m}$
$\ell_c$	longitud de la celda unitaria,	$\text{m}$
$\ell_i$	vectores del patrón de periodicidad ( $i = 1, 2, 3$ ),	$\text{m}$
$\ell^*$	$dp \left( \frac{\varepsilon_\beta}{1 - \varepsilon_\beta} \right)$ , longitud característica para definir el número de Reynolds y Péclet,	
$L$	longitud característica asociada a la región de macroscópica ,	$\text{m}$
$L_\varepsilon$	longitud característica para $\nabla \varepsilon$ ,	$\text{m}$
$L_{T1}$	longitud característica para $\nabla \nabla \langle T_\beta \rangle^\beta$ , $\nabla \nabla \langle T_\sigma \rangle^\sigma$ o $\nabla \nabla \langle T \rangle$ ,	$\text{m}$
$\mathbf{n}_{\beta\sigma}$	$-\mathbf{n}_{\sigma\beta}$ , vector normal unitario dirigido de la fase $\beta$ hacia la fase $\sigma$ ,	
$N_C$	número de especies en la fase fluida,	
$p_\beta$	presión hidrodinámica de la fase $\beta$ ,	$\text{N} \cdot \text{m}^{-2}$ ,
$\hat{p}_\beta$	presión total de la fase $\beta$	$\text{N} \cdot \text{m}^{-2}$ ,
$\Delta p$	incremento de presión de la fase fluida para un medio periódico,	$\text{N} \cdot \text{m}^{-2}$ ,
$Pe$	$\frac{\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \ell_c}{\mathcal{D}_{A\beta}}$ , número de Péclet,	

$Pe_p$	$\frac{\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta d_p}{\mathcal{D}_{A\beta}} \left( \frac{\varepsilon_\beta}{1 - \varepsilon_\beta} \right)$ , número de Péclet de partícula,	
$\mathbf{r}$	vector de posición,	m
$r_0$	radio de la región de promediado $V$ ,	m
$R$	radio de los cilindros en la celda unitaria,	m
$Re_p$	$\frac{\rho_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta d_p}{\mu_\beta} \left( \frac{\varepsilon_\beta}{1 - \varepsilon_\beta} \right)$ , número de Reynolds de partícula,	
$Sc$	$\frac{\mu_\beta}{\rho_\beta \mathcal{D}_{A\beta}}$ , número de Schmidt,	
$t$	tiempo,	s
$t^*$	tiempo característico del proceso en la escala macroscópica,	s
$T_\alpha$	temperatura de la fase $\alpha = \beta$ y $\sigma$ ,	K
$\langle T_\alpha \rangle^\alpha$	promedio intrínseco de la temperatura en la fase $\alpha = \beta$ y $\sigma$ ,	K
$\tilde{T}_\alpha$	$T_\alpha + \langle T_\alpha \rangle^\alpha$ desviación espacial de la temperatura para la fase $\alpha = \beta$ y $\sigma$ ,	K
$\langle T \rangle$	$\varepsilon_\beta \langle T_\beta \rangle^\beta + \varepsilon_\sigma \langle T_\sigma \rangle^\sigma$ , temperatura promedio para el sistema $\beta - \sigma$ ,	K
$\mathbf{v}_\beta$	vector de velocidad de la fase $\beta$ ,	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$	promedio intrínseco del vector de velocidad en la fase $\beta$ ,	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$\tilde{\mathbf{v}}_\beta$	$\mathbf{v}_\beta - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$ , desviaciones espaciales de la velocidad de la fase $\beta$ ,	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$	magnitud del promedio intrínseco del vector de velocidad,	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$V$	región de promediado,	
$V_\alpha$	región de la fase $\alpha = \beta$ y $\sigma$ , contenida en el volumen $V$ ,	
$\mathcal{V}$	volumen de la región de promediado, $V$ ,	$\text{m}^3$
$\mathcal{V}_\alpha$	volumen de la fase $\alpha = \beta$ y $\sigma$ de la región $V_\alpha$ ,	$\text{m}^3$
$x_{A\beta}$	fracción mol de la especie A en la fase $\beta$ ,	
$x, y$	ejes coordenados cartesianos,	m

## Símbolos Griegos

$\alpha$	coeficiente para la correlación potencial de la dispersión,	
$\delta$	exponente para la correlación potencial de la dispersión,	
$\varepsilon$	fracción volumétrica (porosidad),	
$\kappa$	$k_\beta/k_\sigma$ , relación de las conductividades térmicas de las fases,	
$\mu$	viscosidad,	$\text{N}\cdot\text{s}\cdot\text{m}^{-2}$
$\rho$	densidad,	$\text{Kg}\cdot\text{m}^{-3}$

## Índices

$A$	relativo a la especie química $A$
$xx$	componente longitudinal
$yy$	componente transversal
$\beta$	relativo a la fase fluida
$\sigma$	relativo a la fase sólida
$0, 1, 2$	relativo a radios de los cilindros en la celda unitaria

En el análisis de fenómenos de transporte a través de sistemas heterogéneos es frecuente el uso de ecuaciones de transporte promedio o de medio efectivo. De esta manera se evita enfrentarse directamente a las complicaciones geométricas involucradas en un medio poroso real, en las que se tendrían que resolver las ecuaciones puntuales. Para este tipo de modelos promediados la complejidad de la microestructura y la distribución de las fases se consideran mediante un coeficiente efectivo de transporte. La predicción de este coeficiente efectivo se asocia a la solución de un problema de valores a la frontera, resultado del proceso de promediado, el cual se resuelve en una región representativa de un medio poroso espacialmente periódico. Esta región representativa, llamada comúnmente celda unitaria, puede contener la esencia física de las características de la microestructura. La predicción de coeficientes efectivos normalmente se ha limitado a considerar el uso de celdas unitarias con arreglos simples de partículas cilíndricas y cuadradas (2D) o esféricas (3D). Sin embargo algunos de estos coeficientes efectivos, para este tipo de celdas, no logran predecir adecuadamente los resultados experimentales, lo que se atribuye generalmente a una sobre simplificación geométrica de las representaciones periódicas usadas. Bajo esta circunstancia resulta relevante predecir coeficientes de medio efectivo para celdas unitarias con características de la microestructura semejantes a las presentadas un medio poroso real en una representación razonable.

La complejidad geométrica de la celda unitaria está limitada sólo por los requerimientos computacionales necesarios para resolver un problema de valores a la frontera, que

al final permite la predicción de los coeficientes efectivos. En la actualidad existen herramientas computacionales avanzadas que permiten la exploración de distintos problemas fenomenológicos en geometrías compleja. Una de estas herramientas es COMSOL Multiphysics, que emplea un esquema de discretización basado en el método del elemento finito y hace uso de una serie de métodos de solución de sistemas lineales, incluidos como paquetes, para resolver los sistemas de ecuaciones definidos. El mismo método de elemento finito permite explorar celdas unitarias con geometrías relativamente complicadas, por lo que abordar la predicción de los coeficientes efectivos resulta ahora en una idea plausible en razón de los recursos computacionales disponibles.

En un medio poroso homogéneo, si la celda unitaria seleccionada es lo suficientemente representativa de la geometría, tal que las variables de interés (temperatura, concentración y velocidad) sean definidas adecuadamente dentro de una región representativa, entonces los coeficientes de medios efectivos lograrán igualar al valor real, independientemente de la localización de la celda unitaria seleccionada. Por ello en este trabajo se pretenden predecir coeficientes de medio efectivo usando las herramientas computacionales avanzadas para calcular los coeficientes de medio efectivo para celdas unitarias, en un modelo periódico, con representaciones que tratan de capturar cierto conocimiento de la microestructura del medio poroso.

Esta tesis está organizada de la siguiente manera: en el Capítulo 2, se hace una revisión de literatura respecto a las investigaciones llevadas a cabo para determinar, tanto teórico como experimentalmente, los coeficientes de medio efectivo usando representaciones del medio poroso y haciendo énfasis en las geometrías utilizadas. En el Capítulo 3, se muestran las ecuaciones de medio efectivo para los procesos de conducción de calor y de dispersión pasiva obtenidas de aplicar el método del promedio volumétrico presentado en Whitaker (1999), también se definen los problemas de valores a la frontera necesarios para el cálculo de los coeficientes efectivos de estas ecuaciones promedio. En el Capítulo 4, el problema de valores a la frontera es resuelto para modelos de celdas unitarias de geometría simple, calculando los coeficientes efectivos de los procesos de conductividad térmica y de dispersión usando la herramienta computacional disponible. En este capítulo se analiza el efecto de la geometría y el arreglo de las partículas en las celdas unitarias simples sobre los coeficientes efectivos. También en este capítulo se comprueba la validez de los resultados calculados usando la herramienta computacional y la metodología usada, al comparar los resultados numéricos con otros datos reportados en la literatura. Con base en la experiencia del cálculo de

coeficientes efectivos en celdas unitarias simple. En el Capítulo 5 la predicción de coeficientes efectivos se extiende a celdas unitarias de geometrías más complejas, basadas en diferentes configuraciones de arreglos aleatorios de partículas cilíndricas de diferentes tamaños dentro las celdas. También se usan celdas con partículas que describen la posición y la descripción estructural, basadas en micrografías de un sistema poroso reportado en la literatura. Los resultados son comparados con resultados experimentales reportados en la literatura. Las diferencias, encontradas entre los valores de los coeficientes efectivos para las celdas unitarias de geometría simple y compleja, permiten seleccionar adecuadamente una representación que puede ser utilizada, convenientemente, para predecir los coeficientes efectivos usados para simular proceso o modelar sistemas experimentales.



## CAPÍTULO 2

# PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

### 2.1. Antecedentes

Este capítulo sintetiza los esfuerzos realizados por varios investigadores con el objeto de predecir los coeficientes efectivos para la conductividad térmica y la dispersión en sistemas heterogéneos a través de la utilización de representaciones periódicas del medio poroso, llamadas celdas unitarias. Se presentan algunas correlaciones para el coeficiente de conductividad efectiva así como algunos resultados previos para el tensor de dispersión longitudinal.

El problema de la determinación de coeficientes efectivos de transferencia de calor de un sistema formado por dos fases es de amplio interés en distintas áreas de la ingeniería: i) en ingeniería química, la determinación precisa del perfil de temperatura dentro de reactor de lecho fijo o de partículas catalíticas no isotérmicas requiere conocer la conductividad térmica efectiva; en métodos de recuperación térmica de petróleo y el análisis de procesos como el secado constituyen ejemplos donde el conocimiento de la conductividad térmica efectiva es esencial. ii) En ingeniería ambiental, los procesos de incineración de contaminantes y la transferencia de vapor de agua a través de materiales de construcción son procesos donde resulta importante conocer la conductividad térmica efectiva. iii) En ingeniería mecánica la eficiencia de procesos de secado, el enfriamiento de partículas radioactivas en reactores nucleares, la solidificación y fundición de mezclas heterogéneas y el diseño de precalentadores y quemadores radiantes porosos, son problemas donde es necesario tener conocimiento de la

conductividad térmica efectiva.

Con respecto al problema de dispersión de un soluto en un medio heterogéneo, resulta un tema de discusión importante para diferentes ciencias de la ingeniería. i) En la ingeniería química, comprender y modelar la dispersión resulta importante en el momento de diseñar muchos equipos industriales tales como adsorbedores, cromatógrafos, intercambiadores de calor, reactores de lixiviación y de lecho fijo, etc. ii) En la ingeniería ambiental, conocer el fenómeno de dispersión permite predecir el flujo de aguas en mantos freáticos, entender la migración de contaminantes a través del suelo y rocas, diseñar metodologías para la remediación de mantos acuíferos, entre otras. iii) En la ingeniería del petróleo entender la dispersión permite modelar el patrón de flujo de gas natural y petróleo dentro del subsuelo y mejorar su extracción.

Los ejemplos anteriores constituyen problemas generales donde la determinación de parámetros efectivos resulta importante para comprender, modelar y describir diferentes aspectos en procesos que involucran la transferencia de calor por conducción y la dispersión en sistemas multifásicos. En los párrafos siguientes se describe, de manera breve, algunos de los enfoques y modelos usados por diversos investigadores con el fin de predecir los parámetros efectivos de conducción térmica y dispersión en medios porosos.

### **2.1.1. Transferencia de calor por conducción**

En el análisis de la transferencia de calor por conducción a través de un medio heterogéneo es común el uso de propiedades efectivas, donde el efecto de la microestructura queda contenido dentro de un coeficiente efectivo de conductividad térmica. La mayoría de las dificultades encontradas en la predicción del coeficiente efectivo de conductividad de calor están asociadas con el hecho de que la conductividad térmica efectiva es una característica del fenómeno que describen las ecuaciones de transporte en el sistema heterogéneo, más que una propiedad física. Para la determinación del coeficiente de conductividad es frecuente la aplicación, en principio, de un promediado que represente la conducción dentro de un volumen local a través del medio heterogéneo. El coeficiente efectivo de conducción de calor depende principalmente de la conductividad térmica de las fases, la microestructura, la distribución de la fase sólida y el contacto entre las partículas, cuando la fase sólida es continua.

Existen diversos enfoques utilizados para predecir el coeficiente de conductividad efectiva para sistemas multifásicos. Un primer enfoque, determina la conductividad térmica

efectiva mediante experimentos dentro de lechos de partículas esféricas y gases estancados, expresando la conductividad efectiva como función de parámetros empíricos obtenidos de los experimentos. El segundo enfoque emplea con frecuencia, para la determinación de la conductividad térmica efectiva, un análisis de las ecuaciones que rigen el fenómeno de conducción mediante el uso de una metodología de promediado que involucra, en un esquema de cerradura, un tratamiento analítico y numérico del cálculo de la conductividad térmica efectiva usando representaciones periódicas de un medio poroso. Y un tercer enfoque se basa en el cálculo del coeficiente de conductividad efectiva, basada mediante correlaciones empíricas determinada a partir de soluciones numéricas usando arreglos geométricos simples.

Recientemente se han propuesto correlaciones para la conductividad efectiva basadas en el uso de metodologías de similaridad estadística, que emplean celdas unitarias espacialmente periódicas con características fractales de geometrías regulares (Chen y Shi, 1999; Feng *y col.*, 2004; Kou *y col.*, 2009).

Una breve revisión de las diferentes formas de predecir la conductividad térmica efectiva se presenta en los párrafos siguientes, con el fin de observar las estructuras periódicas utilizadas en el cálculo de este coeficiente y la metodología implementada.

Kunii y Smith (1960), obtuvieron una aproximación para la conductividad térmica efectiva de lechos empacados escogiendo como representación una celda unitaria de una esfera contenida en un cilindro asumiendo un contacto mínimo entre las partículas. Discretizando las fases sólida y fluida en un patrón de conducción de calor en paralelo y en serie.

Krupiczka (1967), aproximó un lecho empacado mediante un arreglo de varios cilindros en los que se tomaba en cuenta el contacto sólido-fluido, extendiendo sus resultados al uso de configuraciones con esferas. A partir de los resultados de la solución numérica de las ecuaciones de conducción de calor, propuso una correlación empírica para la conductividad efectiva en función de parámetros como la relación de las conductividades de las fases y la porosidad.

Zehnder y Schlünder (1970), propusieron una correlación para la conductividad efectiva basada en un modelo de flujo de calor unidimensional por conducción a través de un lecho empacado con partículas esféricas. La correlación semi-empírica propuesta dependía de una serie de parámetros como la conductividad de las fases y la porosidad, sin embargo contenía constantes sin ningún significado físico, ignorando con esto, el efecto de la microestructura sobre el coeficiente efectivo de conductividad térmica.

En la década de los ochenta, Jugaribe y Beasley (1984) derivaron un método para el

cálculo de la conductividad efectiva en un arreglo cúbico de cilindros, que sólo requería de conocer las propiedades físicas del fluido y del sólido, así como de la fracción volumétrica, para la aproximación del coeficiente de conductividad efectiva en lechos empacados.

Aplicando el método del promedio volumétrico a las ecuaciones que describen el proceso de transferencia de calor por conducción en un sistema de dos fases y tres fases, Nozad *y col.* (1985a, 1985b) desarrollaron un esquema de cerradura que resolvieron usando diferencias finitas y expansión asintótica para representaciones periódicas simples de medios porosos. Lo anterior les permitió la predicción directa del coeficiente de conductividad térmica efectiva. Sus resultados numéricos fueron comparados satisfactoriamente con los obtenidos experimentalmente por estos mismos investigadores, para diferentes sólidos y fluidos.

Hadley (1986), presentó resultados experimentales y un modelo teórico obtenido de aplicar la técnica del promedio volumétrico al problema general de la conducción de calor de un sistema de dos fases, formado por partículas metálicas y fluidos estancados, los cuales presentaban diferencias grandes entre los valores de las conductividades térmicas de las fases. La correlación obtenida por Hadley (1986) predecía de manera correcta los valores de la conductividad efectiva para un amplio rango de la relación entre las conductividades térmicas de las fases.

Shonnard y Whitaker (1989), midieron experimentalmente el coeficiente de conductividad efectiva usando una celda unitaria de un medio poroso espacialmente periódico, la representación periódica consistía básicamente en un arreglo de partículas cilíndricas con un contacto entre partículas. Sus resultados experimentales verificaron los estudios teóricos del efecto del contacto partícula-partícula sobre el coeficiente de conductividad térmica efectiva de Batchelor y O'Brien (1977).

Para principios de los noventa, Sahraoui y Kaviany (1993), para medios porosos bidimensionales hechos de partículas cilíndricas resolvieron numéricamente la ecuación de conducción de calor bidimensional en estado estacionario. Usando configuraciones de celdas unitarias, que consistían en un arreglo de bloques en línea y en arreglos de cilindros en línea y escalonado de cilindros, calcularon numéricamente el coeficiente efectivo de conductividad térmica mediante una aproximación por diferencias finitas; de sus resultados Sahraoui y Kaviany (1993) presentaron una correlación para la conductividad térmica efectiva en función de la porosidad y la relación de conductividades térmicas de las fases. De manera similar, Hsu *y col.* (1994) propusieron modelos para la predicción del coeficiente de conductividad efectiva para arreglos bidimensionales periódicos de cilindros y cuadrados, así como arreglos

tridimensionales de cubos en línea, sin y con contacto partícula-partícula. El modelo propuesto por Hsu *y col.* (1994) logró tomar en cuenta el contacto entre partícula-partícula, modificando la expresión presentada por Zehnder y Schlünder (1970).

Basados en el método promedio volumétrico, Ochoa-Tapia *y col.* (1994) resolvieron analíticamente el problema de cerradura asociado para la celda de Chang cilíndrica (2D) y esférica (3D), encontrando expresiones para el coeficiente de conductividad térmica efectiva. Los valores de los coeficientes predichos por estas aproximaciones analíticas fueron, esencialmente, idénticos a los calculados por Nozad *y col.* (1985b) para medios porosos espacialmente periódicos.

Zhang y Huang (2000), determinaron el coeficiente efectivo de conductividad térmica en un esquema de cerradura, que resolvieron numéricamente mediante el método de control de volumen en diferencias finitas. Usando celdas unitarias periódicas con geometrías de arreglos lineales de cuadrados, arreglos escalonados y lineales de cilindros, analizaron las características del coeficiente de conductividad térmica.

Las predicciones de la conductividad efectiva en un lecho empacado, hechas por Bounanno *y col.* (2003), se fundamentaron teóricamente en el método del promedio volumétrico. Definiendo el coeficiente de conductividad térmica en términos de variables de cerradura, analizaron la distribución de temperatura en arreglos de celda unitarias elementales bidimensionales de geometrías simples. El modelo propuesto permitió tomar en cuenta características mecánicas de las partículas sobre el coeficiente efectivo de conductividad térmica cuando existe un contacto partícula-partícula; la solución numérica del problema de cerradura fue obtenida usando el método de elemento finito y sus resultados fueron comparados con datos experimentales obtenidos en un sistema experimental diseñado con ese propósito.

En los últimos años Chen y Shi (1999); Yu y Cheng (2002); Feng *y col.* (2004); Kou *y col.* (2009), propusieron una metodología para determinar la conductividad térmica efectiva de manera teórica dentro de medios porosos. Asumiendo que la microestructura de un medio poroso puede ser representada por medio de celdas unitarias periódicas con características fractales, formadas a partir de la división recursiva de formas geométricas regulares simples. Ellos obtuvieron correlaciones para la conductividad térmica efectiva en términos de parámetros geométricos del medio poroso representado fractalmente.

Por lo anterior se puede observar que existen algunas características en común al momento de analizar el problema de transferencia de calor por conducción de un sistema heterogéneo

y predecir la conductividad térmica efectiva. Algunas de estas características son:

- El empleo de ecuaciones de transporte promedio para el fenómeno de conducción de calor, derivadas mediante una metodología de promediado, donde el efecto de la microestructura del medio heterogéneo queda contenido dentro del parámetro efectivo de conducción de calor.
- El uso de celdas unitarias periódicas con arreglos geométricos simples para representar un medio poroso y calcular el coeficiente de conductividad térmica efectiva.
- La derivación de expresiones semi-empíricas y analíticas para el coeficiente efectivo de conductividad como función de parámetros que caracterizan el medio poroso; como la relación de conductividades térmicas de las fases, la fracción de espacio libre, el punto de contacto partícula-partícula, etc.

En la Tabla 2.1 se resumen algunas expresiones analíticas y semi-empíricas para la predicción de la conductividad térmica efectiva obtenidas a partir de los resultados teóricos y experimentales de los trabajos citados y otros.

**Tabla 2.1.** Correlaciones para la conductividad térmica efectiva

Referencia	Características	Expresión
Woodside y Messer (1961).	Concentración de partículas diluidas ( $\varepsilon_\beta \cong 1$ ).	$\frac{K_{eff}}{k_\beta} = \frac{2\varepsilon_\beta + (3 - 2\varepsilon_\beta)\kappa}{3 - \varepsilon_\beta + \varepsilon_\beta\kappa}$ <p>donde <math>K_{eff}</math> es la conductividad térmica efectiva, <math>\kappa</math> la relación de conductividades térmicas de las fases fluida y sólida, <math>\kappa = k_\beta/k_\sigma</math> y <math>\varepsilon_\beta</math> la fracción de volumen de la fase fluida.</p>
Krupiczka (1967) <sup>1</sup> .	Arreglo de cilindros con un punto de contacto entre la superficie de las fases sólida y fluida.	$\frac{K_{eff}}{k_\beta} = (\kappa)^{0.280 - 0.757 \log \varepsilon_\beta - 0.057 \log \kappa}$

Tabla 2.1 Correlaciones para la conductividad térmica efectiva (*Continuación*)

Kunii y Smith (1960) <sup>1</sup> .	Resistencias térmicas en paralelo y en serie de las fases.	$\frac{K_{eff}}{k_\beta} = \varepsilon_\beta + \beta \frac{(1 - \varepsilon_\beta)}{\psi_t + \gamma/\kappa}$
		<p>donde <math>\beta = 0.895</math> para lechos de esferas compactos y <math>\beta = 1</math> para lechos sueltos. Normalmente <math>\gamma = 2/3</math> y</p> $\psi_t = \psi_2 + (\psi_1 + \psi_2)(\varepsilon_\beta - 0.259)/0.217$ <p>para <math>0.260 \leq \varepsilon_\beta \leq 0.476</math>, <math>\psi_t</math> corresponde al tipo del arreglo de las partículas: cúbico o tetraédrico, y al igual que el factor <math>\gamma</math>, son parámetros obtenidos empíricamente.</p>
Zehnder y Schlünder (1970) <sup>1</sup>	Flujo de calor unidimensional en partículas esféricas.	$\frac{K_{eff}}{k_\beta} = 1 - \sqrt{1 - \varepsilon_\beta} + \frac{2\sqrt{1 - \varepsilon_\beta}}{1 - \kappa B}$ $\times \left[ \frac{(1 - \kappa)B}{(1 - \kappa B)^2} \ln\left(\frac{1}{\kappa B}\right) - \frac{B + 1}{2} - \frac{B - 1}{1 - \kappa B} \right]$
		<p>donde <math>B</math> es un factor empírico igual a</p> $B = 1.25 \left( \frac{1 - \varepsilon_\beta}{\varepsilon_\beta} \right)^{10/9}$
Batchelor y O'Brien (1977).	Contacto partícula-partícula. Analogía entre la conductividad eléctrica y térmica.	<p>En paralelo: <math>\frac{K_{eff}}{k_\beta} = \varepsilon_\beta + (1 - \varepsilon_\beta)\kappa</math></p> <p>En serie: <math>\frac{K_{eff}}{k_\beta} = \frac{\kappa}{\varepsilon_\beta\kappa + 1 - \varepsilon_\beta}</math></p>
		<p>Ajuste experimental:</p> $\frac{K_{eff}}{k_\beta} = 4 \ln \kappa - 11, \quad \kappa > 100$

Tabla 2.1 Correlaciones para la conductividad térmica efectiva (*Continuación*)

Chang (1982).	Homogeneización de las ecuaciones de difusión.		$\frac{K_{eff}}{k_\beta} = \frac{(2 - \varepsilon_\beta)\kappa + 1}{2 - \varepsilon_\beta + \kappa}$
Sahraoui y Kaviany (1993).	Flujo de calor unidimensional para arreglos en línea de partículas cilíndricas y cuadradas.	Estructuras periódicas con contacto	$\frac{K_{eff}}{k_\beta} = \frac{f(\phi)\kappa\phi^2 + (1 - \phi^{1/2}) + [1 - f(\phi)]\phi^{1/2}}{\kappa\phi^{1/2}(1 - \phi^{1/2}) + (1 + \phi^{1/2})^2 + \phi^{1/2}}$ <p>donde <math>\phi = 1 - \varepsilon_\beta</math>.</p> <p>Cilindros en línea:</p> $f(\phi) = 0.88 - 0.38\phi + 0.93\phi^2$ <p>Cilindros escalonados:</p> $f(\phi) = -0.21 + 2.77\phi - 6.77\phi^2 + 10.82\phi^3$ <p>Cuadrados en línea:</p> $f(\phi) = 0.83 - 0.18\phi$
Ochoa-Tapia y col. (1994).	Aproximación analítica usando la celda de Chang.	2D:	$\frac{K_{eff}}{k_\beta} = \frac{2\kappa - \varepsilon_\beta(\kappa - 1)}{2 + \varepsilon_\beta(\kappa - 1)}$
		3D:	$\frac{K_{eff}}{k_\beta} = \frac{3\kappa - 2\varepsilon_\beta(\kappa - 1)}{3 + \varepsilon_\beta(\kappa - 1)}$

Tabla 2.1 Correlaciones para la conductividad térmica efectiva (*Continuación*)

Hsu <i>y col.</i> (1994).	Modelos de parámetros globalizados. Arreglo de cuadrados y cilindros en línea (2D) y esferas y cubos en línea (3D).	<p>2D:</p> $\frac{K_{eff}}{k_{\beta}} = \gamma_a \gamma_c \kappa + \frac{\gamma_a(1 - \gamma_c)}{1 + (\gamma_a(\kappa^{-1} - 1))} + \frac{(1 - \gamma_a)}{1 + \gamma_a \gamma_c (\kappa^{-1} - 1)}$ <p>3D:</p> $\frac{K_{eff}}{k_{\beta}} = 1 + \gamma_a^2 - 2\gamma_a \gamma_c + 2\gamma_a^2 \gamma_c + \gamma_c^2 \gamma_a^2 \kappa + \frac{\gamma_a^2(1 - \gamma_c^2)}{1 + \gamma_a \kappa^{-1}} + \frac{2\gamma_a \gamma_c(1 - \gamma_a)}{1 - \gamma_a \gamma_c + \gamma_a \gamma_c \kappa^{-1}}$
		<p>donde <math>\gamma_a</math> y <math>\gamma_c</math> se relacionan con la porosidad por</p> $1 - \varepsilon_{\beta} = (1 - 3\gamma_c^2)\gamma_a^3 + 3\gamma_c^2\gamma_a^2$ <p>para partículas sin contacto:</p> <p>2D: <math>\gamma_c = 0</math> y <math>\gamma_a = 1 - \varepsilon_{\beta}</math></p> <p>3D: <math>\gamma_c = 0</math> y <math>\gamma_a = (1 - \varepsilon_{\beta})^{1/3}</math></p>
Feng <i>y col.</i> (2004).	Medio poroso con representaciones periódicas de características fractales. Alfombras de Sierpinski.	$\frac{K_{eff}}{k_{\beta}} = \frac{A_{nt}}{A} k_{e,nt} + \left(1 - \frac{A_{nt}}{A}\right) k_{e,sc}^{(n) \dagger}$
		<p>La expresión para <math>k_{e,nt}</math>, se deriva del modelo 2D de Hsu <i>y col.</i> (1994) para partículas sin contacto. Para una porosidad <math>\varepsilon_{\beta} = 0.36</math> se toma: <math>L = 13</math> y <math>C = 7</math>. El parámetro de contacto y la relación de áreas, para ajustar los datos experimentales, son: <math>c = 0.0005</math> y <math>A_t/A = 0.10</math>. Para partículas sin contacto <math>c = 0.0</math>. El parámetro <math>\beta^{(n)} = \beta^{(0)}/k_{e,sc}^{(n)-1}</math>, <math>\beta^{(0)} = \kappa</math> y el superíndice <math>n = 1, 2, 3, \dots</math>. Las ecuaciones son utilizadas en un algoritmo recursivo.</p>

Tabla 2.1 Correlaciones para la conductividad térmica efectiva (*Continuación*)

$$\dagger k_{e,sc}^{(n)} = k_{e,sc}^{(n-1)} \left( \frac{1 - C^{(n)}/L^{(n)}}{c(\beta^{(n)} - 1) + 1} + \frac{C^{(n)}/L^{(n)}}{C^{(n)}(\beta^{(n)} - 1) + L^{(n)}} \right)^{-1}$$

<sup>1</sup>Consultar para trabajos experimentales.

Las correlaciones de la tabla anterior, obtenidas en cada una de las investigaciones citadas, son el resultado de la adaptación de resultados experimentales y de un trasfondo teórico del proceso de conducción calor a través de las ecuaciones fenomenológicas que describen este proceso. Para las correlaciones empíricas los valores predichos con estas aproximaciones resultan limitadas por ser obtenidas para sistemas experimentales particulares. En el caso de aquellas desarrolladas de forma puramente teórica, se limitan por el hecho del mismo modelado matemático. Estas limitaciones en la teoría sobrevienen en las expresiones analíticas encontradas para la predicción de los coeficientes efectivos o en las limitaciones computacionales, en esquemas numéricos, del cálculo de estos coeficientes. Tanto para las correlaciones semi-empíricas como para las expresiones teóricas, el uso de representaciones está limitada estructuralmente a geometrías, que si se comparan con la geometría de sistemas heterogéneos encontrados comúnmente, son una sobre-simplificación de la microestructura de un medio poroso.

### 2.1.2. Dispersión de un soluto en un medio poroso

La dispersión de un soluto en un medio poroso es un proceso complejo, relacionado con un patrón de flujo y las irregularidades geométricas existentes en la interfase sólido-fluido. Todos los análisis de este tipo de problemas pueden ser categorizados en tres distintos enfoques para llegar a conocer la localización exacta de las interfaces en un medio poroso real, lo que permite modelar el fenómeno de dispersión en sistemas heterogéneos. El primero de estos enfoques es el probabilístico (Greenkorn y Kessler, 1969; Haring y Greenkorn, 1970; Saffman, 1960; Jong, 1958), donde el medio poroso es visto como una serie de poros cuyo radio, longitud y orientación son determinados mediante funciones de distribución probabilística. Este tipo de métodos se basan en la probabilidad de que una partícula *marcada* pase a través de un poro dado, que es proporcional a la tasa de flujo volumétrico en cada poro, permitiendo correlacionar el coeficiente de dispersión en términos de funciones de distribución. Los

modelos probabilísticos son útiles para determinar la sensibilidad del coeficiente de dispersión a ciertos parámetros característicos del medio poroso, sin embargo estos modelos desprecian los detalles del campo de velocidad, lo que provoca que para flujos donde la convección es dominante, no resulten ser buenas aproximaciones.

Un segundo enfoque para abordar el problema de dispersión en un medio poroso es el uso de ecuaciones de transporte de medio efectivo, obtenidas mediante la aplicación del método del promedio volumétrico (Carbonell y Whitaker, 1983). El modelo obtenido de aplicar esta metodología incluye un parámetro efectivo del coeficiente de dispersión que se predice teóricamente de forma directa, a partir de resolver una serie de problemas de valores a la frontera, conocido como cerradura. Este esquema de cerradura hace uso de variables auxiliares que son calculadas en celdas unitarias representativas de medios porosos periódicos.

El tercer enfoque, reemplaza la estructura de un medio poroso real con un modelo geométrico más simple. La mayoría de los modelos usan alguna variación del tubo capilar usado por Taylor (1953), donde el medio poroso es aproximado por un arreglo de tubos capilares, tal y como lo proponen Paine *y col.* (1983). En el intento de modelar la complejidad de un medio poroso real, los arreglos de tubos capilares presentan variaciones en la orientación y en su diámetro. La utilidad de este tipo de modelos para la predicción del coeficiente de dispersión se puede encontrar en los estudios de Sorensen y Steward (1974).

En muchos de los casos que usan este tipo de enfoques, se posibilita la obtención de una ecuación gobernante del proceso de dispersión de toda la región del medio poroso. En esta ecuación aparece un tensor efectivo de segundo orden (coeficiente efectivo de dispersión), que como se observará posteriormente, caracteriza el proceso de dispersión.

El análisis del problema de dispersión fue abordado en su comienzo por los trabajos pioneros de Taylor (1953, 1954). Sus estudios experimentales y teóricos demostraron que el fenómeno de dispersión en la dirección del flujo de un soluto dentro de un tubo capilar era proporcional a una relación potencial del número de Péclet ( $Pe^2$ ). Aris (1956), en base a los estudios de Taylor (1954), desarrolló un método de momentos de probabilidad para analizar la distribución del soluto y encontró que tanto la propagación de un pulso como el segundo momento de la distribución estaban relacionados directamente con el tensor de dispersión. Horn (1971) extendió los trabajos de Aris (1956) y los aplicó a la dispersión dentro de columnas cromatográficas. Estos trabajos no están relacionados directamente con el cálculo del coeficiente de dispersión en medios porosos, sin embargo representan estudios

básicos para el análisis del fenómeno de dispersión en sistemas de medios porosos, al ser aproximados mediante arreglos de tubos capilares en diferentes configuraciones, como ya se mencionó anteriormente.

El problema de dispersión en un medio poroso espacialmente periódico fue explorado por Brenner (1980), quien analizó el transporte por dispersión a través del movimiento estocástico de una partícula que fluía a través de un medio poroso espacialmente periódico. Empleando el método de momentos le permitió derivar las ecuaciones diferenciales necesarias para calcular los componentes longitudinal y transversal del tensor de dispersión; consolidando los desarrollos de Aris (1956) y Horn (1971).

El fenómeno de dispersión dentro de lechos empacados fue abordado por Gunn y Price (1969), quienes midieron experimentalmente la dispersión longitudinal y axial, considerando arreglos aleatorios y regulares de partículas cúbicas y romboidales. Sus resultados mostraron una dependencia proporcional del tensor de dispersión con el número de Péclet, similar a los resultados obtenidos previamente por Taylor (1954) y Aris (1956).

Estudios numéricos realizados para calcular el coeficiente de dispersión en la dirección longitudinal y axial, con el fin de comprender algunos aspectos de la dispersión a través de un medio poroso, fueron llevado a cabo por Eidsath *y col.* (1983), quienes analizaron el fenómeno de dispersión en modelos espacialmente periódicos y calcularon el tensor de dispersión en base al método del promedio volumétrico, resolviendo numéricamente el problema de cerradura mediante el método del elemento finito. Los resultados de Eidsath *y col.* (1983) para el componente de la dispersión longitudinal mostraron una fuerte dependencia con el número de Péclet de partícula ( $Pe_p$ ) y un incremento potencial a una razón menor de  $Pe_p^2$ .

Para sistemas donde se presentan regiones con características significativamente diferentes a la estructura promedio, Plumb y Whitaker (1988) obtuvieron los valores del coeficiente de dispersión extendiendo la técnica del promedio volumétrico a gran escala y asociando el tensor de dispersión a la solución de un problema de valores a la frontera. Usando un esquema de volumen finito, para obtener una discretización en diferencias finitas, Plumb y Whitaker (1988) resolvieron numéricamente el problema de cerradura en celdas unitarias bidimensionales de arreglos ordenados y desordenados de partículas cilíndricas.

Aplicando el método de momentos propuesto por Brenner (1980), D. Edwards *y col.* (1991) calcularon numéricamente el coeficiente de dispersión longitudinal y transversal mediante el método del elemento finito, usando celdas unitarias bidimensionales de geometría simple. Sus resultados mostraron el efecto que tiene el arreglo geométrico, la porosidad y el

número de Péclet en los componentes longitudinal y transversal del tensor de dispersión.

Sahraoui y Kaviany (1994), en celdas unitarias similares a las usadas por D. Edwards *y col.* (1991), obtuvieron el tensor de dispersión longitudinal y transversal a partir de resolver el problema de cerradura mediante una aproximación numérica por diferencias finitas. Analizaron el efecto de la forma y el arreglo de la celda unitaria, la dirección del flujo y el número de Péclet sobre el componente longitudinal del tensor de dispersión; encontraron que este componente del tensor es particularmente sensible a la geometría de la celda y al número de Péclet.

Amaral-Souto y Moyne (1997b, 1997a); Didierjean *y col.* (1997), investigaron teórica y experimentalmente, respectivamente, la dispersión en medios porosos bidimensionales. El cálculo del tensor de dispersión fue calculado en celdas unitarias formadas por un conjunto de partículas cilíndricas posicionadas de manera ordenada y aleatoria. Analizaron el efecto del arreglo geométrico de la celda unitaria y la dirección de la velocidad promedio, relativa a los ejes de posición de la celda unitaria, sobre el tensor de dispersión.

Neculae *y col.* (2002), para mejorar el proceso de transporte de masa en modelos de solidificación, obtuvieron valores del tensor de dispersión aplicando el método del promedio volumétrico a sistemas dentríticos. Usando un modelo periódico, calcularon el tensor de dispersión resolviendo numéricamente el problema de cerradura en celdas unitarias cruciformes, mediante el método de volumen finito.

Buyuktas y Wallender (2004) aplicaron el método del promedio volumétrico a medios porosos periódicos bidimensionales formados por partículas cilíndricas con arreglos ordenadas y desordenadas con el objeto de calcular los componentes del tensor de dispersión para números de Péclet relativamente pequeños ( $Pe_p \leq 100$ ). En sus resultados se muestra el efecto del número de partículas cilíndricas y su distribución dentro una celda unitaria sobre el tensor de dispersión longitudinal y transversal. Un incremento del número de partículas disminuye el tensor de dispersión longitudinal, mientras que de forma opuesta, el tensor de dispersión transversal se incrementa.

Con el propósito de observar la influencia de las contribuciones inerciales para números de Reynolds moderados sobre el tensor de dispersión, Wood (2007) determinó los componentes longitudinal y transversal del tensor de dispersión en una celda unitaria tridimensional de geometría simple. El problema de cerradura involucrado en el cálculo del tensor de dispersión fue resuelto numéricamente usando el método de elemento finito con ayuda de herramientas computacionales avanzadas y de forma analítica mediante transformadas finitas de Fourier.

Recientemente, Lugo-Méndez (2009) obtuvo expresiones analíticas para el tensor de dispersión en la dirección longitudinal y transversal, resolviendo el problema de cerradura mediante aproximaciones teóricas con funciones de Green para la celda unitaria de Chang bidimensional y tridimensional. Los resultados calculados con esta aproximación fueron comparados satisfactoriamente con los obtenidos numéricamente usando el método implícito de dirección alternante de diferencias finitas (A.D.I., por sus siglas en inglés).

Los trabajos resumidos anteriormente dan una idea acerca de la forma en que el proceso de dispersión en un medio poroso es analizado y modelado, así como la forma en que coeficiente de dispersión es predicho, algunas de las características observadas son:

- El modelamiento de la dispersión se da en términos de una ecuación efectiva que involucra frecuentemente la predicción del coeficiente efectivo de dispersión en un esquema de cerradura.
- El uso de celdas unitarias como representaciones periódicas del medio poroso, con geometrías simplificadas, son usadas como modelos en el problema de cerradura para el cálculo del coeficiente de dispersión.
- El cálculo del coeficiente de dispersión se calcula en estas celdas unitarias principalmente a partir de las soluciones numéricas del problema de cerradura.

En la Tabla 2.2 se muestran algunas de las expresiones reportadas en la literatura para el coeficiente de dispersión longitudinal como función potencial del número de Péclet obtenidas al usar diferentes configuraciones del medio poroso. Las expresiones correspondientes a los trabajos iniciales de dispersión de Taylor (1953, 1954); Aris (1956); Wooding (1960), obtenidas para los casos de tubos capilares y placas paralelas (medios no porosos), son añadidas a la Tabla 2.2 para efecto comparativo de la variación del factor exponencial  $Pe^2$  observadas en los exponentes de las expresiones del coeficiente de dispersión longitudinal, obtenidas por el uso de diferentes representaciones de un medio poroso. En la Tabla 2.2 se observa más claramente las características geométricas de las representaciones del medio poroso usadas por cada uno de los investigadores citados con anterioridad.

**Tabla 2.2.** Expresiones para el coeficiente de dispersión longitudinal.

Referencia	Características	Expresión
Taylor (1953, 1954) <sup>2</sup> y Aris (1956) <sup>2</sup> .	Conjunto de tubos capilares de longitud $L$ y radio $a$ .	$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = 1 + \frac{Pe^2}{48}, \quad 6.9 \ll Pe \ll \frac{4L}{a}$ <p>donde <math>\mathcal{D}_{A\beta}</math> es la difusividad de un fluido <math>A</math> en la fase <math>\beta</math>.</p>
Wooding (1960) <sup>3</sup>	Placas verticales paralelas.	$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = 1 + \frac{Pe^2}{210}$
Gunn y Price (1969) <sup>1;5</sup> .	Arreglos cúbico de esferas <sup>a</sup> , y lecho aleatorio de esferas <sup>b</sup> .	$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} \sim 0.7Pe_p^{1.2}, \quad Pe_p \geq 1$ $\varepsilon_\beta = 0.48^a \text{ y } \varepsilon_\beta = 0.37^b$
Eidsath <i>y col.</i> (1983) <sup>5</sup> .	Arreglo de cilindros en línea	$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} \sim 0.7Pe_p^{1.7}, \quad Pe_p \geq 10$ <p>Para <math>\varepsilon_\beta = 0.37</math>.</p>
Plumb y Whitaker (1988) <sup>5</sup> .	Arreglo de cuadrados en línea (periódico) y sistema de placas horizontales (estratificado).	<p>Periódico:</p> $\frac{\{\varepsilon_\beta\}D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = 4.0Pe_p^{1.2}$ <p>Estratificado:</p> $\frac{\varepsilon_\beta D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = 0.26Pe_p^{1.2}$ <p>donde <math>\{\varepsilon_\beta\}</math> es una porosidad promedio de las fases sólidas.</p>

Tabla 2.2 Expresiones para el coeficiente de dispersión longitudinal. (*Continuación*)

D. Edwards <i>y col.</i> (1991) <sup>4</sup> .	Arreglos escalonado de cilindros.	de $\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = 0.174Pe^{1.76}$ , $Pe \geq 10$ Para $\varepsilon_\beta = 0.4$
	Arreglos hexagonal de cilindros.	de $\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = 0.032e^{1.66}$ , $Pe \geq 10$ para $\varepsilon_\beta = 0.4$
Sahraoui <i>y Kaviany</i> (1994) <sup>4</sup> .	Arreglo lineal de cilindros.	$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = 0.048Pe^{1.71}$ , $10^2 \leq Pe \leq 10^3$ para $\varepsilon_\beta = 0.5$
	Arreglo escalonado de cilindros.	de $\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = 0.018Pe^{1.26}$ , $10^2 \leq Pe \leq 10^3$ para $\varepsilon_\beta = 0.5$
Amaral-Souto <i>y Moyne</i> (1997a) <sup>5</sup> .	Arreglo lineal de cuadrados.	de $\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = \alpha Pe_p^{1.88}$ , $100 \leq Pe_p \leq 4,000$ Para $\varepsilon_\beta = 0.36$
	Arreglo escalonado de cuadrados.	de $\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = \alpha Pe_p^{1.75}$ , $100 \leq Pe_p \leq 4,000$ Para $\varepsilon_\beta = 0.64$
	Arreglos de medios desordenados.	$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = \alpha Pe_p^{1.600}$ , $100 \leq Pe_p \leq 4,000$ Para $\varepsilon_\beta = 0.7$
Didierjean <i>y col.</i> (1997) <sup>1;5</sup> .	Arreglo lineal de discos.	$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = \alpha Pe_p^{1.67}$ , $Pe_p \geq 100$ para $\varepsilon_\beta = 0.68$
	Arreglo desordenado de discos.	$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = \alpha Pe_p^{1.2}$ , $Pe_p \geq 100$ para $\varepsilon_\beta = 0.68$
Neculae <i>y col.</i> (2002) <sup>4</sup> .	Arreglo lineal de estructuras cruciformes.	de $\frac{D_{xx}^*}{\varepsilon_\beta \mathcal{D}_{A\beta}} = \alpha Pe^{1.45}$ , $Pe \geq 50$ para $\varepsilon_\beta = 0.65$
	Arreglo escalonado de estructuras cruciformes.	de $\frac{D_{xx}^*}{\varepsilon_\beta \mathcal{D}_{A\beta}} = \alpha Pe^{1.45}$ , $Pe \geq 50$ para $\varepsilon_\beta = 0.42$
	Esquema de sistemas dentríticos.	$\frac{D_{xx}^*}{\varepsilon_\beta \mathcal{D}_{A\beta}} = \alpha Pe^{1.94}$ , $Pe > 50$ para $0.176 \leq \varepsilon_\beta \leq 0.76$
Buyuktas <i>y Wallender</i> (2004) <sup>5</sup> .	Arreglo lineal de discos.	$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = 0.0267Pe_p^{1.854}$ , $Pe_p \geq 10$ para $\varepsilon_\beta = 0.52$

Tabla 2.2 Expresiones para el coeficiente de dispersión longitudinal. (*Continuación*)

	Arreglo desordenado de discos.	$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = 0.0924Pe_p^{1.356}, \quad Pe_p \geq 10$ para $\varepsilon_\beta = 0.646$
Wood (2007) <sup>5</sup> .	Arreglo lineal de esferas.	$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = \frac{2}{3 - \varepsilon_\beta} + 0.22Pe_p^{1.17},$ $Pe_p < 5 \times 10^3$ para $\varepsilon_\beta = 0.38$
Lugo-Méndez (2009) <sup>5</sup> .	Celda unitaria de Chang 2D y 3D.	$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = 1 + 1.915 \times 10^{-3} + 0.1905Pe_p^2$ para un flujo potencial y $\varepsilon_\beta = 0.3$ $\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = 1 + 1.708 \times 10^{-3} + 0.1905Pe_p^2$ para un flujo reptante y $\varepsilon_\beta = 0.3$

<sup>1</sup>Consultar para trabajos experimentales.

<sup>2</sup> $Pe = \frac{\langle v_\beta \rangle^\beta a}{\mathcal{D}_{A\beta}}$ ;  $a$  = ancho del tubo capilar.

<sup>3</sup> $Pe = \frac{\langle v_\beta \rangle^\beta h}{\mathcal{D}_{A\beta}}$ ;  $h$  = separación entre placas.

<sup>4</sup> $Pe = \frac{\langle v_\beta \rangle^\beta \ell_c}{\mathcal{D}_{A\beta}}$ ;  $\ell_c$  = longitud de celda unitaria.

<sup>5</sup> $Pe = \frac{\langle v_\beta \rangle^\beta d_p}{\mathcal{D}_{A\beta}} \left( \frac{\varepsilon_\beta}{1 - \varepsilon_\beta} \right)$ ;  $d_p$  = diámetro de partícula.

En la tabla anterior, las relaciones potenciales del coeficiente de dispersión longitudinal con el número de Péclet resumen el efecto particular de la geometría de la representación del medio poroso sobre el coeficiente de dispersión longitudinal en diferentes casos de estudio citados para la dispersión. En general las celdas unitarias son sobre-simplificaciones de la microestructura encontrada en un medio porosos real.

## 2.2. Motivación y Justificación

Con base en los antecedentes revisados, el análisis de los fenómenos de conducción de calor y dispersión de un soluto en sistemas heterogéneos, se observa que es común el uso de ecuaciones de medio efectivo, donde el efecto de la distribución de las fases y la microestructura del medio poroso quedan contenidos dentro de un parámetro efectivo. En la predicción de estos parámetros se observa un uso frecuente de representaciones periódicas del

medio poroso como celdas unitarias de geometrías simples, que en esencia, no logran capturar la complejidad de la microestructura que podría encontrarse de un sistema heterogéneo real.

En la actualidad existen herramientas computacionales capaces de explorar el uso de celdas unitarias de geometrías más complejas a las utilizadas por la mayoría de los investigadores citados. El uso de celdas unitarias con geometrías que caractericen mejor la microestructura de un medio poroso, podría permitir la predicción de coeficientes efectivos para representaciones razonables de medios porosos y proporcionar un mejor entendimiento de la manera en como la geometría afecta los coeficientes efectivos presentes en las ecuaciones gobernantes promediadas que describen los procesos de transferencia de calor por conducción y de dispersión de un soluto en un medio poroso.

## **2.3. Objetivos**

### **2.3.1. General**

Predecir coeficientes efectivos de transporte para los problemas de transferencia de calor por conducción y de dispersión en un medio poroso.

### **2.3.2. Objetivos Particulares**

- Explorar el uso de herramientas computacionales avanzadas, que utilizan el método del elemento finito, para resolver el problema asociado al cálculo de coeficientes efectivos de conducción de calor y dispersión.
- Predecir valores de los coeficientes de conductividad efectiva y de dispersión, derivadas del método del promedio volumétrico, para varias representaciones periódicas con geometrías relativamente más complejas a las geometrías comúnmente usadas.
- Comparar los resultados de los coeficientes efectivos calculados con los datos reportados previamente de la literatura.

## CAPÍTULO 3

# ECUACIONES DE TRANSPORTE DE MEDIO EFECTIVO

En este capítulo se revisa brevemente la aplicación del método del promedio volumétrico propuesta por Whitaker (1999) a los problemas de conducción de calor y de dispersión. Se presenta también el problema de valores a la frontera (problema de cerradura) asociado a la predicción de los coeficientes de medio efectivo presentes en las ecuaciones de transporte promedio obtenidas con esta metodología.

### 3.1. Transporte de calor por conducción

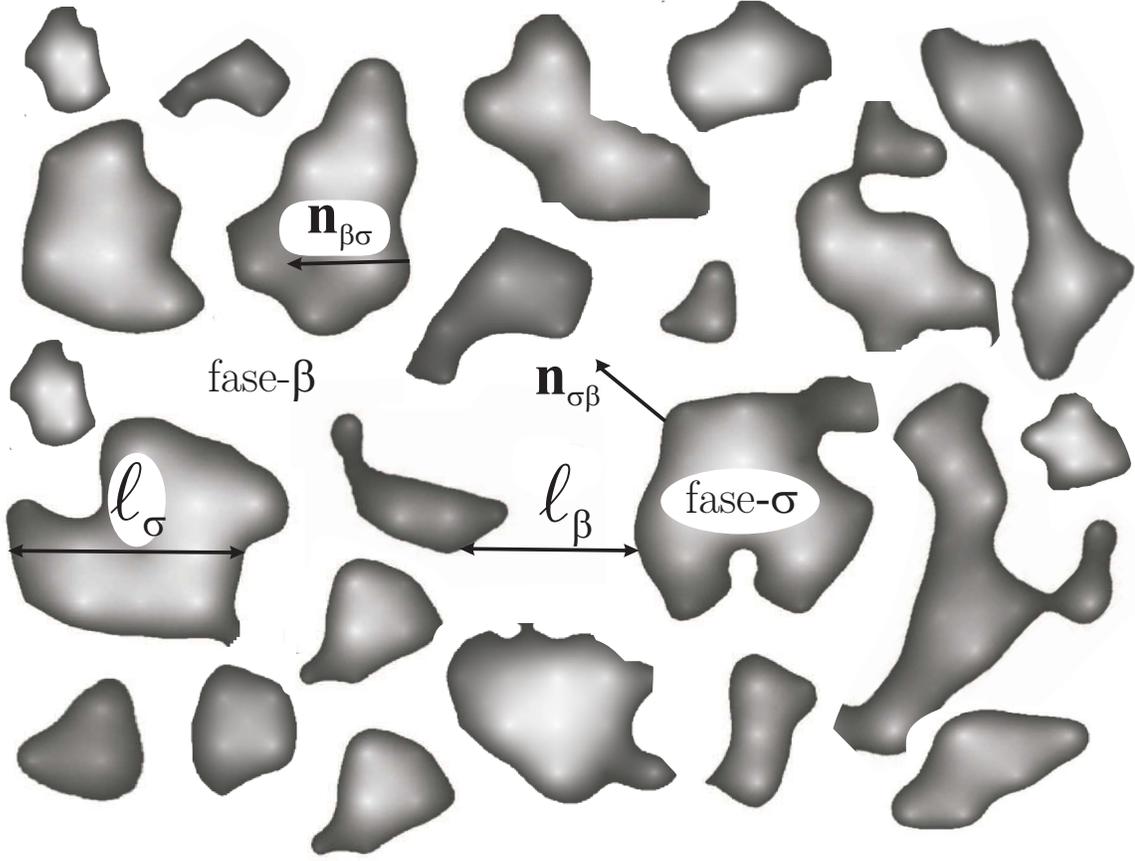
Considérese el problema de transferencia de calor por conducción en un sistema de dos fases, donde la fase  $\beta$  representa una fase fluida continua y la fase  $\sigma$  representa una fase sólida de estructura constante donde no existen fenómenos superficiales asociados a reacciones químicas, cambios de fase, adsorción, etc. Ver Figura 3.1. El sistema anterior se puede describir mediante el siguiente problema de valores a la frontera

$$(\rho c_p)_\beta \frac{\partial T_\beta}{\partial t} = \nabla \cdot (k_\beta \nabla T_\beta), \text{ en la fase-}\beta \quad (3.1a)$$

$$(\rho c_p)_\sigma \frac{\partial T_\sigma}{\partial t} = \nabla \cdot (k_\sigma \nabla T_\sigma), \text{ en la fase-}\sigma \quad (3.1b)$$

$$\text{C.F.1} \quad T_\beta = T_\sigma, \text{ en } A_{\beta\sigma} \quad (3.1c)$$

$$\text{C.F.2} \quad -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla T_\beta = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\sigma \nabla T_\sigma, \text{ en } A_{\beta\sigma} \quad (3.1d)$$



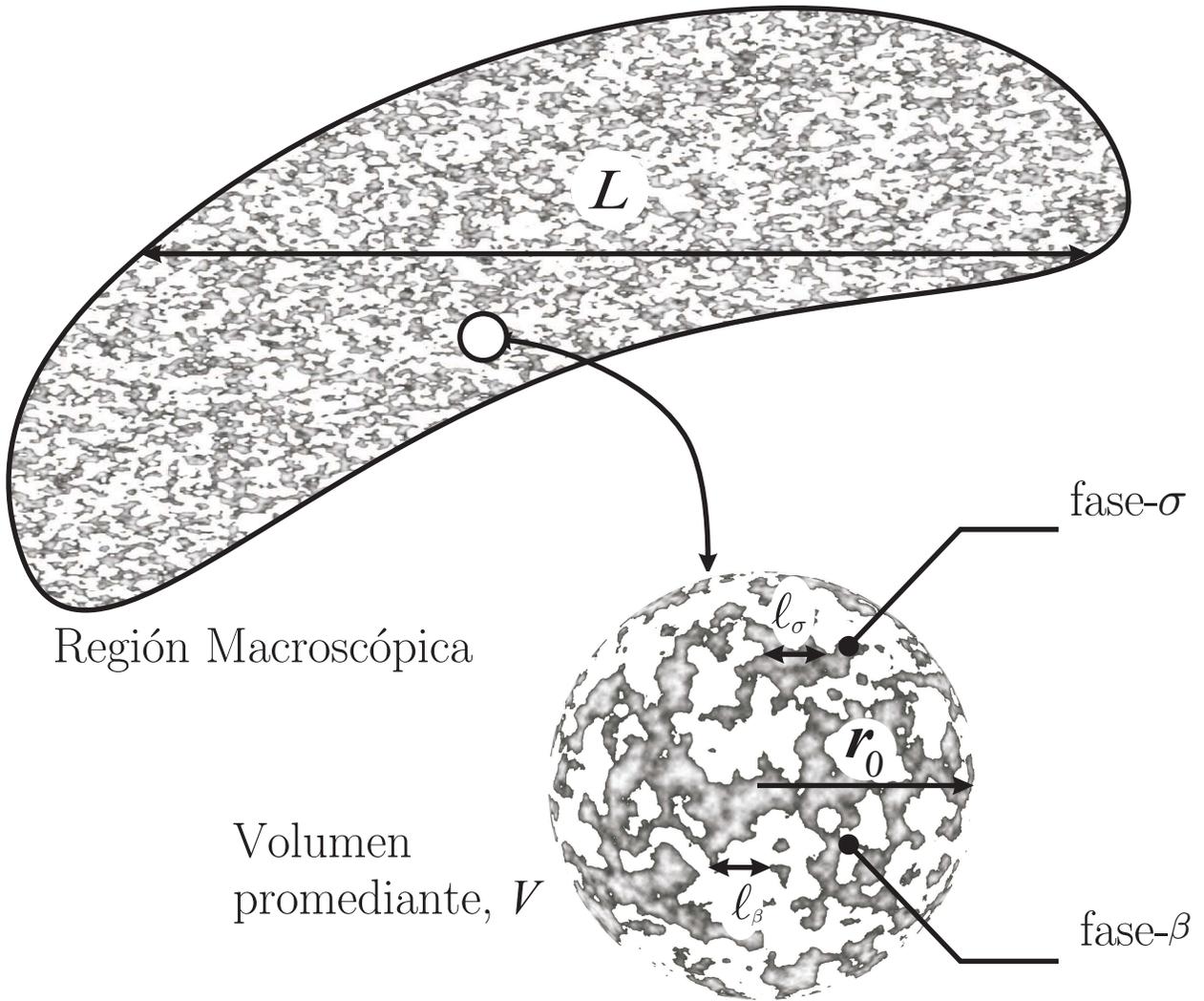
**Figura 3.1.** Sistema de dos fases.

Las variables  $T_\beta$  y  $T_\sigma$  son las temperaturas puntuales en las fases  $\beta$  y  $\sigma$  respectivamente,  $k_\beta$  y  $k_\sigma$  son las conductividades térmicas,  $\mathbf{n}_{\beta\sigma}$  representa el vector normal unitario hacia la fase fluida y  $\mathbf{n}_{\sigma\beta}$  el vector normal unitario análogo en dirección contraria. Las condiciones de frontera en la interfase  $\beta - \sigma$  ( $A_{\beta\sigma}$ ) son la continuidad de la temperatura y el flux de calor, ecuaciones (3.1c) y (3.1d), respectivamente. Los detalles del sistema considerado se ilustran en la Figura 3.1.

Con base en la teoría del promedio volumétrico (Whitaker, 1999) y bajo la suposición de la condición de equilibrio térmico local, cuya principal consideración es que las temperaturas promedio de cada una de las fases son aproximadamente iguales, se obtiene una única ecuación que describe el proceso de transferencia de calor por conducción, expresada como

$$\langle \rho C_p \rangle \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{K}_{eff} \cdot \nabla \langle T \rangle) \quad (3.2)$$

donde  $\mathbf{K}_{eff}$  es el tensor de segundo orden de la conductividad térmica efectiva y  $\langle \rho C_p \rangle =$



**Figura 3.2.** Volumen promediante y longitudes características del sistema de dos fases,  $\beta - \sigma$ .

$\varepsilon_\beta(\rho c_p)_\beta + \varepsilon_\sigma(\rho c_p)_\sigma$ . En la Ecuación (3.2) se supone implícitamente que las conductividades térmicas y las capacidades caloríficas de las fases son constantes. La temperatura promedio del sistema,  $\langle T \rangle$ , estableciendo la suposición de equilibrio térmico local, se define como

$$\langle T \rangle = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_V T dV = \varepsilon_\beta \langle T_\beta \rangle^\beta + \varepsilon_\sigma \langle T_\sigma \rangle^\sigma \quad (3.3)$$

donde  $\langle T_\beta \rangle^\beta$  y  $\langle T_\sigma \rangle^\sigma$  representan las temperaturas promedio intrínsecas de las fases  $\beta$  y  $\sigma$ ,

respectivamente; para la fase  $\beta$  esta temperatura se define explícitamente como

$$\langle T_\beta \rangle^\beta = \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_{V_\beta} T_\beta dV \quad (3.4)$$

En las ecuaciones (3.4) y (3.3),  $V_\beta$  representa la región ocupada por la fase  $\beta$ , de volumen  $\mathcal{V}_\beta$ , dentro de la región de promediado,  $V$ , de volumen  $\mathcal{V}$ . Ver Figura 3.2. En la ecuación (3.3)  $\varepsilon_\beta$  y  $\varepsilon_\sigma$  representan la relación volumétrica de las fases  $\beta$  y  $\sigma$ , definidas como

$$\varepsilon_\beta = \frac{\mathcal{V}_\beta}{\mathcal{V}}, \quad \varepsilon_\sigma = \frac{\mathcal{V}_\sigma}{\mathcal{V}} \quad (3.5)$$

Las suposiciones involucradas para la obtención del modelo de la Ec. (3.2) están asociadas principalmente a longitudes características del sistema en consideración, mostradas en la Figura 3.2. De manera general el modelo de una sola ecuación es válido siempre que las siguientes restricciones de escala se cumplan

$$\ell_\sigma \ll r_0; \quad \ell_\beta \ll r_0; \quad r_0^2 \ll L_\varepsilon L_{T1} \quad (3.6)$$

donde  $\ell_\sigma$  y  $\ell_\beta$  representan las longitudes características de las fases  $\sigma$  y  $\beta$ , respectivamente, y  $r_0$  es el radio del volumen promediante, señalados en la Figura 3.2;  $L_\varepsilon$  y  $L_{T1}$  representan longitudes características asociadas a los cambios apreciables en las fracciones de volumen de las fases  $\beta$  y  $\sigma$  y cambios asociados con la *primera derivada* de  $\langle T \rangle$ . Las longitudes  $L_\varepsilon$  y  $L_{T1}$  no necesariamente son iguales a  $L$ , que representa la longitud característica de la región macroscópica en consideración. Las primeras dos restricciones de la Ec. (3.6) indican que las fases  $\beta$  y  $\sigma$  deben ser lo suficientemente distribuidas dentro del volumen promediante, de tal forma que la estructura del medio no dependa de  $r_0$ . La segunda restricción considera que las variaciones significativas de cantidades promediadas ocurren sobre una distancia lo suficientemente grande comparada con la longitud de  $r_0$ . En ciertos casos la restricción de escala  $r_0^2 \ll L_\varepsilon L_{T1}$  puede ser representada como  $r_0^2 \ll L^2$  (Quintard y Whitaker, 1994) y las restricciones de escala en la Ec. (3.6) pueden combinarse para obtener una restricción más general dada por

$$\ell_\beta \ll r_0 \ll L; \quad \ell_\sigma \ll r_0 \ll L \quad (3.7)$$

la cual se cumple para muchos medios porosos comunes.

El tensor de conductividad térmica efectiva se define por medio de la ecuación de energía promedio (macroscópica) en términos de la desviación de la temperatura [detalles en

Whitaker, 1999, C. 2], de acuerdo a:

$$\langle \rho C_p \rangle \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ [\varepsilon_\beta k_\beta + (1 - \varepsilon_\beta) k_\sigma] \cdot \nabla \langle T \rangle + \frac{(k_\beta - k_\sigma)}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{T}_\beta dA \right\} \quad (3.8)$$

donde  $\tilde{T}_\beta = T_\beta - \langle T_\beta \rangle^\beta$  es la desviación de la temperatura de la fase  $\beta$ . Nozad *y col.* (1985b), relacionaron las desviaciones de la temperatura puntual ( $\tilde{T}_\beta$  y  $\tilde{T}_\sigma$ ) con el gradiente de la temperatura promedio ( $\nabla \langle T \rangle$ ), con un conjunto de ecuaciones constitutivas de cerradura (o transformaciones) dadas por

$$\tilde{T}_\beta = \mathbf{b}_\beta \cdot \nabla \langle T \rangle \quad (3.9a)$$

$$\tilde{T}_\sigma = \mathbf{b}_\sigma \cdot \nabla \langle T \rangle \quad (3.9b)$$

Los vectores de transformación  $\mathbf{b}_\beta$  y  $\mathbf{b}_\sigma$  permiten asociar los cambios de la temperatura promedio sobre la longitud de la escala macroscópica ( $L$ ) en cambios de las desviaciones de la temperatura sobre una longitud de escala microscópica ( $\ell_\sigma$  y  $\ell_\beta$ ). Estos vectores satisfacen el carácter tensorial del coeficiente de conductividad térmica. Usando estas transformaciones en la ecuación (3.8), el tensor de conductividad térmica efectiva se puede expresar de forma adimensional como

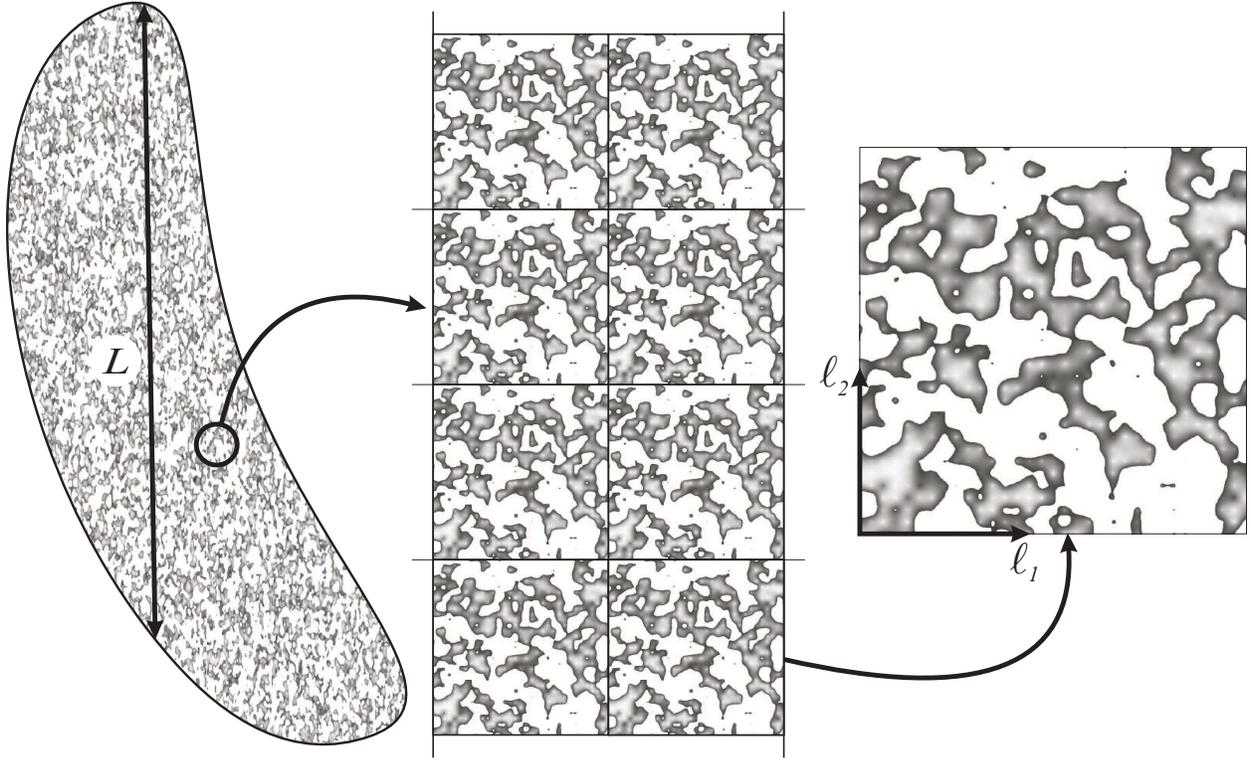
$$\frac{\mathbf{K}_{eff}}{k_\beta} = [\varepsilon_\beta + (1 - \varepsilon_\beta)\kappa] \mathbf{I} + \frac{(1 - \kappa)}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b}_\beta dA \quad (3.10)$$

donde  $\mathbf{I}$  representa el tensor identidad, el parámetro  $\kappa$  está definido como  $\kappa = k_\beta/k_\sigma$ .

La solución para  $\mathbf{b}_\beta$  y  $\mathbf{b}_\sigma$  se obtienen a partir del desarrollo de un sistema de ecuaciones y condiciones de frontera, llamada problema de cerradura, lo que su vez, permite calcular el coeficiente de conductividad térmica efectiva. Normalmente se considera que este sistema de ecuaciones constitutivas presentan soluciones en estado cuasi-estacionario, dado que usualmente se satisfacen las siguientes restricciones para un escala de tiempo característico, ( $t^*$ ):

$$\frac{k_\beta t^*}{(\rho c_p)_\beta \ell_\beta^2} \gg 1 \quad \text{y} \quad \frac{k_\sigma t^*}{(\rho c_p)_\sigma \ell_\sigma^2} \gg 1 \quad (3.11)$$

Estas restricciones son del mismo orden que aquellas necesarias para suponer la condición de equilibrio térmico local (Ec. 3.7).



**Figura 3.3.** Región representativa de celda unitaria para el sistema de dos fases  $\beta - \sigma$ .

Las soluciones para  $\mathbf{b}_\beta$  y  $\mathbf{b}_\sigma$ , se determinan mediante el problema de cerradura que fue presentado originalmente por Nozad *y col.* (1985b), y el cual se expresa de la forma siguiente

$$\nabla^2 \mathbf{b}_\beta = 0 \quad (3.12a)$$

$$\nabla^2 \mathbf{b}_\sigma = 0 \quad (3.12b)$$

$$\text{C.F.1} \quad \mathbf{b}_\beta = \mathbf{b}_\sigma, \text{ en } A_{\beta\sigma} \quad (3.12c)$$

$$\text{C.F.2} \quad -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \kappa \nabla \mathbf{b}_\sigma + (1 - \kappa) \mathbf{n}_{\beta\sigma}, \text{ en } A_{\beta\sigma} \quad (3.12d)$$

$$\text{Periodicidad:} \quad \mathbf{b}_\beta(\mathbf{r} + \ell_i) = \mathbf{b}_\beta(\mathbf{r}), \quad \mathbf{b}_\sigma(\mathbf{r} + \ell_i) = \mathbf{b}_\sigma(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.12e)$$

$$\text{Restricciones:} \quad \langle \mathbf{b}_\beta \rangle^\beta = 0, \quad \langle \mathbf{b}_\sigma \rangle^\sigma = 0 \quad (3.12f)$$

donde  $\mathbf{r}$  es el vector de posición de un punto dentro de la celda unitaria y  $\ell_i$  es el vector periódico que representa las longitudes en la dirección  $i$ , que caracterizan un medio poroso. La condición de periodicidad implica una simplificación basada sobre la restricción de escala de la Ec. (3.7).

El Sistema de Ecuaciones (3.12), que se conoce propiamente como problema de *cerradura*,

se resuelve en representaciones espacialmente periódicas de medios porosos, conocidas como celdas unitarias, las cuales representan el medio poroso mediante arreglos de partículas. Asumir que un medio poroso se puede representar mediante un arreglo repetitivo de partículas extendidas indefinidamente en todas las direcciones, permite que la solución de  $\mathbf{b}_\beta$  y  $\mathbf{b}_\sigma$  para un medio poroso entero se puede obtener a partir de la solución de una sola celda unitaria. Esto es, porque  $\mathbf{b}_\beta$  y  $\mathbf{b}_\sigma$  tienen el mismo valor en puntos equivalentes a través del medio poroso (Brenner, 1980). El volumen del arreglo de partículas es dividido en celdas unitarias las cuales mediante su uso repetitivo en las direcciones  $\ell_i$ , permiten reproducir un medio poroso real. No existe alguna restricción en el tamaño o número de partículas en una celda unitaria y las estructuras de las celdas unitarias pueden ser inclusive arbitrariamente tan complejas como lo muestra la región representativa en la Figura 3.3, y por lo tanto pueden contener todas las características importantes de un sistema; sin embargo, el contenido en cada una de las celdas unitarias debe ser idéntica al del medio poroso. Esto quiere decir que la fracción volumétrica de una celda unitaria debe ser la misma que la del medio poroso real.

Una vez determinado el campo  $\mathbf{b}_\beta$  y  $\mathbf{b}_\sigma$  dentro de una celda unitaria es posible la evaluación de la integral en la Ecuación (3.10) y por lo tanto calcular el tensor de conductividad térmica efectiva  $\mathbf{K}_{eff}$ . Del problema de cerradura dado en las ecuaciones (3.12) y la expresión del tensor de conductividad térmica efectiva de la Ec. (3.10), debe ser claro que el tensor de conductividad térmica efectiva adimensional,  $\mathbf{K}_{eff}/k_\beta$ , dependerá de la relación de conductividades térmicas  $\kappa = k_\beta/k_\sigma$ , la fracción volumétrica de la fase  $\beta$  ( $\varepsilon_\beta$ ), y de la geometría del sistema, dado por  $\mathbf{n}_{\beta\sigma}$  en la condición de frontera del problema de cerradura (Ec. 3.12d).

## 3.2. Dispersión Pasiva

Considerando un sistema sólido-fluido como el que se muestra en la Figura 3.4. La región  $\sigma$  representa una fase sólida rígida e impermeable y la región  $\beta$  representa una fase fluida. El proceso de transporte convectivo-difusivo de un soluto  $A$  no reactivo dentro de la fase fluida se puede modelar a partir de las siguientes ecuaciones gobernantes y condiciones a la frontera

$$\frac{\partial c_{A\beta}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_\beta c_{A\beta}) = \nabla \cdot (\mathcal{D}_{A\beta} \nabla c_{A\beta}), \quad \text{en la fase-}\beta \quad (3.13a)$$

$$\text{C.F.1} \quad -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\mathcal{D}_{A\beta} \nabla c_{A\beta}) = 0, \quad \text{en } A_{\beta\sigma} \quad (3.13b)$$

El problema de valores a la frontera que describe el patrón de flujo del fluido, representado en la Figura 3.4, está dado por

$$0 = -\nabla p_\beta + \mu_\beta \nabla^2 \mathbf{v}_\beta, \quad \text{en la fase-}\beta \quad (3.14a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\beta = 0 \quad (3.14b)$$

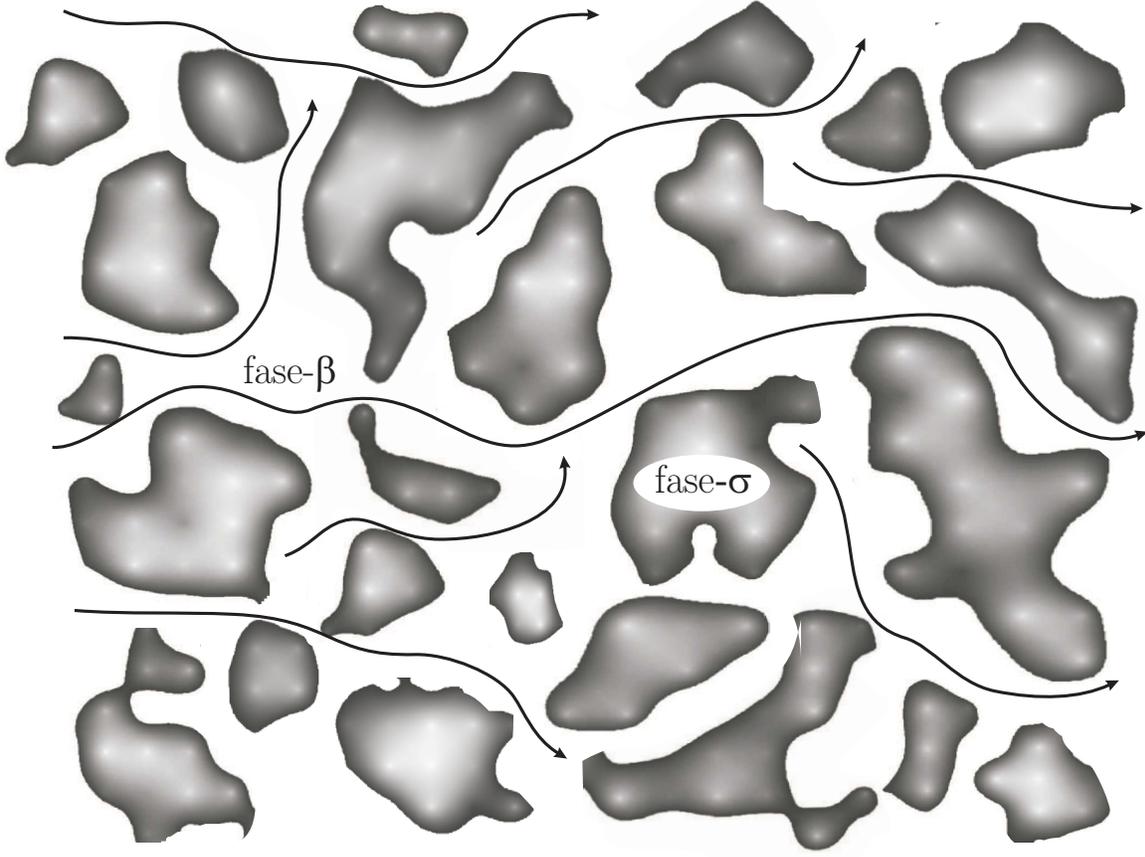
$$\text{C.F.2} \quad \mathbf{v}_\beta = 0, \quad \text{en } A_{\beta\sigma} \quad (3.14c)$$

En las ecuaciones anteriores,  $c_{A\beta}$ , es la concentración de la especie química  $A$ , limitada a una solución diluida, para la cual  $c_{A\beta} \ll c_\beta$ ,  $\mathbf{v}_\beta$  es la velocidad másica promedio del fluido,  $\mu_\beta$  es la viscosidad y  $p_\beta$  la presión hidrodinámica del fluido y  $\mathcal{D}_{A\beta}$  es el coeficiente de difusión molecular para la especie química  $A$  de la mezcla de  $N_C$  componentes, y su definición se deriva de la ecuación de Stefan-Maxwell para soluciones diluidas,  $\mathcal{D}_{A\beta}$  se expresa implícitamente de la forma siguiente

$$\frac{1}{\mathcal{D}_{A\beta}} = \sum_{\substack{B=1 \\ B \neq A}}^{B=N_C} \frac{x_{B\beta}}{\mathcal{D}_{AB}} \quad (3.15)$$

Los parámetros geométricos son: la superficie entre las fases sólida y fluida,  $A_{\beta\sigma}$  y el vector normal unitario que se dirige desde la fase  $\beta$  hacia la fase  $\sigma$ ,  $\mathbf{n}_{\beta\sigma}$ . La presión hidrodinámica del fluido está dada por  $p_\beta = \hat{p}_\beta - \rho_\beta g_z z$ ,  $\rho_\beta$  es la densidad del fluido y  $\hat{p}_\beta$  es la presión total del fluido.

En el problema de convección-difusión se han considerado las siguientes suposiciones: (i) el fluido es newtoniano, incompresible e isotérmico, (ii) el flujo está completamente desarrollado, (iii) la velocidad está gobernada por la ecuación de Stokes (Ec. 3.14a), y (iv) la condición



**Figura 3.4.** Transporte convectivo-difusivo de un soluto a través de medio poroso impermeable.

de frontera de no deslizamiento se aplica en la interfase  $A_{\beta\sigma}$ , (Ec. 3.14c). Adicionalmente se considera que el flux másico se define de acuerdo a la ley de Fick.

Aplicando el método del promedio volumétrico se obtiene la ecuación de transporte del problema de difusión-convección (detalles en Whitaker, 1999, C. 3), la cual se encuentra expresada en términos de cantidades promedio de la siguiente forma

$$\frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta = \nabla \cdot (\mathbf{D}_{A\beta}^* \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta) \quad (3.16)$$

en esta ecuación  $\mathbf{D}_{A\beta}^*$  es el tensor efectivo de dispersión total, mientras que  $\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$  y  $\langle c_{A\beta} \rangle^\beta$  representan los promedios intrínsecos de la velocidad y de la concentración, respectivamente;

estos promedios se definen explícitamente como

$$\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta = \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_{V_\beta} \mathbf{v}_\beta dV, \text{ y } \langle c_{A\beta} \rangle^\beta = \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_{V_\beta} c_{A\beta} dV \quad (3.17)$$

En la Ecuación (3.16), el primer término representa la acumulación del soluto, el segundo término el transporte convectivo y el tercer término el transporte debido a la dispersión.

En la obtención de este modelo se han considerado una serie de suposiciones y restricciones relacionadas principalmente con los órdenes de magnitud y las longitudes de escala características del sistema  $\beta - \sigma$ . Ver Figura 3.2. Estas suposiciones y restricciones validan ciertas aproximaciones que permiten descartar ciertos términos necesarios para obtener el modelo de la Ec. (3.16). Las restricciones que son requeridas para que estas suposiciones sean válidas son difíciles de desarrollar. Sin embargo, de manera intuitiva se puede afirmar que las suposiciones son ciertas cuando el campo de la velocidad promedio es espacialmente estacionario y la concentración promedio no varía bruscamente. Quintard y Whitaker (1994) analizaron en detalle las restricciones, y han asumido que el modelo es válido cuando se cumple la siguiente restricción de separación de longitudes de escalas características

$$\ell_\beta \ll r_0 \ll L \quad (3.18)$$

nuevamente,  $\ell_\beta$  es la longitud característica de la fase  $\beta$  en la microescala y  $L$  la longitud característica en la macroescala. Para ciertos sistemas y bajo ciertas condiciones esta restricción resulta ser demasiado severa. Aun así, para un número considerado de problemas de transporte en medios porosos esta restricción se satisface.

El tensor total de dispersión,  $\mathbf{D}_{A\beta}^*$  que aparece en la Ec. (3.16) es la suma del tensor de difusividad efectiva,  $\mathbf{D}_{eff}$ , y el tensor de dispersión hidrodinámico,  $\mathbf{D}_{A\beta}$ ,

$$\mathbf{D}_{A\beta}^* = \mathbf{D}_{eff} + \mathbf{D}_{A\beta} \quad (3.19)$$

En la ecuación anterior  $\mathbf{D}_{eff}$  y  $\mathbf{D}_{A\beta}$  están definidas, respectivamente como

$$\mathbf{D}_{eff} = \mathcal{D}_{A\beta} \left( \mathbf{I} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{f}_\beta dA \right), \quad (3.20)$$

$$\mathbf{D}_{A\beta} = \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \mathbf{f}_\beta \rangle^\beta \quad (3.21)$$

donde  $\mathbf{I}$  es el tensor identidad, y  $\tilde{\mathbf{v}}_\beta = \mathbf{v}_\beta - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$  son las desviaciones de la velocidad. Debido a que se supone que la solución es diluida, el cálculo para la velocidad es independiente de la concentración y las desviaciones de la velocidad se pueden obtener una vez determinada la velocidad de las ecuaciones del balance de momentum, establecido en el Sistema de Ecuaciones (3.14). El vector  $\mathbf{f}_\beta$  se refiere a una variable de cerradura, obtenido a partir de la solución de un problema de valores a la frontera asociado a la solución formal de las desviaciones de la concentración ( $\tilde{c}_{A\beta}$ ), llamado formalmente como *problema de cerradura*, llamado así en razón de que permite cerrar el modelo presentado en la Ec. (3.16). Dentro de un medio poroso homogéneo el coeficiente de dispersión,  $\mathbf{D}_{A\beta}^*$  es simétrico y la Ec. (3.16) se puede escribir de la forma siguiente

$$\frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \cdot \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta = \mathbf{D}_{A\beta}^* : \nabla \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \quad (3.22)$$

El vector  $\mathbf{f}_\beta$  permite asignar  $\nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta$  a las desviaciones del concentración, que definen el problema de cerradura, a partir de la concentración promedio ( $\tilde{c}_{A\beta} = c_{A\beta} - \langle c_{A\beta} \rangle^\beta$ ). Se puede observar en las ecuaciones (3.20) y (3.21) que la evaluación de este vector permite calcular los componentes del tensor de dispersión total,  $\mathbf{D}_{A\beta}^*$ .

Para una escala de tiempo que se asocia a cambios característicos en las desviaciones de la concentración, representados por  $t^*$ , se puede considerar que el problema de cerradura asociado a la solución formal de  $\tilde{c}_{A\beta}$  es quasi-estacionario si la siguiente restricción se cumple

$$\frac{\mathcal{D}_{A\beta} t^*}{\ell_\beta^2} \gg 1, \quad (3.23)$$

mediante esta restricción el término de acumulación en la ecuación gobernante para  $\tilde{c}_{A\beta}$  es despreciable y como consecuencia la ecuación gobernante para  $\mathbf{f}_\beta$ . También esta restricción permite considerar que el tensor de dispersión es independiente del tiempo. En la evaluación del tensor de dispersión, el vector  $\mathbf{f}_\beta$  se obtiene de la solución del siguiente problema de valores a la frontera,

$$\mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \mathbf{f}_\beta + \tilde{\mathbf{v}}_\beta = \nabla \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla \mathbf{f}_\beta \quad (3.24a)$$

$$\text{C.F.1} \quad -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathcal{D}_{A\beta} \mathbf{f}_\beta = \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathcal{D}_{A\beta}, \text{ en } A_{\beta\sigma} \quad (3.24b)$$

$$\text{Periodicidad:} \quad \mathbf{f}_\beta(\mathbf{r} + \ell_i) = \mathbf{f}_\beta(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.24c)$$

$$\text{Restricción 1:} \quad \langle \mathbf{f}_\beta \rangle^\beta = 0 \quad (3.24d)$$

El Sistema de Ecuaciones (3.24) se conoce, nuevamente, como problema de *cerradura* para el problema de dispersión pasiva, las cuales se resuelven en representaciones de medios porosos espacialmente periódicos (celdas unitarias) que capturan la esencia física de las características de la microestructura. Esta celda no requiere del conocimiento completo de la microestructura, ciertamente se puede suponer que el modelo periódico del medio poroso es una representación razonable. Es decir, la celda unitaria representativa puede ser tan simple como arreglos partículas de geometría regular contenidas dentro de la celda o tan complejas como la región ilustrada en la Figura (3.3).

Como se puede observar de la Ecuación (3.24a) se requiere conocer previamente las desviaciones de la velocidad  $\tilde{\mathbf{v}}_\beta$ , para poder calcular  $\mathbf{f}_\beta$ , el término  $\tilde{\mathbf{v}}_\beta$  en la Ecuación (3.24a) sugiere que la solución para la velocidad se puede considerar como un parámetro que permite el cálculo del tensor efectivo de dispersión. Para la solución de  $\mathbf{f}_\beta$ , la velocidad  $\mathbf{v}_\beta$  (y por lo tanto las desviaciones de la velocidad y la velocidad promedio) se deben determinar dentro del dominio adoptado por el problema de cerradura.

Retomando el problema de valores a la frontera que describen un flujo de Stokes [Sis. de Ec. (3.14)] y para los propósitos del problema de cerradura, la velocidad  $\mathbf{v}_\beta$  se determina dentro de una celda unitaria en un dominio periódico de acuerdo al siguiente problema de valores a la frontera

$$0 = -\nabla p_\beta + \mu_\beta \nabla^2 \mathbf{v}_\beta, \text{ en la fase-}\beta \quad (3.25a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\beta = 0 \quad (3.25b)$$

$$\text{C.F.2} \quad \mathbf{v}_\beta = 0, \quad \text{en } A_{\beta\sigma} \quad (3.25c)$$

$$\text{Periodicidad: } p_\beta(\mathbf{r} + \ell_i) = p_\beta(\mathbf{r}) + \delta_{jk} \Delta p, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.25d)$$

$$\text{Periodicidad: } \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{r} + \ell_i) = \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.25e)$$

$$\text{Restricción 2: } \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta = \mathbf{v}_0 \quad (3.25f)$$

En el sistema de ecuaciones anterior, la presión y la velocidad son periódicas. En una de las caras de la celda periódica una presión constante  $\Delta p$  es añadida a la presión periódica  $p_\beta$ , existiendo entonces un gradiente de presión que genera el flujo. La constante  $\delta_{jk} = 1$ , define la dirección principal en la que se define el flujo, donde  $jk$  indica la frontera de control dada un  $\Delta p$  en una de las fronteras periódicas para la presión, detalles en Wood (2007).

Con base en los párrafos anteriores, el cálculo del tensor de dispersión  $\mathbf{D}_{A\beta}^*$  consiste primeramente en la solución del Sistema de Ecuaciones (3.25) para una caída de presión,

$\Delta p$  dada en un celda unitaria periódica, con lo que se resuelve el campo velocidad  $\mathbf{v}_\beta$  en el dominio periódico. Usando  $\mathbf{v}_\beta$  se determina  $\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$  y  $\tilde{\mathbf{v}}_\beta$ , y enseguida se resuelve el problema de cerradura del Sistema de Ecuaciones (3.24) para obtener  $\mathbf{f}_\beta$ . Y finalmente se sustituye  $\mathbf{f}_\beta$  y  $\tilde{\mathbf{v}}_\beta$  en las ecuaciones (3.20) y (3.21) para calcular los componentes de tensor del dispersión total  $\mathbf{D}_{A\beta}^*$ .



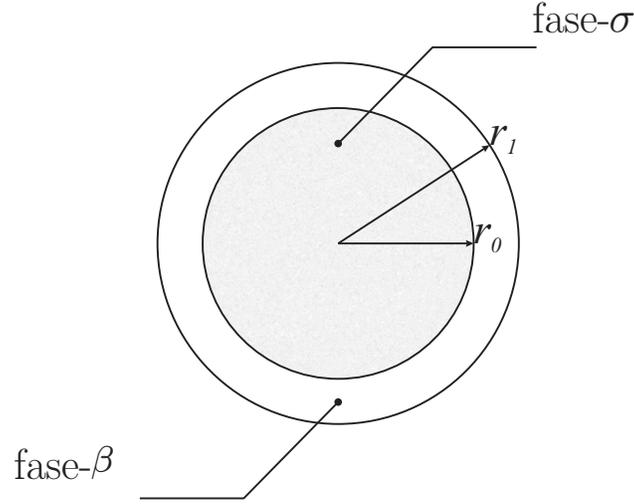
## CAPÍTULO 4

# COEFICIENTES EFECTIVOS EN CELDAS UNITARIAS DE GEOMETRÍA SIMPLE

En éste capítulo se presentan los valores calculados de los coeficientes de medio efectivo encontradas en las ecuaciones promedio que describen los fenómenos conductividad térmica y dispersión pasiva descritos en el capítulo anterior. El cálculo de los coeficientes efectivos se lleva a cabo mediante el uso de herramientas computacionales comerciales que emplean el método de elemento finito, permitiendo explorar varias de celdas unitarias con geometrías y arreglos ordenados de partículas de manera más eficiente. De los resultados se observa el efecto de varios parámetros que caracterizan estos sistemas sobre el coeficiente de conductividad térmica efectiva y el tensor dispersión total. Los resultados de los coeficientes efectivos se comparan con otros resultados teóricos reportados en la literatura.

### 4.1. Coeficiente de conductividad térmica efectiva

El cálculo del coeficiente de conductividad térmica efectiva se obtiene mediante la solución del problema de valores a la frontera del conjunto de ecuaciones (3.12), propuesto para las variables de cerradura  $\mathbf{b}_\beta$  y  $\mathbf{b}_\sigma$  usando celdas unitarias de medios porosos espacialmente periódicas. En medios porosos homogéneos el tensor de segundo orden de la conductividad térmica se puede considerar simétrico ( $\mathbf{K}_{eff} = \mathbf{K}_{eff}^T$ ) y solamente es necesario calcular uno de los componentes del tensor para predecir completamente el coeficiente efectivo de



**Figura 4.1.** Celda unitaria de Chang.

conductividad térmica. Usando el componente en la dirección longitudinal al eje de referencia, el coeficiente de conductividad térmica efectiva se expresa como el producto diádico siguiente

$$\mathbf{i} \cdot \mathbf{K}_{eff} \cdot \mathbf{i} = K_{eff} \quad (4.1)$$

#### 4.1.1. Método de solución

El cálculo de la conductividad térmica efectiva se lleva a cabo usando el software de elemento finito comercial COMSOL Multiphysics. El cual es primeramente probado con el caso límite de la solución numérica del problema de cerradura que considera el uso de celda unitaria de Chang (Figura 4.1). Usando este modelo de celda unitaria, la condición de periodicidad es reemplazada por una condición homogénea en el problema de cerradura de la forma siguiente:

$$\nabla^2 \mathbf{b}_\beta = 0, \quad r_0 < r \leq r_1 \quad (4.2a)$$

$$\text{C.F.1} \quad \mathbf{b}_\beta = 0, \quad r = r_1 \quad (4.2b)$$

$$\text{C.F.2} \quad -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \kappa \nabla \mathbf{b}_\sigma + (1 - \kappa) \mathbf{n}_{\beta\sigma}, \quad r = r_0 \quad (4.2c)$$

$$\text{C.F.3} \quad \mathbf{b}_\beta = \mathbf{b}_\sigma, \quad r = r_0 \quad (4.2d)$$

$$\nabla^2 \mathbf{b}_\sigma = 0, \quad 0 \leq r \leq r_1 \quad (4.2e)$$

Ochoa-Tapia *y col.* (1994) para la geometría de la celda unitaria de Chang bidimensional obtuvieron una aproximación analítica para la conductividad térmica efectiva (Ver Tabla 2.1), expresada como

$$\frac{K_{eff}}{k_{\beta}} = \frac{2\kappa - \varepsilon_{\beta}(\kappa - 1)}{2 + \varepsilon_{\beta}(\kappa - 1)} \quad (4.3)$$

Para la misma geometría, el problema de cerradura fue resuelto numéricamente usando una malla de 4,625 y 2,080 elementos en el esquema de discretización por elemento finito del problema de valores a la frontera del Sistema de Ecuaciones (4.2). Los resultados del coeficiente de conductividad calculados numéricamente se comparan con los resultados determinados con la aproximación analítica de la Ecuación (4.3) para una porosidad igual a 0.37 y varios valores de  $\kappa$  son presentados en Tabla 4.1.

El valor de la integral se obtiene de una opción incluida en la herramienta COMSOL Multiphysics. El cálculo de la expresión del coeficiente de conductividad de la ecuación (3.10) se calcula para varios valores de  $\kappa$  usando la interfase de COMSOL Multiphysics con MATLAB. Detalles de este tipo de procedimientos se encuentran en los apéndices A.1 y A.2; en estos apéndices se muestra la solución del problema de cerradura y el cálculo del coeficiente de conductividad térmica efectiva para un caso general de un celda unitaria de cuadrados y cilindros en línea. Adaptando la geometría para una celda unitaria Chang. En la Tabla 4.1 se observa que no existen diferencias entre los resultados analíticos y los calculados de forma numérica, usando dos diferentes números de elementos. Este problema simple muestra la importancia del término  $[n_{\beta\sigma}(1 - \kappa)]$  en la condición de frontera así como

**Tabla 4.1.** Resultados numéricos y analíticos de  $K_{eff}/k_{\beta}$  para la celda de Chang.

$\kappa = k_{\beta}/k_{\sigma}$	$K_{eff}/k_{\beta,analítica}$	$K_{eff}/k_{\beta,numérico}$	
		4,625(elementos)	2,080 (elementos)
2	1.5316	1.5316	1.5316
5	2.4483	2.4483	2.4483
10	3.1276	3.1276	3.1276
100	4.2291	4.2291	4.2291
1 000	4.3871	4.3871	4.3871
10 000	4.4036	4.4036	4.4037

establecer de forma correcta de la dirección de los vectores  $\mathbf{n}_{\beta\sigma}$  usando esta herramienta comercial, omitiendo la condición de periodicidad.

Nozad *y col.* (1985b) resolvieron las ecuaciones para  $\mathbf{b}_\beta$  y  $\mathbf{b}_\sigma$  del Sistema de Ecuaciones (3.12) para un arreglo espacialmente periódico de cuadrados en línea, ilustrada en la Figura 4.2(a), usando una aproximación numérica por diferencias finitas para valores moderados de  $\kappa$ , encontrando inestabilidad numérica para  $\kappa > 100$ . Nozad *y col.* (1985b) usaron un método de perturbación con  $\kappa^{-1}$  como el parámetro de perturbación para solucionar este problema, ya que el problema necesitaba una mayor fineza en el esquema por diferencias finitas para ser solucionado, lo que significa mayores recursos computacionales, limitados en esa época.

La geometría de cuadrados en línea representa un problema en el que se obtiene los valores para el coeficiente de conductividad efectiva usando el código comercial COMSOL Multiphysics estableciendo la condición de periodicidad de acuerdo a lo muestra el punto 8 del Apéndice A.1. Los resultados para la conductividad térmica efectiva usando la geometría de cuadrados en línea se muestran en la Tabla 4.2 para varios valores de  $\kappa$  y una porosidad de 0.37. Se usan dos mallas de 2,144 y 11,008 elementos para garantizar la independencia de los resultados con el esquema de discretización, observando que no exista una diferencia mayor a 1% en los valores calculados  $K_{eff}/k_\beta$  entre ambos mallas. Los cálculos para la conductividad efectiva se realizaron para 11,008 y 2,144 elementos y mostraron una diferencia en el tiempo de cómputo no mayor a 2 segundos para un computador con 2.10 GHz y 3GB en RAM, para esta geometría de celda unitaria de cuadrados en línea. Los resultados presentados en la Tabla 4.2 para la conductividad efectiva igualan a los reportados originalmente por Nozad *y col.* (1985b).

#### 4.1.2. Resultados del coeficiente de conductividad térmica efectiva

Una vez explorado la predicción de la conductividad efectiva en el problema de cerradura usando la herramienta de cómputo contra las soluciones analíticas y otros trabajos previos, se realiza la predicción del coeficiente de conducción de calor para las celdas unitarias mostradas en la Figura 4.2. Con los valores predichos para la conductividad efectiva, los efectos de la porosidad, el arreglo y la forma de la partícula en una celda unitaria son examinados.

Las configuraciones mostradas en la Figura 4.2 son: (a) arreglo periódico de cuadrados en línea; (b) arreglo lineal de cilindros; (c) en una configuración escalonada de cilindros con filas alternadas de cilindros grandes y pequeños. Las relaciones entre los radios de los cilindros

**Tabla 4.2.** Resultados numéricos de la conductividad efectiva para la celda de cuadrados en línea.

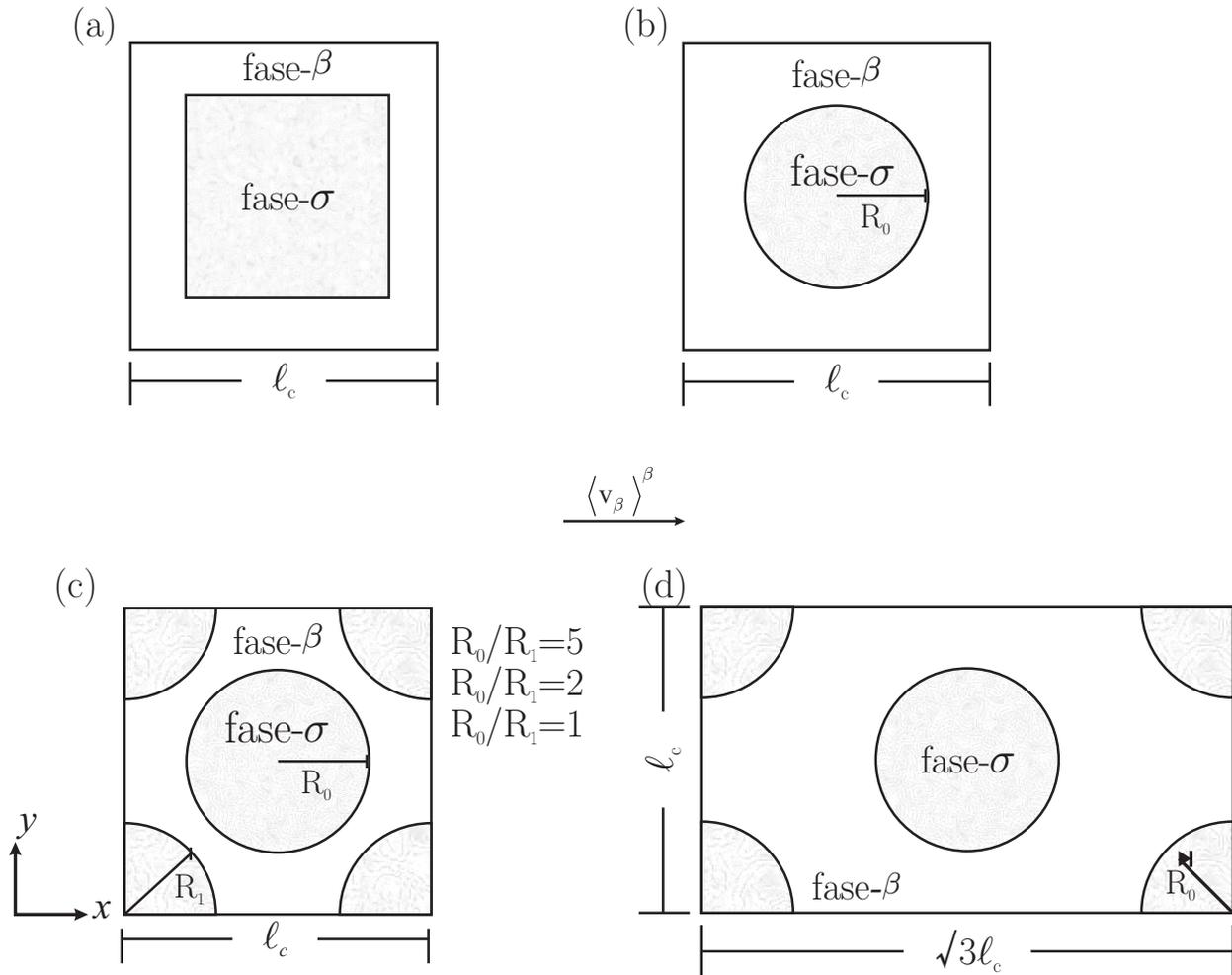
$\kappa = k_\beta/k_\sigma$	$K_{eff}/k_{\beta,numérico}$	
	11,008 (elementos)	2,144 (elementos)
2	1.5327	1.5328
5	2.4655	2.4658
10	3.1757	3.1766
100	4.3276	4.3761
1 000	4.5496	4.5536
10 000	4.5681	4.5722

grandes y pequeños son:  $R_0/R_1 = 1,2$  y  $5$  ; (d) arreglo triangular de cilindros, similar al arreglo escalonado sólo la distancia separación entre las partículas internas es mayor. En las celdas unitarias de la Figura 4.2, la fase  $\beta$  representa la fase fluida continua, y la fase  $\sigma$  representa la fase sólida, como ya se ha señalado anteriormente. Para estas configuraciones no existe un contacto partícula-partícula, lo anterior con el fin de evitar asociar los resultados de  $K_{eff}$  a una área de contacto entre las partículas. La longitud de la celda unitaria es  $\ell_c$ . La dirección principal es el eje  $x$  de la celda unitaria.

Los perfiles de  $K_{eff}$  son calculados en un amplio intervalo de la relación de conductividades de las fases,  $1 \times 10^{-3} \leq \kappa \leq 1 \times 10^4$  y varias porosidades ( $\varepsilon_\beta$ ), para las celdas mostradas en la Figura 4.2. Examinando los efectos arriba mencionados.

### Efecto del arreglo

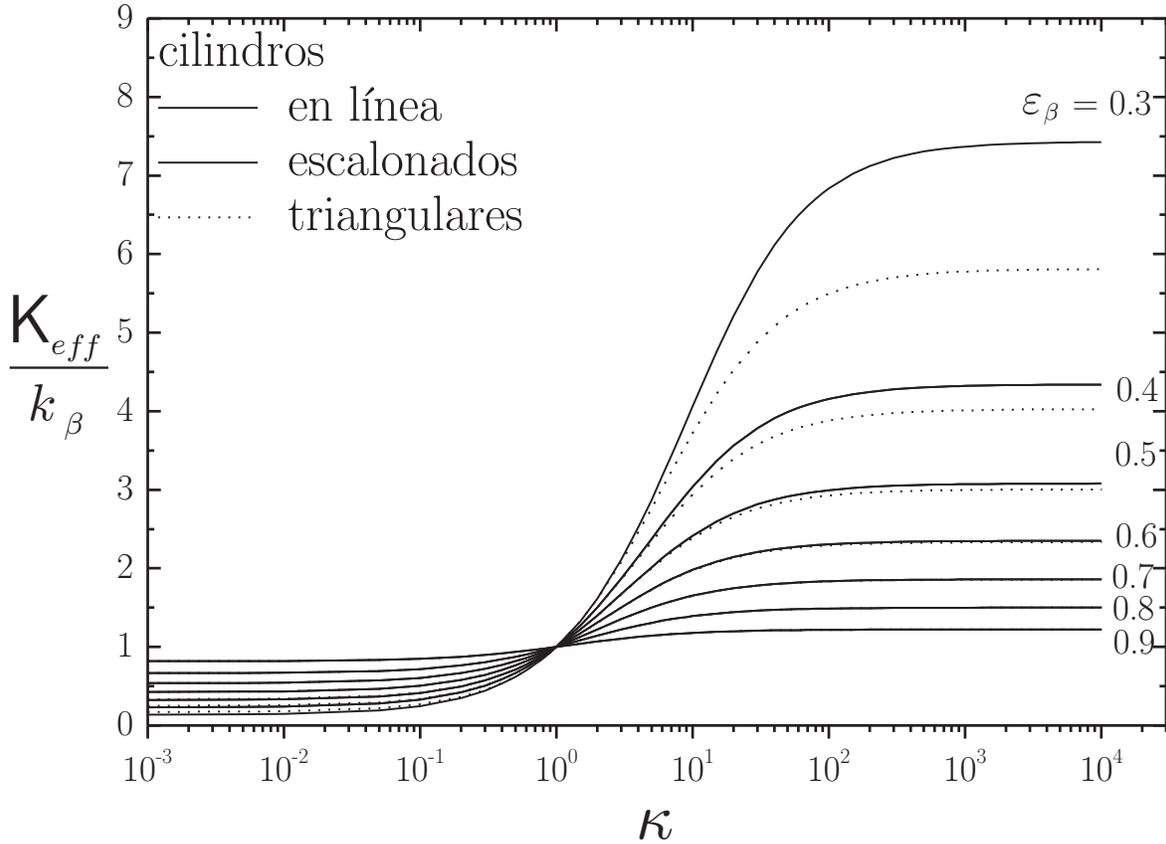
En los perfiles de  $K_{eff}$  contra  $\kappa$  mostrados en las Figura 4.3 se puede analizar el efecto de la relación de las conductividades térmicas sobre el valor de la conductividad térmica efectiva. Para un intervalo aproximado de  $1 < \kappa \leq 10$ , el valor de la conductividad térmica efectiva es sensible a  $\kappa$ , incrementando su valor cuando la relación de conductividades térmicas aumenta. Este incremento se realiza de forma independiente del arreglo y la geometría de la partícula usada; lo que se observa con una diferencia pequeña entre los perfiles de conductividad efectiva de los arreglos lineal y triangular. Para valores de  $\kappa$  entre 10 y 100, la conductividad efectiva se vuelve gradualmente menos sensible a  $\kappa$ . Para estos valores de  $\kappa$  comienza a observarse una diferencia entre los valores de la conductividad efectiva



**Figura 4.2.** Celdas unitarias periódicas bidimensionales: (a) arreglo lineal de cuadrados; (b) arreglo lineal de cilindros; (c) arreglo escalonado con variación de radios; (d) arreglo triangular.

dependientes del arreglo y la geometría de la celda unitaria. Para valores grandes de la relación de conductividades ( $\kappa \rightarrow \infty$ ), el perfil de la conductividad efectiva adquiere una tendencia asintótica, siendo el máximo valor alcanzado por la celda unitaria con un arreglo lineal.

Para valores  $\kappa < 1$  el perfil muestra también un comportamiento asintótico cuando  $\kappa$  se hace pequeño ( $\kappa \rightarrow 0$ ). Para valores de  $\kappa$  cercanos a uno, el valor de la conductividad efectiva depende sólo de la relación de conductividades térmicas, a medida que  $\kappa$  disminuye el valor de la conductividad efectiva decrece de forma dependiente del arreglo y la geometría de las partículas. Sin embargo los perfiles de la conductividad efectiva para los diferentes arreglos muestran valores mucho menores a los mostrados cuando  $\kappa > 1$ .



**Figura 4.3.** Efecto del arreglo de partícula sobre  $K_{eff}/k_\beta$  usando un arreglo lineal, escalonado y triangular de cilindros para varias porosidades.

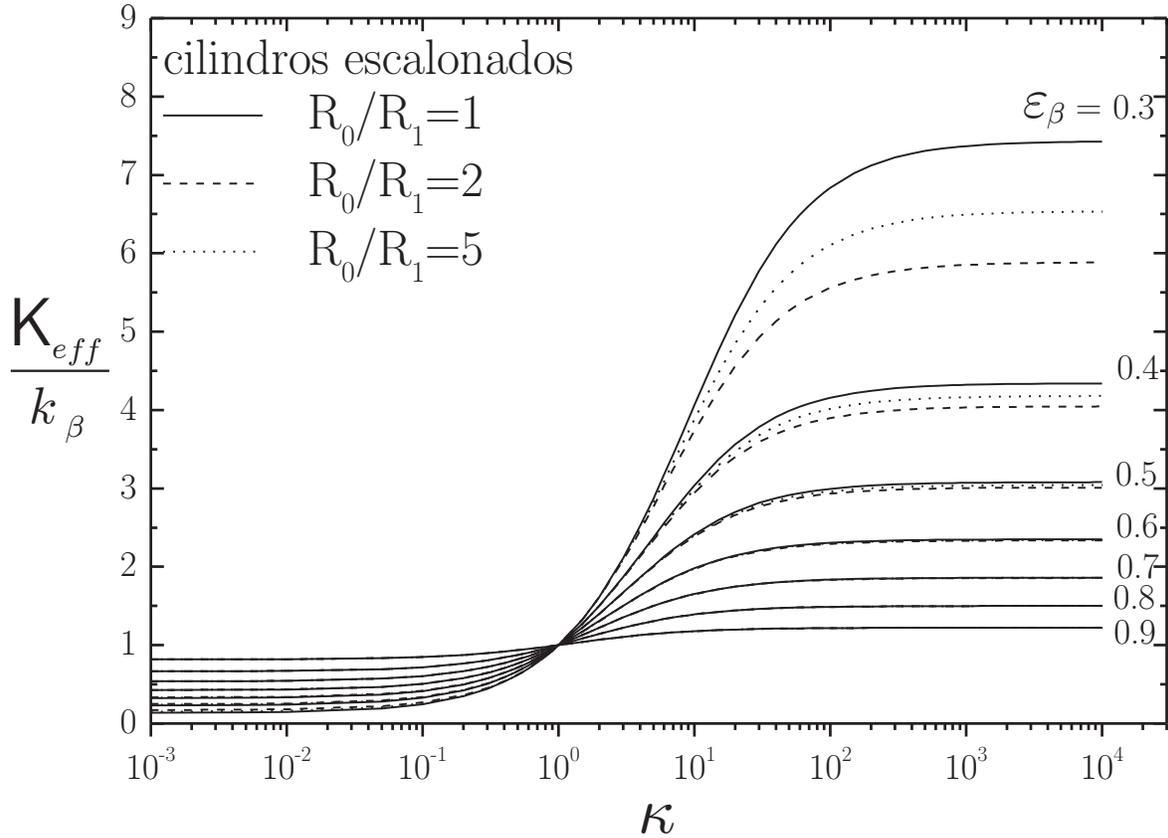
La tendencia asintótica observada en el perfil de  $K_{eff}/k_\beta$  contra  $\kappa$ , cuando  $\kappa \rightarrow \infty$ , se puede explicar de manera intuitiva con fundamento en la contribución de la conductividad de cada fase sobre la conductividad térmica efectiva. Cuando la conductividad térmica de la fase sólida ( $k_\sigma$ ), es mucho mayor que la conductividad térmica de la fase fluida o continua ( $k_\beta$ ); se indica entonces que  $k_\sigma$  no tiene influencia sobre la distribución de la temperatura dentro de la fase sólida, y por lo tanto la conductividad térmica efectiva es controlada enteramente por la conductividad térmica de la fase fluida y por la geometría del sistema  $\beta - \sigma$ . De manera inversa, para  $\kappa$  pequeños; cuando la conductividad térmica de la fase fluida es mucho mayor que la de la fase sólida,  $k_\beta$  no tiene influencia en la distribución de la temperatura en la fase fluida, lo que provoca que la conductividad efectiva sea controlada principalmente por  $k_\sigma$ .

El efecto del arreglo de las partículas sobre  $K_{eff}/k_\beta$  para varias porosidades, es mostrado también en la Figura 4.3, para los arreglos lineal, escalonado con  $R_0/R_1 = 1$  y triangular de cilindros. Para porosidades mayores a 0.8, la conductividad térmica efectiva es prácticamente independiente del arreglo de las partículas. En este rango de porosidades el diámetro de las partículas es tan pequeño que la influencia de las partículas vecinas no es significativo y no afecta el valor de la conductividad térmica efectiva. Estos resultados se pueden explicar a partir de los obtenidos originalmente por Maxwell (1881) y Lorenz (1880) citados en Nozad *y col.* (1985b), quienes consideraron el problema de conducción en una suspensión de esferas a porosidades altas (diluidas). A medida que la porosidad disminuye, la interacción entre las partículas se vuelve más importante, lo que provoca que el valor de  $K_{eff}$  sea más sensible al arreglo geométrico y mayores diferencias entre los valores de la conductividad térmica efectiva son observadas. La Figura 4.3 muestra que los resultados de la conductividad efectiva para los arreglos lineal y escalonado obtienen los mayores valores de  $K_{eff}$ . Esto es porque en los arreglos lineal y escalonado los cilindros adyacentes son más cercanos que aquellos en un arreglo triangular. Para la menor porosidad usada en este análisis ( $\varepsilon_\beta = 0.3$ ), la diferencia en el valor de la conductividad térmica efectiva, calculado entre una celda unitaria con los arreglos lineal y escalonado contra el obtenido con arreglo triangular, es de aproximadamente un 30 %.

En la Figura 4.3 una tendencia opuesta del perfil de  $K_{eff}/k_\beta$  contra  $\kappa$  es observada para  $\kappa < 1$ , con un incremento del valor de la conductividad efectiva cuando la porosidad aumenta. En los perfiles de  $K_{eff}/k_\beta$  para  $\kappa < 1$ , el efecto del arreglo de las partículas sobre el valor de la conductividad efectiva no es tan significativa como el caso donde  $\kappa > 1$ , ya que no se observa una diferencia apreciable entre los valores de  $K_{eff}/k_\beta$  calculados usando un arreglo lineal, escalonado o triangular. Considerando entonces despreciable la influencia del arreglo sobre  $K_{eff}/k_\beta$  cuando  $\kappa$  tiene valores pequeños.

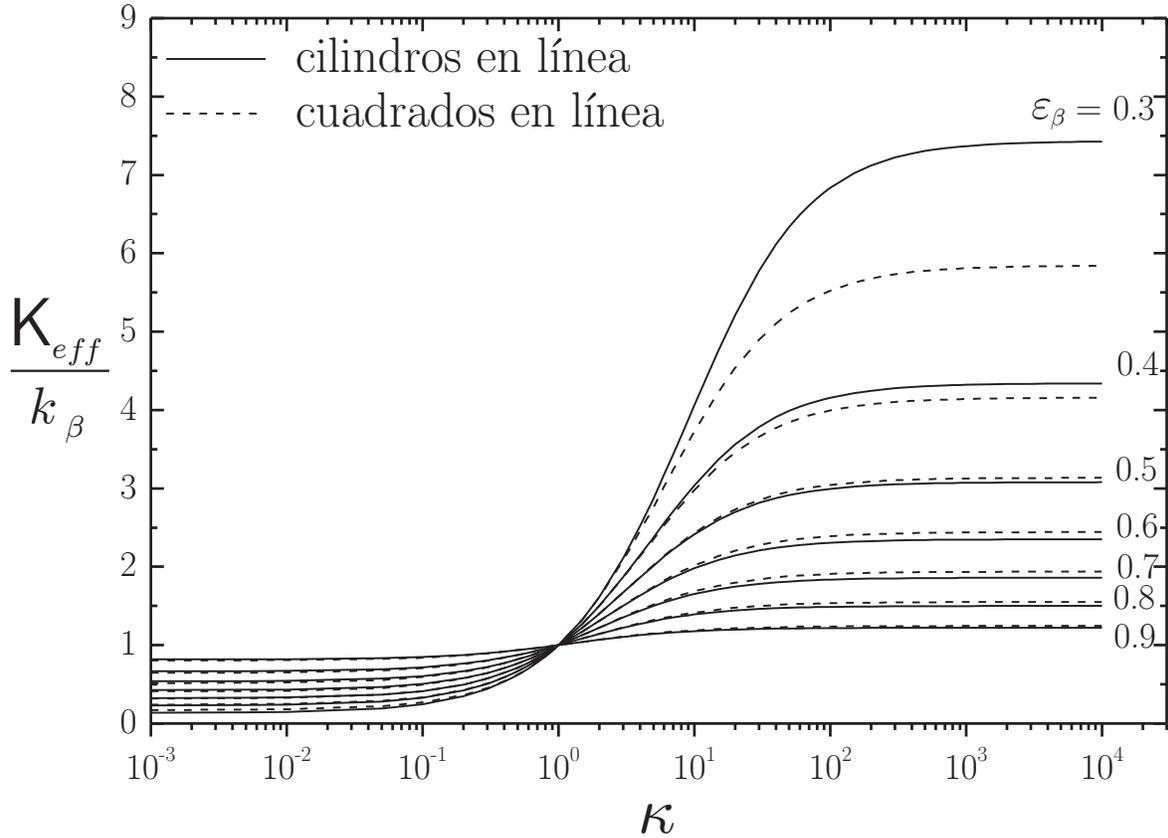
Con el propósito de examinar en detalle la influencia del arreglo y la separación de las partículas sobre la conductividad térmica efectiva, se varia el tamaño de las partículas cilíndricas del arreglo escalonado a partir de modificar la relación de los radios de las partículas cilíndricas ( $R_0/R_1$ ) en la celda unitaria, como lo señala la Figura 4.2 (c). En la Figura 4.4 se muestran los resultados de la conductividad térmica efectiva contra  $\kappa$  para varias porosidades y distintas relaciones de radios de partículas ( $R_0/R_1 = 1, 2$  y  $5$ ).

Los perfiles mostrados en la Figura 4.4 son similares a los analizados anteriormente; para porosidades menores a 0.6 y valores de  $\kappa$  menores a 10, la conductividad térmica



**Figura 4.4.** Efecto del arreglo de partícula sobre  $K_{eff}/k_\beta$  usando en arreglo escalonado con variación de los radios de las partículas de  $R_0/R_1 = 1, 2$  y  $5$ , para varias porosidades.

efectiva no es afectada por la relación de radios de las partículas cilíndricas en el arreglo escalonado. A medida que la porosidad decrece y  $\kappa$  se incrementa a valores mayores de 10, el efecto del arreglo sobre el valor de la conductividad térmica efectiva comienza a ser apreciable. La interacción entre las partículas influyen el valor de la conductividad efectiva, principalmente para el arreglo escalonado con  $R_0/R_1 = 1$ , provocando que éste obtenga los mayores valores de la conductividad efectiva. En la Figura 4.4 se observa que los valores de la conductividad efectiva decrecen a porosidades menores de 0.5, cuando la relación radios es mayor. Para estos valores de porosidad, la relación de diámetros a  $R_0/R_1 > 1$  provocan variaciones en la configuración de cilindros escalonados relacionados con cambios en la microestructura; la distancia de separación entre las partículas adyacentes cambia y



**Figura 4.5.** Efecto de la geometría de la partícula sobre  $K_{eff}/k_\beta$  usando un arreglo lineal de cuadrados y cilindros para varias porosidades.

como consecuencia se tiene un efecto global sobre los valores del coeficiente de conductividad térmica efectiva. Para  $\varepsilon_\beta = 0.3$  la diferencia en el valor de la conductividad efectiva entre un arreglo escalonado de partículas con  $R_0/R_1 = 1$  y  $R_0/R_1 = 2$  es cercana a 21 %; la diferencia con  $R_0/R_1 = 5$  es aproximadamente de 12 %.

Los resultados anteriores se asocian principalmente con la influencia de la distancia entre las partículas vecinas sobre la conductividad efectiva y la interacción entre estas partículas, provocada por la disminución de esta distancia. Esta interacción se relaciona por un patrón más complejo en los campos de las variables de cerradura,  $\mathbf{b}_\beta$  y  $\mathbf{b}_\sigma$  (Perrins *y col.*, 1979).

### Efecto de la geometría

El efecto de la forma de la partícula sobre el coeficiente de conductividad térmica es examinado usando los arreglos lineales de partículas cilíndricas y cuadradas, para estas celdas unitarias el arreglo es el mismo y sólo cambia la geometría de la partícula. Los resultados para la conductividad efectiva contra  $\kappa$  se muestran en la Figura 4.5. Similar a lo observado cuando se examinó el efecto del arreglo de las partículas sobre el coeficiente de conductividad efectiva, para porosidades mayores a 0.6, no se aprecia alguna influencia de la geometría de las partículas sobre el valor de la conductividad térmica efectiva (Fig. 4.5). Sin embargo, cuando la porosidad decrece el efecto de la forma de la partícula se vuelve más significativo.

Para porosidades mayores de 0.5, los valores de la conductividad efectiva calculados con la geometría de cuadrados en línea presenta mayores valores comparados con los obtenidos para partículas cilíndricas. Estas diferencias en los valores de la conductividad se atribuyen al incremento de la distancia entre las partículas cilíndricas adyacentes. Este incremento de la distancia representa una resistencia adicional al flujo de calor cuando  $\kappa > 1$ , como consecuencia los valores de la conductividad térmica efectiva del sistema  $\beta - \sigma$  disminuyen.

Para porosidades menores a 0.5, se observa en la Figura 4.5, que el arreglo de cilindros en línea tienen los mayores valores de la conductividad térmica efectiva con respecto a los valores para el arreglo de cuadrados. Lo anterior es porque, para dos partículas cilíndricas adyacentes, con una misma porosidad, sus superficies están más cerca que las superficies de dos cuadrados adyacentes. Cuando la porosidad decrece, la distancia entre partículas se vuelve cada vez más pequeña y el flujo de calor a través del centro de las partículas se vuelve más significativo comparado con el flujo de calor hacia afuera de la partícula. Así, la conductividad térmica efectiva para una celda unitaria con un arreglo lineal de partículas de geometría cilíndrica, se vuelve mayor comparado con la celda unitaria con un arreglo lineal de partículas cuadradas. Para una porosidad igual a 0.3, la diferencia de la conductividad efectiva, entre una partícula de geometría cilíndrica y cuadrada es cercana a 30%.

En la Figura 4.5 para  $\kappa < 1$  y todas las variaciones de la porosidad, no se observa que la geometría de las partículas tenga alguna influencia sobre la conductividad térmica efectiva. Aun cuando la porosidad es menor a 0.5, sólo se observa una pequeña diferencia entre la conductividad efectiva para la celda unitaria de cuadrados y la de cilindros, correspondiendo el menor valor para la conductividad efectiva de la celda unitaria de cilindros. Para efectos prácticos se puede considerar que  $K_{eff}$  es independiente de la geometría cuando  $\kappa < 1$ .

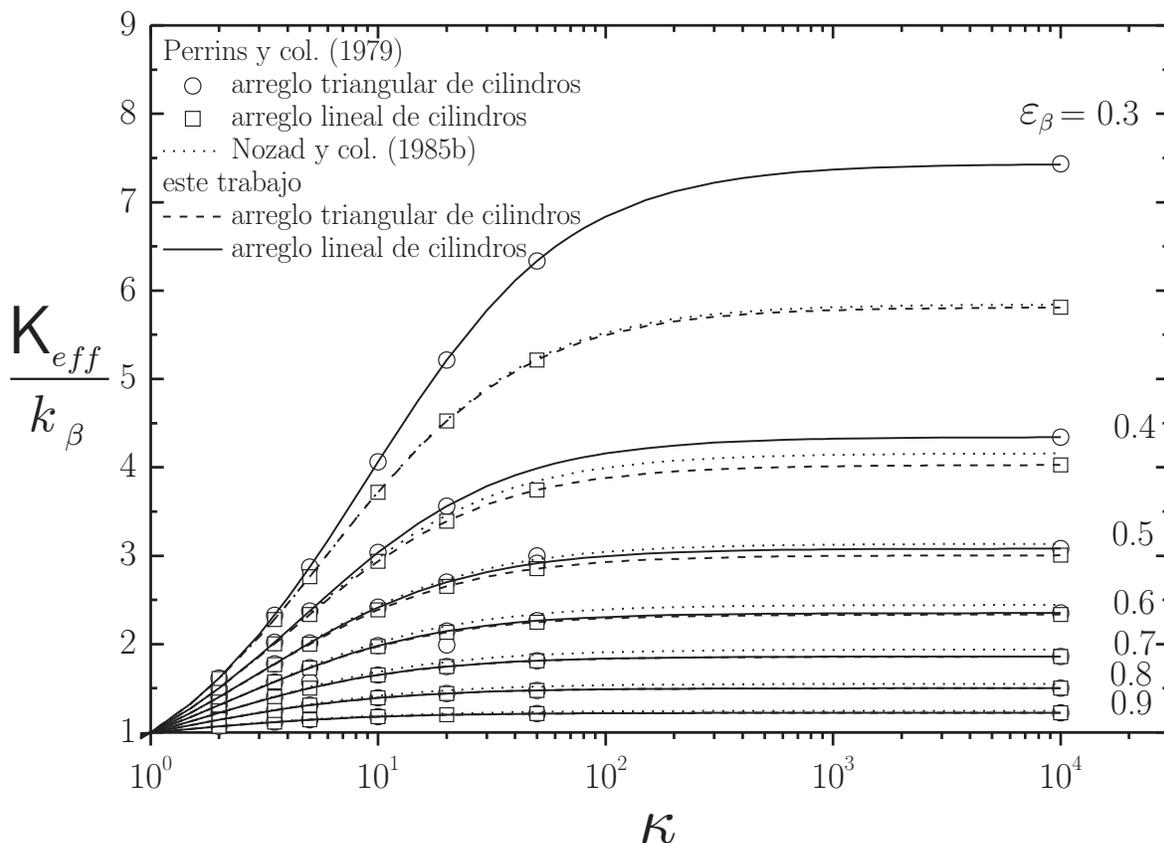
El efecto de la geometría y el arreglo de las partículas en una celda unitaria donde se considera la fase fluida continua (sin contacto partícula-partícula) fue examinado en esta sección. Los resultados muestran, en general, que el valor del coeficiente de conductividad térmica efectiva se ve afectado de manera significativa por la forma y la geometría de las partículas dentro de la celda unitaria cuando la porosidad decrece a valores menores de 0.5 y la relación de las conductividades térmicas de las fases son grandes ( $\kappa \gtrsim 10$ ). Lo anterior debido, principalmente, a un incremento de la interacción entre las partículas contenidas en la celda unitaria por la reducción de la distancia entre partículas vecinas. El efecto de la geometría y el arreglo, como ya se mencionó, están relacionadas de manera directa con el vector  $\mathbf{n}_{\beta\sigma}$  en la condición de frontera sobre la interfase  $\beta - \sigma$  de la Ecuación (3.12d) del problema de cerradura. Sin embargo para configuraciones de celdas unitarias de geometría donde se incluya una distribución aleatoria de partículas, no se puede relacionar de forma directa el efecto de la distancia entre partículas adyacentes sobre el valor de la conductividad efectiva, y su valor está relacionado de forma más íntima con la solución de los campos de las variables de cerradura  $\mathbf{b}_\beta$  y  $\mathbf{b}_\sigma$ .

### 4.1.3. Comparación con otros resultados numéricos

Los valores calculados en la sección anterior para la conductividad efectiva concuerdan con los resultados numéricos presentados por Nozad *y col.* (1985b) para una estructura periódica de cuadrados en línea y los obtenidos por Sahraoui y Kaviany (1993), quienes determinaron la conductividad térmica efectiva a partir de la solución numérica de la ecuación de conducción de calor puntal para estos mismos los arreglos periódicos.

En la Figura 4.6, se muestran los resultados de la conductividad térmica efectiva para los arreglos lineal y triangular de partículas cilíndricas, junto con los resultados obtenidos por Perrins *y col.* (1979); quienes usaron una extensión del método ideado por Rayleigh (1892). La Figura 4.6 muestra que los resultados numéricos calculados en este trabajo se ajustan satisfactoriamente con los datos correspondientes de Perrins *y col.* (1979), con apenas un error relativo promedio de un 1.0%, entre los valores del coeficiente de conductividad predichos con ambas metodologías.

De acuerdo a los resultados obtenidos respecto a la predicción de la conductividad efectiva resultantes para las celdas unitarias de este capítulo, la metodología que se presenta en el Apéndice A.1, para la solución del problema de cerradura de la conductividad efectiva



**Figura 4.6.** Comparación de resultados numéricos de  $K_{eff}/k_\beta$ , para diferentes arreglos de celdas unitarias, con datos reportados en la literatura, (Nozad y col., 1995b; Perrins y col., 1979).

usando el software COMSOL Multiphysics, junto con las modificaciones de su código en la plataforma MATLAB, presentadas en el Apéndice A.2, se pueden extender a celdas unitarias para geometrías más complejas. Algoritmos de solución con este fin son expuestos en estos mismos apéndices. La predicción de la conductividad efectiva para celdas unitarias con geometría relativamente más compleja se atenderá en el capítulo siguiente.

## 4.2. Coeficiente de dispersión total

El cálculo de los componentes del tensor de dispersión se lleva a cabo mediante la solución numérica del problema de cerradura, determinando con ello el campo de la variable  $\mathbf{f}_\beta$ . El algoritmo general para la determinación del tensor efectivo de dispersión total se lleva a cabo de la siguiente manera: (i) la velocidad ( $\mathbf{v}_\beta$ ) y el campo de las desviaciones de la velocidad ( $\tilde{\mathbf{v}}_\beta$ ) son obtenidas resolviendo el problema de valores a la frontera de Stokes del Sistema de Ecuaciones (3.25) en una representación periódica del medio poroso (celda unitaria); (ii) el problema de cerradura del Sistema de Ecuaciones (3.24) se resuelve, determinando con esto, el campo de la variable de cerradura  $\mathbf{f}_\beta$ . (iii) Si el medio poroso es homogéneo el tensor de dispersión total,  $\mathbf{D}_{A\beta}^*$  es simétrico y sólo los componentes longitudinal y transversal del tensor de dispersión se calculan mediante la integración numérica de los valores de la variable de cerradura, de acuerdo a las expresiones (3.20) y (3.21). El coeficiente de dispersión longitudinal  $\mathbf{i} \cdot \mathbf{D}_{A\beta}^* \cdot \mathbf{i} = D_{xx}^*$ , es la dispersión en la dirección del flujo principal, y el coeficiente de dispersión transversal,  $\mathbf{j} \cdot \mathbf{D}_{A\beta}^* \cdot \mathbf{j} = D_{yy}^*$ , es la dispersión perpendicular a la dirección del flujo principal con una velocidad promedio,  $\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$ , en el plano horizontal  $x$ . Los componentes antisimétricos del tensor de dispersión ( $\mathbf{i} \cdot \mathbf{D}_{A\beta}^* \cdot \mathbf{j} = D_{xy}^*$  y  $\mathbf{j} \cdot \mathbf{D}_{A\beta}^* \cdot \mathbf{i} = D_{yx}^*$ ) nos son considerados tomado en cuenta la suposición de que el medio poroso es homogéneo, lo anterior fue puntualizado por Koch y Brady (1987) citado en Amaral-Souto y Moyne (1997a).

Un análisis dimensional de la expresión del tensor de dispersión en la Ecuación (3.16) indica que el tensor de dispersión total adimensional,  $\mathbf{D}_{A\beta}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ , depende del número de Reynolds, el número de Péclet, y de ciertos parámetros que describen la geometría de la celda unitaria periódica como la longitud de la celda unitaria,  $\ell_c$ . Por lo tanto se debe asegurar que todas las cantidades sean definidas consistentemente, con el fin de evaluar de manera adecuada el tensor total de dispersión adimensional,  $\mathbf{D}_{A\beta}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ . En trabajos reportados en la literatura, la velocidad promedio  $\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$  resulta ser la más apropiada para definir los números adimensionales de Reynolds y Péclet, debido a que esta velocidad se define dentro del volumen ocupado por la fase fluida en la región de promediado (dentro de los poros). Los cálculos para el tensor de dispersión pueden ser obtenidos para diferentes velocidades y los resultados pueden ser presentados como función de estos números adimensionales. Designando la magnitud de la velocidad como  $\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$  y escogiendo diferentes longitudes características de la celda unitaria, se pueden definir dos tipos de números de Péclet: el número de Péclet de partícula ( $Pe_p$ ) y el número de Péclet de celda ( $Pe_c$ ). El número de

Péclet de celda se define de la forma siguiente

$$Pe_c = \frac{\langle v_\beta \rangle^\beta \ell_c}{\mathcal{D}_{A\beta}} \quad (4.4)$$

donde  $\ell_c$  representa la longitud de la celda unitaria, como lo muestran las celdas unitarias de la Figura 4.2. El número de Péclet de partícula se define en términos de un diámetro medio de las partículas contenidas en la celda unitaria, definido como

$$d_p = 6 \frac{V_p}{A_p} \quad (4.5)$$

donde  $V_p$  es el volumen de la partículas y  $A_p$  es el área superficial de la partículas en la celda unitaria. El número de Péclet de partícula<sup>1</sup> se expresa como

$$Pe_p = \frac{\langle v_\beta \rangle^\beta d_p}{\mathcal{D}_{A\beta}} \left( \frac{\varepsilon_\beta}{1 - \varepsilon_\beta} \right) \quad (4.6)$$

Una longitud característica  $\ell^*$  es considerada en ciertos casos igual a  $\ell_c$ , relacionando el número de Péclet de celda y el número de Péclet de partícula de la forma siguiente

$$\ell^* = d_p \left( \frac{\varepsilon_\beta}{1 - \varepsilon_\beta} \right) \quad (4.7)$$

El número de Reynolds de partícula se define de forma análoga en términos de  $d_p$ , como

$$Re_p = \frac{\rho_\beta \langle v_\beta \rangle^\beta d_p}{\mu_\beta} \left( \frac{\varepsilon_\beta}{1 - \varepsilon_\beta} \right) \quad (4.8)$$

### 4.2.1. Método de solución

La solución numérica del problema de cerradura y el problema de valores a la frontera de Stokes, descrito en el capítulo anterior, se resuelven para determinar el coeficiente de dispersión longitudinal y transversal mediante el uso del software de elemento finito COMSOL Multiphysics. La integración de superficie y de volumen también se realizan usando esta herramienta computacional, calculando el coeficiente de dispersión en las direcciones longitudinal ( $D_{xx}^*$ ) y transversal ( $D_{yy}^*$ ), usando un programa realizado sobre la plataforma de MATLAB con un código básico extraído de COMSOL Multiphysics. Los detalles de la solución del problema de cerradura se presentan en el Apéndice B.1 usando este software

---

<sup>1</sup>El número de Péclet ( $Pe_p$ ) compara las contribuciones convectivas contra las difusivas.

y en el Apéndice B.2 se muestran las modificaciones en MATLAB necesarias al código de COMSOL Multiphysics para calcular los coeficientes de dispersión, variando el número de Péclet y la porosidad, para una celda unitaria de cuadrados y cilindros en línea; en estos apéndices se sugiere un algoritmo general para extender el uso esta herramienta para la predicción del coeficiente de dispersión en celdas unitarias de geometría mas compleja.

La determinación del coeficiente de dispersión es primeramente probada mediante la solución numérica para el cálculo del coeficiente de dispersión en un flujo entre dos placas paralelas separadas por una distancia de separación  $h$ . Para este caso, el coeficiente de dispersión longitudinal está dado por la solución analítica de Wooding (1960):

$$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = 1 + \frac{Pe^2}{210} \quad (4.9)$$

donde el número de Péclet,  $Pe$ , para este caso, es definido como  $Pe = \langle v_\beta \rangle^\beta h / \mathcal{D}_{A\beta}$ . El cálculo de la dispersión se realiza como lo señalan los apéndices B.1 y B.2, adaptando la metodología señalada para la predicción del coeficiente de dispersión; que sería básicamente omitir la partícula interior en la celda unitaria de cuadrados en línea. El número de elementos en el esquema discretización fue de 68 y 280 elementos; estableciendo periodicidad para el campo de velocidad y la variable de cerradura. Esta diferencia en el número de elementos en ambos esquemas de discretización se realizó para establecer la independencia de la solución del tensor de dispersión con la malla utilizada. Los resultados son comparados con los analíticos en la Tabla 4.3, en la que se muestra que los valores que predice el modelo de cerradura, en

**Tabla 4.3.** Resultados numéricos del coeficiente de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  y la solución analítica de Wooding (1960).

$Pe$	$D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$	
	analítico	numérico
		280(elementos)    68(elementos)
1	1.0048	1.0048    1.0048
5	1.1190	1.1190    1.1188
10	1.4762	1.4762    1.4752
100	48.6190	48.6175    48.5016
1 000	4,762	4,762    4,742
10 000	476,191	476,047    472,663

el cálculo de la dispersión longitudinal concuerdan con los resultados analíticos de Wooding (1960).

Como se mencionó en el planteamiento del problema de este trabajo, el problema de cerradura ha sido resuelto previamente por varios autores para varias configuraciones periódicas en dos y tres dimensiones. Con el fin de examinar los resultados numéricos, encontrados en este trabajo con las soluciones numéricas reportadas previamente para la geometría de cuadrados en línea, ilustrada en la Figura 4.2 (a), se calcula el coeficiente de dispersión longitudinal y los resultados son comparados con los calculados por Eidsath (1981), quien uso también el método del elemento finito, pero con limitaciones en el número de elementos disponibles para la discretización del problema de cerradura, y los obtenidos por Amaral-Souto y Moyne (1997a), quienes emplearon un esquema de diferencias finitas. Para ambos casos, la Tabla 4.4 muestra que los resultados para el coeficiente de dispersión concuerdan bastante bien usando 1,264 elementos finitos en la discretización del problema de cerradura.

La validación teórica y numérica que se realizó permite justificar los resultados de la solución del problema de cerradura y el cálculo del coeficiente efectivos de dispersión usando el software COMSOL Multiphysics, principalmente en lo que se refiere a la metodología involucrada en el cálculo del coeficiente de dispersión.

### 4.2.2. Resultados del coeficiente de dispersión total

Una vez que la metodología para la obtención del coeficiente de dispersión ha sido puesta a prueba para ambos casos, una solución analítica y un trabajo numérico previo, se lleva a

**Tabla 4.4.** Resultados numéricos de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  para la celda cuadrados en línea.

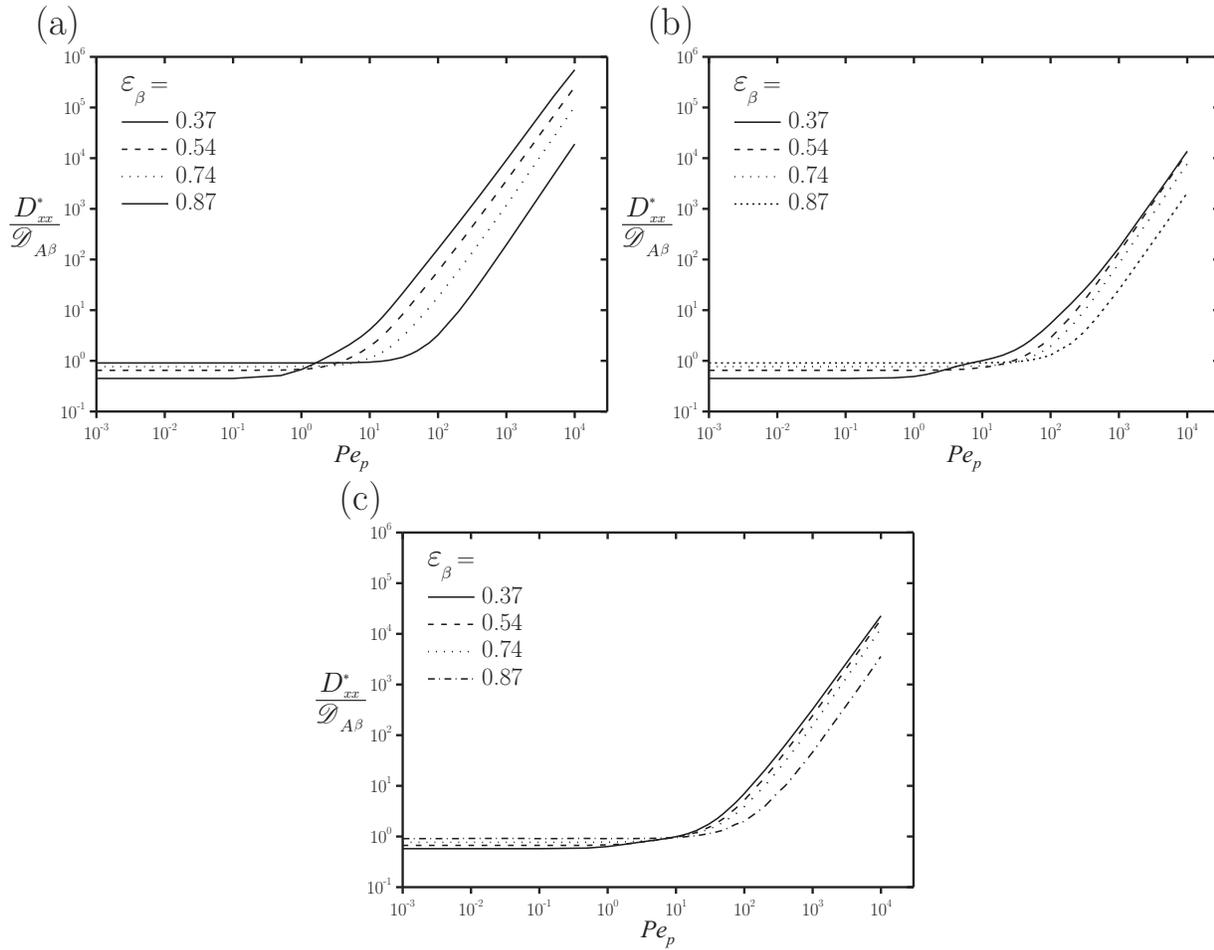
		$D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}(\varepsilon_\beta = 0.37)$		$D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}(\varepsilon_\beta = 0.64)$	
$Pe_p$	Este Trabajo	Eidsath (1981)	$Pe_p$	Este Trabajo	Amaral-Souto y Moyne (1997)
7	3.888	3.91	10	1.599	1.67
35	70.015	70.65	40	12.140	12.30
70	260.634	263.20	100	63.375	63.60
700	14 668.387	14 287.00	1 000	4 276.538	4 266.00

cabo la determinación del coeficiente de dispersión total para diferentes arreglos periódicos de cilindros. Las configuraciones de celdas unitarias con geometría simple de partículas cilíndricas son mostradas en la Figura 4.2 (b) - (d). El efecto de la porosidad, el arreglo y la geometría de las partículas sobre los componentes longitudinal y transversal del tensor de dispersión total es examinado de los resultados, para un intervalo amplio del número de Péclet de partícula:  $1 \times 10^{-3} \leq Pe_p \leq 1 \times 10^4$  y varias porosidades. Los resultados se obtienen para  $Re_p < 0.01$ , manteniendo la condición de flujo de Stokes. Todos los cálculos se llevan a cabo para la dirección principal del flujo en la dirección horizontal de la velocidad promedio  $(\langle v_\beta \rangle^\beta)$  paralela a los ejes  $x$  de las celdas unitarias.

### Efecto de la porosidad

Existen dos mecanismos principales que contribuyen en el término de dispersión hidrodinámico [ $\mathbf{D}_{A\beta} = \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \mathbf{f}_\beta \rangle^\beta$ ] en la definición del tensor total de dispersión total ( $\mathbf{D}_{A\beta}^*$ ), los cuales a su vez se asocian de manera indirecta con el problema de cerradura. El primer mecanismo es debido a los gradientes de velocidad dentro de la celda unitaria causadas por la condición de no deslizamiento en la superficie de las partículas y debido también a las complicaciones en el patrón de flujo provocadas por el arreglo de las partículas sólidas en las celdas unitarias. El segundo, se debe a la presencia de regiones de recirculación o estancamiento. El transporte del soluto  $A$ , fuera de estas regiones ocurre sólo por difusión molecular. La dispersión hidrodinámica es especialmente importante para algunas estructuras periódicas cuando la distancia entre las partículas adyacentes influye sobre estos dos mecanismos.

En la Figura 4.7, se muestran los resultados del componente longitudinal del coeficiente de dispersión de forma adimensional ( $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ ) y en la Figura 4.8, el componente transversal ( $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ ) contra el número de Péclet de partícula ( $Pe_p$ ) y varios valores de porosidad ( $\varepsilon_\beta$ ) para los arreglos lineal, escalonado y triangular de cilindros. En la Figura 4.7, y en todos perfiles, la evolución del coeficiente de dispersión con el número de Péclet muestra tres diferentes zonas distintivas. Cuando el número de Péclet es pequeño (aproximadamente  $Pe_p < 1$ ), el coeficiente longitudinal de dispersión es prácticamente insensible al número de  $Pe_p$  y su valor depende sólo de la porosidad, disminuyendo cuando la porosidad decrece. Para estos números de Péclet, la dispersión se debe principalmente al fenómeno de difusión y los efectos debido a los gradientes de velocidad provocados por el patrón de flujo son despreciables. Para porosidades grandes, la estructura de la celda unitaria



**Figura 4.7.** Efecto de la porosidad sobre la variación de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  con el número  $Pe_p$  para las celdas unitarias con arreglo de cilindros: (a) en línea, (b) escalonados y (c) triangulares.

provoca que el volumen en las regiones de estancamiento aumenten y los gradientes de velocidad generados por el estrechamiento entre las partículas disminuyan; por consiguiente el coeficiente de dispersión se aproxima a uno. En el caso contrario, porosidades bajas incrementan los gradientes de velocidad y reducen las regiones de estancamiento, provocando que la contribución por difusión disminuya y el valor del coeficiente de dispersión sea menor a uno.

Cuando el número Péclet de partícula se incrementa, pero sigue manteniendo valores “moderados”, una zona de transición es observada en la Figura 4.7. Los términos de difusión

efectiva  $[\mathcal{D}_{A\beta} \left( \mathbf{I} + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{f}_{\beta} dA \right)]$  y de dispersión hidrodinámica  $[\langle \tilde{\mathbf{v}}_{\beta} \mathbf{f}_{\beta} \rangle^{\beta}]$  de la definición del tensor de dispersión total tienen magnitudes similares y están en oposición. Las figuras 4.7 y 4.8, muestran que esta zona de transición toma lugar en un rango de numero de Péclet que depende del arreglo de las partículas en la celda unitaria y de la porosidad de la estructura. En la Tabla 4.5, se muestran varios valores de los coeficientes de difusión efectiva y dispersión hidrodinámico en la dirección longitudinal para un arreglo de cilindros en línea, con el fin de puntualizar lo anterior.

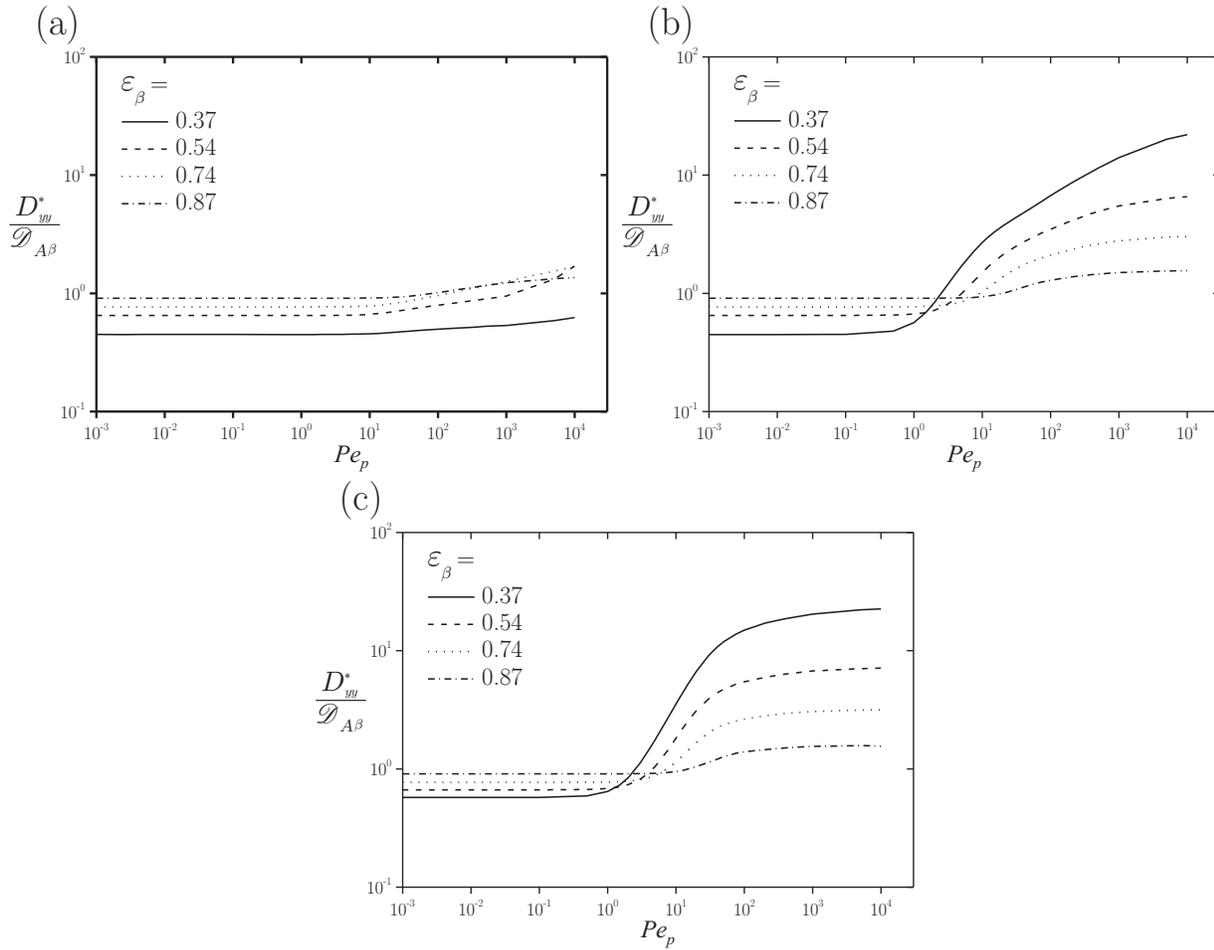
Finalmente, cuando el número de Péclet de partícula se vuelve grande (aproximadamente  $Pe_p \geq 100$ ), el transporte de soluto  $A$  está dominado principalmente por la contribución de la dispersión hidrodinámica y el perfil del coeficiente de dispersión longitudinal puede describirse por medio de una dependencia asintótica con el número de Péclet de partícula, de la forma  $\alpha Pe_p^{\delta}$ .

Comparando las figuras 4.7 y 4.8 se observa que el coeficiente de dispersión longitudinal adimensional  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  constituye el componente dominante del tensor de dispersión total, especialmente para números grandes del Péclet de partícula. Esto se espera, debido a que el componente correspondiente a la velocidad del fluido, paralelo a la dirección principal del flujo, exhibe los gradientes de velocidad más significativos.

En la Figura 4.7, se observa que una disminución de la porosidad resulta en un incremento en el valor del coeficiente de dispersión longitudinal el cual es mayor en un arreglo lineal de partículas cilíndricas, seguido por la distribución escalonada y triangular. Lo anterior puede

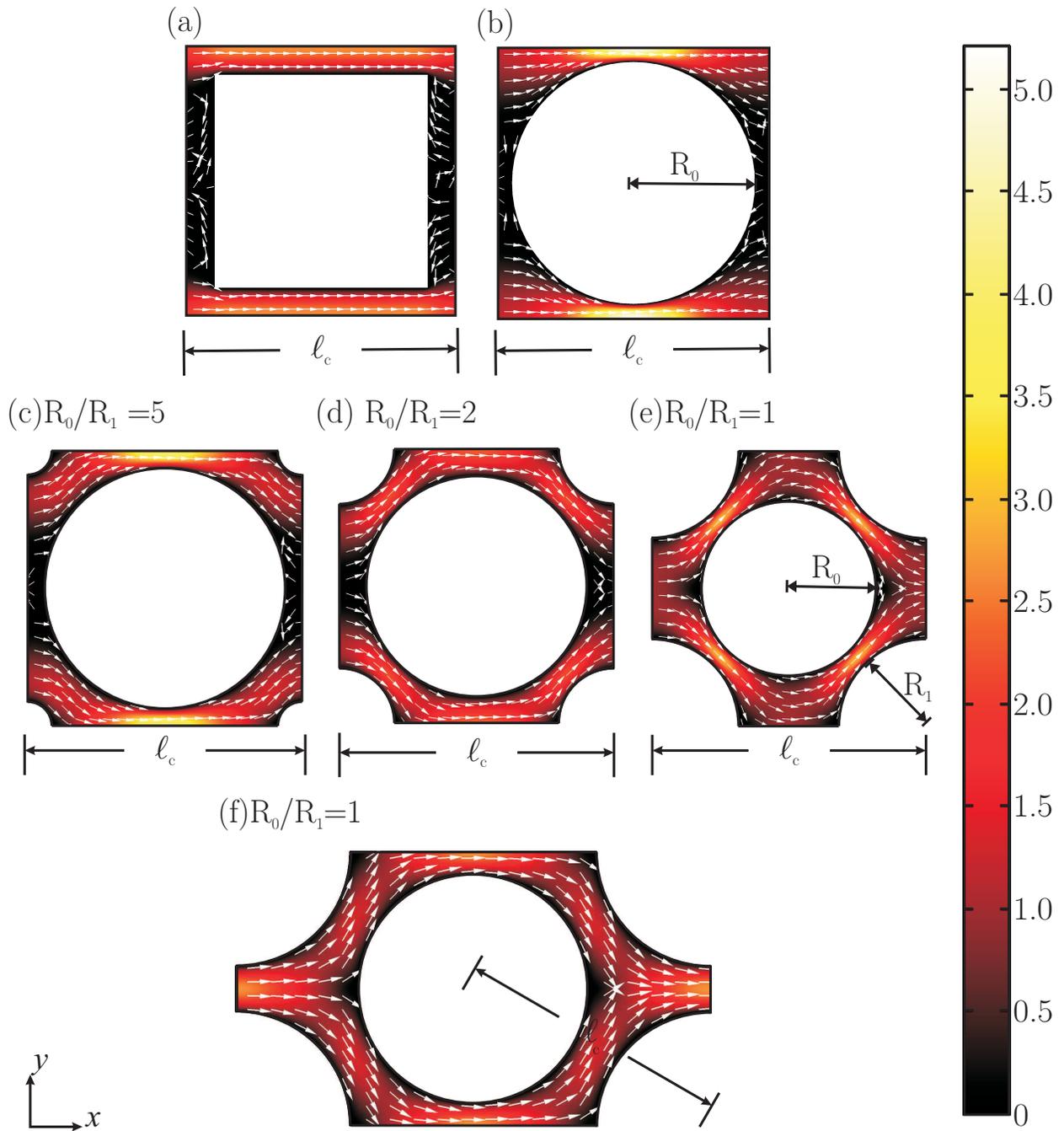
**Tabla 4.5.** Contribución de  $D_{eff}$  y  $D_{A\beta}$  sobre  $D_{xx}^*$  como función del número de  $Pe_p$ .

$Pe_p$	$\varepsilon_{\beta} = 0.3$		$\varepsilon_{\beta} = 0.9$	
	$D_{eff}$	$D_{A\beta}$	$D_{eff}$	$D_{A\beta}$
0.1	0.4494	0.0015	0.9091	$\approx 0$
1	0.5471	0.1241	0.9091	0.0003
5	0.8637	0.8718	0.9100	0.0049
10	1.0527	3.0708	0.9141	0.0298
50	1.7331	48.3314	0.9568	0.6165
100	2.5118	160.2663	0.9997	2.2388

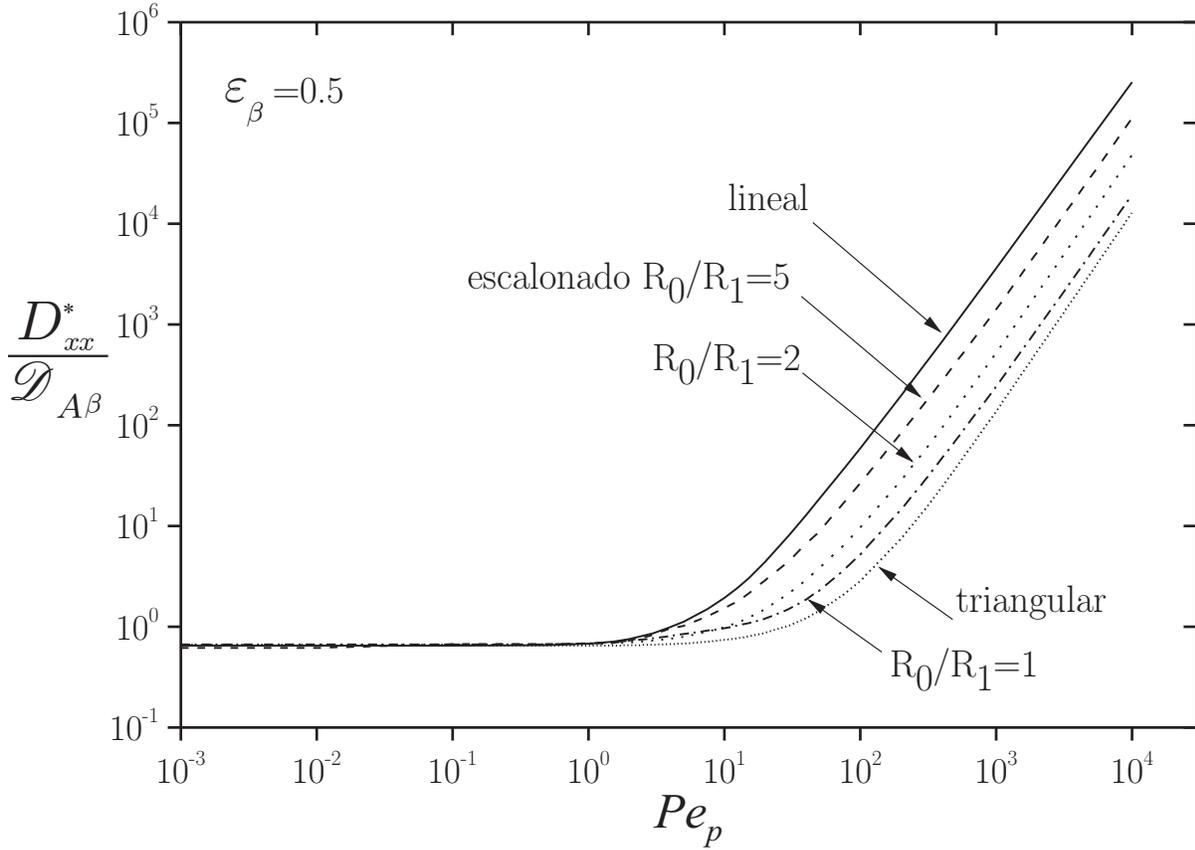


**Figura 4.8.** Efecto de la porosidad sobre la variación de  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  con el número  $Pe_p$  para las celdas unitarias con arreglos de cilindros: (a) en línea, (b) escalonados y (c) triangulares.

explicarse porque, en un arreglo lineal, la velocidad tiene la dirección principal del flujo paralela al eje  $x$ , provocando un incremento de los gradientes de velocidad en esta dirección. Para un arreglo triangular y escalonado, la trayectoria de la velocidad exhibe un patrón de flujo más complicado, debido a la presencia de una partícula en la dirección principal del flujo, y junto con una disminución de la porosidad resulta en una reorientación de la velocidad del fluido en la dirección perpendicular (transversal), provocando una disminución del coeficiente de dispersión longitudinal. En los perfiles del coeficiente de dispersión transversal mostrado en la Figura 4.8, el arreglo lineal, escalonado y triangular también aumenta en sus respectivos perfiles cuando disminuye la porosidad. Para el arreglo lineal, este componente del coeficiente de dispersión, aumenta cuando la porosidad se incrementa tendiendo hacia un valor de uno,



**Figura 4.9.** Campo de velocidad ( $Pe_p \approx 10$ ) para las diferentes configuraciones de las celdas unitarias mostradas en la Figura 4.2, con  $\varepsilon_\beta = 0.37$ .

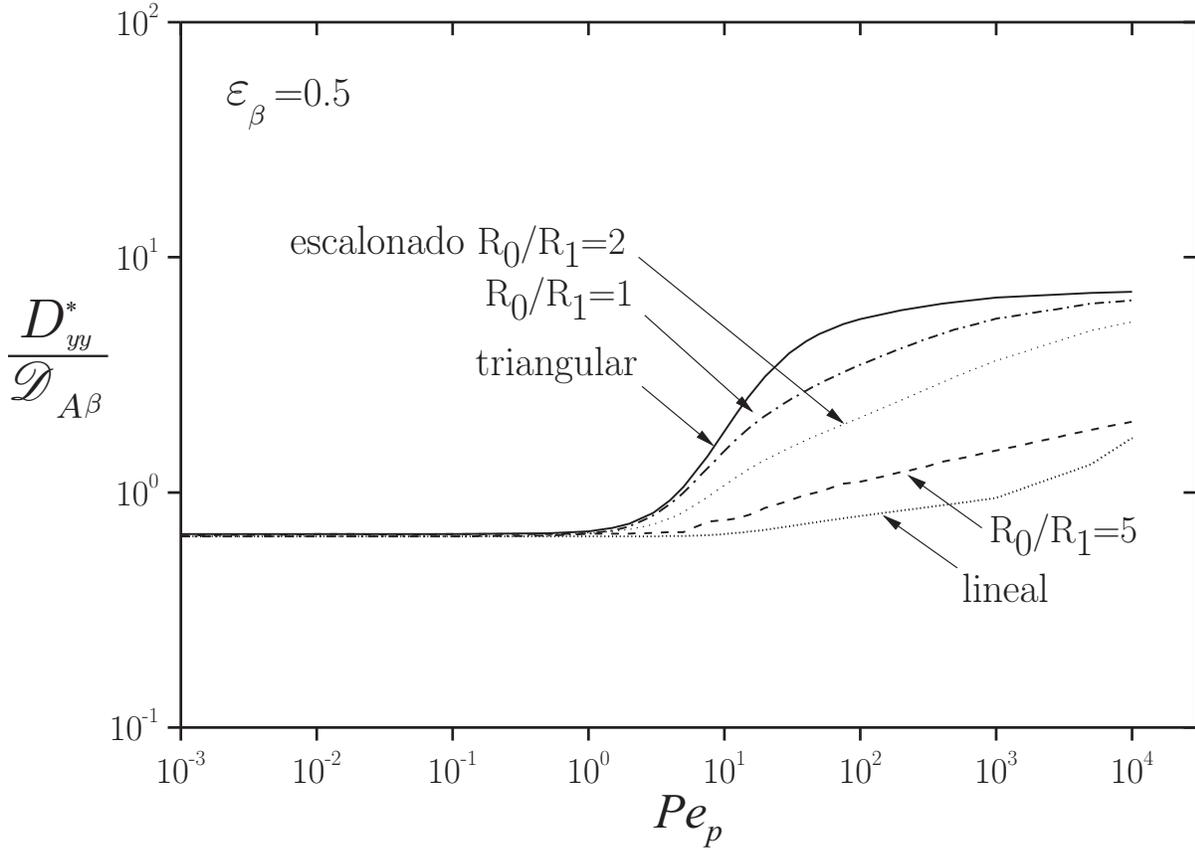


**Figura 4.10.** Efecto del arreglo de partícula sobre  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  usando un arreglo lineal y escalonado de cilindros.

mientras que para los arreglos escalonado y triangular, los perfiles tienden hacia un valor máximo que aumenta cuando el valor  $\varepsilon_\beta$  decrece; estas diferencias pueden ser explicadas por una disminución en el espacio entre las partículas, mayor para los arreglos escalonado y triangular, comparados con el espacio en un arreglo lineal.

### Efecto del arreglo

Como el arreglo de las partículas cambia, así también lo hace el patrón de flujo seguido dentro de celda unitaria, como consecuencia el valor del tensor de dispersión cambia. Para las tres configuraciones de los arreglos escalonados ( $R_1/R_0 = 1, 2$  y  $5$ ) y el arreglo triangular, la distancia entre las partículas adyacentes se reducen por la presencia de una partícula



**Figura 4.11.** Efecto del arreglo de partícula sobre  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  usando un arreglo lineal y escalonado de cilindros.

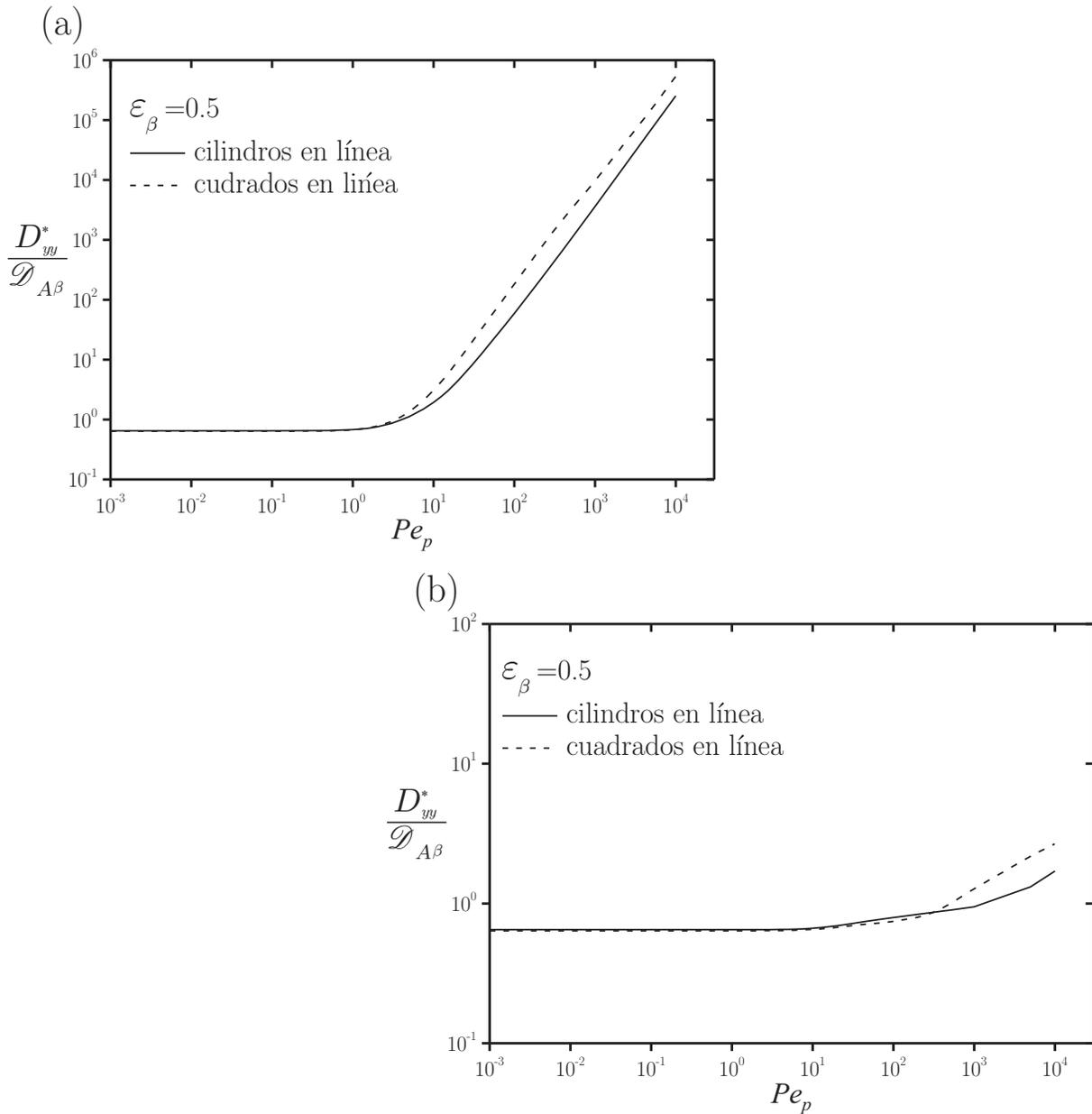
adicional en la dirección principal del flujo, lo cual a su vez altera la trayectoria de la velocidad; esto se observa en los perfiles de velocidad mostrados en la Figura 4.9, para las diferentes estructuras de las celdas unitarias usadas en este capítulo. En los perfiles para el coeficiente de dispersión longitudinal mostrados en la Figura 4.10, para un número de Péclet de partícula igual a 1,000, el valor del coeficiente de dispersión longitudinal para un arreglo triangular es varios órdenes de magnitud menor al valor de un arreglo escalonado; a medida que la relación de diámetros en un arreglo escalonado aumenta, el valor de este coeficiente de dispersión se acerca a los resultados obtenidos de un arreglo lineal, esto es porque el tamaño de las partículas adyacentes disminuyen, lo que tiene como consecuencia un incremento en el tamaño de la partícula de radio  $R_0$ , asemejándose al arreglo lineal. Como la

dispersión es generada principalmente por gradientes de velocidad y regiones de recirculación, estas regiones (presentes entre las partículas en un arreglo lineal) se ven reducidas para los arreglos escalonado y triangular. La interrupción del flujo del fluido en la dirección principal provocado por un arreglo escalonado y triangular implica que los gradientes de velocidad se desvíen de la dirección predominante. En un arreglo lineal, la distribución de la velocidad no cambia significativamente a lo largo de la dirección de flujo; en un arreglo escalonado y triangular, el flujo sigue un patrón más complicado y es objeto de cambios sustanciales periódicos en la dirección y en la magnitud de la velocidad. El resultado es una disminución del componente longitudinal de la dispersión, donde los valores del coeficiente de dispersión longitudinal para los arreglos escalonados, y especialmente para el arreglo triangular, son menores a los obtenidos usando un arreglo en línea. Los cambios sustanciales de la velocidad ocurren también en medios porosos desordenados y su efecto sobre el coeficiente de dispersión serán revisados posteriormente.

Una tendencia opuesta es exhibida por el coeficiente de dispersión transversal, ya que, para números de Péclet de partícula grandes, la contribución principal del tensor de dispersión es debido al movimiento perpendicular del fluido existente dentro de la celda unitaria. Como la magnitud de dicho movimiento transversal del fluido es mayor en un arreglo geométrico triangular y escalonado, estos últimos alcanzan mayores valores del coeficiente de dispersión transversal, como se observa en la Figura 4.11. Por otro lado, el movimiento transversal del fluido en un arreglo lineal se desarrolla en regiones entre los cilindros, donde la velocidad promedio ocurre en una dirección mayoritariamente longitudinal. De lo anterior, se deduce que los gradientes de velocidad en la dirección transversal deben disminuir, el resultado es un valor del coeficiente de dispersión transversal menor para los arreglos escalonado y triangular. Las descripciones anteriores se pueden complementar observando los perfiles de velocidad mostrados en la Figura 4.9, para las distintas arreglos y configuraciones de celdas unitarias.

### **Efecto de la geometría**

El efecto de la geometría de la celda unitaria sobre el coeficiente total de dispersión se examina usando partículas de geometría cilíndrica y cuadrada. Los resultados del tensor de dispersión en la dirección longitudinal y transversal para los arreglos lineales de cilindros y de cuadrados son comparados en la Figura 4.12. Para números de Péclet bajos los perfiles de  $D_{xx}^*$  y  $D_{yy}^*$  muestran que el efecto de la geometría de la partícula sobre el coeficiente



**Figura 4.12.** Efecto de la geometría de la partícula sobre ambos: (a)  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  y (b)  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  usando un arreglo lineal de cuadrados y cilindros.

transversal y longitudinal es despreciable. Para números de Péclet grandes, los resultados del coeficiente de dispersión longitudinal para la geometría de cuadrados en línea presentan los mayores valores comparado con la de cilindros en línea, esto se debe a la presencia de mayores regiones de recirculación entre las partículas para la geometría de cuadrados. Para

un arreglo de cuadrados en línea, el flujo sigue una trayectoria parcialmente rectilínea que puede ser comparado con el flujo entre dos placas paralelas [Figura 4.9 (a)]. Sin embargo, para una geometría de cuadrados el coeficiente de dispersión longitudinal es afectado por las regiones de recirculación, mientras que para dos placas paralelas la dispersión es causada solamente por los gradientes de velocidad. En un arreglo de cilindros en línea el coeficiente es afectado por las regiones de recirculación, y en menor medida, por los gradientes de velocidad entre las partículas.

Los perfiles del coeficiente de dispersión transversal para los arreglos lineal de cilindros y cuadrados se reportan en la Figura 4.12 (b). Para números de Péclet grandes, los valores de  $D_{yy}^*$  son mayores para un arreglo lineal de cuadrados comparados con el de cilindros. Los gradientes de velocidad para este flujo casi rectilíneo en la dirección transversal contribuyen más que las regiones de recirculación en el coeficiente de dispersión transversal.

### Efecto del número de Péclet

La variación del coeficiente de dispersión longitudinal con el número de Péclet observada en la Figura 4.7, donde el coeficiente longitudinal para los arreglos lineal, escalonado y triangular de partículas cilíndricas muestran un perfil asintótico para números grandes del  $Pe_p$ ,  $Pe_p \gtrsim 100$  (proceso dispersivo dominado por la contribución de la dispersión hidrodinámica), es comúnmente descrita mediante un análisis por mínimos cuadrados de los datos, usando una correlación potencial de la forma

$$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = \alpha Pe_p^\delta \quad (4.10)$$

En la Tabla 4.6, se dan los valores para los coeficientes  $\alpha$  y  $\delta$  para diferente porosidades. También se muestran los valores promedios del exponente  $\delta$  para los tres arreglos de partículas cilíndricas. Los valores de los exponentes están dentro de un rango  $1.76 < \delta < 1.96$ . Se puede observar que estos valores son menores a 2, valor que predice la teoría de Taylor (1953, 1954)-Aris (1956) para la dispersión dentro de un tubo capilar. Los resultados en la Tabla 4.6 muestran que un aumento de  $\varepsilon_\beta$  incrementa el valor del exponente  $\delta$  tendiendo a un valor de 2. El valor aproximado de  $\delta = 1.8$  para la Ecuación 4.10 concuerda con aquellos sugeridos por la literatura y mostrados en la Tabla 4.7, obtenidos de cálculos numéricos para diferentes arreglos periódicos de cilindros.

### 4.2.3. Comparación con otros resultados numéricos

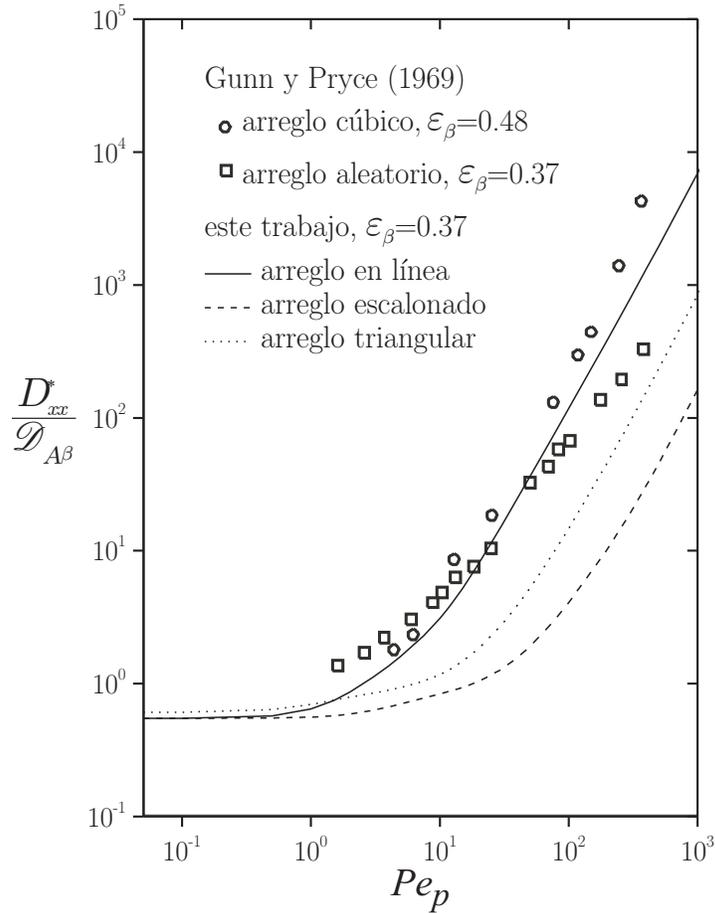
En el planteamiento del problema se mencionó el empleo de varios métodos numéricos usados por varios investigadores para resolver el problema de valores a la frontera, que conduce al cálculo del coeficiente de dispersión total  $\mathbf{D}_{A\beta}^*$ , para varios modelos bidimensionales y tridimensionales de geometrías relativamente simples, como los presentados en esta sección. Los valores del coeficiente de dispersión obtenidos de la literatura pueden ser utilizados para comparar los resultados del coeficiente de dispersión calculados en este trabajo; los cuales fueron obtenidos mediante el uso de herramientas computacionales comerciales con un código basado en el método de elemento finito (COMSOL Multiphysics).

**Tabla 4.6.** Coeficientes  $\alpha$  y  $\delta$  de la correlación potencial del coeficiente de dispersión longitudinal para los arreglos: lineal, escalonado y triangular.

$\varepsilon_\beta$	en línea		escalonado		triangular	
	$\alpha$	$\delta$	$\alpha$	$\delta$	$\alpha$	$\delta$
0.3	0.04720	1.765	0.0017	1.849	0.0013	1.804
0.5	0.01457	1.804	0.0010	1.951	0.0008	1.846
0.7	0.00356	1.852	0.0005	1.943	0.0004	1.840
0.9	0.00037	1.958	0.0002	1.854	0.0002	1.831
Promedio	0.01642	1.8448	0.0008	1.8993	0.0007	1.8303

**Tabla 4.7.** Coeficiente  $\delta$  reportados por varios investigadores.

	Arreglo	$\varepsilon_\beta$	$\delta$
Eidsath <i>y col.</i> (1983)	Cilindros en línea y escalonados	0.37	1.7
D. Edwards <i>y col.</i> (1991)	Cilindros en línea	0.6	1.79
Salles <i>y col.</i> (1993)	Cilindros escalonados	0.59	1.78
Amaral-Souto y Moyne (1997a)	Cilindros en línea y escalonados	0.64	1.71
Didierjean <i>y col.</i> (1997)	Cilindros en línea	0.68	1.67
Buyuktas y Wallender (2004)	Cilindros en línea	0.52	1.85
Wood (2007)	Esferas en línea	0.38	1.17



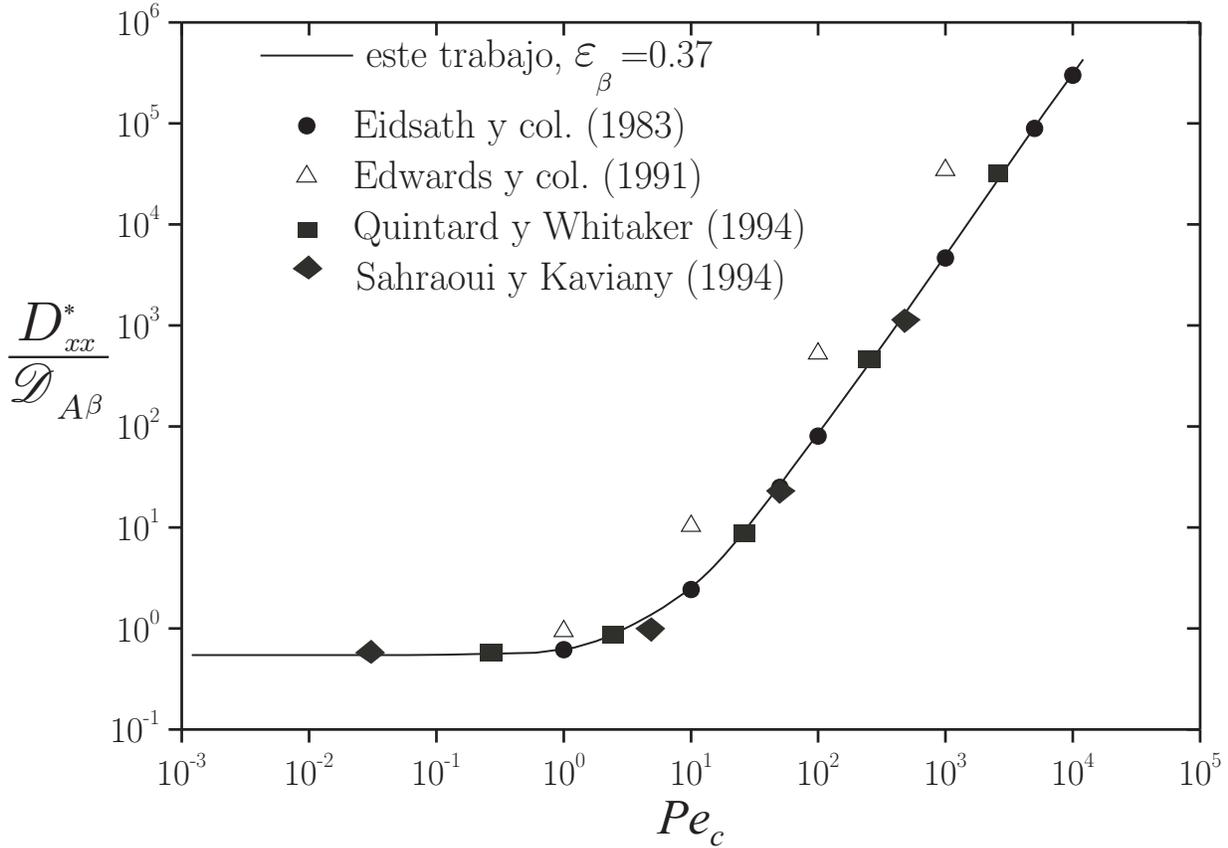
**Figura 4.13.** Comparación de resultados numéricos de  $D_{xx}^*$  para arreglos de cilindros (2D) comparado con datos experimentales para arreglos de esferas (3D).

Los resultados experimentales de Gunn y Price (1969) para el coeficiente de dispersión longitudinal ( $D_{xx}^*$ ), medidos en arreglos cúbicos aleatorios de esferas, representan excelentes datos para comparar los resultados teóricos obtenidos, a pesar de no ser un medio poroso real propiamente dicho. También pueden ser usados para observar la influencia de medios poros periódicos ordenados y desordenados sobre el proceso de dispersión. La influencia de medios porosos periódicos desordenados en la predicción del tensor de dispersión se atenderá en el capítulo siguiente, cuando se explore el uso de celdas unitarias con geometrías periódicas más complejas a los medios porosos ordenados revisados en este capítulo. En la Figura 4.13, se muestra los resultados de Gunn y Price (1969) junto con los cálculos de este trabajo para los arreglos lineal, escalonado y triangular de partículas cilíndricas para una

porosidad de 0.37. Los resultados teóricos obtenidos concuerdan satisfactoriamente con los datos experimentales para el arreglo lineal de cilindros, dando valores similares de  $D_{xx}^*$  para números de Péclet menores a 100; sin embargo estos resultados son parciales, a razón de que los datos experimentales son para sistemas tridimensionales y nuestro análisis está limitado a medios porosos ordenados bidimensionales. Los datos experimentales de Gunn y Price sugieren que el coeficiente de dispersión es independiente del arreglo de la microestructura para un intervalo amplio de  $Pe_p$ , sin embargo en la Figura 4.13 se sugiere lo contrario, ya que existen diferencias en los valores del coeficiente de dispersión dependientes del arreglo de las partículas en la celda unitaria a números de Péclet de partículas mayores a uno. Nuevamente hay que recordar que los resultados son parciales por el uso de modelos de medios poroso periódicos bidimensionales. Para  $Pe_p < 100$ , se presentan valores similares para el arreglo aleatorio y arreglo cúbico, más arriba de ese valor el coeficiente de dispersión longitudinal es mayor para el arreglo ordenado; en los resultados teóricos se observó que el valor de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  depende fuertemente del arreglo y la geometría de la celda periódica, arriba de la zona donde la contribución hidrodinámica es dominante.

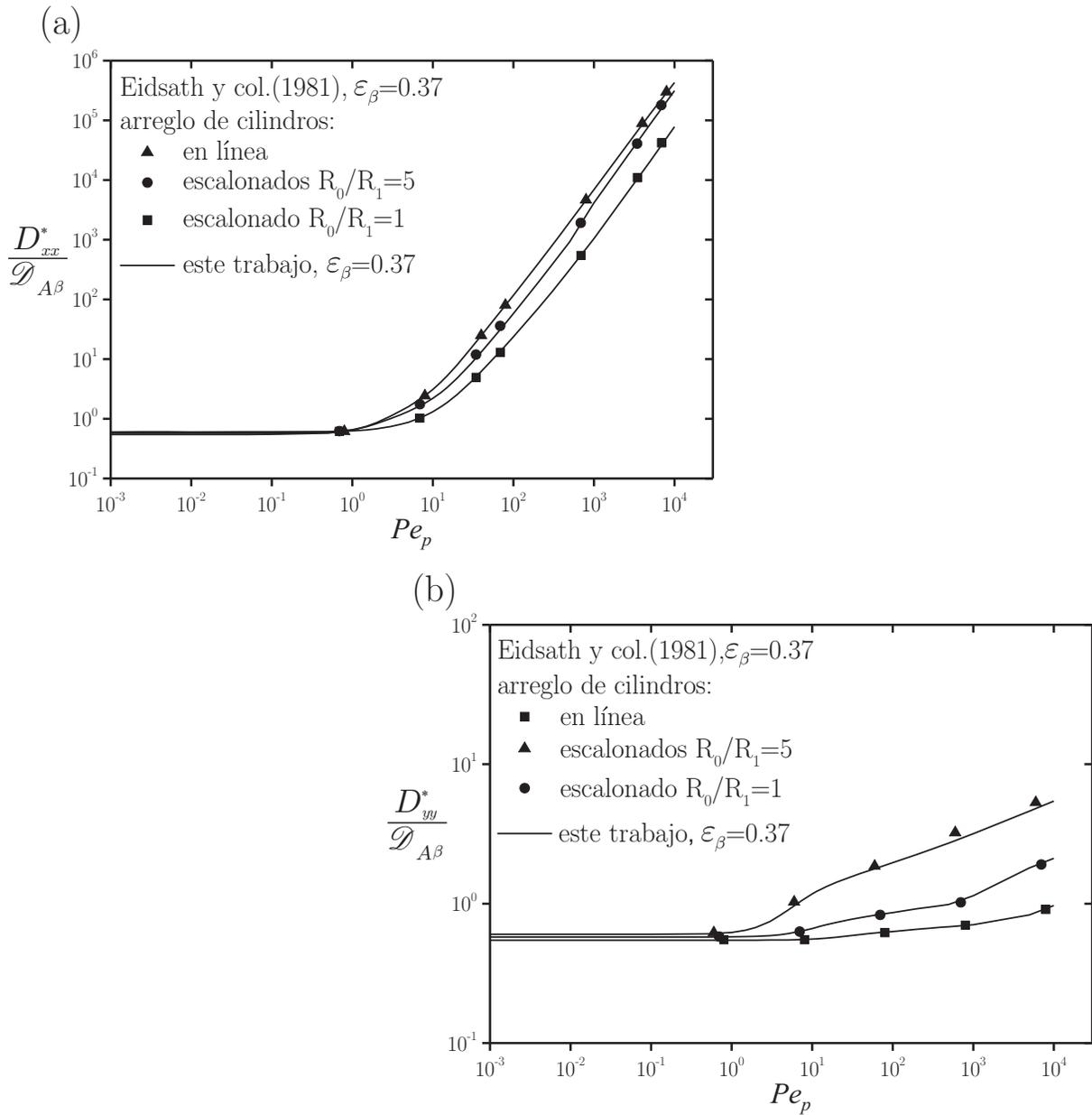
En Whitaker (1999) se sugiere que la solución del problema de cerradura de la ecuaciones (3.24) puede ser resuelto con confianza por una variedad de métodos numéricos, haciendo referencia a los diferentes técnicas numéricas empleados por varios investigadores en el cálculo del tensor de dispersión. Algunos de sus resultados ya han sido citados en este trabajo. Eidsath *y col.* (1983) y D. Edwards *y col.* (1991) usaron diferencias finitas, Sahraoui y Kaviani (1994) y Buyuktas y Wallender (2004) aproximaron el problema de cerradura por diferencias finitas, Quintard y Whitaker (1994) y Amaral-Souto y Moyne (1997a) por el método de volumen finito. En la Figura 4.14 se muestran los resultados numéricos de  $D_{xx}^*$  contra el número de Péclet de celda, obtenidos en este trabajo explorando el uso del software de elemento finito de COMSOL Multiphysics para un arreglo de lineal de cilindros junto con los resultados disponibles en la literatura. En esta comparación los resultados del coeficiente de dispersión están reportados en función del número de Péclet de celda, para evitar confusiones con los valores obtenidos originalmente.

En la Figura 4.15 (a) y 4.15 (b) se presenta una comparación de los valores del coeficiente de dispersión longitudinal y transversal obtenidos con la herramienta computacional COMSOL Multiphysics y los resultados originales calculados en el trabajo de Eidsath (1981), para los arreglos lineal y escalonado con variación de radios. En ambos casos, los resultados del coeficiente de dispersión mostrados en la Figura 4.15 igualan los datos originales



**Figura 4.14.** Comparación de resultados numéricos de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  con resultados numéricos reportados en la literatura.

reportados por Eidsath (1981). A pesar de que las capacidades computacionales presentes cuando el trabajo de Eidsath (1981) fue realizado resultan triviales a las capacidades actuales, en lo que respecta a la número de elementos finitos en la discretización del problema de dispersión. Los resultados resultan ser suficientemente comparativos para corroborar los datos obtenidos. Hay que recalcar sin embargo que estas herramientas computacionales permite el cálculo del coeficiente de dispersión de una forma más eficiente, ya que de otra manera resultaría complicado, inclusive para las celdas unitarias exploradas en este capítulo, la discretización de los problema de valores a la frontera de Stokes y de cerradura. Como lo demuestran los estudios previos reportados en la literatura. Es por demás alentador la exploración de celdas unitarias con diferentes modelos periódicos de medios porosos cuya



**Figura 4.15.** Comparación de resultados numéricos de ambos:  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  y  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  con los reportados por Eidsath y col. (1985).

geometría representa, de forma más aproximada la microestructura real, usando este tipo de herramientas computacionales.

## CAPÍTULO 5

# COEFICIENTES EFECTIVOS PARA CELDAS UNITARIAS DE COMPLEJIDAD MEDIA

En este capítulo se explora el uso de herramientas computacionales para la predicción de parámetros efectivos de las ecuaciones que describen los fenómenos de conducción de calor y dispersión pasiva en medios porosos usando configuraciones periódicas con características geométricas más complejas a las presentadas en el capítulo anterior.

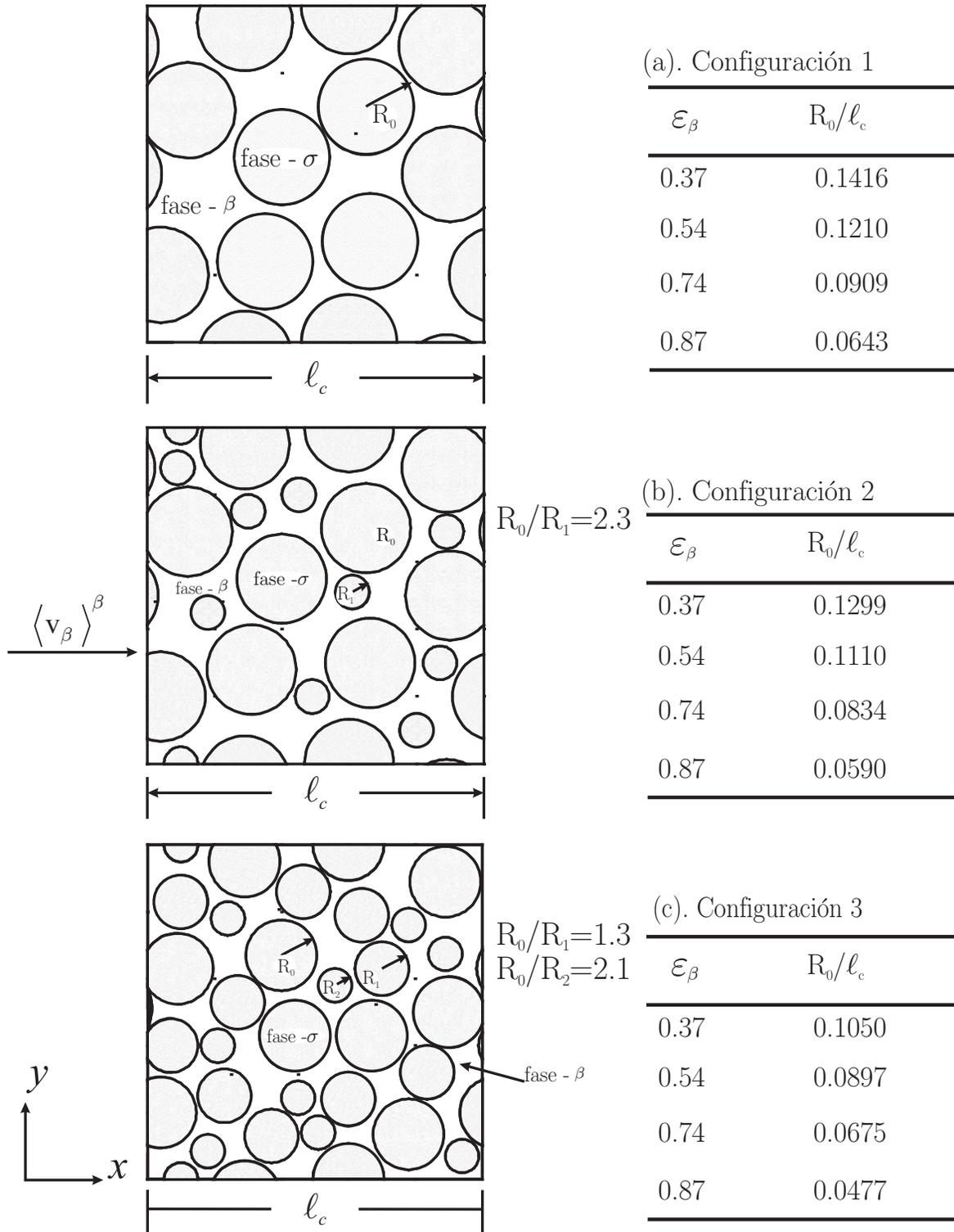
### 5.1. Coeficiente de conductividad térmica efectiva

El cálculo del coeficiente de conductividad térmica efectiva se obtiene de la solución del problema de valores a la frontera asociado (*problema de cerradura*) de las ecuaciones de transporte de propiedades promediadas de la escala macroscópica. El dominio de solución del problema de cerradura se lleva a cabo en representaciones periódicas (celdas unitarias) de medios porosos. El uso de este tipo de celdas unitarias no esta limitada geoméricamente y estas celdas pueden contener los detalles estructurales que permitan describir de forma adecuada la distribución de las fases de un medio poroso real; la complejidad estructural, sin embargo, está limitada más bien a los recursos computacionales disponibles para resolver el problema de cerradura, que permite la predicción del coeficiente de conductividad efectiva. Actualmente se disponen de sistemas de cómputo y herramientas computacionales que permiten explorar el uso estructuras con una mayor complejidad geométrica a las usualmente usadas en la predicción del coeficiente de conductividad efectiva.

La conductividad efectiva, como ya se demostró en el capítulo anterior, es función de la estructura geométrica del sistema heterogéneo (arreglo y forma de las partículas), la porosidad y la relación de conductividades de las fases. Un medio poroso normalmente consiste en partículas sin contacto y con contacto. Modelos analíticos y numéricos que analizan en detalle la contribución del contacto entre las partículas sobre el coeficiente de conductividad térmica efectiva han sido reportados ampliamente en la literatura en Nozad *y col.* (1985b); Shonnard y Whitaker (1989); Hsu *y col.* (1994); Buonanno y Carotenuto (1997); Feng *y col.* (2004). En este capítulo se explora el uso de estructuras más complejas a las descritas en el capítulo anterior con el fin de calcular el coeficiente de conductividad efectiva, por consiguiente sólo se considera la contribución de la estructura geométrica de la celda unitaria, omitiendo el contacto entre las partículas.

El estudio de la conductividad efectiva se realiza frecuentemente en sistemas heterogéneos de lechos empacados y en sistemas naturales como suelos y rocas. Las estructuras de lechos empacados pueden ser modeladas asumiendo arreglos regulares y aleatorios de esferas (3D) y cilindros (2D), de tamaños uniformes y repetidos a través de un lecho. Lehmann *y col.* (2006) caracterizaron medios porosos naturales usando una metodología propuesta por ellos a partir rayos X. Lehmann *y col.* (2006) representan la complejidad de la microestructura mediante arreglos desordenados de partículas esféricas y cilíndricas de diferente tamaño. En la Figura 5.1 se muestran representaciones de celdas unitarias para medios poroso espacialmente periódicos basadas en una distribución aleatoria de partículas cilíndricas mencionadas. La celda unitaria en la Figura 5.1 (a), es una distribución de partículas cilíndricas con un radio de partícula  $R_0$ . La relación de  $R_0$  con la longitud característica de la celda,  $\ell_c$ , para varios valores de porosidad se observan en la tabla contigua a la figura de la celda unitaria. La celda de la Figura 5.1 (a) es semejante a la estructura típica dentro de lechos empacados. Las celdas unitarias periódicas de las figuras 5.1 (b) y 5.1 (c) representan estructuras semejantes a las propuestas por Lehmann *y col.* para medios poroso reales, donde  $R_0/R_1$  y  $R_0/R_2$ , representan una relación entre los radios de las partículas cilíndricas de diferentes tamaños. Las relaciones correspondientes de  $R_0$  con  $\ell_c$  para varias valores porosidad se muestran también en las tablas contiguas de las celdas unitarias en la Figura 5.1. Las regiones  $\beta$  y  $\sigma$  representan las fases fluida y sólida, respectivamente, de acuerdo a la nomenclatura seguida a lo largo de este trabajo.

El cálculo del coeficiente de conductividad se lleva a cabo de la misma manera que en el capítulo anterior; usando la herramienta COMSOL Multiphysics para la discretización



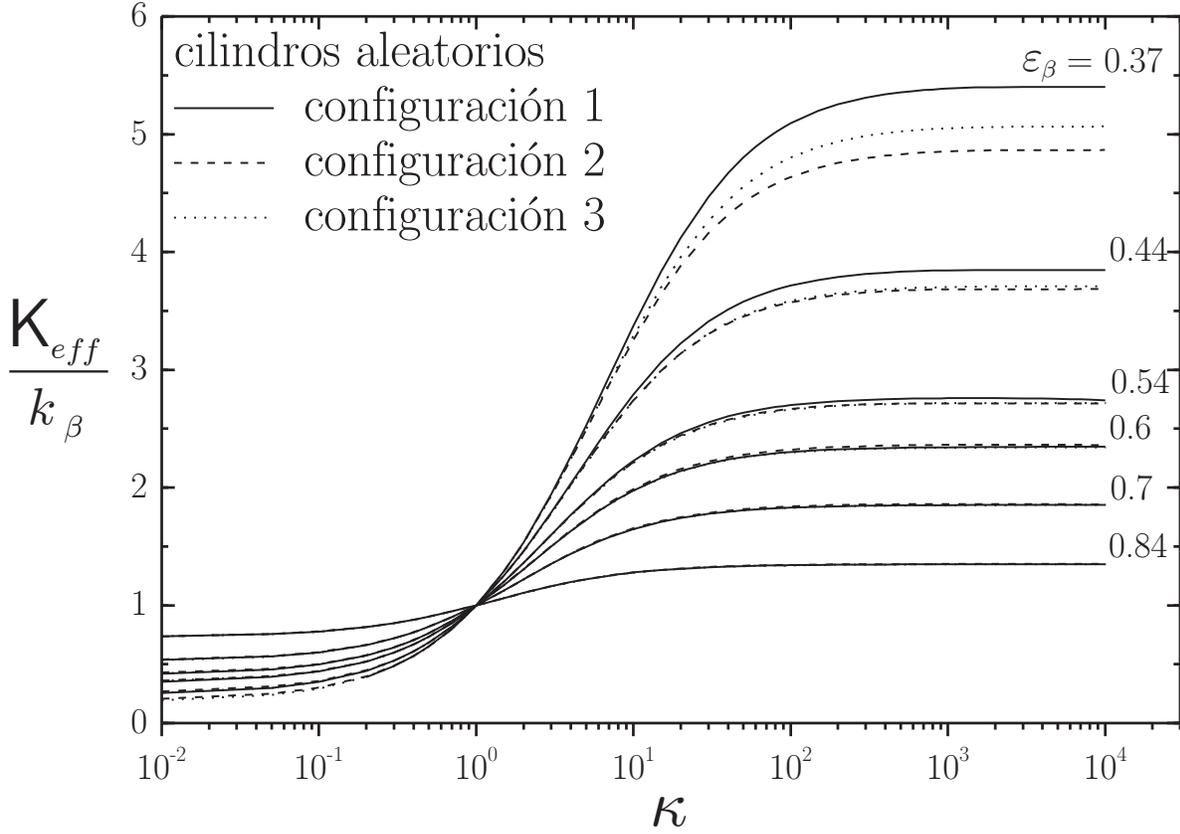
**Figura 5.1.** Celdas unitarias de medios porosos espacialmente periódicos con distribución aleatoria de partículas cilíndricas.

del problema de cerradura, usando las celdas unitarias de la Figura 5.1 para predecir el coeficiente de conductividad térmica efectiva,  $K_{eff}$ .

### 5.1.1. Resultados para arreglos desordenados de partículas

Las celdas unitarias mostradas en la Figura 5.1 son usadas para calcular el coeficiente de conductividad efectiva. Los resultados para el coeficiente de conductividad térmica efectiva adimensional ( $K_{eff}/k_\beta$ ) como función de la relación de conductividades térmicas de las fases ( $\kappa = k_\beta/k_\sigma$ ) para diferentes valores de porosidad se presentan en la Figura 5.2. La conductividad térmica para las diferentes configuraciones de celdas unitarias presenta los mismos perfiles observados en el capítulo anterior. En los perfiles mostrados en la Figura 5.2, se observa que la conductividad efectiva se incrementa a medida que  $\kappa$  aumenta hasta alcanzar un perfil asintótico, donde el valor de la conductividad efectiva se vuelve independiente de  $\kappa$ . El valor de  $\kappa$ , donde la conductividad térmica efectiva presenta el perfil asintótico, varía con el valor de la porosidad y de la estructura geométrica de la celda unitaria. La tendencia asintótica se interpreta en el sentido de que una fase, con una conductividad térmica mucho mayor que otra, provoca que esta fase no tenga influencia sobre la distribución de la temperatura, por consiguiente la conductividad térmica efectiva es controlada prácticamente por la fase con la menor conductividad térmica. En la Figura 5.2 se observa que la conductividad térmica efectiva se incrementa cuando la porosidad decrece para valores de  $\kappa > 1$ . Esto puede interpretarse, en el sentido, de que cuando la porosidad disminuye, la fracción volumétrica del sólido ( $\varepsilon_\sigma$ ), con la mayor conductividad, se incrementa, lo que conduce a un aumento de la conductividad térmica efectiva. En caso contrario para  $\kappa < 1$ , se observa un resultado opuesto, ya que la conductividad térmica se incrementa con la porosidad. Esto es porque cuando  $\kappa < 1$ ,  $k_\sigma < k_\beta$ , y si la porosidad se incrementa, un mayor volumen del medio es ocupado por la fase  $\beta$ , con la mayor conductividad, dominando la conductividad térmica efectiva y resultando en un incremento de ésta.

En la Figura 5.2 se puede observar también, que la conductividad térmica efectiva es casi la misma cuando  $\kappa < 10$ . Esto indica que la conductividad térmica efectiva para estos valores de  $\kappa$  está dominada totalmente por la porosidad y los efectos de la geometría de celda unitaria pueden ser considerados despreciables. Cuando  $\kappa > 100$  y la porosidad es menor a 0.54, el efecto de la geometría de la celda unitaria se vuelven mayor y se observan diferencias entre los valores de la conductividad efectiva entre las distintas configuraciones de las celdas



**Figura 5.2.** Resultados de  $K_{eff}/k_\beta$  para las configuraciones 1,2 y 3 y varias porosidades.

unitarias; siendo la Configuración 1, la que obtienen los mayores valores de  $K_{eff}/k_\beta$ , seguidas de la configuraciones 3 y 2, respectivamente. Cuando la porosidad decrece la interacción entre las partículas se incrementa y la diferencia entre la conductividad térmica para las distintas estructuras se incrementa. En una celda unitaria con una estructura conformada por partículas cilíndricas de diferente tamaño en un arreglo aleatorio, las diferencias entre los valores de la conductividad térmica efectiva se pueden interpretar de acuerdo a la solución del problema de valores a la frontera, donde la dependencia de la conductividad efectiva con la geometría del medio está dada por  $\mathbf{n}_{\beta\sigma}$  en la condición de frontera en la interfase: C.F.2  $-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \kappa \nabla \mathbf{b}_\sigma + \mathbf{n}_{\beta\sigma} (1 - \kappa)$  de la Ecuación (3.12d). La forma con la que influencia ésta condición frontera, el coeficiente de conductividad efectiva con la geometría es particular a la estructura de la celda unitaria empleada y una relación directa a la

complejidad de la celda unitaria no es tan simple. Aparentemente, en estos casos particulares, existe mayor interacción entre las partículas cilíndricas de la Configuración 1, seguida de las configuraciones 3 y 2, respectivamente. Ver Figura 5.2. Para valores  $\kappa > 100$  y porosidades menores a 0.5 los efectos de la microestructura de la celda unitaria sobre el coeficiente de conductividad térmica pueden ser considerados, también, despreciables.

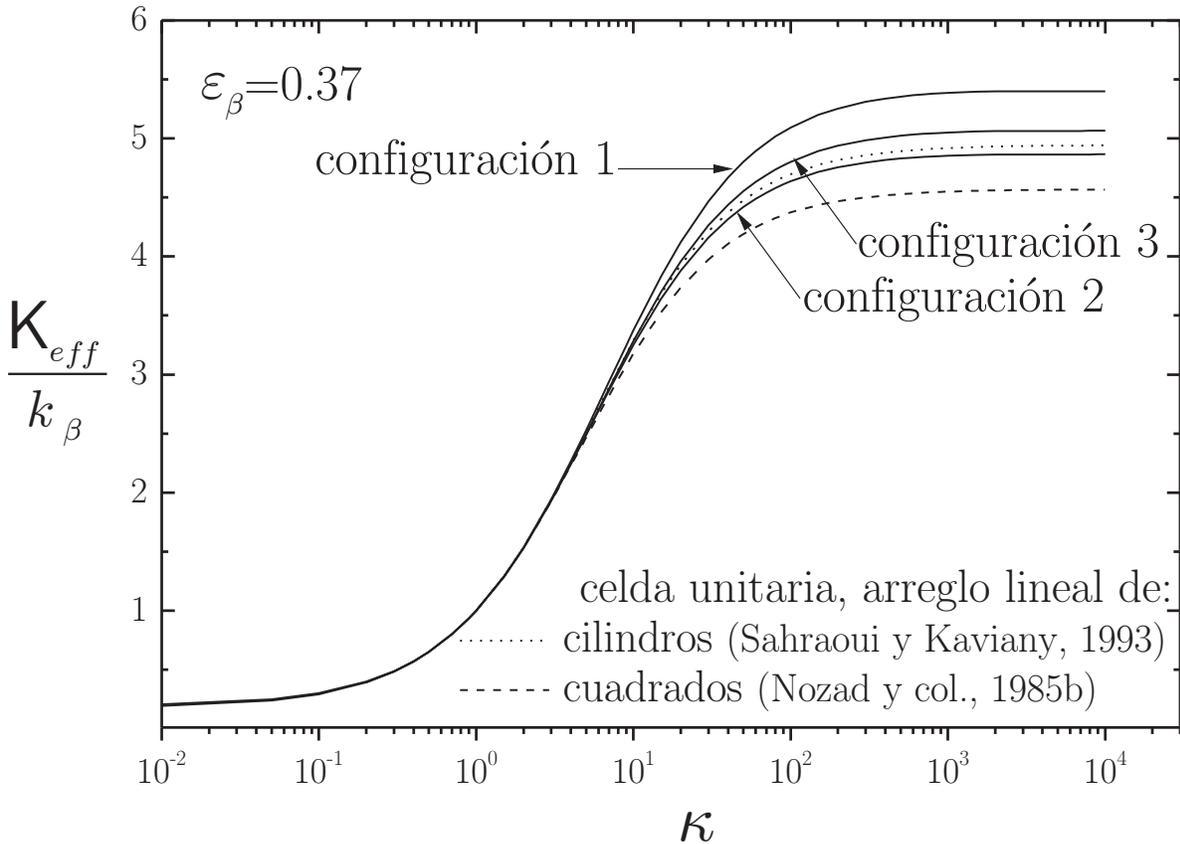
Con el objetivo de analizar el cálculo numérico del coeficiente de conductividad térmica, en los renglones siguientes se detallan aspectos numéricos de la solución del problema de cerradura y el cálculo del coeficiente de conductividad efectiva usando el software de elemento finito COMSOL Multiphysics. Soluciones numéricas para el problema de valores a la frontera asociado al cálculo de la conductividad térmica reportadas por Nozad *y col.* (1985b) quienes usando diferencias finitas, encontraron que la solución numérica del problema de cerradura podía efectuarse para valores de  $\kappa$  moderados, sin que se observarían problemas numéricos aparentes, sin embargo, a medida que el valor de  $\kappa$  se incrementaba, la solución del sistema de ecuaciones presentaba dificultades numéricas y fluctuación de los valores calculados. Este tipo de problemas fueron resueltos por ellos de forma particular, usando un método de expansión de series asintóticas con un parámetro de perturbación  $\kappa^{-1}$  (detalles en Nozad *y col.*, 1985b). Problemas numéricos similares a los descritos por Nozad *y col.* (1985b), fueron observadas en el cálculo del coeficiente de conductividad térmica usando un esquema de discretización con un número insuficiente de elementos en la malla de la celda unitaria para  $\kappa > 1,000$ . Esta dificultad se superó incrementando el número de elementos en la malla, lo suficiente para obtener una solución para la conductividad efectiva donde no se excediera un valor de 1% del error relativo respecto al esquema de discretización anterior. En la Tabla 5.1, se presentan una prueba de los resultados numéricos de la conductividad térmica para las diferentes configuraciones de celdas unitarias. Las pruebas se hacen para valores de porosidad igual 0.37 y 0.42, siendo estas porosidades donde los efectos de la estructura de la celda unitaria son mayores, de acuerdo a los resultados observados en la Figura 5.2. El tiempo de cómputo ( $t_m$ ) dado en segundos, se determina en un PC genérica (2.2 GHz en procesador y 3GB en RAM). En los resultados numéricos que se presentan en la Tabla 5.1 se observa, que para  $\kappa > 1,000$ , un número mayor de elementos es necesario para evitar las inestabilidades numéricas mencionadas anteriormente, por consiguiente el tiempo de cómputo se incrementa. Diferencias en las estructuras geométricas requiere también un número diferente de elementos, para la Configuración 1, se requiere un número menor de elementos en el esquema de discretización para el cálculo del coeficiente de la conductividad

efectiva comparado con los elementos necesarios para las configuraciones 2 y 3. La utilización de este tipo de celdas unitarias sirve para esquematizar el empleo de estructuras con una relativa complejidad geométrica como representaciones de varios medios porosos encontrados en sistemas reales, para predecir los valores del coeficiente de conductividad efectiva.

En la Figura 5.3, los resultados para el coeficiente de conductividad térmica efectiva de las celdas unitarias de la Figura 5.1 son comparados con otros resultados numéricos reportados en la literatura, en los cuales se usaron celdas unitarias básicas similares a las empleadas en el capítulo anterior. La comparación se limita a una porosidad de 0.37, valor donde el efecto de estructura de la celda unitaria es evidente. En la Figura 5.3 se observa que la conductividad

**Tabla 5.1.** Pruebas numéricas del cálculo de  $K_{eff}/k_{\beta}$  para las configuraciones 1, 2 y 3.

Celda unitaria	$\kappa$	$\varepsilon_{\beta} = 0.37$			$\varepsilon_{\beta} = 0.44$		
		Elementos	$K_{eff}/k_{\beta}$	$t_m(s)$	Elementos	$K_{eff}/k_{\beta}$	$t_m(s)$
Configuración 1	10	22 502	3.372	5.6	37 725	2.790	8.9
	100	22 502	5.090	5.2	37 725	3.735	9.0
		97 451	5.092	23.7	100 411	3.714	38.1
	1 000	22 502	5.391	23.6	100 411	3.846	38.3
		97 451	5.392	56.2	312 726	3.849	141.1
	10 000	97 451	5.421	56.3	312 726	3.859	141.7
Configuración 2	10	40 320	3.254	9.8	130 505	2.739	40.2
	100	106 344	4.639	28.8	226 744	3.572	87.6
		146 404	4.637	43.5	380 868	3.572	198.6
	1 000	106 344	4.886	28.7	226 744	3.687	88.5
		146 404	4.856	43.7	380 868	3.688	198.0
	10 000	146 404	4.873	43.1	380 868	3.869	197.6
Configuración 3	10	145 990	3.267	59.2	130 505	2.739	40.2
	100	203 244	4.769	99.4	226 744	3.572	87.6
		342 127	4.769	236.4	380 868	3.572	198.6
	1 000	203 244	5.019	99.9	226 744	3.687	88.5
		342 127	5.020	235.3	380 868	3.688	198.0
	10 000	342 127	5.043	236.0	380 868	3.869	197.6



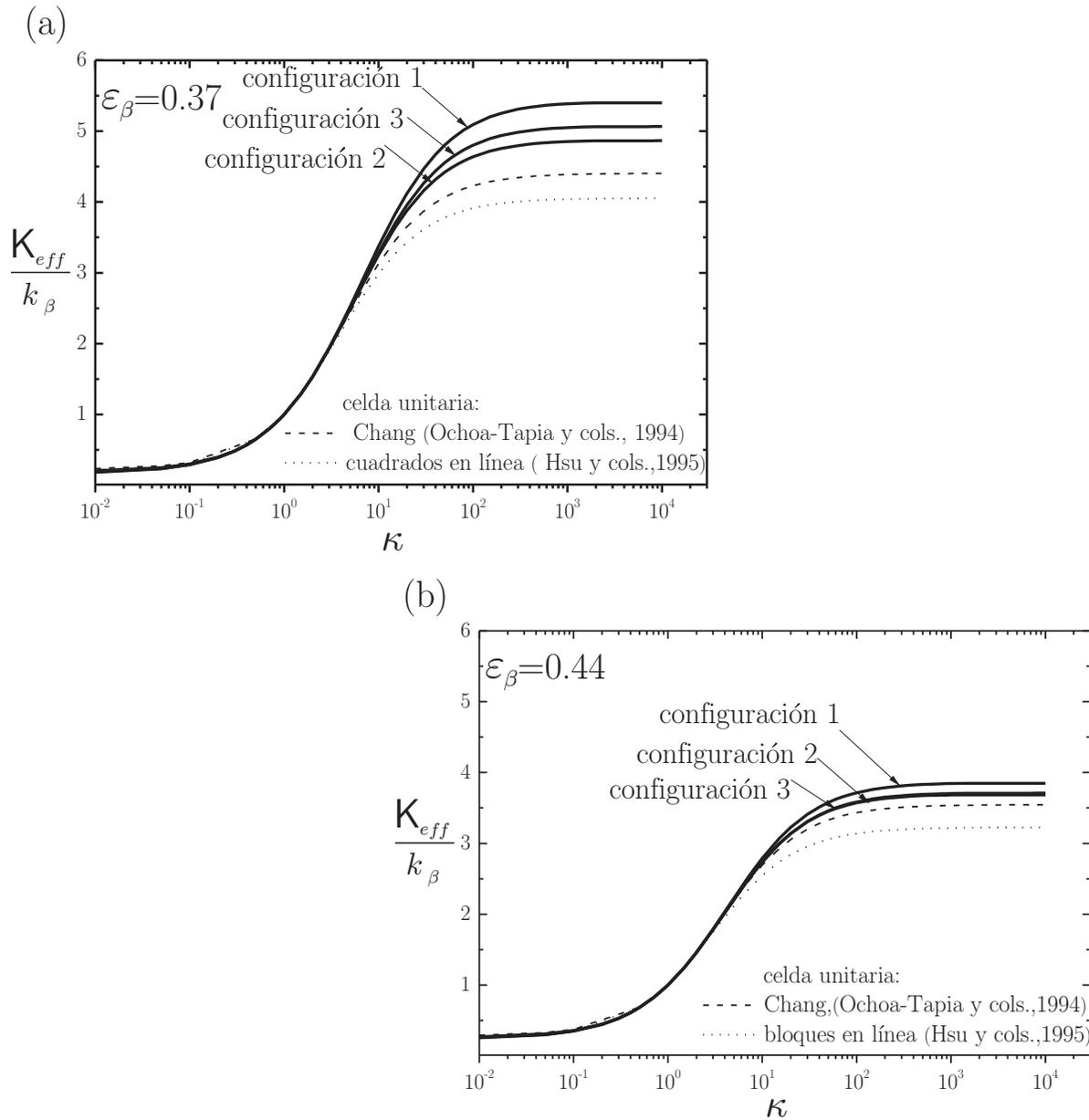
**Figura 5.3.** Comparación de los resultados numéricos  $K_{eff}/k_\beta$  para las configuraciones 1,2 y 3 con otros resultados numéricos reportados en la literatura.

térmica para las configuraciones de la Figura 5.1 adquieren mayores valores que los reportados usando una celda unitaria con un arreglo de cuadrados en línea (Nozad *y col.*, 1985b). La diferencia de los valores de  $K_{eff}/k_\beta$ , entre las distintas configuraciones y el arreglo lineal de cuadrados son de 15% con la Configuración 1, 7% con la Configuración 2 y 12% con la Configuración 3. Sin embargo comparando con los resultados de la conductividad efectiva para el arreglo lineal de cilindros (Sahraoui y Kaviany, 1993) sólo las configuraciones 1 y 3, presentan valores mayores del coeficiente de conductividad efectiva; para la Configuración 2, los valores de  $K_{eff}/k_\beta$  son menores respecto a la celda de cilindros en línea. Las diferencias entre el valor del coeficiente de conductividad que se predice usando las configuraciones 1 y 3, con el arreglo de cilindros en línea son de 8% y 2%, respectivamente, para la Configuración

2 esta diferencia constituye un valor de 1.5%. La cercanía de los valores del coeficiente de conductividad efectiva de las configuraciones 2 y 3 con los valores del arreglo lineal de cilindros, indica poca influencia de la estructura geométrica de la celda unitaria sobre el valor de la conductividad efectiva, para estas estructuras periódicas particulares. Lo anterior involucra el hecho de que un arreglo lineal de cilindros requiere, obviamente, de menos recursos computacionales necesarios en la predicción del coeficiente de conductividad efectiva. Simulaciones numéricas usando COMSOL Multiphysics para una celda unitaria de un arreglo lineal de cilindros requiere solamente de 2,656 elementos y un tiempo de cómputo,  $t_m < 1s$ ; comparando con los tiempos requeridos para las configuraciones 2 y 3, mostrados en la Tabla 5.1, los valores calculados para la conductividad efectiva en un arreglo lineal requieren de mucho menos recursos computacionales. Por esta razón se puede preferir, para estos casos particulares de celdas unitarias, los valores de conductividad efectiva predichos usando una celda unitaria con un arreglo de cilindros en línea (geometría simple), que las configuraciones periódicas 1 y 2 (geometrías más complejas).

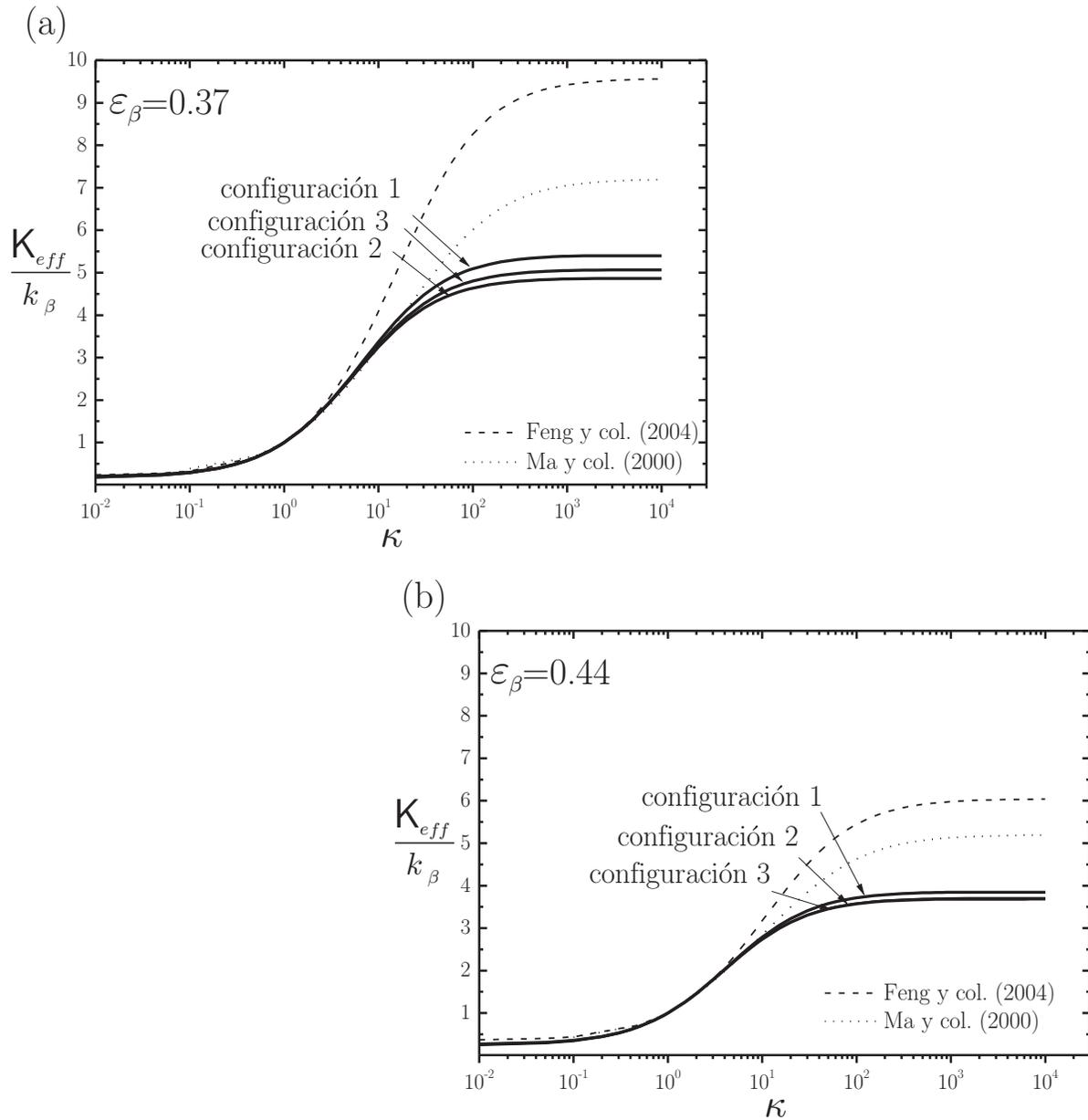
Se debe considerar, sin embargo, que una de las ventajas al usar celdas unitarias que capturan la esencia física de las características de la microestructura del medio poroso, es que permiten la predicción de coeficientes de conductividad efectiva que consideran la distribución de las fases dentro del medio poroso de forma más aproximada a la realidad. Lo anterior se observará posteriormente en la determinación de los perfiles de temperatura dentro de medios porosos, sin demeritar detalles de la microestructura de una representación razonable. Los resultados para la Configuración 1, apuntan hacia esa dirección, al observar de que existen diferencias referentes a los resultados del coeficiente de conductividad efectiva si no se considera apropiadamente la geométrica de la celda unitaria. Sin embargo debe tenerse en cuenta, y como lo demuestran los resultados numéricos del coeficiente de conductividad térmica efectiva para las configuraciones 2 y 3, al compararse con los resultados para un arreglo lineal de cilindros, también existen situaciones donde representaciones simplificadas, que no capturan en esencia la complejidad geométrica de un medio poroso real sirven como buenas aproximaciones para predecir el coeficiente de conductividad efectiva.

Expresiones analíticas también se pueden considerar como buenas aproximaciones para predecir el coeficiente de conductividad térmica efectiva para ciertos casos específicos. Algunas de estas expresiones se presentaron anteriormente en la Tabla 2.1 del Capítulo 1. En la Figura 5.4 se comparan los resultados numéricos obtenidos para las diferentes configuraciones de las celdas unitarias de complejidad media de la Figura 5.1, con los valores



**Figura 5.4.** Comparación de los resultados numéricos de  $K_{eff}/k_\beta$  con las aproximaciones analíticas de Ochoa-Tapia y cols.,(1994) y Hsu y cols.,(1995).

calculados con la aproximación analítica obtenida por Ochoa-Tapia y cols. (1994) para la celda de Chang en 2D y el modelo propuesto por Hsu y cols. (1994) para una arreglo de cuadrados en línea, donde se considera que no existe un contacto entre las partículas. Lo anterior con la finalidad de ser congruentes con los celdas unitarias propuestas de la Figura 5.1. La



**Figura 5.5.** Comparación de los resultados numéricos de  $K_{eff}/k_{\beta}$  con las aproximaciones analíticas de Ma y col.,(2000) y Feng y col.,(2004).

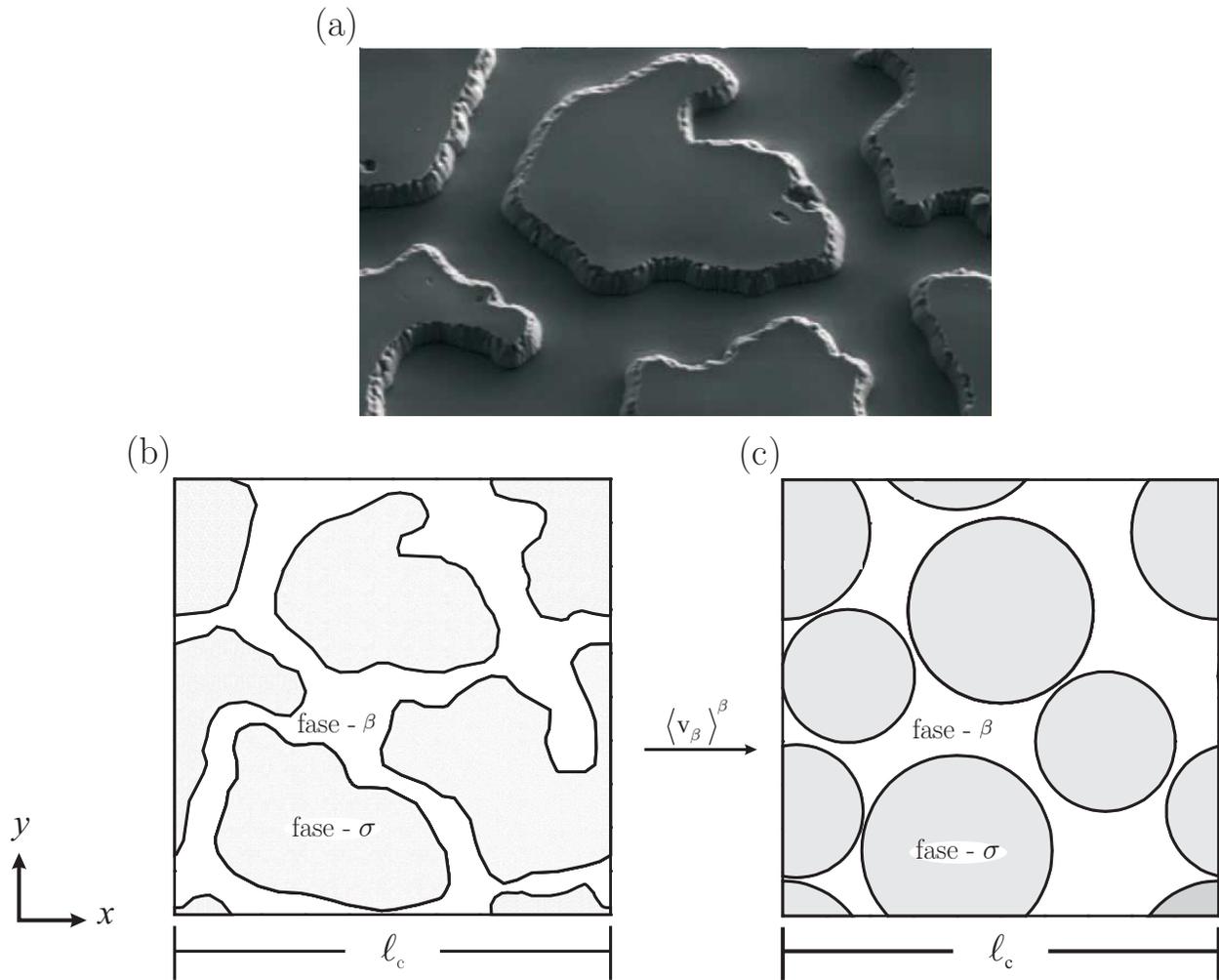
comparación se realiza para valores de porosidad igual 0.37 y 0.44 en la Figura 5.4 (a) y (b), respectivamente. En estas figuras se observa que los resultados numéricos de la conductividad efectiva para las configuraciones 1, 2 y 3 son mayores a los valores que se predicen con las aproximaciones analíticas de Ochoa-Tapia y col. (1994) y Hsu y col. (1994). Para la celda

de Chang se encontraron errores de 18 %, 9.5 % y 13 % con las configuraciones 1,2, y 3, respectivamente, para un porosidad  $\varepsilon_\beta = 0.37$ , y para la representación de cuadrados en línea de Hsu *y col.* (1994) los errores fueron de 24 %, 17 % y 20 % para las configuraciones 1,2 y 3, también para  $\varepsilon_\beta = 0.37$ ; se observa que los resultados para el coeficiente de conductividad efectiva que se predicen con la celda de Chang 2D, de la propuesta analítica de Ochoa-Tapia *y col.* (1994), son los que se acercan más a los resultados numéricos calculados usando las celdas complejas de la Figura 5.1 y los que proporcionan menores errores, a pesar de que la celda unitaria de Chang es una geometría muy simplificada de un medio poroso. Las ligeras diferencias entre los resultados analíticos y numéricos se pueden deber a una sobre-simplificación de las la representaciones del medio poroso usadas por estos modelos analíticos.

En la Figura 5.5 se presenta una comparación de las predicciones numéricas para el coeficiente de conductividad efectiva con las aproximaciones analíticos propuestas recientemente por Ma *y col.* (2003) y Feng *y col.* (2004). El uso de celdas con características fractales empleadas en estos modelos hace que la conductividad efectiva sea mayor que los resultados calculados numéricamente para todas las configuraciones, como lo muestra las figuras 5.5 (a) y (b) para ambas porosidades. En esta figura se observa que el modelo de Feng *y col.* (2004), predice valores de  $K_{eff}/k_\beta$  mucho mayores que los determinados con las tres configuraciones y los resultados de la aproximación de Ma *y col.* (2003), con errores que llegan a ser de 77 %, inclusive para  $\kappa < 10$ . La tendencia de  $K_{eff}/k_\beta$  contra  $\kappa$ , que adquiere el modelo propuesto por Ma *y col.* (2003) es mayor respecto a los resultados numéricos de las configuraciones 1,2 y 3, con un error máximo de 33 % de los valores de la conductividad efectiva para  $\kappa > 10$ , y en el caso de  $\kappa < 10$ , los valores de  $K_{eff}/k_\beta$  igualan los calculados con las tres configuraciones.

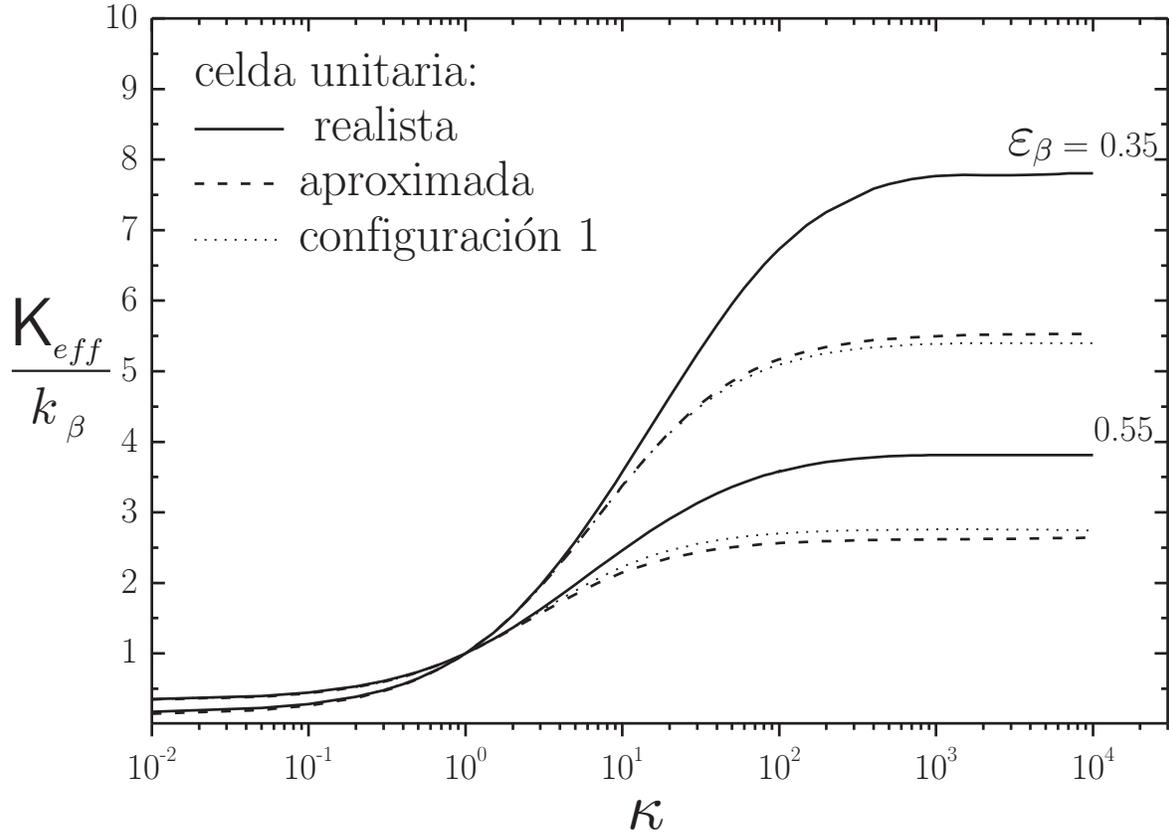
La predicción del coeficiente de conductividad efectiva usando aproximaciones analíticas tienen la ventaja de ser modelos con soluciones más simples y con un menor tiempo de computo ( $t_m < 1s$ ) que aquellos que involucran un análisis numérico, de las soluciones analíticas propuestas en la literatura, la que obtiene los mejores resultados es la aproximación con la celda de Chang (Ochoa-Tapia *y col.*, 1994). Sin embargo, debe tenerse en cuenta que los detalles en la microestructura del medio poroso son considerados irrelevantes en la predicción del coeficiente de conductividad térmica efectiva para este tipo de soluciones analíticas.

Las soluciones numéricas, como las presentadas en este trabajo tratan de considerar estos detalles geométricos del medio poroso y esta información es transferida al coeficiente



**Figura 5.6.** (a) Micrografía extraída de una muestra de suelo (Auset y Keller, 2006). (b) Celda unitaria Realista con geometría basada en la micrografía. (c) Celda unitaria con geometría equivalente a la celda Realista.

de conductividad efectiva que se predice. En ciertos sistemas, para los que no se cuentan con la información experimental previa, una representación de la microestructura del sistema lo suficientemente detallada puede resultar un factor importante en el momento de predecir adecuadamente el coeficiente de conductividad efectiva que se utiliza para modelar el transporte de calor por conducción. Para este tipo de casos el costo computacional resultaría justificable.



**Figura 5.7.** Resultados de  $K_{eff}$  para la celda unitaria Realista comparado con la celdas unitarias aproximada y la configuración 1.

### 5.1.2. Resultados para representaciones de medios porosos

El uso de celdas unitarias como las mostradas en la Figura 5.1 permiten representar en una celda unitaria una variedad de medios porosos homogéneos en 2D; principalmente aquellos semejantes a lechos empacados por esferas y otros tipos de materiales granulares. Sin embargo, existen en la naturaleza medios porosos más complejos cuyas características geométricas no son limitadas a partículas con una forma regular. Bajo los argumentos anteriores, y con el fin extender la predicción del coeficiente de conductividad efectiva a celdas unitarias, que logren capturar la esencia de la complejidad geométrica de medios porosos reales, se determina el coeficiente de conductividad efectiva usando representaciones extraídas de una microfografía de una muestra de suelo, reportadas por Auset y Keller (2006)

y mostradas en la Figura 5.6 (a). La celda unitaria periódica, obtenida en base a la geometría de la micrografía se ilustra en la Figura 5.6 (b); en esta se detalla la orientación y la forma de cada partícula sólida del medio poroso. Nuevamente las regiones  $\beta$  y  $\sigma$  en la celda unitaria representan las fases sólida y fluida, respectivamente, no se considera el contacto entre las partículas para ser consistentes con las celdas unitarias anteriores y con el objetivo principal de omitir el efecto del contacto partícula-partícula, importante para valores de  $\kappa = k_\beta/k_\sigma$  grandes, y enfocarse en el efecto geométrico usando representaciones periódicas más complejas para la predicción del coeficiente de conductividad efectiva. Una celda unitaria “simplificada”, cuya estructura geométrica se basa en partículas cilíndricas con tamaños y posiciones equivalentes a las partículas en la celda unitaria Realista, se muestra en Figura 5.6 (c). Esta última celda unitaria es usada para observar los efectos de la microestructura de la celda unitaria sobre el valor del coeficiente de conductividad efectiva, de forma que se comparen los coeficientes de conductividad predichos.

Las soluciones numéricas del coeficiente de conductividad para las celdas de las Figuras 5.6 (b) y (c), denominadas celdas “Realista” y “Aproximada”, se muestran en la Figura

**Tabla 5.2.** Pruebas numéricas del cálculo de  $K_{eff}$  para las celdas Realista y Aproximada.  $\varepsilon_\beta = 0.35$

Celda unitaria	$\kappa$	$\varepsilon_\beta = 0.35.$		
		Elementos	$K_{eff}/k_\beta$	$t_m(s)$
Realista	10	103 000	3.574	30.6
	100	141 559	6.739	41.2
		230 746	6.740	92.7
		1 000	141 559	7.751
	10 000	230 746	7.762	96.1
		230 746	7.813	94.3
Aproximada	10	37 352	3.375	9.2
	100	37 352	5.168	9.4
		42 080	5.169	17.5
	1 000	42 080	5.488	16.1
		71 370	5.497	33.7
	10 000	71 370	5.528	33.1

5.7. En esta figura también se incluye, para efectos de comparación, los resultados de la conductividad efectiva de la Configuración 1, de la Figura 5.1(a), para una porosidad  $\varepsilon_\beta = 0.35$  y  $\varepsilon_\beta = 0.55$ . La conductividad térmica para estas dos celdas unitarias es casi la misma cuando el valor de  $\kappa$  es menor a 10, cuando  $\kappa$  se incrementa hasta observarse la tendencia asintótica se aprecia una diferencia entre los valores del coeficiente de conductividad efectiva obtenidos por las celdas Realista y Aproximada, siendo el coeficiente de conductividad efectiva muy similar entre la celda Aproximada y la Configuración 1. Para un valor de  $\varepsilon_\beta = 0.35$ , la diferencia entre el valor de la conductividad efectiva llega a ser de un 30% entre la celda Realista y la Aproximada. Para la celda Aproximada y la Configuración 1, la diferencia es de 2%. La Configuración 1, y la celda Aproximada representan arreglos similares de partículas y estos resultados señalan nuevamente la particularidad con que la geometría afecta el coeficiente de conductividad efectiva. La diferencia entre los valores de la conductividad efectiva que se predicen en una celda unitaria con geometría realista y una celda con una geometría aproximada, nos dice, que si no considera adecuadamente los detalles geométricos de la microestructura, puede llegar a existir una pérdida de información en lo referente en la distribución de las fases sobre el coeficiente de conductividad efectiva y pueden existir diferencias entre los valores en los coeficientes de conductividad térmica efectiva predichos, que resulten ser importantes.

El número de elementos en el malla, considerando independencia del esquema de discretización y sin inestabilidades numéricas, junto con el tiempo de cómputo se muestran en las tablas 5.2 y 5.3, con el objeto de realizar pruebas numéricas entorno al cálculo del coeficiente de conductividad efectiva para las celdas unitarias Realista y Aproximada. Un incremento en la complejidad geométrica significa un aumento en el número de elementos requeridos en la discretización lo que conlleva a un mayor tiempo de cómputo. Para la celda unitaria con la representación realista del medio poroso, se requieren casi cuatro veces más el número de elementos necesarios en la representación aproximada, y un tiempo de cómputo promedio tres veces mayor.

La selección de una representación razonable de la complejidad de un medio poroso real, como celda unitaria, estará determinada en función de la información que se quiera aportar acerca de la geometría del sistema heterogéneo en la predicción del coeficiente de conductividad efectiva, como también en la disponibilidad de los recursos computacionales para el cálculo, teniendo en cuenta también las diferencias en el coeficiente de conductividad efectiva al usar celdas unitarias con una sobre simplificación de la geometría del medio poroso.

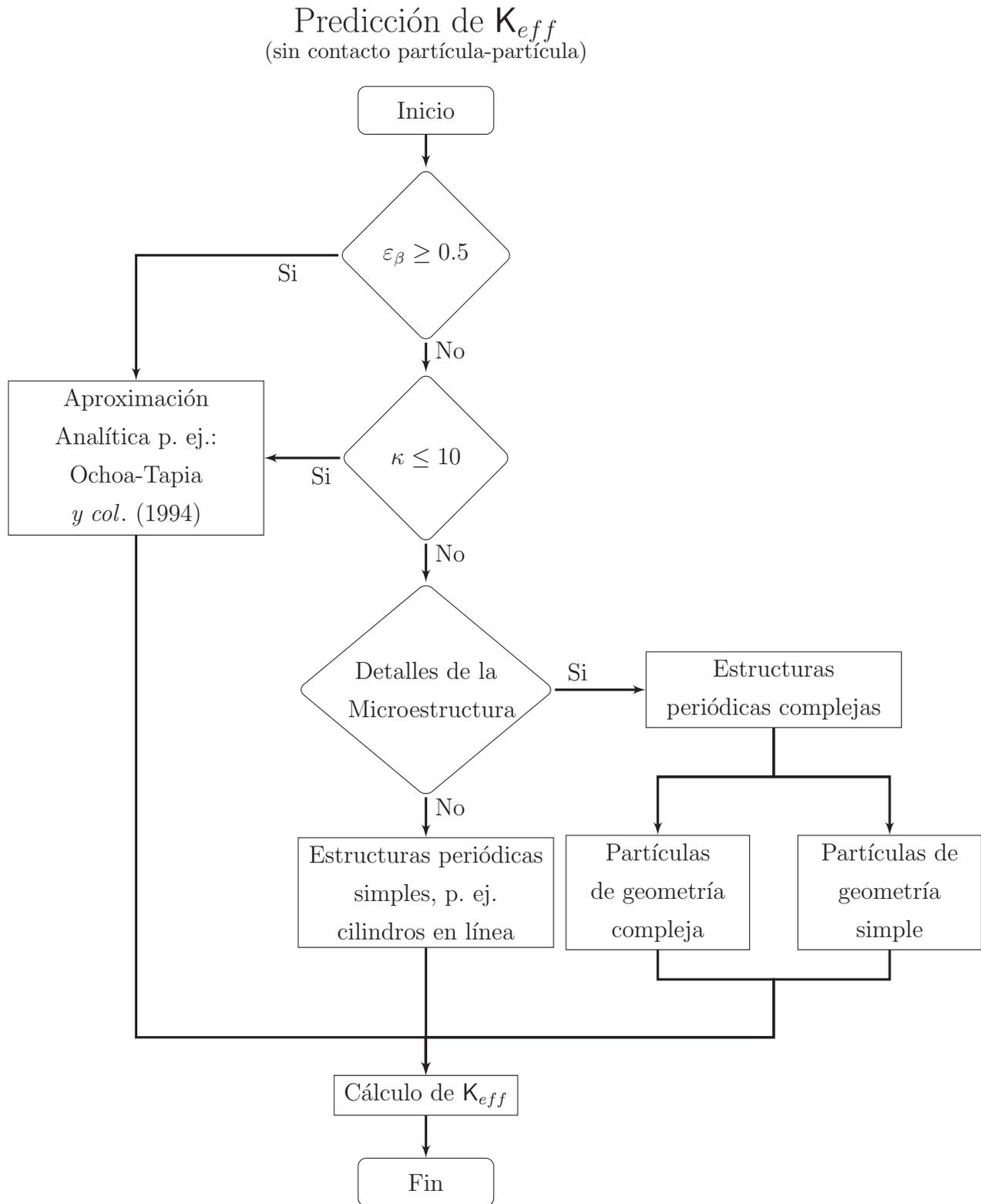


Figura 5.8. Algoritmo para la predicción de  $K_{eff}$ .

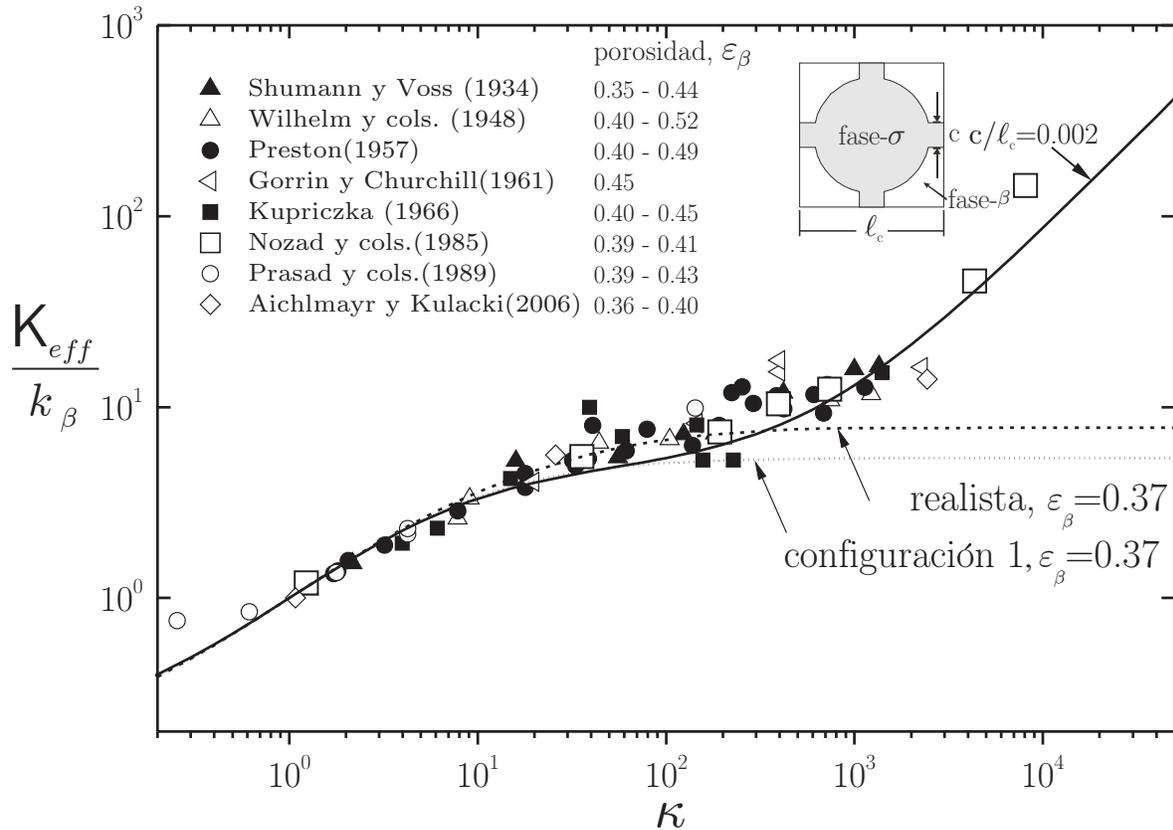
De los resultados discutidos en el Capítulo 4 y en este capítulo, respecto a los valores del coeficiente de conductividad térmica efectiva para diferentes celdas unitarias de complejidad variada, se puede establecer un algoritmo que muestre bajo que circunstancias resulta prudente usar una celda unitaria periódica, con una representación razonable de la microestructura. En la Figura 5.8 se presenta el algoritmo descrito, y se señala que tipo de celdas unitarias pueden ser usadas para calcular el coeficiente de conductividad térmica efectiva. De tal forma que los efectos de la geometría y de la distribución de las fases sean considerados en el valor del coeficiente de conductividad térmica calculado.

### 5.1.3. Comparación con resultados experimentales

Las mediciones experimentales se realizan principalmente en sistemas que involucran diferentes arreglos de medios porosos con un fluido estancado, donde los efectos debido a la convección natural son minimizados (Krupiczka, 1967; Nozad *y col.*, 1985a; Shonnard y Whitaker, 1989; Prasad *y col.*, 1989; Aichlmayr y Kulacki, 2006). Las predicciones del coeficiente de conductividad efectiva obtenidos en este estudio son comparadas con los datos

**Tabla 5.3.** Pruebas numéricas del cálculo de  $K_{eff}$  para las celdas Realista y Aproximada.  $\varepsilon_\beta = 0.55$ .

Celda unitaria	$\kappa$	$\varepsilon_\beta = 0.55$		
		Elementos	$K_{eff}/k_\beta$	$t_m(s)$
Realista	10	132 600	2.463	37.4
	100	152 341	3.581	45.9
		245 687	3.581	101.2
		245 687	3.810	103.1
	1 000	260 137	3.812	111.7
		260 137	3.214	109.7
Aproximada	10	42 358	2.144	11.4
	100	42 358	2.562	10.8
		58 626	2.564	22.1
	1 000	58 626	2.618	21.3
		84 368	2.618	35.4
	10 000	84 368	2.642	36.0



**Figura 5.9.** Comparación de resultados numéricos de  $K_{eff}$  para la Configuración 1 y la celda Realista con datos experimentales de la literatura.

experimentales reportados en la literatura en la Figura 5.9. En la Figura 5.9 también se presentan los resultados numéricos de la conductividad efectiva predichos usando COMSOL Multiphysics, para una celda unitaria con un arreglo lineal de partículas, donde la fase sólida es continua. Los resultados numéricos con los que se comparan los datos experimentales de la conductividad efectiva corresponden a la celda unitaria de la Figura 5.1 (a) (Configuración 1) y a la celda con representación realista de la Figura 5.6 (b). El coeficiente de conductividad efectiva para estas celdas se ajustan bastante bien a los valores experimentales para  $\kappa < 200$ , con errores entre los resultados numéricos y los valores experimentales desde 2% (Nozad y cols., 1985a) hasta un 15% (Gorrin y Churchill, 1961). Como las celdas unitarias utilizadas en este estudio no consideran el contacto partícula-partícula, no se logra obtener la tendencia

observada cuando los valores de  $\kappa > 1,000$ . El factor de contacto juega un papel importante en la determinación de la conductividad efectiva para valores grandes de  $\kappa$ . En las celdas unitarias empleadas se desprecian los detalles del área de contacto para evitar asignar un parámetro específico de contacto relacionado con el tamaño de las partículas. Este parámetro teórico es sensible a los detalles de los métodos numéricos usados en estudios teóricos y frecuentemente es determinado por un estudio detallado de las características mecánicas de las partículas sólidas. La ausencia de un parámetro de contacto, con el que se considera la fase  $\sigma$  como continua, permitió enfocar el estudio hacia los efectos de la complejidad geométrica de la celda unitaria sobre el coeficiente de conductividad térmica efectiva.

A pesar del buen ajuste que existe de las predicciones del coeficiente de conductividad efectiva para valores de  $\kappa < 200$ , se deben tomar en cuenta importantes diferencias en las características de los sistemas usados en los cálculos numéricos y experimentales. (i) Las celdas unitarias empleadas en este estudio están limitadas a celdas bidimensionales, lo que difiere del carácter tridimensional de los sistemas experimentales. (ii) La naturaleza aleatoria de las partículas en los sistemas experimentales no es consistente con las características periódicas de las celdas unitarias. El uso de celdas unitarias en 3D, con diferentes arreglos desordenados de partículas, puede resultar en la predicción de coeficientes de conductividad efectiva que se ajusten mejor a la tendencia mostrada por los resultados experimentales, y más si se considera el incluir detalles de la naturaleza mecánica del contacto partícula-partícula, como lo han demostrado algunos estudios (Bounanno *y col.*, 2003). Esto sin embargo no demerita los resultados para el coeficiente de conductividad efectiva que se predicen en este estudio, ya que se exploró el uso de celdas unitarias con estructuras geométricas más complejas, simulando la aleatoriedad de las partículas sólidas en un lecho empacado, así como estructuras con una complejidad geométrica que podrían encontrarse en varios sistemas naturales.

## 5.2. Coeficiente de dispersión total

En el capítulo anterior se observó que el coeficiente de dispersión total es afectado en buena medida por la geometría y el arreglo las partículas contenidas dentro de la celda unitaria. El uso de celdas unitarias con arreglos de partículas cuya complejidad geométrica se acerque a la microestructura de un medio poroso real, en una representación razonable, permite la predicción de un coeficiente de dispersión efectivo donde se puede capturar, de mejor manera, la esencia de la distribución de las fases de un sistema heterogéneo.

En estudios previos, se ha señalado que el uso de representaciones de medios porosos espacialmente periódicos basados en arreglos ordenados de partículas, como los usados en el capítulo anterior para la predicción de coeficientes de dispersión, han resultado en valores que corresponden pobremente con los datos experimentales reportados en la literatura, principalmente en la dirección transversal (Eidsath *y col.*, 1983; D. Edwards *y col.*, 1991; Salles *y col.*, 1993). Otras investigaciones han adoptado el uso de otros modelos de medios porosos desordenados basados en arreglos aleatorios de partículas, y han demostrado la importancia de la complejidad introducida en las celdas unitarias en el cálculo del coeficiente de dispersión efectivo longitudinal y transversal. En general, el uso celdas unitarias periódicas formadas por arreglos aleatorios de partículas resultan ser buenas aproximaciones en la descripción del proceso de dispersión en un medio poroso homogéneo (Amaral-Souto y Moyne, 1997a; Didierjean *y col.*, 1997; Buyuktas y Wallender, 2004). En la literatura, se ha señalado que si la celda unitaria seleccionada es una región lo suficientemente representativa de la geometría local de un medio poroso homogéneo, las predicciones de tensor de dispersión tenderán a aproximarse al valor real, sin tener en cuenta la localización de la celda unitaria dentro del medio (Saez y Perfetti, 1991).

Con base en lo mencionado en el párrafo anterior en esta sección se predicen los componentes longitudinal y transversal del tensor de dispersión total para las celdas unitarias de la Figura 5.1, las cuales son representaciones razonables de diferentes medios porosos, como lechos empacados u otros medios granulares. También se calcula el tensor de dispersión para la celda unitaria periódica de la Figura 5.6 (b), cuyas partículas describen de forma más detallada la orientación y geometría de medios poroso reales, que pueden ser encontrados en varios sistemas naturales. Para una celda unitaria con una geometría equivalente a la microestructura de un medio poroso real, mostrada en la Figura 5.6(c), se calcula también el tensor de dispersión total para efectos de comparación. El uso de este tipo de celdas de

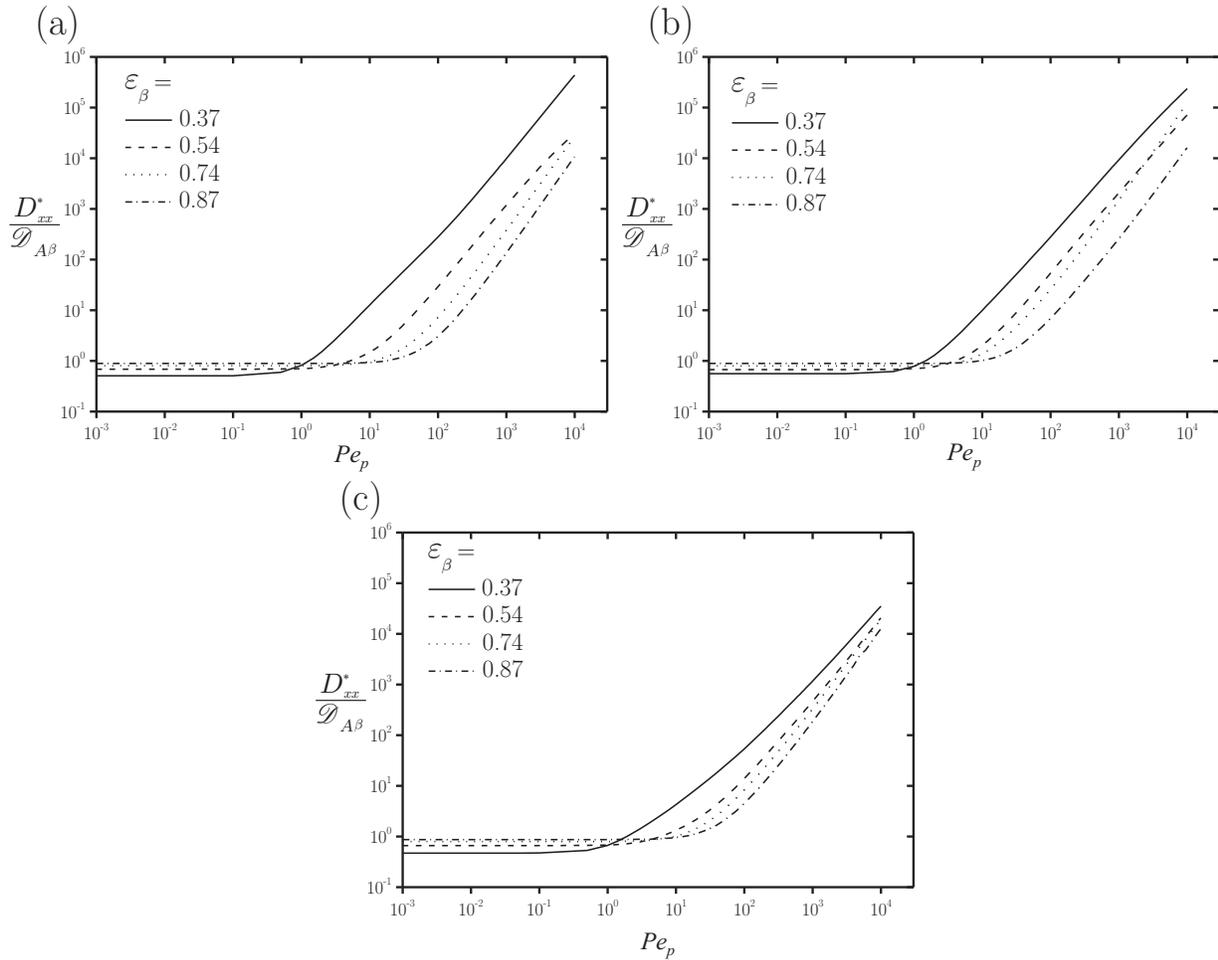
complejidad geométrica, permite analizar los valores del coeficiente de dispersión predichos para regiones representativas que capturen mejor la esencia geométrica de la microestructura de un medio poroso.

Para el cálculo del tensor de dispersión total se hace uso de la herramienta COMSOL Multiphysics para la solución del problema de cerradura (Sis. de Ec. 3.23) y del campo de velocidad (Sis. de Ec. 3.25). Con ayuda de la plataforma MATLAB, se realiza la predicción del tensor de dispersión para varios valores del  $Pe_p$  y porosidades (apéndices B.1 y B.2). Estas herramientas computacionales permiten abordar la solución del problema de cerradura para las celdas unitarias mas complejas geoméricamente propuestas en este trabajo. Un proceso de refinamiento de la malla se realiza en el calculo de los coeficientes de dispersión con el fin de garantizar la independendencia con el esquema de discretización utilizado.

### 5.2.1. Resultados para arreglos desordenados de partículas

Los resultados del coeficiente de dispersión longitudinal adimensional ( $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ ) y transversal ( $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ ) contra el número de Péclet de partícula ( $Pe_p$ ) para las celdas unitarias de la Figura 4.1 y varios valores de porosidad ( $\varepsilon_\beta$ ) se muestran las Figuras 5.10 y 5.11, respectivamente. Las tendencias para ambos componentes del coeficiente de dispersión son idénticas a las mostradas en los resultados para las celdas unitarias de geometría simple del capítulo anterior. Para números de Péclet pequeños ( $Pe_p < 1$ ), ambos, el coeficiente longitudinal y transversal son poco afectados por el valor del número de Péclet, para estas condiciones los valores de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  muestra valores similares a  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ . Disminuyendo su valor cuando la porosidad decrece, como se espera para esta zona de la curva, donde la difusión molecular controla completamente la dispersión. Cuando la porosidad se incrementa  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  y  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  se aproximan a un valor de uno.

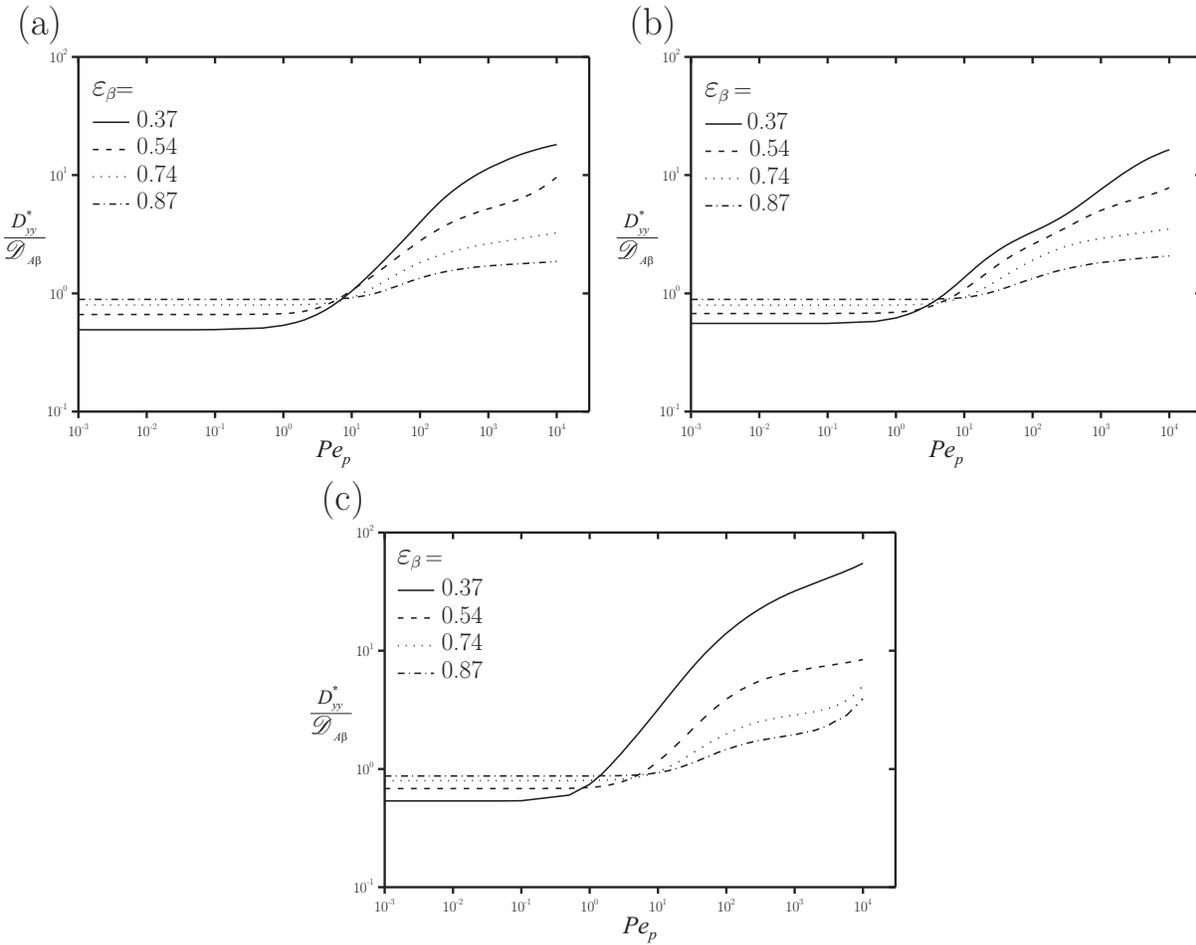
Una zona de transición, donde se observa que la contribución del mecanismo de difusión es menor y de la dispersión hidrodinámica es mayor, se muestra en los perfiles  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  y  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  contra  $Pe_p$  de las figuras 5.10 y 5.11, para números de  $Pe_p$  moderados ( $0.01 \lesssim Pe_p \lesssim 100$ ), el rango de  $Pe_p$  donde esta zona de transición se localiza exactamente depende, de la estructura de la celda unitaria y el valor de la porosidad. En esta zona de transición el  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  y  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  describen una tendencia opuesta; los valores de los coeficientes de dispersión se incrementa cuando la porosidad decrece. Un comportamiento asintótico para  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  se observa en los resultados de Figura 5.10 para todas las configuraciones, este



**Figura 5.10.** Resultados de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  para las celdas unitarias: (a) configuración 1, (b) configuración 2 y (c) configuración 3, para varias porosidades.

comportamiento se puede describir mediante una función potencial con el número de Péclet. Para esta zona de la curva, la dispersión está dominada por el mecanismo de dispersión hidrodinámica y la difusión transversal.

La Figura 5.11 muestra que  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  comienza a exhibir un comportamiento potencial para números de  $Pe_p$  dentro de la zona transición, cuando el número de  $Pe_p$  se incrementa,  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  adquiere una tendencia hacia un valor máximo. Un resultado similar para  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  fue observada por Amaral-Souto y Moyne (1997a), en medios porosos desordenados. El comportamiento potencial observado se atribuye principalmente a un incremento de los gradientes de velocidad que se desvían lateralmente (dirección transversal) de la dirección principal del flujo, provocando un aumento en la convección lateral. Sin embargo, la



**Figura 5.11.** Resultados de  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  para las celdas unitarias: (a) configuración 1, (b) configuración 2 y (c) configuración 3, para varias porosidades.

convección lateral esta limitada por la geometría de la celda unitaria y el campo de flujo resultante. En los perfiles de velocidad mostrados en la Figura 5.12, se observan regiones donde la velocidad en la dirección transversal es cero. De esa manera, la convección en la celda unitaria continua incrementándose con un menor aumento en la dispersión transversal. La desviación del comportamiento potencial es probable que se deba a la estructura del medio poroso periódico. Generalmente estas desviaciones no son observadas en los resultados experimentales obtenidos para lechos empacados reportados en Whitaker (1999, C 3). Los perfiles mostrados en las figuras 5.10 y 5.11 muestran la tendencia del coeficiente de dispersión longitudinal y transversal para un amplio rango de  $1 \times 10^{-3} \leq P_{e_p} \leq \times 10^4$ , sin embargo el rango de validez del modelo establecido en la Sección 3.2 es cuestionable para  $P_{e_p} > 1 \times 10^3$

con base en la suposición de flujo reptante establecida ( $Re_p \ll 1$ ); la relación entre ambos números esta dada por el número de Schmidt ( $Pe_p = ScRe_p$ ) y para un número  $Sc = 1,000$ , se puede inferir, para que números de  $Pe_p$  la suposición de flujo reptante es aun valida. La validez del modelo se ampliará posteriormente, cuando se comparen los coeficientes de dispersión predichos con los datos experimentales reportados en la literatura y se observen discrepancias entre ambos.

Las diferentes configuraciones de la Figura 5.1 son usadas para evaluar el efecto de las tres distintas estructuras periódicas sobre el coeficiente de dispersión total. Las diferencias geométricas de estas celdas unitarias son básicamente el número, el tamaño y la posición de las partículas cilíndricas. La influencia del efecto de la estructura se analiza al comparar los resultados del coeficiente de dispersión longitudinal y transversal para un valor de porosidad,  $\varepsilon_\beta = 0.37$ , ilustrada en la Figura 5.13. La Figura 5.13 (a) muestra que la geometría de la celda unitaria comienza a influenciar sobre el coeficiente de dispersión longitudinal para  $Pe_p > 0.1$ , principalmente se observan diferencias en los valores del coeficiente de dispersión longitudinal entre la Configuración 3, con las configuraciones 1 y 2. Para las configuraciones 1 y 2, sin embargo, no se observan una clara diferencia entre los valores de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ . Para estas celdas el incremento en el número de partículas, el tamaño y las diferentes posiciones no afectan el valor del coeficiente de dispersión. Resultados similares fueron obtenidos por Buyuktas y Wallender (2004) para varias celdas unitarias de medios porosos desordenados con diferente número de partículas. Los resultados mostrados en las figuras 5.12 (a) y (b), se puede deber a que las trayectorias del flujo de las configuraciones 1 y 2 son similares, esto se observa al comparar el perfil de velocidad de la Figura 5.12 (a) de la Configuración 1, con su respectivo para la Configuración 2, de la Figura 5.12 (b). Para la Configuración 3, en cambio, se observa que los valores de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  son mucho menores a los predichos por las configuraciones 1 y 2, en este caso un incremento del número de partículas de diferentes tamaños tiende a reducir los valores de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ , esto es, porque el uso de una celda unitaria relativamente más compleja como la Configuración 3, muestra un patrón de flujo mucho mas complicada [ver Figura 5.12 (c)], lo que conduce a un menor transporte convectivo en la dirección longitudinal y la trayectoria principal del flujo se ve alterada en la dirección transversal mucho más que en los casos de las configuraciones 1 y 2.

Los resultados para el coeficiente de dispersión transversal de la Figura 5.13 (b) muestran que un incremento del número de partículas de diferentes tamaños dentro de la celda unitaria, resulta en un aumento del valor de  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ . La Figura 5.13 (b) muestra que la Configuración

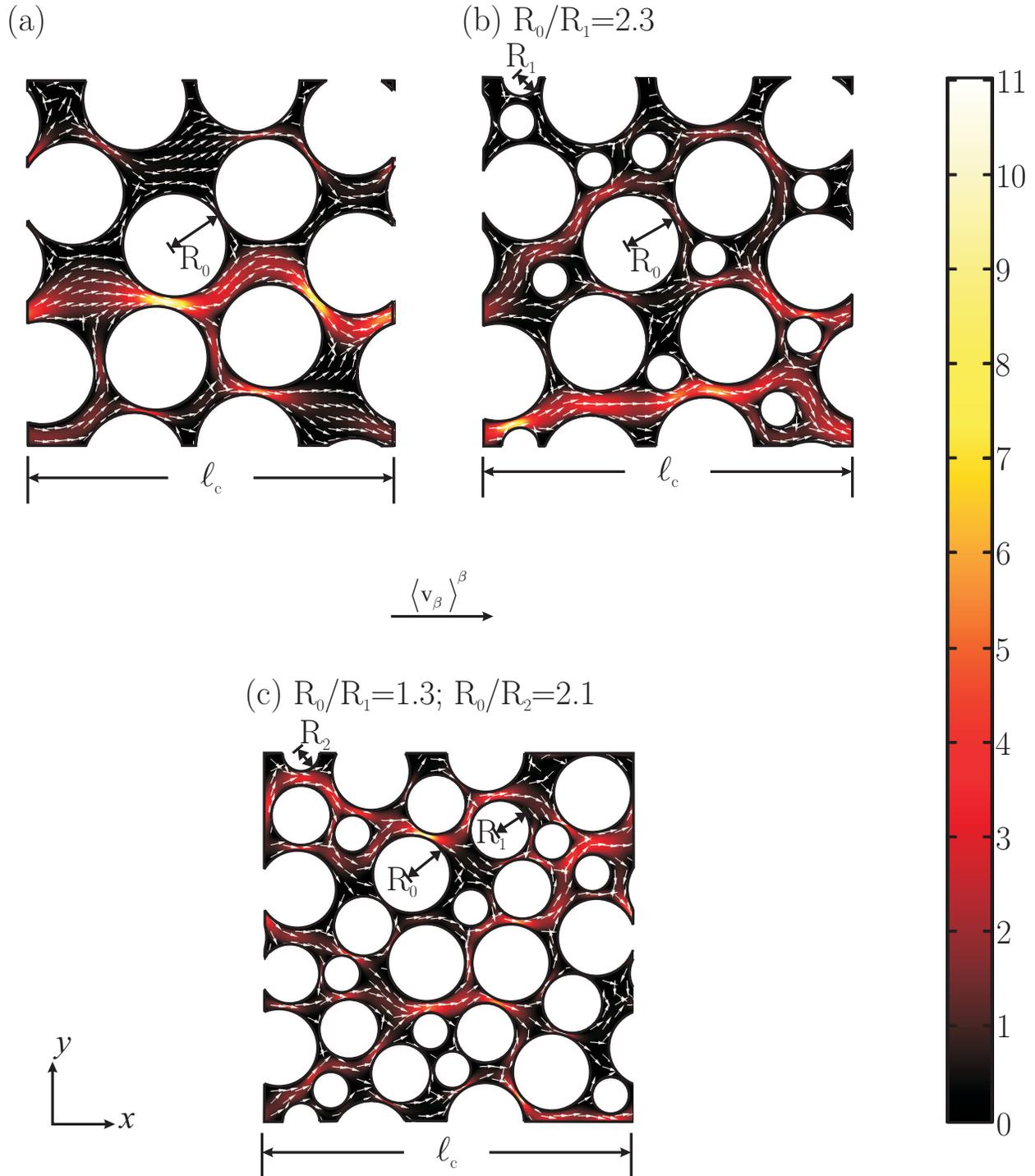
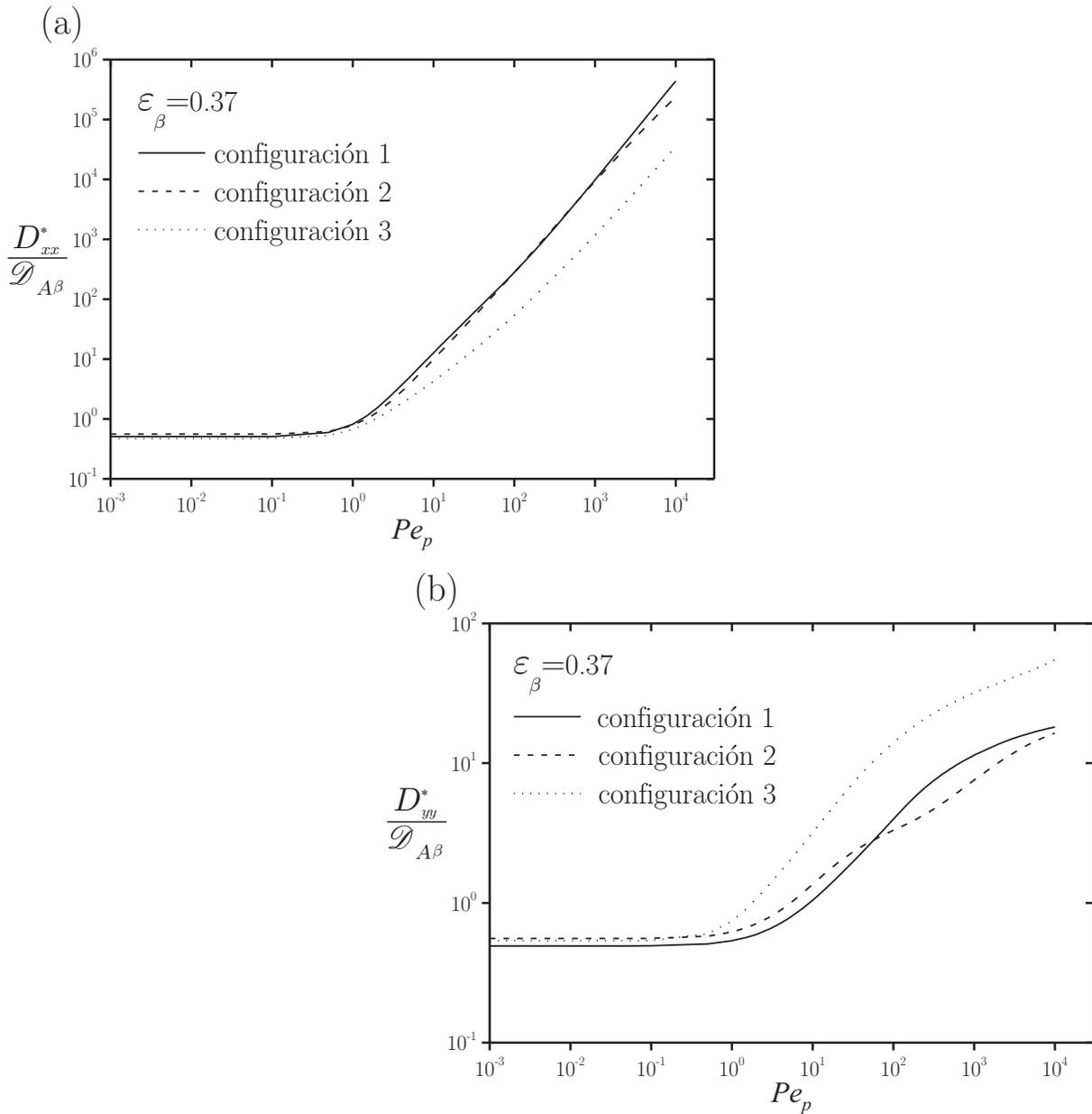


Figura 5.12. Perfil de velocidad ( $Pe_p \approx 10$ ) para las configuraciones 1,2 y 3, con  $\varepsilon_\beta = 0.37$ .



**Figura 5.13.** Comparación de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  y  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  entre las configuraciones 1,2 y 3.

3 adquiere los mayores valores de  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ . Esto es porque para esta celda unitaria, que se puede considerar que tiene una estructura relativamente más compleja respecto a las configuraciones 1 y 2, la dirección de flujo en la dirección transversal es mucho mayor. Debido a esto, se incrementan los gradientes de velocidad y se reduce el transporte por difusión provocando que el coeficiente de dispersión transversal sea mayor. Esta observación

concuera con los resultados presentados por Amaral-Souto y Moyne (1997b). Para  $Pe_p > 50$ , se observa en la Figura 5.13 que los valores de  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  son menores para la Configuración 2, comparados con los valores de la Configuración 1. La causa de este comportamiento se atribuye a una reducción de las zonas de estancamiento localizadas entre las partículas cilíndricas de radio  $R_0$ , debido la presencia de las partículas de radio  $R_1$  en la Configuración 2. Como resultado las contribuciones por difusión molecular en la dirección transversal y la dispersión hidrodinámica decrecen, provocando una disminución a los valores de  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ .

En los estudios que involucran el uso métodos numéricos y aun aquellas para las cuales se emplean herramientas computacionales como COMSOL Multiphysics, es necesario hacer énfasis en los recursos computacionales necesarios para llevar a cabo la predicción del valor del coeficiente de dispersión y la factibilidad de su uso, en razón de ser comparables con los datos experimentales. Pruebas numéricas del cálculo del coeficiente de dispersión efectiva longitudinal para las celdas unitarias usadas en este capítulo se muestran en la Tabla 5.4. En esta tabla se muestra el número de elementos en la malla, considerando independencia del esquema de discretización, junto con el tiempo de cómputo ( $t_m$ ) en segundos. Para las diferentes configuraciones se establece un criterio de independencia numérica con un error relativo del 5% respecto al valor del coeficiente de dispersión calculado con el esquema de discretización anterior.

Durante la predicción de un parámetro efectivo, que en este caso corresponde al coeficiente de dispersión, es necesario tomar en cuenta los recursos necesarios en su cálculo, con el fin de establecer ciertos criterios que permitan hacer más funcional el contar con un coeficiente efectivo que permita modelar el sistema en cuestión. Un menor número de elementos finitos

**Tabla 5.4.** Pruebas numéricas del cálculo de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  para  $Pe_p = 100$  y las configuraciones 1, 2 y 3.

$\varepsilon_\beta$	Configuración 1		Configuración 2		Configuración 3	
	Elementos	$t_m$ (s)	Elementos	$t_m$ (s)	Elementos	$t_m$ (s)
0.34	34 2836	32.1	28 967	27.4	32 107	30.1
0.54	27 0806	25.6	24 519	25.3	27 386	24.1
0.74	24 519	22.5	23 914	20.9	33 242	31.1
0.87	13 269	9.8	44 902	45.3	21 556	22.1

es igual a un menor tiempo de cómputo; para las configuraciones 1,2 y 3 un número similar de elementos es requerido en el cálculo del coeficiente de dispersión, y los tiempos de cálculo. Como el número de elementos y tiempo de cómputo es similar para estas configuraciones, la selección de un medio poroso periódico que se adopte como celda unitaria representativa será aquella que reproduzca consistentemente los datos experimentales reportados en la literatura.

### Efecto del número de Péclet

La tendencia asintótica observada para valores grandes del número de  $Pe_p$  ( $Pe_p \gtrsim 100$ ) en los resultados de dispersión para las diferentes configuraciones, la cual ya se ha mencionado anteriormente, para los resultados de las celdas unitarias simples, se describe de la forma

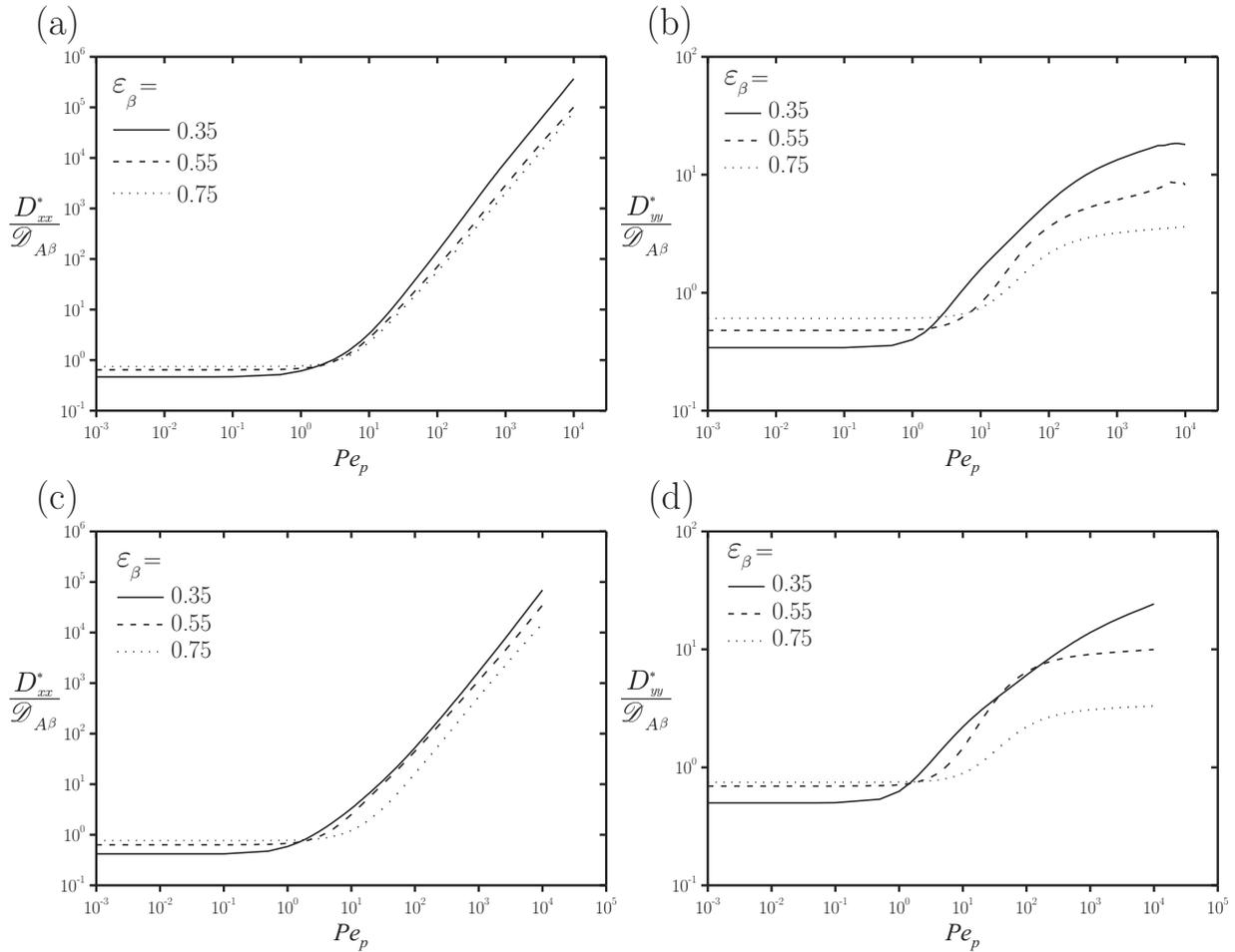
$$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = \alpha Pe_p^\delta, \quad (5.1)$$

esta correlación es usada ampliamente como representación empírica útil de la funcionalidad del tensor de dispersión longitudinal con el número  $Pe_p$ . Los parámetros  $\alpha$  y  $\delta$  para las tendencias presentados para  $Pe_p \gtrsim 100$  de la Figura 5.10 se presentan en la Tabla 5.5, estos valores van de 0.0003 a 0.3 y de 1.42 a 1.87, respectivamente. Un valor de  $\delta = 1.6$  fue obtenido por Amaral-Souto y Moyne (1997b) para medios porosos desordenados con una porosidad igual 0.64 y un valor de 1.38 fue dado por Didierjean *y col.* (1997). Los valores obtenidos en este trabajo se acercan más al valor  $\delta$  determinado por Amaral-Souto y Moyne para porosidades semejantes y estructuras de celdas unitarias similares.

El parámetro  $\alpha$  influye sobre la posición vertical de la curva del coeficiente de dispersión

**Tabla 5.5.** Coeficientes  $\alpha$  y  $\delta$  de la correlación potencial del coeficiente de dispersión para las configuraciones 1, 2 y 3, y varias porosidades.

$\varepsilon_\beta$	Configuración 1		Configuración 2		Configuración 3	
	$\alpha$	$\delta$	$\alpha$	$\delta$	$\alpha$	$\delta$
0.37	0.174	1.570	0.3081	1.488	0.0653	1.425
0.54	0.0166	1.664	0.0458	1.551	0.0076	1.602
0.74	0.0014	1.811	0.0041	1.706	0.0025	1.715
0.87	0.0003	1.8723	0.0018	1.732	0.0007	1.811



**Figura 5.14.** Resultados del coeficiente de dispersión: (a)  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  y (b)  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  para la celda unitaria realista, (c)  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  y (d)  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  para la celda aproximada.

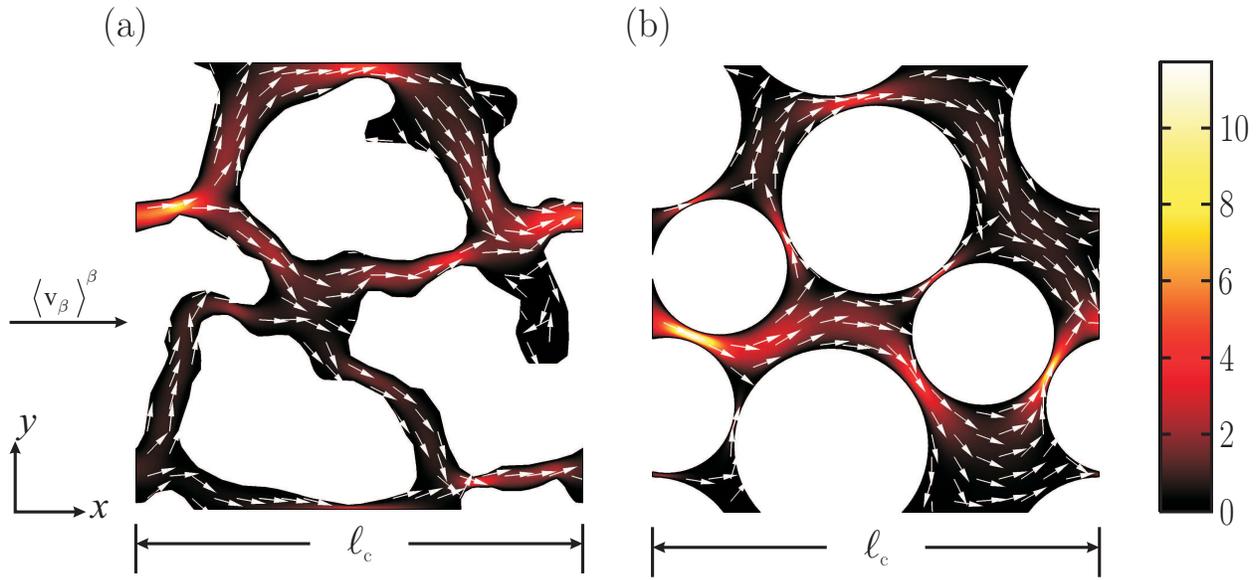
longitudinal contra el número del Péclet; para las distintas porosidades el mayor valor de  $\alpha$  es adquirido por la Configuración 2, de la Tabla 5.5. Esto sugiere que el valor de  $\alpha$  es sensible a la geometría de la celda unitaria y del patrón de flujo del soluto  $A$  dentro de esta. Los múltiples valores del exponente  $\delta$  mostrados en la Tabla 5.5, para las distintas configuraciones, se ven también influenciadas por la microestructura del medio poroso. Lo anterior debido a la interacción entre los mecanismos de transporte difusionales y convectivos (Wood, 2007).

### 5.2.2. Resultados para representaciones de medios porosos

Con el fin extender la predicción del coeficiente de dispersión total a celdas unitarias que capturan las características geométricas de la microestructura de medios porosos de sistemas reales, se determina el coeficiente de dispersión total usando una celda unitaria periódica extraída de una micrografía y mostrada en la Figura 5.6 (b). La orientación y la forma de cada partícula sólida dentro de la celda unitaria periódica detallan las características geométricas de un medio poroso mostrado en la Figura 5.6 (a). El coeficiente de dispersión total se predice también para una celda unitaria de estructura equivalente, pero basada en partículas cilíndricas con tamaños y posiciones que describen, aproximadamente, la celda unitaria Realista mostrada en la Figura 5.6 (c). Los efectos de la microestructura realista y aproximada sobre el coeficiente de dispersión total son observados al comparar los resultados.

Los resultados para el coeficiente de dispersión longitudinal y transversal para varios valores de porosidad se muestran en la Figura 5.14. Los resultados reflejan las mismas tendencias características observadas en los perfiles  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  y  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  contra  $Pe_p$  analizados previamente. La Figura 5.15 muestra los perfiles de velocidad en las celdas unitarias de configuración realista y aproximada y en la Figura 5.16 se comparan los coeficientes de dispersión predichos para una porosidad  $\varepsilon_\beta = 0.35$ . En la Figura 5.16 (a) se observa que para  $Pe_p < 1$  no existe una gran diferencia entre los valores del coeficiente de dispersión calculados con la celda unitaria Realista y la Aproximada, a medida que el  $Pe_p$  se incrementa por arriba de diez (donde se observa el comportamiento asintótico), la influencia de la geometría sobre  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  comienza a ser evidente, y el valor de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  para celda Realista comienza a incrementarse por arriba de los coeficientes de dispersión longitudinal que se predicen con la celda unitaria Aproximada. Para el coeficiente de dispersión transversal una tendencia opuesta es observada en la Figura 5.16 (b); los valores de  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  para la celda Aproximada son mayores que los correspondientes a la celda Realista, sólo hasta  $Pe_p < 100$ , para  $Pe_p \approx 100$  los coeficientes de dispersión transversal se igualan y continúan con valores próximos hasta un valor de  $Pe_p = 1,000$ . Se ha mencionado anteriormente que para  $Pe_p > 1,000$  la validez del modelo resulta cuestionable por la suposición del flujo reptante establecida, debido a esto el significado físico de los valores de  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  no está claro en términos de las contribuciones del coeficiente de dispersión mencionados anteriormente.

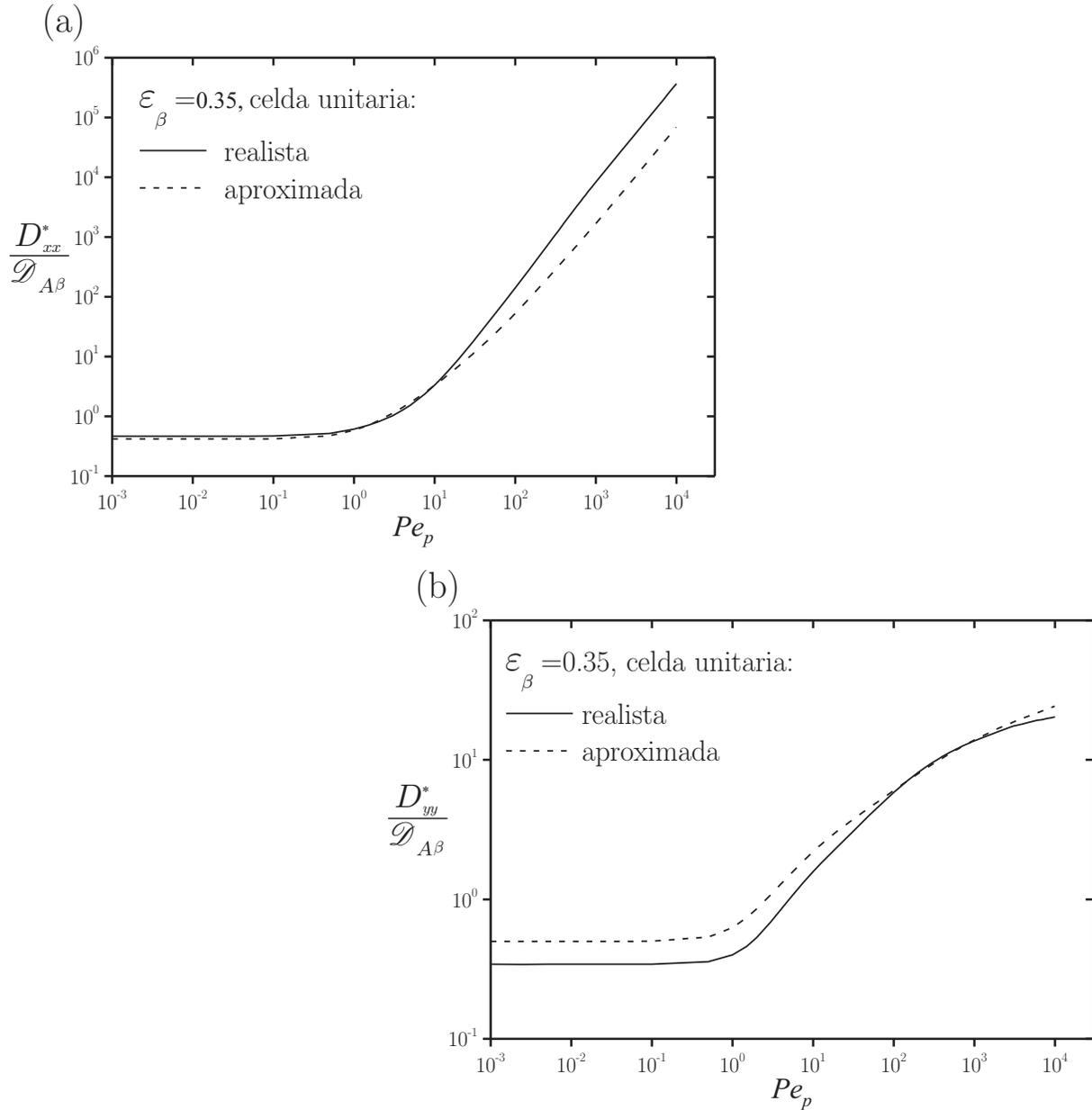
Para los perfiles (a) y (c) de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  contra  $Pe_p$  de la Figura 5.14 se puede hacer un análisis cuantitativo examinando los valores de los parámetros  $\delta$  y  $\alpha$ , calculados usando



**Figura 5.15.** Campo de velocidad ( $Pe_p \approx 10$ ) las celdas unitarias realista y aproximada, con  $\varepsilon_\beta = 0.35$ .

la relación de la ecuación (5.1), y cuyos valores están mostrados en la Tabla 5.6. Las diferencias entre los valores del coeficiente  $\delta$  para estas dos configuraciones permite observar la influencia de la geometría y su importancia sobre la predicción del coeficiente de dispersión longitudinal. Los valores  $\delta$  para la celda unitaria Realista son mayores que los obtenidos para la celda Aproximada, aunque no se puede relacionar directamente este coeficiente con las complejidades estructurales con las representaciones de los medios porosos, estas diferencias son indicativos del coeficiente de dispersión calculado en una celda unitaria particular y la importancia sobre predecir este coeficiente en modelos que se asemejan al sistema que se desea modelar. Ciertamente geometrías aproximadas, que en esencia, no logran capturar apropiadamente la complejidad del medio poroso pueden llevar al cálculo coeficientes de dispersión total cuyo valor difiera de aquellas donde se incluya una aproximación geométrica mas detallada de la distribución de las fases, provocando cierta incertidumbre en los modelos que se puedan plantear a partir de estos coeficientes efectivos.

Cabe señalar que la predicción de este tipo de coeficientes, en sistemas en los que se debe involucrar detalles de la microestructura de un medio poroso, se pueden llevar a cabo por la utilización del software de elemento finito COMSOL Multiphysics, el cual permite explorar este tipo de geometrías complejas, y que de otra manera, resultaría en un examen numérico más exhaustivo. Limitaciones de carácter computacional han restringido el uso



**Figura 5.16.** Comparación de (a)  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  y (b)  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  entre la celda unitaria realista y la celda aproximada, con  $\epsilon_\beta = 0.35$ .

de celdas unitarias con estructuras que se aproximan a un medio poroso real, asumiendo un representación razonable para la predicción de coeficientes efectivos. En ocasiones se prefiere el resultado usando celdas unitarias con características geométricas aproximadas en lugar de incluir detalles de la microestructura, debido a la utilización de menos recursos

computacionales y un menor tiempo de computo,  $t_m$ . Con el fin de analizar este punto, se realizan pruebas numéricas del cálculo del coeficiente de dispersión total correspondiente a la celdas unitarias Realista y Aproximada. En la Tabla 5.7 se muestran el número de elementos en la malla, considerando independencia del esquema de discretización y el tiempo de cómputo necesario para el cálculo.

Como se espera, un mayor número de elementos son necesarios en el esquema de discretización para la configuración realista, lo que involucra, a su vez un mayor tiempo de computo (Tabla 5.7). En términos del tiempo de computo es preferible una solución obtenida mediante una estructura más simple, en este caso, formada a partir de partículas cilíndricas con una localización de las partículas que equivalen a la representación del medio poroso. Sin embargo las diferencias entre los valores predichos del coeficiente de dispersión entre ambas representaciones son un factor condicionante (valores de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  en la Tabla 5.7), ya que la representación real, en teoría, proporciona un valor más aproximado al “real”, por que se consideran mayores detalles de la microestructura.

**Tabla 5.6.** Coeficientes  $\alpha$  y  $\delta$  de la correlación potencial del coeficiente de dispersión para la celda Realista y Aproximada.

$\varepsilon_\beta$	celda Realista		celda Aproximada	
	$\alpha$	$\delta$	$\alpha$	$\delta$
0.35	0.0765	1.673	0.033	1.574
0.55	0.0545	1.571	0.0477	1.461
0.75	0.0351	1.587	0.02	1.473

**Tabla 5.7.** Pruebas numéricas del cálculo de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  para  $Pe_p = 100$  y las celdas Realista y Aproximada.

$\varepsilon_\beta$	celda Realista			celda Aproximada		
	Elementos	$t_m$	$D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$	Elementos	$t_m$	$D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$
0.35	28 916	23.1	52.830	17 810	14.5	42.223
0.55	23 494	18.3	44.452	1 848	16.3	25.099
0.75	41 114	36.8	16.156	2 048	17.1	20.410

Para los casos donde el parámetro efectivo que se predice es fuertemente influenciado por la geometría de la celda unitaria, como el caso del coeficiente de dispersión total, el uso de una celda unitaria que contenga los detalles de la microestructura en una representación razonable, evita la incertidumbre generada por coeficientes de dispersión calculados usando celdas unitarias con geometrías más simples. Cuando la geometría de la celda unitaria es lo suficientemente representativa del medio heterogéneo, las predicciones de los coeficientes de dispersión tienden aproximarse a los valores reales, por lo tanto celdas unitarias como la Figura 5.6 (b), pueden ser usadas adecuadamente en la simulación del proceso dispersión para en sistemas de geometría semejante. Coeficientes de dispersión calculados usando celdas unitarias con geometrías iguales a las usadas por los sistemas experimentales puede ayudar al diseño y mejoramiento de este tipo de sistemas a partir de resultados comparativos entre datos experimentales y teóricos, como se puede leer en el trabajo reciente de Porter *y col.* (2010).

No obstante, hay que reconocer las limitaciones de los valores predichos para los coeficientes de dispersión realizados en esta sección, debido principalmente, a las características bidimensionales de las celdas unitarias. La solución del problema de cerradura en celdas unitarias en tres dimensiones, que incluyan características estructurales de un medio poroso real proporcionarían, en teoría, una mayor información en lo que respecta a la geometría del medio y su influencia sobre el valor del coeficiente de dispersión.

### 5.2.3. Comparación con resultados experimentales

En esta sección los resultados numéricos para el coeficiente de dispersión longitudinal y transversal son comparados con los datos experimentales obtenidos en lechos empacados reportados en la literatura.

Varios investigadores han propuesto una clasificación de los regímenes de dispersión como función del número de Péclet de partícula. Estos regímenes son una modificación del análisis de propuesto originalmente por Pfannkuch (1963), en los cuales se distinguen convencionalmente cinco regímenes de dispersión, tres de estos regímenes ya han sido mencionados implícitamente cuando fueron analizados los resultados numéricos obtenidos del coeficiente de dispersión para las diferentes celdas unitarias. Los regímenes se describen a continuación:

1. Régimen de difusión molecular. La difusión molecular domina sobre la dispersión

hidrodinámica en la propagación del soluto  $A$  en el sistema de dos fases. El coeficiente de dispersión en este régimen se puede predecir por la teoría del promedio volumétrico de Whitaker (1999), lo que conduce a la expresión

$$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = \frac{2}{3 - \varepsilon_\beta} \quad (5.2)$$

denominada también coeficiente de difusión molecular efectiva,  $\mathcal{D}_{m,eff}/\mathcal{D}_{A\beta}$ . Cuando el agua es el fluido de interés este régimen comúnmente corresponde a  $Pe_p < 0.2$ .

2. Régimen de transición. La difusión molecular y la dispersión hidrodinámica son del mismo orden de magnitud, comenzando a imponerse el segundo mecanismo sobre el primero. Este régimen corresponde aproximadamente a  $0.2 < Pe_p < 5$ .
3. Régimen de mayor dispersión hidrodinámica. La dispersión es generada por una interacción entre los mecanismos de dispersión hidrodinámica y la difusión molecular. Una correlación potencial del coeficiente de dispersión describe este régimen

$$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = \frac{D_{m,eff}}{\mathcal{D}_{A\beta}} + \alpha Pe_p^\delta, \quad 1.1 < \delta < 1.9 \quad (5.3)$$

La dispersión es análoga a la dispersión de Taylor (1954, 1953). Las diferencias geométricas en la estructura del medio poroso provocan que el exponente sea diferente de  $\delta = 2$ . Este régimen corresponde aproximadamente a  $5 < Pe_p < 4 \times 10^3$ , aunque este límite difiere dependiendo de las variaciones en el patrón de flujo dentro del medio poroso a valores menores de  $Pe_p < 100 - 200$ .

4. Régimen de dispersión hidrodinámica. La contribución por difusión molecular en la dispersión es despreciable en este régimen. Se identifican cambios en el exponente  $\delta$ . La relación potencial para este régimen está caracterizada por

$$\frac{D_{xx}^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = \alpha_2 Pe_p^\delta, \quad \delta = 1. \quad (5.4)$$

Este régimen corresponde aproximadamente a  $4 \times 10^3 < Pe_p < 200 \times 10^3$ .

5. Régimen de dispersión hidrodinámica con flujo inercial. El patrón de flujo se considera inestable y posiblemente turbulento. Aunque los valores exactos para la transición a flujo inestable en medio poroso dependen de la geometría y las propiedades del fluido, una buena aproximación para que un flujo sea inestable es  $Re_p > 200$ . Este régimen

corresponde a valores grandes del número de Péclet de partícula, aproximadamente para  $Pe_p > 200 \times 10^3$ .

Los resultados numéricos del coeficiente de dispersión longitudinal para las diferentes configuraciones de las celdas unitarias de la Figura 5.1 de este trabajo, son comparados con los datos experimentales reportados en la literatura en la Figura 5.17. En esta figura se distinguen los regímenes señalados previamente. Los detalles acerca de los datos experimentales son dados por Delgado (2006), quien señala que los métodos experimentales involucran lechos fijos formados principalmente por esferas con porosidades en un rango aproximado entre 0.35 – 0.65 y valores de Reynolds de  $0.001 \lesssim Re_p \lesssim 2,000$ . Los resultados numéricos del coeficiente de dispersión longitudinal para las configuraciones 1 y 2, concuerdan bastante bien los datos experimentales para  $Pe_p < 1,000$ , mientras que sobre-estiman el valor de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  para  $Pe_p$  mayores a este valor, de acuerdo a lo que se puede observar en la Figura 5.17 (a). Los errores entre los coeficientes de dispersión predichos y los experimentales reportados en la literatura se encuentran en un intervalo de confianza entre 15 % a 30 % de error respecto a los valores experimentales de Rifai *y col.* (1956); Pfannkuch (1963); Ebach y White (1958). En la Figura 5.17 (a) se observa que los valores de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  para la Configuración 3, muestran un ajuste razonablemente bueno de los resultados con los datos experimentales en todo el intervalo del Péclet de partícula examinado, siendo sólo menores a los datos experimentales reportados en la literatura entre  $60 \lesssim Pe_p \lesssim 600$  donde se logra un intervalo de confianza con un error del 30 % con los datos de Rifai *y col.* (1956) y un ajuste con un error entre 20 % a 30 % con los datos experimentales de Pfannkuch (1963); Ebach y White (1958) para  $1,000 \leq Pe_p \leq 10,000$ . Ver Figura 5.17 (a). Para las celdas unitarias de la Figura 5.6 (configuraciones realista y aproximada) la Figura 5.18 (a) muestra que sus respectivas curvas  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  contra  $Pe_p$ , se acercan bien a los datos experimentales, sin embargo para  $Pe_p = 10,000$  los valores del coeficiente de dispersión longitudinal para la representación realista sobreestiman los valores experimentales. Para la celda Realista los coeficientes de dispersión longitudinal predichos en un intervalo  $10 \leq Pe_p \leq 100$  se aproximan a los valores experimentales reportados por M. Edwards y Richardson (1968) con errores comparativos de un 20 % aproximadamente; en el intervalo de  $100 \leq Pe_p \leq 1,000$  las predicciones se acercan a las reportadas por Pfannkuch (1963) con un 25 % del intervalo de tolerancia del error. Para los valores de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  calculados con la celda unitaria Aproximada la tendencia es la misma que los datos experimentales sin embargo solo concuerda con algunos datos experimentales para  $1,000 \leq Pe_p \leq 10,000$  con un intervalo de error aproximado de un 30 %. En el caso

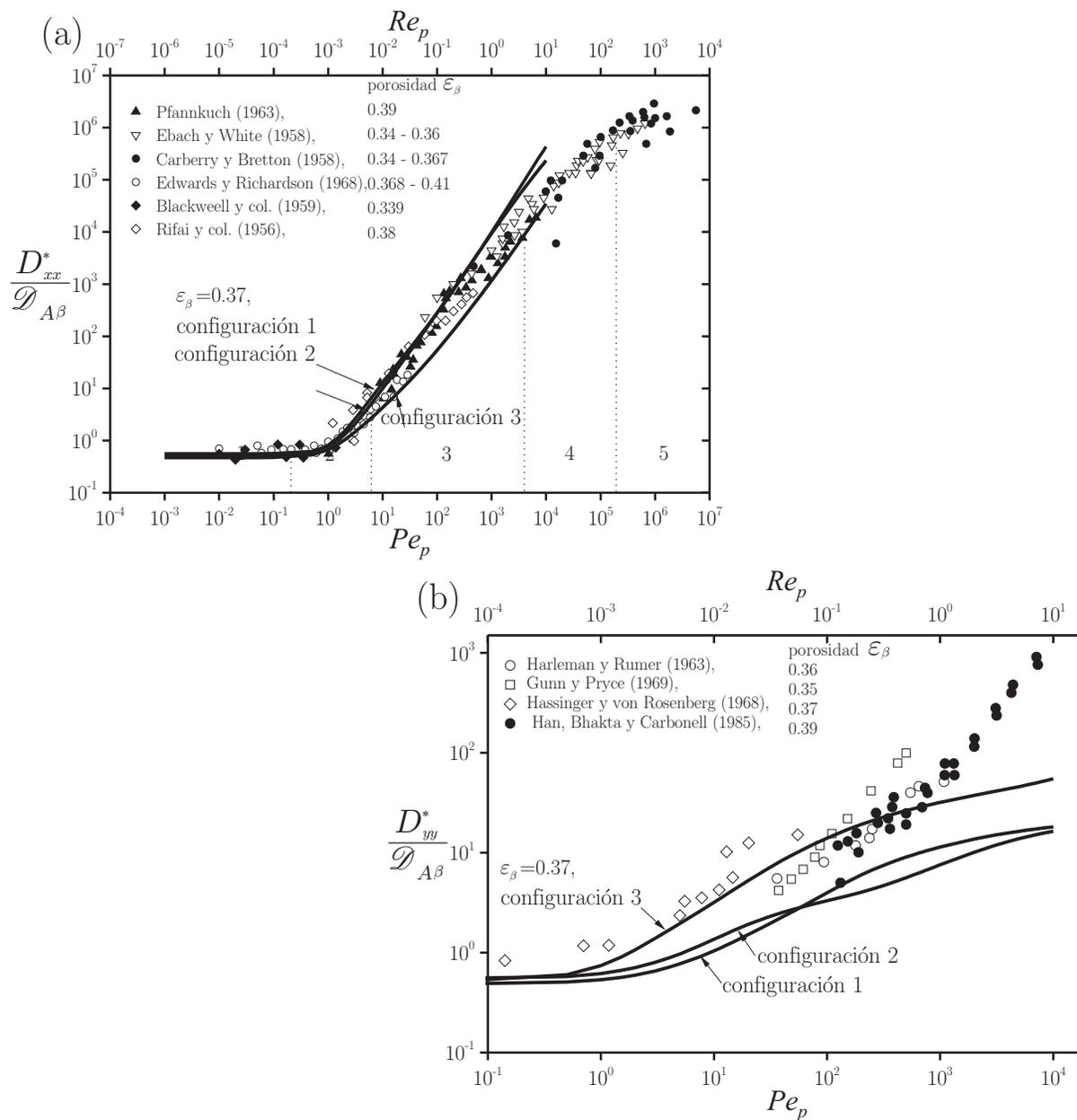
del coeficiente de dispersión transversal para las celdas complejas usadas, los resultados de  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  son comparados con los datos de experimentos en las figuras 5.17 (b) y 5.18 (b). Para las configuraciones 1 y 2 la comparación entre los resultados experimentales y numéricos para  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ , no es tan satisfactoria como los resultados para  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ . Lo mismo sucede para las curvas  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  de las celdas Realista y Aproximada, donde valores de  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  son menores a los reportados en la literatura. Los resultados de  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  para la Configuración 3, sin embargo, concuerdan muy bien con los datos experimentales para  $Pe_p < 1,000$  con intervalos de error menores a 20% respecto a los datos experimentales de Hassinger y Rosenberg (1968). Para números de  $Pe_p > 1,000$  las curvas  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  contra  $Pe_p$  de los resultados numéricos de las configuraciones 1,2 y 3 y de las celdas Realista y Aproximada no exhiben el comportamiento asintótico que los datos experimentales muestran. Noble (1997) [citado en Whitaker (1999)] obtuvo resultados similares en celdas unitarias con una distribución aleatoria de partículas cilíndricas, semejantes a la Configuración 1.

En particular, para números de Péclet grandes ( $Pe_p > 1,000$ ), no se debería considerar propiamente una comparación de los resultados numéricos obtenidos a lo largo de este trabajo. Lo anterior, como ya se ha mencionado, se debe al régimen de flujo que se debe cumplir para que el modelo propuesto y obtenido de la teoría del promedio volumétrico (Sección 3.2) sea válido. Esto se observó cuando se compararon las curvas  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  y  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  contra  $Pe_p$  con los datos experimentales reportados, la diferencias entre los valores del coeficiente de dispersión para  $Pe_p > 1,000$ , se debe fundamentalmente a que los datos experimentales son obtenidos bajo condiciones de flujo que la teoría no predice. Es sabido que el proceso de dispersión es función del patrón de flujo del fluido, por lo tanto se espera una conexión entre el número de Reynolds, el cual caracteriza el patrón de flujo, y el tensor de dispersión total, la relación entre el número de Péclet y número de Reynolds se da por medio del número de Schmidt [ $Sc = \mu_\beta/(\rho_\beta\mathcal{D}_{A\beta})$ ]:  $Pe_p = ScRe_p$ . Para un número de Schmidt igual a 1,000, valor correspondiente cuando el fluido es agua, el  $Re_p$  debe detener un valor de 10 cuando el  $Pe_p = 10,000$ . Para este valor del  $Pe_p$  la condición de flujo de Stokes ( $Re_p < 0.1$ [Bird, Stewart y Lightfoot, 2008, p. 59]), usada para predecir los coeficientes de dispersión en este estudio, ya no se cumple. Los valores para el coeficiente de dispersión, inclusive, están por arriba de esta condición para  $Pe_p = 1,000$  [ver figuras 5.17 (a) y 5.18 (a) en la escala superior dada en el número  $Re_p$ ].

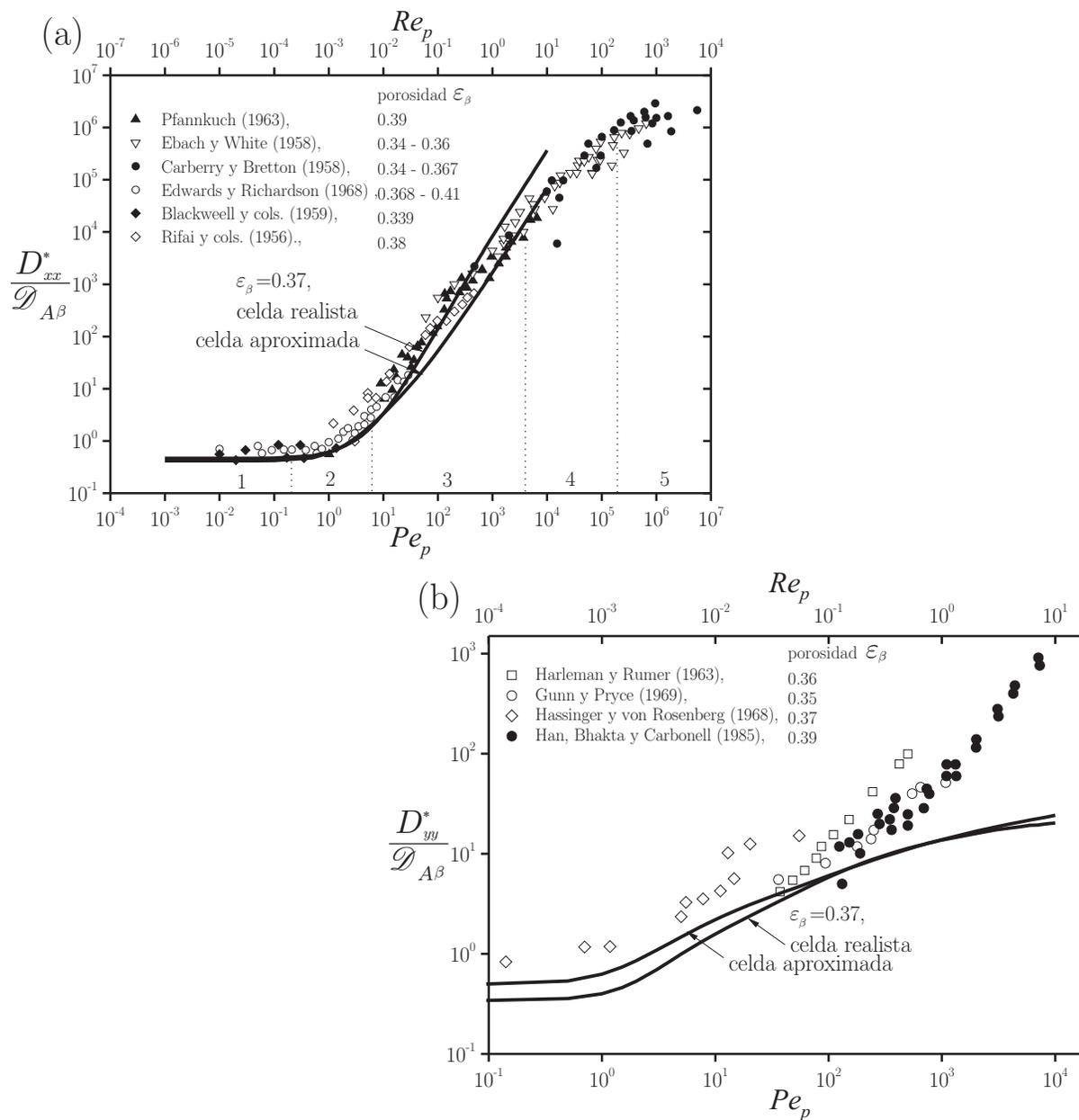
En los datos experimentales del coeficiente de dispersión longitudinal de las Figuras 5.17 (a) y 5.18 (a), se observa un punto de inflexión para  $Pe_p \approx 200$  y una disminución en los

valores de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  para  $Pe_p$  muy grandes. Este tipo de comportamiento no se puede predecir en el modelo de dispersión empleado debido a: (i) La condición de flujo no se cumple, lo que ya se mencionó en el párrafo anterior y (ii) la condición de estado cuasi-estacionario que se asumió en la definición del problema de cerradura para la dispersión ( $\mathcal{D}_{A\beta}t^*/\ell_\beta^2$ ) deja de ser plausible y el tensor de dispersión total se vuelve dependiente del tiempo característico del proceso de dispersión. Han *y col.* (1985), determinaron la restricción asociada con la condición de estado cuasi-estacionario. Los datos reportados por Ebach y White (1958) y Carberry y Breton (1958) no satisfacen la restricción dada por Han *y col.* (1985) y por lo tanto no es conveniente comparar sus resultados con los coeficientes de dispersión longitudinal calculados en este trabajo para números de Péclet grandes.

Para los coeficientes de dispersión predichos numéricamente usando herramientas de cómputo avanzadas en este trabajo, la microestructura del medio poroso periódico resulta importante para los valores de  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  y  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ . Los resultados del coeficiente de dispersión para la Configuración 3 son los que se aproximan más con los datos experimentales. Para las celdas unitarias restantes (configuraciones 1 y 2), sin embargo, los valores coeficiente de dispersión predichos tienen valores limitados comparados con los datos experimentales, principalmente para  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ . Existen características en las predicciones del coeficiente de dispersión que difieren de los datos obtenidos experimentales que se deben considerar cuando se realiza la comparación entre ambos. Está primeramente el hecho de que los cálculos teóricos se obtuvieron en celdas unitarias de medios porosos periódicos en dos dimensiones, mientras que los datos experimentales fueron obtenidos en sistemas tridimensionales. Celdas unitarias tridimensionales, con estructuras similares a las configuraciones presentadas en este estudio, en teoría, se aproximarían a los perfiles mostrados por los datos experimentales. Como se ha mencionado de forma frecuente, la microestructura afecta el coeficiente de dispersión, y algunas configuraciones influyen el coeficiente de dispersión longitudinal y trasversal, tal que, los resultados concuerdan bien con los datos experimentales, por lo tanto, puede ser posible escoger una representación razonable para la microestructura de un medio poroso que permite obtener valores para el coeficiente de dispersión longitudinal y trasversal que se adapten mejor a los datos experimentales.



**Figura 5.17.** Comparación de resultados para las configuraciones 1,2 y 3 con datos experimentales: (a)  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  y (b)  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ . Datos experimentales adaptados de Whitaker (1999).



**Figura 5.18.** Comparación de resultados para las celda realista y aproximada de un medio poroso real con datos experimentales: (a)  $D_{xx}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$  y (b)  $D_{yy}^*/\mathcal{D}_{A\beta}$ . Datos experimentales adaptados de Whitaker (1999).



## CONCLUSIONES

Antes de concluir este trabajo se permite una breve revisión de lo que se hizo alrededor de esta tesis. En este trabajo se predijeron numéricamente los coeficientes efectivos de conductividad térmica y el tensor de dispersión total usando el método del promedio volumétrico. Se exploró el uso del software COMSOL Multiphysics en el cálculo de coeficientes efectivos para varias representaciones de medios porosos espacialmente periódicos de una complejidad variada. El efecto de la geometría de la celda unitaria sobre el coeficiente de conductividad efectiva y dispersión total se analizó para varias configuraciones de arreglos de partículas cilíndricas. Estos coeficientes se predijeron también para una celda unitaria que incluía detalles de la microestructura de un medio poroso real. Los resultados predichos para los coeficientes efectivos de conductividad efectiva y de dispersión fueron comparados satisfactoriamente con los datos experimentales reportados en la literatura.

El uso del software COMSOL Multiphysics hizo posible la predicción de los coeficientes de conductividad efectiva para celdas unitarias periódicas con una mayor complejidad geométrica a las celdas usualmente usada para este tipo de cálculos. El uso de herramientas computacionales avanzadas, que en este caso emplean el método del elemento finito, permitieron la solución del problema de cerradura de forma que se pueden abordar geometrías con un grado mayor de complejidad con las que frecuentemente ha sido resuelto; de tal forma, que los coeficientes que son calculados puedan ser adaptados de problemas de sistemas reales, en representaciones razonables, e incorporados al modelamiento de procesos. El tiempo de cómputo para los coeficientes efectivos depende de la complejidad geométrica de la celda unitaria, de acuerdo al número de elementos en el esquema de discretización. En celdas muy complejas geoméricamente, se invierte una cantidad de tiempo que resulta considerable

para ciertas configuraciones y resulta en valores de los coeficientes efectivos que pueden ser obtenidos por celdas unitarias de geometría más simple o por aproximaciones analíticas. Es importante, por lo tanto considerar la factibilidad del uso de una celda unitaria compleja como representación del medio poroso para calcular el coeficiente efectivo.

Para la conductividad efectiva en medios porosos sin contacto partícula - partícula, los coeficientes de conductividad predichos concuerdan con los experimentales para  $\kappa < 200$  (efecto del contacto entre partículas despreciable). Para problemas donde  $\kappa > 10$ ,  $\varepsilon_\beta \leq 0.5$  y la complejidad estructural del medio poroso, es tal que, se requieren incluir detalles geométricos y se debe tomar en cuenta el efecto de la geometría sobre el coeficiente de conductividad térmica. En este tipo de problemas es necesaria la predicción del coeficiente de conductividad térmica para celdas unitarias más complejas. En caso contrario aproximaciones analíticas, como las reportadas en la literatura (p. ej. Ochoa-Tapia *y col.*, 1994), sirven adecuadamente para predecir el coeficiente de conductividad térmica efectiva. Lo anterior se resume en un algoritmo que me permite establecer bajo que condiciones es preferible usar celda unitaria detallada del medio poroso o bien una aproximación analítica para predecir el coeficiente de conductividad efectiva y su eventual aplicación al modelamiento sistemático de procesos reales. En comparación con las aproximaciones analíticas propuestas, el modelo de predicción de la conductividad efectiva propuesto por Ochoa-Tapia *y col.* (1994) muestra los valores de la conductividad térmica más cercanos a los resultados numéricos de las configuraciones complejas empleadas en este trabajo. Lo anterior refuerza la idea planteada por Ochoa-Tapia *y col.* (1994) sobre la simplificación de la celda unitaria periódica por medio de una celda unitaria de Chang, de un modelo más simple que un modelo periódico y este análisis resulta relevante con fundamento en la simplicidad de la expresión analítica de Ochoa-Tapia *y col.* (1994).

En el caso de dispersión pasiva, los valores predichos de los coeficientes de dispersión longitudinal y transversal, para las celdas unitarias de geometrías complejas, son satisfactorios al compararlos con los datos experimentales encontrados en la literatura para  $Pe_p < 1,000$ . Siendo la predicción del coeficiente de dispersión transversal menos adecuada para ciertas celdas unitarias. Considerando la influencia de la microestructura del medio poroso sobre el tensor de dispersión, celdas unitarias periódicas que contienen ciertas características esenciales de la microestructura de un medio poroso, resultan en valores del coeficiente de dispersión que discrepan con aquellos calculados usando configuraciones de celdas equivalente de geometría aproximada, basadas en estructura

de menor complejidad geométrica; por consiguiente si no se considera adecuadamente la estructura de la celda unitaria pueden surgir errores respecto al modelamiento del proceso de dispersión en los sistemas deseados. A pesar del carácter periódico de las celdas unitarias, estructuras complejas como las utilizadas en este trabajo son prometedoras para representar razonablemente varios sistemas de medios porosos homogéneos y calcular de forma adecuada ambos, el coeficiente de dispersión longitudinal y transversal, donde se incluyen ciertos detalles de la microestructura.

Con base en las conclusiones, las perspectiva del trabajo a futuro sería el plantear el uso de celdas unitarias tridimensionales con características geométricas similares a las de este trabajo, las cuales podrían proveer mejores resultados para la predicción de parámetros efectivos, principalmente al tensor de dispersión, ya que se extiende el uso a representaciones que pueden contener la esencia física de la microestructura de un medio poroso real, sin limitaciones geométricas. Utilizar representaciones periódicas 2D y 3D con características fractales, la cuales han sido usadas ampliamente en estudios de conducción de calor (Chen y Shi, 1999; Yu y Cheng, 2002; Feng *y col.*, 2004; Kou *y col.*, 2009), para predecir los coeficientes de conductividad térmica efectiva y de dispersión pasiva u otros fenómenos más complejos y comparar sus resultados con celdas que presentan detalles de la microestructura, similares a los reportados en este trabajo. Empleando para ambos casos las herramientas computacionales avanzadas. Proponer una metodología que haga uso de las herramientas de cómputo avanzadas, de forma que los recursos computacionales sean reducidos y los coeficientes efectivos puedan ser calculados para celdas unitarias que incluyan una ampliación de las características estructurales del medio poroso. Finalmente incorporar estas mismas herramientas computacionales avanzadas en una metodología que aborde la aplicación de los coeficientes efectivos predichos para problemas de modelamiento.



- Aichlmayr, H.T. y Kulacki, F. (2006). Effective conductivity of saturated porous media. *Advances in Heat Transfer*, 39, 377-460.
- Amaral-Souto, P. y Moyne, C. (1997a). Dispersion in two-dimensional periodic porous media. Part II. Dispersion tensor. *Phys. Fluids*, 9(8), 2253-2263.
- Amaral-Souto, P. y Moyne, C. (1997b). Dispersion in two-dimensional periodic porous media. Part I. Hydrodynamics. *Phys. Fluids*, 9(8), 2243-2252.
- Aris, R. (1956). On the dispersion of a solute in a fluid flowing through a tube. *Proc. Roy. Soc.*, 235, 67-82.
- Auset, M. y Keller, A. (2006). Pore-scale visualization of colloid straining and filtration in saturated porous media using micromodels. *Water Resour. Res.*, 42, W12S02.
- Batchelor, G.K. y O'Brien, R.W. (1977). Thermal or electrical conduction through a granular material. *Proc. Roy. Soc. (London)*, A355, 313-333.
- Bird, R.B., Stewart, W. y Lightfoot, E. (2008). *Transport phenomena*. United States of America: Jhon Wiley and Sons, Inc.
- Bouanno, G., Carotenuto, A., Giovinco, G. y Massarotti, N. (2003). Experimental and theoretical modeling of the effective thermal conductivity of rough steel spheroid packed beds. *J. Heat Transfer*, 125, 693-702.

- Brenner, H. (1980). Dispersion resulting from flow through spatially periodic porous media. *Proc. Roy. Soc. Lond. Series A, Math. And Phys. Sci.*, 297, 81-133.
- Buonanno, G. y Carotenuto, A. (1997). The effective thermal conductivity of a porous medium with interconnected particles. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 40(2), 393-405.
- Buyuktas, D. y Wallender, W.W. (2004). Dispersion in spatially periodic porous media. *Heat and Mass Transfer*, 40, 261-270.
- Carberry, R.G. y Breton, R.H. (1958). Axial dispersion of mass in flow through packed beds. *AIChE Journal*, 4, 367-375.
- Carbonell, R.G. y Whitaker, S. (1983). Dispersion in pulsed systems. Part II. Theoretical developments for passive dispersion in porous media. *Chem. Eng. Sci.*, 38, 1795-1801.
- Chang, H. (1982). Multi-scale analysis of effective transport in periodic heterogeneous media. *Chem. Eng. Comm.*, 15, 83-91.
- Chen, Y. y Shi, M. (1999). Study on effective thermal conductivity for porous media using fractal techniques. *Chinese J. Eng. Thermophys.*, 20, 608-612.
- Delgado, J.M.P.Q. (2006). A critical review of dispersion in packed beds. *Heat Mass Transfer (2006)*, 42, 279-310.
- Didierjean, S., Amaral-Souto, P., Delannay, R. y Moyne, C. (1997). Dispersion in periodic porous media. Experience vs. Theory for two-dimensional systems. *Chem. Eng. Sci.*, 52(12), 1861-1874.
- Ebach, E.A. y White, R.R. (1958). Mixing of fluids flowing through beds of packed solids. *AIChE Journal*, 4, 161-169.
- Edwards, D., Shapiro, M., Brenner, H. y Shapira, M. (1991). Dispersion of inert solutes in spatially periodic, two-dimensional model porous media. *Transport in Porous Media*, 23, 109-123.
- Edwards, M. y Richardson, J. (1968). Gas dispersion in porous bed. *Chem. Engng. Sci.*, 161-169.

- Eidsath, A.B. (1981). *Flow and dispersion in spatially periodic porous media: finite element study*. Tesis de Master no publicada, Department of Chemical Engineering, University of California, Davis, CA.
- Eidsath, A.B., Carbonell, R.G., Whitaker, S. y Herrmann, L.R. (1983). Dispersion in pulsed systems.III. Comparison between theory and experiments for packed beds. *Chem. Eng. Sci.*, *38*, 1803-1816.
- Feng, Y., Yu, B., Zou, M. y Zhang, D. (2004). A generalized model for the effective thermal conductivity of porous media based on self-similarity. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, *37*, 3030-3040.
- Gorring, R. y Churchill, S. (1961). Thermal conductivity of heterogeneous material. *Transport in Porous Media*, *57*, 53-68.
- Greenkorn, R.A. y Kessler, D.P. (1969). Dispersion in heterogeneous nonuniform anisotropic porous media. *American Society*, *61*, 14-32.
- Gunn, D.J. y Price, C. (1969). Dispersion in packed beds. *Trans. Instn. Chem. Engrs.*, *47*, 341-350.
- Hadley, G.R. (1986). Thermal conductivity of packed metal powders. *Int. J. Heat Transfer*, *29(6)*, 909-920.
- Han, N., Bhakta, J. y Carbonell, R.G. (1985). Longitudinal and lateral dispersion in packed beds: effect of column length and particle size distribution. *A.I.C.H.E.J.*, *31(2)*, 277-288.
- Haring, R.E. y Greenkorn, R.A. (1970). Statistical model of a porous medium with nonuniform pores. *A.I.Ch.E.J.*, *16*, 477-483.
- Hassinger, R. y Rosenberg, D. (1968). A mathematical and experimental examination of transverse dispersion coefficients. *Soc. Petrol. Eng. J.*, *8*, 195-204.
- Horn, F.J.M. (1971). Calculation of dispersion coefficients by means of moments. *A.I.C.H.E.J.*, *17*, 617-.
- Hsu, C.T., Cheng, P. y Wong, K.W. (1994). A lumped-parameter model for stagnant thermal conductivity of spatially periodic porous media. *J. Heat Transfer*, *37(17)*, 2751-2759.

- Jong, G.J. de. (1958). Longitudinal and transverse diffusion in granular deposits. *Trans. Am. Geophys. Union*, 39(1), 67.
- Jugaribe, F.E. y Beasley, E.B. (1984). Modeling of the effective thermal conductivity and diffusivity of a packed bed with stagnant fluid. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 27(3), 339-407.
- Koch, D.L. y Brady, J.F. (1987). The symmetry properties of the effective diffusivity tensor in anisotropic porous media. *Phys. Fluids*, 30, 642.
- Kou, J., Wu, F., Lu, H., Xu, Y. y Song, F. (2009). The effective thermal conductivity of porous media based on statistical self-similarity. *Physics Letters A*, 374, 62-65.
- Krupiczka, R. (1967). Analysis of thermal conductivity in granular materials. *Int. Chem. Eng.*, 7, 122.
- Kunii, D. y Smith, J.M. (1960). Heat transfer characteristics of porous rocks. *AIChE Journal*, 6, 71-78.
- Lehmann, P., Wyss, P., Flisch, A., Lehmann, E., P-Vontobel, Krafczyk, M. y cols. (2006). Tomographical imaging and mathematical description of porous media used for the prediction of fluid distribution. *Vadosose Zone Journal*, 5, 80-97.
- Lorenz, L. (1880). Ueber die refraction constante. *Ann. Phys. Lpz.*, 11, 70-76.
- Lugo-Méndez, H.D. (2009). *Predicción de coeficientes efectivos de dispersión y difusión en medios porosos*. Tesis de Master no publicada, Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa.
- Ma, Y., Yu, B., Zhang, D. y Zou, M. (2003). A self-similarity model for effective thermal conductivity of porous media. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 36, 2157 - 2164.
- Maxwell, J.C. (1881). *Treatise of electricity and magnetism* (2nd ed., Vol. I; Oxford, Ed.). Clarendon Press.
- Neculae, A., Goyeau, B., Quintard, M. y Gobin., D. (2002). Passive dispersion in dendritic structures. *Materials Science & Engineering*, 323, 367-376.

- Noble, D.R. (1997). *Lattice boltzman study of interstitial hydrodynamics and dispersión in steady inertial flow in large, randomly packed beds*. Tesis Doctoral no publicada, Department of Mechanical and Industrial Engineering, University of Illinois.
- Nozad, I., Carbonell, R.G. y Whitaker, S. (1985a). Heat conduction in multiphase systems. II. Experimental method and results for three-phase systems. *Chem. Eng. Sci.*, *40*, 857-863.
- Nozad, I., Carbonell, R.G. y Whitaker, S. (1985b). Heat conduction in multiphase systems. I. Theory and experiment for two-phase systems. *Chem. Eng. Sci.*, *40*, 843-856.
- Ochoa-Tapia, J., Stroeve, S. y Whitaker, S. (1994). Diffusive transport in two-phase media: spatially periodic models and maxwell's theory for isotropic and anisotropic systems. *Chem. Eng. Sci.*, *49*(5), 709-726.
- Paine, M.A., Carbonell, R.G. y Whitaker, S. (1983). Dispersion in pulsed systems. I. Heterogeneous reaction and reversible adsorption in capillary tubes. *Chem. Eng. Sci.*, *38*(11), 1781-1793.
- Perrins, W.T., McKenzie, D.R. y McPedran, R.C. (1979). Transport properties of regular arrays of cylinders. *Proc. Roy. Soc. Lond.*, *369*(1737), 207-255.
- Pfannkuch, H.O. (1963). Contribution a l'etude des déplacements de fluides miscibles dans un milieu poreux. *Rev. Inst. Francais Petrole*, *XVIII*, 215.
- Plumb, O.A. y Whitaker, S. (1988). Dispersion in heterogeneous porous media: predictions for stratified and two-dimensional spatially periodic systems. *Wat. Res. Res.*, *24*, 927-938.
- Porter, M.L., Valdés-Parada, F.J. y Wood, B.D. (2010). Comparison of theory and experiments for dispersion in homogeneous porous media. *Adv. Water Resour.*, [doi:10.1016/j.advwatres.2010.06.007](https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2010.06.007).
- Prasad, V., Kladas, N., Bandyopadhyaya, A. y Tian, Q. (1989). Evaluation of correlations for stagnant thermal conductivity of liquid-saturated porous beds of spheres. *J. Heat Mass Transfer*, *32*(9), 1793-1796.
- Quintard, M. y Whitaker, S. (1994). Convection, dispersion, and interfacial transport of contaminants: Homogeneous media. *Advances in Water Resources*, *17*, 221-239.

- Rayleigh, L. (1892). On the influence of obstacles arranged in rectangular order upon the properties of medium. *Phil. Mag.*, *34*, 481-489.
- Rifai, M., Kaufman, W. y Tood, D. (1956). Dispersion in laminar flow trough porous media. En *Sanitary engr. res. lab. rep.* (Vol. IER). Davis: University of California.
- Saez, A.E. y Perfetti, J.C. (1991). Prediction of effective diffusivities in porous media using spatially periodic model. *Trans Porous Media*, *6*, 143-157.
- Saffman, P.C. (1960). Dispersion in flow through a network of capillaries. *J. Fluid Mech.*, *7*, 194-207.
- Sahraoui, M. y Kaviany, M. (1993). Slip and no-slip temperature boundary conditions at interface of porous, plain media: conduction. *Int. J. Heat Mass Trans.*, *36*, 1019-1033.
- Sahraoui, M. y Kaviany, M. (1994). Slip and no-slip temperature boundary conditions at the interface of porous, plain media: convection. *Int. J. Heat Mass Trans.*, *37*, 1092-1044.
- Salles, J., Thovert, J.F., Delannay, R., Prevors, L., Auriault, J.L. y Adle, P.M. (1993). Taylor dispersion in porous media. determination of dispersion tensor. *Phys Fluids A*, *5*, 2348-2376.
- Shonnard, D.R. y Whitaker, S. (1989). The effective thermal conductivity for a point-contact porous medium: an experimental study. *J. Heat Mass Transfer.*, *32*, 503-512.
- Sorensen, J.P. y Steward, W.E. (1974). Computation of forced convection in slowl flow trough ducts and packed beds - parts i-iv. *Chem. Eng. Sci.*, *29*, 811-837.
- Taylor, G. (1953). Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube. *Proc. Roy. Soc. Lond. Series A, Math. And Phys. Sci.*, *219*(219), 186-203.
- Taylor, G. (1954). The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe. *Proc. Roy. Soc. Lond. Series A, Math. And Phys. Sci.*, *223*(1155), 446-468.
- Whitaker, S. (1999). *Theory and applications of transport in porous media: Vol 13. the method of volume averaging.* Netherlands: Kluwer Academic Publishers.
- Wood, D.B. (2007). Inertial effects in dispersion in porous media. *Water Resour. Res.*, *43*, W12S16.

Wooding, R.A. (1960). Inestability of viscous liquid of variable density in a vertical hele-shaw cell. *J. Fluid Mech.*, 7, 501 -515.

Woodside, W. y Messer, J.H. (1961). Thermal conductivity of porous media: I. Unconsolidated sands. *J. Appl. Phys.*, 32, 1688-1706.

Yu, B.M. y Cheng, P. (2002). Fractal models for the effective thermal conductivity of bi-dispersed porous media. *J. Thermophys. Heat Transfer*, 16, 22-29.

Zehnder, P. y Schlünder, E.U. (1970). Thermal conductivity of granular materials at moderate temperatures. *Chemie. Ingr. Tech.*, 42, 933.

Zhang, H.Y. y Huang, X.Y. (2000). Volumetric heat transfer coefficients in solid-fluid porousmedia: closure problem, thermal analysis and model improvement with fluid flow. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 43, 3417-3432.



# Apéndices



## APÉNDICE A

# CÁLCULO DEL COEFICIENTE DE CONDUCTIVIDAD TÉRMICA EFECTIVA

En este apéndice se detalla la metodología seguida para la solución del problema de cerradura y el cálculo del coeficiente de conductividad efectiva para una geometría de celda unitaria de cuadrados y cilindros en línea utilizando la herramienta computacional avanzada: COMSOL Multiphysics.

### A.1. Solución para $\mathbf{b}_\beta$ y $\mathbf{b}_\sigma$

La definición del coeficiente de conductividad térmica efectiva definida en la Ecuación (3.10) del Capítulo 3 es:

$$\frac{\mathbf{K}_{eff}}{k_\beta} = [\varepsilon_\beta + (1 - \varepsilon_\beta)\kappa] \mathbf{I} + \frac{(1 - \kappa)}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b}_\beta dA \quad (\text{A.1})$$

El cálculo del tensor de segundo orden de la conductividad efectiva,  $\mathbf{K}_{eff}$ , esta asociado a la solución de un problema de valores a la frontera, conocido como cerradura, que se resuelve en representaciones de medios porosos espacialmente periódicos. El problema de cerradura se define en el Sistema de Ecuaciones (3.12) del Capítulo 3, y se retoma nuevamente a continuación:

$$\nabla^2 \mathbf{b}_\beta = 0 \quad (\text{A.2a})$$

$$\nabla^2 \mathbf{b}_\sigma = 0 \quad (\text{A.2b})$$

$$\text{C.F.1} \quad \mathbf{b}_\beta = \mathbf{b}_\sigma, \text{ en } A_{\beta\sigma} \quad (\text{A.2c})$$

$$\text{C.F.2} \quad -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \kappa \nabla \mathbf{b}_\sigma + (1 - \kappa) \mathbf{n}_{\beta\sigma}, \text{ en } A_{\beta\sigma} \quad (\text{A.2d})$$

$$\text{Periodicidad:} \quad \mathbf{b}_\beta(\mathbf{r} + \ell_i) = \mathbf{b}_\beta(\mathbf{r}), \mathbf{b}_\sigma(\mathbf{r} + \ell_i) = \mathbf{b}_\sigma(\mathbf{r}), i = 1, 2, 3 \quad (\text{A.2e})$$

$$\text{Restricciones:} \quad \langle \mathbf{b}_\beta \rangle^\beta = 0, \quad \langle \mathbf{b}_\sigma \rangle^\sigma = 0 \quad (\text{A.2f})$$

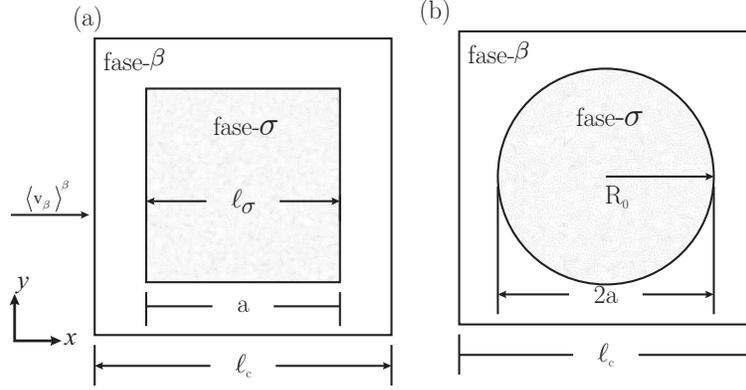
La solución del sistema de ecuaciones anterior se define en el entorno COMSOL Multiphysics en las siguientes líneas de forma secuencial y utilizando las opciones del software en el idioma original (inglés). Se da una explicación breve de la interpretación física de cada una de las opciones. La metodología para la solución del problema de cerradura, usando una interfase gráfica con el usuario, es la siguiente:

### A.1.1. Forma de la ecuación diferencial

1. Iniciar COMSOL Multiphysics: seleccionar **2D** en **Space Dimension**. Definiendo con esto el problema de cerradura para una celda unitaria bidimensional.
2. En la lista de **Application Modes** se selecciona **COMSOL Multiphysics** → **Heat Transfer** → **Conduction** → **Steady-state analysis** → **Multiphysics** → **Add**, se añade también **Fluid Dynamics** → **Incompressible Navier-Stokes** → **Steady-state analysis** → **Add** → **Ok** . Esto define la forma de las ecuaciones diferenciales parciales para problemas específicos de conducción de calor, definiendo adecuadamente, a partir de esta forma, el Sistema de Ecuaciones (A.2). La definición de las ecuaciones de Navier-Stokes no involucra la solución para el perfil de velocidad y su utilidad será explicada posteriormente.

### A.1.2. Geometría

3. En la pestaña **Options** se selecciona **constants** y se definen las constantes mostradas en la Tabla A.1. Estas constantes representan las propiedades del sistema, así como parámetros que describen la geometría de la celda unitaria. En este caso se plantea el uso de la celda unitaria con un arreglo de cuadrados y cilindros en línea. Ver Figura A.1.



**Figura A.1.** Celdas unitarias de (a) cuadrados y (b) cilindros en línea.

El procedimiento es prácticamente el mismo solo cambia la variable  $a$  que relaciona las longitudes características de la celda  $\ell_c$  y el tamaño de la partícula:  $\ell_\sigma$  para la celda de cuadrados en línea y  $R_0$  para la celda de cilindros en línea.

Para la celda de cilindros en línea la expresión y el valor correspondientes a la variable  $a$ , son:  $\sqrt{(1-\text{eb})/\pi}$  y  $0.447811$ , respectivamente. Las constantes de COMSOL representan los siguientes parámetros del problema de cerradura:  $\text{eb} \equiv \varepsilon_\beta$ , y  $k \equiv \kappa$ , donde  $\kappa = k_\beta/k_\sigma$ .

La expresión de  $a$  se define a partir de fracción volumétrica de la fase sólida ( $\sigma$ ) como

$$\varepsilon_\sigma = \mathcal{V}_\sigma / \mathcal{V} = 1 - \varepsilon_\beta \quad (\text{A.3})$$

y con base en la Figura A.1 (a), para la partícula cuadrada,  $\mathcal{V}_\sigma = \ell_\sigma^2$  y el volumen de la celda es:  $\mathcal{V} = \ell_c^2$ . Sustituyendo las definiciones anteriores en la Ec. (A.3), despejamos  $a$  como la longitud adimensional de la relación entre  $\ell_\sigma$  y la longitud de la celda unitaria  $\ell_c$

$$a = \frac{\ell_\sigma}{\ell_c} = \sqrt{1 - \varepsilon_\beta} \quad (\text{A.4})$$

**Tabla A.1.** Parámetros definidos en COMSOL Multiphysics - Conductividad

Name	Expression	Value	Description
eb	0.3	0.3	porosidad
a	sqrt(1-eb)	0.793725	longitud del cuadrado
k	10	10	relación de conductividades

Para la celda unitaria de cilindros en línea de la Figura A.1 (b),  $\mathcal{V}_\sigma = \pi R_0^2$  y  $\mathbf{a}$ , relaciona el radio  $R_0$  y la longitud de la celda unitaria  $\ell_c$  como

$$\mathbf{a} = \frac{R_0}{\ell_c} = \sqrt{\frac{(1 - \varepsilon_\beta)}{\pi}} \quad (\text{A.5})$$

En el entorno COMSOL Multiphysics la longitud de la celda unitaria se le da un valor de  $\ell_c = 1$ . Por lo tanto la expresión colocada en el campo **Expression** es la definición de  $\mathbf{a}$  de la Ecuación A.4, para la celda de cuadrados en línea o la Ecuación A.5, para la de cilindros en línea.

4. Una vez definidos los parámetros se procede con la definición del dominio del problema de cerradura, la celda unitaria. Para dibujar una celda unitaria de cuadrados o cilindros en línea. Para ambas celdas unitarias el procedimiento es básicamente el mismo. Se selecciona en la pestaña **Draw**  $\rightarrow$  **Specify Objects**  $\rightarrow$  **Square**, y se dibuja un cuadrado con una longitud igual de uno (Opciones *Width*: 1).

La partícula cuadrada se dibuja de forma similar, colocando en el campo *Width*:  $\mathbf{a}$  y posicionando el cuadrado dentro de la celda en *Base*: center;  $x$ : 0.5;  $y$ : 0.5. El dominio de cerradura se crea al seleccionar en la pestaña **Draw**  $\rightarrow$  **Create Composite Object...**, los nombres correspondientes al cuadrado y el círculo. Finalmente se aplica la opción **Union** en esta ventana. La única variación con el procedimiento anterior para dibujar una partícula cilíndrica es seleccionar  $\rightarrow$  **Circle** y en la ventana dar un valor de *Radius* :  $\mathbf{a}$  con la misma posición dentro de la celda,  $x$ : 0.5;  $y$ : 0.5.

El objeto creado es la celda unitaria con un arreglo de cuadrados o cilindros en línea, para los dominios  $\beta$  y  $\sigma$ , del problema de cerradura de la conductividad térmica. A partir de este paso, el procedimiento aplica de igual forma para la celda de cuadrados y cilindros en línea.

5. Una vez creada la geometría de la celda unitaria se definen los volúmenes correspondiente a las fases  $\sigma$  y  $\beta$  de la forma siguiente: En la pestaña **Options**  $\rightarrow$  **Integration Coupling Variables**  $\rightarrow$  **Subdomain Variables**. En esta ventana se selecciona *Subdomain selection*: 1 o 2, donde el número debe corresponder a las fases  $\sigma$  y  $\beta$  de la celda unitaria en los campos siguientes escribir *Name*:  $\mathbf{Vb}$  o  $\mathbf{Vs}$ , según sea el caso, en *Expression*: 1; *Integration order*: 4. Este paso es opcional y es sólo si se desea definir los volúmenes de las fases para ser empleadas posteriormente en el cálculo del coeficiente de conductividad efectivo,  $\mathbf{K}_{eff}$  a partir de su definición (Ec. A.1).

### A.1.3. Definición del problema de cerradura en COMSOL Multiphysics

6. Definidos los parámetros y la celda unitaria. Las ecuaciones gobernantes del problema de cerradura se define de la siguiente forma: En la pestaña se selecciona **Multiphysics** → **2 Heat Transfer by Conduction (ht)** y se continua en la pestaña **Physics** → **Subdomain Settings**. En la ventana de **Subdomain settings** se especifica la forma del sistema de ecuaciones diferenciales parciales, para los dominios correspondientes a las fases. Esto se traduce a COMSOL Multiphysics, de acuerdo a la Tabla A.2. En esta tabla sólo se muestran los campos que son modificados para definir adecuadamente el problema de cerradura y esto mismo se realizará en tablas similares para otras ventanas.
7. Para especificar las condiciones de frontera (C.F.) en la interfase  $\beta - \sigma$  y las condiciones en las fronteras externas del dominio de cerradura que permitan establecer la condición de periodicidad, se selecciona **Physics** → **Boundary Settings**, de acuerdo a la Tabla A.3, se establecen las condiciones en la frontera que corresponden al problema de cerradura.

Los vectores unitarios normales que se establecen,  $\mathbf{n}$  mediante el modulo *Heat Transfer by Conduction*, son representados por  $\mathbf{n}_x$ , éstos tienen una dirección dada que no coincide con la dirección deseada de la fase fluida hacia la fase sólida ( $\mathbf{n}_{\beta\sigma}$ ). Por lo tanto, en caso de usar este tipo de vectores normales en donde se establece  $\mathbf{q}_0$  de la Tabla A.3,

**Tabla A.2.** Ecuación diferencial del problema de cerradura para  $\mathbf{b}_\beta$  y  $\mathbf{b}_\sigma$ .

$-\nabla \cdot (\mathbf{k} \nabla T) = Q + h_{\text{trans}}(T_{\text{ext}} - T) + C_{\text{trans}}(T_{\text{amb}}^4 - T^4), T = \text{temperature}$	
Ecuación gobernante	COMSOL Multiphysics
$\nabla^2 \mathbf{b}_\beta = 0$	<b>Subdomain:</b> 1 ; $T \equiv \mathbf{b}_\beta$ <b>Physics</b> k(isotropic): 1
$\kappa \nabla^2 \mathbf{b}_\sigma = 0$	<b>Subdomain:</b> 2 ; $T \equiv \mathbf{b}_\sigma$ <b>Physics</b> k(isotropic) = k

la dirección de los vectores no sería la correcta y los valores de  $\mathbf{K}_{eff}$  calculados serían erróneos. La razón para añadir el módulo Navier-Stokes es ahora clara, y consiste, principalmente para este caso, en definir adecuadamente la dirección de los vectores normales  $\mathbf{n}_{\beta\sigma}$ , definidos como `nx_ns` en COMSOL Multiphysics. Este paso resulta esencial para lograr que los valores de  $\mathbf{b}_\beta$  y  $\mathbf{b}_\sigma$  sean calculados correctamente y para celdas unitarias de estructura más compleja, es esencial para direccionar correctamente los vectores normales.

Las condiciones en las fronteras externas necesarias para establecer periodicidad se muestran en la Tabla A.4. Se declara la condición de *Thermal insulation* para establecer condiciones de frontera tipo Neumann, menos restrictivas que condiciones de tipo Dirichlet. La condición de frontera de aislamiento [ $\mathbf{n} \cdot (\mathbf{k}\nabla T) = 0$ ] será sustituida por la condición de periodicidad.

**Tabla A.3.** Condiciones de frontera internas - Conductividad.

$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{k}_1 \nabla T_1 - \mathbf{k}_2 \nabla T_2) = \mathbf{q}_0 + h(T_{inf} - T) + \text{Const}(T_{amb}^4 - T^4)$	
Condición de frontera	COMSOL Multiphysics
$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \kappa \nabla \mathbf{b}_\sigma + (1 - \kappa) \mathbf{n}_{\beta\sigma}$	<b>Boundaries:</b> 5-8 (interiores) <b>Coefficients</b> <b>Boundary condition:</b> Heat flux discontinuity $\mathbf{q}_0 = -\text{nx\_ns}*(1-\kappa)$

**Tabla A.4.** Condición en las fronteras externas - Conductividad.

$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{k}\nabla T) = 0$	
Periodicidad	COMSOL Multiphysics
$\mathbf{b}_\beta(\mathbf{r} + \ell_i) = \mathbf{b}_\beta(\mathbf{r})$	<b>Boundaries:</b> 1-4 (externas)
$\mathbf{b}_\sigma(\mathbf{r} + \ell_i) = \mathbf{b}_\sigma(\mathbf{r})$	<b>Coefficients</b>
	<b>Boundary condition:</b> Thermal insulation

8. La condición de periodicidad de la variable de cerradura,  $\mathbf{b}_\beta$  y  $\mathbf{b}_\sigma$ , se establecen desde **Physics** → **Periodic Boundary Conditions**. Los campos se completan de acuerdo a la Tabla A.5. La condición de periodicidad se establece a partir de las fronteras y los vértices en las direcciones donde se requiera que la propiedad sea periódica en la celda unitaria. Se escribe *Constraint order*: 2, correspondiente al orden de la ecuación diferencial; para la divergencia:  $\nabla^2 \mathbf{b}_\sigma$  y  $\nabla^2 \mathbf{b}_\beta$  y por tanto el valor de la restricción es igual a dos.
9. Las restricciones  $\langle \mathbf{b}_\beta \rangle^\beta = 0$ ,  $\langle \mathbf{b}_\sigma \rangle^\sigma = 0$ , son usadas para resolver el problema de cerradura, sin embargo estas resultan innecesarias para los caso donde las celdas unitarias son simétricas, detalles sobre esta conclusión se encuentran en Whitaker (1999, p. 105).
10. En este punto, el problema de cerradura esta definido completamente en el entorno COMSOL Multiphysics. La solución del problema de cerradura se realiza estableciendo primeramente la malla de la celda unitaria en la pestaña **Mesh** → **Initialize Mesh**, inicializando con ello el esquema de discretización del problema de cerradura mediante el método del elemento finito. El paquete para resolver el sistema lineal, resultado de la discretización, se selecciona en **Solve** → **Solve Parameters**, esta herramienta

**Tabla A.5.** Condición de periodicidad - Conductividad.

	Source		Destination	
Periodicidad en la dirección $x$				
<b>Boundary Selection</b>	1		4	
<b>Expression</b>	T		T	
<b>Constraint</b>	name:	Tconstrx	order:	2
<b>Vertices</b>	1	2	3	4
Periodicidad en la dirección $y$				
<b>Boundary Selection</b>	2		3	
<b>Expression</b>	T		T	
<b>Constraint</b>	name:	Tconstry	order:	2
<b>Vertices</b>	1	7	2	8

computacional avanzada cuenta con varios tipos de paquetes, cuyos de detalles quedan fuera de este apéndice. Se selecciona en **Linear system solver: Direct (UMFPACK)**. Finalmente se resuelve el problema de cerradura desde la pestaña **Solve** → **Solve Problem**. Se realiza un procedimiento de refinado de la malla, con lo que se garantiza que los resultados numéricos son independientes del esquema de discretización. El refinamiento puede ser manual seleccionando: **Mesh** → **Initialize Refine Mesh** o automático desde **Solve** → **Solve Parameters** seleccionando: **Adaptive mesh refinement**.

No se resuelve el módulo de **Incompresible Navier-Stokes(ns)** debido a que sólo es añadido para establecer correctamente la dirección de los vectores  $\mathbf{n}_{\beta\sigma}$ .

#### A.1.4. Cálculo del coeficiente de conductividad efectiva

11. Una vez resuelto el problema de cerradura, es necesario calcular la integral en la Ecuación A.1, para poder calcular el coeficiente de conductividad efectiva  $\mathbf{K}_{eff}$ . Las integrales de superficie y de volumen se realiza en COMSOL Multiphysics de la siguiente forma: **Postprocessing** → **Boundary Integration** y **Postprocessing** → **Subdomain Integration**, respectivamente. La integral de superficie en la interfase  $\beta - \sigma$  y el volumen de las fases,  $\mathcal{V}_\beta$  y  $\mathcal{V}_\sigma$  se muestra en la Tabla A.6. En celdas unitarias

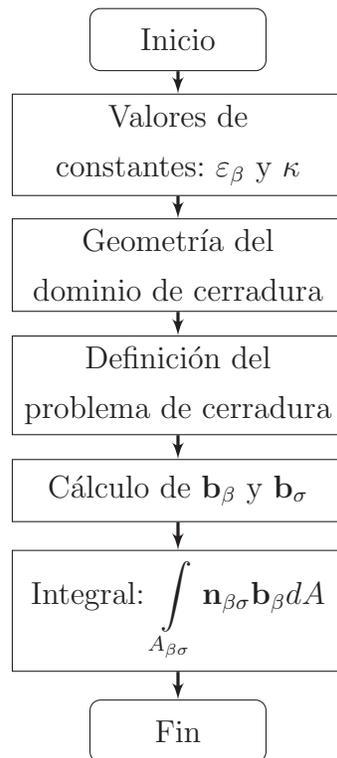
**Tabla A.6.** Integración - Conductividad.

Integral	COMSOL Multiphysics
$\int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b}_\beta dA$	<b>Boundaries selection:</b> 4-8(intteriores) <b>Expression:</b> nx_ns*T
$\mathcal{V}_\beta$	<b>Subdomain selection:</b> 1 (fase $\beta$ ); 2(fase $\sigma$ )
$\mathcal{V}_\sigma$	<b>Expression:</b> 1

cuya geometría es complicada esta integración permite el cálculo de la porosidad:  
 $\varepsilon_\beta = \mathcal{V}_\beta / (\mathcal{V}_\beta + \mathcal{V}_\sigma)$ .

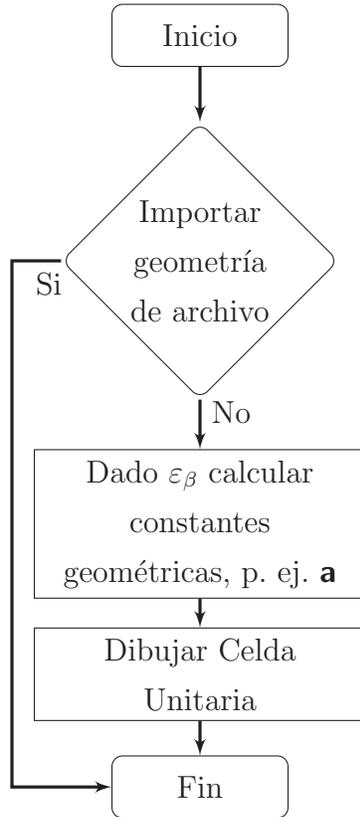
12. La utilidad práctica de resolver el problema de cerradura en COMSOL Multiphysics es la extracción del código en MATLAB. Este código permite la solución del problema de cerradura sin necesidad de recurrir a la interfase gráfica, administrando de mejor forma los recursos computacionales. El código también permite realizar un programa que permite el cálculo del coeficiente de conductividad efectiva variando los parámetros  $\varepsilon_\beta$  y  $\kappa$ . La extracción del código en MATLAB se realiza de la forma siguiente: **File** → **Save As** y se nombre el archivo tipo Model M-file(\*.m).

La solución del problema de cerradura presentado en este apéndice es para una celda unitaria con un arreglo en línea de partículas cuadradas y cilíndricas. Sin embargo puede ser extendido a diferentes modelos de celdas unitarias, incluyendo aquellas que contengan características geométricas de un medio poroso real. En la Figura A.2 se muestra el algoritmo donde se resume el procedimiento de la solución del problema de cerradura para la conductividad térmica. Este algoritmo se puede extender para otras geometrías de celdas unitarias más complicadas.

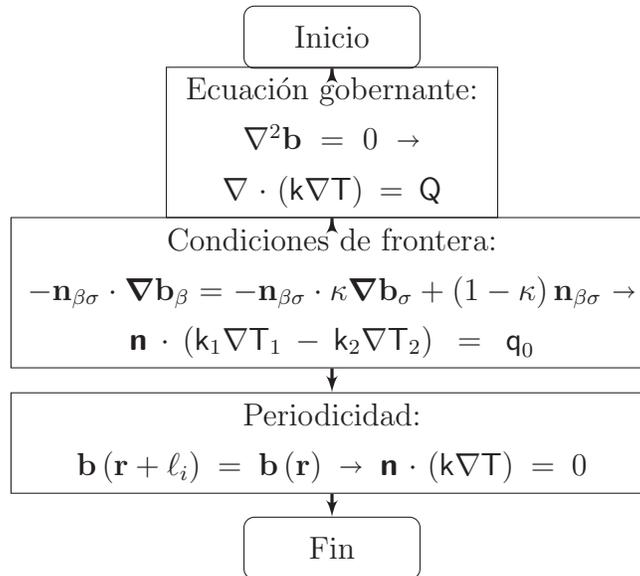


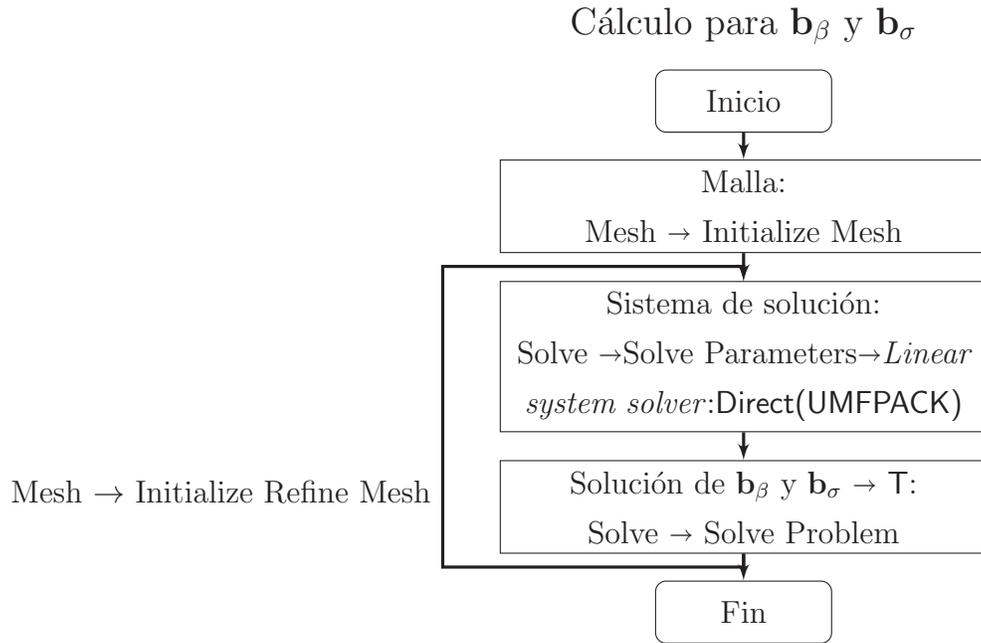
**Figura A.2.** Algoritmo de solución para el problema de cerradura de la conductividad térmica.

Geometría del dominio de cerradura

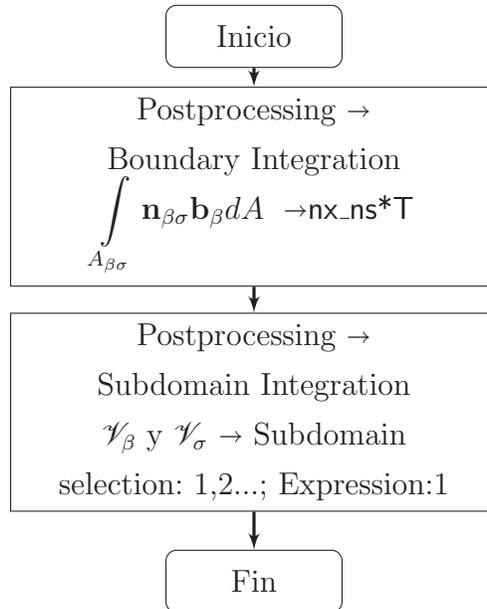


Definición del problema de cerradura





Integral:  $\int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b}_\beta dA$



## A.2. Cálculo del coeficiente de conductividad térmica efectiva

En esta sección del apéndice se sugieren las modificaciones pertinentes del código de COMSOL Multiphysics para calcular el coeficiente de conductividad efectivo para varios valores de  $\varepsilon_\beta$  y  $\kappa$ . Las modificaciones se presentan a continuación:

1. La interfase de MATLAB-COMSOL Multiphysics se inicia, abriendo directamente *COMSOL Multiphysics with MATLAB* o desde COMSOL Multiphysics desde **File** → **Client/Serve/MATLAB** → **Connect To MATLAB...**
2. Desde la plataforma de MATLAB, se abre el archivo \*.m obtenido en A.1. Para liberar la memoria y borrar cualquier resultado almacenado previamente, así como para poner 14 a 15 dígitos después del punto decimal, se debe poner al inicio: `clear; close all; clc; format long`
3. En seguida, se crea un vector donde se incluyan los valores de la porosidad y otro de la relación de conductividades, para los que se calcula la conductividad efectiva. Se proponen los vectores de tal forma que se abarquen varios valores de  $\varepsilon_\beta$  y  $\kappa$ :

```
eb = [ 0.3 0.5 0.7 0.9];
k = [1E-3 0.005 0.01 0.05 0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.7 ...
0.8 0.9 1 1.5 2 3 4 5 6 7 8 9 10 15 20 30 40 50 60...
70 80 90 100 150 200 300 400 500 600 700 800 900 ...
1E3 1.5E3 2E3 3E3 4E3 5E3 6E3 7E3 8E3 9E3 1E4];
```

4. A continuación, se calcula el número de elementos de estos vectores, mediante la instrucción: `n=numel(k); m=numel(eb);`
5. Lo siguiente es dimensionalizar los vectores para la conductividad efectiva, como:

```
Keff = zeros(n,m);
```

6. El siguiente paso es iniciar los ciclos del problema, para ello se escribe en las siguientes líneas del programa: `for j = 1:m; , seguido de for i = 1:n; .`

7. Posteriormente, se declaran las variables que modifican la porosidad de la celda unitaria. Para el caso de un arreglo de cuadrados en línea, la variable **a** se declara de la siguiente manera:

```
a = sqrt(1-eb(i));
```

y para la celda de cilindros en línea:

```
a = sqrt((1-eb(i))/pi) ;
```

8. También se declaran las variables para  $\kappa$  y  $\varepsilon_\beta$ , modificando las siguientes líneas para declarar variables de MATLAB en el código de COMSOL:

```
% Constants
fem.const = {'eb', eb(j), ...
            'a', a, ...
            'k', k(i)}
```

Para ciertas celdas unitarias no es necesario modificar los parámetros que definen la geometría, debido a que esta se importa desde un archivo externo. Incluyendo geometrías que pueden ser de otras aplicaciones u otras realizadas dentro del mismo COMSOL Multiphysics (\*.mphbin).

9. En la línea posterior a `% Initialize mesh` se declara la variable `malla = 3` para variar la fineza de la malla de acuerdo con el número (malla <5, más fino) y con ello, el número de elementos en el esquema de discretización.
10. Se comentan todas las instrucciones referentes a las gráficas de la solución.
11. La conductividad térmica efectiva se calcula a partir de las integrales calculadas en COMSOL Multiphysics, como se muestran a continuación:

```

% Integrate
I1=postint (fem, '1', ...
            'unit', 'm^2', ...
            'recover', 'off', ...
            'dl', [1]);

% Integrate
I2=postint (fem, '1', ...
            'unit', 'm^2', ...
            'recover', 'off', ...
            'dl', [2]);

% Integrate
I3=postint (fem, 'nx_ns*T', ...
            'unit', 'm', ...
            'recover', 'off', ...
            'edim', [5, 6, 7, 8]);

```

12. El coeficiente de conductividad térmica se declara, en términos de las integrales anteriores de la siguiente forma:

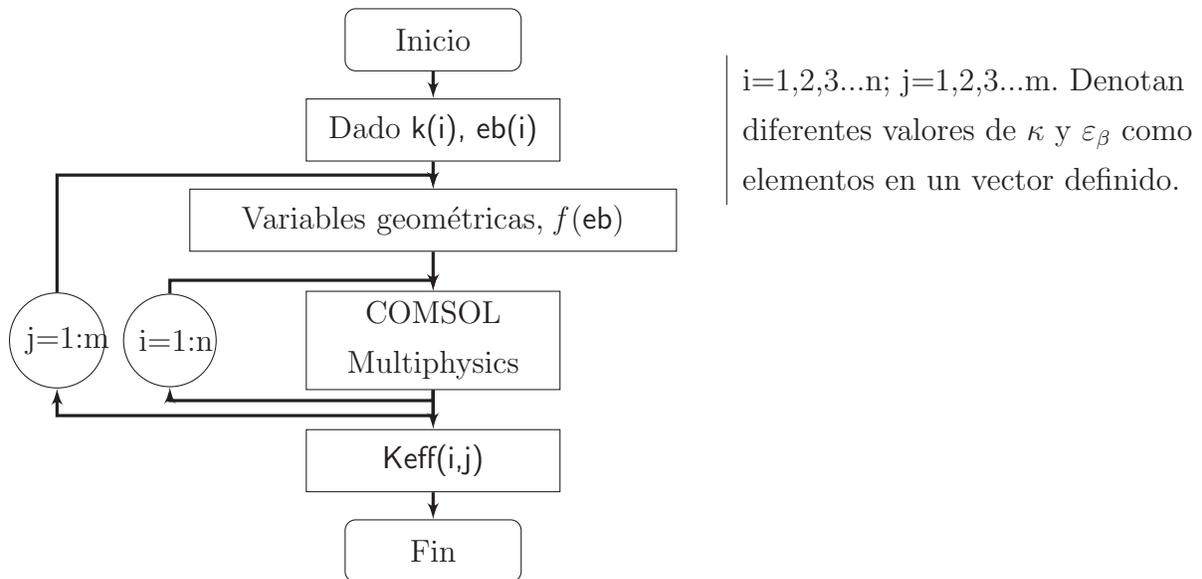
$$K_{eff}(i, j) = eb(j) + (1 - eb(j)) * k(i) + (1 - k(i)) * I3 / (I1 + I2);$$

esta declaración corresponde a la definición de  $K_{eff}$  de la Ecuación A.1.

13. Posteriormente se indica que se desean ver los resultados que se obtengan en la pantalla, para ello se escribe las siguiente instrucción:

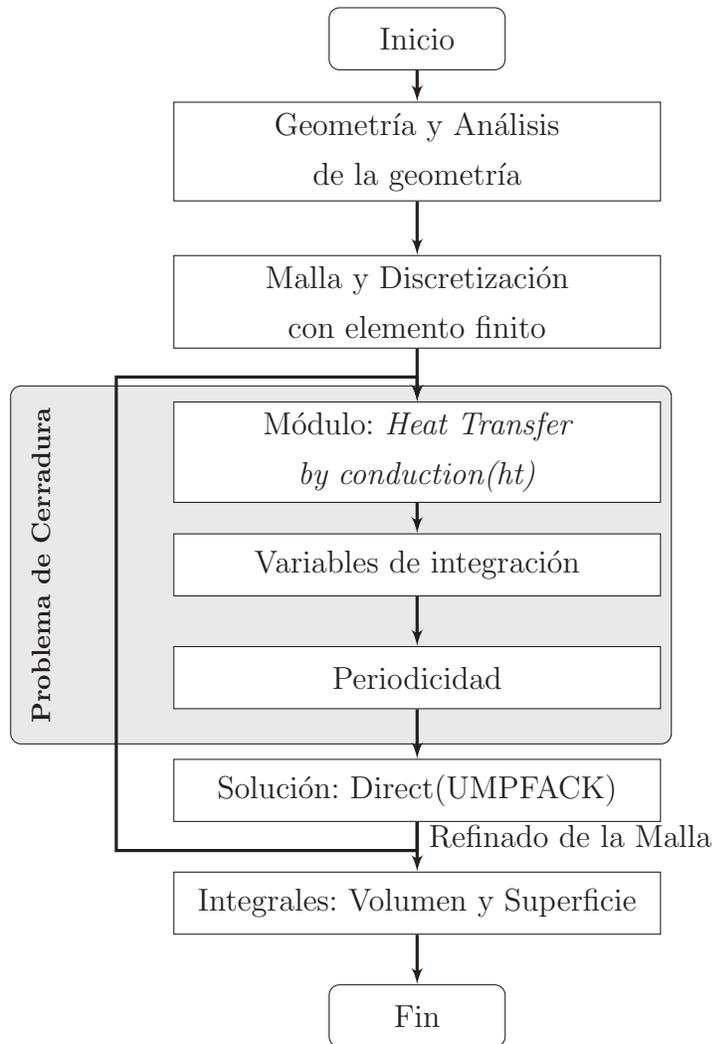
```
disp([k(i) Keff(i, j) eb(j)])
```

Estas modificaciones al código de COMSOL Multiphysics proporcionan el coeficiente de conductividad efectiva y la única variación respecto al uso de otras celdas unitarias son las declaraciones en la definición de la geometría de las estructuras periódicas. En la Figura A.3 se muestra un algoritmo que resumen el uso de las herramientas computacionales avanzadas para el cálculo de la conductividad efectiva.



**Figura A.3.** Algoritmo del cálculo de la conductividad térmica efectiva.

### COMSOL Multiphysics - Conductividad





## APÉNDICE B

### CÁLCULO DEL COEFICIENTE DE DISPERSIÓN

En este apéndice se detalla la metodología para predecir el tensor de dispersión pasiva, solucionado el problema de cerradura asociado, para un arreglo lineal de partículas cuadradas y cilíndricas, usando la herramienta computacional avanzada COMSOL Multiphysics.

#### B.1. Solución para $\mathbf{f}_\beta$

La definición del tensor de dispersión total se define en las ecuaciones (3.19), (3.20) y (3.21) del Capítulo 3, y se expresa de la forma siguiente:

$$\mathbf{D}_{A\beta}^* = \underbrace{\mathcal{D}_{A\beta} \left( \mathbf{I} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{f}_\beta dA \right)}_{\mathbf{D}_{eff}} + \underbrace{\langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \mathbf{f}_\beta \rangle^\beta}_{\mathbf{D}_{A\beta}} \quad (\text{B.1})$$

El cálculo de  $\mathbf{D}_{A\beta}^*$  esta asociado a la solución de la cerradura, problema de valores al frontera que se resuelve en representaciones periódica del medio poroso (celdas unitarias). El problema de cerradura se presenta en el Sistema de Ecuaciones (3.24), el cual se retoma a continuación:

$$\mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \mathbf{f}_\beta + \tilde{\mathbf{v}}_\beta = \nabla \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla \mathbf{f}_\beta \quad (\text{B.2a})$$

$$\text{C.F.1} \quad -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla \mathbf{f}_\beta = \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathcal{D}_{A\beta}, \text{ en } A_{\beta\sigma} \quad (\text{B.2b})$$

$$\text{Periodicidad:} \quad \mathbf{f}_\beta(\mathbf{r} + \ell_i) = \mathbf{f}_\beta(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{B.2c})$$

$$\text{Restricción 1:} \quad \langle \mathbf{f}_\beta \rangle^\beta = 0 \quad (\text{B.2d})$$

El sistema de ecuaciones anteriores se resuelve, de forma no acoplada, con el sistema de ecuaciones que describe el flujo de Stokes para un dominio periódico:

$$0 = -\nabla p_\beta + \mu \nabla^2 \mathbf{v}_\beta, \quad \text{en la fase } -\beta \quad (\text{B.3a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\beta = 0 \quad (\text{B.3b})$$

$$\text{C.F.2} \quad \mathbf{v}_\beta = 0, \quad \text{en } A_{\beta\sigma} \quad (\text{B.3c})$$

$$\text{Periodicidad:} \quad p_\beta(\mathbf{r} + \ell_i) = p_\beta(\mathbf{r}) + \delta_{jk} \Delta p, \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{B.3d})$$

$$\text{Periodicidad:} \quad \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{r} + \ell_i) = \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{B.3e})$$

La solución de los dos sistema de ecuaciones anteriores son definidos en el entorno COMSOL Multiphysics en las siguientes líneas de forma secuencial y utilizando los opciones del software en el idioma original (ingles). Se incluye una explicación del significado físico de cada una de los pasos realizados. La metodología para la solución del problema de cerradura, usando la interfase gráfica con el usuario, es la siguiente:

### B.1.1. Forma de las ecuación diferencial

1. Iniciar COMSOL Multiphysics: especificar **2D** en **Space Dimension**.
2. En la lista de **Application Modes** se selecciona **COMSOL Multiphysics** y se añaden los módulos: **Fluid Dynamics** → **Incompressible Navier-Stokes** → **Steady-state analysis** y **Convection and Diffusion** → **Convection and Diffusion** → **Stationary analysis**. Se da un clic en **Ok**. Los módulos anteriores definirán la Ecuación de Stokes para resolver la velocidad y, como consecuencia, las desviaciones de la velocidad ( $\tilde{\mathbf{v}}_\beta$ ), necesarios en el problema de cerradura y el cálculo de  $\mathbf{D}_{A\beta}$  [Ec. (B.1)]. El problema de cerradura para la dispersión pasiva se define adaptando, adecuadamente, las ecuaciones diferenciales del problema de Convección-Difusión general que fue añadido.

### B.1.2. Geometría

3. En **Options** → **constants** se definen, para una celda unitaria de cuadrados o cilindros en línea, según sea el caso, las siguientes constantes:

Para cilindros en línea la expresión para **a** es  $\text{sqrt}((1-\text{eb})/(\text{pi}))$  con un valor de radio igual a 0.447812. Las constantes en COMSOL Multiphysics representan los siguientes parámetros del problema de cerradura:  $\text{eb} \equiv \varepsilon_\beta$ ,  $\text{dp} \equiv \Delta p$ ,  $\text{Db} \equiv \mathcal{D}_{A\beta}$ . El significado geométrico de **a** se describió previamente en las Ecs. (A.3)-(A.5) del Apéndice A.1.

4. El dibujo de una celda unitaria de cuadrados y cilindros en línea, (Fig. A.1), usando COMSOL Multiphysics se trato previamente en el punto 4, del Apéndice A.1. La diferencia respecto a la realización de la geometría del Apéndice A.1 es la selección de la opción **Difference** en sustitución de la opción de **Union**.
5. Dibujada la celda unitaria, enseguida, se asignan las variables que requieren integración sobre la región que representa la fase  $\beta$  (variables promediadas). Esto se hace desde la pestaña **Options** → **Integration Coupling Variables** → **Subdomain Variables**. En los campos de la ventana se definen estas variables de integración como lo muestra la Tabla B.2. Lo que define  $\langle \mathbf{b}_\beta \rangle^\beta \equiv c/V\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{i} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \equiv U_{av}$  y  $\mathbf{j} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \equiv V_{av}$ .

### B.1.3. Ecuación de Stokes

6. Lo siguiente, es establecer el Sistema de Ecuaciones (B.2). Se selecciona la opción **Multiphysics** → **1 Incompressible Navier - Stokes (ns)** y se continúa en **Physics** → **Subdomain Settings**. En esta ventana definimos la Ecuación de Stokes como se

**Tabla B.1.** Parámetros definidos en COMSOL Multiphysics - Dispersión.

Name	Expression	Value	Description
eb	0.3	0.3	porosidad
a	sqrt(1-eb)	0.793725	longitud del cuadrado
dp	1e-6	1e-6	caída de presión periódica
Db	1e-8	1e-8	Difusión molecular

muestra la Tabla B.3. La utilidad de las opciones en la pestaña **Stabilization** están fuera de este apéndice.

- Las condiciones de frontera internas y externas en el dominio de cerradura se especifican en: **Physics** → **Boundary Settings** de acuerdo a la Tabla B.4. Las condiciones de frontera en las fronteras externas permiten establecer la periodicidad de la caída de presión, como se verá posteriormente.

### B.1.4. Definición del problema de cerradura en COMSOL Multiphysics

- A continuación se define el problema de cerradura para dispersión pasiva [Sis. de Ec. (B.2)] en términos de variables de COMSOL Multiphysics. En el menú **Multiphysics**

**Tabla B.2.** Variables de Integración - Dispersión.

Subdomain	Name	Expression
1	Vb	1
	Uav	u/Vb
	Vav	v/Vb
	Cav	c/Vb

**Tabla B.3.** Ecuación de Stokes.

$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + \eta(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T)] + \mathbf{T}$ $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$	
Navier-Stokes	COMSOL Multiphysics
$0 = -\nabla p_\beta + \mu \nabla^2 \mathbf{v}_\beta = 0$	<b>Subdomain:</b> 1 ; $\mathbf{u} \equiv \mathbf{v}_\beta$ <b>Physics:</b> $\rho = 0; \eta = 1$ <b>Stabilization:</b> Navier - Stokes: Ninguna selección

→ **Convection and Diffusion(cd)**, se continua en **Physics** → **Subdomain Settings**. En esta ventana se llenan los campos para la pestaña **Physics** como se muestra en la Tabla B.5.

En esta tabla el termino  $R \equiv \tilde{\mathbf{v}}_\beta$ , los componentes de  $\mathbf{v}_\beta$  se definen en las direcciones  $x$  y  $y$  mediante las variables  $u$  y  $v$ . Esta definición del problema de cerradura permite calcular el componente de dispersión en la dirección longitudinal  $\mathbf{i} \cdot \mathbf{D}_{A\beta}^* \cdot \mathbf{i} = D_{xx}^*$ . El cálculo del componente transversal se explica en el Apéndice B.2.

La forma de las condiciones de frontera para el problema de cerradura se establecen en **Physics** → **Boundary Settings**. En esta ventana los campos son llenados como se muestra la Tabla B.6.

**Tabla B.4.** Condiciones de frontera para el perfil de velocidad.

Condiciones de Frontera	COMSOL Multiphysics
$\mathbf{u} = \mathbf{0}$ $\mathbf{v}_\beta = 0$	<b>Boundaries:</b> 5-8 (interiores) <b>Boundary type:</b> Wall <b>Boundary condition:</b> No slip
$\eta(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \mathbf{n} = \mathbf{0}$	<b>Boundaries:</b> 1,4 (exteriores) <b>Boundary type:</b> Open boundary <b>Boundary condition:</b> No viscous stress
$\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}, \mathbf{t}[-p\mathbf{l} + \eta(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)] \mathbf{n} = \mathbf{0}$	<b>Boundaries:</b> 2-3 (exteriores) <b>Boundary type:</b> Symmetry boundary

**Tabla B.5.** Ecuación diferencial del problema de cerradura para  $\mathbf{f}_\beta$ .

$\nabla \cdot (-D\nabla c) = R - \mathbf{u} \cdot \nabla c, c = \text{concentration}$	
Ecuación gobernante	COMSOL Multiphysics
$\mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \mathbf{f}_\beta + \tilde{\mathbf{v}}_\beta = \nabla \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla \mathbf{f}_\beta$	<b>Subdomain:</b> 1; $c$ <b>D(isotropic) :</b> $D_b$ <b>R :</b> $-(u-Uav)$ <b>u:</b> $u$ ; <b>v:</b> $v$

Las condiciones en las fronteras externas son reemplazadas por las condiciones de periodicidad, siendo la condición de *Convective Flux* la menos restrictiva, por que permite el transporte difusivo a través de las fronteras externas.

9. La condición de periodicidad de la variable de cerradura, de la velocidad y de la presión se realiza desde **Physics** → **Periodic Boundary Conditions**. Los campos se completan de acuerdo a la Tabla B.7.

**Tabla B.6.** Condiciones de frontera para internas y externas - Dispersión.

Ecuación gobernante	COMSOL Multiphysics
$\mathbf{n} \cdot \mathbf{N} = N_0; \mathbf{N} = -D \nabla c + c \mathbf{u}$	
	<b>Boundaries:</b> 5 - 8 (interiores)
$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla \mathbf{f}_\beta = \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathcal{D}_{A\beta}$	<b>Flux</b>
	$N_0 : -n_x * Db$
	$\mathbf{n} \cdot (-D \nabla c)$
Para periodicidad	<b>Boundaries:</b> 1 - 4 (exteriores)
	<b>Convective Flux</b>

**Tabla B.7.** Condición de periodicidad - Dispersión.

	Source				Destination			
Periodicidad en la dirección $x$								
<b>Boundary Selection</b>	1				4			
<b>Expression</b>	p	u	v	c	p+dp	u	v	c
<b>Constraint</b>	name: pconst	uconstrx	vconstrx	cconstrx	order: 1	2	2	2
<b>Vertices</b>	1			2	3		4	
Periodicidad en la dirección $y$								
<b>Boundary Selection</b>	2				3			
<b>Expression</b>		u	v	c		u	v	c
<b>Constraint</b>	name:	uconstry	vconstry	cconstry	order:	2	2	2
<b>Vertices</b>	1			7	2		8	

La periodicidad en las direcciones  $x$  y  $y$  sólo se establecen para las variables  $\mathbf{u}$ ,  $\mathbf{v}$ ; dadas las condiciones periódicas:  $\tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{r} + \ell_i) = \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{r})$ ,  $i = 1, 2, 3$ ; y para  $\mathbf{c}$  de la condición  $\mathbf{f}_\beta(\mathbf{r} + \ell_i) = \mathbf{f}_\beta(\mathbf{r})$ ,  $i = 1, 2, 3$ . La periodicidad de  $\mathbf{p}$  sólo se establece en la dirección  $x$ ; en el campo *Destination*:  $\mathbf{p} + d\mathbf{p}$ , lo anterior define la caída de presión que genera el perfil de velocidad, estableciendo con esto la condición:  $p_\beta(\mathbf{r} + \ell_i) = p_\beta(\mathbf{r}) + \delta_{jk} \Delta p$ ,  $i = 1, 2, 3$ .

10. Las restricciones  $\langle \mathbf{f}_\beta \rangle^\beta = 0, p_\beta = 0$ , en el dominio de la celda unitaria se establecen en: **Physics** → **Equation System** → **Pointing Settings**. Para ello, se selecciona un punto arbitrario dentro de la celda unitaria, p. ej. **Point selection**: 4. La pestaña **Weak**, los campos son completados con la variable promediada, **Cav**, y la presión, **p**, de la siguiente forma: **constr**: [0 0 p Cav]; **constrf**: [0 0 test(p) test(Cav)]. La restricción para **p** establece una magnitud para el campo de la velocidad dentro de la celda unitaria.
11. Aquí, el problema de cerradura y el sistema de ecuaciones que describen la velocidad en la celda unitaria, han sido definidos en términos de variables de COMSOL Multiphysics. La solución del problema de cerradura se realiza estableciendo, primeramente, la discretización por elemento finito, lo que se realiza en la pestaña **Mesh** → **Initialize Mesh**. A continuación, se selecciona en **Solve** → **Solve Parameters** en el campo **Linear system solver**: Direct (UMFPACK). Posteriormente, la solución se realiza en **Solve** → **Solve Manager**, se seleccionan las opciones Initial value expression evaluated using current solution y Current solution de la pestaña **Initial Value**. Finalmente, desde la pestaña **Solver For**, del árbol de opciones que se observa, se selecciona primeramente **Incompressible Navier - Stokes(ns)** → **Solve** para resolver para la velocidad  $\mathbf{v}_\beta$  y después **Convection and Diffusion (cd)** → **Solve** para resolver el campo de la variable de cerradura  $\mathbf{f}_\beta$ . Se debe realizar un procedimiento de refinado de la malla con lo que se garantiza que los resultados numéricos son independientes del esquema de discretización. El refinamiento puede ser manual, seleccionando **Mesh** → **Initialize Refine Mesh** o automático desde **Solve** → **Solve Parameters**, seleccionando Adaptive mesh refinement.

### B.1.5. Cálculo del coeficiente de dispersión pasiva

12. La expresión que define el coeficiente de dispersión [Ec. (B.1)] establece una integral sobre la superficie de las fronteras internas y una integral sobre el volumen de la región

que representa la fase  $\beta$  de la celda unitaria. Las integrales se realiza en la pestaña **Postprocessing**  $\rightarrow$  **Boundary Integration** y **Subdomain Integration** de acuerdo a la Tabla B.8. Estas integrales permiten el cálculo el componente longitudinal de dispersión  $D_{xx}^*$ . La velocidad  $\langle v_\beta \rangle^\beta$  es necesaria para definir el número de Péclet de partícula:

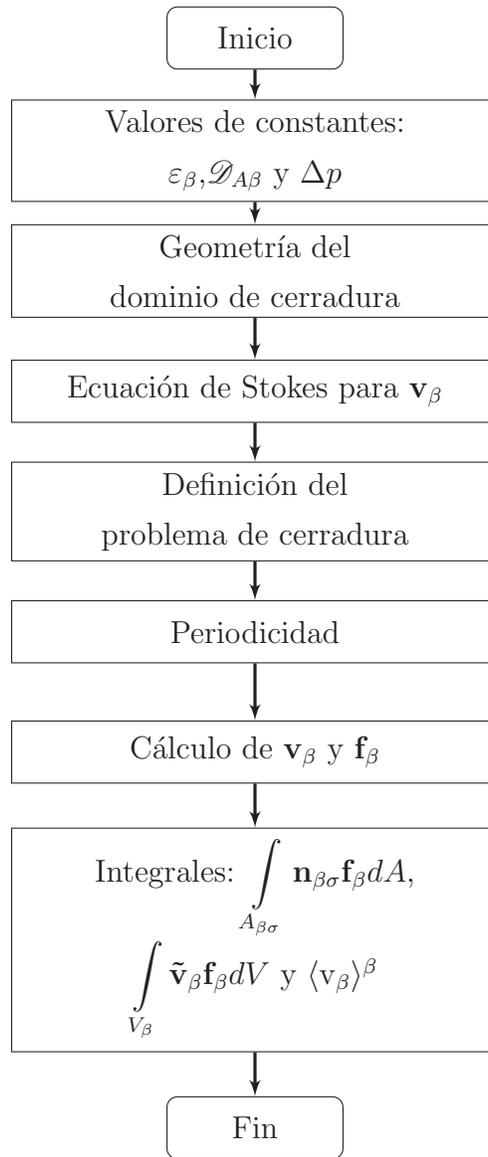
$$Pe_p = \frac{\langle v_\beta \rangle^\beta d_p}{\mathcal{D}_{A\beta}} \left( \frac{\varepsilon_\beta}{1 - \varepsilon_\beta} \right) \quad (\text{B.4})$$

- La utilidad práctica de resolver el problema de cerradura en COMSOL Multiphysics es la extracción del código en MATLAB, con el que se puede llevar a cabo el cálculo del tensor de dispersión  $\mathbf{D}_{A\beta}^*$ , variando parámetros como el número de Péclet y la porosidad. En **File**  $\rightarrow$  **Save As** se guarda un archivo con un nombre tipo Model M-file(\*.m), con lo que se extrae el código de COMSOL Multiphysics que puede ser modificado adecuadamente para calcular el tensor de dispersión, tanto longitudinal como transversal.

La solución del problema de cerradura para la dispersión pasiva presentado en este apéndice es para una celda unitaria con un arreglo lineal de partículas cuadradas o cilíndricas, pero puede ser extendido a diferentes modelos de celdas unitarias, incluyendo aquellas que

**Tabla B.8.** Integración - Dispersión

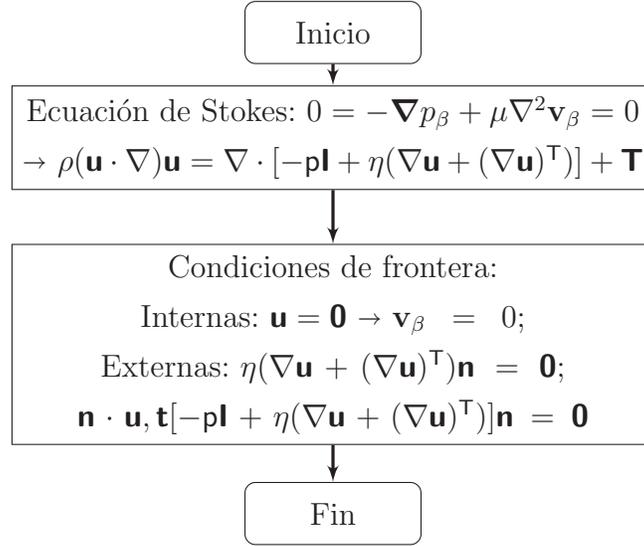
Integral	COMSOL Multiphysics
<b>Boundary Integration</b>	
	<b>Boundaries selection:</b>
$\int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{f}_\beta dA$	5-8(intteriores)
	<b>Expression:</b>
	nx_ns*b
<b>Subdomain Integration</b>	
	<b>Subdomain selection:</b>
$\int_{V_\beta} \tilde{\mathbf{v}}_\beta \mathbf{f}_\beta dV;$	1
	<b>Expression:</b>
$\mathcal{V}_\beta; \langle v_\beta \rangle^\beta$	(u-Uav)*c ; 1; U_ns/Vb



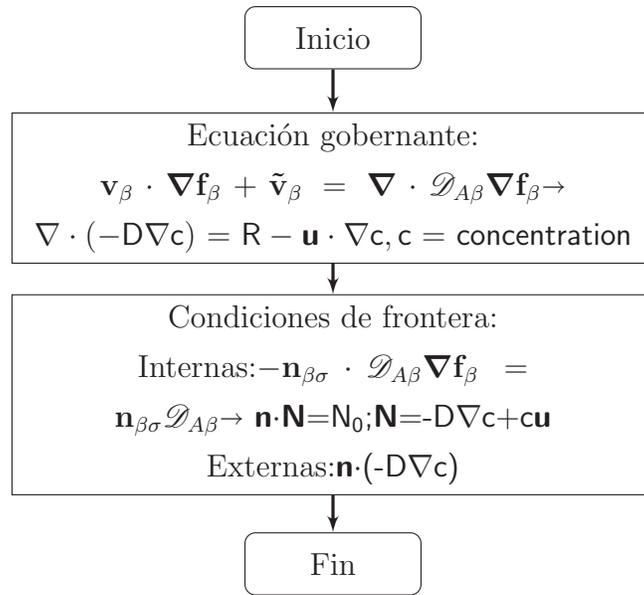
**Figura B.1.** Algoritmo de solución para el problema de cerradura de dispersión pasiva.

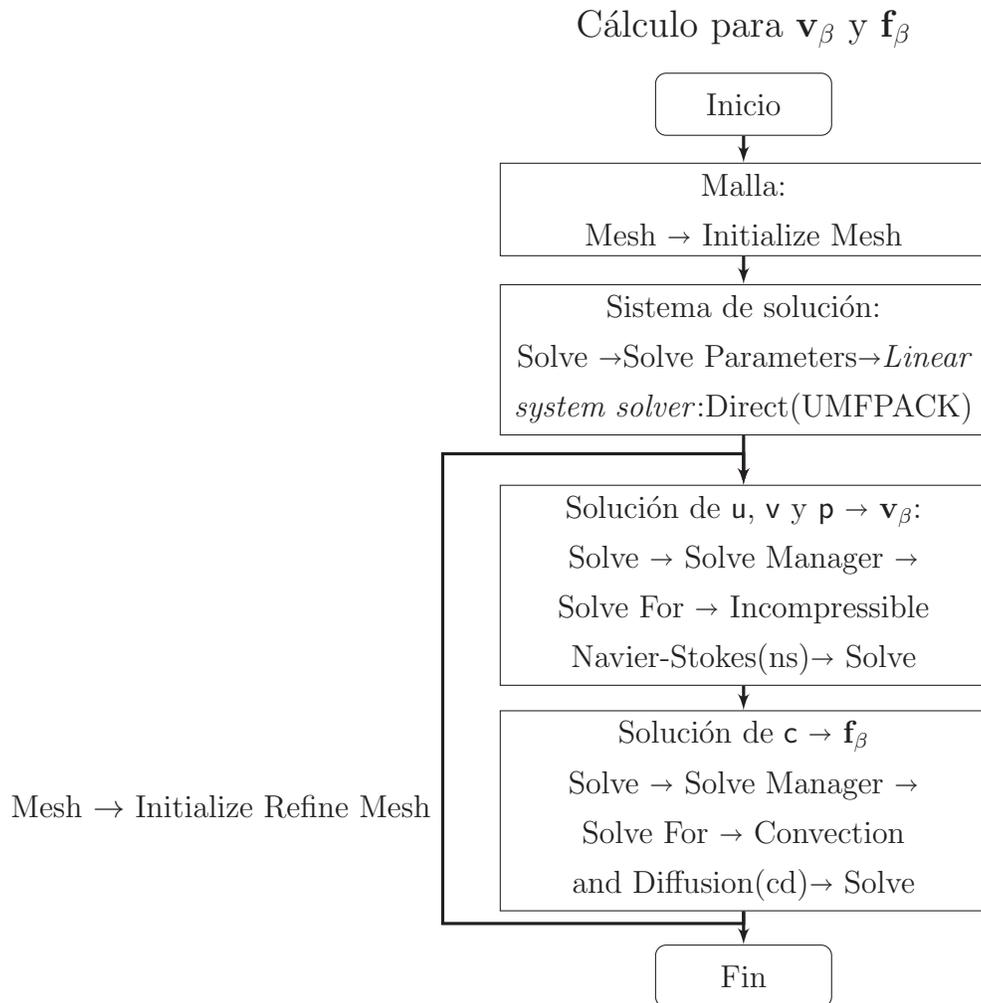
contengan características geométricas de un medio poroso real. La Figura B.1 muestra el algoritmo que resume el procedimiento de la solución del problema de cerradura para el coeficiente de dispersión. El algoritmo se puede extender a otras geometrías de celdas unitarias más complicadas geoméricamente.

Ecuación de Stokes para  $\mathbf{v}_\beta$

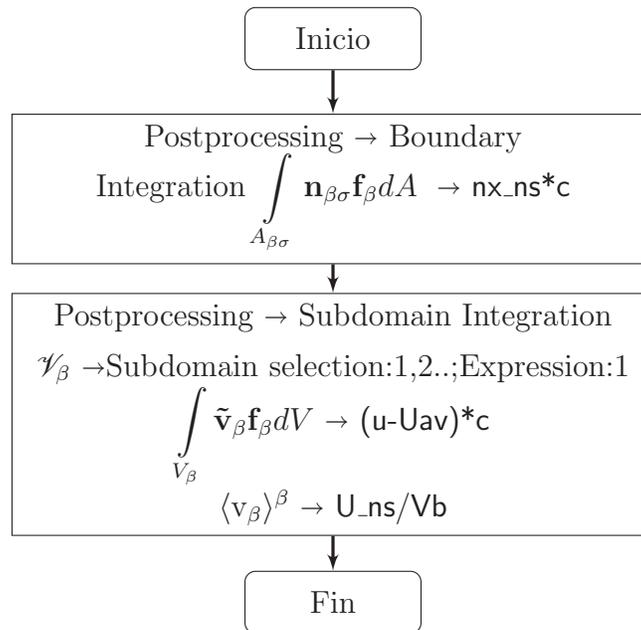


Definición del problema de cerradura





Integrales:  $\int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{f}_{\beta} dA$ ,  $\int_{V_{\beta}} \tilde{\mathbf{v}}_{\beta} \mathbf{f}_{\beta} dV$  y  $\langle v_{\beta} \rangle^{\beta}$



## B.2. Cálculo del coeficiente de dispersión pasiva

En esta sección del apéndice se sugieren las modificaciones pertinentes al código de COMSOL Multiphysics en la plataforma MATLAB para poder calcular el tensor de dispersión longitudinal y transversal para varios valores de  $\varepsilon_\beta$  y del número de Péclet de partícula ( $Pe_p$ ). Las modificaciones se presentan a continuación:

1. La interfase de MATLAB-COMSOL Multiphysics se inicia, abriendo *COMSOL Multiphysics with MATLAB* o desde COMSOL Multiphysics desde **File** → **Client/Server/MATLAB** → **Connect To MATLAB...**
2. En la plataforma de MATLAB se abre el archivo \*.m, obtenido en Apéndice B.1, en el cual primeramente se debe escribir al inicio: `clear; close all; clc; format long;`
3. En seguida, se crea un vector donde se incluyan los valores de la porosidad y otro del número de Péclet de partícula, para los que se calcula el tensor de dispersión. Se proponen los vectores de tal forma que se abarquen varios valores de  $\varepsilon_\beta$  y  $Pe_p$ :

```
eb = [ 0.3 0.5 0.7 0.9];
Pe = [1E-3 0.25E-2 0.5E-2 1E-2 5E-2 1E-1 5E-1 1 ...
1.5 2 3 4 5 7.5 10 11.5 12.5 15 20 30 40 50 75 100...
150 200 250 300 350 400 450 500 550 600 650 700 ...
750 800 850 900 950 1E3 2E3 3E3 4E3 5E3 6E3 7E3 ...
8E3 9E3 1E4];
```

4. A continuación, se calcula el número de elementos de estos vectores con las siguientes instrucciones:

```
n = numel(Pe); m=numel(eb);
```

5. Lo siguiente es dimensionalizar los vectores para el número de Péclet y el tensor de dispersión, como:

```
Pe_p= zeros(n,1); D = zeros(n,1);
```

6. A continuación definimos la variable `flag` con la que se elige el componente del tensor de dispersión a calcular: Si `% flag = 1 Calculo Dxx`, se calcula el componente longitudinal,  $D_{xx}$ . Para `% flag = 2 Calculo Dyy`; se calcula el componente transversal,  $D_{yy}$ .
7. El siguiente paso es iniciar el ciclo del problema para diferentes valores de porosidad, para ello se escribe en las siguientes líneas del programa: `for j = 1:m;` .
8. Posteriormente, se declaran las variables que modifican la porosidad, la caída de presión y la Difusión Molecular. Para una celda de cuadrados en línea, la variable `a`, se declara de la siguiente manera:

```
a = sqrt(1-eb(i)) ;
o para cilindros en línea
a = sqrt((1-eb(i))/pi);
dp1=1e-6
Db =1e-8;
```

9. También se declaran las variables para  $\Delta p$  y  $\varepsilon_\beta$ , modificando las siguientes líneas para declarar variables de MATLAB en el código de COMSOL:

```
% Constants
fem.const = {'eb', eb(j), ...
            'a', a , ...
            'dp1', dp1 , ...
            'Db', Db}
```

10. En la línea posterior a `% Initialize mesh` se declara la variable `mall` = 3 para variar la fineza de la malla de acuerdo con el número (malla <5, más fino, admite valores fraccionarios) y con ello, el número de elementos en el esquema de discretización.
11. Después de la línea `% Application mode 2`, que corresponde a la definición del problema de cerradura para la dispersión. Se modifican las siguientes líneas para poder calcular los componentes del tensor de dispersión de acuerdo al valor de `flag`.

```
clear bnd
switch flag
case 1
    bnd.N = 0, '-nx*Db';
case 2
    bnd.N = 0, '-ny*Db';
end
bnd.type = , 'Nc', 'N';
.
.
.
equ.u = 'u'

switch flag
case 1
    equ.R = 0, '-(u-Uav)';
case 2
    equ.R = 0, '-(v-Vav)';
end
equ.ind = 1;
```

12. A continuación, se comentan todas las instrucciones referentes a las gráficas de la solución para la velocidad. Se escriben las siguientes líneas o bien, se copian y modifican del código de las integrales calculadas, encontradas frecuentemente al final del código:

```

% Porosidad
I1=postint (fem, '1', ...
            'unit', 'm^2', ...
            'recover', 'off', ...
            'dl', 1);

% Velocidad Promedio <v>_ b^b
I2_1=postint (fem, 'U_ns/Vb', ...
              'unit', 'm^2', ...
              'recover', 'off', ...
              'dl', 1);

% Área superficial Ap
I5=postint (fem, '1', ...
            'unit', 'm', ...
            'recover', 'off', ...
            'edim', [5,6,7,8]);
dpar = 6*(1-I1)/I5 ; % diámetro de partícula
Pep1 = I2_1*dpar*eb/(1-eb); % Péclet para de dp1

```

13. El siguiente paso es iniciar el ciclo del problema para diferentes valores del número de  $Pe_p$ , para ello se escribe en las siguientes líneas del programa: `for i = 1:n; .`
14. En seguida, se escribe la siguiente línea: `dp = Pe(i) * (dp1 /Pep1); .` El significado físico de la relación anterior se deriva de la definición de la ley de Darcy [detalles en Whitaker (1999, C. 4)]:

$$\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta = -\varepsilon_\beta \frac{\mathbf{K}_\beta}{\mu_\beta} \cdot (\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta - \rho_\beta \mathbf{g}) \quad (\text{B.5})$$

donde  $\mathbf{K}_\beta$  es el tensor de permeabilidad. Si la magnitud de la velocidad intrínseca es  $\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$ , la constante de permeabilidad es  $\mathbf{K}_\beta$  y una caída de presión  $\Delta p$ , la ecuación anterior el  $Pe_p$  se puede reescribir como:

$$Pe_p = \underbrace{\varepsilon_\beta \frac{\mathbf{K}_\beta d_p}{\mathcal{D}_{A\beta}} \left( \frac{\varepsilon_\beta}{1 - \varepsilon_\beta} \right)}_{\text{cte}} \Delta p \quad (\text{B.6})$$

La ecuación anterior relaciona la caída de presión con la el número de Péclet de partícula. Para una caída de presión  $\Delta p_1$  el número de Péclet correspondiente es  $Pe_{p1}$ . Lo anterior permite relacionar una caída de presión para un número de Péclet de partícula específico, calculado dentro de una celda unitaria con una estructura dada, de la forma siguiente:

$$\Delta p = \frac{\Delta p_1}{Pe_{p1}} Pe_p \quad (\text{B.7})$$

La ecuación anterior es el punto central de este paso, ya que permite el cálculo del tensor de dispersión para valores específicos del número de  $Pe_p$ . Siendo los pasos anteriores necesarios para calcular el  $Pe_{p1}$  dada una  $\Delta p_1$ .

15. A continuación, en la siguiente línea se definen nuevamente las constantes, redefiniendo la variable de COMSOL Multiphysics `'dp'` por `dp` en vez de `dp1`:

```
% Constants
fem.const = {'eb', eb(j), ...
            'a', a , ...
            'dp', dp , ...
            'Db', Db}
```

16. Posteriormente, en las líneas siguientes del código, después de las línea comentada como: `% Application mode 2` , nuevamente se realizan las modificaciones hechas en el punto 11.

17. Después, es necesario modificar las líneas después de la línea

```
fem.xmesh=meshextend(fem)
```

de tal forma que se tenga escrito el siguiente código:

```
% Solve problem
fem.sol=femstatic (fem,...
                'u', 0, ...
                'solcomp', 'v', 'u', 'p' , ...
                'outcomp', 'v', 'u', 'c', 'p' , ...
                'blocksize', 'auto', ...
                'hnlm', 'on', ...
                'uscale', 'none');
```

```

% Save current fem structure for restart purposes
fem0=fem;
% Solve problem
fem.sol=femstatic (fem,...
                  'u', fem0.sol, ...
                  'solcomp', 'c', ...
                  'outcomp', 'v', 'u', 'c', 'p', ...
                  'blocksize', 'auto', ...
                  'hnlm', 'on', ...
                  'uscale', 'none');

```

18. Enseguida, se comentan todas las instrucciones referentes a las gráficas de la solución.
19. Los componentes del tensor de dispersión se calcula a partir de las integrales calculadas en COMSOL Multiphysics, como se muestran a continuación:

```

% Velocidad Promedio <v>_ b^b
I2=postint (fem, 'U_ns/Vb', ...
           'unit', 'm^2', ...
           'recover', 'off', ...
           'dl', 1);

switch flag
case 1
I3=postint (fem, 'c*(u-Uav)/Vb', ...
           'unit', 'm^2', ...
           'recover', 'off', ...
           'dl', 1);

I4=postint (fem, 'c*n_x/Vb', ...
           'unit', 'm', ...
           'recover', 'off', ...
           'dl', [5,6,7,8], ...
           'edim', 1);

```

```

case 2
I3=postint (fem, 'c*(v-Vav)/Vb', ...
            'unit', 'm2', ...
            'recover', 'off', ...
            'dl', 1);
I4=postint (fem, 'c*ny/Vb', ...
            'unit', 'm', ...
            'recover', 'off', ...
            'dl', [5,6,7,8], ...
            'edim', 1);

end

```

20. Las definiciones del  $\mathbf{D}_{eff}$  y  $\mathbf{D}_{A\beta}$ , con base a las integrales anteriores, se declaran de la siguiente manera:

```

Dh = -I3/Db;
Def = 1 + I4;

```

21. El coeficiente de dispersión y el número de Péclet de partícula se declaran de la forma siguiente:

```

D(i, j) = Def + Dh;
Pep(i) = I2*dpar*eb(j) / (1-eb(j));

```

22. Posteriormente, se indica que se desean ver los resultados que se obtengan en la pantalla, para ello se escribe la siguiente instrucción:

```

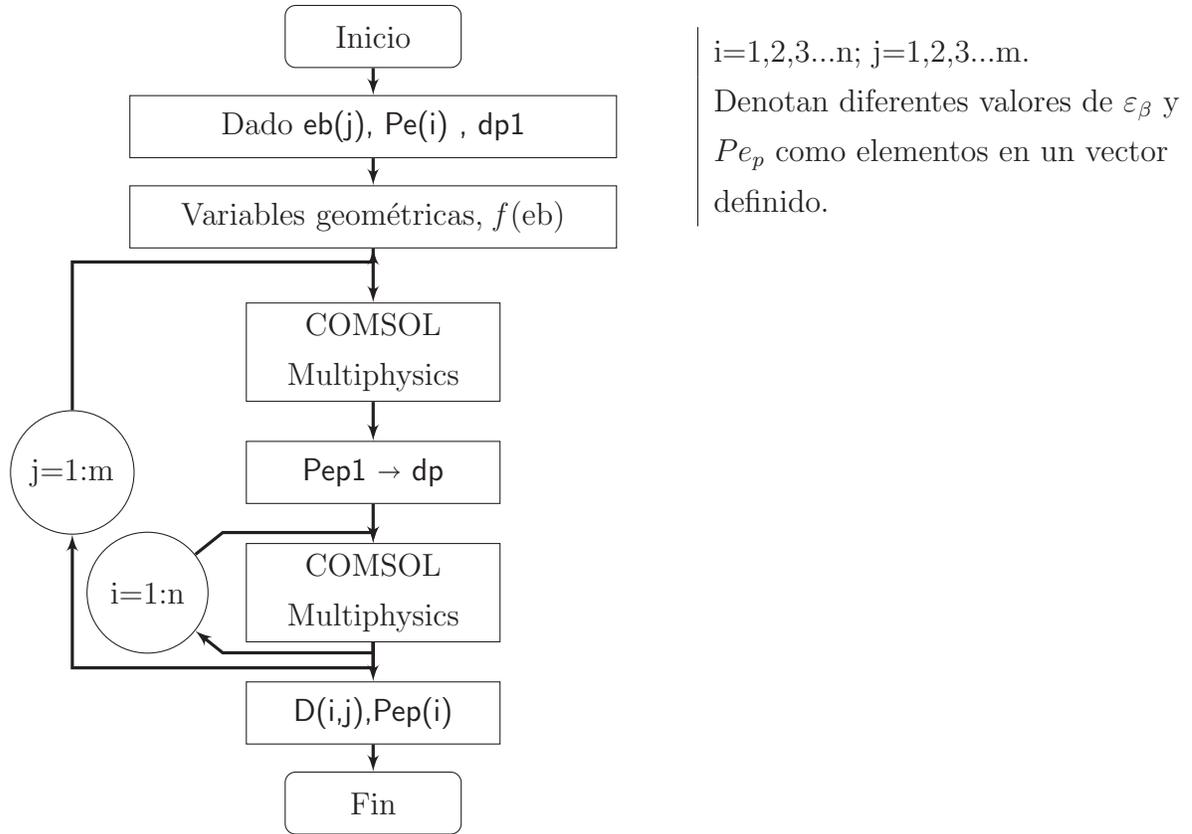
disp([Pep(i) D(i, j) eb(j)])

```

23. Finalmente, se escribe la siguiente instrucción: `flclear fem`, para liberar la memoria y de esa forma optimizar los recursos computacionales.

Estas modificaciones al código de COMSOL Multiphysics calculan el coeficiente de dispersión en los componentes longitudinal y transversal, modificando el valor de la variable `flag`, según sea el caso: `flag = 1`  $\equiv D_{xx}^*$  o `flag = 2`  $\equiv D_{yy}^*$ . La única variación respecto al uso de otras celdas unitarias, son las declaraciones en la definición de la geometría de otras estructuras periódicas. En la Figura B.2 se muestra un algoritmo que resume el uso de la

herramienta computacional COMSOL Multiphysics para el cálculo del tensor de dispersión.



**Figura B.2.** Algoritmo del cálculo del tensor de dispersión total.

### COMSOL Multiphysics - Dispersión

