



Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

Transferencia de calor entre un medio poroso
y un fluido

Carlos Gilberto Aguilar Madera

México, D.F., a Julio de 2011



Universidad Autónoma Metropolitana
UNIDAD IZTAPALAPA

**TRANSFERENCIA DE CALOR ENTRE UN
MEDIO POROSO Y UN FLUIDO**

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

Presenta:

M. en C. Carlos Gilberto Aguilar Madera

Asesor:

Dr. J. Alberto Ochoa Tapia

Agradecimientos

A mi asesor, el Dr. J. Alberto Ochoa Tapia, al cual estoy profundamente agradecido por darme la oportunidad de trabajar en este proyecto y por guiarme apropiadamente durante toda esta etapa.

Al Dr. Francisco J. Valdés Parada, quien a pesar de no haber sido mi asesor ni sinodal, parte de este trabajo contiene su espíritu a través de las discusiones fructíferas que tuve con él. Gracias Paco.

A los profesores: Alberto Soria López, Elizabeth Salinas Barrios, Eduardo Ramos Mora, Gilberto Espinosa Paredes, Octavio Cazares Candia y Benoît Goyeau, quienes como revisores contribuyeron a mejorar notablemente la presente tesis. Gracias por el tiempo dedicado a esto.

Al montón de amigos que tengo y que afortunadamente siempre están allí para hacerme la vida más amena.

A mi familia, quienes a pesar de la distancia, siempre he sentido su apoyo: Juana, Javier, Cristo y Jorge. A mi abuela Carmen y a la memoria de mi abuelo Chano (qepd).

A mi esposa Karla quien siempre está conmigo en las buenas y en las malas. Eres un pilar muy fuerte en mi vida, y más con el fruto que viene.

Finalmente, al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por el apoyo económico brindado.

Resumen

El modelado del transporte de calor entre dos distintas regiones homogéneas, como las de un medio poroso y una región de fluido libre puede llevarse a cabo mediante dos diferentes alternativas. La primera consiste en utilizar una sola ecuación efectiva válida en todo el sistema con coeficientes dependientes de la posición (modelo de un solo dominio). Tales coeficientes pueden experimentar variaciones rápidas en la zona donde ocurren cambios significativos en la microestructura (inter-región). En la segunda alternativa se utiliza una ecuación efectiva con coeficientes constantes para cada región homogénea (modelo de dos dominios). Esto crea la necesidad de introducir una frontera hipotética (superficie divisoria) que separe a las regiones homogéneas, y a la cual se le asocian las condiciones de frontera que acoplan a las ecuaciones efectivas de las regiones adyacentes. Se ha demostrado que ambos modelos se encuentran relacionados principalmente mediante la información contenida en la inter-región.

En el presente trabajo se utiliza el método del promedio volumétrico para derivar las ecuaciones efectivas del modelo de un solo dominio, para el transporte de calor convectivo y difusivo bajo equilibrio y no equilibrio local térmico. Además, se derivan y resuelven los problemas de cerradura que permiten predecir las variaciones espaciales de los coeficientes efectivos. Ya con el modelo cerrado, éste se resolvió y los perfiles de temperatura se compararon con resultados de simulaciones numéricas directas y en un caso de aplicación práctica. Finalmente, con la disponibilidad de las variaciones espaciales de los coeficientes efectivos, se derivan las condiciones de salto para la temperatura y el flux de calor y se predicen los coeficientes que contienen mediante la solución de los problemas de cerradura macroscópicos asociados. Como ejemplo, se estudia el caso de transporte de calor unidireccional, transitorio y conductivo de calor.

ÍNDICE GENERAL

Índice general	I
Índice de figuras	V
Índice de tablas	IX
Nomenclatura	XI
Introducción	1
1. Revisión bibliográfica	7
1.1. Escalamiento del transporte de calor	7
1.2. Análisis de la validez del equilibrio local térmico	10
1.3. Caracterización del transporte entre regiones homogéneas	14
1.3.1. Propuestas empíricas	14
1.3.2. Propuestas metodológicas	17
Objetivos	25
I El modelo de un solo dominio	27
2. Ecuaciones de transferencia generalizadas	29
2.1. Ecuaciones puntuales	29

2.2.	Promediado volumétrico	31
2.2.1.	El modelo de no equilibrio local térmico	33
2.2.2.	El modelo de equilibrio local térmico	37
2.3.	Condiciones de frontera para los modelos promedio	39
3.	Predicción de coeficientes efectivos y comparación con DNS	41
3.1.	Predicción de coeficientes efectivos	41
3.1.1.	Efecto de la intensidad de flujo y de las conductividades térmicas	41
3.1.2.	Efecto del contacto partícula-partícula	47
3.2.	Comparación con simulación numérica directa	54
4.	Caso de estudio: Intercambiador de calor con inserto poroso	61
4.1.	Introducción	61
4.2.	Descripción del problema	63
4.3.	Solución integral implícita del campo de velocidad	66
4.3.1.	Dependencia espacial de la porosidad y la permeabilidad	66
4.3.2.	Solución implícita con funciones de Green	72
4.4.	Determinación del campo de temperatura promedio	77
4.5.	Resultados y discusión	79
4.5.1.	Comportamiento hidrodinámico	79
4.5.2.	Comportamiento térmico	83
II	El modelo de dos dominios	91
5.	Condiciones de salto completas para el modelo de equilibrio local térmico	93
5.1.	Desviaciones macroscópicas de la temperatura	93
5.2.	Problemas de cerradura	99
5.3.	Condición de salto	103
5.4.	Solución analítica de los modelos macroscópicos	106
5.5.	Resultados y discusión	108
5.6.	Posición óptima de la superficie divisoria	113
6.	Condiciones de salto: caso general	117
6.1.	Ecuaciones gobernantes	117

6.2. Desviaciones macroscópicas de la temperatura	118
6.3. Problemas de cerradura	122
6.4. Condiciones de salto	124
Conclusiones	129
Comentarios finales	133
Bibliografía	135
Apéndices	A-1
A. Problemas de cerradura	A-1
A.1. Cerradura para el modelo de no equilibrio local térmico	A-1
A.2. Modelo de equilibrio local térmico	A-12
B. Dependencia espacial de coeficientes efectivos	B-1
B.1. Tensores térmicos	B-1
B.2. Coeficiente de transferencia de calor	B-3
B.3. Coeficientes efectivos tipo-convectivo	B-4

ÍNDICE DE FIGURAS

1.	Modelos de uno y dos dominios para el transporte entre regiones homogéneas.	3
2.	Sistema compuesto de un medio poroso homogéneo adyacente a una región de solo fluido.	4
2.1.	Sistema multifásico mostrando las regiones y fases homogéneas, el volumen promediante y longitudes características.	30
2.2.	Vectores asociados con el dominio de promediado.	32
2.3.	Dominio de solución para los modelos promedio.	40
3.1.	Tipos de modelos periódicos para representar la estructura porosa.	42
3.2.	Dependencia espacial de tensores térmicos en función de la relación de conductividades térmicas.	44
3.3.	Dependencia espacial del tensor térmico efectivo total para diferentes valores de la relación de conductividades térmicas.	45
3.4.	Dependencia espacial de $(K_{\beta\beta}^*)_{xx}$ en función del número de Péclet de celda. .	46
3.5.	Dependencia espacial del coeficiente de transferencia de calor intersticial para diferentes valores de la relación de conductividades térmicas.	47
3.6.	Dependencia espacial del vector velocidad total para diferentes valores de la relación de conductividades térmicas.	48
3.7.	Ejemplos de malla utilizada para resolver los problemas de cerradura en celdas en el seno del medio poroso y en la inter-región	49
3.8.	Dependencia de $(K_{\beta\beta,\omega}^*)_{xx}$ y $(K_{\sigma\sigma,\omega})_{xx}$ con κ y la relación c/a	50

3.9. Dependencia de $(K_{\beta\sigma,\omega}^*)_{xx}$ y $(K_{eff,\omega}^*)_{xx}$ con κ y la relación c/a y comparación con celdas unitarias simples.	51
3.10. Dependencia de $a_v h$ con κ y la relación c/a	52
3.11. Dependencia de $(K_{\beta\beta}^*)_{xx}$, $(K_{\beta\sigma}^*)_{xx}$, $(K_{eff}^*)_{xx}$ y $(K_{\sigma\sigma})_{xx}$ con la posición en la inter-región y la geometría de la microestructura porosa.	53
3.12. Dependencia de $a_v h$ con la posición en la inter-región y la geometría de la microestructura porosa.	54
3.13. Dominio utilizado para la simulación numérica directa.	56
3.14. Comparación de los perfiles de temperatura obtenidos con los modelos de equilibrio y no equilibrio con los obtenidos del DNS	60
4.1. Intercambiadores de calor con insertos porosos.	62
4.2. Configuración de un intercambiador de calor de placas con inserto poroso.	64
4.3. Celdas unitarias para la predicción de coeficientes efectivos colocadas en diferente posición en la inter-región.	66
4.4. Dependencia espacial de la porosidad y su derivada en la inter-región.	68
4.5. Dependencia espacial de la permeabilidad para predicciones a partir de celdas unitarias bidimensionales y diferentes valores de la porosidad.	69
4.6. Dependencia espacial de la permeabilidad para predicciones a partir de celdas unitarias tridimensionales y diferentes valores de la porosidad.	70
4.7. Predicción de la permeabilidad en el seno del medio poroso en función de la porosidad utilizando celdas bi- y tri-dimensionales.	72
4.8. Diferencia de la permeabilidad cuando se predice en celdas unitarias bi- y tri-dimensionales.	73
4.9. Gráfica de la función de Green dada por la Ecuación (4.35).	78
4.10. Perfil de velocidad adimensional en el canal con inserto poroso para diferentes valores de la porosidad y la permeabilidad calculada con celdas bi- y tri-dimensionales.	81
4.11. Perfil de velocidad adimensional en el canal para diferentes tamaños del inserto poroso y de la altura del canal.	82
4.12. Efecto del tamaño del inserto poroso y de la porosidad sobre el flujo volumétrico en el canal.	83

4.13. Efecto del número de Péclet sobre el campo de temperatura adimensional en el canal poroso.	85
4.14. Efecto de la relación de conductividades térmicas sobre el campo de temperatura adimensional en el canal.	86
4.15. Efecto del tamaño de inserto poroso sobre el campo de temperatura adimensional en el canal.	87
4.16. Efecto de la porosidad del inserto poroso sobre el campo de temperatura adimensional en el canal.	88
4.17. Efecto de la relación de conductividades térmicas y de la porosidad del inserto poroso sobre el número de Nusselt local.	89
4.18. Efecto del número de Péclet y del tamaño del inserto poroso sobre el número de Nusselt local.	90
5.1. Perfiles de temperatura típicos bajo los modelos de uno y dos dominios. . . .	95
5.2. Forma típica de la distribución de las desviaciones macroscópicas de la temperatura en la región frontera.	97
5.3. Variación lineal de la conductividad térmica efectiva en la inter-región. . . .	102
5.4. Ejemplos de los campos de las variables de cerradura macroscópicas	104
5.5. Dependencia de los coeficientes de salto con el tamaño de la región frontera. . .	109
5.6. Dependencia de g_w con la porosidad y la relación de conductividades térmicas. Aquí se utilizó la Ecuación (3.4) para predecir la conductividad efectiva en el medio poroso.	110
5.7. Valores de g_w utilizando un arreglo periódico de cilindros (Ecuación (3.4)) y de esferas (Ecuación (3.6)) para predecir la conductividad térmica efectiva en el seno del medio poroso.	110
5.8. Valor de y_0 en función de la porosidad y de las conductividades térmicas. . .	111
5.9. Perfiles de temperatura usando el modelo ODA y el TDA con condiciones de salto y de continuidad.	113
6.1. Dominios de solución en un sistema medio poroso-fluido.	119
A.1. Celdas unitarias representativas de la inter-región en diferentes posiciones. . .	A-9
A.2. Ejemplos del campo de las variables de cerradura en celdas representativas de la inter-región.	A-10

B.1. Dependencia espacial de los tensores térmicos en función de la porosidad. . . . B-4

B.2. Dependencia espacial de $a_v h$ en función de la porosidad. B-5

B.3. Efecto de la porosidad sobre los coeficientes efectivos tipo-convectivo. B-10

B.4. Efecto de la relación de conductividades térmicas sobre los coeficientes
 efectivos tipo-convectivo. B-11

B.5. Efecto del número de Péclet de celda sobre los coeficientes efectivos tipo-
 convectivo. B-12

ÍNDICE DE TABLAS

3.1. Dependencia de los coeficientes de la Ecuación (3.5) con la relación de conductividades térmicas y con la porosidad.	59
3.2. Error de los modelos promedio.	59
4.1. Coeficientes involucrados en la Ecuación (4.6) para predicciones de la permeabilidad a partir de celdas unitarias bidimensionales.	68
4.2. Coeficientes involucrados en la Ecuación (4.6) para predicciones de la permeabilidad a partir de celdas unitarias tridimensionales.	71
5.1. Coeficientes involucrados en la Ecuación (5.41) para g_{ω}	109
5.2. Porcentaje de mejora en las predicciones de la temperatura con el modelo TDA con condiciones de salto.	112

Letras latinas no negritas

A_i	Parámetro de ajuste,	Adimensional
a	Ancho de las partículas cuadradas sólidas,	m
a_i	Parámetro de ajuste,	Adimensional
a_v	Area interfacial por unidad de volumen,	m^{-1}
$A_{\beta\sigma}$	Interfase fluido-sólido,	
$A_{\omega\eta}$	Lugar geométrico de la frontera medio poroso-fluido,	
b_{mp}	Variable de cerradura macroscópica que mapea las desviaciones macroscópicas de la temperatura en la región- m con la fuente $(d\langle T \rangle_p / dy) \Big _{y_0}$ ($m, p = \beta, \sigma$),	m
C_P	Capacidad calorífica ponderada con la fracción másica,	$J \cdot (Kg \cdot K)^{-1}$
c	Ancho de los brazos conectores en celdas con contacto partícula-partícula,	m
c_i	Parámetro de ajuste,	Adimensional
c_P	Capacidad calorífica específica a presión constante,	$J \cdot (Kg \cdot K)^{-1}$
Da	Número de Darcy,	Adimensional
d_p	Diámetro de partícula,	m
e	Espesor del inserto poroso,	m
G	Función de Green,	Adimensional

g_m	Coeficiente de salto asociado con la derivada $(d\langle T \rangle_m / dy) _{y_0}$ ($m = \beta, \sigma$),	m
H	Altura del canal,	m
h	Coeficiente de transferencia de calor interfacial,	$W \cdot (m^2 \cdot K)^{-1}$
$h_{\beta\sigma}$	Coeficiente de salto para el transporte de calor,	$W \cdot (m^2 \cdot K)^{-1}$
K_{eff}	Conductividad térmica efectiva,	$W \cdot (m \cdot K)^{-1}$
K_β	Permeabilidad,	m^2
$K_{\beta,\omega}$	Permeabilidad en el seno del medio poroso,	m^2
$K_{\sigma\sigma}$	Conductividad térmica efectiva del sólido,	$W \cdot (m \cdot K)^{-1}$
$k_{\beta\sigma}$	Conductividad térmica <i>mezclada</i> ,	$W \cdot (m \cdot K)^{-1}$
k_m	Conductividad térmica de la fase- m ($m = \beta, \sigma$),	$W \cdot (m \cdot K)^{-1}$
L	Longitud característica de la macro-escala,	m
\mathcal{L}	Operador diferencial,	
L_c	Longitud característica asociada con el término $\nabla^2 \langle T \rangle$,	m
L_m	Tamaño de la región- m ($m = \omega, \eta$),	m
$L_{\rho c_p}$	Longitud característica asociada con la convección en la macroescala,	m
L_{total}	Longitud del canal,	m
ℓ	Longitud característica de la micro-escala,	m
ℓ_{cell}	Ancho de la celda unitaria de solución,	m
ℓ_i	Vectores del patrón de periodicidad,	m
ℓ_m	Longitud característica de la fase- m ($m = \beta, \sigma$),	m
$l_{\beta\sigma}$	Longitud característica asociada con el sistema fluido-sólido en la microescala,	m
Nu	Número de Nusselt,	Adimensional
\hat{P}	Presión normalizada,	Adimensional
$\langle P \rangle_x$	Presión promedio evaluada en la posición x ,	Pa
$\langle p_\beta \rangle^\beta$	Presión promedio intrínseca,	Pa
Pe	Número de Péclet,	Adimensional
$Pr_{eff,\beta}$	Número de Prandtl efectivo basado en el fluido intersticial,	Adimensional
Q	Flujo volumétrico,	$m^3 \cdot s^{-1}$
R	Coeficiente de correlación estadístico,	

Re_{dp}	Número de Reynolds basado en el diámetro del poro,	Adimensional
r	Coordenada radial,	m
r_0	Longitud característica del dominio de promediado,	m
s_m	Variable de cerradura microscópica que relaciona las variables $(\langle T_m \rangle^m - \langle T_p \rangle^p) \longleftrightarrow \tilde{T}_m (m, p = \beta, \sigma)$. Variable de cerradura macroscópica que relaciona las variables $(\langle T \rangle_\eta _{y_0} - \langle T \rangle_\omega _{y_0}) \longleftrightarrow \hat{T}_m (m = \omega, \eta)$,	Adimensional. Adimensional
s_m^0	Variable de cerradura microscópica asociada con $s_m (m = \beta, \sigma)$,	$W^{-1} \cdot (m^3 \cdot K)$
s_{mp}	Variable de cerradura para la desviación macroscópica \hat{T}_m asociada con la fuente $\langle T \rangle_p _{\mathbf{x}_0} (m, p = \omega, \eta)$,	Adimensional
$\langle T \rangle$	Temperatura promedio en el modelo de equilibrio local térmico,	K
$\langle T \rangle^+$	Temperatura promedio en el lado de la región de fluido,	K
$\langle T \rangle^-$	Temperatura promedio en el lado del medio poroso,	K
$\langle T \rangle_{wall}$	Temperatura promedio en la pared del canal,	K
t	Tiempo,	s
t_i	Parámetro de ajuste,	Adimensional
T_m	Temperatura puntual de la fase- $m (m = \beta, \sigma)$,	K
$T_{m,p}$	Temperatura promedio de la fase- m evaluada en la región- $p (m = \beta, \sigma; p = \omega, \eta)$,	K
\tilde{T}_m	Desviación espacial microscópica de la temperatura en la fase- $m (m = \beta, \sigma)$,	K
\hat{T}_m	Desviación del equilibrio local térmico de la temperatura de la fase- $m (m = \beta, \sigma)$,	K
\widehat{T}_m	Desviación espacial macroscópica de la temperatura en la región- $m (m = \omega, \eta)$,	K
$\langle T_m \rangle$	Temperatura promedio de la fase- $m (m = \beta, \sigma)$,	K
$\langle T \rangle_m$	Temperatura promedio en la región- $m (m = \omega, \eta)$,	K
$\langle T_m \rangle^m$	Temperatura promedio intrínseca de la fase- m en el modelo de no equilibrio $(m = \beta, \sigma)$,	K

u_β	Componente- x de la velocidad,	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
\hat{u}_β	Componente- x de la velocidad normalizado,	Adimensional
u_ω	Componente- x de la velocidad en el seno del medio poroso,	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
V	Dominio de promediado,	
\mathcal{V}	Magnitud del volumen de promediado,	m^3
v_β	Componente- y de la velocidad,	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
\hat{v}_β	Componente- y de la velocidad normalizado,	Adimensional
V_m	Porción de la región- m donde se resuelve el problema de las desviaciones espaciales macroscópicas ($m = \omega, \eta$),	
\mathcal{V}_m	Volumen de la fase- m contenido en el dominio de promediado ($m = \beta, \sigma$). Volumen de la región V_m ($m = \omega, \eta$),	$\text{m}^3 \cdot \text{m}^3$
$\langle v_\beta \rangle$	Magnitud de la velocidad superficial,	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$\langle v_\beta \rangle_\omega^\beta$	Magnitud de la velocidad superficial en el seno del medio poroso,	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
x	Coordenada tangente a la superficie divisoria,	
\hat{x}	Coordenada- x normalizada,	Adimensional
x_i	Parámetro de ajuste,	Adimensional
y	Coordenada normal a la superficie divisoria,	
\hat{y}	Coordenada- y normalizada,	Adimensional
y_0	Posición de la superficie divisoria,	m
y'_0	Posición de la superficie divisoria donde se satisface continuidad en el campo de la temperatura,	m
$y_{0,m}$	Posición de la superficie divisoria donde se satisface que el flux de las desviaciones macroscópicas evaluadas en la frontera en la región- m es igual a cero ($m = \omega, \eta$),	m
y_η	Porción de la región frontera incluida en la región fluida,	m
y_ω	Porción de la región frontera incluida en la región porosa,	m
W	Anchura del canal,	m
w	Peso utilizado en esquemas iterativos,	

Letras latinas negritas

\mathbf{B}_{mp}	Tensor de cerradura para la desviación macroscópica \widehat{T}_m asociado con la fuente $\nabla\nabla\langle T\rangle_p _{\mathbf{x}_0}$ ($m, p = \omega, \eta$),	m^2
\mathbf{b}_m	Vector de cerradura microscópico que mapea las desviaciones espaciales de la temperatura de la fase- m con la fuente $\nabla\langle T\rangle$ ($m = \beta, \sigma$),	m
\mathbf{b}_{mp}	Vector de cerradura microscópico en la ecuación promedio de la fase- m asociada con la fuente $\nabla\langle T_p\rangle^p$ ($m, p = \beta, \sigma$),	m
\mathbf{C}_β	Tensor de cerradura para la predicción de la permeabilidad,	Adimensional
$\mathbf{C}_{\beta\sigma}$	Tensor de tortuosidad asociado con la diferencia de temperaturas promedio entre el fluido y el sólido,	$\text{W}\cdot(\text{m}\cdot\text{K})^{-1}$
\mathbf{c}_{mp}	Vector de cerradura para la desviación macroscópica \widehat{T}_m asociado con la fuente $\nabla\langle T\rangle_p _{\mathbf{x}_0}$ ($m, p = \omega, \eta$),	m
\mathbf{D}_β	Tensor de cerradura para la predicción de la permeabilidad,	m^2
\mathbf{d}_β	Vector de cerradura para la predicción de la permeabilidad,	m
\mathbf{F}_m	Fuente asociada con el gradiente $\nabla\nabla\langle T\rangle_m _{\mathbf{x}_0}$ en la ecuación diferencial para \widehat{T}_m ($m = \omega, \eta$),	$\text{W}\cdot(\text{m}\cdot\text{K})^{-1}$
\mathbf{f}_m	Fuente asociada con el gradiente $\nabla\langle T\rangle_m _{\mathbf{x}_0}$ en la ecuación diferencial para \widehat{T}_m ($m = \omega, \eta$),	$\text{W}\cdot(\text{m}^2\cdot\text{K})^{-1}$
f_m	Fuente asociada con el término $\langle T\rangle_m _{\mathbf{x}_0}$ en la ecuación diferencial para \widehat{T}_m ($m = \omega, \eta$),	$\text{W}\cdot(\text{m}^3\cdot\text{K})^{-1}$
\mathbf{g}	Constante de gravedad,	$\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$
\mathbf{g}_m^I	Coefficiente vectorial en la condición de salto para la temperatura asociado con el término $\nabla\langle T\rangle_m _{\mathbf{x}_0}$ ($m = \omega, \eta$),	m
\mathbf{g}_m^{II}	Coefficiente vectorial en la condición de salto para el flux de calor asociado con el término $\nabla\langle T\rangle_m _{\mathbf{x}_0}$ ($m = \omega, \eta$),	m
\mathbf{H}_m^I	Coefficiente tensorial en la condición de salto para la temperatura asociado con el término $\nabla\nabla\langle T\rangle_m _{\mathbf{x}_0}$ ($m = \omega, \eta$),	m^2

\mathbf{H}_m^{II}	Coeficiente tensorial en la condición de salto para el flux de calor asociado con el término $\nabla \nabla \langle T \rangle_m _{\mathbf{x}_0}$ ($m = \omega, \eta$),	m^2
\mathbf{h}_β	Vector de cerradura para la predicción de la permeabilidad,	m^{-1}
\mathbf{I}	Tensor identidad,	Adimensional
\mathbf{K}_{eff}^*	Coeficiente de dispersión térmico total en el modelo de equilibrio local térmico,	$\text{W} \cdot (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$
\mathbf{K}_{mp}	Coeficiente térmico efectivo en la ecuación promedio de la fase- m asociado al término $\nabla \langle T_p \rangle^p$ en el modelo de no equilibrio local térmico ($m, p = \beta, \sigma$),	$\text{W} \cdot (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$
$\mathbf{K}_{m,\omega}$	Coeficiente térmico efectivo para la fase- m en el seno del medio poroso bajo el modelo de no equilibrio local térmico ($m = \beta, \sigma$),	$\text{W} \cdot (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$
\mathbf{K}_β	Tensor de permeabilidad,	m^2
\mathbf{l}_i	Vectores del patrón de periodicidad,	m
\mathbf{n}	Vector normal unitario dirigido hacia afuera del dominio de solución para los cálculos del DNS,	Adimensional
\mathbf{n}_m	Vector normal unitario dirigido hacia afuera de la región V_m ($m = \omega, \eta$),	Adimensional
\mathbf{n}_{mp}	Vector normal unitario dirigido desde la fase- o región- m hacia la fase- o región- p ($m, p = \beta, \sigma$ ó $m, p = \omega, \eta$),	Adimensional
\mathbf{O}	Indica orden de magnitud,	
\mathbf{r}	Vector de posición,	m
\mathbf{r}_m	Vector que localiza a la fase- m con respecto a un marco de referencia externo ($m = \beta, \sigma$),	m
\mathbf{u}	Coeficiente efectivo tipo-convectivo total en el modelo de equilibrio local térmico,	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
\mathbf{u}_{mp}	Vector tipo-convectivo en la ecuación promedio de la fase- m asociado con el término $\langle T_p \rangle^p$ en el modelo de no equilibrio local térmico ($m, p = \beta, \sigma$),	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
\mathbf{v}_β	Campo de velocidad puntual,	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
$\hat{\mathbf{v}}_\beta$	Campo de velocidad normalizado,	Adimensional
$\tilde{\mathbf{v}}_\beta$	Desviación espacial del campo de velocidad,	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$

$\langle \mathbf{v}_\beta \rangle$	Campo de la velocidad superficial,	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
\mathbf{x}	Vector que localiza el centroide del volumen promediante con respecto a un marco de referencia externo,	m
\mathbf{x}_0	Posición de la superficie divisoria,	m
\mathbf{x}_η	Vector que localiza el seno de la región de fluido,	m
\mathbf{x}_ω	Vector que localiza el seno del medio poroso homogéneo,	m
\mathbf{y}_m	Vector que localiza a la fase- m con respecto al centroide del volumen promediante ($m = \beta, \sigma$),	m

Símbolos griegos

α	Coefficiente de deslizamiento para el transporte de cantidad de movimiento,	Adimensional
$\alpha_{\beta\sigma}$	Difusividad térmica <i>mezclada</i> ,	$\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
α_m	Difusividad térmica de la fase- m ($m = \beta, \sigma$),	$\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
α^I	Coefficiente en la condición de salto para la temperatura asociado con el término $\langle T \rangle_\eta \Big _{\mathbf{x}_0}$,	Adimensional
α^{II}	Coefficiente en la condición de salto para el flux de calor asociado con el término $\langle T \rangle_\eta \Big _{\mathbf{x}_0}$,	Adimensional
α_T	Coefficiente de deslizamiento térmico,	Adimensional
β	Coefficiente de salto para el transporte de cantidad de movimiento,	Adimensional
β_i	Coefficientes de salto para el transporte de cantidad de movimiento considerando efectos inerciales ($i = 1, 2$),	Adimensionales
Δ	Indica diferencia,	Adimensional
δ	Tamaño de la inter-región. Función delta de Dirac,	m. Adimensional
δ_i	Longitud característica asociada con el transporte de calor en la microescala para la fase- i ($i = \beta, \sigma$),	m
δV_m	Superficie externa de la región V_m ($m = \omega, \eta$),	
ε_m	Fracción volumétrica de la fase- m ($m = \beta, \sigma$),	Adimensional
$\varepsilon_{\beta,\omega}$	Fracción volumétrica en el seno poroso,	Adimensional
ε_ω	Mayor de la fracción volumétrica de las dos fases ($\omega = \beta, \sigma$),	Adimensional

Φ	Fuente térmica relacionada con las desviaciones de la condición de equilibrio local térmico. Fuente heterogénea relacionada con el problema de transporte de cantidad de movimiento en el canal,	$\text{J}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$. Adimensional
Φ_s	Fuente térmica de no equilibrio de exceso,	$\text{W}\cdot(\text{m}^2\cdot\text{K})^{-1}$
$\langle\Phi_\sigma\rangle^\sigma$	Fuente térmica homogénea promediada de fase,	$\text{W}\cdot(\text{m}^3\cdot\text{s})^{-1}$
κ	Relación de conductividades térmicas,	Adimensional
λ	Longitud característica en la condición de deslizamiento de la temperatura,	m
μ_{eff}	Viscosidad efectiva en el medio poroso,	Pa·s
μ_β	Viscosidad de la fase fluida,	Pa·s
Ω	Dominio de solución,	
$\langle\Omega\rangle_{\beta\sigma}$	Fuente térmica heterogénea promediada en el área,	$\text{J}\cdot(\text{m}^2\cdot\text{s})^{-1}$
Ω_m	Dominio de solución en la región- m para las desviaciones espaciales macroscópicas ($m = \omega, \eta$),	
$\langle\rho\rangle$	Densidad promediada espacialmente,	$\text{Kg}\cdot\text{m}^{-3}$
ρ_m	Densidad de la fase- m ($m = \beta, \sigma$),	$\text{Kg}\cdot\text{m}^{-3}$
$(\rho c_P)_{\beta\sigma}$	Capacidad calorífica <i>mezclada</i> ,	$\text{J}\cdot(\text{m}^3\cdot\text{K})^{-1}$
Θ	Temperatura adimensional,	Adimensional
Θ_m	Temperatura media,	Adimensional
ξ	Espesor de la inter-región,	m

Subíndices y superíndices

+	Indica el dominio de la región del fluido libre,
-	Indica el dominio de la región porosa,
cell	Relativo a la celda de solución,
H	Relativo a la altura del canal,
I	Coefficiente asociado con la condición de salto para el campo en el modelo de dos dominios,
II	Coefficiente asociado con la condición de salto para el flux en el modelo de dos dominios,
s	Cantidad de exceso,

x	Componente longitudinal,
y	Componente transversal,
β	Fase fluida,
η	Región homogénea del fluido libre,
ω	Región homogénea del medio poroso,
σ	Fase sólida,

Acrónimos

DNS	Direct Numerical Simulation (Simulación Numérica Directa),
GTE	Generalized Transfer Equation (Ecuación de Transferencia Generalizada),
LTE	Local Thermal Equilibrium (Equilibrio Local Térmico),
LTNE	Local Thermal Non-Equilibrium (No Equilibrio Local Térmico),
ODA	One-Domain Approach (Modelo de un Solo Dominio),
REV	Representative Elementary Volume (Volumen Elemental Representativo),
SAT	Spatial Averaging Theorem (Teorema del Promediado Espacial),
TDA	Two-Domain Approach (Modelo de Dos Dominios),

En la naturaleza es muy común encontrar sistemas compuestos de varias fases y también en aplicaciones hechas por el hombre. La descripción completa del transporte de propiedades tales como la velocidad, temperatura y masa en este tipo de sistemas, puede realizarse mediante la solución de las ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento, calor y masa en cada fase presente en el sistema, es decir, en la escala del continuo ó microescala. Sin embargo, existen serios problemas para llevar esto a cabo debido a la presencia de numerosas e irregulares fronteras interfaciales. Al respecto, es oportuno puntualizar lo siguiente:

- Es extremadamente complejo conocer la distribución exacta de cada una de las fases en el sistema, es decir, la posición de las fronteras interfaciales incluso en el caso más simple cuando se consideran medios rígidos y/o con estructura ordenada.
- Frecuentemente el tamaño completo del sistema multifásico es mucho mayor al tamaño característico de las fases individuales (disparidad de escalas), lo cual origina que el dominio de solución del problema luzca *gigantesco* si se pretende modelar todo el sistema a partir de la solución de las ecuaciones gobernantes en la microescala.
- Aún si los dos puntos anteriores no fueran limitantes, en ocasiones no es necesario conocer los numerosos detalles relacionados con la microescala, y es suficiente con describir el fenómeno a partir de variables promedio.

Una de las maneras de describir el transporte en término de variables promedio es llevando a cabo un proceso de escalamiento. Uno de los métodos más utilizados para escalar, el cual es utilizado en este trabajo, es el método del promedio volumétrico (Whitaker, 1999).

Dicho método, además de reducir enormemente la cantidad de información proveniente de la microescala, proporciona un marco teórico que, de manera rigurosa, permite derivar modelos promedio o macroscópicos a partir de las ecuaciones gobernantes de la microescala. Entre las principales ventajas que se tienen con este método están las siguientes:

- Se obtiene una definición clara de las variables dependientes promedio.
- Se definen rigurosamente los coeficientes efectivos de transporte. En dicha definición, se identifica de manera clara el efecto que tiene el fenómeno y la estructura de la microescala sobre el fenómeno en la macroescala.
- Proporciona la manera de enlazar el campo de las variables puntuales al campo de las variables macroscópicas mediante los problemas de cerradura asociados.
- Se obtienen las restricciones de escala que deben de satisfacerse para utilizar los modelos promedio, es decir, se define la validez de las ecuaciones desarrolladas.

Uno de los retos importantes en modelos escalados está en la manera que se caracteriza el transporte en la inter-región que separa a dos o más regiones homogéneas. Dentro de este contexto, por región homogénea se entiende a aquella porción del sistema donde propiedades promedio (por ejemplo la porosidad, permeabilidad, etc) son independientes de la posición; mientras que, la inter-región es la zona donde ocurren variaciones importantes de las propiedades promedio (Chandesris y Jamet, 2009; Valdés-Parada y col., 2007c, 2009b). El tamaño característico de la inter-región es comparable con el volumen de promediado utilizado en el escalamiento. Para llevar a cabo el modelado en la inter-región se tienen dos alternativas (Goyeau y col., 2003): 1) El *Modelo de un Solo Dominio* (ODA por sus siglas en inglés: One Domain Approach), en el cual el sistema entero, es decir, regiones homogéneas e inter-región, se considera como un medio *pseudo-continuo*. El modelado se lleva a cabo por medio de una *Ecuación de Transferencia Generalizada* (GTE por sus siglas en inglés: Generalized Transfer Equation), la cual es válida en todo el dominio de solución y en su formulación existen coeficientes efectivos dependientes de la posición. 2) El *Modelo de Dos Dominios* (TDA por sus siglas en inglés: Two Domain Approach), en el cual el sistema se divide en dos dominios homogéneos y la inter-región es reemplazada por una superficie divisoria. Bajo esta formulación, la información contenida en la inter-región es capturada en las condiciones de salto asociadas con la superficie divisoria. El uso de cualquiera de estos dos modelos, es usualmente una opción que se determina, como ejemplo, por las propiedades

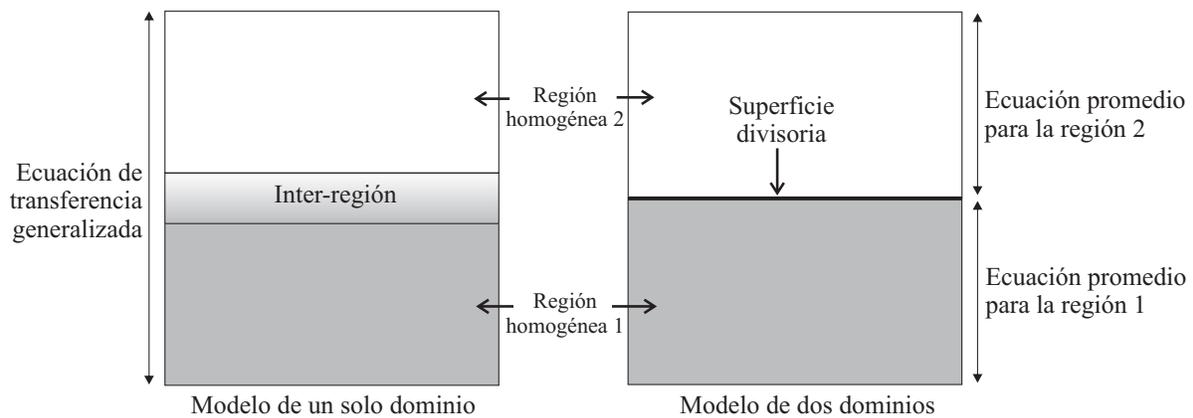


Figura 1. Modelos de uno y dos dominios para el transporte entre regiones homogéneas.

del sistema en particular y por las capacidades de cómputo disponibles. En trabajos previos (Valdés-Parada y col., 2009b) se ha mostrado que el cómputo de los coeficientes de salto en el TDA, requiere de información proveniente de la formulación alterna ODA. Con fines ilustrativos, en la Figura 1 se muestra un esquema mostrando las diferencias sustanciales entre los modelos de uno y dos dominios.

El presente trabajo de investigación doctoral se enfoca en el desarrollo de los modelos ODA y TDA cerrados (en término de parámetros conocidos) para el transporte de calor por convección y conducción entre dos regiones homogéneas; y además, considerando la suposición de equilibrio y no equilibrio local térmico. En este caso, una región se compone de un medio poroso (región- ω) y la otra solo de fluido (región- η) tal como se muestra en la Figura 2. De esta forma, existen solo dos fases en el sistema: la matriz sólida del medio poroso la cual se encuentra saturada por el mismo fluido de la región de fluido libre. Algunos ejemplos de procesos donde estos tipos de sistemas son importantes son:

- Transporte de calor en suelos (Chounet y col., 1999; Xin-Bi y Fu-Chu, 2008).
- Procesos de secado (Jiménez-Islas y col., 2004; Whitaker, 1977, 1980).
- Enfriamiento de artefactos electrónicos (Huang y col., 2005).
- Reactores catalíticos (Fatehi y Kaviany, 1994; Pereira-Duarte y col., 1984a,b).
- Procesos de enfriamiento por transpiración (Cho y Eckert, 1994).

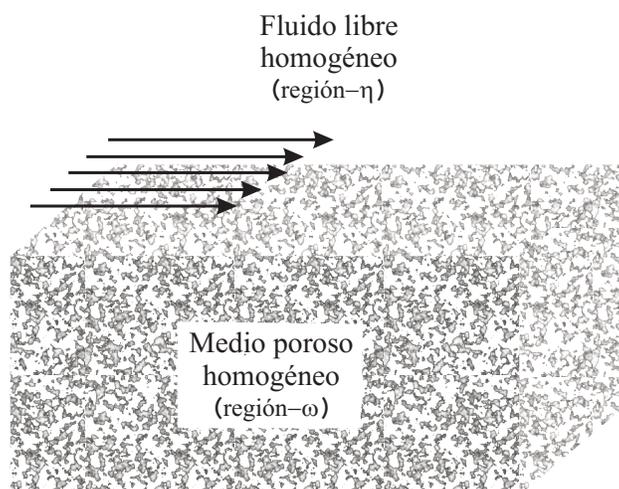


Figura 2. Sistema compuesto de un medio poroso homogéneo adyacente a una región de solo fluido.

- Transporte de calor en tejidos biológicos (Khaled y Vafai, 2003; Nakayama y Kuwahara, 2008).
- Transporte de calor en intercambiadores de calor no convencionales (Alkam y Al-Nimr, 1998, 1999; Alkam y col., 2001; Haji-Sheikh y Vafai, 2004; Mohamad, 2003).
- Transporte de calor en barras de combustible nuclear (Kim y El-Genk, 1989; Nield, 1998).
- Transporte de calor en colectores solares modificados (Al-Nimr y Alkam, 1998).
- Transporte de calor en sistemas geotérmicos (Espinosa-Paredes, 2011).

El trabajo se encuentra estructurado en la siguiente manera. En el Capítulo 1 se presenta la revisión de la literatura. La Parte I (Capítulos 2, 3 y 4) se enfoca en el desarrollo y aplicación del modelo ODA. En el Capítulo 2 se desarrollan las ecuaciones de transferencia generalizada bajo la suposición de equilibrio y no equilibrio local térmico. En el Capítulo 3 se lleva a cabo la predicción de los coeficientes efectivos más relevantes del modelo ODA, y se realiza una comparación entre los perfiles de temperatura obtenidos con las ecuaciones de

transferencia generalizada, y la temperatura promedio que resulta de resolver las ecuaciones de la microescala en un dominio simple. En el Capítulo 4 se utiliza el modelo de equilibrio local térmico para modelar y analizar un caso de aplicación práctica (intercambiador de calor con inserto poroso).

En la Parte II (Capítulos 5 y 6) del trabajo se presentan los desarrollos del modelo TDA. En el Capítulo 5 se estudia el modelo dos dominios bajo la suposición de equilibrio local térmico en una configuración unidireccional del transporte de calor; se plantean los problemas de cerradura asociados y se predicen los coeficientes de salto que aparecen en las condiciones de salto. Además, se propone un criterio teórico para la ubicación óptima de la superficie divisoria. Con el antecedente del problema simple tratado en el Capítulo 5, en el Capítulo 6 se enfoca en la derivación teórica de las condiciones de salto pero para un problema más general, esto es, se aborda el modelo de equilibrio térmico con acumulación, convección y dispersión en una geometría general.

La parte final del documento contiene las conclusiones generales, una sección con comentarios finales, la lista de referencias citadas y los apéndices. En el Apéndice A se derivan los problemas de cerradura correspondientes para predecir los coeficientes efectivos de transporte asociados con el modelo ODA. Por último, en el Apéndice B se presenta la predicción los coeficientes efectivos menos relevantes.

CAPÍTULO 1

REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA

En este capítulo se presenta la revisión de los trabajos más relevantes relacionados con la investigación. Particularmente, se identifican tres temas principales a revisar. El primero se centra en trabajos dedicados a la derivación y aplicación de modelos escalados para el transporte de calor en sistemas multifásicos; esto se presenta en la Sección 1.1. El segundo tema, presentado en la Sección 1.2, trata de estudios sobre la validez del principio de equilibrio local térmico. El tercer tema se enfoca en las distintas propuestas y desarrollos sobre la caracterización del transporte entre regiones homogéneas, las cuales se discuten en la Sección 1.3.

1.1. Escalamiento del transporte de calor

Uno de los primeros trabajos sobre la derivación de parámetros efectivos de transporte es el de Maxwell (1873). Aunque su trabajo estuvo enfocado a la conducción eléctrica entre dos distintos medios, sus resultados pueden fácilmente adaptarse al problema de conducción de calor. En su desarrollo se consideró un medio en la cual se encuentran diseminadas numerosas esferas suficientemente pequeñas para evitar efectos entre partículas; por lo tanto, sus resultados solo son válidos para valores de la porosidad suficientemente altas. Posteriormente, Rayleigh (1892) extendió el trabajo de Maxwell a un medio con una concentración mayor de partículas y considerando un arreglo periódico de esferas.

En un intento por incluir adecuadamente las características geométricas de medios

porosos en la predicción de coeficientes efectivos, algunos investigadores han recurrido a métodos estocásticos. Por ejemplo, Batchelor (1974) definió la conductividad térmica efectiva en función de la densidad de probabilidad que define a las características geométricas y físicas de un medio multifásico. Bajo este contexto, es posible capturar el carácter aleatorio de un medio poroso complejo. En dicho trabajo se presentan los límites inferior y superior de la conductividad térmica efectiva en función de la porosidad (véase la Figura 1 en Batchelor, 1974), los cuales están basados en principios variacionales previamente reportados por Hashin y Shtrikman (1962).

Uno de los métodos más utilizados para procesos de escalamiento es el del promedio volumétrico (Whitaker, 1999). Carbonell y Whitaker (1984) y Zanotti y Carbonell (1984) utilizaron este método para obtener los modelos escalados que gobiernan el transporte de calor en reactores de lecho empacado. En su desarrollo teórico utilizaron el modelo de no equilibrio local térmico (LTNE por sus siglas en inglés: Local Thermal Non-Equilibrium), el cual consiste en el uso de una ecuación para la temperatura promedio de la fase fluida y otra para la fase sólida; además de considerar efectos dispersivos. Debido a la complejidad derivada de los numerosos coeficientes efectivos involucrados en los modelos, y en los problemas de cerradura necesarios para su predicción, se utilizó un modelo simple de tubo capilar para representar la microestructura del lecho empacado. A pesar de las enormes simplificaciones que esto conlleva, se encontró una excelente correspondencia de la dispersión térmica efectiva con datos de laboratorio. Obviamente, la precisión de las predicciones de los perfiles de temperatura puede mejorarse significativamente al involucrar celdas de solución más realistas. Una opción muy adecuada para la determinación de los coeficientes efectivos del modelo de no equilibrio, consiste en usar dicho modelo para interpretar datos de laboratorio, tal como se presenta en el trabajo de Glatzmaier y Ramirez (1988). Además del método del promedio volumétrico, otras técnicas han sido aplicadas para describir el transporte desde la macroescala. Por ejemplo, Auriault (1983) y Auriault y Royer (1993) aplicaron y compararon los métodos fenomenológicos y de homogenización en el problema de calor conductivo.

Para transporte de calor solo por mecanismos difusivos, Nozad y col. (1985a) presentaron en un primer trabajo el escalamiento del transporte de calor en un sistema poroso bifásico. En su desarrollo obtuvieron el modelo de una ecuación; también conocido como el modelo de equilibrio local térmico (LTE por sus siglas en inglés: Local Thermal Equilibrium). Además de presentar el problema de cerradura para la predicción del tensor de conductividad térmica

efectiva, utilizando la teoría de perturbación demostraron que la conductividad térmica efectiva es invariante cuando la relación de conductividades térmicas entre el sólido y el fluido es muy grande; lo cual es válido solamente cuando en el sistema no existe contacto partícula-partícula. Los mismos autores, en una segunda parte (Nozad y col., 1985b), extendieron el análisis a un sistema de tres fases encontrando ligeras discrepancias en las comparaciones de la conductividad térmica efectiva predichas teóricamente con experimentos de laboratorio. Tales discrepancias fueron atribuidas al uso de una celda unitaria simple para resolver el problema de cerradura, la cual no consideraba el contacto partícula-partícula.

La importancia del contacto partícula-partícula ha sido discutida de diferentes maneras en la literatura. Batchelor y O'Brien (1977) obtuvieron una expresión analítica utilizando el método de expansión asintótica en un estudio sobre materiales granulares,

$$K_{eff} = k_{\beta} [4 \ln(\kappa) - 11] \quad (1.1)$$

Esta expresión es válida cuando existe contacto entre las partículas en un solo punto y para valores grandes del parámetro κ , la relación de conductividades térmicas entre el sólido y el fluido k_{σ}/k_{β} . Nozad y col. (1985a) mejoraron notablemente las predicciones de la conductividad térmica efectiva, al resolver el problema de cerradura en celdas unitarias en donde el sólido es la fase continua. Posteriormente, Shonnard y Whitaker (1989) llevaron a cabo experimentos de laboratorio considerando esferas en contacto para la determinación experimental de la conductividad térmica efectiva.

Recientemente, Yang y Nakayama (2010) señalaron la gran importancia del área de contacto entre partículas sólidas. Basados en una celda compleja tri-dimensional la cual consiste en rectángulos sólidos con *brazos conectores* en una arreglo periódico, utilizaron un análisis del transporte de calor en la escala del poro similar al utilizado en circuitos eléctricos. De esta manera, obtienen una expresión algebraica para la conductividad térmica efectiva, la cual predice de manera muy cercana datos de laboratorio. No obstante, uno de los inconvenientes de esta metodología es la cantidad de información que se requiere de la microescala acerca de los *brazos conectores* reales, la cual en muchas ocasiones no se encuentra disponible. Además, proponen una expresión empírica para la dispersión térmica efectiva para flujo en régimen laminar y turbulento.

Utilizando el método del promedio volumétrico, Quintard y Whitaker (1993) llevaron a cabo un exhaustivo análisis de los modelos de equilibrio y no equilibrio local térmico en estado transitorio. En su desarrollo teórico se encontraron las restricciones temporales

y de escala, bajo las cuales, los modelos promedio son simplificados. Para el modelo de equilibrio presentaron la predicción del único coeficiente involucrado, el tensor de conductividad térmica \mathbf{K}_{eff} ; mientras que para el modelo de no equilibrio presentaron los cuatro coeficientes efectivos involucrados, $\mathbf{K}_{\beta\beta}$, $\mathbf{K}_{\beta\sigma} = \mathbf{K}_{\sigma\beta}$, $\mathbf{K}_{\sigma\sigma}$ y $a_v h^1$. De manera general, mediante comparaciones de la predicción teórica de la temperatura promedio y la que resulta de experimentos numéricos, sugieren que ambos modelos son confiables para simulaciones en estado transitorio y estacionario. En un trabajo posterior, Quintard y col. (1997) extendieron el análisis al problema donde también existe transporte de calor por convección en la fase fluida. Bajo el modelo de no equilibrio, se obtuvo la forma macroscópica de las ecuaciones efectivas del fluido y del sólido y se definió el esquema de cerradura para predecir los diversos coeficientes efectivos de transporte involucrados. Debido al transporte convectivo, en algunos coeficientes aparecen términos dispersivos que incluyen efectos de la hidrodinámica en la microescala. Para diversos valores de la relación de las conductividades térmicas y del número de Péclet, los autores presentaron predicciones numéricas de los coeficientes efectivos a partir de la solución de los problemas de cerradura en celdas unitarias bi- y tri-dimensionales. Algunas comparaciones entre estas predicciones y datos experimentales visualizan buena concordancia, a pesar de las dificultades encontradas en experimentos de laboratorio. Recientemente, el análisis del transporte de calor ha sido extendido a sistemas que involucran efectos termodifusivos (Davarzani y col., 2010), es decir, existe transporte de masa debido a los gradientes de temperatura; lo cual se conoce como el efecto Soret. El efecto contrario, es decir, cuando existe transporte de calor debido a gradientes de concentración, se conoce como efecto Dufour.

Los trabajos mencionados hasta este punto, involucran esquemas de cerradura independientes del tiempo, y muy pocos se han enfocado al análisis de esquemas transitorios. Sin embargo, el trabajo de Moyne (1997) sugiere que, generalmente, es aceptable utilizar esquemas de cerradura independientes del tiempo.

1.2. Análisis de la validez del equilibrio local térmico

La pertinencia sobre el uso de un modelo de equilibrio o de no equilibrio ha sido analizada en varios trabajos en la literatura. Cuando es aceptable utilizar una sola temperatura promedio para la descripción del transporte en la macroescala, entonces es suficiente con

¹La definición explícita de los tensores térmicos se encuentra en el Apéndice A.

utilizar una sola ecuación efectiva para el modelamiento. En el caso en que una sola temperatura no es adecuada, entonces es necesario recurrir al modelo de no equilibrio el cual se compone de una ecuación efectiva para cada fase presente en el sistema, y que se encuentran acopladas entre sí. Esto incrementa notablemente el numero de coeficientes efectivos a determinar, y por ende, la complejidad del modelo. Así, en la medida de lo posible es deseable utilizar el modelo de equilibrio, y además, definir las condiciones de validez de dicho modelo. Con el objetivo de identificar las restricciones asociadas con el modelo de equilibrio local térmico, Whitaker (1991) llevó a cabo un análisis de ordenes de magnitud utilizando el método del promedio volumétrico, y concluyó que el uso de una sola temperatura promedio es válida siempre y cuando se satisfagan las siguientes restricciones,

$$\left\{ \frac{\varepsilon_\beta \varepsilon_\sigma [(\rho c_P)_\beta - (\rho c_P)_\sigma] L_c^2}{(\varepsilon_\beta k_\beta + \varepsilon_\sigma k_\sigma) t^*} \right\} \Lambda \ll 1 \quad (1.2a)$$

$$\left\{ \varepsilon_\beta \varepsilon_\sigma \text{Pe} \left(\frac{L_c}{d_p} \right) \left(\frac{L_c}{L_{\rho c_p}} \right) \left(\frac{k_\beta}{\varepsilon_\beta k_\beta + \varepsilon_\sigma k_\sigma} \right) \right\} \Lambda \ll 1 \quad (1.2b)$$

$$\left\{ \frac{\varepsilon_\beta \varepsilon_\sigma (k_\beta - k_\sigma)}{\varepsilon_\beta k_\beta + \varepsilon_\sigma k_\sigma} \right\} \Lambda \ll 1 \quad (1.2c)$$

donde,

$$\begin{aligned} \Lambda = & \mathbf{O} \left\{ \left[\frac{(\rho c_P)_\beta - (\rho c_P)_\sigma}{(\rho c_P)_{\beta\sigma}} \right] \frac{d_p^2}{\alpha_{\beta\sigma} t^*} + \mathbf{O} \left[\left(\frac{k_\beta}{k_{\beta\sigma}} \right) \left(\frac{d_p}{L_{\rho c_p}} \right) \text{Pe} \right] + \mathbf{O} \left[\left(\frac{k_\beta - k_\sigma}{k_{\beta\sigma}} \right) \left(\frac{d_p}{L_c} \right)^2 \right] \right. \\ & \left. + \mathbf{O} \left[\left(\frac{\varepsilon_\omega}{\varepsilon_\beta \varepsilon_\sigma} \right) \frac{a_v \langle \Omega \rangle_{\beta\sigma} d_p^2}{k_{\beta\sigma} \Delta \langle T \rangle} \right] + \mathbf{O} \left[\frac{\langle \Phi_\sigma \rangle^\sigma d_p^2}{k_{\beta\sigma} \Delta \langle T \rangle} \right] \right\} \\ & \times \left\{ \frac{d_p^2}{\alpha_{\beta\sigma} t^*} + \mathbf{O} \left[\varepsilon_\sigma \left(\frac{k_\beta}{k_{\beta\sigma}} \right) \left(\frac{d_p}{L_{\rho c_p}} \right) \text{Pe} \right] + \mathbf{O} \left(\frac{d_p}{L_c} \right)^2 + \mathbf{O} \left[\frac{d_p a_v}{\varepsilon_\beta \varepsilon_\sigma \left(\frac{k_{\beta\sigma}}{d_p} \right) \left(\frac{\delta_\beta}{k_\beta} + \frac{\delta_\sigma}{k_\sigma} \right)} \right] \right\}^{-1} \end{aligned} \quad (1.3)$$

Aquí \mathbf{O} significa orden de magnitud; ε_i es la fracción volumétrica de la fase- i ($i = \beta, \sigma$ donde β es la fase fluida y σ la fase sólida); $(\rho c_P)_i$ es la capacidad térmica de la fase- i ; k_i es la conductividad térmica de la fase- i ; t^* es el tiempo característico del proceso en la microescala; L_c es la longitud característica asociada con el término $\nabla^2 \langle T \rangle$; Pe es el número de Péclet; d_p es el diámetro efectivo de partícula; $L_{\rho c_p}$ es la longitud característica asociada con el transporte convectivo; $(\rho c_P)_{\beta\sigma}$ es una combinación de las capacidades térmicas de los materiales, $(\rho c_P)_{\beta\sigma} = \varepsilon_\sigma (\rho c_P)_\beta + \varepsilon_\beta (\rho c_P)_\sigma$; $k_{\beta\sigma}$ representa una conductividad

térmica combinada, $k_{\beta\sigma} = \varepsilon_\sigma k_\beta + \varepsilon_\beta k_\sigma$; $\alpha_{\beta\sigma}$ representa la difusividad térmica combinada, $\alpha_{\beta\sigma} = k_{\beta\sigma} / (\rho c_P)_{\beta\sigma}$; ε_ω representa el valor mayor de la fracción volumétrica de ambas fases, la fluida y la sólida; a_v es el área interfacial por unidad de volumen; $\Delta \langle T \rangle$ es el cambio neto del campo de temperatura promedio; δ_i es la longitud característica para la transferencia de calor en la microescala para la fase- i ; $\langle \Omega \rangle_{\beta\sigma}$ representa la fuente térmica heterogénea promediada en el área, y finalmente, $\langle \Phi_\sigma \rangle^\sigma$ es la fuente térmica homogénea promedio.

Con base en las expresiones (1.2), el equilibrio local térmico puede aceptarse cuando:

1. Ya sea que el fluido o el sólido se encuentre en una proporción mucho menor al otro, es decir, ε_β ó $\varepsilon_\sigma \ll 1$.
2. Las capacidades térmicas de los materiales son muy parecidas, es decir, $(\rho c_P)_\beta \sim (\rho c_P)_\sigma$.
3. El tiempo característico del proceso es suficientemente grande, es decir, $L_c^2/t^* \ll 1$.
4. La intensidad de flujo es suficientemente pequeña, es decir, $Pe \ll 1$.
5. Las conductividades térmicas de los materiales son muy parecidas, es decir, $k_\beta \sim k_\sigma$.
6. Exista disparidad de escalas en el sistema, es decir, $(d_p/L_c)^2 \ll 1$ (involucrado en el parámetro Λ).

Es obvio que la mayoría de los sistemas multifásicos no cumplen con todos los puntos anteriores; sin embargo, el requerimiento más importante, y el cual es el que relaja las restricciones para el LTE, es la disparidad de escalas del punto 6. La principal consecuencia de esto recae en la definición del parámetro Λ , el cual en general se tiene que a medida que $(d_p/L_c)^2 \rightarrow 0$, $\Lambda \rightarrow 0$.

Quintard y Whitaker (1995), en un trabajo posterior, derivaron la ecuación gobernante para la diferencia de temperaturas promedio entre el fluido y el sólido. De esta manera, presentaron el estimado de orden de magnitud,

$$\frac{\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma}{\Delta \langle T \rangle} = \mathbf{O} \left(\frac{l_{\beta\sigma}}{L} \right)^2 \times \left\{ \frac{\mathbf{O} \left[L^2 \frac{(\rho c_P)_\beta - (\rho c_P)_\sigma}{k_{\beta\sigma} t^*} \right] - \mathbf{O} \left[\frac{(k_\beta - k_\sigma)(1 + \mathbf{C}_{\beta\sigma})}{k_{\beta\sigma}} \right]}{1 + \mathbf{O} \left(\frac{l_{\beta\sigma}}{L} \right)^2 + \mathbf{O} \left(\frac{l_{\beta\sigma}^2}{\alpha_{\beta\sigma} t^*} \right)} \right\} \quad (1.4)$$

Donde $\langle T_\beta \rangle^\beta$ y $\langle T_\sigma \rangle^\sigma$ son las temperaturas promedio de fase para el fluido y el sólido, respectivamente; $l_{\beta\sigma}$ es una longitud microscópica asociada con el sistema fluido-sólido; L es

la longitud del sistema completo, y $\mathbf{C}_{\beta\sigma}$ es el *así-llamado* tensor de tortuosidad asociado con la diferencia de temperatura $\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma$.

Para verificar el estimado de la Ecuación (1.4), los investigadores llevaron a cabo experimentos numéricos encontrando que la diferencia de temperaturas es aproximadamente,

$$\frac{\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma}{\Delta \langle T \rangle} = \mathbf{O}(1 - 10) \quad (1.5)$$

cuando la diferencia en las propiedades físicas de los materiales son importantes. Esto es un indicativo cuantitativo de la validez del LTE, ya que para que el modelo de equilibrio sea satisfactorio se requiere que $(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma) / \Delta \langle T \rangle \ll 1$.

Además de la justificación teórica del principio de equilibrio local térmico, en la literatura también pueden encontrarse estudios cuantitativos dedicados a este fin. Por ejemplo, Jeng y col. (2006) definieron el parámetro

$$\Omega = \left(\sqrt{\frac{h}{K_{\sigma\sigma}}} L \right) \tanh \left(\sqrt{\frac{h}{K_{\sigma\sigma}}} L \right) \quad (1.6)$$

donde h es el coeficiente de transferencia de calor intersticial, $K_{\sigma\sigma}$ es la conductividad térmica efectiva de la matriz sólida y L es el tamaño del medio poroso. Los autores sugieren que la condición de equilibrio local térmico es válida siempre y cuando $\Omega \leq 3$. Además, analizaron el efecto de la condición frontera a la entrada del medio poroso sobre la suposición de equilibrio, encontrando que dicho efecto disminuye a medida que el valor de h se incrementa.

Kim y Jang (2002) analizaron el efecto de parámetros pertinentes como el número de Darcy, el número de Prandtl y el número de Reynolds sobre la validez del LTE. Los autores concluyen que la suposición de equilibrio local térmico es siempre válida en todos los medios porosos cuando la transferencia de calor ocurre principalmente por conducción. Para sistemas porosos donde el coeficiente de transferencia de calor intersticial es proporcional al número de Reynolds con una potencia mayor a 1, la condición de equilibrio es válida cuando el transporte de calor por convección es dominante. En general, la condición de LTE es válida siempre y cuando se cumpla la siguiente expresión

$$\text{Pr}_{eff,\beta} \text{Re}_{d_p} \text{Da}^{1/2} \frac{\varepsilon_\beta}{\text{Nu}} \ll 1 \quad (1.7)$$

Donde $\text{Pr}_{eff,\beta}$ es un número de Prandtl efectivo basado en el fluido, Re_{d_p} es el número de Reynolds basado en el diámetro del poro d_p , Da es el número de Darcy y Nu es el número de Nusselt definido en la microescala.

Mientras tanto, Marafie y Vafai (2001) incorporaron en el análisis el efecto del número de Biot, de parámetros inerciales asociados con el problema de flujo y de la relación de conductividades térmicas. Por comparación entre los campos de solución de los modelos de equilibrio y de no equilibrio, los investigadores encuentran que el número de Darcy y los parámetros inerciales tienen una menor influencia para establecer la validez de la suposición del equilibrio local térmico.

1.3. Caracterización del transporte entre regiones homogéneas

1.3.1. Propuestas empíricas

Uno de los trabajos pioneros dedicados al análisis de los fenómenos de transporte en la zona que separa a dos regiones homogéneas fue llevado a cabo por Beavers y Joseph (1967). En su trabajo teórico-experimental se aborda la problemática del transporte de cantidad de movimiento en un sistema compuesto por un medio poroso adyacente a una región de solo fluido; específicamente, en la frontera macroscópica medio poroso-fluido. Con el objetivo de reproducir teóricamente los datos experimentales, utilizaron la ley de Darcy para modelar el flujo en el medio poroso; la ecuación de Poiseuille en la región fluida, y para acoplar ambos modelos en la así llamada *frontera nominal* propusieron la condición de frontera empírica,

$$\left. \frac{du_\beta}{dy} \right|_{y=O_+} = \frac{\alpha}{\sqrt{K_{\beta,\omega}}} \left(u_\beta|_{y=O_+} - u_\omega \right) \quad (1.8)$$

Donde $K_{\beta,\omega}$ representa la permeabilidad del medio poroso, α es un parámetro desconocido el cual se ajusta para tener correspondencia con los datos experimentales y $u_\beta|_{y=O_+}$ y u_ω representan la velocidad del lado del fluido y del medio poroso, respectivamente. Esta expresión involucra una discontinuidad en el campo de la velocidad proporcional al gradiente de la velocidad $(\sqrt{K_{\beta,\omega}}/\alpha) du_\beta/dy$. Esta propuesta originó mucho interés y, posteriormente, diversos investigadores se dieron a la tarea de determinar el parámetro α usando distintos procedimientos teóricos (Richardson, 1971; Saffman, 1971; Taylor, 1971; Neale y Nader, 1974; Haber y Mauri, 1983; Ross, 1983; Sahraoui y Kaviany, 1992).

La idea de un salto en el campo de la variable dependiente fue retomada posteriormente por Sahraoui y Kaviany (1993, 1994) para el problema de transporte de calor. En este caso,

se propuso una versión análoga a la Ecuación (1.8) dada por,

$$\frac{d\langle T \rangle}{dy} \Big|_{y=O^-} = \frac{\alpha_T}{\lambda} (\langle T \rangle^- - \langle T \rangle^+) \quad (1.9)$$

donde α_T es el así llamado *coeficiente de deslizamiento* y λ representa una longitud característica de la microescala; $\langle T \rangle^-$ y $\langle T \rangle^+$ representan las temperaturas del medio poroso y de la región adyacente respectivamente, y $\langle T \rangle$ es la temperatura promediada en volumen. Los autores reportaron que el orden de magnitud de α_T es aproximadamente,

$$\alpha_T = \mathbf{O}(1 - 10) \quad (1.10)$$

Para un medio poroso adyacente a un medio homogéneo sólido, los autores reportaron que el coeficiente de deslizamiento presenta una dependencia con la porosidad del medio poroso, $\varepsilon_{\beta,\omega}$, y la conductividad térmica efectiva, K_{eff} , de la siguiente forma,

$$\alpha_T = 10.07 \left(\frac{K_{eff}}{k_\beta} \right)^{-2.41} \varepsilon_{\beta,\omega}^{-1.92}, \text{ para } 0.5 \leq \varepsilon_{\beta,\omega} \leq 0.7, \text{ y } \frac{k_\sigma}{k_\beta} = 10^4 \quad (1.11a)$$

$$\alpha_T = 2.59 \frac{\varepsilon_{\beta,\omega}^{-2.04}}{K_{eff}/k_\beta - 1}, \text{ para } 0.5 \leq \varepsilon_{\beta,\omega} \leq 0.8, \text{ y } \frac{k_\sigma}{k_\beta} = 1 \quad (1.11b)$$

Previamente, Yagi y Kunii (1960) realizaron experimentos en un lecho empacado anular de esferas. Sus resultados muestran que α_T se comporta como una función lineal del número de Péclét.

En un trabajo numérico, Alazmi y Vafai (2001) hicieron una comparación cuantitativa entre los perfiles de velocidad y temperatura que se obtienen al utilizar las diferentes condiciones de salto propuestas ó utilizadas hasta ese momento en la literatura:

- Para el problema de cantidad de movimiento:
 - Condición de salto en el flux de cantidad de movimiento(Beavers y Joseph, 1967).

$$\frac{du_\beta}{dy} \Big|_{y=O_+} = \frac{\alpha}{\sqrt{K_{\beta,\omega}}} \left(u_\beta|_{y=O_+} - u_\omega \right) \quad (1.12)$$

- Condiciones de continuidad en la velocidad y en el gradiente de la velocidad (ver por ejemplo: Neale y Nader, 1974).

$$u_\beta|_{y=O_+} = u_\omega; \quad \frac{du_\beta}{dy} \Big|_{y=O_+} = \frac{du_\omega}{dy} \quad (1.13)$$

- Condiciones de continuidad en la velocidad y en el flux de cantidad de movimiento (ver por ejemplo: Vafai y Thiyagaraja, 1987).

$$u_\beta|_{y=O_+} = u_\omega; \quad \mu_{eff} \left. \frac{du_\beta}{dy} \right|_{y=O_+} = \mu_\beta \frac{du_\omega}{dy} \quad (1.14)$$

- Condición de salto en el flux de cantidad de movimiento descartando efectos inerciales, y continuidad en la velocidad (Ochoa-Tapia y Whitaker, 1995a).

$$u_\beta|_{y=O_+} = u_\omega; \quad \frac{\mu_\beta}{\varepsilon_{\beta,\omega}} \frac{du_\omega}{dy} - \mu_\beta \frac{du_\beta}{dy} = \beta_1 \frac{\mu_\beta}{\sqrt{K_{\beta,\omega}}} u_\omega \quad (1.15)$$

- Condición de salto en el flux de cantidad de movimiento considerando efectos inerciales, y continuidad en la velocidad (Ochoa-Tapia y Whitaker, 1997b).

$$u_\beta|_{y=O_+} = u_\omega; \quad \frac{\mu_\beta}{\varepsilon_{\beta,\omega}} \frac{du_\omega}{dy} - \mu_\beta \frac{du_\beta}{dy} = \beta_1 \frac{\mu_\beta}{\sqrt{K_{\beta,\omega}}} u_\omega + \beta_2 \rho_\beta u_\omega^2 \quad (1.16)$$

- Para el problema de calor suponiendo equilibrio local térmico:

- Condiciones de continuidad en la temperatura y en el flux de calor (ver por ejemplo Vafai y Thiyagaraja, 1987).

$$\langle T \rangle^+ = \langle T \rangle^-; \quad K_{eff} \frac{\partial \langle T \rangle^-}{\partial y} = k_\beta \frac{\partial \langle T \rangle^+}{\partial y} \quad (1.17)$$

- Condición de salto en la temperatura y continuidad en el flux de calor (Sahraoui y Kaviany, 1994).

$$\left. \frac{d\langle T \rangle}{dy} \right|_{y=O^-} = \frac{\alpha_T}{\lambda} (\langle T \rangle^- - \langle T \rangle^+); \quad K_{eff} \frac{\partial \langle T \rangle^-}{\partial y} = k_\beta \frac{\partial \langle T \rangle^+}{\partial y} \quad (1.18)$$

- Condición de continuidad en la temperatura y un salto en el flux de calor (Ochoa-Tapia y Whitaker, 1998).

$$\langle T \rangle^+ = \langle T \rangle^-; \quad \Phi_s + K_{eff} \frac{\partial \langle T \rangle^-}{\partial y} = k_\beta \frac{\partial \langle T \rangle^+}{\partial y} \quad (1.19)$$

Aquí μ_{eff} se refiere a la viscosidad efectiva del medio poroso; μ_β es la viscosidad del fluido; β_1 y β_2 son los *así-llamados* coeficientes de salto; ρ_β es la densidad del fluido, y Φ_s es el coeficiente de no equilibrio. Para diferentes valores de parámetros relevantes como el número de Darcy, el parámetro de inercia, el número de Reynolds, la porosidad y los coeficientes de

deslizamiento, concluyen que, en general, los efectos de las distintas condiciones de frontera son más pronunciados en el campo de la velocidad que en el de la temperatura; inclusive tienen un efecto muy pequeño en la distribución del número de Nusselt. Sin embargo, sugieren que pueden surgir algunas discrepancias para valores grandes del número de Reynolds y/ó del número de Darcy.

1.3.2. Propuestas metodológicas

Utilizando el modelo escalado para transporte de calor conductivo de Nozad y col. (1985a), Prat (1989, 1990, 1992) llevó a cabo una serie de análisis sobre las condiciones de frontera que aplican en las fronteras macroscópicas de un medio poroso. En estos trabajos, se resaltó la ambigüedad que se tiene al prescribir las condiciones de frontera desde la macroescala, es decir, son impuestas independientemente del fenómeno que ocurre en la microescala lo cual lleva a inconsistencias físicas. A pesar de esto, Prat concluye que generalmente el uso de condiciones tipo Dirichlet o Neumann generan errores que, desde un punto de vista práctico, pueden descartarse debido a que son confinados dentro de una capa delgada, llamada zona interfacial. Cuando existen fuentes térmicas en el sistema (Prat, 1992), aparece un flux de calor extra en la frontera macroscópica, aunque, de igual manera, es despreciable. Estas conclusiones se basan en el uso de modelos macroscópicos de uno y dos dominios, es decir, usando ecuaciones con coeficientes de transporte dependientes (Prat, 1990) e independientes (Prat, 1989, 1992) de la posición, respectivamente.

Utilizando algunas ideas teóricas de trabajos previos (Whitaker, 1992; Stone, 1990), Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a,b) desarrollaron una metodología bajo la cual, sistemáticamente, se deriva la condición de salto para el flux de cantidad de movimiento utilizando el método del promedio volumétrico. Esta metodología consiste en la introducción de *cantidades de exceso* similares a las que se utilizan en balances entre *fases homogéneas* (Gibbs, 1948; Slattery, 1967b). La diferencia sustancial radica en que Ochoa-Tapia y Whitaker llevaron a cabo balances entre *regiones homogéneas*. Debido a que este tipo de metodología conduce a la obtención de ecuaciones gobernantes para el transporte superficial, es necesario la introducción de una frontera nominal que separe (de manera abstracta) a las regiones homogéneas. Dicha frontera nominal es así-llamada como *superficie divisoria*, la cual es análoga a la *superficie singular* manejada en balances entre fases homogéneas (Slattery, 1967b). Para un sistema medio poroso-fluido similar al estudiado por Beavers y Joseph (1967) y descartando

los términos inerciales, la condición de salto desarrollada es,

$$\varepsilon_{\beta,\omega}^{-1} \frac{\partial \langle u_\beta \rangle_\omega}{\partial y} - \frac{\partial \langle u_\beta \rangle_\eta}{\partial y} = \frac{\beta}{\sqrt{K_{\beta,\omega}}} \langle u_\beta \rangle_\omega \quad (1.20)$$

la cual se completa con la condición de continuidad del campo de la velocidad,

$$\langle u_\beta \rangle_\omega = \langle u_\beta \rangle_\eta \quad (1.21)$$

Cabe señalar que esta condición es impuesta, es decir, no fue derivada rigurosamente utilizando un procedimiento de escalamiento. De hecho, el desarrollo teórico de la condición apropiada para el campo es un punto faltante actualmente, y algunos esfuerzos dedicados a esto se presentan en este documento. En la Ecuación (1.20) β es un parámetro (en ese momento) ajustable que depende de las propiedades intrínsecas del sistema y, además, de orden de magnitud igual a uno. La definición completa de β se expresa en la Ecuación (88) de (Ochoa-Tapia y Whitaker, 1995a). En una segunda parte, Ochoa-Tapia y Whitaker (1995b) compararon predicciones a partir del modelo con condición de salto con datos experimentales. Para ello utilizaron un modelo de porosidad variable encontrando poca correspondencia con los datos de laboratorio. Tal como sugieren los investigadores, una de las razones de esto se atribuye a la inherente complejidad del transporte en la región heterogénea del sistema, es decir, en la inter-región. A pesar de no disponer del esquema de cerradura para predecir a β , la condición de salto de estrés ha sido utilizada para el desarrollo de soluciones analíticas para el flujo en canales parcialmente llenos con un medio poroso (ver por ejemplo Kuznetsov, 1996).

La derivación teórica de la condición de salto (1.20) despertó un gran interés en varios investigadores. La principal inquietud de ellos fue encontrar la relación explícita que guarda el coeficiente de salto β , con la propiedades geométricas y de transporte de la zona cercana a la frontera medio poroso-fluido. Para ello, Goyeau y col. (2003) introdujeron el concepto de un solo dominio el cual se compone de dos zonas homogéneas, la del medio poroso y la del fluido libre, y una zona heterogénea localizada en la frontera medio poroso-fluido. La zona heterogénea se caracteriza por contener la transición de las propiedades de transporte entre las regiones homogéneas adyacentes; en otras palabras, contiene las dependencias espaciales de las propiedades efectivas de transporte como la porosidad, permeabilidad, viscosidad efectiva, etc. Bajo esta idea, y utilizando solamente integración de las ecuaciones gobernantes, los investigadores fueron capaces de definir explícitamente la dependencia de β con las propiedades heterogéneas del sistema (véase la Ecuación (28) de Goyeau y col., 2003).

Sin embargo, algunas de las dificultades encontradas en esta metodología, se relacionan con la disponibilidad de la dependencia espacial de los coeficientes efectivos de transporte, la determinación del tamaño de la zona heterogénea (la cual se maneja como *inter-región* en este trabajo) y el hecho de que se involucra el mismo campo de velocidad en la definición de β . El concepto de un solo dominio es ampliamente usado en este trabajo como un paso intermedio hacia el desarrollo de condiciones de salto para el modelo de dos dominios.

En un trabajo posterior, Deng y Martinez (2005) utilizaron el concepto de un solo dominio para modelar el transporte en todo el sistema; sin embargo, en vez de considerar la dependencia espacial de las propiedades de transporte en la zona heterogénea, ellos consideraron los cambios espaciales en la forma de cambios en escalón. De esta forma, al ajustar los resultados del modelo con la condición de salto (1.20), con los resultados del modelo de un solo dominio obtienen el valor de β . Sin embargo, una inconsistencia surge al utilizar funciones escalón para modelar la dependencia espacial de las propiedades efectivas, debido a que esta metodología es equivalente al uso de condiciones de continuidad en el modelo de dos dominios (Jamet y col., 2009). Es decir, se usa un modelo con condiciones de continuidad, para encontrar el coeficiente de salto de un modelo con condiciones de salto.

La dificultad relacionada con la inclusión del campo de velocidad en la definición de β encontrada por Goyeau y col. (2003), fue removida por Chandesris y Jamet (2006) usando el método de expansión asintótica. Sin embargo, el coeficiente de salto obtenido contiene aún cantidades de exceso desconocidas que involucran la dependencia espacial de la porosidad y la permeabilidad (véase la Ecuación (85) de Chandesris y Jamet, 2006). Ciertamente, la disponibilidad de estos parámetros de transporte, ya sea filtrando información de la microescala o por métodos experimentales, permite en principio el cómputo de cantidades de exceso, y el posterior cálculo del coeficiente de salto; aunque aún faltaría por definir explícitamente la localización más propicia para la superficie divisoria (Jamet y Chandesris, 2009). Este tipo de metodología también ha sido aplicada para problemas de flujo turbulento y transporte de calor solo por conducción (Chandesris y Jamet, 2009; Jamet y Chandesris, 2009).

Cuando los efectos inerciales son importantes, la derivación de la condición de salto para el flux de cantidad de movimiento se complica enormemente y la Ecuación (1.20) ya no es válida. Al respecto, Ochoa-Tapia y Whitaker (1997b) utilizaron la misma metodología para

la obtención de la Ecuación (1.20), y desarrollaron la siguiente condición de salto,

$$\varepsilon_{\beta,\omega}^{-1} \frac{\partial \langle u_\beta \rangle_\omega}{\partial y} - \frac{\partial \langle u_\beta \rangle_\eta}{\partial y} = \frac{\beta_1}{\sqrt{K_{\beta,\omega}}} \langle u_\beta \rangle_\omega + \frac{\rho_\beta}{\mu_\beta} \beta_2 (\langle u_\beta \rangle_\omega)^2 \quad (1.22)$$

donde β_1 y β_2 son parámetros ajustables de orden uno. La definición completa de estos parámetros está dada en las Ecuaciones (75) y (76) de (Ochoa-Tapia y Whitaker, 1997b). Una vez más, la condición de frontera faltante se completa con la condición de continuidad de la velocidad, Ecuación (1.21).

Utilizando la misma ideología, posteriormente Ochoa-Tapia y Whitaker (1997a) derivaron la condición de salto para el flux de calor entre un medio poroso y un fluido homogéneo. Dado que el desarrollo teórico se aplicó al modelo de no equilibrio local térmico, en este caso las condiciones de salto son dos,

$$\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left(\mathbf{K}_{\beta,\omega}^* \cdot \nabla \langle T_\beta \rangle_\omega^\beta \right) = \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left(k_\beta \nabla \langle T_\beta \rangle_\eta^\beta \right) - h_{\beta\sigma} \left(\langle T_\beta \rangle_\omega^\beta - \langle T_\sigma \rangle_\omega^\sigma \right), \text{ para el fluido} \quad (1.23a)$$

$$\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left(\mathbf{K}_{\sigma,\omega} \cdot \nabla \langle T_\sigma \rangle_\omega^\sigma \right) = h_{\beta\sigma} \left(\langle T_\beta \rangle_\omega^\beta - \langle T_\sigma \rangle_\omega^\sigma \right), \text{ para el sólido} \quad (1.23b)$$

donde $\mathbf{K}_{\beta,\omega}^*$ y $\mathbf{K}_{\sigma,\omega}$ son tensores térmicos efectivos para el fluido y el sólido respectivamente, definidos en el seno del medio poroso; $h_{\beta\sigma}$ es un parámetro ajustable para tener correspondencia con datos de laboratorio. Estrictamente, $h_{\beta\sigma}$ es el coeficiente de intercambio de calor de exceso, es decir, $h_{\beta\sigma} = (a_v h)_s$ cuya definición explícita se presenta en la Ecuación (A13) de (Ochoa-Tapia y Whitaker, 1997a). Además, las Ecuaciones (1.23) son válidas cuando es aceptable la condición de *equilibrio local del gradiente térmico*

$$\nabla \langle T_\beta \rangle_\omega^\beta = \nabla \langle T_\sigma \rangle_\omega^\sigma \quad (1.24)$$

Además, en su derivación se ha descartado la contribución de algunas cantidades de exceso. Cuando la expresión (1.24) no es válida es necesario recurrir a las versiones no simplificadas de las condiciones de salto,

$$\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left(\mathbf{K}_{\beta\beta,\omega}^* \cdot \nabla \langle T_\beta \rangle_\omega^\beta + \mathbf{K}_{\beta\sigma,\omega}^* \cdot \nabla \langle T_\sigma \rangle_\omega^\sigma \right) = \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left(k_\beta \nabla \langle T_\beta \rangle_\eta^\beta \right) - h_{\beta\sigma} \left(\langle T_\beta \rangle_\omega^\beta - \langle T_\sigma \rangle_\omega^\sigma \right), \quad \text{para el fluido} \quad (1.25a)$$

$$\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \left(\mathbf{K}_{\sigma\beta,\omega} \cdot \nabla \langle T_\beta \rangle_\omega^\beta + \mathbf{K}_{\sigma\sigma,\omega} \cdot \nabla \langle T_\sigma \rangle_\omega^\sigma \right) = h_{\beta\sigma} \left(\langle T_\beta \rangle_\omega^\beta - \langle T_\sigma \rangle_\omega^\sigma \right), \text{ para el sólido} \quad (1.25b)$$

donde los tensores representan coeficientes térmicos efectivos asociados con el modelo de no equilibrio local térmico; su definición puede consultarse en el Apéndice A de este trabajo. Debe recalcar que estas expresiones fueron derivadas de manera rigurosa utilizando el método del promedio volumétrico y la teoría de balances entre fases homogéneas, es decir, *no son expresiones empíricas*. Su aplicación en un problema práctico origina algunas cuestiones muy interesantes. Por ejemplo, si $h_{\beta\sigma} = 0$ la Ecuación (1.25a) indica que todo el flux que entra del fluido al medio poroso a través de la superficie divisoria $\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot (k_{\beta} \nabla \langle T_{\beta} \rangle_{\eta}^{\beta})$ (también puede verse en el sentido contrario para el flux de calor), se distribuye en el medio poroso entre el sólido y el fluido intersticial de acuerdo la resistencia térmica que presentan, es decir, $\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot (\mathbf{K}_{\sigma\beta,\omega} \cdot \nabla \langle T_{\beta} \rangle_{\omega}^{\beta} + \mathbf{K}_{\sigma\sigma,\omega} \cdot \nabla \langle T_{\sigma} \rangle_{\omega}^{\sigma})$. Esto indica que la manera en que se distribuye el flux calor en el medio poroso, en este caso, depende únicamente de las propiedades intrínsecas del seno poroso. Cabe señalar que $\mathbf{K}_{\beta\sigma,\omega}^*$ no es el coeficiente efectivo más representativo para la conductividad del sólido (de hecho el más representativo es $\mathbf{K}_{\sigma\sigma,\omega}$); sin embargo, es útil para ejemplificar las ideas en esta parte. En el caso contrario en que $h_{\beta\sigma} \neq 0$, la distribución de calor en el medio poroso ya no es *tan simple* debido a que el coeficiente de salto determina la cantidad de calor que se transporta a través del fluido y a través del sólido. En este caso, la manera en que se distribuye el calor en la frontera no solo depende de las propiedades intrínsecas del seno poroso, sino también de los fenómenos asociados a la zona heterogénea del sistema *cuantificados* en la condición de salto.

Este tipo de metodología se aplicó de nueva cuenta al problema de calor pero bajo el principio de LTE (Ochoa-Tapia y Whitaker, 1998). Cuando la contribución de algunas cantidades de exceso son descartadas, la condición de salto toma la forma,

$$\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot (\mathbf{K}_{eff}^* \cdot \nabla \langle T \rangle_{\omega}) = \mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot (k_{\beta} \nabla \langle T \rangle_{\eta}) + \Phi_s \quad (1.26)$$

donde Φ_s es la así llamada *fuerza térmica de no equilibrio de exceso*. La importancia de este término recae en que, al igual que el término $h_{\beta\sigma}$ de las Ecuaciones (1.25), indica la existencia o no de un salto en el flux de calor en la frontera medio poroso-fluido. Cabe señalar que Φ_s es un parámetro asociado con el transporte superficial de calor en la superficie divisoria; su definición asociada con el transporte en las regiones homogéneas es,

$$\int_{A_{\omega\eta}} \Phi_s dA = \int_{\mathcal{V}_{\infty}} \Phi dV \quad (1.27)$$

donde $A_{\omega\eta}$ representa el lugar geométrico de la superficie divisoria y \mathcal{V}_{∞} representa un dominio de integración suficientemente grande que incluye porciones del medio poroso y

del fluido homogéneo. Aquí Φ es un término complejo que involucra diversas cantidades asociadas con la diferencia de temperaturas promedio entre el fluido y el sólido,

$$\begin{aligned} \Phi = & \varepsilon_\beta \varepsilon_\sigma \left[(\rho c_P)_\beta - (\rho c_P)_\sigma \right] \frac{\partial}{\partial t} \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) - \nabla \cdot \left[\nabla \varepsilon_\beta (\varepsilon_\beta k_\beta - \varepsilon_\sigma k_\sigma) \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) \right] \\ & + \nabla \cdot \left[\varepsilon_\beta \varepsilon_\sigma (k_\beta - k_\sigma) \nabla \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) \right] - (\rho c_P)_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \cdot \nabla \left[\varepsilon_\sigma \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) \right] \quad (1.28) \end{aligned}$$

En esta definición, claramente se observa que si la condición de equilibrio térmico se satisface, $\langle T_\beta \rangle^\beta = \langle T_\sigma \rangle^\sigma = \langle T \rangle$, entonces $\Phi = 0$. Debido a que el principio de LTE puede fallar en la inter-región (tema aún por investigarse rigurosamente), el término de no equilibrio juega un papel muy importante para minimizar los errores incurridos por el uso del modelo de equilibrio en la región frontera.

La metodología empleada por Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a,b, 1997a,b, 1998) fue la primera con la cual, eventualmente, se deriva rigurosamente la condición de salto para el flux de cualquier potencial entre medios homogéneos; la cual contiene cantidades de exceso difíciles de determinar. Aunque su desarrollo teórico se aplicó a un medio poroso adyacente a un fluido libre, su aplicabilidad puede extenderse a cualquier tipo de configuración. Sin embargo, aún falta por determinar sistemáticamente la condición de salto para el campo, lo cual, a la fecha, es aún un problema abierto. Con fines ilustrativos, es oportuno resumir la metodología de Ochoa-Tapia y Whitaker:

- Utilizando el método del promedio volumétrico, obtener ecuaciones efectivas válidas en todo el dominio. Esto se logra evitando imponer restricciones de escala durante el desarrollo.
- Obtener las ecuaciones efectivas para cada región homogénea mediante la imposición de restricciones asociadas con cada región.
- Integrar las ecuaciones obtenidas en un dominio suficientemente grande que incluya porciones de cada región homogénea. Posteriormente, se restan las ecuaciones de medio efectiva integradas a la ecuación integrada válida en todo el dominio.
- La forma de la ecuación resultante sugiere definir cantidades de exceso similares a las que resultan en balances entre fases homogéneas (Gibbs, 1948; Slattery, 1967b).
- El resultado representa la condición de salto en su forma más completa. En la medida de lo posible, es útil agrupar todos los términos desconocidos en uno solo.

En un trabajo posterior, Wood y col. (2000) obtuvieron la condición de salto efectiva para una reacción de primer orden en una superficie catalítica heterogénea. Para ello introducen un coeficiente de reacción efectivo que depende de las propiedades locales de la superficie reactiva; en otras palabras, de la distribución espacial de los sitios activos del catalizador. Uno de los resultados más importantes en este trabajo es la relación de promedios de cantidades de exceso,

$$\langle \psi \rangle_s = \langle \psi_s \rangle_{\omega\eta} \quad (1.29)$$

donde $\langle \bullet \rangle_{\omega\eta}$ se refiere a un promedio en área en la frontera $\omega - \eta$. Esta ecuación está limitada a casos cuando el radio de curvatura de la superficie divisoria $\omega - \eta$ es mucho mayor al radio del volumen de promediado, y cuando la propiedad ψ no está correlacionada con la posición radial dentro del volumen de promediado. La importancia de la Ecuación (1.29) recae en que permite relacionar directamente las cantidades de exceso que aparecen en el desarrollo de condiciones de salto, usando la metodología de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a), a cantidades promedio definidas en las regiones homogéneas utilizando esquemas de cerradura similares a los utilizados en el método del promedio volumétrico (Whitaker, 1999). Debe señalarse que el concepto de reacción efectiva manejada por Wood y col. (2000), es muy diferente conceptualmente al utilizado en *condiciones de frontera efectivas* (Veran y col., 2009). En la cual la superficie (rugosa y heterogénea) donde se lleva a cabo la reacción, es reemplazada por una plana (idealizada). Además, aquí el enlace de la física en las porciones del dominio cercanas a la superficie real, a la física del dominio lejos de la frontera, se hace por medio de aproximaciones en series de Taylor (usando solo los dos primeros términos). De esta forma, las propiedades efectivas de transporte que aparecen en la descripción macroscópica del problema son caracterizadas como de *primer orden*.

Además de los métodos descritos para la descripción de los coeficientes de salto hasta este punto, en la literatura se encuentran algunos trabajos basados enteramente en soluciones analíticas del campo microscópico. Por ejemplo, Min y Kim (2005) resolvieron analíticamente el problema de calor y flujo en un canal conteniendo un medio poroso con estructura periódica. En su desarrollo consideraron la *profundidad* del canal para encontrar la solución en la región de fluido libre. De esta forma, haciendo comparaciones con los modelos que involucran condiciones de salto en el flux de calor (Ecuaciones (1.23)) y de cantidad de movimiento (Ecuación (1.20)), determinaron los valores de β y $h_{\beta\sigma}$. No obstante, debido al tipo de geometría periódica utilizada para encontrar la solución, los resultados de este trabajo quedan limitados a este tipo de estructuras porosas.

Recientemente, Valdés-Parada (2007) hizo una combinación de las metodologías de Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a) y Wood y col. (2000) en el estudio de condiciones de frontera entre medios multifásicos. A diferencia del trabajo de Wood y col., en donde el análisis se centra entre una superficie heterogénea adyacente a una región homogénea, el análisis de Valdés-Parada se extiende a dos regiones homogéneas adyacentes. De esta forma, se derivaron las condiciones de salto asociadas con las superficie divisoria que separa a las regiones homogéneas, y se obtiene la manera de predecir las cantidades de exceso que aparecen mediante el problema de cerradura correspondiente. Una primera aplicación de esta metodología fue sobre el problema de transporte de masa con reacción heterogénea de primer orden (Valdés-Parada y col., 2006), con ello, eventualmente, se obtuvo la condición de salto apropiada, y el problema de cerradura que permite predecir el coeficiente de reacción efectiva contenido en la condición de salto. Además, este tipo de análisis se extendió a sistemas que involucran también adsorción en la matriz sólida (Valdés-Parada y col., 2009a), en sistemas de emulsión doble (Espinosa-Paredes, 2006, 2007; Morales-Zárte y col., 2008), y en problemas de transporte de cantidad de movimiento (Valdés-Parada y col., 2007b).

Posteriormente, Valdés-Parada y col. (2007c) derivaron la ecuación gobernante macroscópica para el transporte de masa solo por medios difusivos. Utilizando la aproximación de un solo dominio, desarrolló el problema de cerradura que permite predecir el tensor de difusividad efectiva en la inter-región. Para ello, resolvió el problema de cerradura en celdas unitarias colocadas en diferentes posiciones a través de la inter-región. De esta manera, la dependencia espacial de la difusividad efectiva se logra al asociarla al centroide de cada celda. A diferencia de las celdas unitarias utilizadas comúnmente en el seno de las regiones homogéneas, Valdés-Parada y col. utilizaron una celda suficientemente grande para capturar convenientemente los cambios geométricos importantes de la inter-región (esta idea es retomada en este trabajo para predecir los coeficientes efectivos de los modelos ODA para el transporte de calor). Al contar con la dependencia espacial de los coeficientes efectivos, usando un método iterativo los investigadores fueron capaces de estimar las cantidades de exceso que aparecen en la condición de salto. Este tipo de procedimiento fue aplicado posteriormente para el cálculo del coeficiente de salto que aparece en el problema de transporte de cantidad de movimiento, β , (Valdés-Parada y col., 2009b).

General

Desarrollar condiciones de salto completas cerradas para el transporte de calor por convección y conducción entre un medio poroso homogéneo y una región de solo fluido.

Específicos

Para el transporte de calor por convección y conducción entre un medio poroso homogéneo y una región de solo fluido:

- Desarrollar las ecuaciones de transferencia generalizadas para los modelos de equilibrio y no equilibrio local térmico.
- Predecir los coeficientes de transporte efectivos involucrados en las ecuaciones de transferencia generalizadas.
- Aplicar las ecuaciones de transferencia generalizadas en el modelado de un caso práctico, y comparar su campo de solución con resultados surgidos de simulaciones numéricas directas.
- Desarrollar las condiciones de salto para la temperatura y el flux de calor.
- Predecir los coeficientes que aparecen en las condiciones de salto.

Parte I

El modelo de un solo dominio

2.1. Ecuaciones puntuales

El sistema en consideración se presenta en la Figura 2.1. La fase fluida es denotada como la fase- β mientras que la sólida como fase- σ . Se asume que el mismo fluido satura el medio poroso y fluye sobre éste último de manera similar al sistema estudiado por Beavers y Joseph (1967). La ecuación gobernante puntual para la transferencia de calor en la fase fluida es,

$$(\rho c_P)_\beta \left[\frac{\partial T_\beta}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_\beta T_\beta) \right] = \nabla \cdot (k_\beta \nabla T_\beta) \quad (2.1)$$

donde $(\rho c_P)_\beta$ y k_β son la capacidad calorífica por volumen y la conductividad térmica de la fase fluida respectivamente; mientras que T_β es la temperatura puntual del fluido. El campo de velocidad, \mathbf{v}_β , se obtiene de resolver ya sea la Ecuación de Stokes o la Ecuación de Navier-Stokes, y suponiendo que el fluido es Newtoniano e incompresible. Además, debido a que se considera un medio poroso rígido la condición de no deslizamiento, $\mathbf{v}_\beta = 0$, es impuesta en la interfase que separa al fluido del sólido, $A_{\beta\sigma}$. Nótese que en la Ecuación (2.1) se ha mantenido la contribución convectiva del transporte de calor, mientras que para el transporte de cantidad de movimiento pudieran despreciarse los efectos inerciales. Esto implica que los resultados que se obtengan de esta manera, son válidos para ciertas condiciones de transporte en el sistema, particularmente en condiciones con flujo laminar.

La ecuación correspondiente para la fase sólida es,

$$(\rho c_P)_\sigma \frac{\partial T_\sigma}{\partial t} = \nabla \cdot (k_\sigma \nabla T_\sigma) \quad (2.2)$$

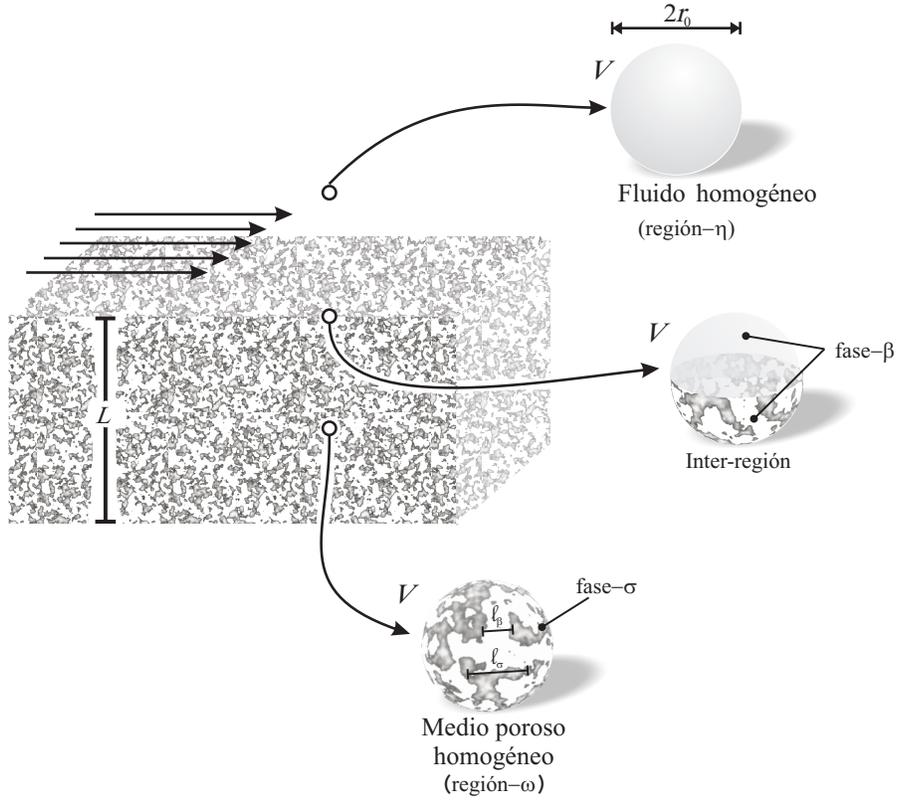


Figura 2.1. Sistema multifásico mostrando las regiones y fases homogéneas, el volumen promediante y longitudes características.

De manera análoga, $(\rho c_P)_\sigma$ y k_σ representan la capacidad calorífica volumétrica y la conductividad térmica del sólido respectivamente. Además, en la interfase $A_{\beta\sigma}$ se aplican condiciones de continuidad para el flux de calor y la temperatura,

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (k_\beta \nabla T_\beta) = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (k_\sigma \nabla T_\sigma) \quad (2.3a)$$

$$T_\beta = T_\sigma \quad (2.3b)$$

Donde $\mathbf{n}_{\beta\sigma}$ es el vector normal unitario dirigido desde la fase fluida a la fase sólida ($\mathbf{n}_{\beta\sigma} = -\mathbf{n}_{\sigma\beta}$).

Las Ecuaciones (2.1)-(2.3) junto con las correspondientes condiciones de frontera en las entradas y salidas del sistema y la condición inicial, constituyen por completo el problema en la escala puntual. Debe recalarse que las Ecuaciones (2.1) y (2.2) (y las condiciones de frontera interfaciales) son válidas siempre y cuando la fase fluida y la fase sólida estén presentes respectivamente. Sin embargo, la solución del problema puntual en todo el sistema

es un esfuerzo computacional altamente demandante. Por esta razón, frecuentemente es necesario llevar a cabo un proceso de escalamiento, el cual sistemáticamente reduce el número de grados de libertad involucrados en el modelo de la escala puntual. Con este fin, Ochoa-Tapia y Whitaker (1997a, 1998) utilizaron el método del promedio volumétrico para obtener las correspondientes ecuaciones válidas en la macroescala. En párrafos subsecuentes se muestran los pasos esenciales de este proceso. Además antes de continuar, es importante señalar que el escalamiento de las ecuaciones puntuales puede desarrollarse siempre y cuando ciertas *leyes de escalamiento* (usualmente, en forma de restricciones de escala y de tiempo) se puedan aplicar. Tal como lo describe Wood (2009a,b), una ley de escalamiento es una afirmación acerca de la estructura de las desviaciones en el sistema que permita reducir los grados de libertad. Como ejemplos se tienen: 1) condiciones de suavidad, 2) estructura geométrica periódica y 3) estructuras estadísticamente homogéneas. Cuando no se pueda identificar alguna ley de escalamiento en el sistema, entonces resolver completamente el problema en la escala puntual es el único curso de acción posible. Cabe añadir que, bajo estas situaciones, la solución del problema en la escala puntual en dominios reducidos es una alternativa razonable para propósitos de comparación. Esto es conocido como *Simulación Numérica Directa*. Por último, cabe señalar que gran parte del contenido del presente capítulo se encuentra publicado en la literatura (Aguilar-Madera y col., 2011a).

2.2. Promediado volumétrico

Con el objetivo de suavizar espacialmente las ecuaciones puntuales, se introduce un dominio de promediado V , también llamado *Volumen Elemental Representativo* (REV por sus siglas en inglés: Representative Elementary Volume) (Bear, 1972) cuya magnitud volumétrica es \mathcal{V} . Así, en términos del REV se introduce el operador de promediado superficial de cualquier propiedad continua definida en cierta fase, ψ_λ ($\lambda = \beta, \sigma$), como sigue

$$\langle \psi_\lambda \rangle |_{\mathbf{x}} = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{V_\lambda(\mathbf{x})} \psi_\lambda |_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\lambda} dV \quad (2.4)$$

donde V_λ es el dominio ocupado por la fase- λ dentro del volumen de promediado; \mathbf{x} es el vector de posición que localiza el centroide de V con respecto a un marco de referencia externo, y \mathbf{y}_λ es el vector de posición que localiza puntos de la fase- λ dentro de V con respecto al centroide. Éstos vectores se muestran en la Figura 2.2.

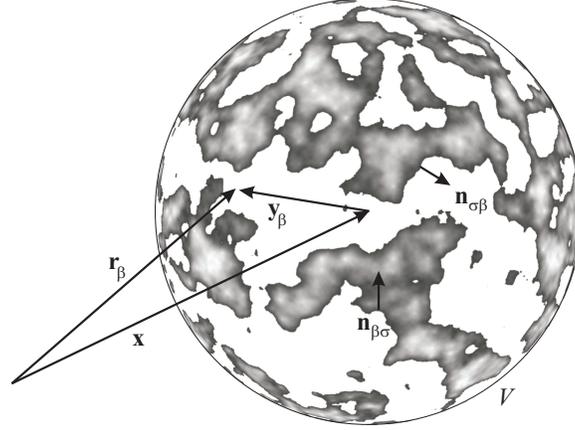


Figura 2.2. Vectores asociados con el dominio de promediado.

El operador de promedio intrínseco se define como,

$$\langle \psi_\lambda \rangle^\lambda \Big|_{\mathbf{x}} = \frac{1}{\mathcal{V}_\lambda(\mathbf{x})} \int_{V_\lambda(\mathbf{x})} \psi_\lambda|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\lambda} dV \quad (2.5)$$

Ambos operadores están relacionados de la siguiente manera,

$$\langle \psi_\lambda \rangle = \varepsilon_\lambda(\mathbf{x}) \langle \psi_\lambda \rangle^\lambda \quad (2.6)$$

donde $\varepsilon_\lambda = \mathcal{V}_\lambda(\mathbf{x})/\mathcal{V}$ es la fracción volumétrica de la fase- λ dentro del volumen de promediado. En este punto además, es importante resaltar que las Ecuaciones (2.4) y (2.5) al igual que la fracción volumétrica están evaluadas en la posición \mathbf{x} . Esto es conveniente para la derivación de modelos promedio que son válidos en todo el dominio (es decir, en las dos regiones homogéneas y la inter-región que las separa).

Una afirmación suficiente para que la Ecuación (2.4) sea una *definición precisa*¹ (Whitaker, 1986), es que el tamaño del volumen de promediado satisfaga la restricción de escala,

$$\ell_\lambda \ll r_0 \ll L \quad (2.7)$$

y además, cumpliéndose la restricción anterior se evitan las heterogeneidades de la micro-escala, cuya longitud característica es ℓ_λ , y de la macro-escala, con longitud característica L (véase la Figura 2.1). Esto garantiza además que se suavice espacialmente la propiedad que se

¹Aquí *definición precisa* se refiere a la situación en la cual hay una adecuada comparación entre datos experimentales y cantidades promedio teóricas.

está promediando, y se evita la pérdida de demasiada información del fenómeno proveniente de la micro-escala.

2.2.1. El modelo de no equilibrio local térmico

Ahora, con el objetivo de desarrollar el modelo promedio de no equilibrio, se aplica el operador de promediado superficial, Ecuación (2.4), a la ecuación gobernante puntual, Ecuación (2.1), para obtener,

$$(\rho c_P)_\beta \left[\frac{\partial \langle T_\beta \rangle}{\partial t} + \langle \nabla \cdot (\mathbf{v}_\beta T_\beta) \rangle \right] = \langle \nabla \cdot (k_\beta \nabla T_\beta) \rangle \quad (2.8)$$

En este resultado se ha considerado que las propiedades físicas son constantes dentro del volumen de promediado, y además que V_β no depende del tiempo. Para seguir en el desarrollo es necesario intercambiar diferenciación e integración. Para ello se recurre al *Teorema de Promediado Espacial* (SAT por sus siglas en inglés: Spatial Averaging Theorem) (Slattery, 1967a; Whitaker, 1967; Howes y Whitaker, 1985),

$$\langle \nabla \psi_\beta \rangle = \nabla \langle \psi_\beta \rangle + \frac{1}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \psi_\beta|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} dA \quad (2.9)$$

El SAT requiere que las propiedades promedio sean continuas y diferenciables, lo cual ocurre cuando se acepta la restricción de escala de la Ecuación (2.7).

La aplicación del SAT a la Ecuación (2.8) produce,

$$(\rho c_P)_\beta \left[\varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle T_\beta \rangle^\beta}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta T_\beta \rangle \right] = \nabla \cdot (k_\beta \langle \nabla T_\beta \rangle) + \frac{k_\beta}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla T_\beta|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} dA \quad (2.10)$$

Aquí se ha utilizado la condición de no deslizamiento y la definición de variable promedio intrínseca en el lado derecho de la ecuación. Una segunda aplicación del SAT en el primer término del lado derecho de la Ecuación (2.10) produce,

$$\begin{aligned} (\rho c_P)_\beta \left[\varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle T_\beta \rangle^\beta}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta T_\beta \rangle \right] &= \frac{k_\beta}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla T_\beta|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} dA \\ &+ \nabla \cdot \left[\varepsilon_\beta(\mathbf{x}) k_\beta \nabla \langle T_\beta \rangle^\beta + \frac{k_\beta}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \left(T_\beta|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} - \langle T_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{x}} \right) dA \right] \end{aligned} \quad (2.11)$$

en donde adicionalmente ha sido utilizada la siguiente relación que se puede deducir a partir del SAT,

$$\nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) = -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} dA \quad (2.12)$$

Ahora, con el fin de eliminar las variables puntuales, T_β y \mathbf{v}_β , de la Ecuación (2.11) se introducen las siguientes descomposiciones espaciales (Gray, 1975),

$$T_\beta|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} = \langle T_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} + \tilde{T}_\beta|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} \quad (2.13a)$$

$$\mathbf{v}_\beta|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} = \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} + \tilde{\mathbf{v}}_\beta|_{\mathbf{x}+\mathbf{y}_\beta} \quad (2.13b)$$

y después de sustituirlas en la Ecuación (2.11) se tiene,

$$\begin{aligned} (\rho c_P)_\beta \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle T_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{x}}}{\partial t} = & -(\rho c_P)_\beta \nabla \cdot \left\langle \left(\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{r}_\beta} + \tilde{\mathbf{v}}_\beta|_{\mathbf{r}_\beta} \right) \left(\langle T_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{r}_\beta} + \tilde{T}_\beta|_{\mathbf{r}_\beta} \right) \right\rangle \\ & + \nabla \cdot \left[\varepsilon_\beta(\mathbf{x}) k_\beta \nabla \langle T_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{x}} + \frac{k_\beta}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \left(\langle T_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{r}_\beta} - \langle T_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{x}} + \tilde{T}_\beta|_{\mathbf{r}_\beta} \right) dA \right] \\ & + \frac{k_\beta}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \left(\nabla \langle T_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{r}_\beta} + \nabla \tilde{T}_\beta|_{\mathbf{r}_\beta} \right) dA \end{aligned} \quad (2.14)$$

En la Ecuación (2.14) $\mathbf{r}_\beta = \mathbf{x} + \mathbf{y}_\beta$ es el vector de posición que localiza puntos de la fase- β dentro del dominio de promediado, con respecto a un marco de referencia externo (véase la Figura 2.2). Una expresión similar (sin los términos que involucran el campo de velocidad) se puede obtener para la ecuación de la fase- σ siguiendo el mismo procedimiento.

La Ecuación (2.14) es mas complicada que su contraparte puntual, Ecuación (2.1), debido a que aún no se han desarrollado simplificaciones significativas en el proceso de suavizado espacial. No obstante, es importante entender el significado físico de los términos que constituyen la Ecuación (2.14). En este sentido, debe señalarse que además de los términos esperados (es decir, acumulación, convección, conducción e intercambio entre fases), están presentes términos adicionales no locales (convectivos y dispersivos).

En su forma presente, la Ecuación (2.14) es de poco uso debido a que no está expresada solamente en términos de cantidades promediadas en volumen. El proceso de determinar la funcionalidad de las desviaciones espaciales con las correspondientes cantidades promedio es conocido como *cerradura*. Los detalles de la derivación y solución formal del problema de cerradura es un proceso muy elaborado, y este se presenta en el Apéndice A. En este punto,

es suficiente con escribir la solución formal del campo de desviaciones espaciales para las dos fases:

$$\tilde{T}_\beta = \mathbf{b}_{\beta\beta} \cdot \nabla \langle T_\beta \rangle^\beta + \mathbf{b}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \langle T_\sigma \rangle^\sigma - s_\beta \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) \quad (2.15a)$$

$$\tilde{T}_\sigma = \mathbf{b}_{\sigma\beta} \cdot \nabla \langle T_\beta \rangle^\beta + \mathbf{b}_{\sigma\sigma} \cdot \nabla \langle T_\sigma \rangle^\sigma + s_\sigma \left(\langle T_\sigma \rangle^\sigma - \langle T_\beta \rangle^\beta \right) \quad (2.15b)$$

Aquí los vectores $\mathbf{b}_{\beta\beta}$, $\mathbf{b}_{\beta\sigma}$, $\mathbf{b}_{\sigma\beta}$, $\mathbf{b}_{\sigma\sigma}$ y los escalares s_β y s_σ son las llamadas *variables de cerradura*. Tal como se discute en el Apéndice A, para obtener las Ecuaciones (2.15a) y (2.15b) se han impuesto las siguientes restricciones de escala:

$$r_0 \ll L \quad (2.16a)$$

$$r_0^2 \ll L^2 \quad (2.16b)$$

En estas restricciones se ha supuesto que la longitud característica asociada con las variaciones espaciales de la temperatura promedio y sus gradientes, puede representarse por la longitud macroscópica del sistema, L . En el caso de la longitud característica del gradiente de la temperatura, esto representa una *subestimación*, dado que usualmente, para sistemas con gradientes *suaves* y en ausencia de alguna fuente o sumidero térmico, dicha longitud es mucho mayor que el tamaño completo del sistema medio poroso-fluido. Además, se ha tomado r_0 como la longitud característica de los cambios espaciales de la porosidad, lo que de igual manera representa una *subestimación* en el seno del medio poroso donde generalmente es cercano al valor de L .

La sustitución de la Ecuación (2.15a) en (2.14) produce, después de cierto esfuerzo algebraico, la GTE para la fase- β ,

$$\varepsilon_\beta(\mathbf{x}) (\rho c_P)_\beta \frac{\partial \langle T_\beta \rangle^\beta}{\partial t} + (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot \left[\langle \mathbf{v}_\beta \rangle \langle T_\beta \rangle^\beta - \mathbf{u}_{\beta\beta}^*(\mathbf{x}) \langle T_\beta \rangle^\beta - \mathbf{u}_{\beta\sigma}^*(\mathbf{x}) \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right] = \nabla \cdot \left[\mathbf{K}_{\beta\beta}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle T_\beta \rangle^\beta + \mathbf{K}_{\beta\sigma}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right] - a_v h(\mathbf{x}) \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) \quad (2.17)$$

En la Ecuación (2.17) se han introducido varios coeficientes efectivos, los cuales pueden ser calculados a partir de la solución de los problemas de cerradura asociados (presentados en el Apéndice A). Por ejemplo, el tensor $\mathbf{K}_{\beta\beta}^*(\mathbf{x})$ que representa la dispersión de calor total en la fase- β se define como

$$\mathbf{K}_{\beta\beta}^*(\mathbf{x}) = k_\beta \left(\varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \mathbf{I} + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b}_{\beta\beta} dA \right) - (\rho c_p)_\beta \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \mathbf{b}_{\beta\beta} \rangle_{\mathbf{x}} \quad (2.18)$$

Además, $\mathbf{u}_{\beta\beta}^*$ es un vector tipo-velocidad que resulta de la conducción y dispersión en la fase- β , mientras que en conjunto el término $(\rho c_P)_\beta \nabla \cdot [\mathbf{u}_{\beta\sigma}^* \langle T_\sigma \rangle^\sigma]$ representa un término tipo-convectivo que surge de la interacción entre las fases sólida y fluida. Finalmente, $a_v h$ representa el coeficiente de transferencia de calor interfacial por unidad de volumen. Evidentemente, este coeficiente debe tener un valor máximo en el seno del medio poroso y debe disminuir hasta un valor de cero en el fluido homogéneo. Esto se demostrará más adelante en este trabajo junto con la dependencia espacial de los otros coeficientes efectivos. En este punto, debe enfatizarse que se ha supuesto que la transferencia de calor en la fase sólida ocurre solo por procesos conductivos, y no por conducción y convección como sucede en la fase fluida. Para mantener esta distinción en mente, se ha usado un superíndice * en algunos de los coeficientes efectivos involucrados en la Ecuación (2.17) para indicar que ellos tienen contribuciones generadas por el transporte convectivo, es decir, efectos dispersivos.

Cabe señalar que la Ecuación (2.17) fue derivada previamente por Ochoa-Tapia y Whitaker (1997a) suponiendo que la solución del problema de cerradura está dada por las Ecuaciones (2.15). Sin embargo, en este trabajo, las Ecuaciones (2.15a) y (2.15b) fueron obtenidas como la solución formal del problema de cerradura. De este modo, además de justificar la derivación previa de Ochoa-Tapia y Whitaker (1997a), este resultado permite calcular los coeficientes efectivo asociados como se mostrará mas adelante. De esta manera, los resultados de este trabajo complementan los de Ochoa-Tapia y Whitaker y proveen la información necesaria para predecir los coeficientes de salto asociados en el TDA.

Es importante señalar que la Ecuación (2.17) está limitada por la restricción de escala

$$\ell_\beta \ll r_0 \ll L \quad (2.19)$$

Estas restricciones no impiden que la Ecuación (2.17) sea aplicable en todo el dominio, debido a que éstas son menos restrictivas que las que se aplican en el seno de las regiones homogéneas. Además, lo anterior se debe a la suposición de que las longitudes características del sistema entero satisfacen dichas restricciones de escala. Cuando este no es el caso, se obtienen modelos promedio no locales los cuales sustancialmente incrementan la complejidad. Se recalca que el análisis de este tipo de modelos macroscópicos se encuentra fuera de los objetivos de este trabajo.

Si se repite el procedimiento que condujo a la Ecuación (2.17), se obtiene la GTE para la fase sólida,

$$\varepsilon_\sigma(\mathbf{x}) (\rho c_P)_\sigma \frac{\partial \langle T_\sigma \rangle^\sigma}{\partial t} - (\rho c_P)_\sigma \nabla \cdot \left[\mathbf{u}_{\sigma\beta}(\mathbf{x}) \langle T_\beta \rangle^\beta + \mathbf{u}_{\sigma\sigma}(\mathbf{x}) \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right] = \nabla \cdot \left[\mathbf{K}_{\sigma\beta}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle T_\beta \rangle^\beta + \mathbf{K}_{\sigma\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right] - a_v h(\mathbf{x}) \left(\langle T_\sigma \rangle^\sigma - \langle T_\beta \rangle^\beta \right) \quad (2.20)$$

Es interesante notar que la Ecuación (2.20) involucra coeficientes tipo-convectivos a pesar de que no hay transporte por convección en la fase sólida, tal como lo habían señalado previamente Quintard y col. (1997). La naturaleza de estos términos se atribuye a una compleja interacción entre el transporte interfacial y conducción efectiva a nivel del poro asociados con diferentes fuerzas impulsoras (fuentes macroscópicas). Para clarificar este punto, se remite al lector a revisar las definiciones de cada uno de los coeficientes tipo-convectivos (y de los demás coeficientes también) en la parte final del Apéndice A.

2.2.2. El modelo de equilibrio local térmico

El desarrollo presentado hasta aquí constituye el modelo de no equilibrio local térmico, el cual consiste de dos ecuaciones de medio efectivo, una para cada fase en el sistema, Ecuaciones (2.17) y (2.20). Sin embargo, estudios previos han sugerido que modelos que involucran una sola temperatura promedio (con un peso apropiado), son suficientes para obtener predicciones razonables del transporte de calor en el seno del medio poroso. La temperatura promedio en este caso se define como sigue (Whitaker, 1999, Capítulo 2),

$$\langle T \rangle|_{(\mathbf{x})} = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{V(\mathbf{x})} T dV = \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \langle T_\beta \rangle^\beta + \varepsilon_\sigma(\mathbf{x}) \langle T_\sigma \rangle^\sigma \quad (2.21)$$

Así, es posible representar cada temperatura promedio intrínseca en términos de $\langle T \rangle$ (Whitaker, 1991),

$$\langle T_\beta \rangle^\beta = \langle T \rangle + \hat{T}_\beta \quad (2.22a)$$

$$\langle T_\sigma \rangle^\sigma = \langle T \rangle + \hat{T}_\sigma \quad (2.22b)$$

Donde \hat{T}_β y \hat{T}_σ representan las desviaciones macroscópicas de las temperaturas promedio intrínsecas en las fases- β y $-\sigma$ con respecto a $\langle T \rangle$, respectivamente. Es claro que en la región de fluido homogéneo $\hat{T}_\beta = 0$ debido a que solo hay una fase en el dominio de promediado, mientras que en la región porosa se tiene que (véase Whitaker, 1999, Sección 2.3)

$$\varepsilon_\beta \hat{T}_\beta = (\varepsilon_\beta - 1) \hat{T}_\sigma = \varepsilon_\beta (1 - \varepsilon_\beta) \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) \quad (2.23)$$

De esta manera, puede afirmarse que la condición de *equilibrio local térmico* es válida siempre y cuando la diferencia $(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma) = 0$, lo cual como consecuencia implica que

$$\langle T_\beta \rangle^\beta = \langle T_\sigma \rangle^\sigma = \langle T \rangle, \text{ equilibrio local térmico} \quad (2.24)$$

En su texto, Whitaker (1999) concluye que la diferencia de las temperaturas promedio son cercanas a cero cuando las propiedades físicas de las fases sólida y fluida son parecidas, o debido a la disparidad de escalas existente entre los procesos de transporte en la microescala y en la macroescala. Para detallar este punto, se remite al lector a la Ecuación (2.3-39) de Whitaker (1999).

Para derivar la ecuación gobernante de $\langle T \rangle$ se sustituye la descomposición macroscópica dada por la Ecuación (2.22) en (2.17) y (2.20) y después se suman los resultados para obtener (Ochoa-Tapia y Whitaker, 1998)

$$\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot \{[\langle \mathbf{v}_\beta \rangle + \mathbf{u}(\mathbf{x})] \langle T \rangle\} = \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle T \rangle] + \Phi(\mathbf{x}) \quad (2.25)$$

donde se introdujo

$$\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) = \varepsilon_\beta(\mathbf{x})(\rho c_P)_\beta + \varepsilon_\sigma(\mathbf{x})(\rho c_P)_\sigma \quad (2.26a)$$

$$\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) = \mathbf{K}_{\beta\beta}^*(\mathbf{x}) + \mathbf{K}_{\beta\sigma}^*(\mathbf{x}) + \mathbf{K}_{\sigma\beta}(\mathbf{x}) + \mathbf{K}_{\sigma\sigma}(\mathbf{x}) \quad (2.26b)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}_{\beta\beta}^*(\mathbf{x}) + \mathbf{u}_{\beta\sigma}^*(\mathbf{x}) + \frac{(\rho c_P)_\sigma}{(\rho c_P)_\beta} [\mathbf{u}_{\sigma\beta}(\mathbf{x}) + \mathbf{u}_{\sigma\sigma}(\mathbf{x})] \quad (2.26c)$$

El término fuente Φ en la Ecuación (2.25) agrupa todos los términos involucrados en la desviaciones macroscópicas de la siguiente manera (Ochoa-Tapia y Whitaker, 1998),

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{x}) = & \varepsilon_\beta \varepsilon_\sigma \left[(\rho c_P)_\beta - (\rho c_P)_\sigma \right] \frac{\partial}{\partial t} \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) \\ & - \nabla \cdot \left[(\nabla \varepsilon_\beta) (\varepsilon_\beta k_\beta + \varepsilon_\sigma k_\sigma) \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) \right] + \nabla \cdot \left[\varepsilon_\beta \varepsilon_\sigma (k_\beta - k_\sigma) \nabla \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) \right] \\ & - (\rho c_P)_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \cdot \nabla \left[\varepsilon_\sigma \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) \right] \quad (2.27) \end{aligned}$$

Debe recalarse que cada término de esta ecuación está evaluado en la posición (\mathbf{x}) .

Por mencionarse en otras palabras, la Ecuación (2.25) es solo otra manera de expresar las Ecuaciones (2.17) y (2.20) debido a que aún no se ha utilizado la suposición de equilibrio local térmico. Ciertamente, siempre y cuando Φ pueda considerarse despreciable en comparación con los otros términos de la Ecuación (2.25), se puede afirmar que el modelo corresponde al de equilibrio local térmico. Esta condición requiere de suposiciones y restricciones de escala, las

cuales se encuentran en muchos casos debido a la disparidad de escalas que existen en sistemas multifásicos (Whitaker, 1991). Como se mencionó anteriormente, algunas restricciones de escala no son fáciles de satisfacer en la zona de cambios geométricos drásticos. Esto genera la necesidad de determinar las condiciones en las cuales, el modelo de equilibrio local térmico (es decir, la Ecuación (2.20) con $\Phi = 0$) se puede utilizar en la inter-región. Esta situación se retomará mas adelante.

2.3. Condiciones de frontera para los modelos promedio

En este punto el desarrollo teórico corresponde a la formulación de un solo dominio, por lo tanto no es necesario especificar las condiciones de frontera entre el medio poroso y el fluido. Sin embargo, con el objetivo de completar el planteamiento de los modelos promedio, aún se necesitan considerar las condiciones de frontera que aplican en el seno del medio poroso homogéneo y en el fluido homogéneo, es decir, en $\mathbf{x} = \mathbf{x}_\omega$ y $\mathbf{x} = \mathbf{x}_\eta$, respectivamente (véase la Figura 2.3). Como una primera propuesta, es común imponer condiciones tipo Dirichlet en las fronteras correspondientes del seno del medio poroso y de la región de fluido libre,

$$\text{En } \mathbf{x}_\omega, \quad \langle T_\beta \rangle^\beta = T_{\beta,\omega}, \quad \langle T_\sigma \rangle^\sigma = T_{\sigma,\omega}, \quad \langle T \rangle = T_\omega \quad (2.28a)$$

$$\text{En } \mathbf{x}_\eta, \quad \langle T_\beta \rangle^\beta = \langle T \rangle = T_\eta \quad (2.28b)$$

donde $T_{\beta,\omega}$, $T_{\sigma,\omega}$, T_ω and T_η son temperaturas conocidas en dichas posiciones. Esto no es una regla, frecuentemente en el seno de las regiones homogéneas también se impone cierto flux de calor conocido.

Una situación muy importante surge con la condición de frontera de la ecuación del sólido en el modelo de no equilibrio, Ecuación (2.20). Nótese que en \mathbf{x}_η ya no existe sólido dentro de V , es decir $\varepsilon_\sigma = 0$, y por lo tanto no es posible especificar una condición de frontera para $\langle T_\sigma \rangle^\sigma$ en esta posición. Por esta razón, se impone que la temperatura promedio del sólido satisfaga la siguiente restricción

$$0 = - \left[(u_{\sigma\beta})_y \langle T_\beta \rangle^\beta + (u_{\sigma\sigma})_y \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right] \Big|_{-0.5\delta} \frac{(\rho c_P)_\sigma}{\delta} - \frac{1}{\delta} \left[(K_{\sigma\beta})_{yy} \frac{d\langle T_\beta \rangle^\beta}{dy} + (K_{\sigma\sigma})_{yy} \frac{d\langle T_\sigma \rangle^\sigma}{dy} \right] \Big|_{-0.5\delta} - \frac{1}{\delta} \int_{y=-r_0}^{y=+r_0} a_v h \left(\langle T_\sigma \rangle^\sigma - \langle T_\beta \rangle^\beta \right) dy \quad (2.29)$$

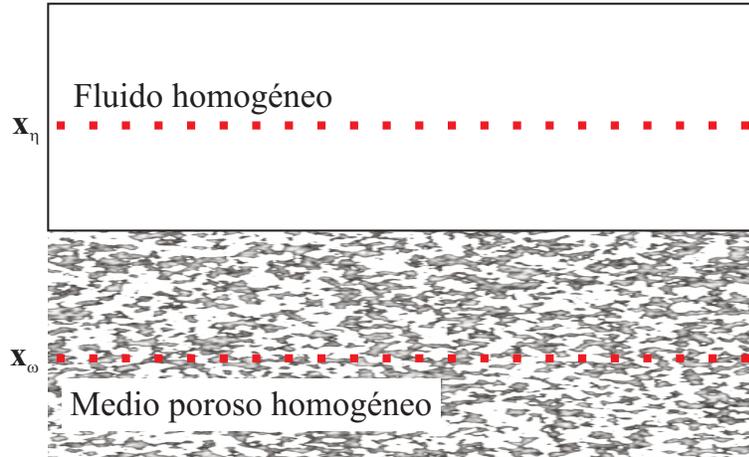


Figura 2.3. Dominio de solución para los modelos promedio.

la cual resulta de integrar la Ecuación (2.20) en la inter-región (es decir desde $y = -r_0$ hasta $y = r_0$) suponiendo que las temperaturas promedio se encuentran en estado estacionario y solo dependen de la dirección y . Se reconoce que esta es una suposición seria para la mayoría de los casos de aplicación, y para ello se requiere elaborar la restricción integral (2.29) en forma completa, es decir en 3 dimensiones, y en estado transitorio. Sin embargo, tal ecuación se utilizará en los casos de comparación de los perfiles de temperatura mostrados en la Sección 3.2, en donde la configuración del problema permite plantear la suposición de estado estacionario unidimensional.

En la Ecuación (2.29) δ es el grosor de la inter-región (de longitud similar a $2r_0$). La restricción de la Ecuación (2.29) representa la *condición de solvabilidad* ó la *condición de compatibilidad* asociada con la Ecuación (2.20). Esta condición establece que en el estado estacionario el campo de temperaturas debe satisfacer el *principio del máximo*, el cual dice que *en el estado estacionario, y en ausencia de algún tipo de fuente, la temperatura no puede tener un valor máximo en el interior del dominio*. Nótese que esta condición aplica incluso cuando la temperatura es constante en todo el dominio (véase Haberman, 2004, Sección 2.5.4). Un corolario de este principio es que solo puede haber valores máximos o mínimos de la temperatura promedio en las fronteras del dominio de solución. Este principio no se viola con la introducción de la condición de compatibilidad de la Ecuación (2.29).

CAPÍTULO 3

PREDICCIÓN DE COEFICIENTES EFECTIVOS Y COMPARACIÓN CON DNS

3.1. Predicción de coeficientes efectivos

En esta sección se presenta la funcionalidad de los coeficientes efectivos con las propiedades de la microescala. Con la finalidad de ser breves y concisos en esta capítulo, aquí se presentan solo los coeficientes mas relevantes, es decir, aquéllos que tienen mayor orden de magnitud en comparación con los restantes. La dependencia espacial del resto de los coeficientes se presentan en el Apéndice B. Cabe señalar que todos los coeficientes efectivos presentaron una moderada dependencia con la porosidad del seno medio poroso $\varepsilon_{\beta,\omega}$, por lo que de igual manera, la funcionalidad que tienen los coeficientes con este parámetro se presenta en el Apéndice B.

3.1.1. Efecto de la intensidad de flujo y de las conductividades térmicas

En este caso el análisis se centra en la dependencia espacial de los tensores térmicos, el coeficiente de transferencia de calor interfacial y los términos tipo-convectivos para diferentes valores de la relación de conductividades térmicas $\kappa = k_\sigma/k_\beta$ y del número de Péclet de celda,

$$\text{Pe}_{\text{cell}} = \frac{(\rho c_P)_\beta \langle v_\beta \rangle_\omega^\beta \ell_{\text{cell}}}{k_\beta} \quad (3.1)$$

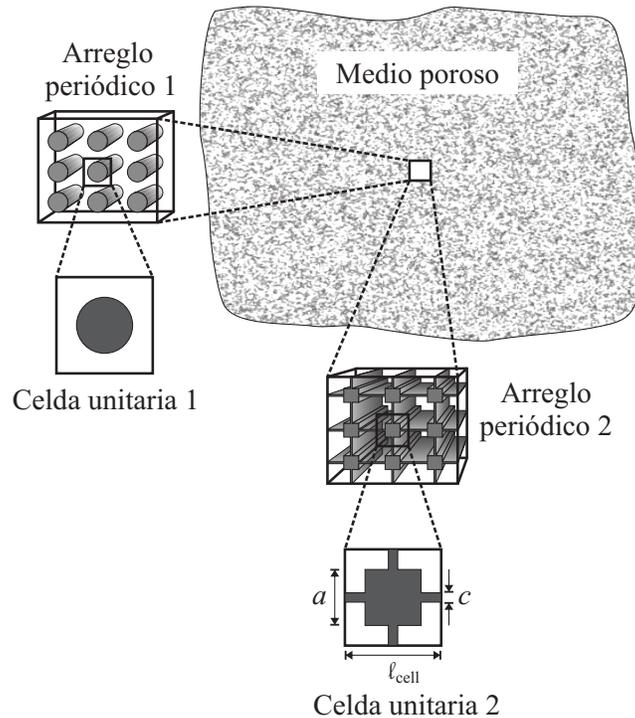


Figura 3.1. Tipos de modelos periódicos para representar la estructura porosa.

Para ello, la estructura porosa se modela como un arreglo periódico de cilindros que no están en contacto como el mostrado en la Figura 3.1 (arreglo periódico 1). Esto disminuye considerablemente los recursos de cómputo requeridos, al ser necesario resolver solamente celdas en 2D. Además, el hecho de que las partículas no estén en contacto entre sí facilita la inclusión de transporte de calor por convección forzada. Realmente, los dos modelos geométricos mostrados en la Figura 3.1 son poco realistas en comparación con estructuras porosas comunes; no obstante, en la literatura se ha encontrado que el uso de tales celdas simples lleva a predicciones de propiedades efectivas muy similares a las obtenidas bajo procedimientos de laboratorio (Eidsath y col., 1983; Ryan y col., 1983; Nozad y col., 1985a).

El cómputo de los coeficientes efectivos se llevó a cabo usando el software comercial basado en elemento finito Comsol Multiphysics®, el cual utiliza un algoritmo adaptativo para refinar la malla con la finalidad de asegurar que los resultados sean independientes del número de elementos computacionales. El procedimiento numérico consistió en resolver las ecuaciones de transporte de cantidad de movimiento para determinar el campo de velocidad en celdas unitarias de solución (véase la Figura A.1). Para llevar esto a cabo, se impone

una caída de presión en la dirección tangente a la superficie que divide al medio poroso del fluido libre (es decir, la dirección x). Estos resultados, entonces, se utilizan como datos de entrada en la solución de los problemas de cerradura asociados (véanse los problemas I, II y IIIa del Apéndice A.1) debido a que el campo de velocidad es independiente del campo de las variables de cerradura. Una vez que los campos de las variables de cerradura estén disponibles, estos se sustituyen en las Ecuaciones (A.33)-(A.34) para predecir los coeficientes efectivos.

En la Figura 3.2 se presenta la dependencia espacial de $\mathbf{K}_{\beta\beta}^*$, $\mathbf{K}_{\beta\sigma}^*$ y $\mathbf{K}_{\sigma\sigma}$ para diferentes valores de la relación de conductividades térmicas κ , mientras se mantiene fijo el valor de la porosidad, $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$, y el valor del número de Péclet de celda, $\text{Pe}_{\text{cell}} = 0.01$. Para los cálculos numéricos se optó por mantener fija una porosidad intermedia con el fin de evitar que los resultados se sesguen hacia situaciones cuando hay principalmente sólido o fluido. No se presentan los perfiles para $\mathbf{K}_{\sigma\beta}$ debido a que los resultados son iguales a los del coeficiente $\mathbf{K}_{\beta\sigma}^*$. Se encontró que con el valor del número de Péclet menor o igual a 0.01 la intensidad de flujo es suficientemente baja y el transporte por conducción es el mecanismo dominante; así, se observa que la dependencia espacial es lineal para todos los coeficientes en general. Esto es consistente con resultados previos para difusión pasiva entre un medio poroso y un fluido homogéneo (Valdés-Parada y col., 2007c). Además, en la vecindad del seno del medio poroso se recuperan los resultados reportados por Quintard y col. (1997). Tal como se esperaba, $\mathbf{K}_{\beta\beta}^* \rightarrow \mathbf{I}k_{\beta}$ en la vecindad del fluido homogéneo. En esta misma posición, se tiene que $\mathbf{K}_{\beta\sigma}^* = \mathbf{K}_{\sigma\sigma} \rightarrow \mathbf{0}$ debido a que las variables de cerradura tienden a cero conforme el centroide del REV se aproxima a la región de solo fluido.

Bajo situaciones en que $\text{Pe}_{\text{cell}} \ll 1$ se puede escribir que,

$$\mathbf{K}_{\beta\beta}^* = \left[K_{\beta\beta,\omega} + \frac{1}{2}(k_{\beta} - K_{\beta\beta,\omega}) \left(1 + \frac{y}{r_0} \right) \right] \mathbf{I} \quad (3.2a)$$

$$\mathbf{\Omega} = \left[\frac{\phi_{\omega}}{2} \left(1 - \frac{y}{r_0} \right) \right] \mathbf{I}; \quad \begin{aligned} \mathbf{\Omega} &= \mathbf{K}_{\beta\sigma}^*, \mathbf{K}_{\sigma\sigma} \\ \phi_{\omega} &= K_{\beta\sigma,\omega}^*, K_{\sigma\sigma,\omega} \end{aligned} \quad (3.2b)$$

Aquí se ha utilizado el subíndice ω para representar valores en el seno del medio poroso.

De acuerdo a la Ecuación (2.26b), el tensor de dispersión térmica total, \mathbf{K}_{eff}^* , involucrado en el modelo de equilibrio, Ecuación (2.25) con $\Phi = 0$, puede obtenerse al sumar los tensores térmicos contenidos en el modelo de no equilibrio, Ecuaciones (2.17) y (2.20). En la Figura 3.3 se presenta este resultado para las mismas condiciones utilizadas en la Figura 3.2. La

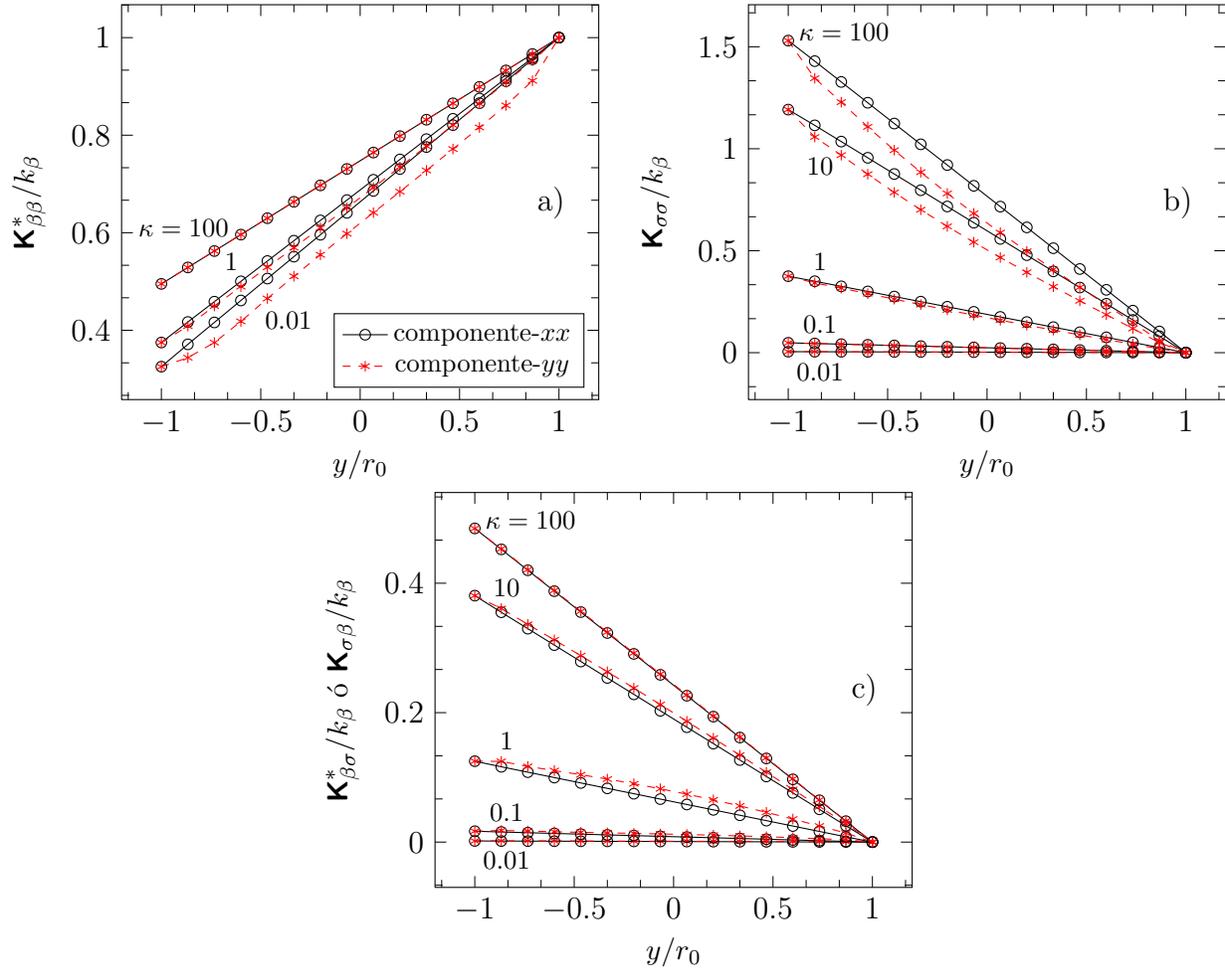


Figura 3.2. Dependencia espacial de a) $\mathbf{K}_{\beta\beta}^*$, b) $\mathbf{K}_{\sigma\sigma}$ y c) $\mathbf{K}_{\beta\sigma}^*$ para diferentes valores de κ tomando $\text{Pe}_{\text{cell}} = 0.01$ y $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$.

dependencia lineal de los perfiles se representan fácilmente por

$$\mathbf{K}_{eff}^* = \left[K_{eff,\omega} + \frac{1}{2}(k_\beta - K_{eff,\omega}) \left(1 + \frac{y}{r_0} \right) \right] \mathbf{I}, \quad \text{Pe}_{\text{cell}} \ll 1 \quad (3.3)$$

En este caso, $K_{eff,\omega}$ se puede obtener utilizando la celda de Chang (Chang, 1983) tal como se explica en el trabajo de Ochoa-Tapia y col. (1994). Los resultados para un arreglo bidimensional de cilindros que no se encuentran en contacto están dados por

$$\frac{K_{eff,\omega}}{k_\beta} = \frac{2\kappa - \varepsilon_{\beta,\omega}(\kappa - 1)}{2 + \varepsilon_{\beta,\omega}(\kappa - 1)} \quad (3.4)$$

En todas las gráficas presentadas en las Figuras 3.2 y 3.3 se muestran cálculos para un

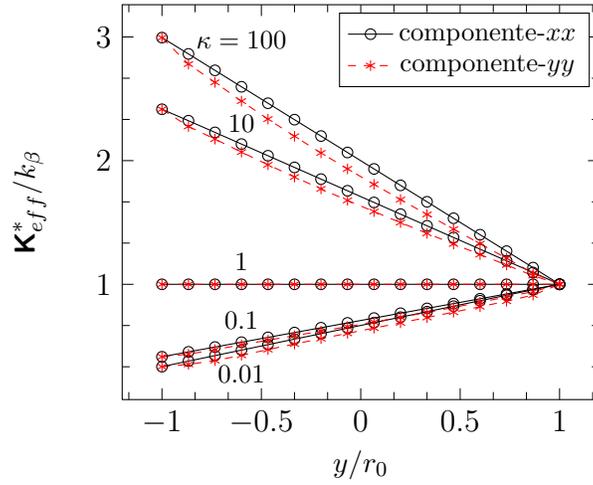


Figura 3.3. Dependencia espacial de \mathbf{K}_{eff}^* para diferentes valores de κ tomando $Pe_{cell} = 0.01$ y $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$.

valor máximo de $\kappa = 100$ debido a que para valores mayores todas las curvas colapsan prácticamente en la misma curva. La misma situación se encontró cuando $\kappa \leq 0.01$.

En este punto, se ha mantenido fijo el número de Péclet de la celda en un valor menor a 1, y se ha variado la relación de conductividades térmicas en todas las gráficas presentadas. Esto conduce a resultados que son aplicables solo para transporte de calor por conducción entre un medio poroso y un fluido. Con el objetivo de examinar la dependencia del tensor térmico con la intensidad de flujo, en la Figura 3.4 se presenta la dependencia espacial de $(K_{\beta\beta}^*)_{xx}$ para diferentes valores de Pe_{cell} en un rango de cuatro órdenes de magnitud. Se nota que, a medida que el número de Péclet aumenta, los perfiles se alejan de la tendencia lineal y adquieren una forma sigmodal para $y \in (-r_0, r_0)$. Cabe señalar, que solo se presentan los perfiles de $(K_{\beta\beta}^*)_{xx}$ por dos razones:

- Debido a que la dirección de flujo neto es tangente a la superficie divisoria entre el medio poroso y el fluido libre, los componentes yy del tensor térmico prácticamente no se afectan por cambios en el número de Péclet.
- Los órdenes de magnitud de los tensores $\mathbf{K}_{\beta\sigma}^*$ y $\mathbf{K}_{\sigma\sigma}$ son mucho menores comparados con el de $(K_{\beta\beta}^*)_{xx}$.

Con base en estos razonamientos, es razonable para $Pe_{cell} > 1$ considerar que $(K_{eff}^*)_{xx} = (K_{\beta\beta}^*)_{xx}$.

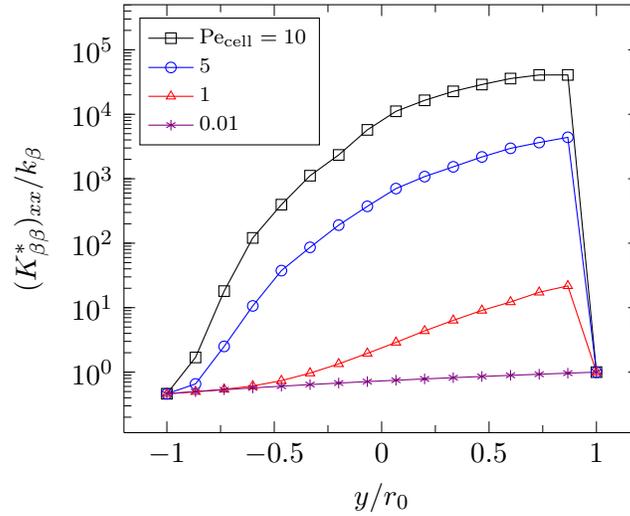


Figura 3.4. Dependencia espacial de $(K_{\beta\beta}^*)_{xx}$ para diferentes valores de Pe_{cell} , tomando $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$ y $\kappa = 10$.

El siguiente coeficiente que se presenta es el coeficiente de transferencia de calor por unidad de volumen, $a_v h$, el cual es normalizado con $k_{\beta}/\ell_{\text{cell}}^2$ en los resultados mostrados en la Figura 3.5. Este coeficiente exhibe una fuerte dependencia con κ cuando esta relación es menor o igual a uno. De hecho, para $\kappa > 10$ todas las curvas colapsan en una sola. Además, se encontró que $a_v h$ depende débilmente con el número de Péclet. Las curvas sigmoideas de la Figura 3.5 se ajustaron satisfactoriamente ($R^2 > 0.99$) a la siguiente ecuación tipo Boltzmann,

$$\frac{a_v h \ell_{\text{cell}}^2}{k_{\beta}} = A_2 + \frac{A_1 - A_2}{1 + \exp[(y/r_0 - x_0)/x_1]} \quad (3.5)$$

Los coeficientes A_1 , A_2 , x_0 y x_1 dependen de los valores de κ tal como se muestran en la Tabla 3.1, donde además, se ha incluido la dependencia con la porosidad del medio poroso homogéneo.

El último coeficiente efectivo que se presenta es el vector tipo-velocidad \mathbf{u} para el modelo de equilibrio. En esta parte no se presentan los resultados para los vectores involucrados en el modelo de no equilibrio. Esto con el fin de ser lo más breve posible y mostrar solo la información más relevante en esta parte del documento. Sin embargo, información más detallada acerca de los vectores tipo-velocidad se puede encontrar en el Apéndice B. En la Figura 3.6 se muestran los perfiles de los componentes x y y del vector \mathbf{u} para dos valores del número de Péclet de celda, y además considerando cambios en varios órdenes de magnitud

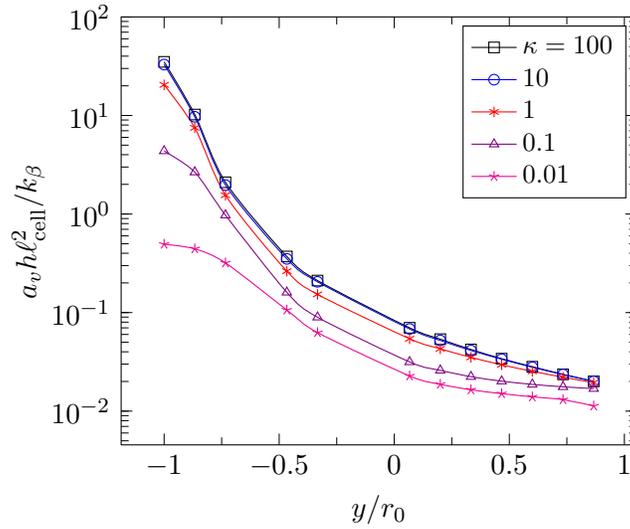


Figura 3.5. Dependencia espacial de $a_v h$ para diferentes valores de κ manteniendo fijo $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$ y $\text{Pe}_{\text{cell}} = 0.01$.

de κ . De los cálculos llevados a cabo, se sabe que para $\text{Pe}_{\text{cell}} \geq 1$ el componente x de \mathbf{u} predomina sobre el componente y , y para $\text{Pe}_{\text{cell}} \ll 1$ ocurre el caso contrario (es decir, predomina el componente y). Nótese en la Figura 3.6a que u_x aumenta conforme κ lo hace y es siempre positivo, además exhibe una dependencia espacial del tipo sigmodal en todos los casos. Mientras tanto, en la Figura 3.6b se observa que u_y es prácticamente cero para $\kappa < 10$ y aumenta drásticamente para $\kappa > 100$.

La relevancia del cómputo de las variaciones espaciales de los coeficientes efectivos se resumen en:

- Primero, los coeficientes efectivos determinan el campo de la temperatura promedio cuando se resuelven las GTE's.
- Segundo, los coeficientes efectivos son necesarios para el cómputo de los coeficientes de salto en el desarrollo de las condiciones de frontera involucradas en el modelo de dos dominios (Valdés-Parada y col., 2007b, 2009b).

3.1.2. Efecto del contacto partícula-partícula

Ahora se considera el efecto del contacto partícula-partícula sobre los coeficientes efectivos involucrados en los modelos LTNE y LTE. En este caso, el medio poroso es modelado

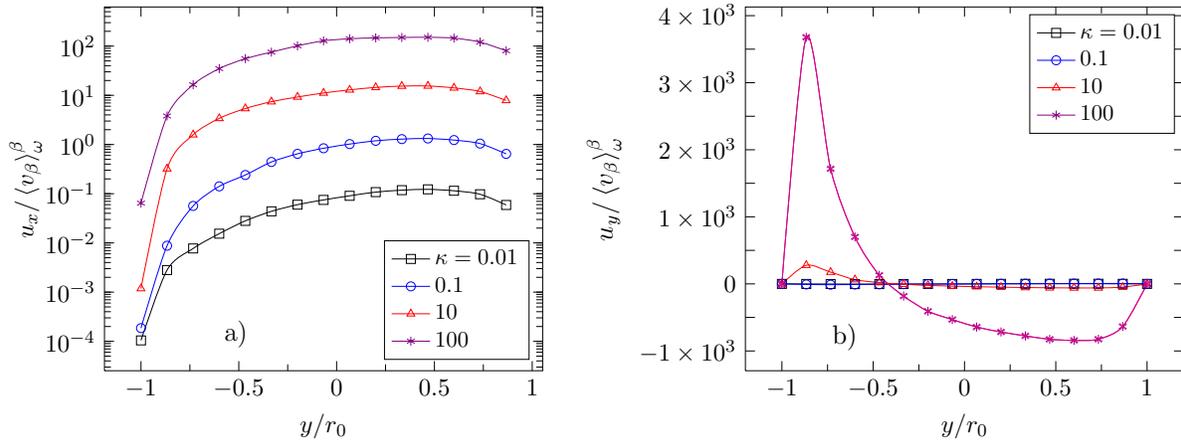


Figura 3.6. Dependencia espacial de a) u_x con $Pe_{\text{cell}} = 1$ y b) u_y tomando $Pe_{\text{cell}} = 0.01$ para diferentes valores de κ y $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$.

como un arreglo periódico de cuadrados que se encuentran interconectados, tal como el arreglo periódico 2 mostrado en la Figura 3.1. Allí c representa el grosor de los brazos de interconexión y a es el ancho de los cuadrados. El grado de interconexión entre las partículas sólidas es cuantificado a través de la relación c/a . Debido a que a medida que $c/a \rightarrow 0$ los brazos de interconexión se adelgazan, los requerimientos de recursos de cómputo se incrementan notablemente limitando los cálculos hasta cierto valor mínimo de la relación c/a . Esto lleva a dividir el análisis en dos etapas: la primera consiste en resolver el problema de cerradura en celdas representativas del seno poroso, lo cual permite realizar simulaciones hasta $c/a = 0.005$; y la segunda consiste en resolver celdas en la inter-región permitiendo realizar cálculos solo hasta $c/a = 0.04$. De esta forma, el comportamiento de los coeficientes efectivos de transporte en la inter-región para bajos valores de la relación c/a pueden inferirse a partir del comportamiento correspondiente en el seno poroso. Ambos tipos de celda se presentan en la Figura 3.7 donde, además, se ha ejemplificado la malla utilizada para la solución de los problemas de cerradura.

Predicción en el seno del medio poroso

En esta sección, se presenta la dependencia que presentan los tensores térmicos y el coeficiente de transferencia de calor con el grado de interconexión de las partículas y la relación de conductividades térmicas. No se presenta el efecto de éstos parámetros sobre los vectores tipo-convectivo debido a que, generalmente, su orden de magnitud son despreciables

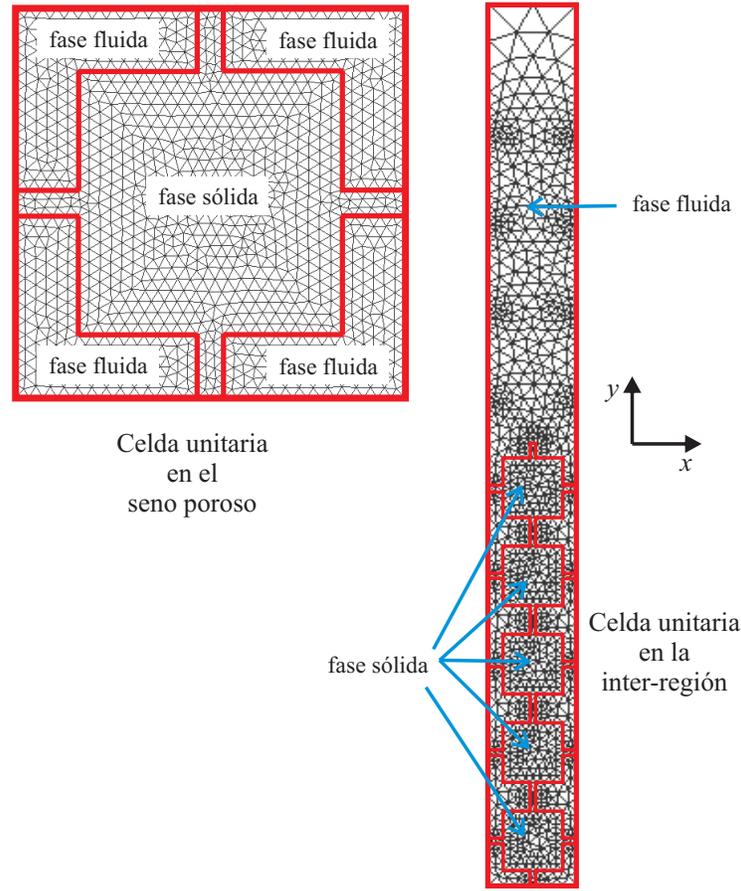


Figura 3.7. Ejemplos de malla utilizada para resolver los problemas de cerradura en celdas en el seno del medio poroso y en la inter-región. Se tomó $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$ y $c/a = 0.1$.

en comparación con los coeficientes restantes. Debido a que en el tipo de celda utilizada la fase dispersa es la fluida, no es posible imponer flujo alguno por lo que en todos los casos el número de Péclet es cero. Además en el caso de los tensores térmicos, solo se presentan los resultados para los componentes longitudinales debido a que, como se discutió en la sección anterior, éstos son muy similares a los componentes transversales y significativamente mayores a los componentes fuera de la diagonal principal.

En la Figura 3.8 se presenta la dependencia de los componentes longitudinales de $\mathbf{K}_{\beta\beta,\omega}^*$ y $\mathbf{K}_{\sigma\sigma}$ con la relación c/a . Nótese que incrementar el grado de interconexión lleva a que $(K_{\beta\beta,\omega}^*)_{xx}$ disminuya cuando $\kappa < 1$, mientras que cuando $\kappa > 1$ es invariante. Para el coeficiente $(K_{\sigma\sigma,\omega})_{xx}$ se tiene el comportamiento inverso. Esta situación es consistente con la

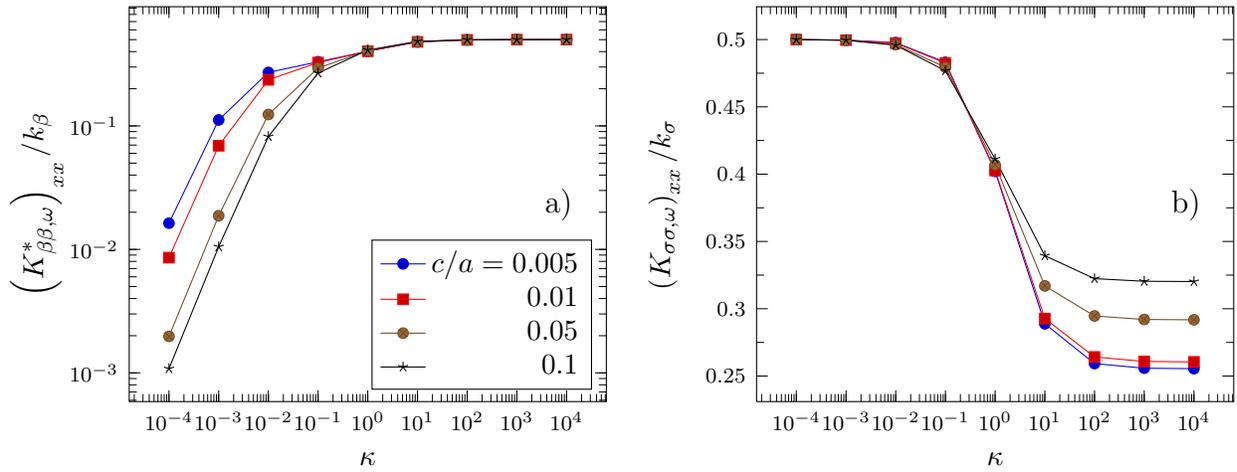


Figura 3.8. Dependencia de a) $(K_{\beta\beta,\omega}^*)_{xx}$ y b) $(K_{\sigma\sigma,\omega})_{xx}$ con κ y la relación c/a , tomando $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$ y $\text{Pe}_{\text{cell}} = 0$.

física que ocurre en la microescala, pues si el sólido es la fase más conductiva en comparación con el fluido ($\kappa > 1$), entonces al incrementar la interconexión se favorecen los valores de los tensores térmicos asociados con el sólido, es decir, $\mathbf{K}_{\sigma\sigma}$. Para el caso en que la fase fluida es la más conductiva ($\kappa < 1$), disminuir el grado de interconexión entre las partículas favorece al tensor $\mathbf{K}_{\beta\beta}^*$ debido a que la resistencia térmica ofrecida por el sólido disminuye.

Los siguientes tensores térmicos que se presentan son los *cruzados* $\mathbf{K}_{\beta\sigma}^*$ y $\mathbf{K}_{\sigma\beta}$. Sin embargo, a partir de las simulaciones y en concordancia con resultados previos reportados por Quintard y Whitaker (1993) se encontró que ambos tensores son iguales, por lo que solo se presentan los resultados para el componente longitudinal de $\mathbf{K}_{\beta\sigma}^*$. Como se muestra en la Figura 3.9a, éste coeficiente térmico se incrementa conforme $c/a \rightarrow 0$ cuando $\kappa > 1$. Note que para $\kappa \ll 1$ el valor del coeficiente disminuye rápidamente y el grado de interconexión no es significativo.

Con los tensores térmicos involucrados en el modelo LTNE disponibles, se utiliza la definición (2.26b) para predecir el único tensor térmico efectivo involucrado en el modelo LTE. En la Figura 3.9b se muestra la dependencia del componente longitudinal del tensor \mathbf{K}_{eff}^* con κ y el grado de interconexión entre partículas. El valor de la relación de conductividades térmicas tiene importancia significativa principalmente cuando $\kappa < 1$ y, eventualmente, la conductividad efectiva disminuye cuando $c/a \rightarrow 1$. Para el caso opuesto ($\kappa > 1$), la conductividad efectiva aumenta significativamente con la existencia de contacto partícula-partícula. Este efecto es de esperarse pues al ser el sólido mucho más conductivo

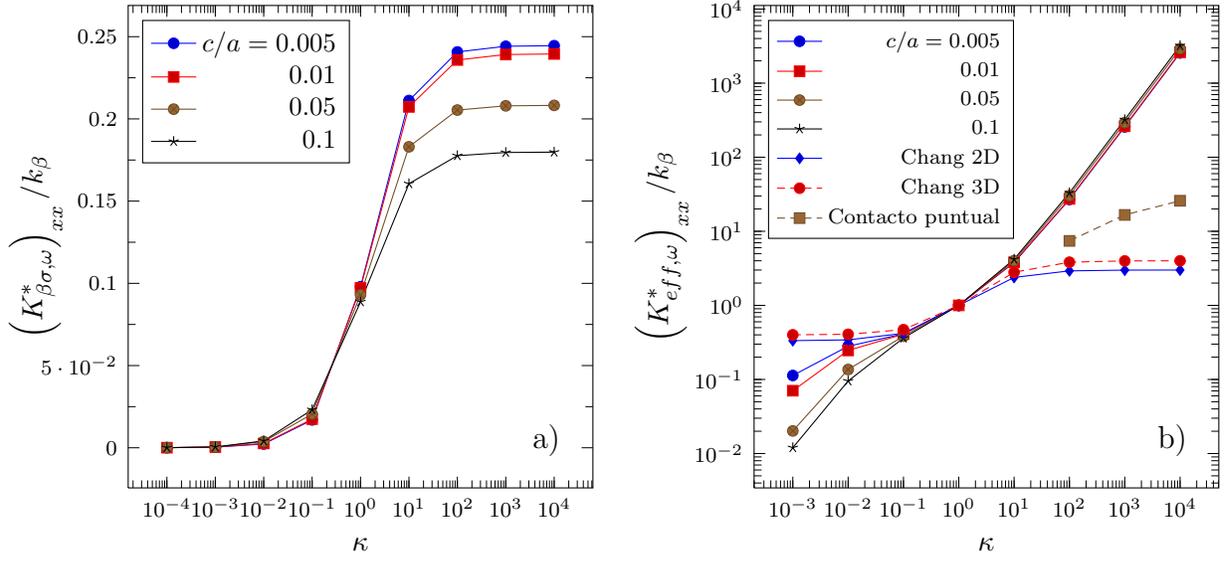


Figura 3.9. Dependencia de a) $(K_{\beta\sigma,\omega}^*)_{xx}$ y b) $(K_{eff,\omega}^*)_{xx}$ con κ y la relación c/a y comparación con celdas unitarias simples, tomando $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$ y $Pe_{cell} = 0$.

que el fluido, el calor se transporta preferencialmente por el sólido aunque los brazos de interconexión sean delgados (inclusive aunque solo se tenga un contacto puntual entre las partículas sólidas).

Para propósitos de comparación, en la Figura 3.9b se ha graficado la expresión analítica de Batchelor y O'Brien (1977), Ecuación (1.1), válida para valores grandes de κ y con contacto puntual entre las partículas. Nótese que la tendencia de los resultados de este trabajo está en concordancia con la curva para contacto puntual. Además, se presentan los resultados para la conductividad efectiva cuando los problemas de cerradura son resueltos en celdas de Chang en 2D (Ochoa-Tapia y col., 1994), Ecuación (3.4), y en celdas en 3D dada por la siguiente expresión (Maxwell, 1873),

$$\frac{(K_{eff,\omega}^*)_{xx}}{k_{\beta}} = \frac{3\kappa - 2\varepsilon_{\beta,\omega}(\kappa - 1)}{3 + \varepsilon_{\beta,\omega}(\kappa - 1)} \quad (3.6)$$

Sumarizando todos los resultados de la Figura 3.9b, la importancia del contacto partícula-partícula se manifiesta con los tres tipos de curvas graficadas: con contacto, sin contacto y con contacto puntual. Cabe señalar, que en los casos con $\kappa \ll 1$ ó $\kappa \gg 1$, son más notorias las diferencias entre las distintas curvas, y bajo estas circunstancias, la caracterización adecuada de la microestructura porosa se convierte un asunto relevante en las predicciones.

Para finalizar esta parte, en la Figura 3.10 se presenta el efecto de la relación c/a y de

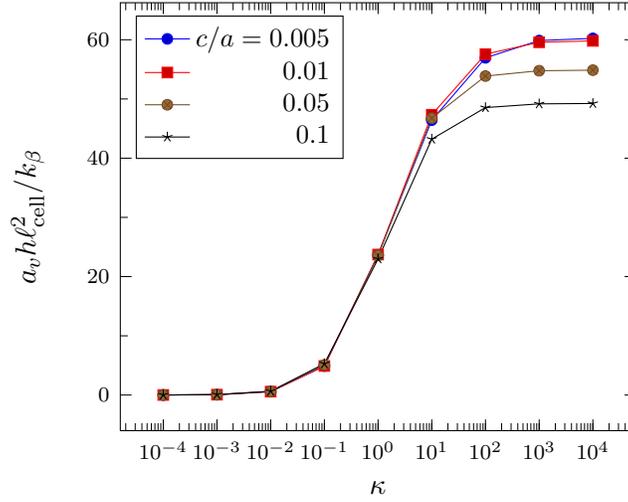


Figura 3.10. Dependencia de $a_v h$ con κ y la relación c/a , tomando $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$ y $\text{Pe}_{\text{cell}} = 0$.

κ sobre el coeficiente de transferencia de calor intersticial $a_v h$ normalizado con $k_{\beta}/l_{\text{cell}}^2$. Para los casos en que $\kappa \ll 1$ el coeficiente efectivo se aproxima al valor de cero y la influencia del contacto partícula-partícula es despreciable. Este comportamiento está en concordancia con la física que ocurre en la microescala; a medida que $\kappa \rightarrow 0$ el sólido actúa como un aislante térmico y el calor intercambiado entre las fases (cuantificado con $a_v h$) disminuye. Cuando el sólido es más conductivo que el fluido, incrementar el grado de interconexión disminuye la cantidad de calor transferida entre las fases. Sin embargo, debe mencionarse que esto sucede porque el área interfacial a_v disminuye cuando $c/a \rightarrow 1$.

Predicción en la inter-región

Ahora se analiza la transición espacial de los coeficientes efectivos a través de la inter-región. Particularmente, el interés se centra en la influencia del grado de interconexión. La influencia de otros parámetros como κ , el número de Péclet y $\varepsilon_{\beta,\omega}$ puede consultarse en la Sección 3.1.1 y en el Apéndice B. En la inter-región se utilizan celdas más largas como la mostrada en la Figura 3.7 con el fin de incluir los cambios en la microestructura.

En la Figura 3.11a se presentan las evoluciones espaciales de $(K_{\beta\beta}^*)_{xx}$ y $(K_{\beta\sigma}^*)_{xx}$ en función de la relación c/a . En cuanto al primer coeficiente, se tiene una funcionalidad débil con el contacto partícula-partícula y todos los resultados calculados prácticamente colapsan en la misma curva, por esta razón solo se presentan los datos para $c/a = 0.04$. Para este caso ($\kappa = 100$), la relación c/a tiene poca influencia sobre $(K_{\beta\beta}^*)_{xx}$, lo cual está de acuerdo con los

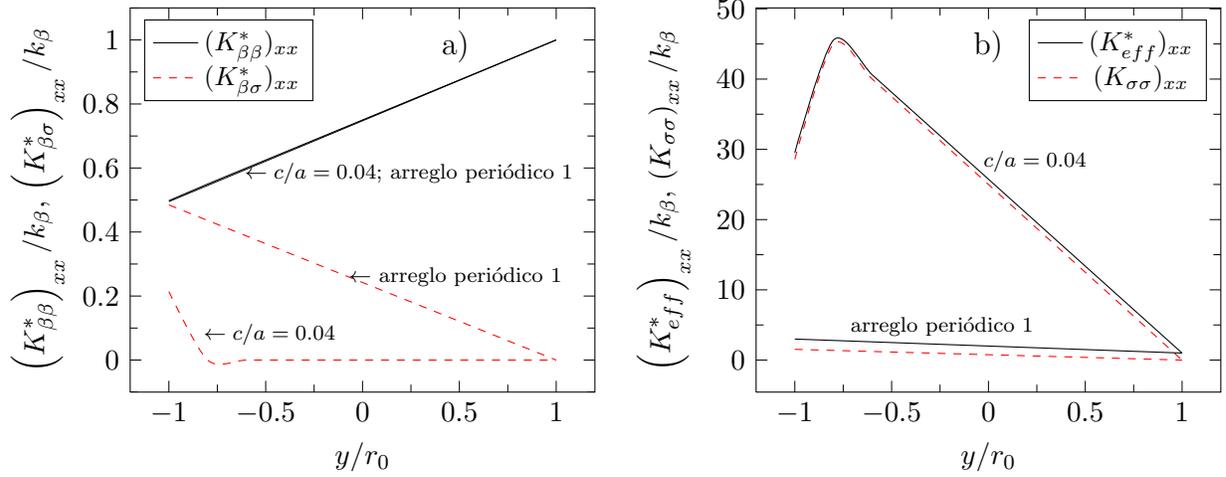


Figura 3.11. Dependencia de a) $(K_{\beta\beta}^*)_{xx}$ y $(K_{\beta\sigma}^*)_{xx}$, y b) $(K_{eff}^*)_{xx}$ y $(K_{\sigma\sigma})_{xx}$ con la posición en la inter-región y la geometría de la microestructura porosa, tomando $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$, $\kappa = 100$ y $\text{Pe}_{\text{cell}} = 0$.

resultados mostrados en la Figura 3.8a. Además, para fines de comparación se han agregado los resultados cuando el medio poroso se modela como el arreglo periódico 1 mostrado en la Figura 3.7. En cuanto al coeficiente $(K_{\beta\sigma}^*)_{xx}$, el grado de interconexión tiene una influencia moderada principalmente en las cercanías del seno poroso, es decir, cuando $y/r_0 \rightarrow -1$. No obstante, cuando se considera la geometría con contacto partícula-partícula se tienen resultados claramente diferentes con respecto a cuando se consideran partículas aisladas. Cabe agregar que cuando se usa el arreglo periódico 1 $(K_{\beta\sigma}^*)_{xx}$, depende linealmente de la posición siendo igual a $(K_{\beta\beta}^*)_{xx}$ en el seno poroso y toma el valor de cero en el seno del fluido.

En la Figura 3.11b se presenta la dependencia espacial de $(K_{\sigma\sigma})_{xx}$, involucrado en el modelo LTNE, y $(K_{eff}^*)_{xx}$, el único coeficiente efectivo del modelo LTE. Debido a que $\kappa = 100$ ambos coeficientes efectivos tienen valores similares en la inter-región y en el seno del medio poroso. Tal como se mencionó arriba, valores altos de κ favorecen los coeficientes asociados con el sólido, y como consecuencia, el tensor térmico $\mathbf{K}_{\sigma\sigma}$ contribuye en mayor proporción al cálculo de la conductividad térmica efectiva¹. Los resultados presentados en la Figura 3.11b son consistentes con los mostrados en las Figuras 3.8b y 3.9b, en el sentido en que el contacto partícula-partícula afecta significativamente a los coeficientes efectivos, lo cual conduce a resultados notoriamente diferentes con respecto a partículas aisladas. Cabe señalar que en casos de celdas con contacto partícula-partícula la dependencia espacial no es lineal,

¹Recuérdese que \mathbf{K}_{eff} involucra todos los coeficientes del modelo LTNE, Ecuación (2.26b).

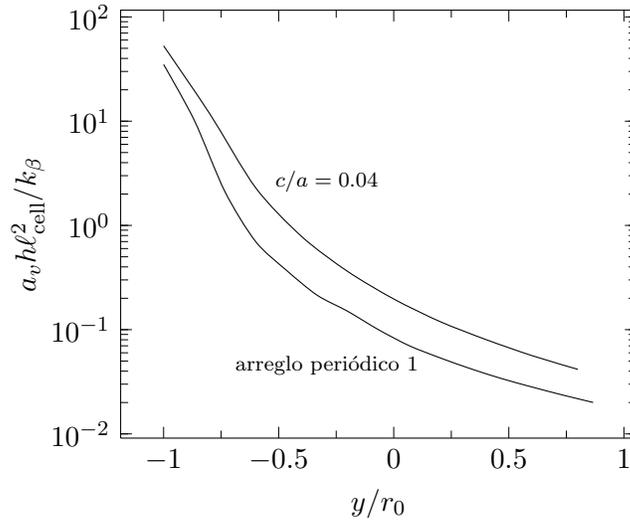


Figura 3.12. Dependencia de $a_v h$ con la posición en la inter-región y la geometría de la microestructura porosa, tomando $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$, $\kappa = 100$ y $\text{Pe}_{\text{cell}} = 0$.

lo cual es contrario a cuando se consideran partículas dispersas.

Finalmente, en la Figura 3.12 se presenta la funcionalidad de $a_v h$ con la posición y la relación c/a . Para este caso la tendencia de las curvas es similar con y sin contacto partícula-partícula. No obstante, como se mostró en la Figura 3.10, la interconexión entre partículas genera valores más grandes del coeficiente $a_v h$ en comparación con partículas dispersas en el seno poroso, y esta tendencia se mantiene a través de la inter-región. Los perfiles de la Figura 3.12 presentan un valor máximo en el seno de la región porosa y toman el valor de cero en el seno de la región fluida. Este comportamiento es consistente con el fenómeno de la microescala, ya que, eventualmente, la fracción volumétrica del sólido disminuye conforme se aproxima a la región de fluido, y por tanto también disminuye la cantidad de calor intercambiado entre las fases.

3.2. Comparación con simulación numérica directa

Con el objetivo de evaluar la precisión de los modelos promedio desarrollados en el Capítulo 2, en esta parte del trabajo se comparan los perfiles de la temperatura promedio obtenidos con los modelos de equilibrio y no equilibrio, con aquellos que resultan de resolver directamente las ecuaciones gobernantes puntuales en estado estacionario (de aquí en adelante se señalarán como DNS). Ciertamente, este tipo de comparaciones no reemplaza en ningún

sentido la necesidad de corroboración con datos experimentales de laboratorio. No obstante, la comparación con DNS da una idea acerca del alcance de las leyes de escalamiento (Wood, 2009a) involucradas en los modelos promedio, y sobretodo, corroborar si dichas leyes son satisfechas en la inter-región.

La DNS consiste en resolver las ecuaciones gobernantes puntuales en estado estacionario,

$$(\rho c_P)_\beta \nabla \cdot (\mathbf{v}_\beta T_\beta) = \nabla \cdot (k_\beta \nabla T_\beta), \quad \text{en la fase-}\beta \quad (3.7a)$$

$$0 = \nabla \cdot (k_\sigma \nabla T_\sigma), \quad \text{en la fase-}\sigma \quad (3.7b)$$

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (k_\beta \nabla T_\beta) = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (k_\sigma \nabla T_\sigma), \quad \text{en la interfase sólido-fluido} \quad (3.7c)$$

$$T_\beta = T_\sigma, \quad \text{en la interfase sólido-fluido} \quad (3.7d)$$

en el dominio mostrado en la Figura 3.13 con el fin de mantener consistencia con la solución de los problemas de cerradura expresados en el Apéndice A. Además, en las fronteras superior e inferior se imponen las condiciones de frontera tipo Dirichlet,

$$T_\beta = T_\eta, \quad \text{en } y = L_\eta \quad (3.8a)$$

$$T_\beta = T_\omega, \quad \text{en } y = -L_\omega \quad (3.8b)$$

Aquí se ha considerado que el eje y tiene el origen donde termina el medio poroso e inicia la región de solo fluido.

Las magnitudes de L_η y L_ω se eligen de tal manera que se satisfaga la restricción de escala $\ell_\beta, \ell_\sigma \ll r_0 \ll L_\eta, L_\omega$. Específicamente, se utilizó $2r_0 = 15\ell_{\text{cell}}$ y $L_\eta = L_\omega = 100\ell_{\text{cell}}$, lo cual garantiza al menos un orden de magnitud de separación entre las longitudes características del sistema. No se consideraron separaciones de escala más grandes con el fin de evitar la disminución de la precisión en los resultados numéricos. Una vez más, los cálculos se llevaron a cabo usando el software comercial Comsol Multiphysics® usando refinamiento de malla para, de esta manera, asegurar que los resultados sean independientes del número de nodos computacionales.

Así, el dominio de solución para el DNS tiene una altura total de $200\ell_{\text{cell}}$ y, por simplicidad, se consideró una anchura igual a ℓ_{cell} . Se reconoce que esta es una suposición severa debido a que el ancho del dominio de solución debe ser, al menos, $2r_0$. Esto significa que, en este caso, el volumen promediante consiste en un rectángulo de anchura igual a ℓ_{cell} y altura igual a $15\ell_{\text{cell}}$. Además, en las fronteras verticales del dominio de solución se

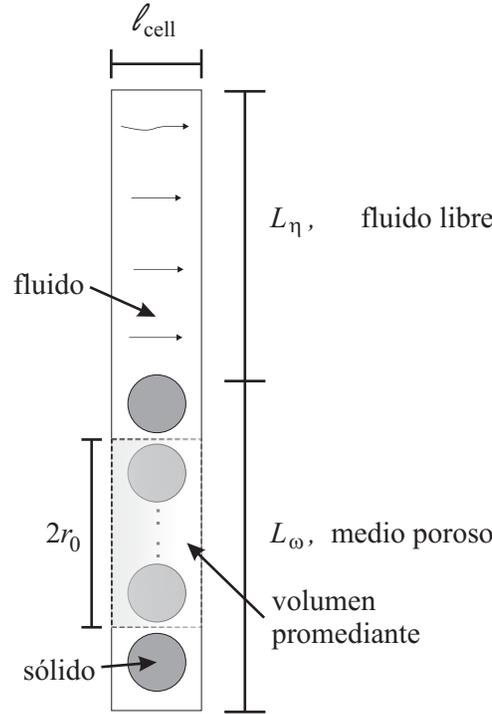


Figura 3.13. Dominio utilizado para la simulación numérica directa.

impusieron las siguientes condiciones de frontera tipo Neumann:

$$-\mathbf{n} \cdot k_\beta \nabla T_\beta = 0, \quad \text{en } x = 0, l_{\text{cell}} \quad (3.9)$$

Donde, en este caso, \mathbf{n} representa el vector normal unitario dirigido hacia afuera del dominio de solución.

Bajo estas circunstancias resulta que la temperatura promedio solo depende de la dirección y . Esto significa que los modelos promedio de equilibrio y no equilibrio se reducen a ecuaciones diferenciales ordinarias. Además, el campo de velocidad empleado en los modelos promedio se obtiene de resolver la ecuación de Stokes en el dominio del DNS y promediar los resultados. En este caso, las condiciones de frontera para las temperaturas promedio en $-L_\omega$ y L_η surgen de promediar apropiadamente los campos calculados en el DNS. A continuación, con la finalidad de presentar resultados más generales se introduce la temperatura adimensional definida como,

$$\Theta_m = \frac{T_m - T_\omega}{T_\eta - T_\omega}, \quad m = \beta, \sigma \quad (3.10)$$

En la Figura 3.14 se muestran los perfiles de temperatura calculados con los modelos de equilibrio, Ecuación (2.25), y de no equilibrio, Ecuaciones (2.17) y (2.20), y utilizando la dependencia espacial de los coeficientes efectivos considerando al medio poroso como un arreglo periódico de cilindros aislados. Además, se añaden los perfiles de temperatura del DNS. Primero considérense los casos con baja intensidad de flujo, es decir, $Pe_{\text{cell}} < 1$ (Figuras 3.14a y 3.14b). Cuando la relación de conductividades térmicas es suficientemente pequeña ($\kappa < 1$, Figura 3.14a), el calor es transportado esencialmente solo por la fase fluida. Debido a que el mismo fluido está presente fuera y dentro del medio poroso, no es de sorprenderse que los resultados del modelo de equilibrio coincidan con aquellos del modelo de no equilibrio y del DNS. Por otro lado, cuando $\kappa > 100$ (Figura 3.14b), el calor se transporta preferencialmente por la fase sólida del medio poroso. En la vecindad de la superficie divisoria, es decir, cerca de la posición $y/r_0 = 0$, el dominio de promediado incluye más fluido conduciendo así a complicaciones para satisfacer la hipótesis de equilibrio local térmico. Tal como se muestra en la Figura 3.14b, las mayores diferencias entre los perfiles de temperatura ocurren cerca de $y = 0$, y éste error se propaga hacia el resto del dominio ocupado por el fluido homogéneo.

Cuando los mecanismos de transporte por convección y conducción son de magnitud similar, es decir, $Pe_{\text{cell}} = 1$ (Figuras 3.14c y 3.14d), ambos modelos presentan cierto error con respecto a la temperatura del DNS principalmente en la zona de fluido libre. Atendiendo el fenómeno con $\kappa < 1$ en la Figura 3.14c, se tienen mejores predicciones de la temperatura con el modelo de no equilibrio en comparación con el modelo de equilibrio. Tal como se esperaba, el utilizar un medio poroso altamente conductivo, favorece la situación de equilibrio debido a que el sólido presenta menor resistencia al transporte de calor. Esto es consistente con los resultados mostrados en la Figura 3.14d donde se muestra que las predicciones del modelo de equilibrio mejoran en la zona del medio poroso.

Cuando el número de Péclet de celda aumenta ($Pe_{\text{cell}} = 10$, Figuras 3.14e y 3.14f), el término convectivo en los modelos de equilibrio y no equilibrio domina sobre el término de dispersión; por lo tanto la influencia de las fuentes de no equilibrio se convierten despreciables. Como consecuencia, los perfiles de temperatura de ambos modelos coinciden para $\kappa = 0.01$ y 100.

Finalmente, para cuantificar la precisión de la predicción del perfil de temperaturas de los modelos promedio se introduce la siguiente definición del error:

$$\% \text{ Error} = 100 \int_{\Omega} \text{abs} \left(\langle \Theta \rangle_{\text{DNS}} - \langle \Theta \rangle_{\text{Modelo promedio}} \right) d(y/r_0) \quad (3.11)$$

Donde Ω se refiere al dominio en donde se resolvieron los modelos. Para diferentes valores del número de Péclet y de la relación de conductividades térmicas, en la Tabla 3.2 se muestran los errores de los modelos promedio de equilibrio (LTE) y de no equilibrio (LTNE) local térmico. De manera general, el modelo de no equilibrio presenta un menor error en comparación con el modelo de equilibrio local térmico independientemente del par de valores de Pe_{cell} y κ . Además, de los resultados se infiere que ambos modelos son adecuados para la predicción del perfil de temperatura, excepto el modelo de equilibrio cuando $Pe_{cell} < 1$ y $\kappa > 1$. Esto sugiere que bajo esas condiciones el principio de equilibrio local térmico es más difícil de satisfacer en la inter-región.

Tabla 3.1. Dependencia de los coeficientes de la Ecuación (3.5) con la relación de conductividades térmicas y con la porosidad tomando $Pe_{cell} = 0.01$.

	κ	A_1	A_2	x_0	x_1
Manteniendo constante $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$	0.01	0.563	0.015	-0.699	0.146
	0.1	5.590	0.034	-0.878	0.096
	1	32.240	0.073	-0.958	0.076
	10	67.470	0.073	-1.004	0.077
	100	82.526	0.091	-1.025	0.080
$\varepsilon_{\beta,\omega}$					
Manteniendo constante $\kappa = 10$	0.4	206.346	0.063	-1.118	0.078
	0.6	38.804	0.083	-0.939	0.076
	0.7	25.799	0.093	-0.891	0.076
	0.8	17.418	0.099	-0.852	0.077
	0.9	10.805	0.098	-0.810	0.085

Tabla 3.2. Error de los modelos promedio.

κ	$Pe_{cell} = 0.01$			
	0.01	0.1	10	100
Modelo de no equilibrio	13.340	12.079	11.287	8.973
Modelo de equilibrio	13.726	12.892	43.220	47.213
$Pe_{cell} = 1$				
Modelo de no equilibrio	18.055	17.450	21.131	15.719
Modelo de equilibrio	28.070	18.436	21.288	19.415
$Pe_{cell} = 10$				
Modelo de no equilibrio	11.472	16.239	13.874	18.685
Modelo de equilibrio	11.742	16.672	17.528	19.667

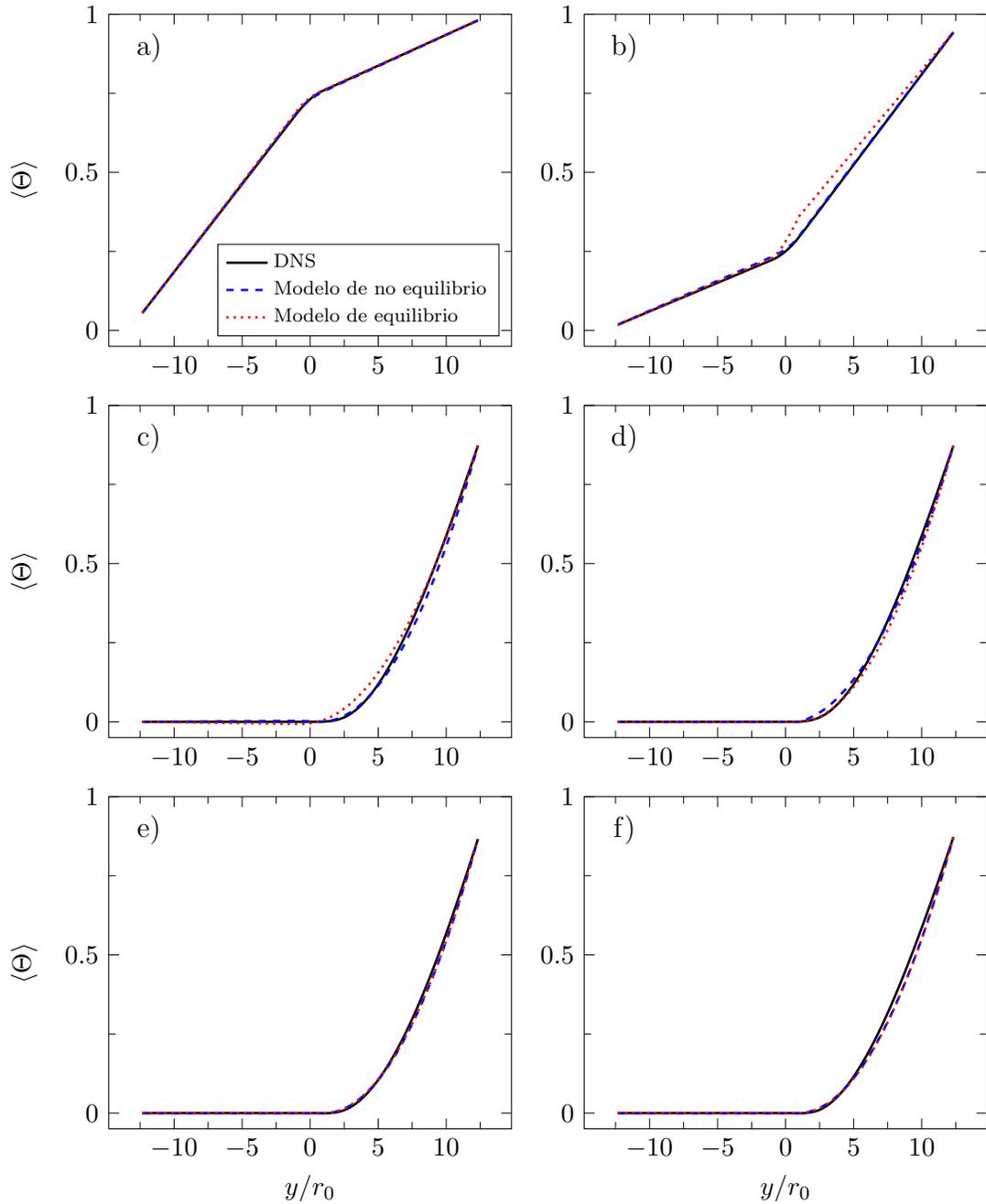


Figura 3.14. Comparación de los perfiles de temperatura obtenidos con los modelos de equilibrio y no equilibrio con los obtenidos del DNS para $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$ y tomando a) $Pe_{\text{cell}} = 0.01$, $\kappa = 0.01$, b) $Pe_{\text{cell}} = 0.01$, $\kappa = 100$, c) $Pe_{\text{cell}} = 1$, $\kappa = 0.01$, d) $Pe_{\text{cell}} = 1$, $\kappa = 100$, e) $Pe_{\text{cell}} = 10$, $\kappa = 0.01$ y f) $Pe_{\text{cell}} = 10$, $\kappa = 100$.

CAPÍTULO 4

CASO DE ESTUDIO: INTERCAMBIADOR DE CALOR CON INSERTO POROSO

4.1. Introducción

En este capítulo se utilizan las ecuaciones promedio desarrolladas para modelar la transferencia de calor en un ejemplo de aplicación práctica, como lo es un intercambiador de calor modificado con un inserto poroso. El estudio de sistemas que incluyen insertos porosos para mejorar la transferencia de calor en equipos modificados ha adquirido un interés sustancial recientemente (Alkam y Al-Nimr, 1998, 1999; Byun y col., 2006; Huang y col., 2010). Esto es motivado principalmente por el amplio rango de aplicaciones en sistemas ingenieriles. En la literatura se encuentran diversos trabajos dedicados a este tipo de estudios utilizando diferentes configuraciones geométricas, y además, se ha analizado el efecto que tienen diversos parámetros asociados (por ejemplo el número de Biot, el número de Darcy, el coeficiente de arrastre, etc). En la Figura 4.1 se muestran dos diferentes configuraciones de intercambiadores de calor que utilizan insertos porosos. De manera general, existen intercambiadores de calor de placas y de tubos. En ambos tipos, los insertos porosos son añadidos en las paredes con la finalidad de aumentar el transporte de calor entre los fluidos utilizados.

El mejoramiento del transporte de calor usando insertos porosos en diferentes tipos de intercambiadores de calor, ha sido resaltado en varios trabajos en la literatura mediante simulación. Alkam y Al-Nimr (1998) estudiaron el problema transitorio de flujo por

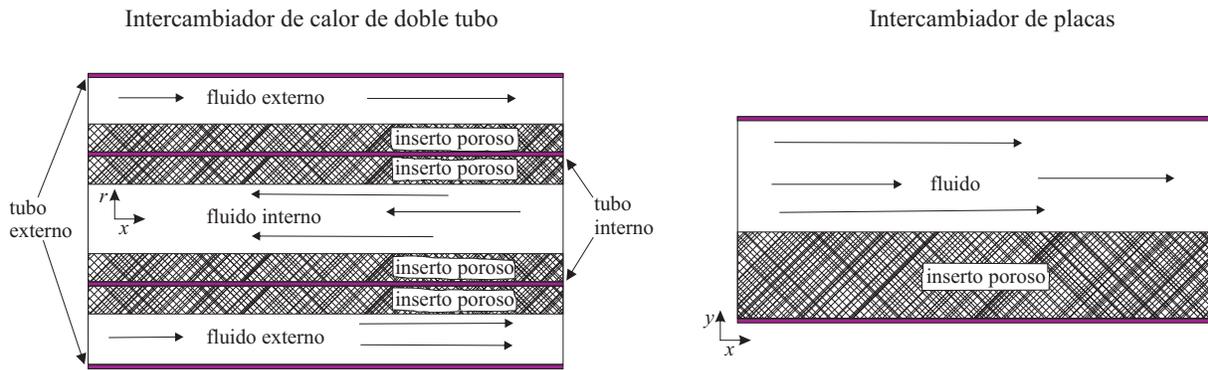


Figura 4.1. Intercambiadores de calor con insertos porosos.

convección forzada en canales circulares parcialmente llenos con un inserto poroso. Ellos mostraron el efecto del tamaño del medio poroso, también como el de los números de Darcy y Forchheimer, sobre el desempeño hidrodinámico y térmico. Además, los investigadores reportaron que la transferencia de calor puede mejorarse hasta 8 veces por la inclusión del inserto poroso. En un trabajo posterior (Al-Nimr y Alkam, 1998), los mismos autores sugirieron que la eficiencia térmica puede incrementar en el intervalo 3-32 % en un colector solar modificado. El inconveniente es que la caída de presión puede aumentar hasta 30 veces en relación a cuando no se usa el inserto poroso. La mejora de la transferencia de calor ocurre sin importar si flujo es en paralelo o a contracorriente en el sistema (Alkam y Al-Nimr, 1999). Además, se ha reportado que existe un valor crítico en el tamaño del inserto poroso, sobre el cual, ya no hay mejoramiento significativo en la eficiencia térmica. Además de los trabajos mencionados hasta aquí, se han llevado a cabo estudios recientes en canales de placas paralelas en configuraciones en 2D (Alkam y col., 2001) y en 3D (Jen y Yan, 2005). Todos estos trabajos evidencian que la convección no es el único mecanismo de transporte de calor que es mejorado. De hecho, Chen y Sutton (2005) demostraron que la transferencia de calor por radiación puede aumentarse alrededor de 105 % usando cerámicas porosas en ductos circulares. Considerando flujo turbulento, Yang y Hwang (2009) recientemente investigaron el mejoramiento del transporte de calor en un tubo con un núcleo poroso para un rango amplio de valores del número de Reynolds (5000-15000). Además, estos autores reportaron que la relación óptima núcleo poroso-radio es aproximadamente 0.8. Recientemente, Lukisha y Prisnyakov (2010) llevaron a cabo un análisis detallado acerca de las condiciones óptimas

que favorecen la eficiencia térmica usando condiciones de frontera del tipo ley de enfriamiento de Newton en canales circulares. Los investigadores resumen que dichas condiciones óptimas se encuentran por: disminuyendo el diámetro del canal ó el número de Biot ó incrementando la porosidad ó el número de Reynolds.

Además de los trabajos que mediante simulación resaltan el mejoramiento de la transferencia de calor por el uso de insertos poroso, existen algunos trabajos que concluyen lo mismo utilizando evidencia experimental. Por ejemplo, Pavel y Mohamad (2004) investigaron el efecto de materiales porosos metálicos sobre la rapidez de transferencia de calor y la caída de presión. Recientemente, Huang y col. (2010) hicieron experimentos insertando un medio poroso con porosidad alta (0.951-0.975) en el centro de un tubo. De esta manera, ellos estudiaron la resistencia al flujo y las características de transferencia de calor experimental y numéricamente.

Así, los principales objetivos en el caso de aplicación a estudiar son:

- Modelar el transporte de calor convectivo en un sistema compuesto por dos regiones homogéneas (fluido e inserto poroso), bajo la formulación de un solo dominio. Esto requiere tomar en cuenta la dependencia espacial de coeficientes efectivos de transporte como: la permeabilidad, la porosidad y la conductividad térmica efectiva, los cuales aparecen en las ecuaciones de medio efectivo para el transporte de calor y de cantidad de movimiento.
- Resolver las ecuaciones diferenciales parciales con coeficientes variables correspondientes, usando un esquema numérico robusto.
- Mostrar los alcances y limitaciones de la ODA bajo varias condiciones de transporte.

Por último, se señala que diversos detalles presentados en este capítulo se encuentran disponibles en la literatura (Aguilar-Madera y col., 2011b).

4.2. Descripción del problema

En la Figura 4.2 se presenta la configuración del problema bajo estudio. Éste consiste en un intercambiador de placas con un inserto poroso de grosor e el cual se encuentra adherido en la placa inferior. La convección se genera debido a la diferencia de presiones $\langle P \rangle_L - \langle P \rangle_0$. Además por simplicidad, las temperaturas de las placas se mantienen constantes, $\langle T \rangle_{wall}$.

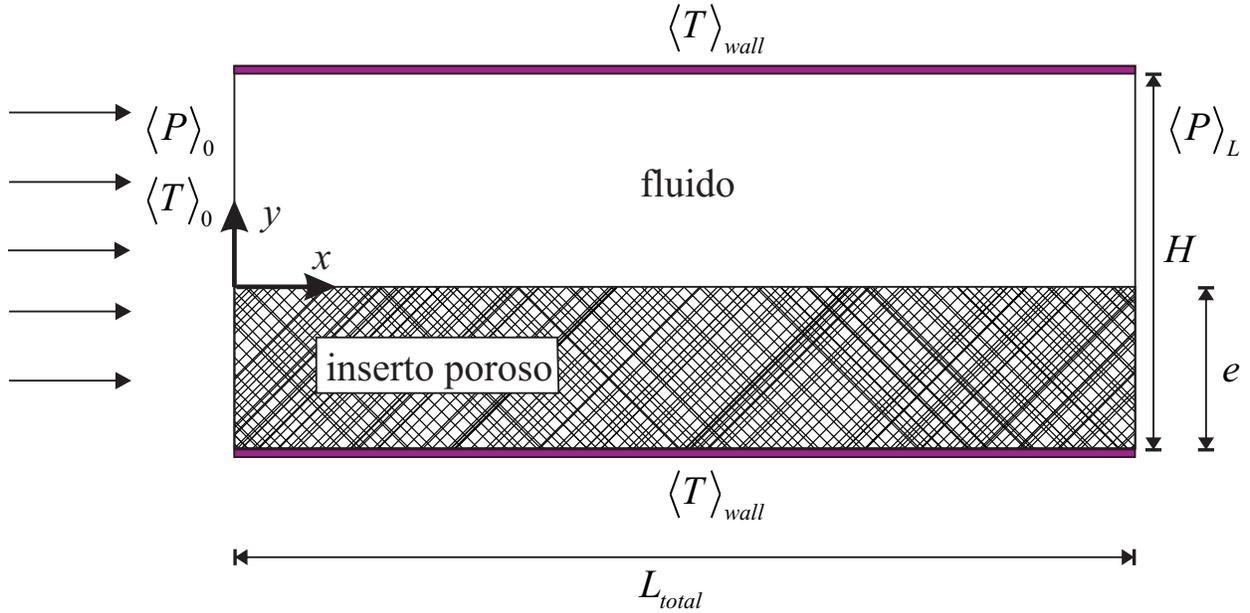


Figura 4.2. Configuración de un intercambiador de calor de placas con inserto poroso.

En ocasiones podría considerarse imponer un flux de calor conocido, sin embargo, es común encontrar en la literatura estudios que utilizan uno o ambos de estos tipos de condiciones de frontera. Lo más correcto y riguroso es simular también el transporte de calor que ocurre en el otro lado de las placas. Las condiciones de frontera para el problema de calor en la entrada y salida del canal se discuten más adelante.

El análisis comienza adoptando la ecuación de Darcy-Brinkman para la velocidad promedio en el contexto del ODA y en estado estacionario. Dicha ecuación fue previamente derivada descartando efectos inerciales y utilizando el método del promedio volumétrico por Ochoa-Tapia y Whitaker (1995a) y más recientemente por Valdés-Parada y col. (2007b),

$$\mathbf{0} = -\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \rho_\beta \mathbf{g} + \mu_\beta \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \mu_\beta \varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) \cdot \nabla (\varepsilon_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \langle \mathbf{v}_\beta \rangle) - \mu_\beta \mathbf{K}_\beta^{-1}(\mathbf{x}) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \quad (4.1)$$

Esta ecuación además se resuelve de manera acoplada con la ecuación promedio de continuidad,

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle = 0 \quad (4.2)$$

En la Ecuación (4.1) \mathbf{K}_β es el tensor de permeabilidad, μ_β es viscosidad del fluido y $\langle p_\beta \rangle^\beta$ y $\langle \mathbf{v}_\beta \rangle$ representan la presión y la velocidad promediadas en volumen respectivamente. Debe

enfatzarse que las variables dependientes (presión y velocidad) están definidas en cualquier parte del sistema, es decir, en el inserto poroso y en la región de solo fluido.

Como ya se mencionó en capítulos anteriores, en el contexto del método del promedio volumétrico las predicciones de coeficientes de medio efectivo se llevan a cabo mediante la solución de los problemas de cerradura asociados en zonas representativas de la microestructura (celdas unitarias). Para tener una idea clara acerca de esto, en la Figura 4.3 se muestran varias celdas unitarias en diferentes posiciones en la inter-región. Allí la microestructura del inserto poroso se representa por medio de un modelo periódico cilindros ó cubos que no están en contacto entre sí. De esta manera, de acuerdo al centroide de cada celda unitaria, se especifica la posición de cada coeficiente efectivo.

Para el proceso de transporte de calor, en ausencia de cualquier tipo de fuentes térmicas, a continuación se reescribe la ecuación gobernante para la temperatura promedio $\langle T \rangle$, suponiendo la condición de equilibrio local térmico, y de igual manera, en estado estacionario,

$$(\rho c_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle \langle T \rangle) = \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle T \rangle] \quad (4.3)$$

En este caso, para modelar el proceso de transporte de calor se ha optado por utilizar el modelo de equilibrio local térmico. Como ya se analizó en la Sección 3.2, para varias condiciones de flujo y conductividades térmicas efectivas el modelo de equilibrio predice la temperatura promedio con aceptable precisión, y tiene la ventaja de utilizar menos coeficientes de medio efectivo que el modelo de no equilibrio. Además, en la Ecuación (4.3) se ha descartado la contribución del vector-convectivo total, \mathbf{u} , debido a que como se discutió en el Apéndice B, generalmente dicho término es depreciable en comparación con el campo de velocidad.

Con el fin de utilizar la Ecuación (4.3), es necesario contar con la dependencia espacial del tensor térmico efectivo total, \mathbf{K}_{eff}^* , así como también del campo de velocidad promedio, $\langle \mathbf{v}_\beta \rangle$. No obstante, en este caso el campo de velocidad se considera independiente del problema de transporte de calor por lo que la velocidad se trata como un dato de entrada. En las siguientes secciones se presenta la solución de los modelos macroscópicos aquí presentados.

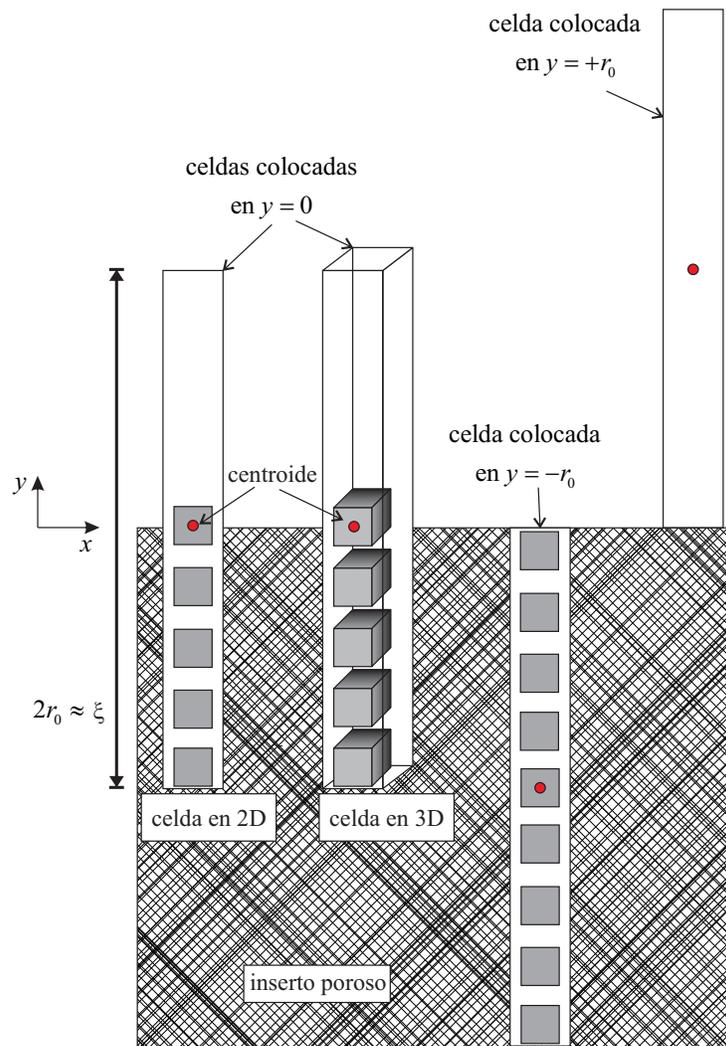


Figura 4.3. Celdas unitarias para la predicción de coeficientes efectivos colocadas en diferente posición en la inter-región.

4.3. Solución integral implícita del campo de velocidad

4.3.1. Dependencia espacial de la porosidad y la permeabilidad

La ecuación de transporte de cantidad de movimiento promedio, Ecuación (4.1), está expresada en término de coeficientes de medio efectivo, los cuales dependen, en general, de todas las coordenadas espaciales. Sin embargo, por simplicidad se asume que las variaciones más importantes ocurren solamente en la dirección vertical, es decir, en la dirección y . Así, para un modelo periódico de esferas representando el inserto poroso, Valdés-

Parada y col. (2007b) reportaron la siguiente expresión para la dependencia espacial de la porosidad,

$$\varepsilon_{\beta}(y/r_0) = \begin{cases} \varepsilon_{\beta,\omega}, & y/r_0 < -1 \\ \frac{1}{2}(\varepsilon_{\beta,\omega} + 1) + \frac{1}{4}(\varepsilon_{\beta,\omega} - 1) \left(\frac{y}{r_0}\right) \left[\left(\frac{y}{r_0}\right)^2 - 3\right], & -1 \leq y/r_0 \leq +1 \\ 1, & y/r_0 > +1 \end{cases} \quad (4.4)$$

Aquí se ha utilizado la coordenada normalizada y/r_0 con el objetivo de acotar el intervalo de *cambios importantes* a $[-1, +1]$. Como ya se mencionó anteriormente, el intervalo de cambios importantes es la zona donde los coeficientes efectivos experimentan rápidos y continuos cambios. Ésta zona es la llamada inter-región de tamaño ξ^1 similar a $2r_0$ (véase la Figura 4.3).

La Ecuación (4.1) además requiere de los cambios espaciales de la derivada espacial de la porosidad. Así, derivando la Ecuación (4.4) con respecto a y/r_0 se tiene que,

$$\frac{d}{d(y/r_0)} [\varepsilon_{\beta}(y/r_0)] = \begin{cases} 0, & y/r_0 < -1 \\ \frac{3}{4}(\varepsilon_{\beta,\omega} - 1) \left[\left(\frac{y}{r_0}\right)^2 - 1\right], & -1 \leq y/r_0 \leq +1 \\ 0, & y/r_0 > +1 \end{cases} \quad (4.5)$$

En la Figura 4.4 se presenta la forma típica de los cambios espaciales de la porosidad y de su derivada.

Recientemente, Valdés-Parada y col. (2009b) predijeron la dependencia espacial de la permeabilidad para un arreglo de cuadrados que no se tocan entre sí. Esta situación corresponde a resolver el problema de cerradura asociado que define a la permeabilidad en celdas unitarias bidimensionales como las mostradas en la Figura 4.3. Los valores reportados fueron ajustados a una ecuación del siguiente tipo ($R^2 \geq 0.999$),

$$\frac{K_{\beta,\omega}}{K_{\beta}(y/r_0)} = \begin{cases} 1, & y/r_0 < -1 \\ c_0 + \sum_{i=1}^3 c_i \exp \left[- \left(\frac{y}{r_0} - t_0 \right) t_i^{-1} \right], & -1 \leq y/r_0 \leq +1 \\ 0, & y/r_0 > +1 \end{cases} \quad (4.6)$$

El valor de los parámetros involucrados en esta ecuación se presentan en la Tabla 4.1, mientras que en la Figura 4.5 se muestra gráficamente la variación espacial de la permeabilidad para diferentes valores de la porosidad.

¹En este capítulo, con el fin de evitar confusión con la función delta de Dirac, δ , el tamaño de la inter-región será representado con el símbolo ξ .

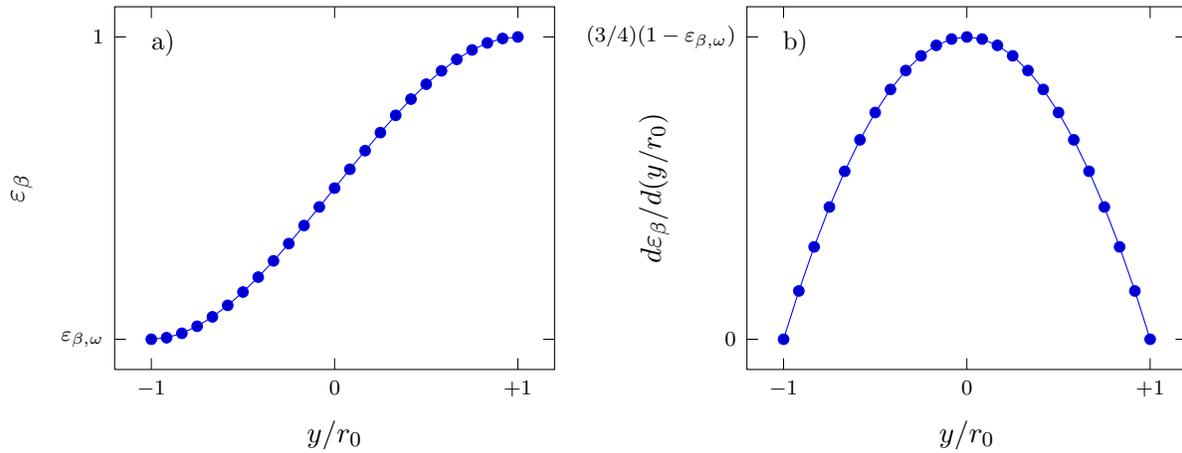


Figura 4.4. Dependencia espacial de: a) la porosidad y b) la derivada de la porosidad.

Sin embargo, de simulaciones previas se observó que la permeabilidad depende fuertemente de la geometría de la microescala en la cual el problema de cerradura es resuelto. Con esta idea en mente, con el objetivo de obtener predicciones más realistas en este trabajo se resolvió el problema de cerradura en celdas tridimensionales. Dichas celdas unitarias contienen cubos que no se tocan entre sí tal como la que se muestra en la Figura 4.3.

Con el objetivo de mantener fluidez en el trabajo, enseguida se presenta la definición del

Tabla 4.1. Coeficientes involucrados en la Ecuación (4.6) para predicciones de la permeabilidad a partir de celdas unitarias bidimensionales.

$\varepsilon_{\beta,\omega}$	c_0	t_0	c_1	t_1	c_2	t_2	c_3	t_3
0.1	-0.011	-0.502	0.496	0.023	0.382	0.082	0.172	0.362
0.2	-0.027	0.000	0.091	0.422	3.39E-03	0.102	6.66E-08	0.033
0.3	-0.051	0.000	8.04E-03	0.123	1.47E-06	0.043	1.43E-01	0.488
0.4	-0.084	0.000	1.10E-05	0.053	0.015	0.147	0.202	0.565
0.5	-0.118	-0.50	0.305	0.240	0.302	0.105	0.507	0.677
0.6	-0.146	-0.50	0.169	0.084	0.463	0.297	0.514	0.736
0.7	-0.259	0.000	0.049	0.234	0.451	0.867	1.42E-04	0.089
0.8	-0.325	0.000	0.576	1.470	5.51E-03	0.168	0.158	0.407
0.9	-0.456	0.000	0.220	0.722	0.220	0.722	0.220	0.722

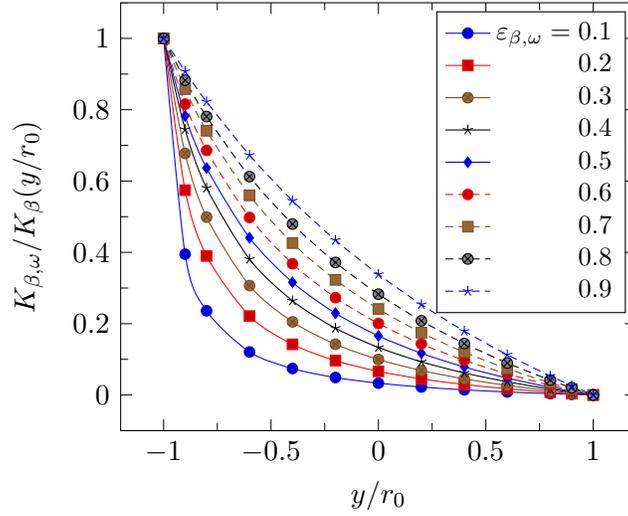


Figura 4.5. Dependencia espacial de la permeabilidad para predicciones a partir de celdas unitarias bidimensionales y diferentes valores de la porosidad.

tensor de permeabilidad extraído del trabajo de Valdés-Parada y col. (2007b),

$$\varepsilon_{\beta}(\mathbf{x}) \mathbf{K}_{\beta}^{-1}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{\mathcal{V}_{\beta}(\mathbf{x})} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (-\mathbf{l}\mathbf{h}_{\beta} + \nabla \mathbf{C}_{\beta}) dA \quad (4.7)$$

donde \mathbf{h}_{β} y \mathbf{C} son el vector y el tensor de cerradura respectivamente, los cuales son determinados a partir de la solución del siguiente problema de valor en la frontera (Valdés-Parada y col., 2009b),

$$\nabla \cdot \mathbf{D}_{\beta} = \varepsilon_{\beta}^{-2}(\mathbf{x}) \nabla \varepsilon_{\beta}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{K}_{\beta}(\mathbf{x}), \quad \text{en la fase-}\beta \quad (4.8a)$$

$$\mathbf{0} = -\nabla \mathbf{d}_{\beta} + \nabla^2 \mathbf{D}_{\beta} + \mathbf{I}, \quad \text{en la fase-}\beta \quad (4.8b)$$

$$\mathbf{D}_{\beta} = \mathbf{0}, \quad \text{en la interfase } A_{\beta\sigma} \quad (4.8c)$$

$$\frac{\partial \mathbf{D}_{\beta}}{\partial y} = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial \mathbf{d}_{\beta}}{\partial y} = \mathbf{0}, \quad \text{en el fondo y tapa de la celda} \quad (4.8d)$$

$$\mathbf{d}_{\beta}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{d}_{\beta}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{D}_{\beta}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{D}_{\beta}(\mathbf{r}), \quad \text{periodicidad} \quad (4.8e)$$

$$\langle \mathbf{D}_{\beta} \rangle_{\omega}^{\beta} = \varepsilon_{\beta}^{-1} \mathbf{K}_{\beta}(\mathbf{x}), \quad \text{promedio} \quad (4.8f)$$

Aquí se han hecho los siguientes cambios de variable tal como lo sugiere Whitaker (1999) en su texto:

$$\mathbf{d}_{\beta} = \varepsilon_{\beta}^{-1}(\mathbf{x}) \mathbf{h}_{\beta} \cdot \mathbf{K}_{\beta}(\mathbf{x}) \quad (4.9a)$$

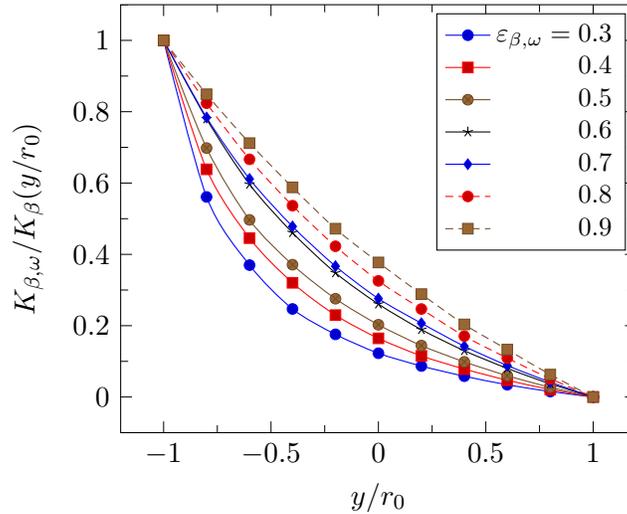


Figura 4.6. Dependencia espacial de la permeabilidad para predicciones a partir de celdas unitarias tridimensionales y diferentes valores de la porosidad.

$$\mathbf{D}_{\beta} = \varepsilon_{\beta}^{-1}(\mathbf{x})(\mathbf{C}_{\beta} + \mathbf{I}) \cdot \mathbf{K}_{\beta}(\mathbf{x}) \quad (4.9b)$$

En la Figura 4.6 se presenta la variación espacial de la permeabilidad cuando se resuelve el problema de cerradura en celdas unitarias tridimensionales. En este caso, el valor mínimo de la porosidad reportado es de 0.3, debido a la alta demanda computacional que se requiere al resolver el problema de cerradura para porosidades menores. Nótese que los perfiles exhiben una dependencia espacial similar a los de la Figura 4.5. De igual manera, la funcionalidad de la permeabilidad se ajustó a una Ecuación del tipo (4.6), y los coeficientes se presentan en la Tabla 4.2.

Finalmente, con el objetivo de utilizar la Ecuación (4.6) se necesita conocer el valor de la permeabilidad en el seno del inserto poroso, $K_{\beta,\omega}$, el cual puede ser calculado a partir de la solución del problema de cerradura en celdas representativas del seno. Para un arreglo periódico de cuadrados y cubos separados entre sí, en la Figura 4.7 se presenta la permeabilidad en función de la porosidad. Se observa que, generalmente, las predicciones en la celda bidimensional son mayores que las obtenidas con la celda tridimensional. Además, en la literatura (Bird y col., 1960) se han reportado expresiones semi-analíticas como la ecuación de Blake-Kozeny, válida para condiciones en la región laminar; la ecuación de Blake-Plummer, válida para la región altamente turbulenta; y la ecuación de Ergun, la cual es una combinación de las anteriores.

Los resultados de la Figura 4.7 se ajustaron a una ecuación de la siguiente forma

$(R^2 > 0.999)$,

$$\frac{K_{\beta,\omega}}{\ell_{\text{cell}}^2} = 2.430 \times 10^{-3} + 1.360 \times 10^{-6} \exp(13.900\varepsilon_{\beta,\omega}), \quad \text{celdas en 2D} \quad (4.10a)$$

$$\frac{K_{\beta,\omega}}{\ell_{\text{cell}}^2} = 1.606 \times 10^{-4} + 2.047 \times 10^{-5} \exp(8.397\varepsilon_{\beta,\omega}), \quad \text{celdas en 3D} \quad (4.10b)$$

Particularmente, en problemas que involucran efectos dispersivos, la forma de la celda unitaria utilizada para resolver los problemas de cerradura influye de manera importante en el valor del coeficiente dispersivo que se esté calculando (Whitaker, 1999; Lugo-Méndez y col., 2010), sobre todo cuando se calculan los componentes transversales de los coeficientes efectivos. Este mismo fenómeno se observa en predicciones de la permeabilidad, ya que la forma real de la micro-estructura y la dirección del flujo neto influyen significativamente en los valores predichos (Valdés-Parada y col., 2009c), lo cual es más notorio en situaciones con intensidad de flujo considerable (números de Péclet mayores a 1).

Una situación interesante que surge a partir de los resultados de la Figura 4.7, es conocer la diferencia de la permeabilidad a través de la inter-región cuando se calcula a partir de celdas conteniendo cuadros y cubos. Dicha diferencia se presenta en la Figura 4.8 calculada de acuerdo a la expresión,

$$\text{Diferencia} = \left[\frac{K_{\beta,\omega}}{K_{\beta}(y/r_0)} \right]_{3D} - \left[\frac{K_{\beta,\omega}}{K_{\beta}(y/r_0)} \right]_{2D} \quad (4.11)$$

Nótese que las diferencias máximas se encuentran con valores intermedios de la porosidad, es decir $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.4 - 0.6$, siendo con el valor de 0.6 el caso con las mayores desviaciones.

Tabla 4.2. Coeficientes involucrados en la Ecuación (4.6) para predicciones de la permeabilidad a partir de celdas unitarias tridimensionales.

$\varepsilon_{\beta,\omega}$	c_0	t_0	c_1	t_1	c_2	t_2	c_3	t_3
0.3	-0.175	-1.006	0.189	0.012	0.674	0.340	0.402	2.375
0.4	-0.124	-1.000	0.109	0.100	0.516	0.405	0.498	1.411
0.5	-0.144	-1.000	0.362	0.282	0.387	1.177	0.395	1.186
0.6	-0.231	-1.000	0.392	1.364	0.436	0.568	0.405	1.754
0.7	-0.284	-1.000	0.388	0.744	0.388	0.858	0.506	2.491
0.8	-0.292	-1.045	0.445	1.360	0.445	1.360	0.445	1.360
0.9	-0.557	-1.074	0.539	1.956	0.539	1.956	0.539	1.956

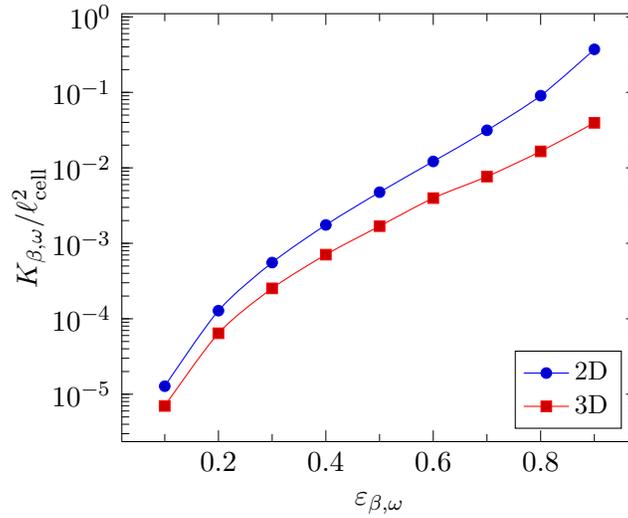


Figura 4.7. Predicción de la permeabilidad en el seno del medio poroso en función de la porosidad utilizando celdas bi- y tri-dimensionales.

Se encontró además que la diferencia es mayor en las posiciones cercanas al seno del medio poroso. Este análisis sugiere que las mayores desviaciones ocurren cuando existen cambios significativos en el campo de la velocidad puntual, lo cual sucede principalmente cuando existen muchas partículas en la celda de solución, es decir, la celda de solución se localiza más cerca del seno poroso. Se reconoce que un análisis más detallado de la influencia de la microestructura sobre la permeabilidad debe de incluir celdas más realistas durante la solución de los problemas de cerradura. El hecho de que con las celdas simples utilizadas en este trabajo se tengan diferencias importantes, es un indicativo de la necesidad de llevar esto a cabo.

4.3.2. Solución implícita con funciones de Green

Antes de proceder a la solución de la Ecuación (4.1), es conveniente introducir las siguientes variables adimensionales,

$$\hat{x} = \frac{x}{H}, \quad \hat{y} = \frac{y+e}{H}, \quad \hat{\mathbf{v}}_{\beta} = \frac{\langle \mathbf{v}_{\beta} \rangle}{\langle v_{\beta} \rangle_{\omega}^{\beta}}, \quad \text{Da} = \frac{K_{\beta}}{H^2}, \quad \hat{P} = \frac{\langle p_{\beta} \rangle^{\beta} H}{\mu_{\beta} \langle v_{\beta} \rangle_{\omega}^{\beta}} \quad (4.12)$$

Donde $\langle v_{\beta} \rangle_{\omega}^{\beta}$ es la norma de la velocidad promedio en el seno del inserto poroso; \hat{P} es la presión adimensional; \hat{x} y \hat{y} son las coordenadas adimensionales; $\hat{\mathbf{v}}_{\beta}$ es el campo de velocidad adimensional y Da es el número de Darcy. Nótese además que el origen del eje \hat{y} está situado

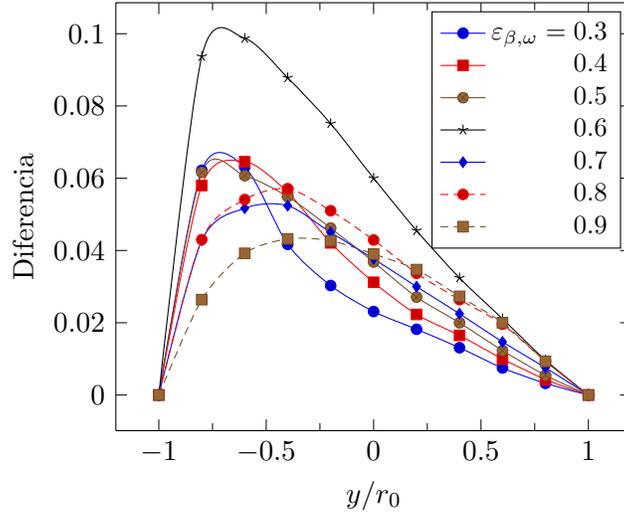


Figura 4.8. Diferencia de la permeabilidad cuando se predice en celdas unitarias bi- y tri-dimensionales.

en la frontera inserto poroso-fluido. Estas variables adimensionales conducen a la siguiente ecuación,

$$0 = -\hat{\nabla} \hat{P} + \varepsilon_{\beta}^{-1}(\hat{\mathbf{x}}) \hat{\nabla}^2 \hat{\mathbf{v}}_{\beta} - \varepsilon_{\beta}^{-1}(\hat{\mathbf{x}}) \hat{\nabla} \varepsilon_{\beta}(\hat{\mathbf{x}}) \cdot \hat{\nabla} (\varepsilon_{\beta}^{-1}(\hat{\mathbf{x}}) \hat{\mathbf{v}}_{\beta}) - \frac{1}{\text{Da}(\hat{\mathbf{x}})} \mathbf{I} \cdot \hat{\mathbf{v}}_{\beta} \quad (4.13)$$

La cual se resuelve junto con la ecuación de continuidad adimensional,

$$\hat{\nabla} \cdot \hat{\mathbf{v}}_{\beta} = 0 \quad (4.14)$$

En el término que involucra el número de Darcy, en la Ecuación (4.13), se ha considerado que el tensor de esfuerzos es isotrópico, lo cual implica que,

$$\mathbf{K}_{\beta} = K_{\beta} \mathbf{I} \quad (4.15)$$

donde \mathbf{I} es el tensor identidad, $\mathbf{I} = \delta_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j$. Además se descartó el término gravitacional.

Para encontrar la solución es conveniente escribir el problema en forma escalar. Considerando que u_{β} y v_{β} son los componentes x y y del campo de velocidad, se tiene el siguiente problema de valor a la frontera.

$$0 = -\frac{\partial \hat{P}}{\partial \hat{x}} + \varepsilon_{\beta}^{-1}(\hat{y}) \frac{\partial^2 \hat{u}_{\beta}}{\partial \hat{y}^2} - \varepsilon_{\beta}^{-1}(\hat{y}) \frac{\partial}{\partial \hat{y}} [\varepsilon_{\beta}(\hat{y})] \frac{\partial}{\partial \hat{y}} [\varepsilon_{\beta}^{-1}(\hat{y}) \hat{u}_{\beta}] - \frac{\hat{u}_{\beta}}{\text{Da}(\hat{y})} \quad (4.16)$$

Con condiciones de frontera,

$$\text{En } \hat{y} = 0, 1 \quad \hat{u}_\beta = 0 \quad (4.17)$$

La configuración del sistema sugiere adoptar las siguientes simplificaciones,

$$\hat{v}_\beta = 0, \quad \frac{\partial \hat{P}}{\partial \hat{y}} = 0, \quad \frac{\partial \hat{u}_\beta}{\partial \hat{x}} = 0, \quad \frac{\partial \varepsilon_\beta}{\partial \hat{x}} = 0 \quad (4.18)$$

Esto trae como consecuencia que el problema involucra una ecuación diferencial de segundo orden con coeficientes variables, y cuya única fuente es la caída de presión adimensional en la dirección x , .

La Ecuación (4.16) puede reescribirse de la siguiente manera,

$$\frac{\partial^2 \hat{u}_\beta}{\partial \hat{y}^2} - \frac{\partial}{\partial \hat{y}} [\varepsilon_\beta(\hat{y})] \frac{\partial}{\partial \hat{y}} [\varepsilon_\beta^{-1}(\hat{y}) \hat{u}_\beta] - \varepsilon_\beta(\hat{y}) \frac{\hat{u}_\beta}{\text{Da}(\hat{y})} = \varepsilon_\beta(\hat{y}) \frac{\partial \hat{P}}{\partial \hat{x}} \quad (4.19)$$

Además, desarrollando la derivada del producto y después de cierto esfuerzo algebraico se tiene que,

$$\frac{d^2 \hat{u}_\beta}{d\hat{y}^2} = \Phi(\hat{u}_\beta, \hat{y}) \quad (4.20)$$

Donde,

$$\Phi(\hat{u}_\beta, \hat{y}) = \varepsilon_\beta(\hat{y}) \frac{d\hat{P}}{d\hat{x}} + \left[\varepsilon_\beta(\hat{y}) \text{Da}^{-1}(\hat{y}) - \left(\varepsilon_\beta^{-1}(\hat{y}) \frac{d}{d\hat{y}} \varepsilon_\beta(\hat{y}) \right)^2 \right] \hat{u}_\beta + \varepsilon_\beta^{-1}(\hat{y}) \frac{d}{d\hat{y}} \varepsilon_\beta(\hat{y}) \frac{d\hat{u}_\beta}{d\hat{y}} \quad (4.21)$$

La dependencia espacial de la porosidad $\varepsilon_\beta(\hat{y})$, y de la derivada de la porosidad $d\varepsilon_\beta(\hat{y})/d\hat{y}$, están definidas por las Ecuaciones (4.4) y (4.5) respectivamente. Sin embargo, aún falta por definir explícitamente la dependencia espacial del número de Darcy, $\text{Da}(\hat{y})$. Éste parámetro se define como,

$$\text{Da}(\hat{y}) = \frac{K_\beta(\hat{y})}{H^2} \quad (4.22)$$

Según la Ecuación (4.6) y los resultados de las Tablas 4.1 y 4.2, la permeabilidad solo depende de la porosidad en el seno del medio poroso $\varepsilon_{\beta,\omega}$, y de la posición normalizada y/r_0 . De esta manera, para determinada posición y valor de la porosidad, se puede encontrar la relación $K_{\beta,\omega}/K_\beta$ utilizando la Ecuación (4.6), y la permeabilidad en el seno del medio poroso se puede estimar a partir de la Ecuación (4.10).

En su forma actual, no es fácil encontrar una solución analítica de la Ecuación (4.20) debido a la complicada dependencia espacial de la porosidad y de la permeabilidad. Con esto

en mente, es conveniente considerar los términos del lado derecho de la Ecuación (4.20) como un solo término fuente heterogéneo. Esto se hace con el objetivo de encontrar una solución analítica implícita usando formulaciones integrales en término de funciones de Green, tal como se describe en el trabajo de Valdés-Parada y col. (2007a). El problema de Green asociado está definido por,

$$\frac{d^2 G(\hat{y}, \hat{y}_0)}{d\hat{y}^2} = \delta(\hat{y} - \hat{y}_0) \quad (4.23a)$$

$$\text{En } \hat{y} = 0, 1, \quad G(\hat{y}, \hat{y}_0) = 0 \quad (4.23b)$$

Donde $\delta(\hat{y} - \hat{y}_0)$ es la función delta de Dirac definida como,

$$\delta(\hat{y} - \hat{y}_0) = \begin{cases} 0, & \hat{y} \neq \hat{y}_0 \\ \infty, & \hat{y} = \hat{y}_0 \end{cases} \quad (4.24)$$

Además, para los desarrollos subsecuentes es conveniente introducir el siguiente operador diferencial,

$$\mathcal{L}(\bullet) = \frac{d^2}{d\hat{y}^2}(\bullet) \quad (4.25)$$

De tal manera que se tienen las siguientes igualdades,

$$\mathcal{L}(\hat{u}_\beta) = \Phi(\hat{u}_\beta, \hat{y}) \quad (4.26a)$$

$$\mathcal{L}(G) = \delta(\hat{y} - \hat{y}_0) \quad (4.26b)$$

La *fórmula de Green* adaptada a este caso en particular está dada por (Haberman, 2004),

$$\int_{\hat{y}=0}^{\hat{y}=1} [\hat{u}_\beta \mathcal{L}(G) - G \mathcal{L}(\hat{u}_\beta)] d\hat{y} = \left(\hat{u}_\beta \frac{dG}{d\hat{y}} - G \frac{d\hat{u}_\beta}{d\hat{y}} \right) \Big|_{\hat{y}=0}^{\hat{y}=1} \quad (4.27)$$

Después de sustituir las Ecuaciones (4.26a) y (4.26b) en (4.27), y evaluar las condiciones de frontera para \hat{u}_β y G se tiene,

$$\hat{u}_\beta(\hat{y}) = \int_{\hat{y}_0=0}^{\hat{y}_0=1} \Phi(\hat{u}_\beta, \hat{y}_0) G(\hat{y}, \hat{y}_0) d\hat{y}_0 \quad (4.28)$$

Además, en éste resultado se ha utilizado la *propiedad de filtración* de la función delta de Dirac, la cual establece que,

$$\int_{\hat{y}=0}^{\hat{y}=1} \hat{u}_\beta(\hat{y}) \delta(\hat{y} - \hat{y}_0) d\hat{y} = \hat{u}_\beta(\hat{y}_0) \quad (4.29)$$

La Ecuación (4.28) representa la solución formal al problema de transporte de cantidad de movimiento. Ésta es una solución integral implícita ya que se necesita integrar el término fuente a través de todo el dominio evaluado con el mismo campo de solución. Por lo tanto se requiere de un esquema iterativo para encontrar el campo de velocidad. Este tipo de formulación integral implícita ha sido utilizado, por ejemplo, para resolver problemas de transporte de masa que involucran reacción química con cinéticas lineales y no lineales (Valdés-Parada y col., 2007a, 2008a,b) en geometrías simples.

En la Ecuación (4.28) la función de Green, $G(\hat{y}, \hat{y}_0)$, refleja la influencia que tiene la fuente $\Phi(\hat{u}_\beta, \hat{y}_0)$ en la posición \hat{y}_0 sobre la velocidad situada en \hat{y} . También lo contrario es cierto debido a la simetría de la función de Green, es decir $G(\hat{y}, \hat{y}_0) = G(\hat{y}_0, \hat{y})$. Debido a que el término fuente es la única *fuerza* que origina perturbaciones en el campo de velocidad, es de esperarse que la solución involucre solo un término relacionado con éste término no homogéneo. Nótese que en el caso que hubiera fuentes asociadas a las condiciones de frontera, éstas aparecerían en la solución como términos extras. En otras palabras, la formulación integral que se obtiene al encontrar la solución mediante funciones de Green, permite identificar de manera muy clara la contribución que cada una de las fuentes tiene sobre el campo de solución. Estos conceptos han sido aplicados recientemente por Valdés-Parada (2010), con el objetivo de interpretar el significado físico de las variables de cerradura que aparecen en procesos de escalamiento. Por último, cabe señalar que el término fuente Φ puede ser tan complicado o tan simple de tal manera que la única dificultad que se tiene, se relaciona únicamente con la estabilidad del esquema iterativo utilizado para encontrar la solución. Esto significa, por ejemplo, que el término Φ puede simplemente modificarse con el objetivo de explorar diferentes alternativas de la dependencia espacial de los coeficientes efectivos. Esta es una de las principales ventajas en usar formulaciones integrales sobre otros esquemas clásicos basados en la discretización de las ecuaciones diferenciales.

Para poder evaluar la solución es necesario determinar la función de Green. Para ello se parte de la solución general la cual es,

$$G(\hat{y}, \hat{y}_0) = \begin{cases} a\hat{y} + b, & \hat{y} < \hat{y}_0 \\ c\hat{y} + d, & \hat{y} > \hat{y}_0 \end{cases} \quad (4.30)$$

Al utilizar las condiciones de frontera

$$G(0, \hat{y}_0) = G(1, \hat{y}_0) = 0$$

se tiene,

$$G(\hat{y}, \hat{y}_0) = \begin{cases} a\hat{y}, & \hat{y} < \hat{y}_0 \\ c(\hat{y} - 1), & \hat{y} > \hat{y}_0 \end{cases} \quad (4.31)$$

Imponiendo que la función de Green es continua en $\hat{y} = \hat{y}_0$, es decir,

$$G(\hat{y}_0^-, \hat{y}_0) = G(\hat{y}_0^+, \hat{y}_0) \quad (4.32)$$

se tiene que,

$$G(\hat{y}, \hat{y}_0) = \begin{cases} c\left(\hat{y} - \frac{\hat{y}}{\hat{y}_0}\right), & \hat{y} < \hat{y}_0 \\ c(\hat{y} - 1), & \hat{y} > \hat{y}_0 \end{cases} \quad (4.33)$$

Finalmente, integrando la ecuación diferencial se produce la condición de frontera faltante,

$$\frac{dG(\hat{y}_0^+, \hat{y}_0)}{d\hat{y}} - \frac{dG(\hat{y}_0^-, \hat{y}_0)}{d\hat{y}} = 1 \quad (4.34)$$

la cual al evaluarse permite obtener la expresión final de la función de Green,

$$G(\hat{y}, \hat{y}_0) = \begin{cases} \hat{y}(\hat{y}_0 - 1), & \hat{y} < \hat{y}_0 \\ \hat{y}_0(\hat{y} - 1), & \hat{y} > \hat{y}_0 \end{cases} \quad (4.35)$$

Nótese que la función de Green es simétrica debido a que el operador diferencial que se definió $\mathcal{L}(\bullet)$ también lo es. En la Figura 4.9 se muestra la forma de la función de Green para tres valores de \hat{y}_0 . En dicha figura se observa claramente la simetría de la función de Green, $G(\hat{y}, \hat{y}_0) = G(\hat{y}_0, \hat{y})$.

4.4. Determinación del campo de temperatura promedio

El problema de transporte de calor en la macroescala se encuentra definido por la Ecuación diferencial (4.3) la cual está sujeta a las condiciones de frontera,

$$\langle T \rangle = \langle T \rangle_{wall}, \quad \text{En } y = -e, H - e \quad (4.36a)$$

$$(\rho c_P)_\beta u_\beta \langle T \rangle_0 = (\rho c_P)_\beta u_\beta \langle T \rangle - (K_{eff}^*)_{xx} \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial x}, \quad \text{En } x = 0 \quad (4.36b)$$

$$\frac{\partial \langle T \rangle}{\partial x} = 0, \quad \text{En } x = L_{total} \quad (4.36c)$$

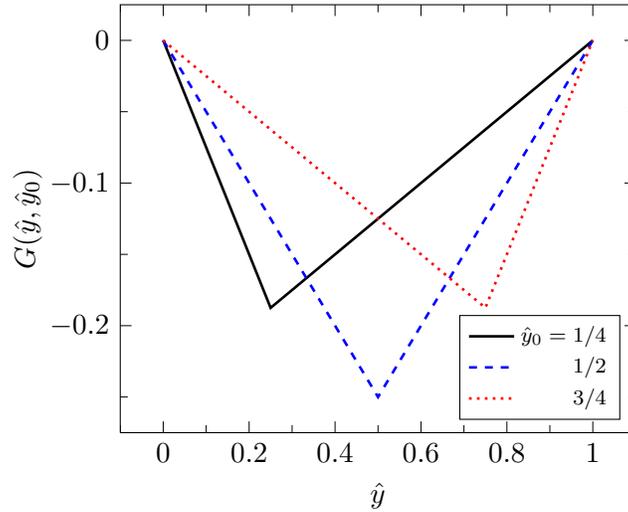


Figura 4.9. Gráfica de la función de Green dada por la Ecuación (4.35).

Por un lado, la condición de frontera expresada en la Ecuación (4.36b) es conocida como *la condición de frontera tipo Danckwerts* (Danckwerts, 1986), la cual establece que en la frontera $x = 0$ la cantidad de calor que entra por el lado izquierdo, $(\rho c_P)_\beta u_\beta \langle T \rangle_0$, es igual a la cantidad de calor que sale por el lado derecho, $(\rho c_P)_\beta u_\beta \langle T \rangle - (K_{eff}^*)_{xx} (\partial \langle T \rangle / \partial x)$. Nótese que con esto la condición de frontera tiende a una condición del tipo Dirichlet cuando el número la intensidad de flujo es suficientemente *grande*, es decir $\langle T \rangle \approx \langle T \rangle_0$. Por otro lado, la condición de frontera de la Ecuación (4.36c), de manera estricta, solamente es válida cuando

$$L_{total} \gg H \quad (4.37)$$

ya que esto garantiza que prácticamente la temperatura en el canal sea constante y cercana a $\langle T \rangle_{wall}$.

Dado que se utiliza el modelo de equilibrio local térmico, solo es necesario conocer la dependencia espacial del tensor térmico efectivo total \mathbf{K}_{eff}^* . Dicha dependencia espacial se obtuvo por métodos numéricos mediante la solución de los problemas de cerradura correspondientes, y los resultados son presentados en el Capítulo 3 y en el Apéndice B para diferentes valores de la porosidad del inserto poroso, del número de Péclet y de las conductividades térmicas de los materiales. Se enfatiza que el principal objetivo de esta parte del trabajo es mostrar la utilidad y aplicabilidad del modelo promedio de equilibrio de un solo dominio, desarrollado en el Capítulo 2, en un problema práctico de la ingeniería. Debe señalarse que, contrario al problema de transporte de cantidad de movimiento, en este

caso existen serias dificultades relacionadas con el término dispersivo en la Ecuación (4.3), lo cual complica en demasía encontrar la solución analítica basada en funciones de Green. Por este motivo, el problema de transporte de calor es resuelto a partir de métodos numéricos.

4.5. Resultados y discusión

4.5.1. Comportamiento hidrodinámico

Tal como se explicó en la Sección 4.3.2, con el objetivo de obtener el campo de velocidad promedio es necesario implementar un esquema iterativo. Para ello se utiliza la siguiente fórmula recursiva,

$$(\hat{u}_\beta)_{j+1} = w(\hat{u}_\beta)_{j-1} + (1 - w)(\hat{u}_\beta)_j \quad (4.38)$$

Donde el subíndice j se refiere al número de iteración y w es la función peso en el esquema iterativo. La rapidez de convergencia depende fuertemente de éste parámetro y su intervalo de valores es de 0 a 1. En el código computacional, el esquema iterativo fue forzado a satisfacer una tolerancia en el error basado en la norma L^2 , es decir,

$$error = \left\{ \int_{\hat{y}=0}^{\hat{y}=1} [(\hat{u}_\beta)_j - (\hat{u}_\beta)_{j-1}]^2 d\hat{y} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (4.39)$$

Las iteraciones son detenidas siempre y cuando $error \leq 1 \times 10^{-4}$.

En todos los cálculos la caída de presión se mantuvo fija en

$$\frac{\Delta \langle p_\beta \rangle^\beta}{L_{total}} = -1 \text{ Pa m}^{-1} \quad (4.40)$$

Esto permite obtener la velocidad característica $\langle v_\beta \rangle_\omega^\beta$ cuando el canal está totalmente lleno con el inserto poroso. Nótese que con este procedimiento no se mantiene fijo el número de Reynolds basado en la altura del canal,

$$Re_H = \frac{\rho_\beta \langle v_\beta \rangle_\omega^\beta H}{\mu_\beta} \quad (4.41)$$

debido a que la velocidad característica depende de la porosidad del inserto poroso. Un procedimiento alternativo consiste en mantener fijo el número de Reynold y entonces encontrar la caída de presión correspondiente. En este caso, la búsqueda no es tan directa pues depende de la porosidad del inserto poroso.

Es de esperarse que la porosidad influya notablemente en el perfil de velocidad en el canal. De acuerdo a la Figura 4.10a, la velocidad es fuertemente influenciada por la porosidad del inserto poroso, lo cual es consistente con resultados teóricos y experimentales previamente reportados (Goyeau y col., 2003; Beavers y Joseph, 1967; Ochoa-Tapia y Whitaker, 1995b). Nótese que a medida que la porosidad toma el valor de 1, la resistencia ejercida por el medio poroso disminuye y el perfil de velocidad es similar al que se encuentra entre dos placas paralelas, es decir, flujo Poiseuille. En el caso opuesto, es decir $\varepsilon_{\beta,\omega} \rightarrow 0$, eventualmente el inserto actúa como una pared impermeable. Debido a la definición adoptada para la velocidad adimensional, Ecuación (4.12), los perfiles de velocidad están adimensionalizados con respecto a la velocidad característica $\langle v_{\beta} \rangle_{\omega}^{\beta}$, por lo tanto, se espera que aproximadamente a la mitad de la altura del inserto poroso (es decir, $\hat{y} \approx 0.25$) $\hat{u}_{\beta} \approx \varepsilon_{\beta,\omega}$.

Además, en la Figura 4.10b se muestra la importancia de la dimensionalidad de la celda unitaria para la predicción del campo de velocidad. Se observa que las mayores diferencias ocurren en el *pico* del perfil de velocidad, es decir, en $\hat{u}_{\beta,max}$. Una de las causas es que se involucra directamente la inversa del número de Darcy (es decir, la permeabilidad) en la solución, Ecuación (4.28). Cualquier diferencia pequeña afecta en sobremanera el campo de velocidad. De hecho, para el caso considerado en la figura, se tiene que el valor de $\hat{u}_{\beta,max}$ correspondiente para celdas en 2D es aproximadamente la tercera parte del que se obtiene con las celdas en 3D. A nuestro conocimiento, existe poca o nula información en la literatura acerca del efecto de la dimensionalidad de la celda unitaria sobre el campo de solución, lo cual resulta una situación crucial en el modelado en la macroescala. Bajo esta situación, se enfatiza la importancia de contar con métodos rigurosos (y robustos) para la predicción de parámetros efectivos. Sin duda, la mejor manera de evaluar la precisión en la predicción del campo de velocidad es a través de la comparación adecuada con datos de laboratorio.

Siguiendo las observaciones experimentales de Beavers y Joseph (1967), los perfiles de velocidad también son influenciados por la configuración del canal parcialmente lleno con el inserto poroso. En la Figura 4.11a se presentan los perfiles de velocidad que se obtienen cuando se utilizan diferentes espesores del inserto poroso, $e/H = 0.25, 0.5, 0.75$. Como se esperaba, la velocidad se incrementa a medida que el tamaño del inserto poroso disminuye o la porosidad del inserto poroso se aproxima a 1.

Un aspecto crucial que surge en procesos de escalamiento es la relación de escalas presentes en el sistema. Se ha discutido a lo largo de este documento que para que el método del promedio volumétrico funcione deben de existir jerarquías de escalas en el sistema, es

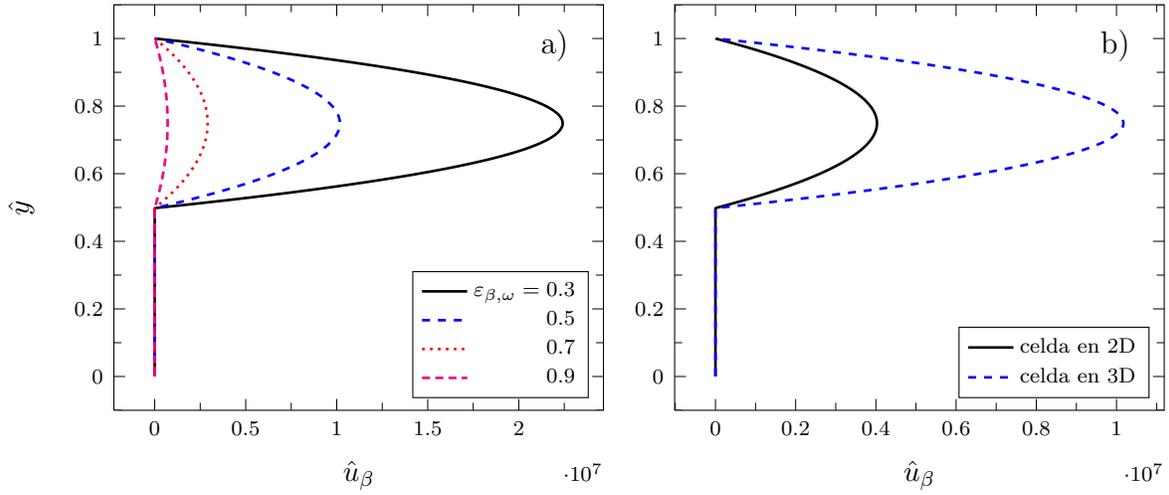


Figura 4.10. Perfil de velocidad adimensional en el canal con inserto poroso para: a) diferentes valores de la porosidad y tomando la permeabilidad calculada en celdas en 3D, b) permeabilidades estimadas en celdas en 2D y 3D y $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$. Para todos los casos se utilizó $e/H = 0.5$ y $\xi/H = 0.01$.

decir, las longitudes características deben ser dispares. En otras palabras, se deben identificar las leyes de escalamiento (Wood, 2009a) bajo las cuales las ecuaciones en la macroescala son válidas. Usualmente, la disparidad de escalas se expresa en la forma $\ell_\beta \ll r_0 \ll L$. Mientras que este tipo de restricciones son ciertamente informativas, éstas no arrojan información suficiente en cuestiones prácticas. Según las Ecuaciones (4.10), la permeabilidad se encuentra normalizada con el cuadrado del tamaño de la celda utilizada para resolver el problema de cerradura correspondiente, ℓ_{cell}^2 . Para el tipo de celdas utilizadas en este trabajo (véase la Figura 4.3), se tiene que,

$$\ell_{\text{cell}} \sim d_p \quad (4.42)$$

donde d_p es el diámetro equivalente de la partícula. Sin embargo, en la ecuación adimensionalizada para el transporte de cantidad de movimiento, aparece el número de Darcy definido con la altura del canal H . Por tanto, para poder utilizar las Ecuaciones (4.10) es necesario especificar la relación de escalas ℓ_{cell}/H . Para una relación fija de $\ell_{\text{cell}}/\xi = 0.1$, esto puede lograrse modificando la relación ξ/H , la cual relaciona el tamaño de la inter-región con la altura del canal. En la Figura 4.11b se investigó la influencia de la relación ξ/H sobre el perfil de velocidad. Nótese que un pequeño cambio en ξ origina cambios significativos en el perfil de velocidad. Esto resalta la enorme importancia de identificar claramente las distintas escalas involucradas en determinado problema, además de capturar adecuadamente

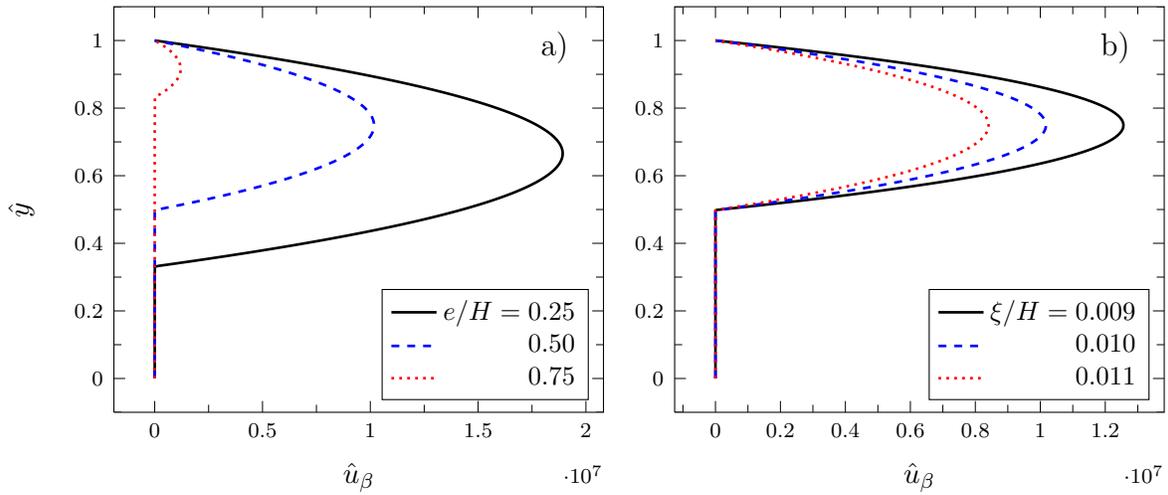


Figura 4.11. Perfil de velocidad adimensional en el canal para: a) diferentes tamaños del inserto poroso ($\xi/H = 0.01$), b) diferentes tamaños de la altura del canal ($e/H = 0.5$). En todos los casos se utilizó $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$ y la permeabilidad obtenida con la celda tridimensional.

la microestructura del medio poroso.

Para finalizar esta sección, como una medida cuantitativa del efecto del inserto poroso sobre la hidrodinámica en el canal, se introduce el flujo volumétrico promedio por unidad de anchura del canal,

$$\frac{Q}{W} = \int_{y=-e}^{y=H-e} \langle u_{\beta} \rangle dy \quad (4.43)$$

En la Figura 4.12 se presenta la variación de Q con el tamaño del inserto poroso y la porosidad. Nótese que el flujo volumétrico se ha dividido entre el flujo que se tiene cuando no hay inserto poroso en el canal. En la Figura 4.12a se observa que existe una disminución exponencial en el flujo a medida que el inserto poroso llena totalmente el canal. Cabe señalar que el flujo volumétrico que se tiene cuando el inserto llena totalmente el canal se puede calcular directamente de la ley de Darcy. En la Figura 4.12b se presenta el efecto de la porosidad sobre el flujo volumétrico dentro del canal para tres valores del tamaño del inserto poroso. Contrario a la Figura 4.12a, aquí se utilizó la permeabilidad calculada en celdas en 2D para poder simular en porosidades cercanas a cero. De manera general, la relación $Q/Q_{e=0}$ presenta una débil dependencia con la porosidad debido a que la mayor contribución para el flujo volumétrico, surge del fluido en la región libre del canal. Esto es consistente con el a) de esta figura, pues en ella se observa la fuerte dependencia de Q con el espesor del

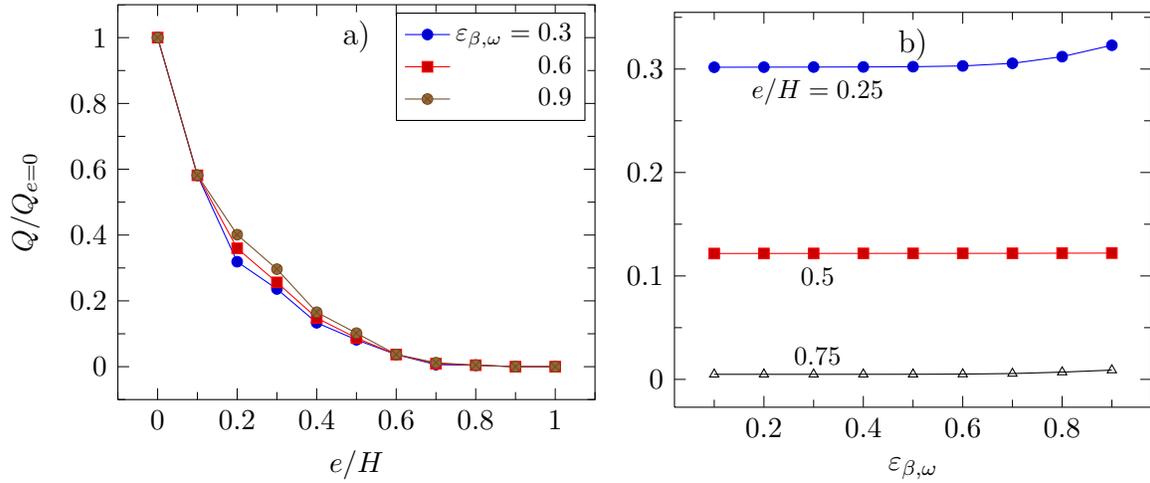


Figura 4.12. a) Efecto del tamaño del inserto poroso sobre Q tomando la permeabilidad calculada con la celda tridimensional y $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.3, 0.6$ y 0.9 . b) Efecto de la porosidad sobre Q tomando la permeabilidad calculada con la celda bidimensional y $e/H = 0.25, 0.5$ y 0.75 . En todos los casos se consideró $\xi/H = 0.01$.

inserto poroso e .

4.5.2. Comportamiento térmico

El problema del transporte de calor se resolvió mediante el software comercial Comsol Multiphysics®, el cual está basado en formulaciones con elemento finito. Para asegurar que los resultados sean independientes del número de nodos computacionales, se usó un algoritmo de refinamiento de malla consecutivo el cual se detiene cuando se generan resultados consistentes. Ya obtenido el campo de velocidad (es decir, satisfacer la Ecuación (4.28)), éste se utiliza como dato de entrada al programa de Comsol. La principal dificultad del problema de transporte de calor, además del hecho de que es bidimensional, yace en la cuantificación correcta de los cambios espaciales del tensor térmico efectivo total $\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x})$.

En este problema existen varios grados de libertad, sin embargo, solo se consideran los siguientes: la relación de conductividades térmicas del inserto poroso; la porosidad; el tamaño del inserto poroso y el número de Péclet basado en la altura del canal definido como,

$$\text{Pe}_H = \frac{(\rho c_P)_\beta v_{av} H}{k_\beta} \quad (4.44)$$

la relación de éste número de Péclet con el de celda es $\text{Pe}_H = \text{Pe}_{\text{cell}}/\ell_{\text{cell}}$. Aquí v_{av} es la

velocidad característica definida como

$$v_{av} = \int_{\hat{y}=0}^{\hat{y}=1} \|\langle \mathbf{v}_\beta \rangle\| d\hat{y} \quad (4.45)$$

la cual puede evaluarse en cualquier distancia dentro del canal.

En la Figura 4.13 se presenta el campo de la temperatura adimensional definida como,

$$\Theta = \frac{\langle T \rangle - \langle T \rangle_0}{\langle T \rangle_{wall} - \langle T \rangle_0} \quad (4.46)$$

para diferentes valores del número de Péclet del canal. Se observa que, para las condiciones aquí consideradas, bajo intensidades de flujo moderadas, es decir $Pe_H < 10$, prácticamente todo el fluido que pasa a través del canal adquiere la temperatura de la pared. En el caso opuesto, es decir $Pe_H > 10$, el transporte de calor por convección predomina sobre la conducción axial, y en esta situación, solamente el fluido cercano a la pared está a la temperatura $\langle T \rangle_{wall}$. Por otra parte, se observa que la porción del sistema ocupado por el inserto poroso tiene una fuerte tendencia a preservar la temperatura de la pared; debido a esto se notan variaciones drásticas en la temperatura cercana a la frontera inserto poroso-fluido, especialmente para $Pe_H > 10$. Además, para estas condiciones, el fluido fuera del medio poroso prácticamente conserva la temperatura de entrada del fluido. Cabe señalar que estos resultados están basados en un canal cuya longitud es 10 veces su altura. Se espera que estas observaciones cambien ligeramente para longitudes mayores (o menores) del canal, debido a que esto origina un aumento (o disminución) en el tiempo de contacto entre el fluido y las paredes del canal.

El efecto de utilizar insertos porosos con diferentes valores de la conductividad térmica de la matriz sólida se presenta en la Figura 4.14. Como es de esperarse, la incorporación de insertos porosos más conductivos lleva a que la transferencia de calor sea mayor de las paredes del canal hacia el fluido o viceversa. Nótese que con $\kappa = 0.01$ el fluido no alcanza a salir con la temperatura del canal en su mayor proporción. En el caso contrario, cuando $\kappa = 100$, el fluido prácticamente sale con la temperatura $\langle T \rangle_{wall}$. Estos resultados sugieren que una manera de mejorar la transferencia de calor en intercambiadores de calor es usando sustratos porosos con alta conductividad térmica, y con gran área interfacial disponible para el intercambio de calor entre el fluido intersticial y el sólido que compone al sustrato.

En la Figura 4.15 se muestra el perfil de temperatura adimensional en el canal cuando se utilizan diferentes tamaños del inserto poroso. A medida que el inserto poroso satura

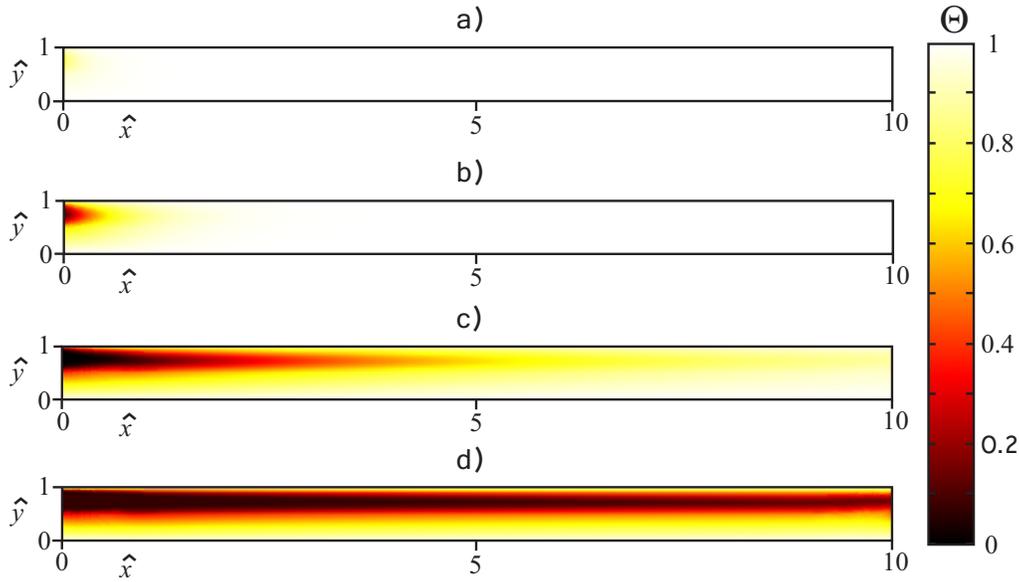


Figura 4.13. Efecto del número de Péclet sobre el campo de temperatura adimensional en el canal poroso: a) $Pe_H = 1$, b) 10, c) 100 y d) 1000. Se tomó $\kappa = 100$, $e/H = 0.5$, $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$, $\xi/H = 0.01$ y la permeabilidad calculada en celdas tridimensionales.

por completo el canal, se tienen temperaturas más uniformes con valores cercanos a la temperatura de la pared. Nótese que en el caso en que no hay inserto poroso, es decir $e/H = 0$, solo el fluido cercano a la pared aumenta su temperatura. Esta es la situación típica que se encuentra en los equipos de intercambio de calor que no son modificados con un inserto poroso cuando el flujo es en régimen laminar. Aunque el uso de los insertos porosos lleva a un aumento (no directamente proporcional) de la caída de presión (Al-Nimr y Alkam, 1998), su utilidad se aprecia inmediatamente en los resultados presentados en la Figura 4.15.

Finalmente, en la Figura 4.16 se presenta el efecto que tiene la porosidad del inserto poroso sobre el campo de temperatura adimensional. En este caso, los resultados corresponden a una caída presión fija y cuyo valor origina un número de Péclet de canal igual a 10 cuando la porosidad es 0.5 usando la permeabilidad calculada en celdas bidimensionales. Además, con el objetivo de hacer una comparación más sencilla de interpretar, las gráficas corresponden a la situación del canal completamente saturado con el sustrato poroso. Para valores de la porosidad relativamente bajos, $\varepsilon_{\beta,\omega} < 0.5$, el perfil de temperaturas que se obtiene es prácticamente similar al de una barra sólida de dimensiones iguales a las del canal. La situación contraria ocurre cuando la porosidad se acerca a la unidad. Los perfiles

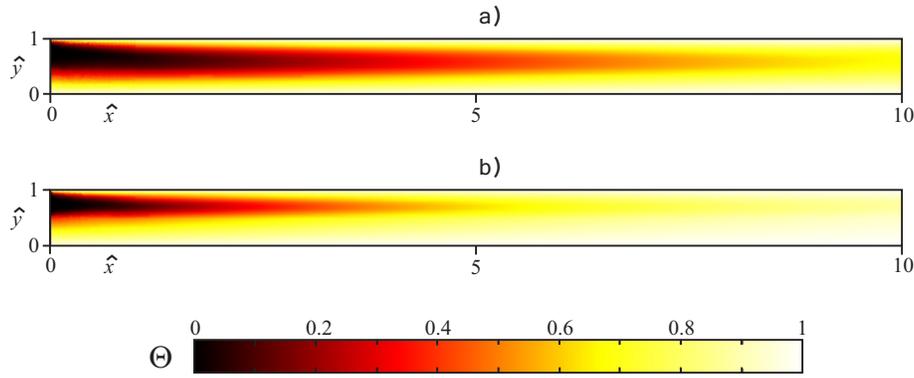


Figura 4.14. Efecto de la relación de conductividades térmicas sobre el campo de temperatura adimensional en el canal: a) $\kappa = 0.01$ y b) 100. Se tomó $Pe_H = 100$, $e/H = 0.5$, $\xi/H = 0.01$, $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$ y la permeabilidad calculada en celdas tridimensionales.

de temperatura y velocidad son similares a los encontrados cuando no hay inserto poroso debido a que la matriz porosa ejerce menos resistencia al flujo. De esta manera, se espera que bajos valores de la porosidad aumenten el transporte de calor entre las paredes del canal y el fluido de trabajo.

Con el objetivo de evaluar cuantitativamente el desempeño térmico del intercambiador de calor, se introduce el número de Nusselt local (Al-Nimr y Alkam, 1998; Alkam y col., 2001),

$$Nu_x = \frac{1}{1 - \Theta_m} \left[\frac{(K_{eff}^*)_{yy} d\Theta}{k_\beta d\hat{y}} \right] \Big|_{\hat{y}=0} \quad (4.47)$$

el cual se encuentra evaluado en la posición x dentro del canal. Además, se ha introducido la temperatura media definida como,

$$\Theta_m = \int_{\hat{y}=0}^{\hat{y}=1} \Theta d\hat{y} \quad (4.48)$$

El análisis comienza variando la relación de conductividades térmicas, κ , tal como se muestra en la Figura 4.17a. Para las condiciones utilizadas en los resultados, se observa que los perfiles tanto de velocidad como de temperatura, están desarrollados prácticamente en $x = H/2$. Por esta razón solo se presentan resultados para $\hat{x} \in [0, 5]$. En todos los casos, en la entrada del canal el número de Nusselt es menor que en el resto del canal debido a que el canal está parcialmente saturado con el inserto poroso. Nótese que los cambios más significativos en el número de Nusselt ocurren cuando $\kappa > 1$. Cabe señalar que el número de

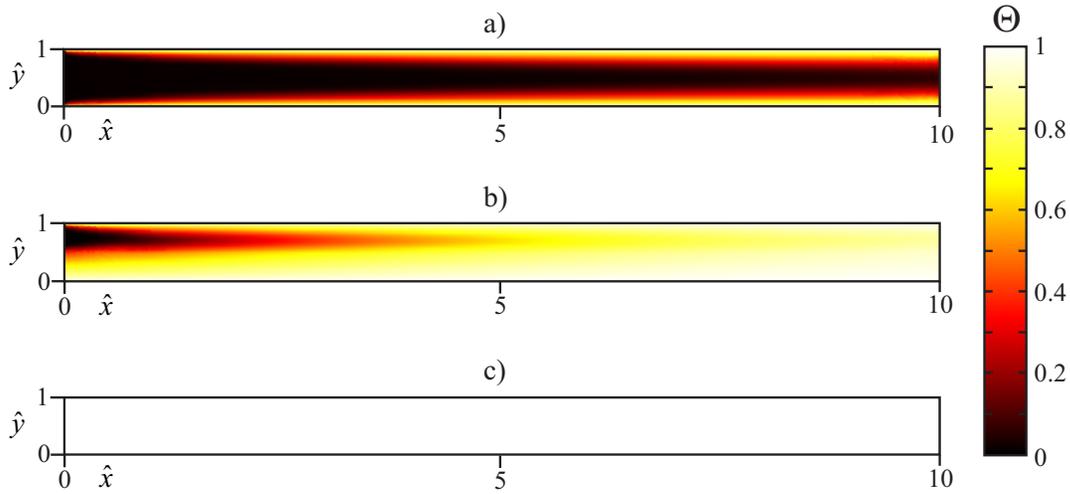


Figura 4.15. Efecto del tamaño del inserto poroso sobre el campo de temperatura adimensional en el canal: a) $e/H = 0.0$, b) 0.5 y c) 1.0 . En todos los casos se consideró la caída de presión necesaria para que $Pe_H = 100$ cuando $e/H = 0.5$; $\kappa = 100$, $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$, $\xi/H = 0.01$ y la permeabilidad calculada en celdas tridimensionales.

Nusselt definido en la Ecuación (4.47) es una medida directa de la tasa de transferencia de calor entre la placa inferior y el fluido dentro del canal. Debido a esto, es de esperarse que se tenga mayor transporte de calor cuando el inserto poroso es altamente conductivo. Esta situación es consistente con los perfiles de temperatura presentados en la Figura 4.14.

La influencia de la porosidad sobre la tasa de transferencia de calor se presenta en la Figura 4.17b. Se observa que el número de Nusselt local incrementa a medida que la porosidad disminuye. Además, en este caso el número de Nusselt es mayor en la entrada que en el resto del canal, debido a que el canal se encuentra saturado completamente con el inserto poroso. Cabe agregar en este punto, que en situaciones reales ocurre un fenómeno extra dentro del inserto poroso. La cual es la turbulencia que se origina por las numerosas y complejas *redes porosas* (de Lemos, 2006) dentro del inserto, y coadyuva al mezclado interno. Realmente, los modelos aquí desarrollados no contemplan flujo en régimen turbulento y un análisis más detallado se encuentra fuera del alcance del presente documento.

En la Figura 4.18a se presentan los perfiles del número de Nusselt para diferentes valores del número de Péclet. En todos los casos que se presentan, la tasa de transferencia de calor es menor en la entrada que en el resto del canal. Observando la tendencia de los perfiles se puede concluir que si la longitud del canal se incrementa, esto es ($\hat{x} \gg 1$), el desempeño

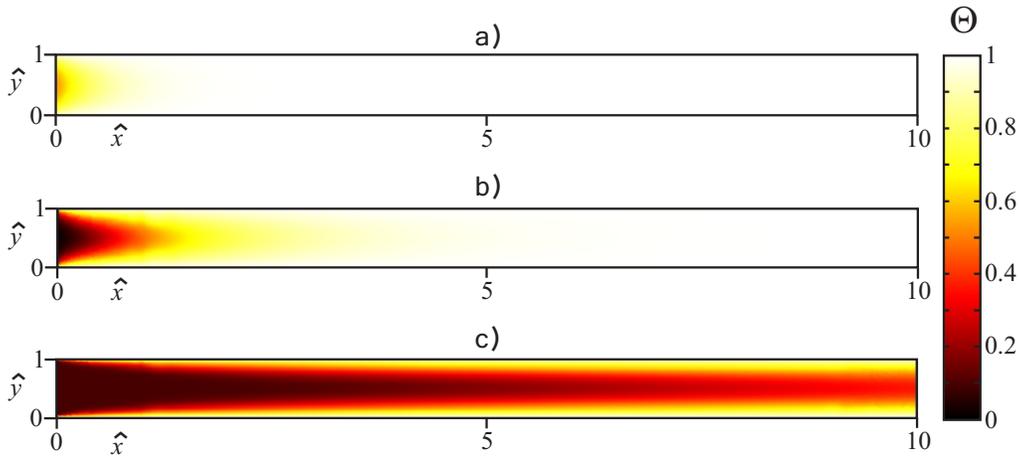


Figura 4.16. Efecto de la porosidad del inserto poroso sobre el campo de temperatura adimensional en el canal: a) $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$, b) 0.7 y c) 0.9. Se tomó $e/H = 1$, $\xi/H = 0.01$, $\kappa = 100$ y la caída de presión correspondiente a $Pe_H = 10$ cuando $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$ y usando la permeabilidad calculada en celdas bidimensionales.

térmico del sistema se ve favorecido para valores bajos del número de Péclet, debido a que esto representa mayor tiempo de contacto entre las paredes y el fluido. Esto ocasiona que, en el caso de transporte predominantemente conductivo ($Pe_H < 1$), la mayoría del fluido alcanza la temperatura de la pared en menos distancia dentro del canal. En el caso opuesto ($Pe_H > 1$), el fluido necesita trasladarse una mayor distancia con el fin de alcanzar la misma temperatura.

Finalmente, en la Figura 4.18b se muestra el efecto del grosor del inserto poroso sobre el número de Nusselt. Los resultados son consistentes con los presentados en la Figura 4.15, es decir, un incremento en el tamaño del inserto poroso lleva a mejorar la tasa de transferencia de calor. Sin embargo, esta situación no es directamente proporcional a la cantidad de material poroso presente en el canal. No obstante, puede concluirse que el mejor desempeño térmico corresponde cuando el canal está completamente saturado con el inserto poroso.

Resumiendo, con el fin de mejorar la tasa de transferencia de calor en el canal es recomendable:

- Usar un inserto poroso altamente conductivo.
- Usar un inserto poroso con baja porosidad.

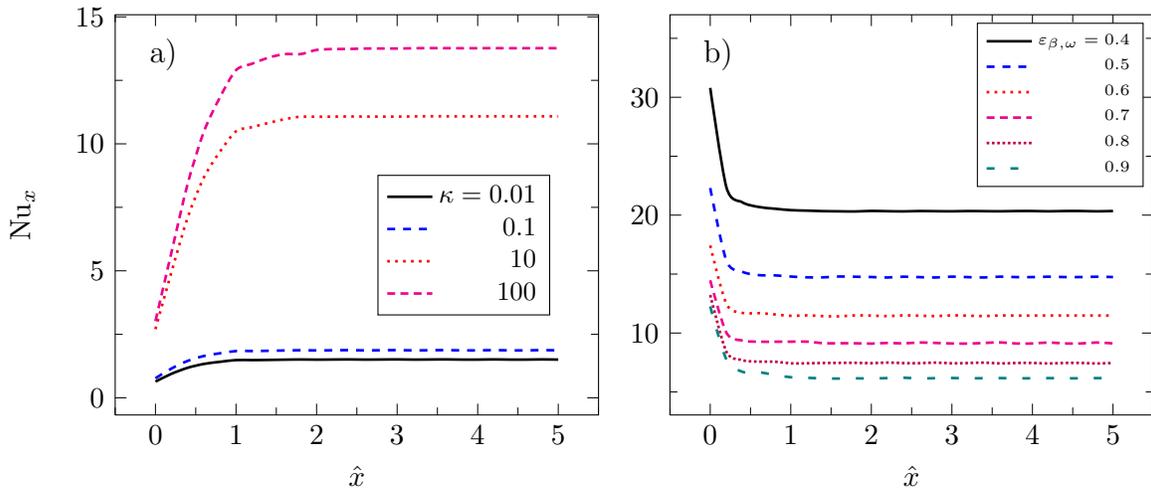


Figura 4.17. Influencia sobre el número de Nusselt local de: a) la relación de conductividades térmicas tomando $e/H = 0.5$; b) la porosidad del inserto poroso tomando $\kappa = 100$ y $e/H = 1$. En todos los casos se consideró la caída de presión correspondiente a un valor de $Pe_H = 1$ cuando $\varepsilon_{\beta, \omega} = 0.5$, $\xi/H = 0.01$ y la permeabilidad calculada en celdas tridimensionales.

- Mantener, por un lado, valores del número de Péclet menores a 1 para canales largos ($\hat{x} \gg 1$), y por otro lado, para canales pequeños ($\hat{x} \ll 1$) es conveniente operar con $Pe_H \gg 1$.
- Usar un canal completamente saturado con el inserto poroso.

Cabe agregar que un análisis más detallado, por ejemplo incluyendo costos debido a la caída de presión y al material poroso, necesita hacerse con el objetivo de evaluar la viabilidad de las recomendaciones aquí sugeridas para optimizar el proceso.

Los resultados de este trabajo sirven como motivación para posteriores estudios experimentales y teóricos de transporte de calor y de cantidad de movimiento, en canales parcialmente llenos con un medio poroso. Debe señalarse que, a pesar de que se fue capaz de resolver el modelo ODA en este trabajo, no significa que ésta deba ser la alternativa más óptima de modelamiento en situaciones prácticas. Por ejemplo, la demanda computacional considerable involucrada en la solución de ecuaciones diferenciales parciales con coeficientes variables, puede convertirse en algo impráctico en aplicaciones de monitoreo continuo, como lo son los sistemas de control. Por esta razón, es de gran interés comparar los resultados de este trabajo con los correspondientes del modelo TDA, el cual involucra resolver más ecuaciones diferenciales parciales (al menos el doble que los utilizados en el ODA), pero

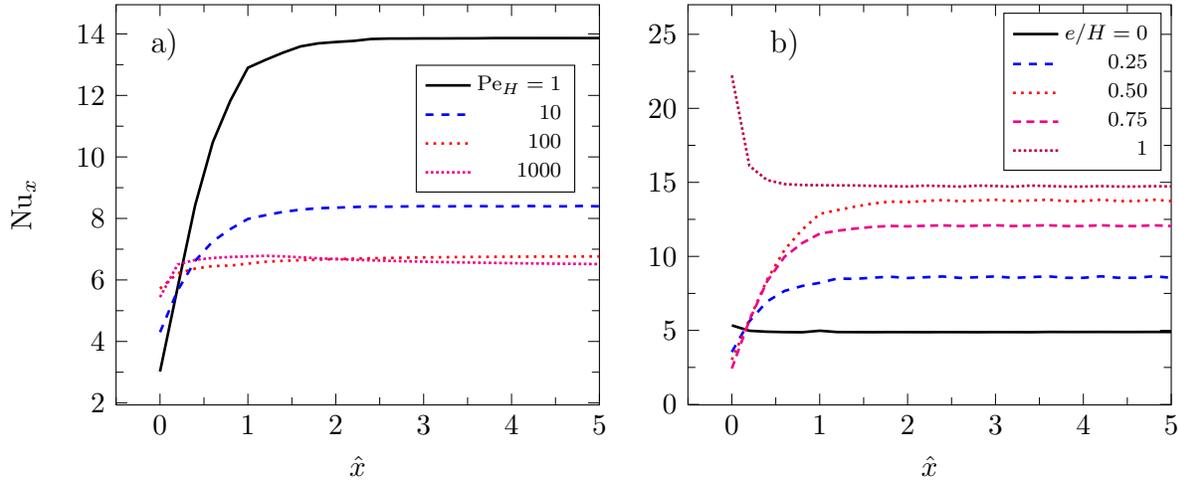


Figura 4.18. Influencia sobre el número de Nusselt local de: a) el número de Péclet tomando $e/H = 0.5$; b) el tamaño del inserto poroso tomando $Pe_H = 1$. En todos los casos se consideró $\kappa = 100$, $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$, $\xi/H = 0.01$ y la permeabilidad calculada en celdas tridimensionales.

con la diferencia que se encuentran expresadas en términos de coeficientes de medio efectivo constantes. No obstante, debe señalarse que las predicciones surgidas con el modelo TDA, dependen de las condiciones de salto asociadas con la frontera macroscópica medio poroso-fluido. Como ya se mencionó anteriormente, con el fin de calcular los coeficientes involucrados en las condiciones de salto es necesario contar con las variaciones espaciales de los coeficientes de transporte efectivo en el modelo ODA. Así, el material presentado en esta sección es útil para estudios posteriores enfocados a la derivación, solución y comparación de los modelos de uno y dos dominios.

Parte II

El modelo de dos dominios

CAPÍTULO 5

CONDICIONES DE SALTO COMPLETAS PARA EL MODELO DE EQUILIBRIO LOCAL TÉRMICO

En este capítulo se desarrollan las condiciones de salto para el campo de temperatura promedio y el flux de calor en la frontera medio poroso-fluido considerando el modelo de equilibrio local térmico.

5.1. Desviaciones macroscópicas de la temperatura

El desarrollo comienza re-escribiendo la ecuación efectiva válida en todo el dominio para el transporte de calor bajo la suposición de equilibrio local térmico,

$$\langle \rho \rangle C_P \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + (\rho c_P)_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \cdot \nabla \langle T \rangle = \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle T \rangle] \quad (5.1)$$

En esta ecuación se ha utilizado la característica solenoidal de la fase fluida, $\nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle = 0$, y, con base en el análisis presentado en el Apéndice B, se ha descartado la contribución del vector total tipo-convectivo \mathbf{u} .

Desarrollando la Ecuación (5.1) en coordenadas cartesianas se tiene,

$$\begin{aligned} \langle \rho \rangle C_P \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + (\rho c_P)_\beta \left(\langle u_\beta \rangle \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial x} + \langle v_\beta \rangle \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial y} \right) = \\ \frac{\partial}{\partial x} \left[(K_{eff}^*)_{xx}(y) \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial x} + (K_{eff}^*)_{xy}(y) \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[(K_{eff}^*)_{yx}(y) \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial x} + (K_{eff}^*)_{yy}(y) \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial y} \right] \end{aligned} \quad (5.2)$$

Sin embargo, a partir de las características propias del problema bajo estudio se pueden hacer las siguientes simplificaciones:

- No existe flujo neto en la dirección normal a la frontera medio poroso-fluido, es decir, $\langle v_\beta \rangle = 0$, debido a las paredes del canal.
- Tal como lo sugieren los resultados de la Sección 3.1, los elementos del tensor térmico fuera de la diagonal principal son despreciables en comparación con los de la diagonal, es decir, $(K_{eff}^*)_{xy}, (K_{eff}^*)_{yx} = 0$.
- Para fines del desarrollo de la condición de salto en esta parte, se descartan las contribuciones transitorias por lo que $\partial \langle T \rangle / \partial t = 0$.
- Además, con el objetivo que la condición de salto sea independiente de la coordenada tangente a la superficie divisoria (coordenada x), se considera que el transporte de calor ocurre principalmente en la dirección y , es decir, $\partial \langle T \rangle / \partial x = 0$.

Tomando en cuenta todo esto la Ecuación (5.2) se reduce a,

$$0 = \frac{d}{dy} \left[(K_{eff}^*)_{yy}(y) \frac{d \langle T \rangle}{dy} \right], \text{ modelo ODA} \quad (5.3)$$

Debe recalarse que esta ecuación pertenece al modelo de un solo dominio (ODA), y por tanto, el coeficiente efectivo es dependiente de la posición y no es posible sacarlo fuera de la derivada.

La ecuación correspondiente para el seno de la región del medio poroso puede deducirse fácilmente a partir de la Ecuación (5.3),

$$0 = \frac{d^2 \langle T \rangle_\omega}{dy^2}, \text{ modelo TDA en la región porosa} \quad (5.4)$$

Mientras que la ecuación análoga para el seno de la región de fluido es,

$$0 = \frac{d^2 \langle T \rangle_\eta}{dy^2}, \text{ modelo TDA en la región de fluido} \quad (5.5)$$

Para ilustrar las diferencias substanciales entre ambos modelos, en la Figura 5.1 se presentan de manera cualitativa los perfiles de temperatura típicos bajo los modelos ODA y TDA. Debido a que los coeficientes efectivos de transporte entre ambos modelos difieren principalmente en la inter-región, es en dicha zona donde ocurren las desviaciones más

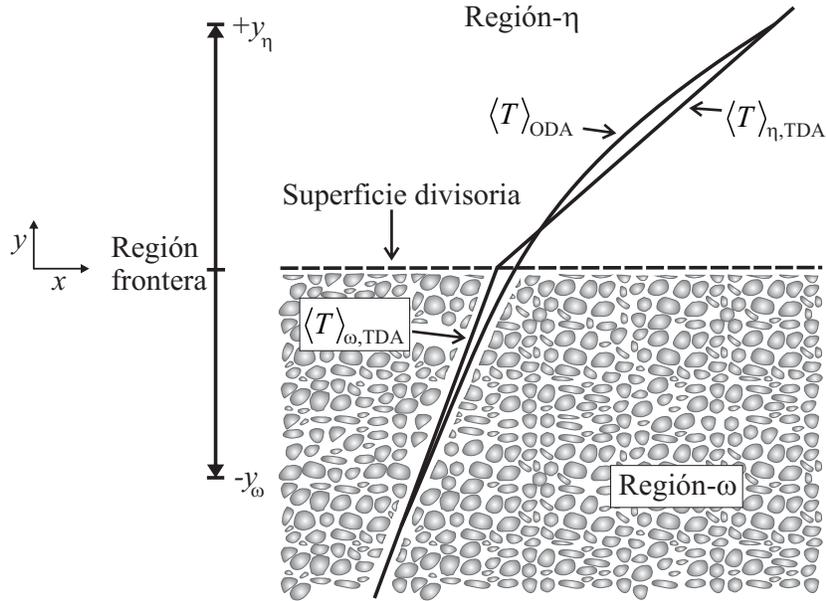


Figura 5.1. Perfiles de temperatura típicos bajo los modelos de uno y dos dominios.

importantes. Cabe agregar que la diferencia en los perfiles de temperatura toma lugar no solo en la inter-región, sino que además puede extenderse sobre una zona más grande incluyendo porciones del medio poroso homogéneo y del fluido libre. Ésta zona de influencia es denominada *región frontera*.

En este punto, es oportuno señalar las diferencias más importantes entre el concepto de *inter-región*, el cual se puede definir como la:

Porción del sistema donde ocurren los cambios espaciales de las propiedades de transporte involucradas en las ecuaciones efectivas (permeabilidad, porosidad, conductividad térmica efectiva, etc.). Generalmente, esta porción es de tamaño similar al de la muestra promediada utilizada en el proceso de escalamiento.

y el concepto de *región frontera*, el cual se puede definir como la:

Porción del sistema donde ocurren diferencias significativas entre el campo de solución de los modelos de uno y dos dominios. Se espera que el tamaño de esta zona sea mayor que el de la inter-región, pero a su vez menor que el tamaño completo del sistema.

Bajo este contexto, resulta útil listar las relaciones entre las distintas longitudes características introducidas a lo largo de este documento de la siguiente forma,

$$\underbrace{\ell_\beta, \ell_\sigma}_{\text{asociadas con las fases-}\beta \text{ y } -\sigma} \ll \underbrace{r_0}_{\text{asociada con la inter-región y el proceso de escalamiento}} < \underbrace{y_\omega, y_\eta}_{\text{asociadas con la región frontera}} \ll \underbrace{L}_{\text{asociada con el sistema entero}} \quad (5.6)$$

Con base en los perfiles típicos de temperatura mostrados en la Figura 5.1, es razonable definir una nueva variable de desviación macroscópica,

$$\widehat{T}_\omega = \langle T \rangle - \langle T \rangle_\omega, \text{ en la región-}\omega \quad (5.7a)$$

$$\widehat{T}_\eta = \langle T \rangle - \langle T \rangle_\eta, \text{ en la región-}\eta \quad (5.7b)$$

Aquí, para evitar confusiones, se recalca que dicha definición se hace sobre la diferencia entre los modelos de uno y dos dominios, *ambos bajo la suposición de equilibrio local térmico* inclusive en la inter-región. Esto es diferente a la definición de las desviaciones del equilibrio local térmico dadas en las Ecuaciones (2.22), donde las desviaciones son establecidas entre las temperaturas promedio del fluido y del solido, *ambas bajo el modelo de un solo dominio*. Para enfatizar dicha diferencia, en las Ecuaciones (5.7) se utiliza un símbolo circunflejo más grande que el utilizado en las Ecuaciones (2.22). En la Figura 5.2 se presenta de manera general la dependencia espacial de las desviaciones macroscópicas, donde se señala que pueden existir valores negativos y positivos a través de la región frontera. Cabe agregar que el modelo TDA usado en las definiciones (5.7), corresponde al modelo con condiciones de salto, del cual, en este punto no se conoce su condición frontera que aplica en la superficie divisoria, ni tampoco la posición de dicha superficie.

De las Ecuaciones (5.7) se observa que para obtener la ecuación gobernante para las desviaciones espaciales, es necesario restar las ecuaciones del modelo TDA a la ecuación ODA. Con este fin, se reescribe la Ecuación (5.3) en la siguiente forma,

$$0 = \frac{d^2 \langle T \rangle}{dy^2} + \frac{1}{(K_{eff}^*)_{yy}(y)} \frac{d(K_{eff}^*)_{yy}(y)}{dy} \frac{d \langle T \rangle}{dy} \quad (5.8)$$

y restándole la Ecuación (5.4) se tiene,

$$\frac{d}{dy} \left[(K_{eff}^*)_{yy}(y) \frac{d\widehat{T}_\omega}{dy} \right] = - \underbrace{\frac{d(K_{eff}^*)_{yy}(y)}{dy} \frac{d \langle T \rangle_\omega}{dy}}_{\text{fuente}}, \text{ en la región-}\omega \quad (5.9)$$

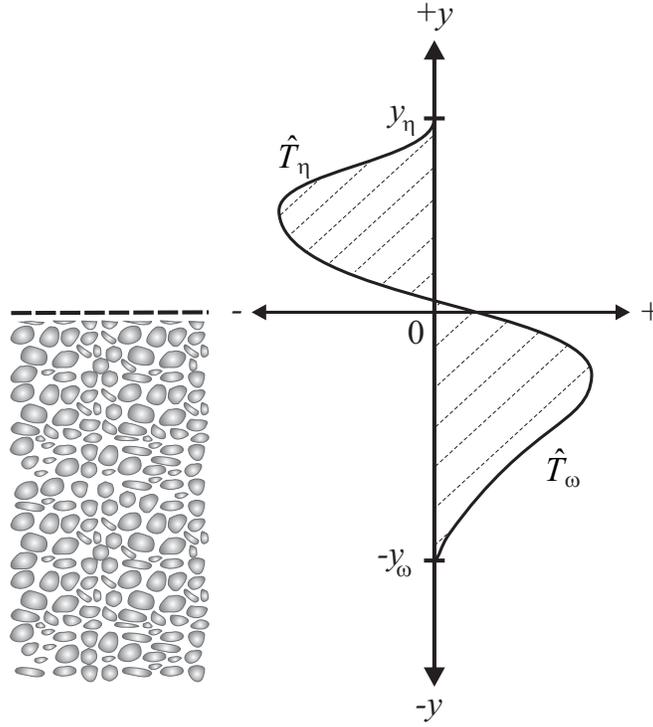


Figura 5.2. Forma típica de la distribución de las desviaciones macroscópicas de la temperatura en la región frontera.

La ecuación análoga para la región- η es,

$$\frac{d}{dy} \left[(K_{eff}^*)_{yy}(y) \frac{d\hat{T}_\eta}{dy} \right] = - \underbrace{\frac{d(K_{eff}^*)_{yy}(y)}{dy}}_{\text{fuente}} \frac{d\langle T \rangle_\eta}{dy}, \text{ en la región-}\eta \quad (5.10)$$

En estas ecuaciones se señalan las fuentes que originan el campo de las desviaciones macroscópicas. Con el objetivo de proponer la solución formal de las desviaciones como una superposición de las fuentes, es necesario *localizar* previamente las fuentes de manera análoga al desarrollo de la cerradura en la microescala para la predicción de los coeficientes efectivos. Para ello, se utilizan las siguientes expansiones en series de Taylor alrededor de la posición de la superficie divisoria, $y = y_0$, la cual en este punto permanece desconocida,

$$\left. \frac{d\langle T \rangle_\omega}{dy} \right|_y = \left. \frac{d\langle T \rangle_\omega}{dy} \right|_{y_0} + \underbrace{(y - y_0) \left. \frac{d^2\langle T \rangle_\omega}{dy^2} \right|_{y_0}}_{\mathcal{O}\left(\frac{y\omega}{L} \left. \frac{d\langle T \rangle_\omega}{dy} \right|_{y_0}\right)} + \frac{1}{2} \underbrace{(y - y_0)^2 \left. \frac{d^3\langle T \rangle_\omega}{dy^3} \right|_{y_0}}_{\mathcal{O}\left(\frac{y\omega^2}{L^2} \left. \frac{d\langle T \rangle_\omega}{dy} \right|_{y_0}\right)} + \dots \quad (5.11a)$$

$$\frac{d\langle T \rangle_\eta}{dy} \Big|_y = \frac{d\langle T \rangle_\eta}{dy} \Big|_{y_0} + \underbrace{(y - y_0) \frac{d^2 \langle T \rangle_\eta}{dy^2} \Big|_{y_0}}_{\mathcal{O}\left(\frac{y_\eta}{L} \frac{d\langle T \rangle_\eta}{dy} \Big|_{y_0}\right)} + \underbrace{\frac{1}{2}(y - y_0)^2 \frac{d^3 \langle T \rangle_\eta}{dy^3} \Big|_{y_0}}_{\mathcal{O}\left(\frac{y_\eta^2}{L^2} \frac{d\langle T \rangle_\eta}{dy} \Big|_{y_0}\right)} + \dots \quad (5.11b)$$

Aquí se ha expresado en algunos términos el estimado de orden magnitud. De esta manera, con base en un análisis de orden de magnitud se concluye que si se satisfacen las siguientes restricciones de escala,

$$\frac{y_\omega}{L} \ll 1; \quad \frac{y_\eta}{L} \ll 1; \quad \frac{y_\omega^2}{L^2} \ll 1; \quad \frac{y_\eta^2}{L^2} \ll 1 \quad (5.12)$$

Entonces se pueden considerar las fuentes evaluadas en la superficie divisoria como constantes dentro de la región frontera. Esto es,

$$\frac{d\langle T \rangle_\omega}{dy} \Big|_y = \frac{d\langle T \rangle_\omega}{dy} \Big|_{y_0} \quad (5.13a)$$

$$\frac{d\langle T \rangle_\eta}{dy} \Big|_y = \frac{d\langle T \rangle_\eta}{dy} \Big|_{y_0} \quad (5.13b)$$

La condición frontera que acopla las ecuaciones diferenciales (5.9) y (5.10) en la superficie divisoria, surge de la idea de que el campo de la temperatura promedio y el flux de calor en el modelo ODA son continuos en la superficie divisoria,

$$\langle T \rangle_{y_0^-} = \langle T \rangle_{y_0^+} \quad (5.14a)$$

$$(K_{eff}^*)_{yy}(y_0^-) \frac{d\langle T \rangle}{dy} \Big|_{y_0^-} = (K_{eff}^*)_{yy}(y_0^+) \frac{d\langle T \rangle}{dy} \Big|_{y_0^+} \quad (5.14b)$$

ó escrito en la siguiente manera utilizando la descomposición de la temperatura promedio dada por las Ecuaciones (5.7),

$$\widehat{T}_\omega - \widehat{T}_\eta = \langle T \rangle_\eta \Big|_{y_0} - \langle T \rangle_\omega \Big|_{y_0} \quad (5.15a)$$

$$\frac{d\widehat{T}_\omega}{dy} - \frac{d\widehat{T}_\eta}{dy} = \frac{d\langle T \rangle_\eta}{dy} \Big|_{y_0} - \frac{d\langle T \rangle_\omega}{dy} \Big|_{y_0} \quad (5.15b)$$

Finalmente, para plantear completamente el problema de valor a la frontera para las desviaciones macroscópicas, se impone que dichas desviaciones tomen el valor de cero en las fronteras del dominio de solución. Esto es similar a afirmar que los campos de solución de los modelos ODA y TDA son iguales.

$$\langle T \rangle = \langle T \rangle_\omega, \quad \text{en } y = -y_\omega \quad (5.16a)$$

$$\langle T \rangle = \langle T \rangle_\eta, \quad \text{en } y = y_\eta \quad (5.16b)$$

A continuación se presenta el problema completo.

$$\widehat{T}_\omega = 0, \quad \text{en } y = -y_\omega \quad (5.17a)$$

$$\frac{d}{dy} \left[(K_{eff}^*)_{yy}(y) \frac{d\widehat{T}_\omega}{dy} \right] = - \underbrace{\frac{d(K_{eff}^*)_{yy}(y)}{dy} \frac{d\langle T \rangle_\omega}{dy}}_{\text{fuente}} \Big|_{y_0}, \quad \text{en } -y_\omega \leq y \leq y_0 \quad (5.17b)$$

$$\widehat{T}_\omega - \widehat{T}_\eta = \underbrace{\langle T \rangle_\eta \Big|_{y_0} - \langle T \rangle_\omega \Big|_{y_0}}_{\text{fuente}}, \quad \text{en } y = y_0 \quad (5.17c)$$

$$\frac{d\widehat{T}_\omega}{dy} - \frac{d\widehat{T}_\eta}{dy} = \underbrace{\frac{d\langle T \rangle_\eta}{dy} \Big|_{y_0}}_{\text{fuente}} - \underbrace{\frac{d\langle T \rangle_\omega}{dy} \Big|_{y_0}}_{\text{fuente}}, \quad \text{en } y = y_0 \quad (5.17d)$$

$$\frac{d}{dy} \left[(K_{eff}^*)_{yy}(y) \frac{d\widehat{T}_\eta}{dy} \right] = - \underbrace{\frac{d(K_{eff}^*)_{yy}(y)}{dy} \frac{d\langle T \rangle_\eta}{dy}}_{\text{fuente}} \Big|_{y_0}, \quad \text{en } y_0 \leq y \leq y_\eta \quad (5.17e)$$

$$\widehat{T}_\eta = 0, \quad \text{en } y = y_\eta \quad (5.17f)$$

5.2. Problemas de cerradura

Con base en las fuentes identificadas en las Ecuaciones (5.17), la solución formal de las desviaciones macroscópicas se puede escribir como,

$$\widehat{T}_\omega = b_{\omega\omega} \frac{d\langle T \rangle_\omega}{dy} \Big|_{y_0} + b_{\omega\eta} \frac{d\langle T \rangle_\eta}{dy} \Big|_{y_0} + s_\omega \left(\langle T \rangle_\eta \Big|_{y_0} - \langle T \rangle_\omega \Big|_{y_0} \right) \quad (5.18a)$$

$$\widehat{T}_\eta = b_{\eta\omega} \frac{d\langle T \rangle_\omega}{dy} \Big|_{y_0} + b_{\eta\eta} \frac{d\langle T \rangle_\eta}{dy} \Big|_{y_0} + s_\eta \left(\langle T \rangle_\eta \Big|_{y_0} - \langle T \rangle_\omega \Big|_{y_0} \right) \quad (5.18b)$$

donde $b_{\omega\omega}$, $b_{\omega\eta}$, $b_{\eta\omega}$, $b_{\eta\eta}$, s_ω y s_η son las variables de cerradura macroscópicas.

Sustituyendo la solución formal de las desviaciones macroscópicas en el problema del valor a la frontera planteado en las Ecuaciones (5.17), se tienen los siguientes problemas de cerradura macroscópicos:

Problema para $b_{\omega\omega}$ y $b_{\eta\omega}$, fuente $\frac{d\langle T \rangle_\omega}{dy} \Big|_{y_0}$:

$$b_{\omega\omega} = 0, \quad \text{en } y = -y_\omega \quad (5.19a)$$

$$\frac{d}{dy} \left[(K_{eff}^*)_{yy}(y) \frac{db_{\omega\omega}}{dy} \right] = -\frac{d(K_{eff}^*)_{yy}(y)}{dy}, \quad \text{en } -y_\omega \leq y \leq y_0 \quad (5.19b)$$

$$b_{\omega\omega} - b_{\eta\omega} = 0, \quad \text{en } y = y_0 \quad (5.19c)$$

$$\frac{db_{\omega\omega}}{dy} - \frac{db_{\eta\omega}}{dy} = -1, \quad \text{en } y = y_0 \quad (5.19d)$$

$$\frac{d}{dy} \left[(K_{eff}^*)_{yy}(y) \frac{db_{\eta\omega}}{dy} \right] = 0, \quad \text{en } y_0 \leq y \leq y_\eta \quad (5.19e)$$

$$b_{\eta\omega} = 0, \quad \text{en } y = y_\eta \quad (5.19f)$$

Problema para $b_{\omega\eta}$ y $b_{\eta\eta}$, fuente $\left. \frac{d\langle T \rangle_\eta}{dy} \right|_{y_0}$:

$$b_{\omega\eta} = 0, \quad \text{en } y = -y_\omega \quad (5.20a)$$

$$\frac{d}{dy} \left[(K_{eff}^*)_{yy}(y) \frac{db_{\omega\eta}}{dy} \right] = 0, \quad \text{en } -y_\omega \leq y \leq y_0 \quad (5.20b)$$

$$b_{\omega\eta} - b_{\eta\eta} = 0, \quad \text{en } y = y_0 \quad (5.20c)$$

$$\frac{db_{\omega\eta}}{dy} - \frac{db_{\eta\eta}}{dy} = 1, \quad \text{en } y = y_0 \quad (5.20d)$$

$$\frac{d}{dy} \left[(K_{eff}^*)_{yy}(y) \frac{db_{\eta\eta}}{dy} \right] = -\frac{d(K_{eff}^*)_{yy}(y)}{dy}, \quad \text{en } y_0 \leq y \leq y_\eta \quad (5.20e)$$

$$b_{\eta\eta} = 0, \quad \text{en } y = y_\eta \quad (5.20f)$$

Problema para s_ω y s_η , fuente $\left(\left. \langle T \rangle_\eta \right|_{y_0} - \left. \langle T \rangle_\omega \right|_{y_0} \right)$:

$$s_\omega = 0, \quad \text{en } y = -y_\omega \quad (5.21a)$$

$$\frac{d}{dy} \left[(K_{eff}^*)_{yy}(y) \frac{ds_\omega}{dy} \right] = 0, \quad \text{en } -y_\omega \leq y \leq y_0 \quad (5.21b)$$

$$s_\omega - s_\eta = 1, \quad \text{en } y = y_0 \quad (5.21c)$$

$$\frac{ds_\omega}{dy} - \frac{ds_\eta}{dy} = 0, \quad \text{en } y = y_0 \quad (5.21d)$$

$$\frac{d}{dy} \left[(K_{eff}^*)_{yy}(y) \frac{ds_\eta}{dy} \right] = 0, \quad \text{en } y_0 \leq y \leq y_\eta \quad (5.21e)$$

$$s_\eta = 0, \quad \text{en } y = y_\eta \quad (5.21f)$$

La solución de cada uno de los problemas de cerradura puede lograrse analíticamente conduciendo a,

$$b_{\omega\omega} = (y_0 + y_\omega) s_\omega - y - y_\omega \quad (5.22a)$$

$$b_{\eta\omega} = (y_0 + y_\omega) s_\eta \quad (5.22b)$$

$$b_{\omega\eta} = (y_\eta - y_0) s_\omega \quad (5.22c)$$

$$b_{\eta\eta} = (y_\eta - y_0) s_\eta - y + y_\eta \quad (5.22d)$$

$$s_\omega = \frac{\int_{-y_\omega}^y \frac{dy}{(K_{eff}^*)_{yy}(y)}}{y_\eta} \quad (5.22e)$$

$$s_\eta = -\frac{\int_y^{y_\eta} \frac{dy}{(K_{eff}^*)_{yy}(y)}}{\int_{-y_\omega}^{y_\eta} \frac{dy}{(K_{eff}^*)_{yy}(y)}} \quad (5.22f)$$

La solución explícita de las variables de cerradura s_ω y s_η dependen del tipo de evolución espacial que presente el coeficiente de conductividad térmica efectiva. Basándose en los resultados mostrados en la Figura 3.3, es aceptable suponer una dependencia lineal en la inter-región con valores constantes fuera de la misma, tal como se muestra en la Figura 5.3. Expresado matemáticamente es,

$$\frac{(K_{eff}^*)_{yy}(y)}{k_\beta} = \begin{cases} \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}, & \frac{y}{r_0} < -1 \\ \frac{1}{2} \left[1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \right] \left(\frac{y}{r_0} + 1 \right) + \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}, & -1 \leq \frac{y}{r_0} \leq +1 \\ 1, & \frac{y}{r_0} > +1 \end{cases} \quad (5.23)$$

Donde $(K_{eff,\omega}^*)_{yy}$ representa la conductividad térmica efectiva en el seno del medio poroso, la cual puede predecirse a partir de la solución del problema de cerradura correspondiente en celdas unitarias representativas. Para un arreglo periódico bidimensional de cilindros que no se tocan entre sí bajo condiciones difusivas (Ochoa-Tapia y col., 1994), la conductividad efectiva está dada por la Ecuación (3.4), mientras que para un arreglo tridimensional de esferas la expresión se da en la Ecuación (3.6).

Utilizando el tipo de dependencia lineal por partes, las soluciones explícitas para s_ω y s_η

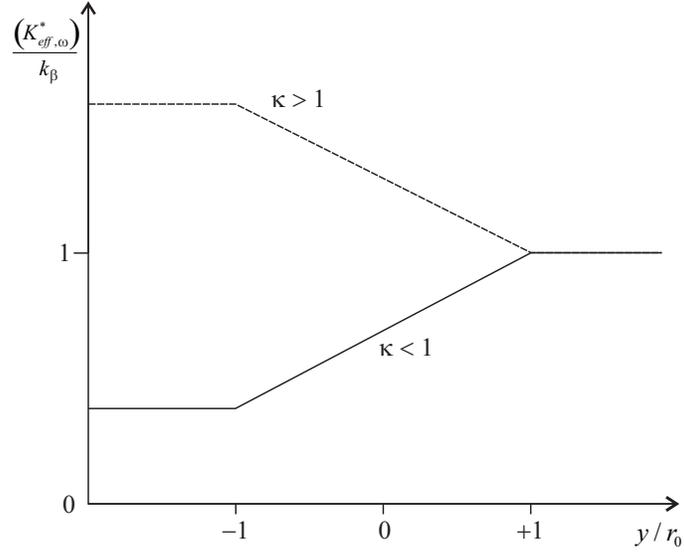


Figura 5.3. Variación lineal de la conductividad térmica efectiva en la inter-región.

son,

$$S_\omega = \begin{cases} \frac{\left(\frac{y}{r_0} + \frac{y\omega}{r_0}\right) \left[1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}\right]}{\left[\frac{y\omega}{r_0} - 1 + \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \left(\frac{y\eta}{r_0} - 1\right)\right] \left[1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}\right] + 2 \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \ln \left[\frac{1}{\frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}}\right]}, & \frac{y}{r_0} < -1 \\ \frac{\left(\frac{y\omega}{r_0} - 1\right) \left[1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}\right] + 2 \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \ln \left[\frac{1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}}{2 \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}} \left(\frac{y}{r_0} + 1\right) + 1\right]}{\left[\frac{y\omega}{r_0} - 1 + \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \left(\frac{y\eta}{r_0} - 1\right)\right] \left[1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}\right] + 2 \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \ln \left[\frac{1}{\frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}}\right]}, & -1 \leq \frac{y}{r_0} \leq +1 \\ \frac{\left[\frac{y\omega}{r_0} - 1 + \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \left(\frac{y}{r_0} - 1\right)\right] \left[1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}\right] + 2 \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \ln \left[\frac{1}{\frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}}\right]}{\left[\frac{y\omega}{r_0} - 1 + \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \left(\frac{y\eta}{r_0} - 1\right)\right] \left[1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}\right] + 2 \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \ln \left[\frac{1}{\frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}}\right]}, & \frac{y}{r_0} > +1 \end{cases}, \quad (5.24)$$

$$S_\eta = \left\{ \begin{array}{l} \frac{\left[\frac{y}{r_0} + 1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} (y_\eta - 1) \right] \left[1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \right] - 2 \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \ln \left[\frac{1}{\frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}} \right]}{\left[\frac{y_\omega}{r_0} - 1 + \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} (y_\eta - 1) \right] \left[1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \right] + 2 \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \ln \left[\frac{1}{\frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}} \right]}, \\ \frac{\frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \left(1 - \frac{y_\eta}{r_0} \right) \left[1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \right] - 2 \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \ln \left[\frac{1}{1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \left(\frac{y}{r_0} + 1 \right) + \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}} \right]}}{\left[\frac{y_\omega}{r_0} - 1 + \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} (y_\eta - 1) \right] \left[1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \right] + 2 \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \ln \left[\frac{1}{\frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}} \right]}, \\ \frac{\frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \left[1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \right] \left(\frac{y}{r_0} - \frac{y_\eta}{r_0} \right)}{\left[\frac{y_\omega}{r_0} - 1 + \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} (y_\eta - 1) \right] \left[1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \right] + 2 \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \ln \left[\frac{1}{\frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}} \right]}, \\ \frac{\frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \left[1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \right] \left(\frac{y}{r_0} - \frac{y_\eta}{r_0} \right)}{\left[\frac{y_\omega}{r_0} - 1 + \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} (y_\eta - 1) \right] \left[1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \right] + 2 \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \ln \left[\frac{1}{\frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}} \right]}, \end{array} \right. \quad (5.25)$$

Con fines ilustrativos, en la Figura 5.4 se presentan ejemplos de las variables de cerradura macroscópicas para las condiciones allí descritas, y utilizando la Ecuación (3.4) para el cálculo de $(K_{eff,\omega}^*)_{yy}$.

5.3. Condición de salto

La idea fundamental para la derivación de la condición de salto radica en que, *en promedio, el campo de solución del modelo de dos dominios debe satisfacer al modelo de un solo dominio*. Esto expresado matemáticamente es,

$$\frac{1}{y_0 + y_\omega} \int_{y=-y_\omega}^{y=y_0} (\langle T \rangle - \langle T \rangle_\omega) dy + \frac{1}{y_\eta - y_0} \int_{y=y_0}^{y=y_\eta} (\langle T \rangle - \langle T \rangle_\eta) dy = 0 \quad (5.26)$$

De esta manera, la construcción de la condición de salto se basa en la minimización del área sombreada de la Figura 5.2. Ahora, de la definición de la desviación espacial macroscópica

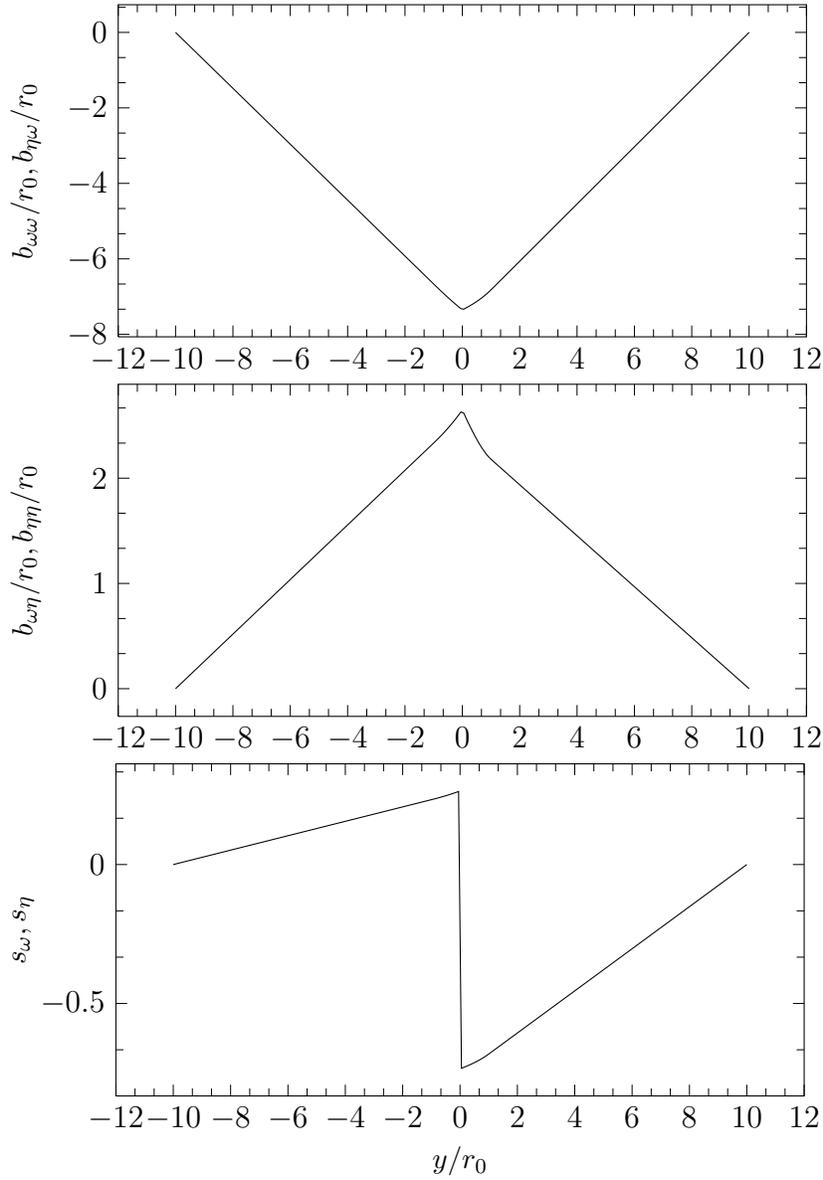


Figura 5.4. Ejemplos de los campos de las variables de cerradura macroscópicas. $y_0 = 0$, $\kappa = 100$, $y_{\omega} = y_{\eta} = 10r_0$ y $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$.

se tiene que,

$$\frac{1}{y_0 + y_{\omega}} \int_{y=-y_{\omega}}^{y=y_0} \hat{T}_{\omega} dy + \frac{1}{y_{\eta} - y_0} \int_{y=y_0}^{y=y_{\eta}} \hat{T}_{\eta} dy = 0 \quad (5.27)$$

En esencia, este es un procedimiento similar al presentado por Ochoa-Tapia y Whitaker (1998) en la derivación de la condición de salto para el flujo de calor. La idea principal

en su desarrollo teórico consistió en la derivación de la ecuación de transporte de calor superficial asociada con la superficie divisoria, llevando a cabo una metodología equivalente a la utilizada en balances en fases interfases (Gibbs, 1948; Slattery, 1967b). Sin embargo, la diferencia substancial del procedimiento aquí presentado, radica en que la expresión (5.27) es aplicada a la diferencia de los campos de temperatura y no a las ecuaciones gobernantes para el transporte de energía.

Para obtener la condición de salto del campo de la temperatura promedio, se sustituyen las expresiones constitutivas de las desviaciones espaciales, Ecuaciones (5.18), en la Ecuación (5.27), lo cual conduce a

$$\langle T \rangle_\omega|_{y_0} = \langle T \rangle_\eta|_{y_0} + g_\omega \left. \frac{d \langle T \rangle_\omega}{dy} \right|_{y_0} + g_\eta \left. \frac{d \langle T \rangle_\eta}{dy} \right|_{y_0} \quad (5.28)$$

Esta expresión representa la condición de salto para el campo, en la cual se han introducido los llamados *coeficientes de salto* g_ω y g_η definidos como,

$$g_\omega = \frac{\frac{1}{y_0+y_\omega} \int_{y=-y_\omega}^{y=y_0} b_{\omega\omega} dy + \frac{1}{y_\eta-y_0} \int_{y=y_0}^{y=y_\eta} b_{\eta\omega} dy}{\frac{1}{y_0+y_\omega} \int_{y=-y_\omega}^{y=y_0} s_\omega dy + \frac{1}{y_\eta-y_0} \int_{y=y_0}^{y=y_\eta} s_\eta dy} \quad (5.29a)$$

$$g_\eta = \frac{\frac{1}{y_0+y_\omega} \int_{y=-y_\omega}^{y=y_0} b_{\omega\eta} dy + \frac{1}{y_\eta-y_0} \int_{y=y_0}^{y=y_\eta} b_{\eta\eta} dy}{\frac{1}{y_0+y_\omega} \int_{y=-y_\omega}^{y=y_0} s_\omega dy + \frac{1}{y_\eta-y_0} \int_{y=y_0}^{y=y_\eta} s_\eta dy} \quad (5.29b)$$

Ahora, dado que el problema de valor a la frontera que determina las desviaciones espaciales macroscópicas, es independiente del criterio utilizado para desarrollar la condición de salto de la temperatura, es posible desarrollar la condición de salto faltante a partir de las ecuaciones gobernantes para \widehat{T}_ω y \widehat{T}_η . De este modo, integrando la Ecuación (5.17b) desde $y = -y_\omega$ hasta $y = y_0$, y sumando el resultado a la integral de la Ecuación (5.17e) desde $y = y_0$ hasta $y = y_\eta$ se tiene,

$$\left[(K_{eff}^*)_{yy}(y) \frac{d\widehat{T}_\omega}{dy} \right] \Big|_{y=y_0} - \left[(K_{eff}^*)_{yy}(y) \frac{d\widehat{T}_\omega}{dy} \right] \Big|_{y=-y_\omega} + \left[(K_{eff}^*)_{yy}(y) \frac{d\widehat{T}_\eta}{dy} \right] \Big|_{y=y_\eta} =$$

$$\left[(K_{eff}^*)_{yy}(y) \frac{d\widehat{T}_\eta}{dy} \right] \Big|_{y=y_0} - (K_{eff}^*)_{yy}(y_0) \left. \frac{d \langle T \rangle_\omega}{dy} \right|_{y_0} + (K_{eff}^*)_{yy}(-y_\omega) \left. \frac{d \langle T \rangle_\omega}{dy} \right|_{y_0}$$

$$- (K_{eff}^*)_{yy}(y_\eta) \left. \frac{d \langle T \rangle_\eta}{dy} \right|_{y_0} + (K_{eff}^*)_{yy}(y_0) \left. \frac{d \langle T \rangle_\eta}{dy} \right|_{y_0} \quad (5.30)$$

Pero, en las fronteras del dominio de solución el flux del calor en el modelo ODA es igual que en el modelo TDA, es decir,

$$(K_{eff}^*)_{yy}(-y_\omega) \frac{d \langle T \rangle}{dy} = (K_{eff}^*)_{yy}(-y_\omega) \frac{d \langle T \rangle_\omega}{dy}, \quad \text{en } y = -y_\omega \quad (5.31a)$$

$$(K_{eff}^*)_{yy}(y_\eta) \frac{d \langle T \rangle}{dy} = (K_{eff}^*)_{yy}(y_\eta) \frac{d \langle T \rangle_\eta}{dy}, \quad \text{en } y = y_\eta \quad (5.31b)$$

lo cual, utilizando la descomposición espacial macroscópica de la temperatura lleva a que,

$$(K_{eff}^*)_{yy}(-y_\omega) \frac{d \widehat{T}_\omega}{dy} = 0, \quad \text{en } y = -y_\omega \quad (5.32a)$$

$$(K_{eff}^*)_{yy}(y_\eta) \frac{d \widehat{T}_\eta}{dy} = 0, \quad \text{en } y = y_\eta \quad (5.32b)$$

Utilizando estas expresiones y las condición de frontera de la Ecuación (5.17d), la Ecuación (5.30) se simplifica a,

$$(K_{eff}^*)_{yy}(-y_\omega) \left. \frac{d \langle T \rangle_\omega}{dy} \right|_{y_0} = (K_{eff}^*)_{yy}(y_\eta) \left. \frac{d \langle T \rangle_\eta}{dy} \right|_{y_0} \quad (5.33)$$

o escrito en la siguiente manera,

$$(K_{eff,\omega}^*)_{yy} \left. \frac{d \langle T \rangle_\omega}{dy} \right|_{y_0} = k_\beta \left. \frac{d \langle T \rangle_\eta}{dy} \right|_{y_0} \quad (5.34)$$

con lo cual se recupera la condición de continuidad de flux de energía.

5.4. Solución analítica de los modelos macroscópicos

El modelo de dos dominios con la condición de salto puede fácilmente resolverse de manera analítica. Imponiendo las condiciones de frontera tipo Dirichlet en las fronteras del dominio

$$\langle T \rangle_\omega = \langle T \rangle_\omega|_{-L_\omega}, \quad \text{en } y = -L_\omega \quad (5.35a)$$

$$\langle T \rangle_\eta = \langle T \rangle_\eta|_{L_\eta}, \quad \text{en } y = L_\eta \quad (5.35b)$$

se tiene la solución,

$$\langle T \rangle_\omega = \frac{\langle T \rangle_\eta \Big|_{L_\eta} - \langle T \rangle_\omega \Big|_{-L_\omega}}{y_0 + L_\omega - g_\omega + \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} (L_\eta - y_0 - g_\eta)} (y + L_\omega) + \langle T \rangle_\omega \Big|_{-L_\omega}, \quad -L_\omega \leq y \leq y_0 \quad (5.36a)$$

$$\langle T \rangle_\eta = \frac{\langle T \rangle_\eta \Big|_{L_\eta} - \langle T \rangle_\omega \Big|_{-L_\omega}}{\frac{k_\beta}{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}} (y_0 + L_\omega - g_\omega) + L_\eta - y_0 - g_\eta} (y - L_\eta) + \langle T \rangle_\eta \Big|_{L_\eta}, \quad y_0 \leq y \leq L_\eta \quad (5.36b)$$

A partir de este resultado es sencillo recuperar la solución analítica cuando se descarta la contribución de los coeficientes de salto, es decir, recuperar el modelo de dos dominios con condiciones de continuidad. De esta manera, haciendo $g_\omega, g_\eta = 0$ y localizando la superficie divisoria en $y_0 = 0$ se tiene,

$$\langle T \rangle_\omega = \frac{\langle T \rangle_\eta \Big|_{L_\eta} - \langle T \rangle_\omega \Big|_{-L_\omega}}{L_\omega + \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} L_\eta} (y + L_\omega) + \langle T \rangle_\omega \Big|_{-L_\omega}, \quad -L_\omega \leq y \leq 0 \quad (5.37a)$$

$$\langle T \rangle_\eta = \frac{\langle T \rangle_\eta \Big|_{L_\eta} - \langle T \rangle_\omega \Big|_{-L_\omega}}{\frac{k_\beta}{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}} L_\omega + L_\eta} (y - L_\eta) + \langle T \rangle_\eta \Big|_{L_\eta}, \quad 0 \leq y \leq L_\eta \quad (5.37b)$$

Dado que el problema bajo estudio es relativamente simple y los perfiles de temperatura prácticamente son líneas rectas, es posible redefinir la posición de la superficie divisoria de manera que se traslapen las soluciones de las Ecuaciones (5.36). Con esto se recupera la condición de continuidad de temperatura,

$$\langle T \rangle_\omega = \langle T \rangle_\eta, \quad \text{en } y = y'_0 \quad (5.38)$$

La nueva posición de la superficie divisoria puede determinarse igualando la Ecuación (5.36a) con la (5.36b), y despejar la posición y'_0 . Haciendo esto se tiene,

$$y'_0 = \frac{y_0 - g_\omega - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} (y_0 + g_\eta)}{1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}} \quad (5.39)$$

Debe señalarse que en $y = y'_0$ se tienen condiciones de continuidad tanto para el flux de calor como en la temperatura promedio; mientras que, en la posición original de la superficie

divisoria utilizada para calcular los coeficientes de salto, $y = y_0$, se tiene una discontinuidad en el campo.

Finalmente, para fines de comparación es útil presentar la solución analítica del modelo ODA,

$$\langle T \rangle = \frac{\int_{-L_\omega}^y \frac{dy}{(K_{eff}^*)_{yy}(y)}}{L_\eta \int_{-L_\omega}^y \frac{dy}{(K_{eff}^*)_{yy}(y)}} \left(\langle T \rangle|_{L_\eta} - \langle T \rangle|_{-L_\omega} \right) + \langle T \rangle|_{-L_\omega} \quad (5.40)$$

en la cual, la relación de las integrales es similar a la solución analítica para s_ω , Ecuación (5.22e), pero reemplazando y_ω por L_ω y y_η por L_η .

5.5. Resultados y discusión

En este punto aún faltan por determinar las longitudes desconocidas y_ω y y_η , sin embargo, de diversos cálculos llevados a cabo se observó que los coeficientes de salto tienden asintóticamente hacia un valor fijo (cuando se normalizan con $y_\omega + y_\eta$) a medida que y_ω y y_η se incrementan. En la Figura 5.5 se presenta un ejemplo de los coeficientes de salto en función del tamaño total de la región frontera, $y_\eta + y_\omega$, el cual se encuentra normalizado con el radio del volumen promediante r_0 . Eventualmente se alcanza un valor constante aproximadamente cuando $y_\eta + y_\omega \geq 150r_0$. Esta situación se observa para diferentes valores de la porosidad y conductividades térmicas del sistema.

En la Figura 5.6 se presenta la dependencia del coeficiente de salto g_ω en función de la porosidad y de la relación de conductividades térmicas. Eventualmente, el coeficiente tiende al valor de cero cuando $\varepsilon_{\beta,\omega} \rightarrow 0$, y presenta un valor máximo cuando $\varepsilon_{\beta,\omega} \rightarrow 1$. Además, se observa que a medida que $\kappa \rightarrow 1$ el coeficiente de salto tiende a cero con lo cual se recupera la continuidad de la temperatura, y por lo tanto, el sistema se comporta como si solo hubiera fluido. Debe señalarse que estos resultados son válidos cuando el contacto partícula-partícula no es importante en el transporte de calor [aproximadamente para $\kappa < 100$ según comparaciones llevadas a cabo por Nozad y col. (1985a)], y se esperan resultados diferentes cuando el transporte de calor por contacto a través de la matriz sólida sea significativo.

Por otra parte, la forma de la microestructura influye de manera importante en la predicción de los coeficientes de salto tal como se muestra en la Figura 5.7; en ella se comparan los valores de g_ω cuando se predice utilizando las Ecuaciones (3.4) y (3.6). Se

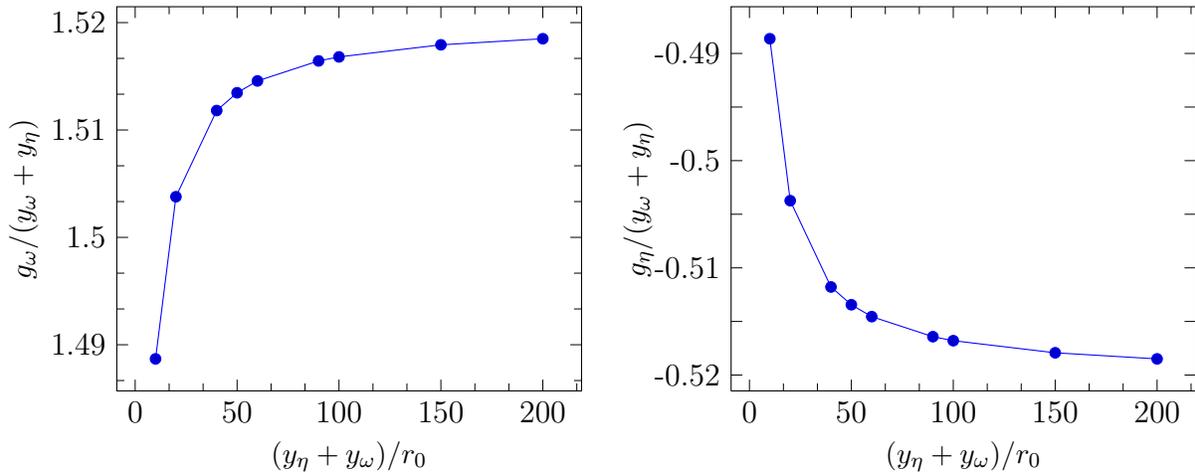


Figura 5.5. Dependencia de los coeficientes de salto con el tamaño de la región frontera. $y_0 = 0$, $\kappa = 100$ y $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$.

observa que las principales diferencias ocurren cuando la porosidad es cercana 1.

Los resultados mostrados en la Figura 5.6 se ajustaron satisfactoriamente a la siguiente expresión ($R^2 \geq 0.99999$),

$$\frac{g_\omega}{y_\omega + y_\eta} = a_0 + a_1 \exp\left(-\frac{\varepsilon_{\beta,\omega}}{a_2}\right) + a_3 \exp\left(-\frac{\varepsilon_{\beta,\omega}}{a_4}\right) \quad (5.41)$$

Los coeficientes de esta expresión se reportan en la Tabla 5.1 para g_ω . No se presentan los resultados para el coeficiente g_η debido a que, con base en las predicciones, se observó que

$$g_\eta(\kappa) = g_\omega(1/\kappa) \quad (5.42)$$

Ahora, considerando el modelo TDA con condiciones de continuidad de flux y de temperatura, en la Figura 5.8 se presenta el valor de la posición de la superficie divisoria, y'_0

Tabla 5.1. Coeficientes involucrados en la Ecuación (5.41) para g_ω .

κ	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4
0.01	0.09701	-1.68575E-6	-0.06351	-0.11854	-0.30376
0.1	0.01450	-1.99347E-6	-0.06346	-0.14108	-0.30305
10	0.98547	1.99335E-6	-0.06346	0.14108	-0.30305
100	0.90295	1.68586E-6	-0.06351	0.11855	-0.30376

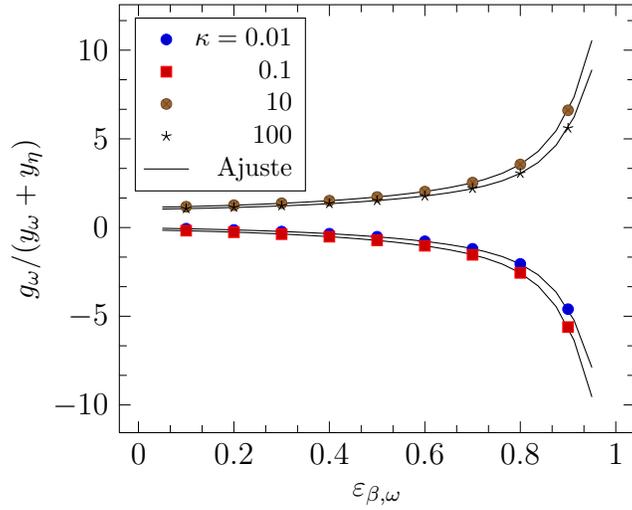


Figura 5.6. Dependencia de g_ω con la porosidad y la relación de conductividades térmicas. Aquí se utilizó la Ecuación (3.4) para predecir la conductividad efectiva en el medio poroso.

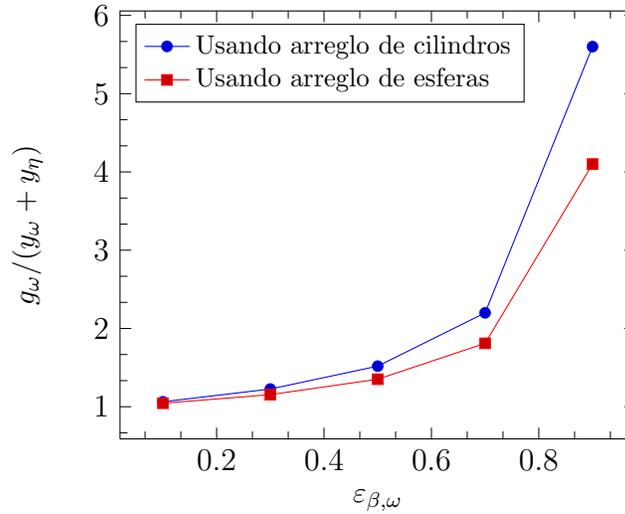


Figura 5.7. Valores de g_ω utilizando un arreglo periódico de cilindros (Ecuación (3.4)) y de esferas (Ecuación (3.6)) para predecir la conductividad térmica efectiva en el seno del medio poroso. Se tomó $y_0 = 0$ y $\kappa = 100$.

como función de la porosidad y de la relación de conductividades térmicas. Nótese que todos los valores están dentro de la inter-región, es decir, $y'_0 \in [-r_0, +r_0]$, y además, las mayores diferencias con respecto a $y_0 = 0$ aumentan cuando la porosidad disminuye y cuando $\kappa \ll 1$ ó $\gg 1$.

Con el fin de evaluar la precisión en las predicciones del campo de temperatura con los

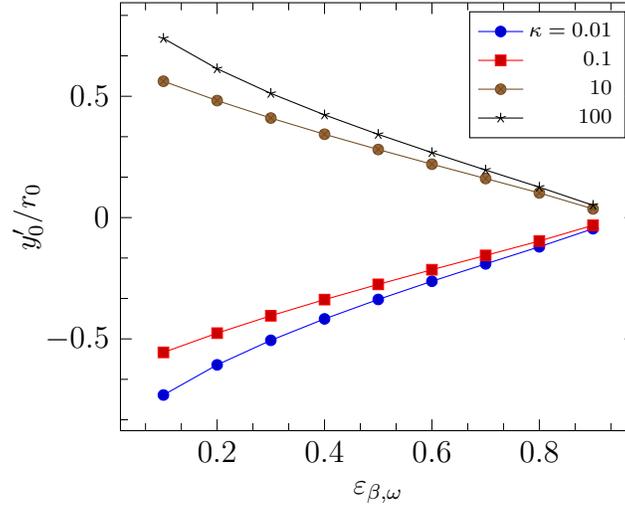


Figura 5.8. Valor de y'_0 en función de la porosidad y de las conductividades térmicas.

modelos desarrollados, se resolvieron los modelos ODA y TDA con condiciones de continuidad situando la superficie divisoria en $y = 0$ y en $y = y'_0$. Para ello, se utilizó el dominio de solución $y/r_0 \in [-100, 100]$. En los extremos del dominio se utilizaron condiciones de frontera tipo Dirichlet, es decir, se impusieron temperaturas promedio conocidas. Para generalizar los resultados se introdujo la temperatura adimensional:

$$\Theta = \frac{\tau - \langle T \rangle|_{y/r_0=-100}}{\langle T \rangle|_{y/r_0=100} - \langle T \rangle|_{y/r_0=-100}}, \quad \tau = \langle T \rangle, \langle T \rangle_\omega, \langle T \rangle_\eta \quad (5.43)$$

Para describir de manera cuantitativa el mejoramiento en las predicciones de la temperatura con el modelo TDA con coeficientes de salto y colocando la posición de la superficie divisoria en y'_0 , con respecto al mismo modelo pero con condiciones de continuidad, se introduce el siguiente factor de mejora,

$$\% \text{ mejora} = 100 \frac{\text{error}_{\text{continuidad}} - \text{error}_{\text{salto}}}{\text{error}_{\text{continuidad}}} \quad (5.44)$$

Donde el error se define con respecto al modelo ODA de la siguiente manera,

$$\% \text{ error} = 100 \int_{y/r_0=-1}^{y/r_0=1} \text{abs} \left(\frac{\Theta_{\text{ODA}} - \Theta_{\lambda, \text{TDA}}}{\Theta_{\text{ODA}}} \right) d(y/r_0), \quad \lambda = \omega, \eta \quad (5.45)$$

Aquí el cálculo del error incluye solamente la inter-región.

En la Tabla 5.2 se muestran los porcentajes de mejora para varias condiciones en el transporte de calor. De manera general, las predicciones mejoran notablemente cuando $\kappa \ll 1$

$\phi \gg 1$ y cuando $\varepsilon_{\beta,\omega} \rightarrow 0$. Cabe señalar que, a medida que la porosidad se incrementa las ventajas de usar los coeficientes de salto disminuyen, pues, en este caso, el perfil de temperatura es una línea recta y eventualmente se recuperan condiciones de continuidad. Un caso similar ocurre con respecto al parámetro κ ; cuando $\kappa \rightarrow 1$ las propiedades térmicas son similares y todo el sistema se comporta como una sola fase, lo cual hace que el valor de los coeficientes de salto disminuyan. En resumen, los resultados de la Tabla 5.2 constatan la mejora en las predicciones de la temperatura con la introducción de las condiciones de salto desarrolladas, sobretodo cuando las propiedades efectivas entre el medio poroso y el fluido libre son significativamente diferentes.

Para finalizar esta Sección, en la Figura 5.9 se presentan dos ejemplos de los perfiles de temperatura que se obtienen al resolver el modelo de un solo dominio junto con los modelos de dos dominios para $\kappa = 0.01$ y 100 . Obsérvese que las mayores desviaciones de los modelos TDA con respecto al ODA ocurren en la vecindad de la superficie divisoria. En el resto del dominio los perfiles de temperatura son muy similares entre los tres modelos resueltos. No obstante, es de resaltar la tendencia del modelo con coeficientes de salto a predecir cercanamente la temperatura del modelo ODA en el dominio de solución.

Tabla 5.2. Porcentaje de mejora en las predicciones de la temperatura con el modelo TDA con condiciones de salto.

$\varepsilon_{\beta,\omega}$	$\kappa = 0.01$	$\kappa = 0.1$	$\kappa = 10$	$\kappa = 100$
0.1	84.66	69.86	69.57	84.43
0.2	74.55	61.97	61.71	74.26
0.3	65.01	54.11	53.90	64.72
0.4	55.59	46.16	46.05	55.37
0.5	46.08	38.08	38.09	45.97
0.6	36.37	29.80	29.94	36.39
0.7	26.36	21.33	21.61	26.57
0.8	16.16	12.75	13.16	16.51
0.9	5.75	3.91	4.40	6.22

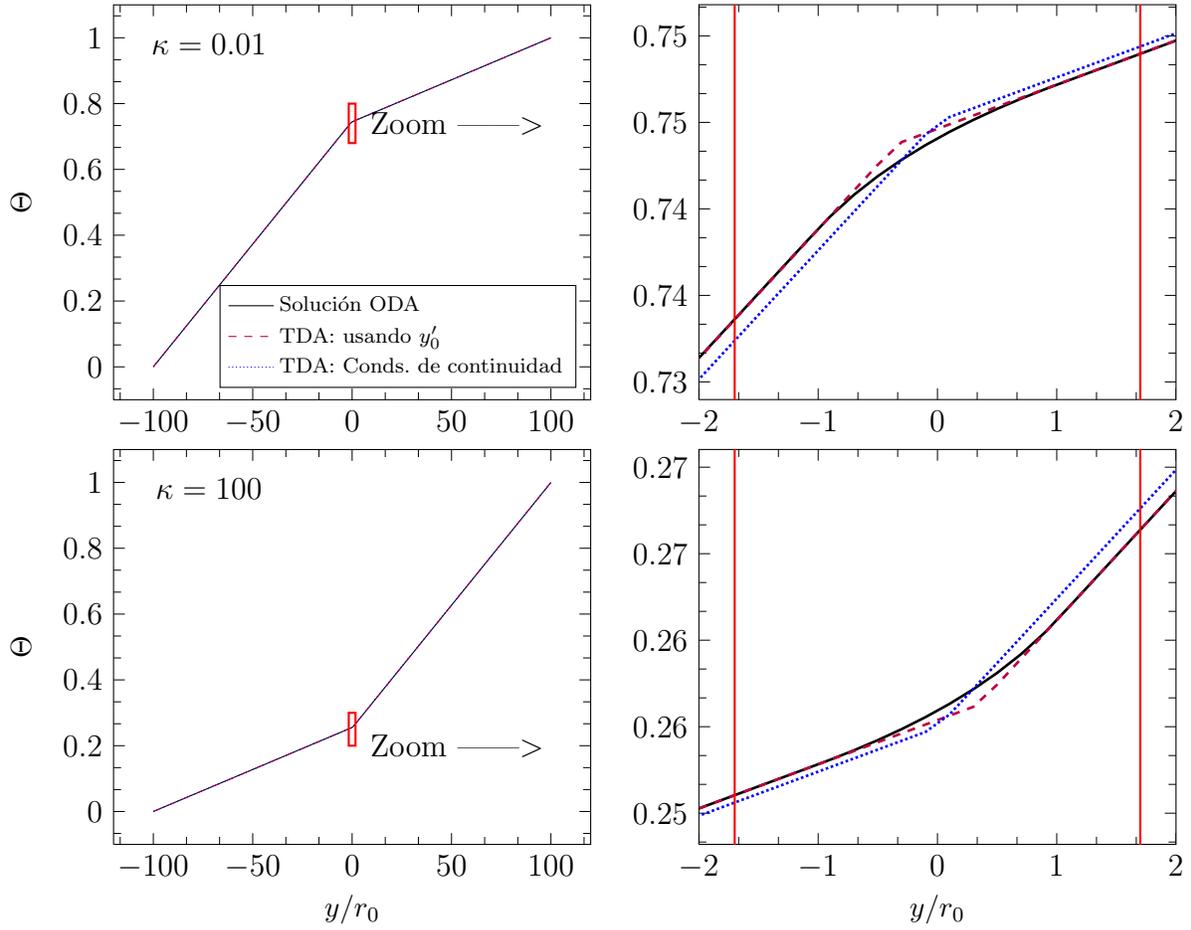


Figura 5.9. Perfiles de temperatura usando el modelo ODA y el TDA con condiciones de salto y de continuidad. Se utilizó $\kappa = 0.01, 100$ y $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$.

5.6. Posición óptima de la superficie divisoria

En los resultados presentados en la sección anterior se consideró que la superficie divisoria se localizaba en $y_0 = 0$. Con esto, el modelo de dos dominios presentó una correspondencia excelente con el perfil de temperatura del modelo de un solo dominio. Sin embargo, existe una condición que nunca se aplicó al problema de las desviaciones macroscópicas; ésta es que en los extremos de la región frontera el flux de calor es el mismo en los modelos ODA y TDA. En otras palabras, las desviaciones macroscópicas de la temperatura realmente deben satisfacer en los extremos de la región frontera las siguientes condiciones,

$$\hat{T}_\omega = 0, \quad (K_{eff,\omega}^*)_{yy} \frac{d\hat{T}_\omega}{dy} = 0, \quad \text{en } y = -y_\omega \quad (5.46a)$$

$$\widehat{T}_\eta = 0, \quad k_\beta \frac{d\widehat{T}_\eta}{dy} = 0, \quad \text{en } y = y_\eta \quad (5.46b)$$

con el fin de asumir que fuera de la región frontera los modelos de uno y dos dominios son idénticos.

En el problema de las desviaciones macroscópicas, Ecuaciones (5.17), se impusieron las condiciones tipo Dirichlet $\widehat{T}_\omega, \widehat{T}_\eta = 0$, por lo que, estrictamente, aún faltan por satisfacer las condiciones tipo Neumann. Este tipo de condiciones no se satisfacen en cualquier posición de la superficie divisoria. Existe una posición $y_0 = y_{0,\omega}$ para la cual se cumple que $(K_{eff,\omega}^*)_{yy} \frac{d\widehat{T}_\omega}{dy} = 0$; y existe otra posición $y_0 = y_{0,\eta}$ (no necesariamente $y_{0,\omega} = y_{0,\eta}$) para la cual se satisface que $k_\beta \frac{d\widehat{T}_\eta}{dy} = 0$.

La determinación de $y_{0,\omega}$ comienza sustituyendo la solución formal para \widehat{T}_ω , Ecuación (5.18a), en la condición tipo Neumann de (5.46a) conduciendo a

$$\left. \frac{db_{\omega\omega}}{dy} \right|_{-y_\omega} \left. \frac{d\langle T \rangle_\omega}{dy} \right|_{y_{0,\omega}} + \left. \frac{db_{\omega\eta}}{dy} \right|_{-y_\omega} \left. \frac{d\langle T \rangle_\eta}{dy} \right|_{y_{0,\omega}} + \left. \frac{ds_\omega}{dy} \right|_{-y_\omega} \left(\left. \langle T \rangle_\eta \right|_{y_{0,\omega}} - \left. \langle T \rangle_\omega \right|_{y_{0,\omega}} \right) = 0 \quad (5.47)$$

O bien, utilizando las soluciones explícitas para $b_{\omega\omega}$ y $b_{\omega\eta}$ y usando la condición de continuidad de flux de calor se tiene,

$$\left\{ \left[y_{0,\omega} + y_\omega + \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} (y_\eta - y_{0,\omega}) \right] \left. \frac{ds_\omega}{dy} \right|_{-y_\omega} - 1 \right\} \left. \frac{d\langle T \rangle_\omega}{dy} \right|_{y_{0,\omega}} + \left. \frac{ds_\omega}{dy} \right|_{-y_\omega} \left(\left. \langle T \rangle_\eta \right|_{y_{0,\omega}} - \left. \langle T \rangle_\omega \right|_{y_{0,\omega}} \right) = 0 \quad (5.48)$$

Ahora solo falta evaluar las cantidades:

$$\left. \frac{ds_\omega}{dy} \right|_{-y_\omega} = \frac{\frac{1}{r_0} \left[1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \right]}{\left[\frac{y_\omega}{r_0} - 1 + \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \left(\frac{y_\eta}{r_0} - 1 \right) \right] \left[1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \right] + 2 \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} \ln \left[\frac{1}{\frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta}} \right]} \quad (5.49)$$

$$\left. \frac{d\langle T \rangle_\omega}{dy} \right|_{y_{0,\omega}} = \frac{\left. \langle T \rangle_\eta \right|_{L_\eta} - \left. \langle T \rangle_\omega \right|_{-L_\omega}}{y_{0,\omega} + L_\omega - g_\omega + \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} (L_\eta - y_{0,\omega} - g_\eta)} \quad (5.50)$$

$$\left. \langle T \rangle_\omega \right|_{y_{0,\omega}} = \frac{\left. \langle T \rangle_\eta \right|_{L_\eta} - \left. \langle T \rangle_\omega \right|_{-L_\omega}}{y_{0,\omega} + L_\omega - g_\omega + \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_\beta} (L_\eta - y_{0,\omega} - g_\eta)} (y_{0,\omega} + L_\omega) + \left. \langle T \rangle_\omega \right|_{-L_\omega} \quad (5.51)$$

$$\langle T \rangle_{\eta} \Big|_{y_{0,\omega}} = \frac{\langle T \rangle_{\eta} \Big|_{L_{\eta}} - \langle T \rangle_{\omega} \Big|_{-L_{\omega}}}{\frac{k_{\beta}}{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}} (y_{0,\omega} + L_{\omega} - g_{\omega}) + L_{\eta} - y_{0,\omega} - g_{\eta}} (y_{0,\omega} - L_{\eta}) + \langle T \rangle_{\eta} \Big|_{L_{\eta}} \quad (5.52)$$

Por lo tanto, después de cierto esfuerzo algebraico la posición $y_{0,\omega}$ esta dada por,

$$\frac{y_{0,\omega}}{r_0} = \frac{\frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_{\beta}} \left\{ 2 \ln \left[\frac{1}{\frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_{\beta}}} \right] + \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_{\beta}} \left[1 - \frac{g_{\eta}(y_{0,\omega})}{r_0} \right] + \frac{g_{\eta}(y_{0,\omega})}{r_0} - \frac{g_{\omega}(y_{0,\omega})}{r_0} \right\}}{\left[1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_{\beta}} \right]^2} + \frac{\frac{g_{\omega}(y_{0,\omega})}{r_0} - 1}{\left[1 - \frac{(K_{eff,\omega}^*)_{yy}}{k_{\beta}} \right]^2} \quad (5.53)$$

Debe mencionarse que ésta es una expresión implícita, pues los coeficientes de salto dependen de la posición de la superficie divisoria que se elija para la solución de los problemas de cerradura macroscópicos. Por tanto, se debe implementar un procedimiento iterativo para encontrar el valor de $y_{0,\omega}$ que satisface a la Ecuación (5.53). Además, por brevedad no se escribe la expresión para la posición $y_{0,\eta}$ debido a que se encontró que,

$$y_{0,\eta} = y_{0,\omega} \quad (5.54)$$

lo cual es consecuencia directa de la continuidad de flux de calor en la superficie divisoria. No se presentan los resultados para los valores de $y_{0,\omega}$ debido a que se encontró que son muy cercanos a cero. Esta es la razón por la cual al utilizar $y_0 = 0$ en los resultados mostrados en la sección anterior, los perfiles de temperatura del modelo TDA con salto son muy similares al del modelo ODA.

6.1. Ecuaciones gobernantes

En este capítulo se aborda el problema de transporte convectivo y conductivo de calor en estado transitorio, además de que no restringe el análisis a alguna geometría en particular. En este caso la ecuación gobernante bajo el esquema de un solo dominio y con la suposición de equilibrio local térmico está dada por,

$$\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle \langle T \rangle) = \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle T \rangle], \text{ válida en todo el dominio} \quad (6.1)$$

Aquí el vector tipo convectivo \mathbf{u} se ha descartado debido a que, generalmente, es despreciable en comparación con el campo de velocidad.

Bajo el modelo de dos dominios se requieren de las ecuaciones efectivas para cada región homogénea. Así, para la región porosa la ecuación gobernante se escribe como,

$$\langle \rho \rangle C_P)_\omega \frac{\partial \langle T \rangle_\omega}{\partial t} + (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle \langle T \rangle_\omega) = \nabla \cdot (\mathbf{K}_{eff,\omega}^* \cdot \nabla \langle T \rangle_\omega), \text{ válida en la región-}\omega \quad (6.2)$$

mientras que la ecuación gobernante para la región fluida es

$$(\rho c_P)_\beta \frac{\partial \langle T \rangle_\eta}{\partial t} + (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle \langle T \rangle_\eta) = \nabla \cdot (k_\beta \nabla \langle T \rangle_\eta), \text{ válida en la región-}\eta \quad (6.3)$$

En estas ecuaciones se han utilizado los subíndices ω y η para indicar variables asociadas al medio poroso y a la región de fluido respectivamente. Cabe agregar que en la Ecuación (6.1)

los coeficientes efectivos dependen de la posición \mathbf{x} , mientras que en las Ecuaciones (6.2) y (6.3) son independientes de la posición.

6.2. Desviaciones macroscópicas de la temperatura

Como se mencionó en el Capítulo 5, la filosofía fundamental para el desarrollo de las condiciones de salto recae en que en promedio el modelo de dos dominios satisfaga al modelo de un dominio. Esto escrito matemáticamente de manera mas general es,

$$\frac{1}{\mathcal{V}_\omega} \int_{V_\omega} (\langle T \rangle - \langle T \rangle_\omega) dV + \frac{1}{\mathcal{V}_\eta} \int_{V_\eta} (\langle T \rangle - \langle T \rangle_\eta) dV = 0 \quad (6.4)$$

Aquí V_ω y V_η representan las zonas del medio poroso y del fluido libre, mientras que \mathcal{V}_ω y \mathcal{V}_η son sus volúmenes respectivamente. Se asume que en las regiones V_ω y V_η ocurren las diferencias más significativas entre los campos de solución de los modelos de uno y dos dominios. Dichas zonas no necesariamente son las mismas que el dominio completo del medio poroso Ω_ω y del fluido Ω_η donde se resuelven los modelos escalados, tal como se muestra en la Figura 6.1. Además, se señala que la superficie divisoria yace en la región formada por la unión de V_ω y V_η .

El principal inconveniente de la Ecuación (6.4) es que se requiere conocer simultáneamente los campos de solución de los modelos escalados. Así, el siguiente paso consiste en encontrar una expresión de la forma,

$$\langle T \rangle = f(\langle T \rangle_\omega, \langle T \rangle_\eta) \quad (6.5)$$

de manera similar como en los problemas de cerradura en la microescala. Para ello se proponen una función por partes de la siguiente manera,

$$\langle T \rangle = \widehat{T}_\omega + \langle T \rangle_\omega, \text{ en } V_\omega \quad (6.6a)$$

$$\langle T \rangle = \widehat{T}_\eta + \langle T \rangle_\eta, \text{ en } V_\eta \quad (6.6b)$$

Cabe agregar que \widehat{T}_ω y \widehat{T}_η representan desviaciones espaciales macroscópicas entre *dos variables de la macroescala*, lo cual contrasta con la definición de las desviaciones microscópicas \widetilde{T}_β [Ecuación (2.13a)] y \widetilde{T}_σ las cuales enlazan los campos de *una variable en la macroescala con una en la microescala*.

El siguiente paso consiste en encontrar la ecuación diferencial gobernante para las desviaciones macroscópicas. Atendiendo a las definiciones (6.6), se resta la Ecuación (6.2) a

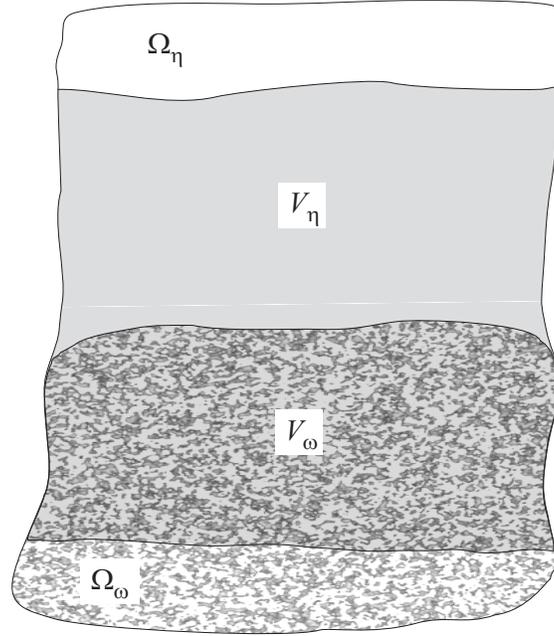


Figura 6.1. Dominios de solución en un sistema medio poroso-fluido.

la (6.1) para obtener después de cierto esfuerzo algebraico la ecuación diferencial para \widehat{T}_ω ,

$$\begin{aligned} \langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) \frac{\partial \widehat{T}_\omega}{\partial t} + (\rho C_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle \widehat{T}_\omega) - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla \widehat{T}_\omega] = \mathbf{F}_\omega(\mathbf{x}) : \nabla \nabla \langle T \rangle_\omega |_{\mathbf{x}_0} \\ + \mathbf{f}_\omega(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle T \rangle_\omega |_{\mathbf{x}_0} + f_\omega(\mathbf{x}) \langle T \rangle_\omega |_{\mathbf{x}_0}, \text{ en } V_\omega \end{aligned} \quad (6.7)$$

Donde,

$$\mathbf{F}_\omega(\mathbf{x}) = \mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) - \frac{\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x})}{(\langle \rho \rangle C_P)_\omega} \mathbf{K}_{eff,\omega}^* \quad (6.8a)$$

$$\mathbf{f}_\omega(\mathbf{x}) = \nabla \cdot \mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) + \frac{\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) - (\langle \rho \rangle C_P)_\omega}{(\langle \rho \rangle C_P)_\omega} (\rho C_P)_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \quad (6.8b)$$

$$f_\omega(\mathbf{x}) = \frac{\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) - (\langle \rho \rangle C_P)_\omega}{(\langle \rho \rangle C_P)_\omega} (\rho C_P)_\beta \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \quad (6.8c)$$

Mientras que la ecuación correspondiente para \widehat{T}_η es,

$$\begin{aligned} \langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) \frac{\partial \widehat{T}_\eta}{\partial t} + (\rho C_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle \widehat{T}_\eta) - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla \widehat{T}_\eta] = \mathbf{F}_\eta(\mathbf{x}) : \nabla \nabla \langle T \rangle_\eta |_{\mathbf{x}_0} \\ + \mathbf{f}_\eta(\mathbf{x}) \cdot \nabla \langle T \rangle_\eta |_{\mathbf{x}_0} + f_\eta(\mathbf{x}) \langle T \rangle_\eta |_{\mathbf{x}_0}, \text{ en } V_\eta \end{aligned} \quad (6.9)$$

Con,

$$\mathbf{F}_\eta(\mathbf{x}) = \mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) - \frac{\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x})}{(\rho c_P)_\beta} k_\beta \mathbf{I} \quad (6.10a)$$

$$\mathbf{f}_\eta(\mathbf{x}) = \nabla \cdot \mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) + \left[\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) - (\rho c_P)_\beta \right] \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \quad (6.10b)$$

$$f_\eta(\mathbf{x}) = \left[\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) - (\rho c_P)_\beta \right] \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \quad (6.10c)$$

En las Ecuaciones (6.7) y (6.9) se han considerado a las cantidades que involucran a las temperaturas y gradientes del modelo de dos dominios, como valores constantes dentro de los dominios de solución V_ω y V_η . Tales valores han sido evaluados en la posición de la superficie divisoria \mathbf{x}_0 . Además, es necesario encontrar las restricciones de escala bajo las cuales las Ecuaciones (6.7) y (6.9) son válidas en V_ω y V_η respectivamente. Para ello, se hacen las siguientes expansiones en series de Taylor alrededor de la superficie divisoria,

$$\begin{aligned} \langle T \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} &= \underbrace{\langle T \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}_0}}_{\mathcal{O}(\langle T \rangle_\gamma)} + \underbrace{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \nabla \langle T \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}_0}}_{\mathcal{O}\left(\frac{L_\gamma \langle T \rangle_\gamma}{L}\right)} \\ &\quad + \underbrace{\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) : \nabla \nabla \langle T \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}_0}}_{\mathcal{O}\left(\frac{L_\gamma^2 \langle T \rangle_\gamma}{L^2}\right)} + \dots, \quad \gamma = \omega, \eta \end{aligned} \quad (6.11a)$$

$$\nabla \langle T \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}} = \underbrace{\nabla \langle T \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}_0}}_{\mathcal{O}(\Delta \langle T \rangle_\gamma)} + \underbrace{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \nabla \nabla \langle T \rangle_\gamma \Big|_{\mathbf{x}_0}}_{\mathcal{O}\left(\frac{L_\gamma \Delta \langle T \rangle_\gamma}{L}\right)} + \dots, \quad \gamma = \omega, \eta \quad (6.11b)$$

Aquí se ha descartado la contribución de gradientes de tercer orden o superior¹, y se han agregado los estimados de orden de magnitud de algunos términos. De esta manera, imponiendo las siguientes restricciones

$$\frac{L_\gamma}{L} \ll 1, \quad \gamma = \omega, \eta \quad (6.12a)$$

$$\frac{L_\gamma^2}{L^2} \ll 1, \quad \gamma = \omega, \eta \quad (6.12b)$$

entonces es aceptable considerar las temperaturas y gradientes del modelo de dos dominios constantes en el dominio de solución de las desviaciones macroscópicas. En las Ecuaciones

¹Es razonable descartar los gradientes de orden superior debido a que, como se observa en la tendencia de las Ecuaciones (6.12) la disparidad de escalas lo permite.

(6.11) y (6.12) L_γ ($\gamma = \omega, \eta$) representa la longitud característica de la región V_γ , mientras que L es la correspondiente para la región Ω_γ .

El problema de las desviaciones macroscópicas se completa imponiendo las condiciones iniciales,

$$\widehat{T}_\omega = 0, \text{ a } t = 0 \text{ y en } V_\omega \quad (6.13a)$$

$$\widehat{T}_\eta = 0, \text{ a } t = 0 \text{ y en } V_\eta \quad (6.13b)$$

Las cuales indican que al inicio los campos de temperatura en los modelos de uno y dos dominios son iguales. Esto solo es posible cuando al inicio el sistema está a temperatura constante desde el punto de vista de la microescala. Además, se requiere de las condiciones de frontera en la superficie externa de las regiones V_ω y V_η (δV_ω y δV_η respectivamente), es decir, sin considerar a la superficie divisoria

$$\widehat{T}_\omega = 0, \text{ en } \delta V_\omega \quad (6.14a)$$

$$\widehat{T}_\eta = 0, \text{ en } \delta V_\eta \quad (6.14b)$$

La condición de frontera en la superficie divisoria surge de la idea de continuidad de la temperatura y del flux de calor en el modelo de un solo dominio, es decir,

$$\langle T \rangle|_{\mathbf{x}_0^-} = \langle T \rangle|_{\mathbf{x}_0^+} \quad (6.15a)$$

$$\begin{aligned} (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle \langle T \rangle) \Big|_{\mathbf{x}_0^-} - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}_0^-) \cdot \nabla \langle T \rangle] \Big|_{\mathbf{x}_0^-} = \\ (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle \langle T \rangle) \Big|_{\mathbf{x}_0^+} - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}_0^+) \cdot \nabla \langle T \rangle] \Big|_{\mathbf{x}_0^+} \end{aligned} \quad (6.15b)$$

Sustituyendo las definiciones (6.6) se tiene después de cierto esfuerzo algebraico

$$\widehat{T}_\omega - \widehat{T}_\eta = \langle T \rangle_\eta \Big|_{\mathbf{x}_0} - \langle T \rangle_\omega \Big|_{\mathbf{x}_0}, \text{ en } \mathbf{x}_0 \quad (6.16a)$$

$$\begin{aligned} (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot \left[\langle \mathbf{v}_\beta \rangle \left(\widehat{T}_\omega - \widehat{T}_\eta \right) \right] - \nabla \cdot \left[\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}_0) \cdot \nabla \left(\widehat{T}_\omega - \widehat{T}_\eta \right) \right] = \\ \mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}_0) : \nabla \nabla \langle T \rangle_\omega \Big|_{\mathbf{x}_0} \\ - \mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}_0) : \nabla \nabla \langle T \rangle_\eta \Big|_{\mathbf{x}_0} \\ + \left[\nabla \cdot \mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}_0) - (\rho c_P)_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \right] \cdot \nabla \langle T \rangle_\omega \Big|_{\mathbf{x}_0} \\ - \left[\nabla \cdot \mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}_0) - (\rho c_P)_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \right] \cdot \nabla \langle T \rangle_\eta \Big|_{\mathbf{x}_0} \\ - (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \langle T \rangle_\omega \Big|_{\mathbf{x}_0} \\ + (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \langle T \rangle_\eta \Big|_{\mathbf{x}_0}, \text{ en } \mathbf{x}_0 \end{aligned} \quad (6.16b)$$

6.3. Problemas de cerradura

La solución formal para las desviaciones macroscópicas de la temperatura se puede escribir como,

$$\begin{aligned} \hat{T}_\omega = & \mathbf{B}_{\omega\omega} : \nabla\nabla \langle T \rangle_\omega|_{\mathbf{x}_0} + \mathbf{B}_{\omega\eta} : \nabla\nabla \langle T \rangle_\eta|_{\mathbf{x}_0} + \mathbf{c}_{\omega\omega} \cdot \nabla \langle T \rangle_\omega|_{\mathbf{x}_0} + \mathbf{c}_{\omega\eta} \cdot \nabla \langle T \rangle_\eta|_{\mathbf{x}_0} \\ & + s_{\omega\omega} \langle T \rangle_\omega|_{\mathbf{x}_0} + s_{\omega\eta} \langle T \rangle_\eta|_{\mathbf{x}_0} \end{aligned} \quad (6.17a)$$

$$\begin{aligned} \hat{T}_\eta = & \mathbf{B}_{\eta\omega} : \nabla\nabla \langle T \rangle_\omega|_{\mathbf{x}_0} + \mathbf{B}_{\eta\eta} : \nabla\nabla \langle T \rangle_\eta|_{\mathbf{x}_0} + \mathbf{c}_{\eta\omega} \cdot \nabla \langle T \rangle_\omega|_{\mathbf{x}_0} + \mathbf{c}_{\eta\eta} \cdot \nabla \langle T \rangle_\eta|_{\mathbf{x}_0} \\ & + s_{\eta\omega} \langle T \rangle_\omega|_{\mathbf{x}_0} + s_{\eta\eta} \langle T \rangle_\eta|_{\mathbf{x}_0} \end{aligned} \quad (6.17b)$$

Donde \mathbf{B}_{mp} ($m, p = \omega, \eta$), \mathbf{c}_{mp} y s_{mp} son las variables de cerradura macroscópicas que resuelven los siguientes problemas de valor inicial y a la frontera:

Problema para $\mathbf{B}_{\omega\omega}$ y $\mathbf{B}_{\eta\omega}$, fuente $\nabla\nabla \langle T \rangle_\omega|_{\mathbf{x}_0}$

$$\mathbf{B}_{\omega\omega} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \delta V_\omega \quad (6.18a)$$

$$\mathbf{B}_{\eta\omega} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \delta V_\eta \quad (6.18b)$$

$$\mathbf{B}_{\omega\omega} = \mathbf{0}, \quad \text{a } t = 0 \quad (6.18c)$$

$$\mathbf{B}_{\eta\omega} = \mathbf{0}, \quad \text{a } t = 0 \quad (6.18d)$$

$$\mathbf{B}_{\omega\omega} - \mathbf{B}_{\eta\omega} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathbf{x}_0 \quad (6.18e)$$

$$(\rho c_P)_\beta \nabla \cdot [\langle \mathbf{v}_\beta \rangle (\mathbf{B}_{\omega\omega} - \mathbf{B}_{\eta\omega})] - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}_0) \cdot \nabla (\mathbf{B}_{\omega\omega} - \mathbf{B}_{\eta\omega})] = \mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}_0), \quad \text{en } \mathbf{x}_0 \quad (6.18f)$$

$$\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) \frac{\partial \mathbf{B}_{\omega\omega}}{\partial t} + (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle \mathbf{B}_{\omega\omega}) - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla \mathbf{B}_{\omega\omega}] = \mathbf{F}_\omega(\mathbf{x}), \quad \text{en } V_\omega \quad (6.18g)$$

$$\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) \frac{\partial \mathbf{B}_{\eta\omega}}{\partial t} + (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle \mathbf{B}_{\eta\omega}) - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla \mathbf{B}_{\eta\omega}] = \mathbf{0}, \quad \text{en } V_\eta \quad (6.18h)$$

Problema para $\mathbf{B}_{\omega\eta}$ y $\mathbf{B}_{\eta\eta}$, fuente $\nabla\nabla \langle T \rangle_\eta|_{\mathbf{x}_0}$

$$\mathbf{B}_{\omega\eta} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \delta V_\omega \quad (6.19a)$$

$$\mathbf{B}_{\eta\eta} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \delta V_\eta \quad (6.19b)$$

$$\mathbf{B}_{\omega\eta} = \mathbf{0}, \quad \text{a } t = 0 \quad (6.19c)$$

$$\mathbf{B}_{\eta\eta} = \mathbf{0}, \quad \text{a } t = 0 \quad (6.19d)$$

$$\mathbf{B}_{\omega\eta} - \mathbf{B}_{\eta\eta} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathbf{x}_0 \quad (6.19e)$$

$$(\rho c_P)_\beta \nabla \cdot [\langle \mathbf{v}_\beta \rangle (\mathbf{B}_{\omega\eta} - \mathbf{B}_{\eta\eta})] - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}_0) \cdot \nabla (\mathbf{B}_{\omega\eta} - \mathbf{B}_{\eta\eta})] = -\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}_0), \quad \text{en } \mathbf{x}_0 \quad (6.19f)$$

$$\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) \frac{\partial \mathbf{B}_{\omega\eta}}{\partial t} + (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle \mathbf{B}_{\omega\eta}) - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla \mathbf{B}_{\omega\eta}] = \mathbf{0}, \quad \text{en } V_\omega \quad (6.19g)$$

$$\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) \frac{\partial \mathbf{B}_{\eta\eta}}{\partial t} + (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle \mathbf{B}_{\eta\eta}) - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla \mathbf{B}_{\eta\eta}] = \mathbf{F}_\eta(\mathbf{x}), \quad \text{en } V_\eta \quad (6.19h)$$

Problema para $\mathbf{c}_{\omega\omega}$ y $\mathbf{c}_{\eta\omega}$, fuente $\nabla \langle T \rangle_\omega|_{\mathbf{x}_0}$

$$\mathbf{c}_{\omega\omega} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \delta V_\omega \quad (6.20a)$$

$$\mathbf{c}_{\eta\omega} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \delta V_\eta \quad (6.20b)$$

$$\mathbf{c}_{\omega\omega} = \mathbf{0}, \quad \text{a } t = 0 \quad (6.20c)$$

$$\mathbf{c}_{\eta\omega} = \mathbf{0}, \quad \text{a } t = 0 \quad (6.20d)$$

$$\mathbf{c}_{\omega\omega} - \mathbf{c}_{\eta\omega} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathbf{x}_0 \quad (6.20e)$$

$$(\rho c_P)_\beta \nabla \cdot [\langle \mathbf{v}_\beta \rangle (\mathbf{c}_{\omega\omega} - \mathbf{c}_{\eta\omega})] - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}_0) \cdot \nabla (\mathbf{c}_{\omega\omega} - \mathbf{c}_{\eta\omega})] = \nabla \cdot \mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}_0) - (\rho c_P)_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle, \quad \text{en } \mathbf{x}_0 \quad (6.20f)$$

$$\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) \frac{\partial \mathbf{c}_{\omega\omega}}{\partial t} + (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle \mathbf{c}_{\omega\omega}) - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla \mathbf{c}_{\omega\omega}] = \mathbf{f}_\omega(\mathbf{x}), \quad \text{en } V_\omega \quad (6.20g)$$

$$\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) \frac{\partial \mathbf{c}_{\eta\omega}}{\partial t} + (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle \mathbf{c}_{\eta\omega}) - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla \mathbf{c}_{\eta\omega}] = \mathbf{0}, \quad \text{en } V_\eta \quad (6.20h)$$

Problema para $\mathbf{c}_{\omega\eta}$ y $\mathbf{c}_{\eta\eta}$, fuente $\nabla \langle T \rangle_\eta|_{\mathbf{x}_0}$

$$\mathbf{c}_{\omega\eta} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \delta V_\omega \quad (6.21a)$$

$$\mathbf{c}_{\eta\eta} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \delta V_\eta \quad (6.21b)$$

$$\mathbf{c}_{\omega\eta} = \mathbf{0}, \quad \text{a } t = 0 \quad (6.21c)$$

$$\mathbf{c}_{\eta\eta} = \mathbf{0}, \quad \text{a } t = 0 \quad (6.21d)$$

$$\mathbf{c}_{\omega\eta} - \mathbf{c}_{\eta\eta} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathbf{x}_0 \quad (6.21e)$$

$$(\rho c_P)_\beta \nabla \cdot [\langle \mathbf{v}_\beta \rangle (\mathbf{c}_{\omega\eta} - \mathbf{c}_{\eta\eta})] - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}_0) \cdot \nabla (\mathbf{c}_{\omega\eta} - \mathbf{c}_{\eta\eta})] = (\rho c_P)_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \nabla \cdot \mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}_0), \quad \text{en } \mathbf{x}_0 \quad (6.21f)$$

$$\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) \frac{\partial \mathbf{c}_{\omega\eta}}{\partial t} + (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle \mathbf{c}_{\omega\eta}) - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla \mathbf{c}_{\omega\eta}] = \mathbf{0}, \quad \text{en } V_\omega \quad (6.21g)$$

$$\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) \frac{\partial \mathbf{c}_{\eta\eta}}{\partial t} + (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle \mathbf{c}_{\eta\eta}) - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla \mathbf{c}_{\eta\eta}] = \mathbf{f}_\eta(\mathbf{x}), \quad \text{en } V_\eta \quad (6.21h)$$

Problema para $s_{\omega\omega}$ y $s_{\eta\omega}$, fuente $\langle T \rangle_\omega|_{\mathbf{x}_0}$

$$s_{\omega\omega} = 0, \quad \text{en } \delta V_\omega \quad (6.22a)$$

$$s_{\eta\omega} = 0, \quad \text{en } \delta V_\eta \quad (6.22b)$$

$$s_{\omega\omega} = 0, \quad \text{a } t = 0 \quad (6.22c)$$

$$s_{\eta\omega} = 0, \quad \text{a } t = 0 \quad (6.22d)$$

$$s_{\omega\omega} - s_{\eta\omega} = -1, \quad \text{en } \mathbf{x}_0 \quad (6.22e)$$

$$(\rho C_P)_\beta \nabla \cdot [\langle \mathbf{v}_\beta \rangle (s_{\omega\omega} - s_{\eta\omega})] - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}_0) \cdot \nabla (s_{\omega\omega} - s_{\eta\omega})] = -(\rho C_P)_\beta \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle, \quad \text{en } \mathbf{x}_0 \quad (6.22f)$$

$$\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) \frac{\partial s_{\omega\omega}}{\partial t} + (\rho C_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle s_{\omega\omega}) - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla s_{\omega\omega}] = f_\omega(\mathbf{x}), \quad \text{en } V_\omega \quad (6.22g)$$

$$\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) \frac{\partial s_{\eta\omega}}{\partial t} + (\rho C_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle s_{\eta\omega}) - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla s_{\eta\omega}] = 0, \quad \text{en } V_\eta \quad (6.22h)$$

Problema para $s_{\omega\eta}$ y $s_{\eta\eta}$, fuente $\langle T \rangle_\eta \Big|_{\mathbf{x}_0}$

$$s_{\omega\eta} = 0, \quad \text{en } \delta V_\omega \quad (6.23a)$$

$$s_{\eta\eta} = 0, \quad \text{en } \delta V_\eta \quad (6.23b)$$

$$s_{\omega\eta} = 0, \quad \text{a } t = 0 \quad (6.23c)$$

$$s_{\eta\eta} = 0, \quad \text{a } t = 0 \quad (6.23d)$$

$$s_{\omega\eta} - s_{\eta\eta} = 1, \quad \text{en } \mathbf{x}_0 \quad (6.23e)$$

$$(\rho C_P)_\beta \nabla \cdot [\langle \mathbf{v}_\beta \rangle (s_{\omega\eta} - s_{\eta\eta})] - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}_0) \cdot \nabla (s_{\omega\eta} - s_{\eta\eta})] = (\rho C_P)_\beta \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle, \quad \text{en } \mathbf{x}_0 \quad (6.23f)$$

$$\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) \frac{\partial s_{\omega\eta}}{\partial t} + (\rho C_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle s_{\omega\eta}) - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla s_{\omega\eta}] = 0, \quad \text{en } V_\omega \quad (6.23g)$$

$$\langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) \frac{\partial s_{\eta\eta}}{\partial t} + (\rho C_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle s_{\eta\eta}) - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla s_{\eta\eta}] = f_\eta(\mathbf{x}), \quad \text{en } V_\eta \quad (6.23h)$$

6.4. Condiciones de salto

Con la solución formal de las desviaciones macroscópicas se procede a desarrollar la primera condición de salto. Sustituyendo las Ecuaciones (6.6) y (6.17) en (6.4) se tiene

$$\begin{aligned} \langle T \rangle_\omega \Big|_{\mathbf{x}_0} = \alpha^I \langle T \rangle_\eta \Big|_{\mathbf{x}_0} + \mathbf{H}_\omega^I : \nabla \nabla \langle T \rangle_\omega \Big|_{\mathbf{x}_0} + \mathbf{H}_\eta^I : \nabla \nabla \langle T \rangle_\eta \Big|_{\mathbf{x}_0} \\ + \mathbf{g}_\omega^I \cdot \nabla \langle T \rangle_\omega \Big|_{\mathbf{x}_0} + \mathbf{g}_\eta^I \cdot \nabla \langle T \rangle_\eta \Big|_{\mathbf{x}_0} \end{aligned} \quad (6.24)$$

Donde α^I , \mathbf{H}_ω^I , \mathbf{H}_η^I , \mathbf{g}_ω^I y \mathbf{g}_η^I son los coeficientes de salto dependientes de las variables de cerradura en la siguiente forma,

$$\alpha^I = -\frac{\frac{1}{\gamma_\omega} \int_{V_\omega} s_{\omega\eta} dV + \frac{1}{\gamma_\eta} \int_{V_\eta} s_{\eta\eta} dV}{\frac{1}{\gamma_\omega} \int_{V_\omega} s_{\omega\omega} dV + \frac{1}{\gamma_\eta} \int_{V_\eta} s_{\eta\omega} dV} \quad (6.25a)$$

$$\mathbf{H}_\omega^I = -\frac{\frac{1}{\gamma_\omega} \int_{V_\omega} \mathbf{B}_{\omega\omega} dV + \frac{1}{\gamma_\eta} \int_{V_\eta} \mathbf{B}_{\eta\omega} dV}{\frac{1}{\gamma_\omega} \int_{V_\omega} s_{\omega\omega} dV + \frac{1}{\gamma_\eta} \int_{V_\eta} s_{\eta\omega} dV} \quad (6.25b)$$

$$\mathbf{H}_\eta^I = -\frac{\frac{1}{\gamma_\omega} \int_{V_\omega} \mathbf{B}_{\omega\eta} dV + \frac{1}{\gamma_\eta} \int_{V_\eta} \mathbf{B}_{\eta\eta} dV}{\frac{1}{\gamma_\omega} \int_{V_\omega} s_{\omega\omega} dV + \frac{1}{\gamma_\eta} \int_{V_\eta} s_{\eta\omega} dV} \quad (6.25c)$$

$$\mathbf{g}_\omega^I = -\frac{\frac{1}{\gamma_\omega} \int_{V_\omega} \mathbf{c}_{\omega\omega} dV + \frac{1}{\gamma_\eta} \int_{V_\eta} \mathbf{c}_{\eta\omega} dV}{\frac{1}{\gamma_\omega} \int_{V_\omega} s_{\omega\omega} dV + \frac{1}{\gamma_\eta} \int_{V_\eta} s_{\eta\omega} dV} \quad (6.25d)$$

$$\mathbf{g}_\eta^I = -\frac{\frac{1}{\gamma_\omega} \int_{V_\omega} \mathbf{c}_{\omega\eta} dV + \frac{1}{\gamma_\eta} \int_{V_\eta} \mathbf{c}_{\eta\eta} dV}{\frac{1}{\gamma_\omega} \int_{V_\omega} s_{\omega\omega} dV + \frac{1}{\gamma_\eta} \int_{V_\eta} s_{\eta\omega} dV} \quad (6.25e)$$

La Ecuación (6.24) representa la condición de salto para el campo de la temperatura en la posición \mathbf{x}_0 . Ciertamente, con el fin de recuperar la condición de continuidad se requiere que $\alpha^I = 1$ y los coeficientes restantes sean igual a cero. Tales requerimientos se cumplen de acuerdo con el tipo de problema de transporte en cuestión. Para el problema simple de transporte unidireccional, estacionario y conductivo de calor presentado en el Capítulo 5, se mostró que es posible recuperar la condición de continuidad replanteando la posición de la superficie divisoria. De esta forma, la condición de salto (6.24) se considera de carácter general en el sentido de que incluye acumulación, convección y conducción en cualquier tipo de geometría, y puede reducirse a una forma más simple dependiendo de las condiciones de transporte de calor.

Ahora, la siguiente etapa consiste en encontrar la segunda condición de frontera asociada con el salto del flux de calor. Para ello, se enfatiza que las Ecuaciones (6.7) y (6.9) son independientes del criterio utilizado para derivar la primera condición de salto, Ecuación (6.4), por lo que se utilizan para la derivación de la segunda condición de salto. De esta

manera, después de integrar la Ecuación (6.7) en la región V_ω , sumar el resultado a la integración de la Ecuación (6.9) en V_η e igualar a cero se obtiene²,

$$\begin{aligned} \langle T \rangle_\omega|_{\mathbf{x}_0} = & \alpha^{II} \langle T \rangle_\eta|_{\mathbf{x}_0} + \mathbf{H}_\omega^{II} : \nabla \nabla \langle T \rangle_\omega|_{\mathbf{x}_0} + \mathbf{H}_\eta^{II} : \nabla \nabla \langle T \rangle_\eta|_{\mathbf{x}_0} \\ & + \mathbf{g}_\omega^{II} \cdot \nabla \langle T \rangle_\omega|_{\mathbf{x}_0} + \mathbf{g}_\eta^{II} \cdot \nabla \langle T \rangle_\eta|_{\mathbf{x}_0} \end{aligned} \quad (6.26)$$

Donde,

$$\alpha^{II} = - \frac{\int_{V_\omega} \mathcal{L}(s_{\omega\eta}) dV + \int_{V_\eta} [\mathcal{L}(s_{\eta\eta}) - f_\eta(\mathbf{x})] dV}{\int_{V_\omega} [\mathcal{L}(s_{\omega\omega}) - f_\omega(\mathbf{x})] dV + \int_{V_\eta} \mathcal{L}(s_{\eta\omega}) dV} \quad (6.27a)$$

$$\mathbf{H}_\omega^{II} = - \frac{\int_{V_\omega} [\mathcal{L}(\mathbf{B}_{\omega\omega}) - \mathbf{F}_\omega(\mathbf{x})] dV + \int_{V_\eta} \mathcal{L}(\mathbf{B}_{\eta\omega}) dV}{\int_{V_\omega} [\mathcal{L}(s_{\omega\omega}) - f_\omega(\mathbf{x})] dV + \int_{V_\eta} \mathcal{L}(s_{\eta\omega}) dV} \quad (6.27b)$$

$$\mathbf{H}_\eta^{II} = - \frac{\int_{V_\omega} \mathcal{L}(\mathbf{B}_{\omega\eta}) dV + \int_{V_\eta} [\mathcal{L}(\mathbf{B}_{\eta\eta}) - \mathbf{F}_\eta(\mathbf{x})] dV}{\int_{V_\omega} [\mathcal{L}(s_{\omega\omega}) - f_\omega(\mathbf{x})] dV + \int_{V_\eta} \mathcal{L}(s_{\eta\omega}) dV} \quad (6.27c)$$

$$\mathbf{g}_\omega^{II} = - \frac{\int_{V_\omega} [\mathcal{L}(\mathbf{c}_{\omega\omega}) - \mathbf{f}_\omega(\mathbf{x})] dV + \int_{V_\eta} \mathcal{L}(\mathbf{c}_{\eta\omega}) dV}{\int_{V_\omega} [\mathcal{L}(s_{\omega\omega}) - f_\omega(\mathbf{x})] dV + \int_{V_\eta} \mathcal{L}(s_{\eta\omega}) dV} \quad (6.27d)$$

$$\mathbf{g}_\eta^{II} = - \frac{\int_{V_\omega} \mathcal{L}(\mathbf{c}_{\omega\eta}) dV + \int_{V_\eta} [\mathcal{L}(\mathbf{c}_{\eta\eta}) - \mathbf{f}_\eta(\mathbf{x})] dV}{\int_{V_\omega} [\mathcal{L}(s_{\omega\omega}) - f_\omega(\mathbf{x})] dV + \int_{V_\eta} \mathcal{L}(s_{\eta\omega}) dV} \quad (6.27e)$$

con \mathcal{L} siendo el operador diferencial lineal definido como,

$$\mathcal{L}(\bullet) = \langle \rho \rangle C_P(\mathbf{x}) \frac{\partial(\bullet)}{\partial t} + (\rho C_P)_\beta \nabla \cdot [(\mathbf{v}_\beta)(\bullet)] - \nabla \cdot [\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla(\bullet)] \quad (6.28)$$

Debe mencionarse que para la estimación de los numerosos coeficientes de salto que aparecen en las Ecuaciones (6.24) y (6.26), solo se requiere conocer la dependencia espacial de las propiedades efectivas del modelo de un solo dominio. Lo cual en este punto, solo se conoce para el transporte unidireccional de calor en la dirección normal a la superficie divisoria. Ciertamente, con el fin de analizar configuraciones más complicadas del transporte de calor es necesario extender el análisis presentado en este trabajo a sistemas con superficies divisorias irregulares.

²Realmente, este procedimiento significa la aplicación del principio de conservación de energía.

Para finalizar, se añade que en este punto aún no está definida explícitamente la posición de la superficie divisoria \mathbf{x}_0 . Siguiendo el razonamiento utilizado en la Sección 5.6, la posición \mathbf{x}_0 debe satisfacer que en las fronteras δV_ω y δV_η el flux total de las desviaciones macroscópicas sea igual a cero, esto es

$$\int_{\delta V_\omega} \mathbf{n}_\omega \cdot \left[(\rho c_P)_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \widehat{T}_\omega - \mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla \widehat{T}_\omega \right] dA + \int_{\delta V_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \left[(\rho c_P)_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \widehat{T}_\eta - \mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) \cdot \nabla \widehat{T}_\eta \right] dA = 0 \quad (6.29)$$

Donde \mathbf{n}_ω y \mathbf{n}_η son los vectores normales unitarios apuntando hacia afuera de las regiones V_ω y V_η respectivamente.

CONCLUSIONES

En este trabajo se utilizó el método del promedio volumétrico para la derivación de las ecuaciones efectivas para el transporte de calor convectivo y difusivo entre un medio poroso homogéneo y una región de solo fluido. Se estudiaron los casos cuando es válida la suposición de equilibrio local térmico y también cuando la suposición no es válida y, por tanto, se requiere de una ecuación efectiva para cada fase presente. Los objetivos principales consistieron en la derivación de los modelos cerrados de uno y dos dominios, los cuales se llevaron a cabo en las siguientes etapas:

- En la Parte I se discutió todo lo relacionado con el modelo de un solo dominio. En el Capítulo 2 se presentó la forma de las ecuaciones efectivas bajo la suposición de equilibrio y no equilibrio local térmico. Para ello, se utilizó el método del promedio volumétrico para escalar rigurosamente las ecuaciones gobernantes desde la microescala, y se desarrollaron los esquemas de cerradura (presentados en el Apéndice A) para la predicción de todos los coeficientes efectivos involucrados. Además, en el modelo de no equilibrio, el cual incluye dos ecuaciones efectivas, se desarrolló la condición frontera asociada a la ecuación del sólido en el lado de la región de fluido.
- En el Capítulo 3 se llevó a cabo la predicción de los coeficientes efectivos en función de las conductividades térmicas, del número de Péclet, de la porosidad y de la posición a través de la zona de cambios significativos en la microestructura (inter-región). Para ello el medio poroso fue representado de dos maneras simples: como un arreglo periódico de cilindros en línea que no se tocan entre sí, y como un arreglo periódico de cuadrados con brazos de interconexión. Específicamente, se encontró que los elementos de la diagonal

principal de los tensores térmicos son más significativos que el resto de los elementos y además, los elementos- xx (tangentes a la dirección del flujo neto) incrementan su valor notablemente cuando el régimen de transporte es convectivo. El coeficiente de transferencia de calor disminuye exponencialmente desde un valor máximo en el seno del medio poroso hasta tomar el valor de cero en la región de solo fluido. Se encontró que los vectores tipo-convectivo, generalmente, pueden ser descartados para efectos prácticos. Los coeficientes efectivos menos relevantes se muestran en el Apéndice B. Además, el contacto partícula-partícula modifica significativamente los valores de los coeficientes efectivos, especialmente cuando una fase es más conductiva que la otra.

- También, en el Capítulo 3 se resolvieron los modelos escalados de equilibrio y no equilibrio en un dominio simple, y los perfiles de temperatura se compararon con resultados originados al resolver las ecuaciones gobernantes de la microescala (DNS) en un dominio simplificado del medio poroso. A pesar de que el modelo de equilibrio involucra más suposiciones que el modelo de no equilibrio, éste predice adecuadamente los resultados del DNS para diferentes condiciones de simulación. Por lo tanto, dada su precisión y relativa sencillez del modelo de equilibrio, su uso representa una buena opción incluso para modelar el transporte de calor en la inter-región entre el medio poroso y la región de fluido libre.
- Habiendo comprobado que el modelo de equilibrio térmico es una opción adecuada para modelar el transporte de calor, en el Capítulo 4 se utilizó dicho modelo para estudiar el desempeño térmico de un intercambiador de calor de placas paralelas con un inserto poroso sometido a convección forzada. Para ello, el campo de velocidad se obtuvo al resolver la ecuación de Darcy-Brinkman con coeficientes variables utilizando un esquema integral iterativo con funciones de Green. Con esto, el campo de velocidad se utilizó como dato de entrada para resolver el problema de transporte de calor en el canal utilizando rutinas numéricas de Comsol Multiphysics® 3.5a. Particularmente, se comprobó que el uso del inserto poroso lleva a una mejora significativa en la tasa de transferencia de calor entre el fluido y las paredes del intercambiador.
- En la Parte II de este documento se presentó lo relacionado con el modelo de dos dominios. En este caso, los objetivos que se persiguieron consisten en el desarrollo de condiciones salto cerradas, tanto para el flux de calor como para la temperatura.

Para transporte de calor unidimensional, estacionario y difusivo en la dirección normal a la superficie divisoria, se implementó un procedimiento teórico el cual, en esencia, consiste en que el modelo de dos dominios satisfaga en promedio al modelo de un solo dominio. Así, con el procedimiento descrito en el Capítulo 5, se derivó teóricamente la condición de continuidad del flux de calor y una discontinuidad en el campo de la temperatura. La condición de salto de la temperatura se expresó en términos de dos coeficientes que pueden ser predichos a partir de la solución de los problemas de cerradura macroscópicos asociados. La introducción de la condición de salto condujo a mejores predicciones de la temperatura en comparación con el modelo con condiciones de continuidad. Además, en este caso se encontró que se recupera la condición de continuidad de la temperatura al modificar apropiadamente la posición de la superficie divisoria.

- Con los antecedentes del Capítulo 5, en el Capítulo 6 se presenta la derivación de las condiciones de salto para el problema de transporte de calor en un sentido más general. Específicamente, se analizó el transporte transitorio, convectivo y dispersivo de calor para cualquier tipo de geometría. En este caso, se derivaron las condiciones de salto tanto para el flux como de la temperatura encontrándose que las discontinuidades dependen linealmente de los gradientes (hasta de segundo orden) de la temperatura. Los coeficientes que aparecen en las condiciones de salto dependen explícitamente de las variables de cerradura, las cuales pueden determinarse a partir de la solución de los problemas de valor a la frontera asociados. Para resolver los problemas de cerradura solo se requiere conocer la dependencia espacial de los coeficientes efectivos del modelo de un solo dominio.

Cabe agregar que la metodología expuesta en este trabajo puede extenderse a problemas de mayor complejidad. A lo largo del documento se ha enfatizado que ambos tipos de modelo –de uno y dos dominios– comparten la información del fenómeno que ocurre en la microescala en la zona cercana a la frontera medio poroso-fluido. Si se piensa en el desarrollo del modelo cerrado de dos dominios como el objetivo final de cierto estudio, invariablemente se tiene que recurrir, como un paso previo, al desarrollo del modelo cerrado de un solo dominio. Tres de las contribuciones más importantes de este trabajo se presentan en los Capítulos 2, 5 y 6; donde se presentan los modelos cerrados de uno y dos dominios. No obstante, uno de los avances más significativos presentados está relacionado con el desarrollo del problema

de cerradura macroscópico para la predicción de los coeficientes de salto, el cual involucra solamente los cambios espaciales de las propiedades efectivas de transporte. Esto mejora notablemente la metodología para el desarrollo de condiciones de salto, y en contraste con otras metodologías (Ochoa-Tapia y Whitaker, 1997a, 1998; Wood y col., 2000; Valdés-Parada, 2007), no se requiere del campo de solución del modelo de un solo dominio para el cómputo de los coeficientes de salto (relacionados con las cantidades de exceso).

COMENTARIOS FINALES

Esta sección se enfoca hacia el uso correcto que se le debe brindar a los modelos térmicos desarrollados en este trabajo. A lo largo de la búsqueda bibliográfica se encontraron algunos trabajos de carácter experimental (para transporte de masa y momentum), en los cuales se utilizaron determinados modelos (algunos muy utilizados en la literatura) para interpretar los datos de laboratorio. Si bien esto funciona en la mayoría de las veces, puesto que se trata de ajustar lo mejor posible los datos experimentales a alguna curva de predicciones, en ocasiones dichos modelos contienen implícitas algunas suposiciones como pueden ser:

- La existencia de un volumen elemental representativo.
- Disparidad de escalas en el sistema.
- Soluciones diluidas.
- La posibilidad de descartar algún tipo de transporte (convección, radiación, etc).
- La posibilidad de descartar algún tipo de fuente o sumidero.
- Que el fenómeno obedezca alguna expresión constitutiva (relación termodinámica, ley de Fick, fluido newtoniano, etc.).
- Entre otras...

las cuales podrían no ser respetadas durante el desarrollo del experimento. Esto puede llevar a inconsistencias entre *lo que puede predecir el modelo* y *lo que se quiere que prediga el modelo*.

Sobre esto, una de las características importantes del método del promedio volumétrico es que permite identificar de manera clara el dominio de validez del modelo escalado al que se llega, y de las suposiciones hechas durante su derivación teórica. Posterior a esto, es de suma importancia comprobar experimentalmente tales suposiciones en el caso de que se pueda llevar a cabo. Considerando los modelos térmicos cerrados desarrollados en este trabajo, dichas suposiciones y restricciones de escala y temporales se detallan en el Capítulo 2 y en el Apéndice A. Si se desean utilizar estos modelos para interpretar resultados experimentales (esto es, determinar experimentalmente propiedades efectivas de transporte), es muy recomendable tomar en cuenta todo lo descrito en el desarrollo teórico con el objetivo de mantener consistencia entre el modelo utilizado con las características propias del experimento que se lleva a cabo.

BIBLIOGRAFÍA

- Aguilar-Madera, C. G., Valdés-Parada, F. J., Goyeau, B., y Ochoa-Tapia, J. A., 2011a. “One-domain approach for heat transfer between a porous medium and a fluid”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 54, 2089–2099.
- Aguilar-Madera, C. G., Valdés-Parada, F. J., Goyeau, B., y Ochoa-Tapia, J. A., 2011b. “Convective heat transfer in a channel partially filled with a porous medium”, *International Journal of Thermal Sciences*, Vol. 50, 1355–1368.
- Al-Nimr, M. A. y Alkam, M. K., 1998. “A modified tubeless solar collector partially filled with porous substrate”, *Renewable Energy*, Vol. 13, No. 2, 165–173.
- Alazmi, B. y Vafai, K., 2001. “Analysis of fluid flow and heat transfer interfacial conditions between a porous medium and a fluid layer”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 44, 1735–1749.
- Alkam, M. K. y Al-Nimr, M. A., 1998. “Transient non-Darcian forced convection flow in a pipe partially filled with a porous material”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 41, No. 2, 347–356.
- Alkam, M. K. y Al-Nimr, M. A., 1999. “Improving the performance of double-pipe heat exchangers by using porous substrates”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 42, 3609–3618.
- Alkam, M. K., Al-Nimr, M. A., y Hamdan, M. O., 2001. “Enhancing heat transfer in parallel-

-
- plate channels by using porous inserts”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 44, 931–938.
- Auriault, J. L., 1983. “Effective macroscopic description for heat conduction in periodic composites”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 26, 861–869.
- Auriault, J. L. y Royer, P., 1993. “Double conductivity media: a comparison between phenomenological and homogenization approaches”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 36, No. 10, 2613–2621.
- Batchelor, G. K., 1974. “Transport properties of two-phase materials with random structure”, *Annual Reviews of Fluid Mechanics*, Vol. 6, 227–255.
- Batchelor, G. K. y O’Brien, R. W., 1977. “Thermal or electrical conduction through a granular material”, *Proceedings of the Royal Society A*, Vol. 355, 313–333.
- Bear, J., 1972. *Dynamic of fluids in porous media*. Elsevier, New York.
- Beavers, G. S. y Joseph, D. D., 1967. “Boundary conditions at a naturally permeable wall”, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 30, 197–207.
- Bird, R. B., Stewart, W. E., y Lightfoot, E. N., 1960. *Transport phenomena*. John Wiley and Sons, Inc., New York.
- Byun, S. Y., Ro, S. T., Shin, J. Y., Son, Y. S., y Lee, D. Y., 2006. “Transient thermal behavior of porous media under oscillating flow condition”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 49, 5081–5085.
- Carbonell, R. G. y Whitaker, S. “Heat and mass transfer in porous media”. En Bear, J. y Corapcioglu, M. Y., editores, *Mechanics of Fluids in Porous Media*, páginas 121–198. Martinus Nijhof, 1984.
- Chandesris, M. y Jamet, D., 2006. “Boundary conditions at a planar fluid-porous interface for a Poiseuille flow”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 49, 2137–2150.
- Chandesris, M. y Jamet, D., 2009. “Jump conditions and surface-excess quantities at a fluid/porous interface: A multiscale approach”, *Transport in Porous Media*, Vol. 78, 419–438.

-
- Chang, H. C., 1983. “Effective diffusion and conduction in two-phase media: a unified approach”, *AIChE Journal*, Vol. 29, No. 5, 846–853.
- Chen, X. y Sutton, W. H., 2005. “Enhancement of heat transfer: Combined convection and radiation in the entrance region of circular ducts with porous inserts”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 48, 5460–5474.
- Cho, H. H. y Eckert, E. R. G., 1994. “Transition from transpiration to film cooling”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 37, 3–8.
- Chounet, L. M., Hilhorst, D., Jouron, C., Kelanemer, Y., y Nicolas, P., 1999. “Simulation of water flow and heat transfer in soils by means of a mixed finite element method”, *Advances in Water Resources*, Vol. 22, No. 5, 445–460.
- Danckwerts, P. V., 1986. “Continuous flow systems. Distribution of residence times”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 2, 219–230.
- Davarzani, H., Marcoux, M., y Quintard, M., 2010. “Theoretical predictions of the effective thermodiffusion coefficients in porous media”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 53, 1514–1528.
- deLemos, M. J. S., 2006. *Turbulence in porous media: Modeling and applications*. Elsevier Ltd., Oxford, 1a edición.
- Deng, C. y Martinez, D. M., 2005. “Viscous flow in a channel partially filled with a porous medium and with wall suction”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 60, 329–336.
- 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”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 38, 1803–1816.
- Espinosa-Paredes, G., 2006. “Mass transfer and reaction in double emulsion systems”, *International Mathematical Forum*, Vol. 1, No. 36, 1789–1804.
- Espinosa-Paredes, G., 2007. “Jump mass transfer for double emulsion systems”, *International Mathematical Forum*, Vol. 2, No. 32, 1553–1570.

-
- Espinosa-Paredes, G., 2011. *Heat transfer processes upscaling in geoenery fields*. Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects, Accepted for publication.
- Fatehi, M. y Kaviany, M., 1994. “Adiabatic reverse combustion in a packed bed”, *Combustion and Flame*, Vol. 99, 1–17.
- Gibbs, J. W., 1948. *Collected works of J. W. Gibbs*, volumen 1. Yale University Press, New Haven.
- Glatzmaier, G. C. y Ramirez, W. F., 1988. “Use of volume averaging for the modeling of thermal properties of porous materials”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 43, 3157–3169.
- Goyeau, B., Lhuillier, D., Gobin, D., y Velarde, M. G., 2003. “Momentum transport at a fluid-porous interface”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 46, 4071–4081.
- Gray, W. G., 1975. “A derivation of the equations for multiphase transport”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 30, 229–233.
- Haber, S. y Mauri, R., 1983. “Boundary conditions for Darcy’s law through porous media”, *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 9, No. 5, 561–574.
- Haberman, R., 2004. *Applied partial differential equations with Fourier series and boundary value problems*. Pearson Prentice Hall, New Jersey, 4 edición.
- Haji-Sheikh, A. y Vafai, K., 2004. “Analysis of flow and heat transfer in porous media imbedded inside various-shaped ducts”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 47, 1889–1905.
- Hashin, Z. y Shtrikman, S., 1962. “A variational approach to the theory of the effective magnetic permeability of multiphase materials”, *Journal of Applied Physics*, Vol. 33, No. 10, 3125–3131.
- Howes, F. A. y Whitaker, S., 1985. “The spatial averaging theorem revisited”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 40, No. 8, 1387–1392.

-
- Huang, P. C., Nian, S. H., y Yang, C. F., 2005. “Enhanced heat-source cooling by flow pulsation and porous block”, *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 4, 460–470.
- Huang, Z. F., Nakayama, A., Yang, K., Yang, C., y Liu, W., 2010. “Enhancing heat transfer in the core flow by using porous medium inserts in a tube”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 53, 1164–1174.
- Jamet, D. y Chandesris, M., 2009. “On the intrinsic nature of jump coefficients at the interface between a porous medium and a free fluid region”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 52, 289–300.
- Jamet, D., Chandesris, M., y Goyeau, B., 2009. “On the equivalence of the discontinuous one- and two-domain approaches for the modeling of transport phenomena at a fluid/porous interface”, *Transport in Porous Media*, Vol. 78, 403–418.
- Jen, T. C. y Yan, T. Z., 2005. “Developing fluid flow and heat transfer in a channel partially filled with porous medium”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 48, 3995–4009.
- Jeng, T. M., Tzeng, S. C., y Hung, Y. H., 2006. “An analytical study of local thermal equilibrium in porous heat sinks using fin theory”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 49, 1907–1914.
- Jiménez-Islas, H., Navarrete-Bolaños, J. L., y Botello-Álvarez, E., 2004. “Numerical study of the natural convection of heat and 2-D mass of grain stored in cylindrical silos”, *Agrociencia*, Vol. 38, 325–342.
- Khaled, A. R. A. y Vafai, K., 2003. “The role of porous media in modeling flow and heat transfer in biological tissues”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 46, 4989–5003.
- Kim, S. H. y El-Genk, M. S., 1989. “Heat transfer experiments for low flow of water in rod bundles”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 32, No. 7, 1321–1336.
- Kim, S. J. y Jang, S. P., 2002. “Effects of the Darcy number, the Prandtl number, and the Reynolds number on local thermal non-equilibrium”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 45, 3885–3896.

- Kuznetsov, A. V., 1996. “Analytical investigation of the fluid flow in the interface region between a porous medium and a clear fluid in channels partially filled with a porous medium”, *Applied Scientific Research*, Vol. 56, 53–67.
- Lugo-Méndez, H. D., Valdés-Parada, F. J., y Ochoa-Tapia, J. A., Mayo 2010. “Modelo aproximado del coeficiente de dispersión en medios porosos”. En *Memorias del XXXI Encuentro Nacional de la AMIDIQ*, páginas 3256–3261, Huatulco, México, Mayo 2010. AMIDIQ.
- Lukisha, A. P. y Prisyakov, V. F., 2010. “The efficiency of round channels fitted with porous, highly heat-conducting insert in a laminar fluid coolant flow at boundary conditions of the third kind”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 53, 2469–2476.
- Marafie, A. y Vafai, K., 2001. “Analysis of non-Darcian effects on temperature differentials in porous media”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 44, 4401–441.
- Maxwell, J. C., 1873. *A treatise on electricity and magnetism*, volumen 1 de Clarendon Press. MacMillan and Co., Londres, 1 edición.
- Min, J. Y. y Kim, S. J., 2005. “A novel methodology for thermal analysis of a composite system consisting of a porous medium and a adjacent fluid layer”, *Journal of Heat Transfer*, Vol. 127, 648–656.
- Mohamad, A. A., 2003. “Heat transfer enhancements in heat exchangers fitted with porous media. Part I: Constant wall temperature”, *International Journal of Thermal Sciences*, Vol. 42, 385–395.
- Morales-Zárate, E., Valdés-Parada, F. J., Goyeau, B., y Ochoa-Tapia, J. A., 2008. “Diffusion and reaction in three-phase systems: Average Transport equations and jump boundary conditions”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 138, 307–332.
- Moyne, C., 1997. “Two-equation model for a diffusive process in porous media using the volume averaging method with an unsteady-state closure”, *Advances in Water Resources*, Vol. 20, No. 2-3, 63–76.
- Nakayama, A. y Kuwahara, F., 2008. “A general bioheat transfer model based on the theory of porous media”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 51, 3190–3199.

- Neale, G. y Nader, W., 1974. "Practical significance of Brinkman's extension of Darcy's law: Coupled parallel flows within a channel and a bounding porous medium", *Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol. 52, 475–478.
- Nield, D. A., 1998. "Effect of local thermal non-equilibrium in steady convective processes in a saturated porous media: Forced convection in a channel", *Journal of Porous Media*, Vol. 1, 181–186.
- Nozad, I., Carbonell, R. G., y Whitaker, S., 1985a. "Heat conduction in multiphase systems-I. Theory and experiment for two-phase systems", *Chemical Engineering Science*, Vol. 40, No. 5, 843–855.
- Nozad, I., Carbonell, R. G., y Whitaker, S., 1985b. "Heat conduction in multiphase systems-I. Experimental method and results for three-phase systems", *Chemical Engineering Science*, Vol. 40, No. 5, 843–855.
- Ochoa-Tapia, J. A. y Whitaker, S., 1995a. "Momentum transfer at the boundary between a porous medium and a homogeneous fluid. I- Theoretical development", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 38, No. 14, 2635–2646.
- Ochoa-Tapia, J. A. y Whitaker, S., 1995b. "Momentum transfer at the boundary between a porous medium and a homogeneous fluid- II. Comparison with experiment.", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 38, No. 14, 2647–2655.
- Ochoa-Tapia, J. A. y Whitaker, S., 1997a. "Heat transfer at the boundary between a porous medium and a homogeneous fluid", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 40, No. 11, 2691–2707.
- Ochoa-Tapia, J. A. y Whitaker, S., 1997b. "Momentum jump condition at the boundary between a porous medium and a homogeneous fluid: Inertial effects", *Journal of Porous Media*, Vol. 1, No. 3, 201–217.
- Ochoa-Tapia, J. A. y Whitaker, S., 1998. "Heat transfer at the boundary between a porous medium and a homogeneous fluid: The one-equation model", *Journal of Porous Media*, Vol. 1, No. 1, 31–46.

- Ochoa-Tapia, J. A., Stroeve, P., y Whitaker, S., 1994. “Diffusive transport in two phase-media: Spatially periodic models and Maxwell’s theory for isotropic and anisotropic systems”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 49, 709–726.
- Pavel, B. I. y Mohamad, A. A., 2004. “An experimental and numerical study on heat transfer enhancement for gas heat exchangers fitted with porous media”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 47, 4939–4952.
- Pereira-Duarte, S. I., Barreto, G. F., y Lemcoff, N. O., 1984a. “Comparison of two-dimensional models of fixed bed catalytic reactors”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 39, 1017–1024.
- Pereira-Duarte, S. I., Ferreti, O. A., y Lemcoff, N. O., 1984b. “A heterogeneous one-dimensional model for non-adiabatic fixed bed catalytic reactors”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 39, 1025–1031.
- Prat, M., 1989. “On the boundary conditions at the macroscopic level”, *Transport in Porous Media*, Vol. 4, 259–280.
- Prat, M., 1990. “Modelling of heat transfer by conduction in a transition region between a porous medium and a external fluid”, *Transport in Porous Media*, Vol. 5, 71–95.
- Prat, M., 1992. “Some refinements concerning the boundary conditions at the macroscopic level”, *Transport in Porous Media*, Vol. 7, 147–161.
- Quintard, M. y Whitaker, S., 1993. “One- and two-equation models for transient diffusion processes in two-phase systems”, *Advances in Heat Transfer*, Vol. 23, 369–464.
- Quintard, M. y Whitaker, S., 1995. “Local thermal equilibrium for transient heat conduction: theory and comparison with numerical experiments”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 38, No. 15, 2779–2796.
- Quintard, M., Kaviany, M., y Whitaker, S., 1997. “Two-medium treatment of heat transfer in porous media: numerical results for effective properties”, *Advances in Water Resources*, Vol. 20, No. 2-3, 77–94.
- Rayleigh, L., 1892. “On the influence of obstacles arranged in rectangular order upon the properties of a medium”, *Philosophical Magazine*, Vol. 34, 481–502.

-
- Richardson, S., 1971. “A model for the boundary condition of a porous material. Part 2”, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 49, No. 2, 327–336.
- Ross, S. M., 1983. “Theoretical model of the boundary condition at a fluid-porous interface”, *AIChE Journal*, Vol. 29, No. 5, 840–846.
- Ryan, D., Carbonell, R. G., y Whitaker, S., 1983. “A theory of diffusion and reaction in porous media”, *AIChE Symposium*, Vol. 71, 46–62.
- Saffman, P. G., 1971. “On the boundary condition at the surface of a porous medium”, *Studies in Applied Mathematics*, Vol. 2, 93–101.
- Sahraoui, M. y Kaviany, M., 1992. “Slip and no-slip velocity boundary conditions at interface of porous, plain media”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 35, 927–943.
- Sahraoui, M. y Kaviany, M., 1993. “Slip and no-slip temperature boundary conditions at interface of porous, plain media: Conduction”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 36, No. 4, 1019–1033.
- Sahraoui, M. y Kaviany, M., 1994. “Slip and no-slip temperature boundary conditions at the interface of porous, plain media: Convection”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 37, No. 6, 1029–1044.
- Shonnard, D. R. y Whitaker, S., 1989. “The effective thermal conductivity for a point-contact porous medium: an experimental study”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 32, No. 3, 503–512.
- Slattery, J. C., 1967a. “Flow of viscoelastic fluids through porous media”, *AIChE Journal*, Vol. 13, 1066–1071.
- Slattery, J. C., 1967b. “General balance equation for a phase interface”, *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, Vol. 6, No. 1, 108–115.
- Stone, H. A., 1990. “A simple derivation of the time-dependent convective-diffusion equation for surfactant transport along a deforming interface”, *Physics of Fluids A*, Vol. 2, No. 1, 111–112.

-
- Taylor, G. I., 1971. “A model for the boundary condition of a porous material. Part I”, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 49, No. 2, 319–326.
- Vafai, K. y Thiyagaraja, R., 1987. “Analysis of flow and heat transfer at the interface region of a porous medium”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 30, 1391–1405.
- Valdés-Parada, F. J., 2007. *Condiciones de frontera para el transporte entre medios multifásicos*. Tesis Doctoral, UAM-Iztapalapa, México, D.F.
- Valdés-Parada, F. J., 2010. “Integral formulation for the solution of closure problems in upscaling processes”, *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, Vol. 9, No. 1, 53–66.
- Valdés-Parada, F. J., Goyeau, B., y Ochoa-Tapia, J. A., 2006. “Diffusive mass transport between a microporous medium and a homogeneous fluid: Jump boundary conditions”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 61, 1692–1704.
- Valdés-Parada, F. J., Alvarez-Ramírez, J., y Ochoa-Tapia, J. A., 2007a. “Analysis of mass transport and reaction problems using Green’s functions”, *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, Vol. 6, No. 3, 283–294.
- Valdés-Parada, F. J., Goyeau, B., y Ochoa-Tapia, J. A., 2007b. “Jump momentum boundary condition at a fluid-porous dividing surface: Derivation of the closure problem”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 62, 4025–4039.
- Valdés-Parada, F. J., Ochoa-Tapia, J. A., y Alvarez-Ramírez, J., 2007c. “Diffusive mass transport in the fluid-porous medium inter-region: Closure problem solution for the one-domain approach”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 62, 6054–6068.
- Valdés-Parada, F. J., Sales-Cruz, A. M., Ochoa-Tapia, J. A., y Alvarez-Ramírez, J., 2008a. “An integral equation formulation for solving reaction-diffusion-convection boundary-value problems”, *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, Vol. 6, 1–20.
- Valdés-Parada, F. J., Sales-Cruz, M., Ochoa-Tapia, J. A., y Alvarez-Ramírez, J., 2008b. “On Green’s functions methods to solve nonlinear reaction-diffusion systems”, *Computers & Chemical Engineering*, Vol. 32, 503–511.

- Valdés-Parada, F. J., Alvarez-Ramírez, J., Goyeau, B., y Ochoa-Tapia, J. A., 2009a. “Jump condition for diffusive and convective mass transfer between a porous medium and a fluid involving adsorption and chemical reaction”, *Transport in Porous Media*, Vol. DOI: 10.1007/s11242-009-9343-z.
- Valdés-Parada, F. J., Alvarez-Ramírez, J., Goyeau, B., y Ochoa-Tapia, J. A., 2009b. “Computation of jump coefficients for momentum transfer between a porous medium and a fluid using a closed generalized transfer equation”, *Transport in Porous Media*, Vol. 78, 439–457.
- Valdés-Parada, F. J., Ochoa-Tapia, J. A., y Alvarez-Ramírez, J., 2009c. “Validity of the permeability Carman-Kozeny equation: A volume averaging approach”, *Physica A*, Vol. 388, 789–798.
- Veran, S., Aspa, Y., y Quintard, M., 2009. “Effective boundary conditions for rough reactive walls in laminar boundary layers”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 52, 3712–3725.
- Whitaker, S., 1967. “Diffusion and dispersion in porous media”, *AIChE Journal*, Vol. 13, 420–427.
- Whitaker, S., 1977. “Simultaneous heat, mass, and momentum transfer in porous media: A theory of drying”, *Advances in Heat Transfer*, Vol. 13, 119–203.
- Whitaker, S., 1980. “Heat and mass transfer in granular porous media”, *Advances in Drying*, Vol. 1, 23–61.
- Whitaker, S., 1986. “Multiphase transport phenomena: Matching theory and experiment”, *Advances in Multiphase Flow and Related Problems*, Vol. 1, 273–295.
- Whitaker, S., 1991. “Improved constraints for the principle of local thermal equilibrium”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Vol. 30, No. 5, 983–997.
- Whitaker, S., 1992. “The species mass jump condition at a singular surface”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 47, No. 7, 1677–1685.
- Whitaker, S., 1999. *The method of volume averaging*, volumen 13 de *Theory and applications of transport in porous media*. Kluwer Academic Publishers, Netherlands.

-
- Wood, B. D., 2009a. “The role of scaling laws in upscaling”, *Advances in Water Resources*, Vol. 32, 723–736.
- Wood, B. D., 2009b. “Taylor-Aris dispersion. An explicit example for understanding multiscale analysis via volume averaging”, *Chemical Engineering Education*, Vol. 43, No. 1, 29–38.
- Wood, B. D., Quintard, M., y Whitaker, S., 2000. “Jump conditions at a non-uniform boundaries: The catalytic surface”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 55, 5231–5245.
- Xin-Bi, T. y Fu-Chu, D., 2008. “Analytical solution for one-dimensional heat transfer equation of soil and evaluation for thermal diffusivity”, *Chinese Journal of Geotechnical Engineering*, Vol. 30, No. 5, 652–657.
- Yagi, S. y Kunii, D., 1960. “Studies on heat transfer near wall surface in packed beds”, *AIChE Journal*, Vol. 6, 97–104.
- Yang, C. y Nakayama, A., 2010. “A synthesis of tortuosity and dispersion in effective thermal conductivity of porous media”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 53, 3222–3230.
- Yang, Y. T. y Hwang, M. L., 2009. “Numerical simulation of turbulent fluid flow and heat transfer characteristics in heat exchangers fitted with porous media”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 52, 2956–2965.
- Zanotti, F. y Carbonell, R. G., 1984. “Development of transport equations for multiphase systems -III: Application to heat transfer in packed beds”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 39, 299–311.

En esta sección se presentan los detalles relacionados con el planteamiento y solución formal de los problemas de cerradura asociados con los modelos promedio.

A.1. Cerradura para el modelo de no equilibrio local térmico

De la Ecuación (2.13a) se deduce que,

$$\tilde{T}_\beta|_{\mathbf{r}_\beta} = T_\beta|_{\mathbf{r}_\beta} - \langle T_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{r}_\beta} \quad (\text{A.1})$$

Por lo tanto, la ecuación gobernante para las desviaciones de la temperatura se puede obtener restando la ecuación promedio (tomando $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{r}_\beta$),

$$\begin{aligned} (\rho c_P)_\beta \varepsilon_\beta(\mathbf{r}_\beta) \frac{\partial \langle T_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{r}_\beta}}{\partial t} = & -(\rho c_P)_\beta \nabla \cdot \left\langle \left(\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{r}_\beta} + \tilde{\mathbf{v}}_\beta|_{\mathbf{r}_\beta} \right) \left(\langle T_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{r}_\beta} + \tilde{T}_\beta|_{\mathbf{r}_\beta} \right) \right\rangle \\ & + \nabla \cdot \left[\varepsilon_\beta(\mathbf{r}_\beta) k_\beta \nabla \langle T_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{r}_\beta} + \frac{k_\beta}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{T}_\beta|_{\mathbf{r}_\beta} dA \right] \\ & + \frac{k_\beta}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \left(\nabla \langle T_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{r}_\beta} + \nabla \tilde{T}_\beta|_{\mathbf{r}_\beta} \right) dA \quad (\text{A.2}) \end{aligned}$$

a la ecuación gobernante puntual (también evaluada en \mathbf{r}_β),

$$(\rho c_P)_\beta \left[\frac{\partial T_\beta|_{\mathbf{r}_\beta}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_\beta T_\beta)|_{\mathbf{r}_\beta} \right] = \nabla \cdot (k_\beta \nabla T_\beta)|_{\mathbf{r}_\beta} \quad (\text{A.3})$$

El resultado puede expresarse como,

$$\begin{aligned} & (\rho c_P)_\beta \frac{\partial \tilde{T}_\beta}{\partial t} + (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \langle T_\beta \rangle^\beta - \langle \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \langle T_\beta \rangle^\beta \rangle^\beta) \\ & + (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \tilde{T}_\beta - \langle \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \tilde{T}_\beta \rangle^\beta) + (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{v}}_\beta \langle T_\beta \rangle^\beta - \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \langle T_\beta \rangle^\beta \rangle^\beta) \\ & + (\rho c_P)_\beta \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{v}}_\beta \tilde{T}_\beta - \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \tilde{T}_\beta \rangle^\beta) = \nabla \cdot (k_\beta \nabla \tilde{T}_\beta) - \varepsilon_\beta^{-1} \nabla \varepsilon_\beta \cdot (k_\beta \nabla \langle T_\beta \rangle^\beta) \\ & - \varepsilon_\beta^{-1} \nabla \cdot \left[\frac{k_\beta}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{T}_\beta dA \right] + \varepsilon_\beta^{-1} (\rho c_P)_\beta \nabla \varepsilon_\beta \cdot \langle \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \langle T_\beta \rangle^\beta \rangle^\beta \\ & + \varepsilon_\beta^{-1} (\rho c_P)_\beta \nabla \varepsilon_\beta \cdot \langle \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \tilde{T}_\beta \rangle^\beta + \varepsilon_\beta^{-1} (\rho c_P)_\beta \nabla \varepsilon_\beta \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \langle T_\beta \rangle^\beta \rangle^\beta \\ & + \varepsilon_\beta^{-1} (\rho c_P)_\beta \nabla \varepsilon_\beta \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \tilde{T}_\beta \rangle^\beta - \frac{\varepsilon_\beta^{-1} k_\beta}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\nabla \langle T_\beta \rangle^\beta + \nabla \tilde{T}_\beta) dA \quad (\text{A.4}) \end{aligned}$$

Aquí se ha simplificado la nomenclatura, pero debe enfatizarse que cada término está evaluado en la posición \mathbf{r}_β .

Cabe señalar que la Ecuación (A.4) contiene fuentes promedio locales y no locales. Esto puede ser un inconveniente cuando el problema de cerradura se sustituya en la GTE de la fase- β , Ecuación (2.14), debido a que el campo de la temperatura promedio dependería de integrales de área y de volumen de ella misma. Para sobrellevar este aspecto se proponen las siguientes expansiones en series de Taylor para $\psi_\beta = \mathbf{v}_\beta, T_\beta$,

$$\langle \psi_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{r}_\beta} = \underbrace{\langle \psi_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{x}}}_{\mathcal{O}(\langle \psi_\beta \rangle^\beta)} + \underbrace{\mathbf{y}_\beta \cdot \nabla \langle \psi_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{x}}}_{\mathcal{O}(\frac{r_0}{L} \langle \psi_\beta \rangle^\beta)} + \underbrace{\frac{1}{2} \mathbf{y}_\beta \mathbf{y}_\beta : \nabla \nabla \langle \psi_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{x}}}_{\mathcal{O}(\frac{r_0^2}{L^2} \langle \psi_\beta \rangle^\beta)} + \dots \quad (\text{A.5a})$$

$$\nabla \langle \psi_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{r}_\beta} = \underbrace{\nabla \langle \psi_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{x}}}_{\mathcal{O}(\nabla \langle \psi_\beta \rangle^\beta)} + \underbrace{\mathbf{y}_\beta \cdot \nabla \nabla \langle \psi_\beta \rangle^\beta|_{\mathbf{x}}}_{\mathcal{O}(\frac{r_0}{L} \nabla \langle \psi_\beta \rangle^\beta)} + \dots \quad (\text{A.5b})$$

Aquí se han incluido los estimados de orden de magnitud de los primeros términos de las series. Nótese que en estos estimados se ha supuesto que la longitud característica asociada a las variaciones espaciales de $\langle \psi_\beta \rangle^\beta$ y $\nabla \langle \psi_\beta \rangle^\beta$ son del mismo orden de magnitud, la cual se

toma como la longitud característica del sistema, L . Además, con el propósito de resolver el problema de cerradura, se imponen las siguientes restricciones de escala,

$$r_0 \ll L \quad (\text{A.6a})$$

$$r_0^2 \ll L^2 \quad (\text{A.6b})$$

De tal manera que las Ecuaciones (A.5) conducen a que

$$\mathbf{O} \left(\langle \psi_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{r}_\beta} - \langle \psi_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \right) \ll 1 \quad (\text{A.7a})$$

$$\mathbf{O} \left(\nabla \langle \psi_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{r}_\beta} - \nabla \langle \psi_\beta \rangle^\beta \Big|_{\mathbf{x}} \right) \ll 1 \quad (\text{A.7b})$$

Estos resultados permiten remover cantidades promedio de las integrales de área y de volumen. Bajo estas condiciones la Ecuación (A.4) se reduce a

$$\begin{aligned} & (\rho_{CP})_\beta \frac{\partial \tilde{T}_\beta}{\partial t} + (\rho_{CP})_\beta \nabla \cdot (\mathbf{v}_\beta \tilde{T}_\beta) + (\rho_{CP})_\beta \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{v}}_\beta \langle T_\beta \rangle^\beta) - (\rho_{CP})_\beta \nabla \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \tilde{T}_\beta \rangle^\beta \\ &= \nabla \cdot (k_\beta \nabla \tilde{T}_\beta) - \varepsilon_\beta^{-1} \nabla \cdot \left[\frac{k_\beta}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{T}_\beta dA \right] + \varepsilon_\beta^{-1} (\rho_{CP})_\beta \nabla \varepsilon_\beta \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \langle T_\beta \rangle^\beta) \\ &+ \varepsilon_\beta^{-1} (\rho_{CP})_\beta \nabla \varepsilon_\beta \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \tilde{T}_\beta \rangle^\beta - \frac{\varepsilon_\beta^{-1} k_\beta}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \tilde{T}_\beta dA \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

En la Ecuación (A.8) se entiende que las cantidades promedio ya están evaluadas en la posición \mathbf{x} . Además, se ha impuesto la siguiente restricción en el promedio de las desviaciones espaciales,

$$\langle \tilde{\psi}_\beta \rangle^\beta = 0, \quad \psi_\beta = \mathbf{v}_\beta, T_\beta \quad (\text{A.9})$$

lo cual permite acotar el nivel de valores de las desviaciones espaciales.

Ahora, con el objetivo de simplificar aún mas la Ecuación (A.8), se afirma con base en la ecuación de continuidad,

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\beta = 0, \quad \text{en la fase-}\beta \quad (\text{A.10})$$

que el promedio intrínseco de la velocidad satisface la expresión:

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta = -\varepsilon_\beta^{-1} \nabla \varepsilon_\beta \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \quad (\text{A.11})$$

Así, restando la Ecuación (A.11) a la (A.10) se tiene que,

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}_\beta = \varepsilon_\beta^{-1} \nabla \varepsilon_\beta \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta, \quad \text{en la fase-}\beta \quad (\text{A.12})$$

Con base en estos resultados se tienen las siguientes identidades,

$$(\rho_{cP})_\beta \nabla \cdot (\mathbf{v}_\beta \tilde{T}_\beta) = (\rho_{cP})_\beta \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \tilde{T}_\beta \quad (\text{A.13a})$$

$$(\rho_{cP})_\beta \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{v}}_\beta \langle T_\beta \rangle^\beta) = (\rho_{cP})_\beta \varepsilon_\beta^{-1} \nabla \varepsilon_\beta \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \langle T_\beta \rangle^\beta + (\rho_{cP})_\beta \tilde{\mathbf{v}}_\beta \cdot \nabla \langle T_\beta \rangle^\beta \quad (\text{A.13b})$$

Además, nótese que

$$\varepsilon_\beta^{-1} (\rho_{cP})_\beta \nabla \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \tilde{T}_\beta \rangle = (\rho_{cP})_\beta \nabla \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \tilde{T}_\beta \rangle^\beta + \varepsilon_\beta^{-1} (\rho_{cP})_\beta \nabla \varepsilon_\beta \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \tilde{T}_\beta \rangle^\beta \quad (\text{A.14})$$

Sustituyendo las Ecuaciones (A.13) y (A.14) en (A.8) se tiene,

$$\begin{aligned} (\rho_{cP})_\beta \left(\frac{\partial \tilde{T}_\beta}{\partial t} + \underbrace{\mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \tilde{T}_\beta}_{\mathcal{O}((\rho_{cP})_\beta v_\beta \tilde{T}_\beta / \ell_\beta)} + \tilde{\mathbf{v}}_\beta \cdot \nabla \langle T_\beta \rangle^\beta \right) &= \underbrace{k_\beta \nabla^2 \tilde{T}_\beta}_{\mathcal{O}(k_\beta \tilde{T}_\beta / \ell_\beta^2)} - \underbrace{\varepsilon_\beta^{-1} \nabla \cdot \left[\frac{k_\beta}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{T}_\beta dA \right]}_{\mathcal{O}(k_\beta \tilde{T}_\beta / (L \ell_\beta \varepsilon_\beta))} \\ &+ \underbrace{\varepsilon_\beta^{-1} (\rho_{cP})_\beta \nabla \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \tilde{T}_\beta \rangle}_{\mathcal{O}((\rho_{cP})_\beta v_\beta \tilde{T}_\beta / (L \varepsilon_\beta))} - \frac{\varepsilon_\beta^{-1} k_\beta}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \tilde{T}_\beta dA, \quad \text{en la fase-}\beta \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Aquí nuevamente se han agregado el estimado del orden de magnitud de algunos términos. En este análisis se ha tomado en cuenta la condición de no deslizamiento de la velocidad, lo cual conduce a que $v_\beta = \mathbf{O}(\tilde{v}_\beta)$. De los estimados de orden de magnitud de la Ecuación (A.15), y considerando la restricción de escala,

$$\ell_\beta \ll L \quad (\text{A.16})$$

entonces se pueden afirmar las siguientes desigualdades

$$\varepsilon_\beta^{-1} \nabla \cdot \left[\frac{k_\beta}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{T}_\beta dA \right] \ll k_\beta \nabla^2 \tilde{T}_\beta \quad (\text{A.17a})$$

$$\varepsilon_\beta^{-1} \nabla \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \tilde{T}_\beta \rangle \ll \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \tilde{T}_\beta \quad (\text{A.17b})$$

Esto permite simplificar la Ecuación (A.15) a

$$(\rho_{cP})_\beta \left(\frac{\partial \tilde{T}_\beta}{\partial t} + \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \tilde{T}_\beta + \tilde{\mathbf{v}}_\beta \cdot \nabla \langle T_\beta \rangle^\beta \right) = k_\beta \nabla^2 \tilde{T}_\beta$$

$$-\frac{\varepsilon_\beta^{-1}k_\beta}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \tilde{T}_\beta dA, \quad \text{en la fase-}\beta \quad (\text{A.18})$$

Como una simplificación final, se limita el análisis a situaciones en la cual las desviaciones espaciales de la temperatura se pueden suponer en estado cuasi-estacionario. La restricción asociada con esta simplificación es,

$$\frac{\ell_\beta^2/k_\beta}{\frac{v_\beta \ell_\beta}{k_\beta} + 1} \ll t^* \quad (\text{A.19})$$

De esta manera, la Ecuación (A.18) toma su forma final

$$(\rho_{CP})_\beta \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \tilde{T}_\beta + \underbrace{(\rho_{CP})_\beta \tilde{\mathbf{v}}_\beta \cdot \nabla \langle T_\beta \rangle^\beta}_{\text{Fuente convectiva}} = k_\beta \nabla^2 \tilde{T}_\beta - \frac{\varepsilon_\beta^{-1}k_\beta}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \tilde{T}_\beta dA, \quad \text{en la fase-}\beta \quad (\text{A.20})$$

Se puede desarrollar un análisis similar a la ecuación gobernante de la fase- σ , lo cual conduce a la ecuación gobernante para las desviaciones espaciales de la fase sólida,

$$0 = k_\sigma \nabla^2 \tilde{T}_\sigma - \frac{\varepsilon_\sigma^{-1}k_\sigma}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \tilde{T}_\sigma dA, \quad \text{en la fase-}\sigma \quad (\text{A.21})$$

Las Ecuaciones (A.20) y (A.21) están acopladas por las condiciones de frontera interfacial,

$$\tilde{T}_\beta = \tilde{T}_\sigma + \underbrace{\langle T_\sigma \rangle^\sigma - \langle T_\beta \rangle^\beta}_{\text{Fuente interfacial}}, \quad \text{en } A_{\beta\sigma} \quad (\text{A.22a})$$

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla \tilde{T}_\beta = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\sigma \nabla \tilde{T}_\sigma + \underbrace{\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\beta \nabla \langle T_\beta \rangle^\beta - \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot k_\sigma \nabla \langle T_\sigma \rangle^\sigma}_{\text{Fuentes conductivas}}, \quad \text{en } A_{\beta\sigma} \quad (\text{A.22b})$$

las cuales resultan de sustituir la descomposición espacial de la temperatura, Ecuación (2.13a), en las Ecuaciones (2.3). Para completar el problema de valor en la frontera de las desviaciones de la temperatura, es necesario establecer las condiciones de frontera en las entradas y salidas del dominio de solución en la dirección tangente a la superficie divisoria, la cual separa al medio poroso de la región de solo fluido. Cabe señalar que no se tiene la intención de resolver el problema en la frontera macroscópica por completo, para evitar esto, se asume que una geometría periódica es una representación suficientemente precisa

de las condiciones de frontera externas. Esto con el propósito de resolver los problemas de cerradura. Esta suposición constituye una ley de escalamiento en el sentido de Wood (2009a) y da lugar a las siguientes condiciones de frontera periódicas,

$$\tilde{T}_i(\mathbf{r} + \mathbf{l}_j) = \tilde{T}_i(\mathbf{r}), \quad i = \beta, \sigma; \quad j = 1, 2 \quad (\text{A.23})$$

La solución formal del problema de valor en la frontera dado por las Ecuaciones (A.20)-(A.23) puede llevarse a cabo usando formulaciones integrales basadas en funciones de Green (véase por ejemplo Valdés-Parada, 2010), y las expresiones resultantes para el campo de desviaciones se pueden escribir como,

$$\tilde{T}_\beta = \mathbf{b}_{\beta\beta} \cdot \nabla \langle T_\beta \rangle^\beta + \mathbf{b}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \langle T_\sigma \rangle^\sigma - s_\beta \left(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) \quad (\text{A.24a})$$

$$\tilde{T}_\sigma = \mathbf{b}_{\sigma\beta} \cdot \nabla \langle T_\beta \rangle^\beta + \mathbf{b}_{\sigma\sigma} \cdot \nabla \langle T_\sigma \rangle^\sigma + s_\sigma \left(\langle T_\sigma \rangle^\sigma - \langle T_\beta \rangle^\beta \right) \quad (\text{A.24b})$$

lo cual es consistente con trabajos previos (Ochoa-Tapia y Whitaker, 1997a; Quintard y Whitaker, 1993; Quintard y col., 1997). En las Ecuaciones (A.24), las variables $\mathbf{b}_{\beta\beta}$, $\mathbf{b}_{\beta\sigma}$, $\mathbf{b}_{\sigma\beta}$, $\mathbf{b}_{\sigma\sigma}$, s_β y s_σ son las llamadas *variables de cerradura* y representan integrales de las funciones de Green asociadas, tal como se explica en detalle en el trabajo de Valdés-Parada (2010). Las variables de cerradura se determinan resolviendo los problemas de valor en la frontera correspondientes, los cuales resultan de sustituir las Ecuaciones (A.24) en las Ecuaciones (A.20)-(A.23). Estos problemas son:

Problema I:

$$\text{En } V_\beta, \quad (\rho c_P)_\beta (\mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \mathbf{b}_{\beta\beta} + \tilde{\mathbf{v}}_\beta) = k_\beta \nabla^2 \mathbf{b}_{\beta\beta} - (\rho c_P)_\beta \varepsilon_\beta^{-1} \mathbf{c}_{\beta\beta} \quad (\text{A.25a})$$

$$\text{En } V_\sigma, \quad \mathbf{0} = k_\sigma \nabla^2 \mathbf{b}_{\sigma\beta} - (\rho c_P)_\sigma \varepsilon_\sigma^{-1} \mathbf{c}_{\sigma\beta} \quad (\text{A.25b})$$

$$\text{En } A_{\beta\sigma}, \quad \mathbf{n}_{\beta\sigma} k_\beta + \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (k_\beta \nabla \mathbf{b}_{\beta\beta}) = \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (k_\sigma \nabla \mathbf{b}_{\sigma\beta}) \quad (\text{A.25c})$$

$$\text{En } A_{\beta\sigma}, \quad \mathbf{b}_{\beta\beta} = \mathbf{b}_{\sigma\beta} \quad (\text{A.25d})$$

$$\text{Periodicidad,} \quad \mathbf{b}_{\beta\beta}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{b}_{\beta\beta}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2 \quad (\text{A.25e})$$

$$\text{Periodicidad,} \quad \mathbf{b}_{\sigma\beta}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{b}_{\sigma\beta}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2 \quad (\text{A.25f})$$

$$\text{Restricción,} \quad \langle \mathbf{b}_{\beta\beta} \rangle = \mathbf{0} \quad (\text{A.25g})$$

$$\text{Restricción,} \quad \langle \mathbf{b}_{\sigma\beta} \rangle = \mathbf{0} \quad (\text{A.25h})$$

$$\mathbf{c}_{\beta\beta} = \frac{\alpha_\beta}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{b}_{\beta\beta} dA \quad (\text{A.25i})$$

$$\mathbf{c}_{\sigma\beta} = \frac{\alpha_\sigma}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \nabla \mathbf{b}_{\sigma\beta} dA \quad (\text{A.25j})$$

$$(\rho_{CP})_\beta \mathbf{c}_{\beta\beta} = -(\rho_{CP})_\sigma \mathbf{c}_{\sigma\beta} \quad (\text{A.25k})$$

Problema II:

$$\text{En } V_\beta, \quad (\rho_{CP})_\beta \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \mathbf{b}_{\beta\sigma} = k_\beta \nabla^2 \mathbf{b}_{\beta\sigma} - (\rho_{CP})_\beta \varepsilon_\beta^{-1} \mathbf{c}_{\beta\sigma} \quad (\text{A.26a})$$

$$\text{En } V_\sigma, \quad \mathbf{0} = k_\sigma \nabla^2 \mathbf{b}_{\sigma\sigma} - (\rho_{CP})_\sigma \varepsilon_\sigma^{-1} \mathbf{c}_{\sigma\sigma} \quad (\text{A.26b})$$

$$\text{En } A_{\beta\sigma}, \quad \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (k_\beta \nabla \mathbf{b}_{\beta\sigma}) = \mathbf{n}_{\beta\sigma} k_\sigma + \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (k_\sigma \nabla \mathbf{b}_{\sigma\sigma}) \quad (\text{A.26c})$$

$$\text{En } A_{\beta\sigma}, \quad \mathbf{b}_{\beta\sigma} = \mathbf{b}_{\sigma\sigma} \quad (\text{A.26d})$$

$$\text{Periodicidad,} \quad \mathbf{b}_{\beta\sigma}(\mathbf{r} + l_i) = \mathbf{b}_{\beta\sigma}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2 \quad (\text{A.26e})$$

$$\text{Periodicidad,} \quad \mathbf{b}_{\sigma\sigma}(\mathbf{r} + l_i) = \mathbf{b}_{\sigma\sigma}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2 \quad (\text{A.26f})$$

$$\text{Restricción,} \quad \langle \mathbf{b}_{\beta\sigma} \rangle = \mathbf{0} \quad (\text{A.26g})$$

$$\text{Restricción,} \quad \langle \mathbf{b}_{\sigma\sigma} \rangle = \mathbf{0} \quad (\text{A.26h})$$

$$\mathbf{c}_{\beta\sigma} = \frac{\alpha_\beta}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{b}_{\beta\sigma} dA \quad (\text{A.26i})$$

$$\mathbf{c}_{\sigma\sigma} = \frac{\alpha_\sigma}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \nabla \mathbf{b}_{\sigma\sigma} dA \quad (\text{A.26j})$$

$$(\rho_{CP})_\beta \mathbf{c}_{\beta\sigma} = -(\rho_{CP})_\sigma \mathbf{c}_{\sigma\sigma} \quad (\text{A.26k})$$

Problema III:

$$\text{En } V_\beta, \quad (\rho_{CP})_\beta \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla s_\beta = k_\beta \nabla^2 s_\beta - \varepsilon_\beta^{-1} h_\beta \quad (\text{A.27a})$$

$$\text{En } V_\sigma, \quad 0 = k_\sigma \nabla^2 s_\sigma + \varepsilon_\sigma^{-1} h_\sigma \quad (\text{A.27b})$$

$$\text{En } A_{\beta\sigma}, \quad \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (k_\beta \nabla s_\beta) = \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (k_\sigma \nabla s_\sigma) \quad (\text{A.27c})$$

$$\text{En } A_{\beta\sigma}, \quad s_\beta = s_\sigma + 1 \quad (\text{A.27d})$$

$$\text{Periodicidad,} \quad s_\beta(\mathbf{r} + l_i) = s_\beta(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2 \quad (\text{A.27e})$$

$$\text{Periodicidad,} \quad s_\sigma(\mathbf{r} + l_i) = s_\sigma(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2 \quad (\text{A.27f})$$

$$\text{Restricción,} \quad \langle s_\beta \rangle = 0 \quad (\text{A.27g})$$

$$\text{Restricción,} \quad \langle s_\sigma \rangle = 0 \quad (\text{A.27h})$$

$$h_\beta = \frac{k_\beta}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla s_\beta dA \quad (\text{A.27i})$$

$$h_\sigma = -\frac{k_\sigma}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \nabla s_\sigma dA \quad (\text{A.27j})$$

$$h_\beta = h_\sigma = a_v h \quad (\text{A.27k})$$

Las Ecuaciones (A.25k) y (A.26k), son una consecuencia directa de integrar en la interfase $A_{\beta\sigma}$ y dividir entre \mathcal{V} las condiciones de frontera para el flux de calor en los problemas I y II respectivamente, Ecuaciones (A.25c) y (A.26c). Sin embargo, cabe señalar que para la derivación de dichas expresiones se consideró que,

$$\int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} dA = 0 \quad (\text{A.28})$$

Estrictamente, no existe dificultad alguna en satisfacer la ecuación anterior para los casos en que se tienen partículas simétricas en la celda unitaria de solución. Sin embargo, se debe tener cuidado cuando se tienen partículas asimétricas. En esta situación las Ecuaciones (A.25k) y (A.26k) no son válidas.

Computacionalmente es fácil resolver los problemas I y II, sin embargo, particularmente en el problema III la condición interfacial $s_\beta = s_\sigma + 1$ es difícil de satisfacer en Comsol Multiphysics®. Para atacar este problema se hace el siguiente cambio de variable

$$s_\beta = a_v h s_\beta^0 \quad (\text{A.29a})$$

$$s_\sigma = a_v h s_\sigma^0 - 1 \quad (\text{A.29b})$$

Esta superposición se basa en que los términos no locales en las Ecuaciones (A.27a) y (A.27b) se consideran constantes debido a la imposición de las condiciones de periodicidad. Así, las Ecuaciones (A.29) producen el siguiente problema de cerradura alterno,

Problema IIIa:

$$\text{En } V_\beta, \quad (\rho c_P)_\beta \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla s_\beta^0 = k_\beta \nabla^2 s_\beta^0 - \varepsilon_\beta^{-1} \quad (\text{A.30a})$$

$$\text{En } V_\sigma, \quad 0 = k_\sigma \nabla^2 s_\sigma^0 + \varepsilon_\sigma^{-1} \quad (\text{A.30b})$$

$$\text{En } A_{\beta\sigma}, \quad \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (k_\beta \nabla s_\beta^0) = \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (k_\sigma \nabla s_\sigma^0) \quad (\text{A.30c})$$

$$\text{En } A_{\beta\sigma}, \quad s_\beta^0 = s_\sigma^0 \quad (\text{A.30d})$$

$$\text{Periodicidad,} \quad s_\beta^0(\mathbf{r} + l_i) = s_\beta^0(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2 \quad (\text{A.30e})$$

$$\text{Periodicidad,} \quad s_\sigma^0(\mathbf{r} + l_i) = s_\sigma^0(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2 \quad (\text{A.30f})$$

$$\text{Restricción,} \quad \langle s_\beta^0 \rangle^\beta = 0 \quad (\text{A.30g})$$

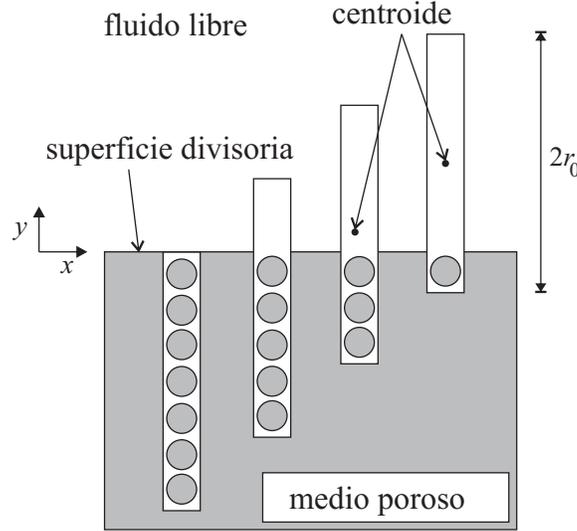


Figura A.1. Celdas unitarias representativas de la inter-región en diferentes posiciones.

y por lo tanto, a partir de las Ecuaciones (A.29b) y (A.27h) es fácil deducir que el coeficiente de transferencia de calor se calcula a partir del campo de s_σ^0 ,

$$a_v h = \frac{1}{\langle s_\sigma^0 \rangle_\sigma} \quad (\text{A.31})$$

Los problemas I, II y IIIa se resuelven en varias celdas unitarias que toman en cuenta las drásticas variaciones geométricas en la inter-región, tales como las mostradas en la Figura A.1 donde el medio poroso es representado como un arreglo periódico de cilindros aislados (véase Figura 3.1). La altura de la celda unitaria se selecciona de tal manera que cuando se localiza en la superficie divisoria, se obtienen resultados consistentes y no varían significativamente con el número de partículas involucradas. De hecho, el tamaño de la celda unitaria debe ser tal que se garantice que las siguientes condiciones de frontera sean satisfechas en el fondo y en la parte superior de la celda unitaria,

$$\text{En } y = +r_0, \quad \phi_{ji} = 0 \quad (\text{A.32a})$$

$$\text{En } y = -r_0, \quad \begin{cases} \frac{\partial \phi_{ji}}{\partial y} = 0, & \text{Para el componente } x \text{ de los problemas I y II, y el problema escalar IIIa} \\ \phi_{ji} = 0, & \text{Para el componente } y \text{ de los problemas I y II} \end{cases} \quad (\text{A.32b})$$

$$\phi = \mathbf{b}, s; \quad j, i = \beta, \sigma; \quad \text{solo un subíndice si } \phi = s$$

La condición frontera de la Ecuación (A.32a) se origina de imponer que en la posición $y = +r_0$ las desviaciones espaciales de la temperatura son cero debido a que el centroide del

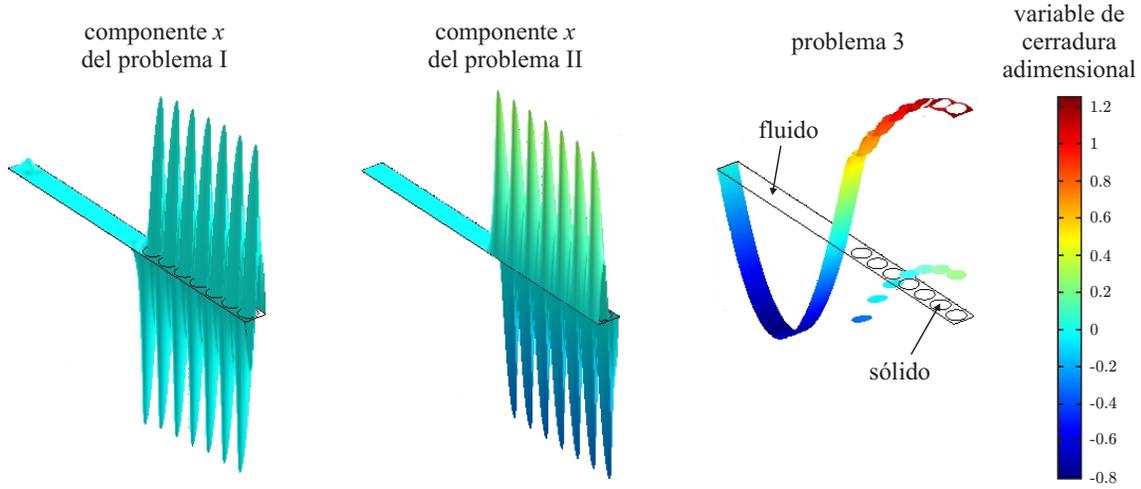


Figura A.2. Ejemplos del campo de las variables de cerradura en celdas representativas de la inter-región. $Pe_{\text{cell}} = 0.01$, $\kappa = 10$ and $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$.

REV se localiza en la región del fluido homogéneo. Además, las Ecuaciones (A.32b) plantean condiciones de simetría (derivada igual a cero) y antisimetría (campo igual a cero) en el lado de la celda unitaria que se encuentra en contacto con el medio poroso homogéneo, cuando se resuelven los componentes x y y de los problemas I y II. Nótese que en el problema escalar IIIa solo se imponen condiciones de simetría. Se encontró que una celda que contiene 10 partículas es suficiente para obtener resultados consistentes, sin embargo con el fin de tener más datos discretos en la inter-región se seleccionó una celda con 15 partículas.

Para ilustrar la forma típica de las variables de cerradura, en la Figura A.2 se presentan ejemplos de las variables $(b_{\beta\beta})_x/\ell_{\text{cell}}$ y $(b_{\sigma\beta})_x/\ell_{\text{cell}}$ relacionadas con el problema I; $(b_{\beta\sigma})_x/\ell_{\text{cell}}$ y $(b_{\sigma\sigma})_x/\ell_{\text{cell}}$ del problema II; y s_β y s_σ del problema III. Nótese que, en general, las variables de cerradura relacionadas con el problema III presentan valores mayores en comparación con el resto de las variables de cerradura. Además, en el problema III se ilustra el salto en el campo de la variable en la interface fluido-sólido, mientras que en el problema I y II la discontinuidad ocurre en la derivada de las variables de cerradura. Cabe señalar que las variables relacionadas con los problemas I y II toman prácticamente el valor de cero en la región de solo fluido.

Para concluir, a continuación se presentan las expresiones de los coeficientes efectivos involucrados en las Ecuaciones (2.17) y (2.20), en términos de las variables de cerradura derivadas en esta sección.

Para la ecuación del fluido:

$$\mathbf{K}_{\beta\beta}^*(\mathbf{x}) = k_\beta \left(\varepsilon_\beta(\mathbf{x})\mathbf{I} + \frac{1}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b}_{\beta\beta} dA \right) - (\rho c_p)_\beta \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \mathbf{b}_{\beta\beta} \rangle \Big|_{\mathbf{x}} \quad (\text{A.33a})$$

$$\mathbf{K}_{\beta\sigma}^*(\mathbf{x}) = \frac{k_\beta}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b}_{\beta\sigma} dA - (\rho c_p)_\beta \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \mathbf{b}_{\beta\sigma} \rangle \Big|_{\mathbf{x}} \quad (\text{A.33b})$$

$$\mathbf{u}_{\beta\beta}^*(\mathbf{x}) = \frac{\alpha_\beta}{\gamma} \left(\int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{b}_{\beta\beta} dA - \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} s_\beta dA \right) + \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta s_\beta \rangle \Big|_{\mathbf{x}} \quad (\text{A.33c})$$

$$\mathbf{u}_{\beta\sigma}^*(\mathbf{x}) = \frac{\alpha_\beta}{\gamma} \left(\int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{b}_{\beta\sigma} dA + \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} s_\beta dA \right) - \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta s_\beta \rangle \Big|_{\mathbf{x}} \quad (\text{A.33d})$$

$$a_v h(\mathbf{x}) = \frac{k_\beta}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla s_\beta dA = -\frac{k_\sigma}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \nabla s_\sigma dA \quad (\text{A.33e})$$

Para la ecuación del sólido:

$$\mathbf{K}_{\sigma\beta}(\mathbf{x}) = \frac{k_\sigma}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \mathbf{b}_{\sigma\beta} dA \quad (\text{A.34a})$$

$$\mathbf{K}_{\sigma\sigma}(\mathbf{x}) = k_\sigma \left(\varepsilon_\sigma(\mathbf{x})\mathbf{I} + \frac{1}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \mathbf{b}_{\sigma\sigma} dA \right) \quad (\text{A.34b})$$

$$\mathbf{u}_{\sigma\beta}(\mathbf{x}) = \frac{\alpha_\sigma}{\gamma} \left(\int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \nabla \mathbf{b}_{\sigma\beta} dA - \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\sigma\beta} s_\sigma dA \right) \quad (\text{A.34c})$$

$$\mathbf{u}_{\sigma\sigma}(\mathbf{x}) = \frac{\alpha_\sigma}{\gamma} \left(\int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \nabla \mathbf{b}_{\sigma\sigma} dA + \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\sigma\beta} s_\sigma dA \right) \quad (\text{A.34d})$$

Aquí α_i representa la difusividad térmica de la fase- i .

A.2. Modelo de equilibrio local térmico

En esta sección se plantea el problema de cerradura para el modelo de equilibrio local térmico. Dada la expresión de equilibrio

$$\langle T_\beta \rangle^\beta = \langle T_\sigma \rangle^\sigma = \langle T \rangle \quad (\text{A.35})$$

Entonces, se puede reducir la expresión formal de las desviaciones espaciales de la temperatura del fluido y del sólido,

$$\tilde{T}_\beta = (\mathbf{b}_{\beta\beta} + \mathbf{b}_{\beta\sigma}) \cdot \nabla \langle T \rangle \quad (\text{A.36a})$$

$$\tilde{T}_\sigma = (\mathbf{b}_{\sigma\beta} + \mathbf{b}_{\sigma\sigma}) \cdot \nabla \langle T \rangle \quad (\text{A.36b})$$

La Ecuación (A.36) expresa la idea de que, bajo la condición de equilibrio, las desviaciones espaciales de la temperatura del fluido y del fluido se pueden encontrar resolviendo solo un problema de cerradura. Dicho problema de cerradura resulta de sumar los problemas I y II. Debido a que la fuente que origina al problema III (y por lo tanto también al problema IIIa) es la diferencia de temperaturas promedio del fluido y del sólido, se tiene que con la suposición de equilibrio el problema III desaparece.

Si se hace el cambio de variable,

$$\mathbf{b}_\beta = \mathbf{b}_{\beta\beta} + \mathbf{b}_{\beta\sigma} \quad (\text{A.37a})$$

$$\mathbf{b}_\sigma = \mathbf{b}_{\sigma\beta} + \mathbf{b}_{\sigma\sigma} \quad (\text{A.37b})$$

entonces el problema de cerradura resultante bajo la condición de equilibrio local térmico es,

$$\text{En } V_\beta, \quad (\rho c_P)_\beta (\mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta + \tilde{\mathbf{v}}_\beta) = k_\beta \nabla^2 \mathbf{b}_\beta - (\rho c_P)_\beta \varepsilon_\beta^{-1} \mathbf{c}_\beta \quad (\text{A.38a})$$

$$\text{En } V_\sigma, \quad \mathbf{0} = k_\sigma \nabla^2 \mathbf{b}_\sigma - (\rho c_P)_\sigma \varepsilon_\sigma^{-1} \mathbf{c}_\sigma \quad (\text{A.38b})$$

$$\text{En } A_{\beta\sigma}, \quad \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (k_\beta \nabla \mathbf{b}_\beta) = \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (k_\sigma \nabla \mathbf{b}_\sigma) + \mathbf{n}_{\beta\sigma} (k_\sigma - k_\beta) \quad (\text{A.38c})$$

$$\text{En } A_{\beta\sigma}, \quad \mathbf{b}_\beta = \mathbf{b}_\sigma \quad (\text{A.38d})$$

$$\text{Periodicidad,} \quad \mathbf{b}_\beta(\mathbf{r} + l_i) = \mathbf{b}_\beta(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2 \quad (\text{A.38e})$$

$$\text{Periodicidad,} \quad \mathbf{b}_\sigma(\mathbf{r} + l_i) = \mathbf{b}_\sigma(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2 \quad (\text{A.38f})$$

$$\text{Restricción,} \quad \langle \mathbf{b}_\beta \rangle = \mathbf{0} \quad (\text{A.38g})$$

$$\text{Restricción,} \quad \langle \mathbf{b}_\sigma \rangle = \mathbf{0} \quad (\text{A.38h})$$

$$\mathbf{c}_\beta = \frac{\alpha_\beta}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta dA \quad (\text{A.38i})$$

$$\mathbf{c}_\sigma = \frac{\alpha_\sigma}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \nabla \mathbf{b}_\sigma dA \quad (\text{A.38j})$$

$$(\rho c_P)_\beta \mathbf{c}_\beta = -(\rho c_P)_\sigma \mathbf{c}_\sigma \quad (\text{A.38k})$$

Ahora, dada la definición del tensor de dispersión térmico total,

$$\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) = \mathbf{K}_{\beta\beta}^*(\mathbf{x}) + \mathbf{K}_{\beta\sigma}^*(\mathbf{x}) + \mathbf{K}_{\sigma\beta}(\mathbf{x}) + \mathbf{K}_{\sigma\sigma}(\mathbf{x}) \quad (\text{A.39})$$

entonces, utilizando la definición para cada tensor térmico en el modelo de no equilibrio y las Ecuaciones (A.37), se obtiene después de cierto arreglo algebraico la expresión para el tensor de dispersión térmico total en función del único problema de cerradura,

$$\mathbf{K}_{eff}^*(\mathbf{x}) = [k_\beta \varepsilon_\beta(\mathbf{x}) + k_\sigma \varepsilon_\sigma(\mathbf{x})] \mathbf{I} + \frac{k_\beta - k_\sigma}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}(\mathbf{x})} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b}_\beta dA - (\rho c_P)_\beta \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle \Big|_{\mathbf{x}} \quad (\text{A.40})$$

La Ecuación (A.40) es similar a la reportada por Whitaker (1999, Ecuación 2.5-2) en el estudio del transporte de calor solo por conducción. Sin embargo, la diferencia sustancial está en el término dispersivo debido a la existencia de transporte de calor por convección.

Un procedimiento similar puede hacerse para el vector tipo-velocidad total,

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}_{\beta\beta}^*(\mathbf{x}) + \mathbf{u}_{\beta\sigma}^*(\mathbf{x}) + \frac{(\rho c_P)_\sigma}{(\rho c_P)_\beta} [\mathbf{u}_{\sigma\beta}(\mathbf{x}) + \mathbf{u}_{\sigma\sigma}(\mathbf{x})] \quad (\text{A.41})$$

Si se sustituyen las definiciones para cada vector velocidad de la Ecuación (A.41) y los cambios de variable de la Ecuación (A.37) eventualmente se llega a que,

$$\mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (\text{A.42})$$

Debe enfatizarse que este resultado solo es posible bajo las siguientes condiciones:

- Cuando es válido el principio de equilibrio local térmico, incluso en la inter-región.
- Son válidas en el REV las expresiones

$$\frac{k_\beta}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{b}_{\beta\beta} dA = -\frac{k_\sigma}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \nabla \mathbf{b}_{\sigma\beta} dA \quad (\text{A.43a})$$

$$\frac{k_\beta}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{b}_{\beta\sigma} dA = -\frac{k_\sigma}{\gamma} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\sigma} \cdot \nabla \mathbf{b}_{\sigma\beta} dA \quad (\text{A.43b})$$

La validez de estas ecuaciones se discutió al final de la Sección anterior.

APÉNDICE B

DEPENDENCIA ESPACIAL DE COEFICIENTES EFECTIVOS

En esta sección se presenta la dependencia espacial de los coeficientes efectivos involucrados en los modelos promedio de equilibrio y no equilibrio local térmico en el Capítulo 2. Con el fin de ser breves y concisos, en el Capítulo 3 se presentó únicamente la dependencia espacial de los coeficientes efectivos con mayor orden de magnitud bajo ciertas condiciones. La información restante cuando el medio poroso se modela como un arreglo periódico de cilindros aislados se presenta a continuación.

B.1. Tensores térmicos

El análisis comienza presentando la dependencia espacial de los tensores térmicos efectivos como función de la porosidad del medio poroso homogéneo. Los siguientes resultados se calcularon considerando que el transporte por conducción predomina sobre el de convección. De esta manera, los tensores térmicos tienen ordenes de magnitud comparables y el efecto de la porosidad es más notorio.

De las simulaciones llevadas a cabo, se concluye que todos los elementos fuera de la diagonal principal de los tensores térmicos son despreciables en comparación con los elementos de la diagonal. En otras palabras, para cualquier condición bajo la cual se lleva a cabo el transporte de calor se puede afirmar que,

$$(K)_{xy}, (K)_{yx} \ll (K)_{xx}, (K)_{yy}, \quad K = K_{\beta\beta}^*, K_{\beta\sigma}^*, K_{\sigma\beta}, K_{\sigma\sigma}, K_{eff}^* \quad (\text{B.1})$$

En este caso, como se trabajó en configuraciones en 2D cada tensor térmico efectivo

tiene cuatro elementos. No obstante, las mismas afirmaciones pueden sugerirse para configuraciones tridimensionales.

En la Figura B.1a se presenta el efecto de la porosidad sobre el tensor térmico $\mathbf{K}_{\beta\beta}^*$. En este caso, el valor mínimo de la porosidad utilizado es 0.4 debido a las altas exigencias computacionales requeridas para resolver los problemas de cerradura para valores de la porosidad menores. Para el modelo de no equilibrio, éste es el único coeficiente efectivo que toma el valor de k_β en el seno de la región de solo fluido, es decir, en $y/r_0 \geq 1$. Como se esperaba, a medida que el valor de la porosidad se acerca a 1, el coeficiente efectivo tiende al valor de k_β debido a que el volumen promediante contiene principalmente fluido. A diferencia de los tensores térmicos restantes, los elementos de la diagonal de $\mathbf{K}_{\beta\beta}^*$ tienen prácticamente el mismo valor, es decir,

$$(K_{\beta\beta}^*)_{xx} \cong (K_{\beta\beta}^*)_{yy}, \text{ para } \text{Pe}_{\text{cell}} < 1 \quad (\text{B.2})$$

Cabe señalar que, con base en las simulaciones llevadas a cabo, para condiciones predominantemente conductivas ($\text{Pe}_{\text{cell}} < 1$) la dependencia espacial de los elementos diagonales de $\mathbf{K}_{\beta\beta}^*$ solo dependen de la porosidad y de la conductividad térmica de los materiales.

El resto de los tensores térmicos para el modelo de no equilibrio son mostrados en las Figuras B.1b y c. Generalmente, se puede afirmar que los tensores térmicos cruzados son iguales, es decir,

$$\mathbf{K}_{\beta\sigma}^* = \mathbf{K}_{\sigma\beta} \quad (\text{B.3})$$

Contrario al tensor $\mathbf{K}_{\beta\beta}^*$, los elementos longitudinales (componentes xx) de $\mathbf{K}_{\beta\sigma}^*$, $\mathbf{K}_{\sigma\beta}$ y $\mathbf{K}_{\sigma\sigma}$ son ligeramente diferentes a sus contrapartes transversales (componentes yy). Por ejemplo, se tiene que $(K_{\sigma\sigma})_{xx} \neq (K_{\sigma\sigma})_{yy}$. Esta diferencia aumenta a medida que la porosidad disminuye. Además, todos éstos tensores térmicos toman el valor de cero en el seno de la región de solo fluido. Esto se debe, a que en sus definiciones (Ecuaciones (A.33b), (A.34a) y (A.34b)) se involucra la presencia de la fase sólida, la cual no existe en la región del fluido. Esta situación, además, explica el hecho que valores bajos de la porosidad conducen a valores bajos de los tensores térmicos.

Finalmente, en la Figura B.1d se presenta la dependencia espacial del tensor térmico total \mathbf{K}_{eff}^* involucrado en el modelo de equilibrio local térmico en función de la porosidad. Nótese que en este caso, el valor del coeficiente efectivo toma el valor k_β a medida que se predice cerca del seno de la región de solo fluido. Esta situación ocurre debido a que en la celda

de solución solo existe la fase- β . Además, se encontró que el valor del coeficiente efectivo en el seno del medio poroso incrementa cuando la porosidad disminuye. Esto sucede para $\kappa > 1$ debido a que la muestra promediante contiene principalmente sólido. El caso contrario también es cierto para $\kappa < 1$. De la misma manera, se pueden utilizar líneas rectas para ajustar la dependencia espacial de $(K_{eff}^*)_{xx}$ en la inter-región similar a la Ecuación (3.2a) del Capítulo 3.

Si se acepta que los elementos diagonales de los tensores térmicos presentados en la Figura B.1 son iguales entre sí, entonces se puede escribir que,

$$\mathbf{K} \cong (K)_{xx} \mathbf{I}, \text{ para } \text{Pe}_{\text{cell}} < 1, \quad K = K_{\beta\beta}^*, K_{\beta\sigma}^*, K_{\sigma\beta}, K_{\sigma\sigma}, K_{eff}^* \quad (\text{B.4})$$

En otras palabras, bajo régimen conductivo los tensores térmicos de los modelos de equilibrio y de no equilibrio son isotrópicos.

Tal como se discutió en el Capítulo 3, solo el coeficiente $(K_{\beta\beta}^*)_{xx}$ es afectado significativamente por el número de Péclet. De hecho, la dependencia espacial en la inter-región de dicho coeficiente efectivo está fuertemente influenciada por el flujo en la dirección tangente a la frontera medio poroso-fluido, al grado que puede aumentar varios órdenes de magnitud tal como se muestra en la Figura 3.4. Además, dado que el tensor de dispersión térmico total en el modelo de equilibrio local térmico representa la suma de los tensores térmicos involucrados en el modelo de no equilibrio, es razonable considerar para $\text{Pe}_{\text{cell}} > 1$ el componente- xx de \mathbf{K}_{eff}^* es igual a $(K_{\beta\beta}^*)_{xx}$.

B.2. Coeficiente de transferencia de calor

Ahora se analiza al coeficiente de transferencia de calor intersticial $a_v h$. Dicho coeficiente efectivo presenta una débil dependencia con el número de Péclet y una moderada influencia de la porosidad y de la relación de conductividades térmicas. La dependencia espacial de $a_v h$ en función de κ se presentó en la Figura 3.5 del Capítulo 3, por lo que en esta sección solo se presenta la funcionalidad que tiene con la porosidad. En la Figura B.2 se observa que el valor máximo de $a_v h$ se tiene en el seno del medio poroso, es decir, en $y/r_0 \leq -1$, y rápidamente disminuye hasta alcanzar el valor de cero en el seno de la región de solo fluido ($y/r_0 \geq +1$). Esto es consistente con la física del problema debido a que solo debe existir de transporte interfacial de calor cuando se hallan al menos dos fases en la muestra promediante. Cabe señalar que los valores correspondientes al seno de la región poroso, son similares a

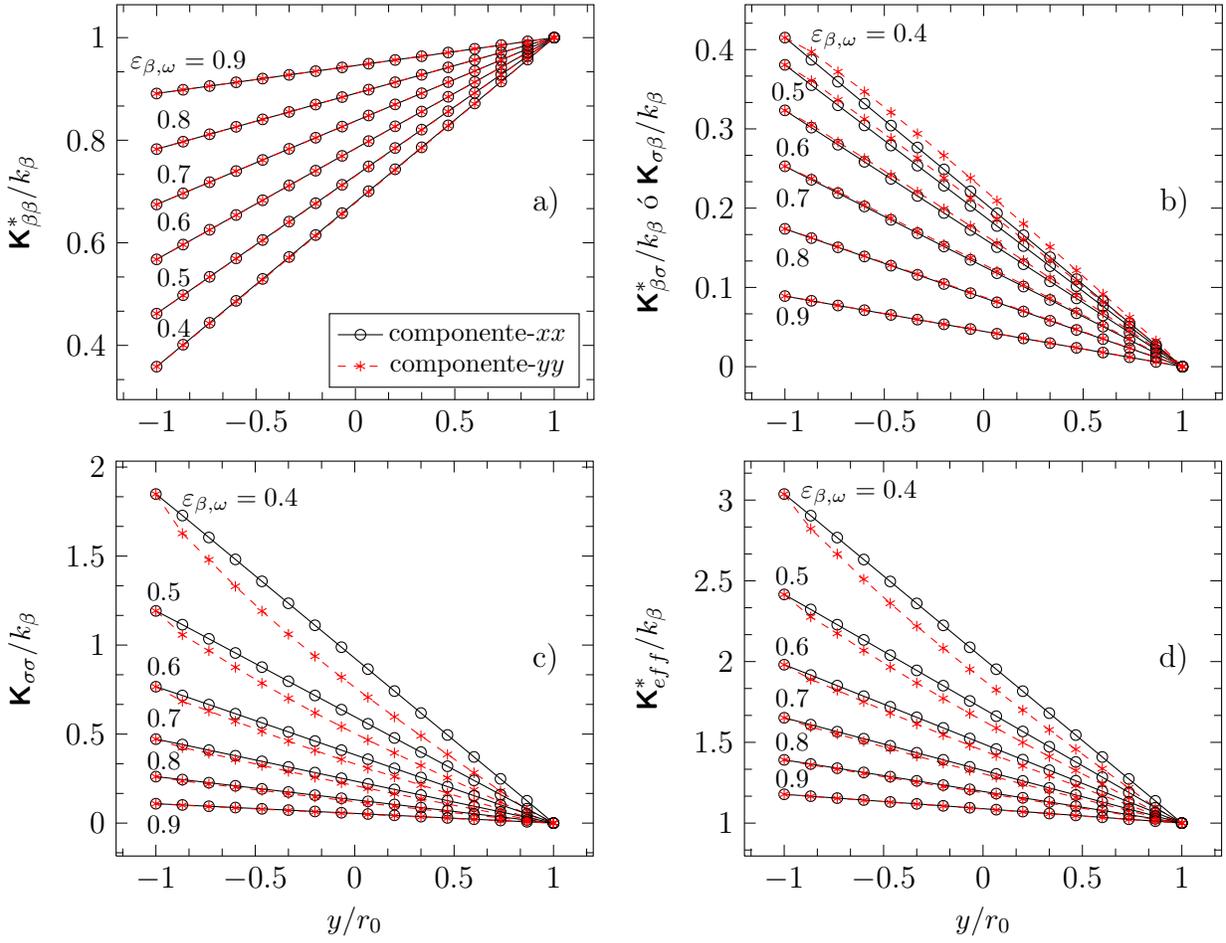


Figura B.1. Dependencia espacial de los tensores térmicos en función de la porosidad tomando $Pe_{cell} = 0.01$ y $\kappa = 10$. a) $\mathbf{K}_{\beta\beta}^*$, b) $\mathbf{K}_{\beta\sigma}^*$, c) $\mathbf{K}_{\sigma\sigma}$ y d) \mathbf{K}_{eff}^* .

los reportados por Quintard y col. (1997) en el estudio de transporte de calor en un medio poroso homogéneo bajo el modelo de no equilibrio local térmico. Finalmente, obsérvese que valores bajos de la porosidad conducen a valores ligeramente mayores de $a_v h$ en el medio poroso. Esta situación se revierte rápidamente a medida que se evaluá en la inter-región. En otras palabras, los valores mayores corresponden a valores de la porosidad cercanas a 1.

B.3. Coeficientes efectivos tipo-convectivo

Los últimos coeficientes efectivos que se estudian son los vectores tipo-convectivo $\mathbf{u}_{\beta\beta}^*$, $\mathbf{u}_{\beta\sigma}^*$, $\mathbf{u}_{\sigma\beta}$ y $\mathbf{u}_{\sigma\sigma}$. Dependiendo de la intensidad de flujo y de la relación de conductividades

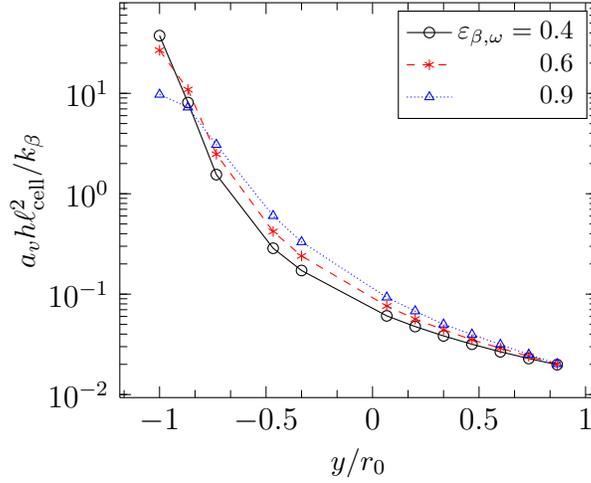


Figura B.2. Dependencia espacial de $a_v h$ en función de la porosidad, $Pe_{\text{cell}} = 0.01$ y $\kappa = 10$.

térmicas, la funcionalidad de tales coeficientes se puede resumir de la siguiente manera.

$Pe_{\text{cell}} < 1$ y $\kappa < 1$. Los componentes- y predominan sobre los componentes- x y, en general, se tienen las siguientes relaciones de ordenes de magnitud:

$$\mathbf{O}((u_{\beta\beta}^*)_y) > \mathbf{O}((\mathbf{u}_{\beta\sigma}^*)_y) \quad (\text{B.5a})$$

$$\mathbf{O}((u_{\sigma\beta})_y) > \mathbf{O}((\mathbf{u}_{\sigma\sigma})_y) \quad (\text{B.5b})$$

$$\mathbf{O}((\rho c_P)_\beta (u_{\beta\beta}^*)_y) \gg \mathbf{O}((\rho c_P)_\sigma (u_{\sigma\beta})_y) \quad (\text{B.5c})$$

Nótese que la última expresión es dependiente de la relación de capacidades caloríficas de las fases presentes, y por lo tanto, podría revertirse dependiendo de dicha relación. De esta manera, con base en las Ecuaciones (B.5) se puede afirmar que el término predominante es únicamente $(\rho c_P)_\beta (u_{\beta\beta}^*)_y$.

$Pe_{\text{cell}} < 1$ y $\kappa > 1$. Una vez más los componentes- y presentan valores más grandes que los componentes- x y, en general, se tienen las siguientes relaciones:

$$\mathbf{O}((u_{\beta\beta}^*)_y) \ll \mathbf{O}((u_{\beta\sigma}^*)_y) \quad (\text{B.6a})$$

$$\mathbf{O}((u_{\sigma\beta})_y) \ll \mathbf{O}((u_{\sigma\sigma})_y) \quad (\text{B.6b})$$

$$\mathbf{O}(((\rho c_P)_\beta (u_{\beta\sigma}^*)_y)) \ll \mathbf{O}((\rho c_P)_\sigma (u_{\sigma\sigma})_y) \quad (\text{B.6c})$$

De esta manera, el parámetro predominante es solamente $(\rho c_P)_\sigma (u_{\sigma\sigma})_y$.

$Pe_{\text{cell}} > 1$ y $\kappa < 1$. En este caso, excepto para $(u_{\sigma\sigma})_y$, los componentes- x presentan valores mayores que los componentes- y y, en general, se pueden afirmar las siguientes relaciones de

ordenes de magnitud:

$$\mathbf{O}((u_{\beta\beta}^*)_x) = \mathbf{O}((u_{\beta\sigma}^*)_x) \quad (\text{B.7a})$$

$$\mathbf{O}((u_{\sigma\beta})_x) \gg \mathbf{O}((u_{\sigma\sigma})_y) \quad (\text{B.7b})$$

$$\mathbf{O}\left((\rho c_P)_\beta (u_{\beta\beta}^*)_x\right) \gg \mathbf{O}\left((\rho c_P)_\sigma (u_{\sigma\beta})_x\right) \quad (\text{B.7c})$$

Así, considerando estas relaciones los coeficientes más importantes son $(\rho c_P)_\beta (u_{\beta\beta}^*)_x$ y $(\rho c_P)_\beta (u_{\beta\sigma}^*)_x$

Pe_{cell} > 1 y κ > 1. Una vez más, excepto para $(u_{\sigma\sigma})_y$, los componentes- x predominan sobre los componentes- y . En este caso, las relaciones de ordenes de magnitud son:

$$\mathbf{O}((u_{\beta\beta}^*)_x) = \mathbf{O}((u_{\beta\sigma}^*)_x) \quad (\text{B.8a})$$

$$\mathbf{O}((u_{\sigma\beta})_x) \gg \mathbf{O}((u_{\sigma\sigma})_y) \quad (\text{B.8b})$$

$$\mathbf{O}\left((\rho c_P)_\beta (u_{\beta\beta}^*)_x\right) \ll \mathbf{O}\left((\rho c_P)_\sigma (u_{\sigma\beta})_x\right) \quad (\text{B.8c})$$

Con base en estas expresiones, se puede afirmar que el más importante coeficiente efectivo es solamente $(\rho c_P)_\sigma (u_{\sigma\beta})_x$.

De esta forma, independientemente de las condiciones que se encuentren en el problema de transporte de calor, es razonable descartar a los coeficientes efectivos $(u_{\beta\sigma}^*)_y$, $(u_{\sigma\beta})_y$ y $(u_{\sigma\sigma})_x$. Para los coeficientes restantes, en la Figura B.3 se presenta la dependencia que tienen con la porosidad del medio poroso homogéneo. Cabe señalar que los coeficientes toman el valor de cero en la región de fluido debido principalmente a dos razones:

1. En su definición, los coeficientes tipo-convectivo contienen integrales de área sobre la interface sólido-fluido y (algunos) un término de dispersión hidrodinámica. Debido a que estos dos tipos de términos no existen en la región de fluido entonces desaparecen.
2. No tiene sentido utilizar el modelo de no equilibrio local térmico, el cual involucra una ecuación promedio para el fluido y otra para el sólido, en la región de fluido debido a que allí solo existe una fase. Así, se requiere que la ecuación correspondiente para el sólido desaparezca, y también los términos acoplados de la ecuación del fluido.

En general, nótese de la Figura B.3 que la porosidad tiene una influencia moderada sobre los coeficientes tipo-convectivo, excepto para $(u_{\sigma\sigma})_y$. Dicha influencia se puede resumir en la siguiente manera:

- $(u_{\beta\beta}^*)_x$ se incrementa de manera negativa al aumentar la porosidad, véase la Figura B.3a.
- $(u_{\beta\beta}^*)_y$ disminuye al aumentar la porosidad, véase la Figura B.3b.
- $(u_{\beta\sigma}^*)_x$ incrementa con la porosidad, véase la Figura B.3c.
- $(u_{\sigma\beta})_x$ incrementa con la porosidad, véase la Figura B.3d.
- $(u_{\sigma\sigma})_y$ disminuye con la porosidad, véase la Figura B.3e.

Estos tipos de coeficientes presentan un comportamiento complejo en la inter-región. Por ejemplo, algunos de ellos generalmente tienen valores positivos, otros negativos, y otros incluso como $(u_{\sigma\sigma})_y$, tienen valores positivos y negativos. Esta característica dificulta el ajustarlos a alguna curva, y por esta razón no se lleva a cabo esta tarea.

En la Figura B.4 se presenta el efecto de la relación de conductividades térmicas sobre los coeficientes efectivos tipo-convectivo más relevantes. Por un lado, se observa que los componentes- x presentan un valor máximo en las cercanías del seno de la región de fluido, mientras que los componentes- y lo tienen cerca del seno del medio poroso homogéneo. Esta característica es consistente con la física del problema, debido a que la dirección de flujo del fluido es tangente a la frontera macroscópica medio poroso-fluido, es decir, la dirección x . Por lo tanto, los componentes- x son más influenciados por los efectos de convección. Como el transporte por convección es mayor en la región de fluido, entonces se espera que los componentes- x tengan un valor máximo en esta zona. Por otro lado, como ya se mencionó, los componentes- y presentan el valor máximo cerca del medio poroso homogéneo porque en esta zona la presencia del sólido tiene una mayor influencia que los efectos convectivos, lo cual favorece la conducción efectiva y el intercambio de calor interfacial.

El efecto de κ sobre los coeficientes tipo-convectivo se puede resumir en la siguiente manera:

- $(u_{\beta\beta}^*)_x$ disminuye cuando $\kappa < 1$ y alcanza un valor asintótico para $\kappa > 1$, véase la Figura B.4a.
- $(u_{\beta\beta}^*)_y$ no tiene un comportamiento bien definido con el valor de κ . Cuando $\kappa < 1$ tiene valores positivos y negativos significativos a través de la inter-región, y cuando $\kappa > 1$ éste parámetro disminuye rápidamente pero solamente presentando valores negativos, véase la Figura B.4b.

- $(u_{\beta\sigma}^*)_x$ disminuye cuando $\kappa < 1$ y alcanza un valor asintótico cuando $\kappa > 1$, véase la Figura B.4c. De hecho, obsérvese que para $\kappa = 10$ y 100 los resultados colapsan en la misma curva.
- $(u_{\sigma\beta})_x$ incrementa rápidamente cuando $\kappa > 1$ y, eventualmente, desaparece cuando $\kappa < 1$, véase la Figura B.4d.
- $(u_{\sigma\sigma})_y$ eventualmente desaparece para $\kappa < 1$ e incrementa rápidamente para $\kappa > 1$ adquiriendo valores positivos y negativos significativos a través de la inter-región, véase la Figura B.4d.

Ahora el análisis se centra en el efecto del número de Péclet de celda sobre los coeficientes efectivos tipo-convectivo. Se espera que al aumentar la intensidad de flujo se incrementen los componentes longitudinales y disminuyan los componentes transversales. Esto se debe a que el calor se transporta principalmente en la dirección x . Así, se encontró que al aumentar el número de Péclet los coeficientes $(u_{\beta\beta}^*)_x$, $(u_{\beta\sigma}^*)_x$ y $(u_{\sigma\sigma})_x$ incrementaron rápidamente. Para el caso opuesto, en tasas de flujo bajas los valores de $(u_{\beta\beta}^*)_y$ y $(u_{\sigma\sigma})_y$ se incrementaron tal como se muestra en la Figura B.5.

Para finalizar esta sección, se enfatiza que la dependencia espacial del vector tipo-convectivo total del modelo de equilibrio local térmico, \mathbf{u} , no se presenta debido a que éste se puede inferir a partir de los coeficientes correspondientes del modelo de no equilibrio. En este punto, se conoce que dependiendo del par de valores del número de Péclet y de la relación de conductividades térmicas, solo algunos componentes son los más relevantes en relación con sus órdenes de magnitud. Con el objetivo de ser más explícito acerca de esto último, se escriben las siguientes expresiones:

$$\mathbf{u} \approx \begin{bmatrix} 0 \\ (u_{\beta\beta}^*)_y \end{bmatrix}, \quad \text{cuando } \text{Pe}_{\text{cell}} < 1 \text{ y } \kappa < 1 \quad (\text{B.9a})$$

$$\mathbf{u} \approx \begin{bmatrix} 0 \\ (u_{\sigma\sigma})_y \frac{(\rho c_P)_\sigma}{(\rho c_P)_\beta} \end{bmatrix}, \quad \text{cuando } \text{Pe}_{\text{cell}} < 1 \text{ y } \kappa > 1 \quad (\text{B.9b})$$

$$\mathbf{u} \approx \begin{bmatrix} (u_{\beta\beta}^*)_x + (u_{\beta\sigma}^*)_x \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \text{cuando } \text{Pe}_{\text{cell}} > 1 \text{ y } \kappa < 1 \quad (\text{B.9c})$$

$$\mathbf{u} \approx \begin{bmatrix} 0 \\ (u_{\sigma\beta})_x \frac{(\rho c_P)_\sigma}{(\rho c_P)_\beta} \end{bmatrix}, \quad \text{cuando } \text{Pe}_{\text{cell}} > 1 \text{ y } \kappa > 1 \quad (\text{B.9d})$$

Aquí se ha utilizado la notación vectorial $\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_x \\ u_y \end{bmatrix}$.

Cabe señalar, que en las Figuras B.3-B.5 los coeficientes efectivos tipo-convectivo han sido normalizados con la norma del campo de velocidad evaluada en el seno del medio poroso homogéneo, $\langle v_\beta \rangle_\omega^\beta$. Como se muestra en dichas figuras, en algunas posiciones en la inter-región éstos coeficientes presentan valores muy grandes, pero esto no significa que sean mucho mayores a la velocidad promedio local. En otras palabras, se encontró que, generalmente, los coeficientes tipo-convectivo son mucho más pequeños que la velocidad promedio debido a que,

$$\langle v_\beta \rangle_\omega^\beta \ll \langle v_\beta \rangle, \text{ en la inter-región} \quad (\text{B.10})$$

Lo cual lleva a la posibilidad de descartar la contribución de dichos coeficientes con fines de simulación.

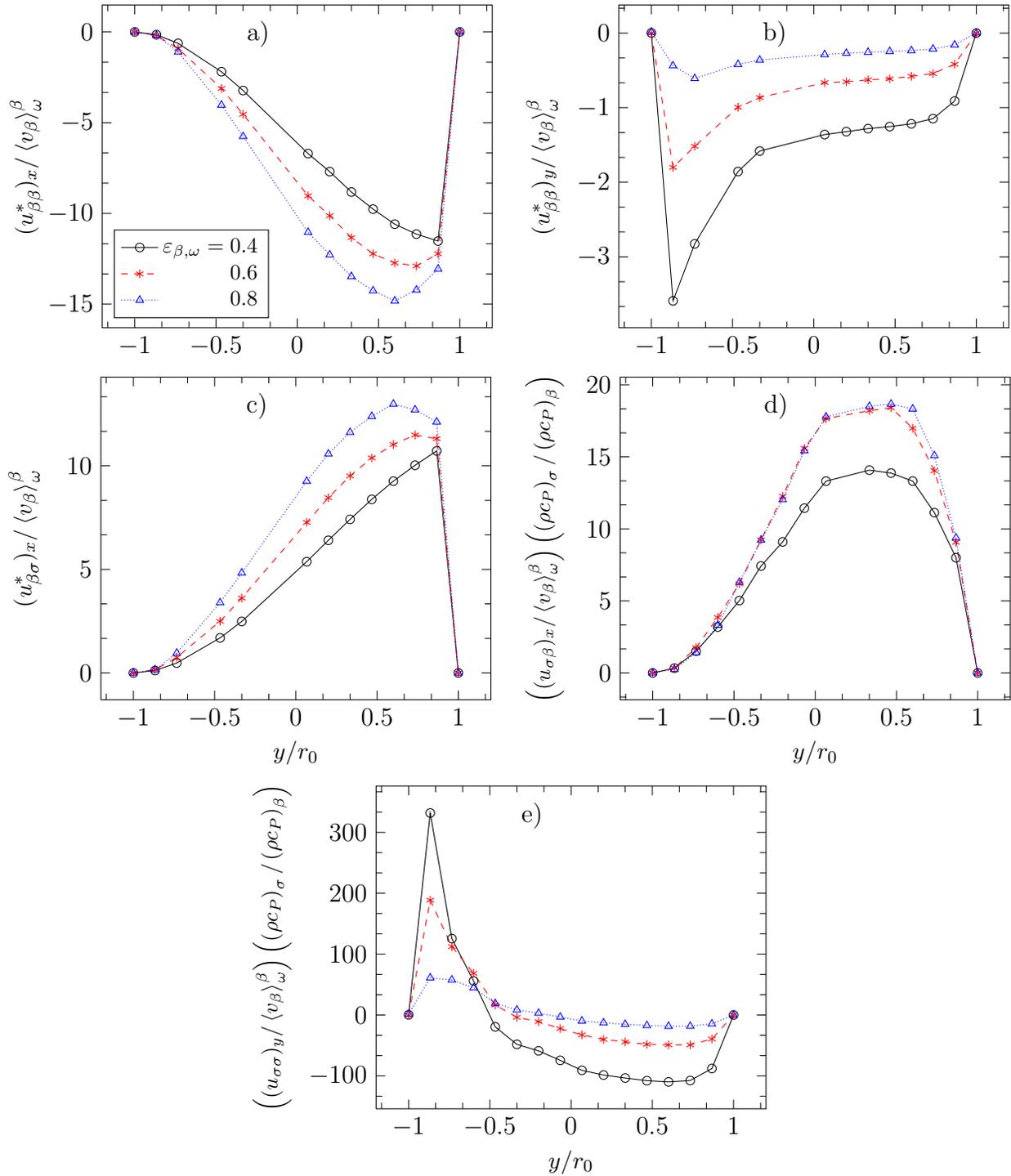


Figura B.3. Efecto de la porosidad sobre: a) $(u_{\beta\beta}^*)_x$ tomando $\text{Pe}_{\text{cell}} = 1$, b) $(u_{\beta\beta}^*)_y$ tomando $\text{Pe}_{\text{cell}} = 0.01$, c) $(u_{\beta\sigma}^*)_x$ tomando $\text{Pe}_{\text{cell}} = 1$, d) $(u_{\sigma\beta})_x$ tomando $\text{Pe}_{\text{cell}} = 1$ y e) $(u_{\sigma\sigma})_y$ tomando $\text{Pe}_{\text{cell}} = 0.01$. En todos los casos se tomó $\kappa = 10$.

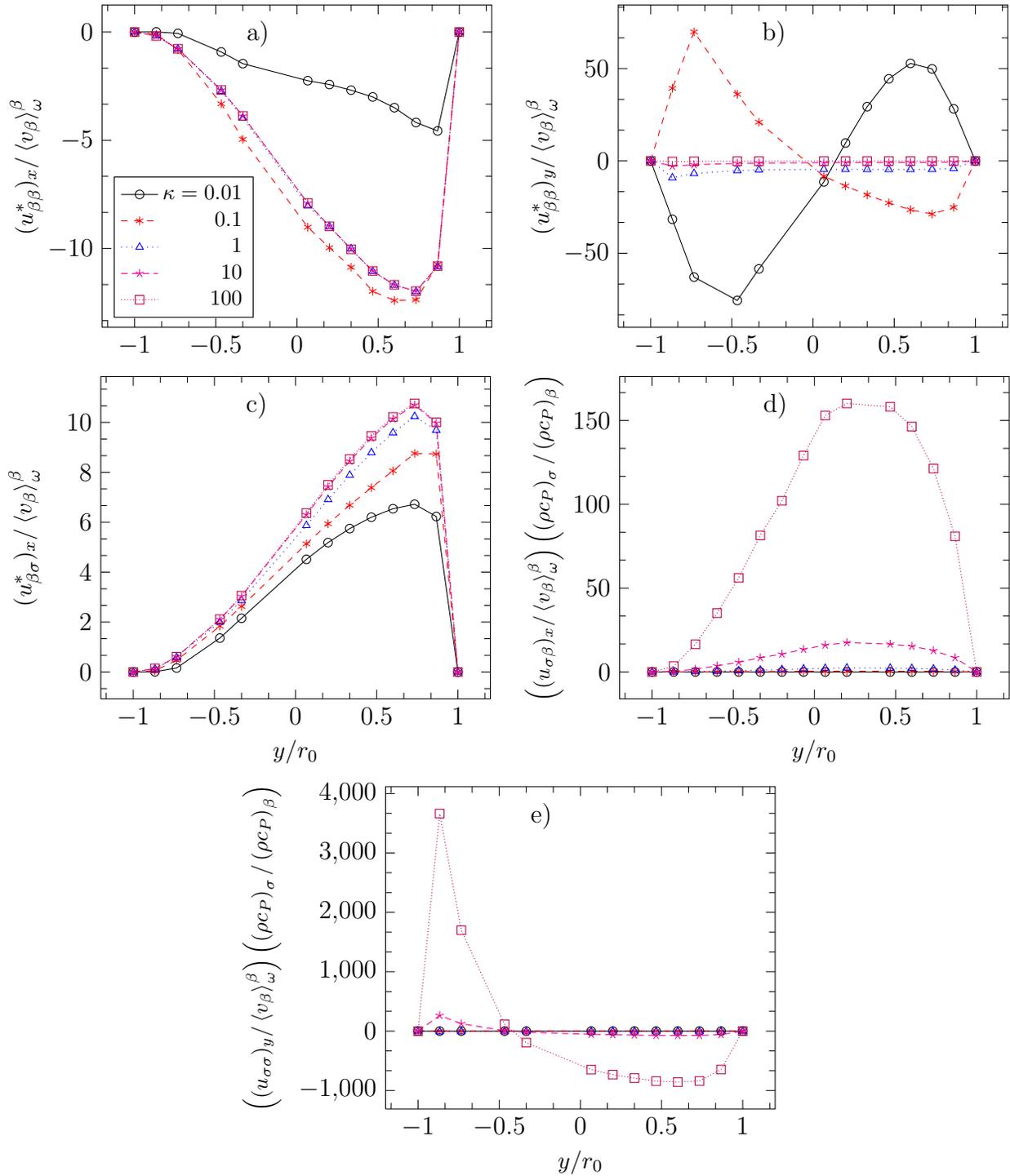


Figura B.4. Efecto de la relación de conductividades térmicas sobre: a) $(u_{\beta\beta}^*)_x$ tomando $Pe_{\text{cell}} = 1$, b) $(u_{\beta\beta}^*)_y$ tomando $Pe_{\text{cell}} = 0.01$, c) $(u_{\beta\sigma}^*)_x$ tomando $Pe_{\text{cell}} = 1$, d) $(u_{\sigma\beta})_x$ tomando $Pe_{\text{cell}} = 1$ y e) $(u_{\sigma\sigma})_y$ tomando $Pe_{\text{cell}} = 0.01$. En todos los casos se utilizó $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$.

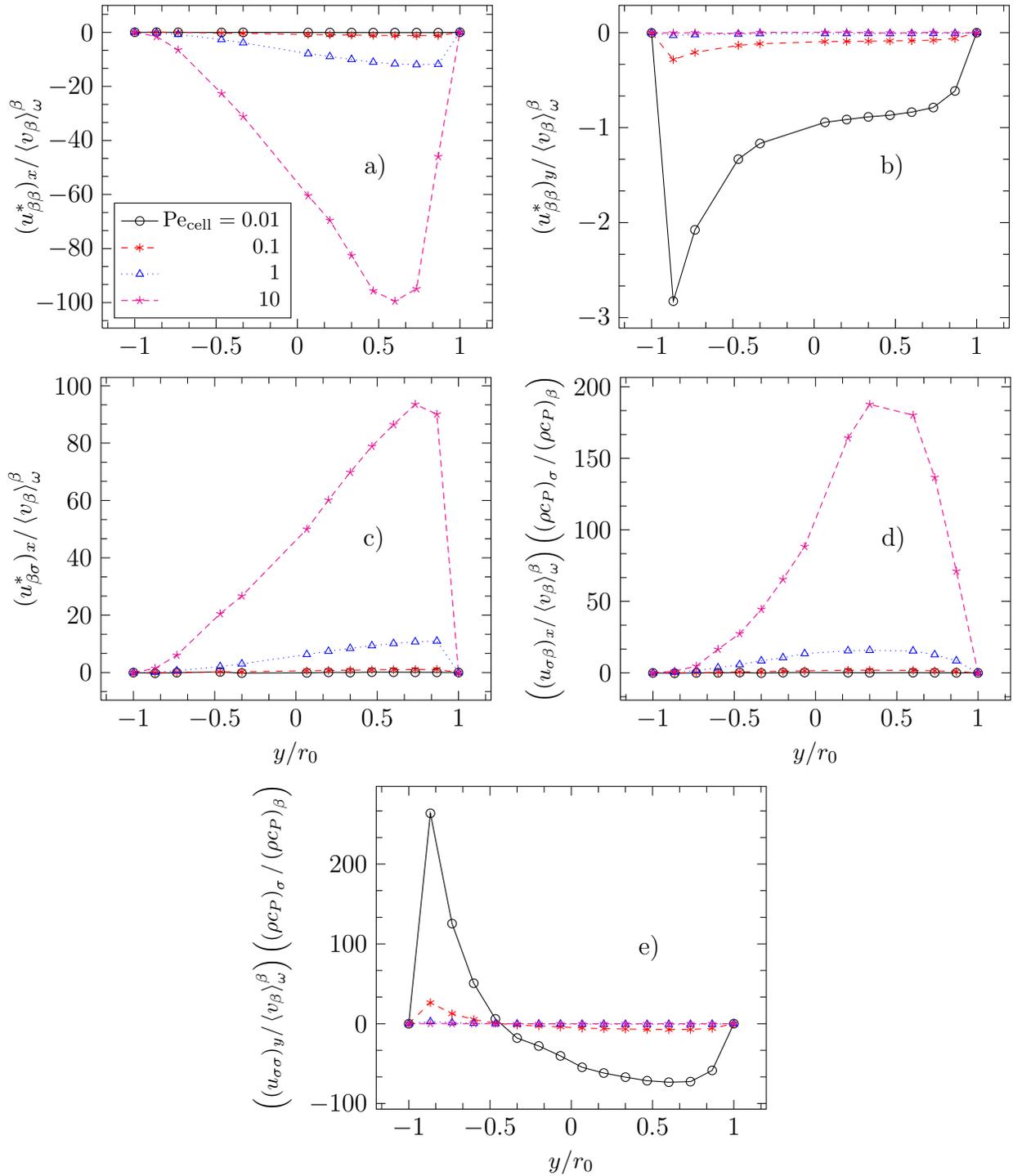


Figura B.5. Efecto del número de Péclet de celda sobre: a) $(u_{\beta\beta}^*)_x$, b) $(u_{\beta\beta}^*)_y$, c) $(u_{\beta\sigma}^*)_x$, d) $(u_{\sigma\beta})_x$ y e) $(u_{\sigma\sigma})_y$. En todos los casos se utilizó $\varepsilon_{\beta,\omega} = 0.5$ y $\kappa = 10$.