



Universidad Autónoma Metropolitana – Iztapalapa
División de Ciencias Básicas e Ingeniería
Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica
Título:

**Predicción de Difusividades Efectivas para
Sistemas de Dos Fases y Microestructura Compleja**

**Tesis que para obtener el grado de
Maestro en Ciencias (Ingeniería Química)**

Presenta

I. Q. MIGUEL ANGEL GUTIERREZ LIMON

Matrícula No. 91354839

Asesor:

DR. JESUS ALBERTO OCHOA TAPIA

Primavera de 2010

AGRADECIMIENTOS

Agradezco el apoyo económico otorgado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) para el desarrollo de esta tesis (50787).

Agradezco el apoyo económico otorgado por Industrias Negromex en otra etapa del proyecto.

Mi agradecimiento al Dr. Jesús Alberto Ochoa Tapia, asesor de este trabajo

Mi agradecimiento al jurado evaluador de esta tesis que con sus comentarios ayudaron a enriquecer este trabajo: Dr. Héctor Felipe López Isunza, Dr. Alfonso Mauricio Sales Cruz y Dr. Antonio Flores Tlacuahuac

RESUMEN

En este trabajo presentamos el cálculo de coeficientes efectivos en un sistema de dos fases para sistemas donde la geometría no es sencilla. Aplicamos el método del promedio volumétrico porque consideramos que presenta ventajas plausibles cuando se aplica a este tipo de sistemas; durante el desarrollo del modelo no se hace uso de ninguna geometría en particular y las restricciones que deben satisfacerse surgen de manera natural durante el desarrollo del mismo. Para resolver el modelo matemático y así poder calcular los coeficientes de difusividad efectivos, se usó el método de elemento finito. Los resultados obtenidos fueron comparados con los arrojados cuando el modelo se resolvió por el método de diferencias finitas para el caso de geometrías más sencillas y, presentamos los resultados para geometrías complejas.

PROLOGO

Con la intención de verificar la afirmación de que el método del promedio volumétrico no está limitado en su aplicación a geometría alguna se inició este proyecto varios lustros atrás. Se eligió para este propósito el problema de predecir coeficientes efectivos en sistemas de dos fases en los que la geometría es un arreglo de polígonos irregulares. El antecedente más inmediato de este problema había sido formulado para diferentes arreglos de polígonos regulares usando el método de diferencias finitas para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales parciales resultante, mientras que para nuestro problema planeamos utilizar el método de elemento finito, dadas las características del dominio en cuestión. Para esto, planteamos la necesidad de implementar un código que nos permitiera realizar nuestra tarea ya que, debido a los requerimientos de cómputo, resultaba inaccesible intentar usar un software comercial de los pocos existentes.

A varios años de distancia, el proyecto inicial sigue vigente. El problema de la predicción de coeficientes efectivos empleando geometrías complejas permanece inexplorado. Por otro lado, el software de análisis de elemento finito ahora es numeroso y relativamente más accesible. Lo mismo sucede en materia de cómputo.

Pareciera entonces que el objetivo planteado inicialmente de desarrollar un programa para resolver ecuaciones diferenciales parciales usando el método de elemento finito no es más, vigente. Difiero de esta opinión (y aquí cambio a escribir en primera persona en singular) y quiero exponer brevemente las razones.

No todos estarán de acuerdo con ellas, desde luego –“la Universidad es una institución hecha para la disidencia”. Si bien el objetivo principal de esta tesis es predecir coeficientes efectivos, no se debe olvidar que un objetivo de mayor jerarquía es el de “formar profesionales capaces de aplicar y generar conocimientos para la resolución de problemas de la ingeniería química y campos afines”. Esto es, la realización de una tesis es un medio y no un fin. La realización de esta tesis me permitió darme cuenta de lo que sé, de lo que puedo llegar a saber y, más importante, de lo que no sé. La educación es más que sólo conocimiento. No hay que olvidar, dice Pablo Latapí (Doctor Honoris Causa de nuestra Universidad Autónoma Metropolitana) *“que la Universidad es algo más: no es un apéndice de la empresa, sino una institución responsable de generar, proteger y difundir todos los tipos de conocimiento que requiere el país, también los aparentemente improductivos”* [10]. Hablando de programas de computadora hechizos, durante años nos dijeron que ya existían muchas cosas, pero nunca dijeron como se hicieron. Nunca saldremos del subdesarrollo, de la periferia, o como quiera llamársele si seguimos comprando las cosas en lugar de hacerlas. Tampoco hablamos (vuelvo a la primera persona del plural) de sustitución de importaciones. Hablamos de procesos de enseñanza más comprometidos, no un aprendizaje en función de los indicadores dictados por la SEP, CONACYT, u otro organismo de moda.

Ya existen los códigos, posiblemente (seguramente) mejores que el mío, pero mi objetivo bien sabido desde el principio no era descubrir el hilo negro, era descubrir como se hacen los hilos, para poder descubrir un hilo de otro color.

Tuve la fortuna de educarme en la Universidad Autónoma de Puebla donde un grupo de maestros entusiastas me impulsaron y me siguen impulsando a salir y a construir, espero no haberlos defraudado.

Para Silvita[†], Sebastián y Silvia

INDICE

	Página
AGRADECIMIENTOS	i
RESUMEN	ii
PROLOGO	iii
Nomenclatura	ix
Lista de Figuras	xi
Lista de Tablas	xiii
Introducción	1
Planteamiento del problema y justificación	4
Objetivos.....	6
Capítulo 1. Fenómenos de Transporte en Varias Fases	7
1.1 El Proceso de Difusión.....	9
1.2 Promedio Volumétrico.....	10
1.3 Definición del Problema	13
Capítulo 2. Solución de Ecuaciones Diferenciales Parciales Elípticas	
Usando el Método de Elemento Finito	18
2.1 Descripción del Método de Elemento Finito.....	20
2.1.1 Aspectos a considerar para la implementación de un código del método de elemento finito.....	22
2.1.2 Funciones de interpolación	24
2.2 Generación de una Malla de Elemento Finito	27

2.2.1 Generación de la malla para una celda con geometría compleja.....	31
2.3 Software Comercial de Elemento Finito.....	38
Capítulo 3. Predicción de Difusividades Efectivas.....	40
3.1 Definición del problema	41
3.2 Caso unidimensional.....	43
3.3 Caso bidimensional con geometrías sencillas	45
3.4 Caso bidimensional con geometrías complejas.....	49
Capítulo 4. Resultados y Discusión.....	52
4.1 Discusión de los resultados	54
Conclusiones.....	62
Bibliografía	65

Nomenclatura

- $\langle C_\sigma \rangle^\sigma$ Concentración volumétrica promedio en la fase σ
- $\langle C_\beta \rangle^\beta$ Concentración volumétrica promedio en la fase β
- $\mathcal{H}_{\beta e}$ Área de entradas y salidas de la fase β contenida en el sistema macroscópico
- $\mathcal{H}_{\sigma e}$ Área de entradas y salidas de la fase σ contenida en el sistema macroscópico
- $A_{\beta\sigma}$ Área interfacial contenida en el volumen promediante
- \mathbf{D}_{eff} Tensor de difusividades efectivo
- $\mathbf{n}_{\beta\sigma}$ Vector unitario normal desde la superficie de la fase β apuntando hacia
- V_σ Volumen de la fase σ contenido en el volumen promediante
- V_β Volumen de la fase β contenido en el volumen promediante
- $\{C\}$ Concentración volumétrica promedio ponderada por el coeficiente de distribución
- \tilde{C}_ω Desviación espacial de la concentración en la fase ω
- a, b Dimensiones asociadas a la fase σ en una celda unitaria
- D^* Forma adimensional del componente en la dirección x del tensor de difusividades efectivas

- D_{xx} Componente en la dirección x del tensor de difusividades efectivas
- \mathbf{f} y \mathbf{g} Variables del problema de cerradura
- K_{eq} Coeficiente de distribución en el equilibrio
la fase σ
- l_a, l_b Dimensiones asociadas a la celda unitaria
- P Permeabilidad de una membrana rodeando la fase sólida
- u Variable independiente en la ecuación diferencial en la presentación del método de elemento finito, Cap. 2

Letras griegas

- \bar{K} Producto del coeficiente de distribución por la relación de la permeabilidad de la fase σ sobre la permeabilidad de la fase β
- ε_β Fracción volumétrica de la fase β
- Ω Dominio de la ecuación diferencial elíptica
- Γ Frontera de Ω
- v función prueba

Subíndices

- σ Asociado a la fase σ
- β Asociado a la fase β
- eff “Efectivo”

Lista de Figuras

Figura	Página
1.1 Volumen promediante	11
1.2 Localización del área interfacial entre las fases σ y β , $A_{\beta\sigma}$, así como del área de cada fase con el entorno macroscópico, $A_{\beta e}$ y $A_{\sigma e}$.	15
2.1 Características de dos elementos típicos pertenecientes a dominios Diferentes	30
2.2 Malla calculada co la subrutina MESH usada en esta tesis	33
2.3 Aspecto de la malla completa de elemento finito diferenciando dos Fases	33
2.4 Vista parcial del archivo generado por MESH	35
2.5 Vista parcial del archivo modificado manualmente generado por MESH	37
3.1 Celda para difusión unidimensional	45
3.2 Celdas unitarias para los modelos de la Figura 3.3	47
3.3 Modelos de arreglos regulares de paralelepípedos mostrando una celda unitaria del medio espacialmente periódico	48
3.4 Celda unitaria para el medio espacialmente periódico mostrado en al Figura 3.5	49
3.5 Fotografía modificada de glóbulos rojos empaçados	50
3.6 Medio espacialmente periódico mostrando una celda unitaria	51
4.1 Comparación de los valores de D^* calculados por los métodos de	53

elemento finito y diferencias finitas para la celda mostrada con $\varepsilon_\beta=0.64$	
4.2 Comparación de los valores de D^* calculados por los métodos de elemento finito y diferencias finitas para la celda mostrada con $\varepsilon_\beta=0.36$	53
4.3 Comparación de los valores de D^* calculados por el método de elemento finito en función de κ para la celda B mostrada y en función del parámetro ε_β	55
4.4 Celdas a las que se hace referencia en las Figuras 4.1 – 4.3	56
4.5 Celda con geometría compleja	58
4.6 Comparación de D^* calculado para dos celdas diferentes. $\varepsilon_\beta =0.36$ para ambas celdas	59
4.7 Resultados para la celda con geometría compleja mostrada en la Figura 4.5 para diferentes valores de ε_β	60
4.8 Comparación de los resultados obtenidos para tres tipos de celda unitaria ($\varepsilon_\beta = 0.36$)	61

Lista de Tablas

Tabla	Página
2.1 Características de dos elementos típicos pertenecientes a dos dominios diferentes	30
2.2 Compañías líderes de software comercial de elemento finito	39
4.1 Comparación de los valores de D^* calculados por los métodos de elemento finito y diferencias finitas para la celda mostrada con $\varepsilon_\beta = 0.64$	55
4.2 Comparación de los valores de D^* calculados por los métodos de elemento finito y diferencias finitas para la celda mostrada con $\varepsilon_\beta=0.36$	56
4.3 Comparación de los valores de D^* calculados por el método de elemento finito en función de κ para la celda mostrada en la Figura 4.3 y en función del parámetro ε_β	58
4.4 Comparación tabular de valores de D^* calculado para dos tipos de celdas diferentes. $\varepsilon_\beta =0.36$ para ambas celdas	59
4.5 Resultados correspondientes a la Figura 4.6	60

Introducción

En el estudio de sistemas de varias fases frecuentemente se recurre a la representación matemática de la física del problema para su posterior uso en el diseño en ingeniería o en la estimación de parámetros útiles para el sistema. En particular, en el modelamiento de reactores catalíticos heterogéneos, debemos entender los mecanismos físicos por los que tiene lugar la transferencia de masa entre las fases sólida y fluida, así como hacia el interior de la partícula catalítica con el fin de comprender el desarrollo de estos modelos matemáticos y conocer sus alcances para estimar la fracción de la superficie de catalizador que es efectiva en promover la reacción [2].

Existen varios factores que complican los esfuerzos para analizar la transferencia de masa en estos sistemas, tales como: la complejidad extrema de la geometría de los poros del catalizador, no sujeta a ningún modelo realista y; los diferentes fenómenos moleculares responsables de la transferencia de masa. Consecuentemente, ha sido útil caracterizar el proceso de transferencia de masa en términos de una “difusividad efectiva”, es decir, un coeficiente de transporte que pertenece a un material poroso en el que los cálculos se basan en el área total (hueco más sólido) normal a la dirección del transporte [9]. Puesto que las difusividades efectivas no pueden medirse directamente, esto es, se calculan a partir de mediciones experimentales del flux másico y la solución de un modelo matemático, es absolutamente esencial contar con un marco teórico confiable y que incorpore desde el inicio el efecto de una posible reacción química sobre el flux difusivo [12]. Concluimos entonces, que estudiar la naturaleza de la difusividad efectiva merece nuestra atención.

La necesidad de conocer más a fondo los fenómenos por los que ocurre la transferencia de masa en sistemas tales como reactores químicos heterogéneos, el transporte de metano en lechos de carbón o el transporte de nutrientes en tejidos celulares, por mencionar sólo algunos ejemplos, ha llevado al desarrollo del área de los fenómenos de transporte en varias fases. Ochoa-Tapia y col. [13] han hecho una revisión muy completa de los métodos empleados para abordar su estudio. En este trabajo se hará uso del Método del Promedio Volumétrico ya que presenta varias características que lo hacen muy útil para el estudio de estos sistemas. Así, en el primer capítulo se mostrará como, mediante el empleo del método del promedio volumétrico, se llega a un conjunto de ecuaciones que permite el cálculo de coeficientes efectivos en sistemas con geometría arbitraria. El modelo resultante es un sistema de ecuaciones diferenciales parciales elípticas con condiciones de frontera que contemplan generación por reacción química y resistencia interfacial.

En el segundo capítulo se describirá la solución de ecuaciones diferenciales parciales elípticas usando la técnica de elemento finito. Aquí nos detendremos a analizar la aplicación del método de elemento finito a nuestro problema ya que presenta características que hacen que la aplicación del método numérico no sea simple. Cabe mencionar que el método de elemento finito es uno muy bien desarrollado y actualmente, muy conocido. Otros métodos variacionales son el de Rayleigh-Ritz, el de Galerkin, el de mínimos cuadrados y métodos de colocación. Se ofrecerá con cierto detalle la descripción del programa de cómputo implementado y la forma de usarlo para resolver varios tipos de problemas.

El tercer capítulo estará dedicado al cálculo de difusividades efectivas para el problema de difusión en sistemas de dos fases restringido al caso en el que la resistencia interfacial está ausente. Aquí se resolverán por medio del método de elemento finito las ecuaciones que se desarrollaron en el capítulo uno.

En el cuarto capítulo se discutirán con detalle los resultados obtenidos. Se mostrará el efecto que tiene el usar una celda con geometría compleja sobre nuestras predicciones del coeficiente de difusividad efectiva, comparando estos resultados con los obtenidos usando celdas con geometrías más sencillas.

Planteamiento del problema y justificación

La presencia de los sistemas heterogéneos en ingeniería es tan común que para su estudio han surgido una variedad de métodos, todos con sus características particulares que los hacen útiles en igual número de circunstancias. De entre ellos destacamos el método del promedio volumétrico ya que su aplicación a un sistema de dos fases nos conduce al resolver el problema de cerradura planteado como un sistema de ecuaciones diferenciales parciales, permitiendo así el cálculo de valores del coeficiente de difusividad efectivo, necesario para un número de aplicaciones prácticas.

Como se mencionó antes, existen en el ámbito de la ingeniería un gran número de problemas que demandan resolver numéricamente ecuaciones diferenciales parciales que resultan de modelar matemáticamente problemas físicos con variaciones espaciales y posiblemente temporales. La manera tradicional de resolver numéricamente problemas complejos consiste en emplear algún tipo de aproximación para transformar el problema original en uno más simple cuya solución se sepa como evaluar y cuyo cálculo pudiera ser menos demandante. En el caso particular de problemas con sólo variaciones espaciales la idea es emplear un esquema de aproximación espacial (también llamado discretización) para transformar el problema original, modelado en términos de ecuaciones diferenciales parciales, en un sistema de ecuaciones algebraicas, lineales o no-lineales, cuya solución (al menos para sistemas de baja o mediana escala) no representa un problema numérico demandante. El método de elemento finito es

uno muy adecuado cuando los dominios son de dos y tres dimensiones y con geometrías irregulares y, existen bastantes códigos comerciales que ofrecen diversas ventajas al usuario. Sin embargo, es tanta la oferta de éstos que resulta difícil la elección de uno u otro para su empleo en determinada tarea.

Objetivos

General

- Predecir coeficientes de difusividad efectivos para sistemas de dos fases y microestructura compleja.

Particulares

- Construir un código del método de elemento finito para la solución de ecuaciones diferenciales parciales elípticas.
- Resolver el problema de cerradura para calcular valores de difusividades efectivas.

Capítulo 1.
Fenómenos de Transporte en Varias Fases

Al discutir la diferencia entre los modelos unidimensionales y las teorías multidimensionales, se debe tener en mente que los experimentos para la medición de difusividades están arreglados universalmente para funcionar unidimensionalmente en el sentido promedio. Sin embargo, los experimentos arreglados en esta forma no se pueden tratar confiablemente por modelos que son unidimensionales en el sentido puntual.

El método del promedio volumétrico se basa en la idea de que podemos asociar un volumen promediante a un elemento de volumen representativo con cada punto en el espacio. Designamos este volumen por V y el valor promedio de cualquier función calculado sobre la base de este volumen lo asignamos al centroide de este volumen [3].

El método del promedio volumétrico tiene varias ventajas sobre otras técnicas para investigar fenómenos de transporte multifásicos y los detalles han sido presentados por Whitaker [25]. En primer lugar, las ecuaciones promediadas sobre el volumen poseen un grado de generalidad tal que no requieren de una geometría particular para su formulación. Además, las restricciones que el modelo de una ecuación debe satisfacer se identifican de manera natural durante éste. La más notoria, sin duda es la que deben satisfacer las escalas de longitud

$$l_{\beta} \ll r_0 \ll L$$

que quiere decir que la región de promediado (V) debe ser lo suficientemente grande para que las no uniformidades en el medio poroso sean suavizadas en el

espacio pero, al mismo tiempo, lo suficientemente pequeña para que no se pierda demasiada información de la microestructura en el proceso de promediado.

Finalmente, el método del promedio volumétrico puede ser usado para abordar todo tipo de problemas de fenómenos de transporte multifásico.

Durante el desarrollo del mismo se aclaran: la relación que guarda la concentración promedio global con las concentraciones promedio de cada fase y con las concentraciones puntuales, la relación del tensor de coeficientes de difusión efectiva con la microestructura (del medio de dos fases) y, la relación de la constante efectiva de velocidad de reacción química con las constantes de las reacciones de primer orden en cada una de las fases.

1.1 El Proceso de Difusión

El primer estudio sistemático se debió al químico escocés Thomas Graham. Graham fue el inventor de la diálisis, que definió como un método de separación por difusión a través de una membrana (1854). Su investigación sobre la difusión en gases la realizó de 1828 a 1833 y presentó sus resultados a la Royal Society de Edimburgo en 1831, mismos que fueron publicados en la *Philosophical Magazine* en 1833.

Graham realizó el primer experimento cuantitativo de difusión además de la primera medición confiable que permitió la determinación de un coeficiente de difusión. La noción de coeficiente de difusión no se había establecido en esa época, ésta se dio 26 años más tarde gracias a Fick. En 1867 Maxwell calculó los

coeficientes de difusión en gases a partir de los resultados numéricos de Graham. Su coeficiente de difusión de CO₂ en aire es exacto en +/-5%. Más adelante, Graham realizó una serie de experimentos en líquidos y notó que la difusión en líquidos es tres órdenes de magnitud menor que en gases.

Analizando los resultados de Graham, Fick percibió una profunda analogía entre la difusión y la conducción de calor o electricidad. En otras palabras, tuvo la intuición premonitoria de que la difusión podría describirse de acuerdo al mismo formalismo que la ley de Fourier para la conducción de calor o la ley de Ohm para la corriente eléctrica. Siguiendo esta analogía consideró que el flux de masa es proporcional al gradiente de su concentración, denotada por y , con un factor de proporcionalidad k , al que llamó “una constante que depende de la naturaleza de las sustancias”. Siempre siguiendo el enfoque de Fourier, llega a la ecuación básica (notación original de Fick)

$$\frac{\partial y}{\partial t} = -k \frac{\partial^2 y}{\partial z^2}$$

1.2 Promedio Volumétrico

Como se ha mencionado anteriormente, para obtener la forma promediada de una función con el volumen, primero asociamos un volumen promediante con cada punto en el sistema ilustrado en la Figura 1.1. El radio del volumen promediante es r_0 y la longitud característica asociada a la fase β es l_β . En la Figura 1.1 también se ilustra una longitud L que es la distancia asociada sobre la que pueden ocurrir

cambios significativos en las cantidades promedio. En lo que sigue, se asume que las escalas de longitud están restringidas por [3]

$$l_{\beta} \ll r_0 \ll L$$

Usaremos el volumen promediante V para definir dos promedios: el *promedio superficial* y el *promedio intrínseco* de cada fase. Cada uno de estos promedios es

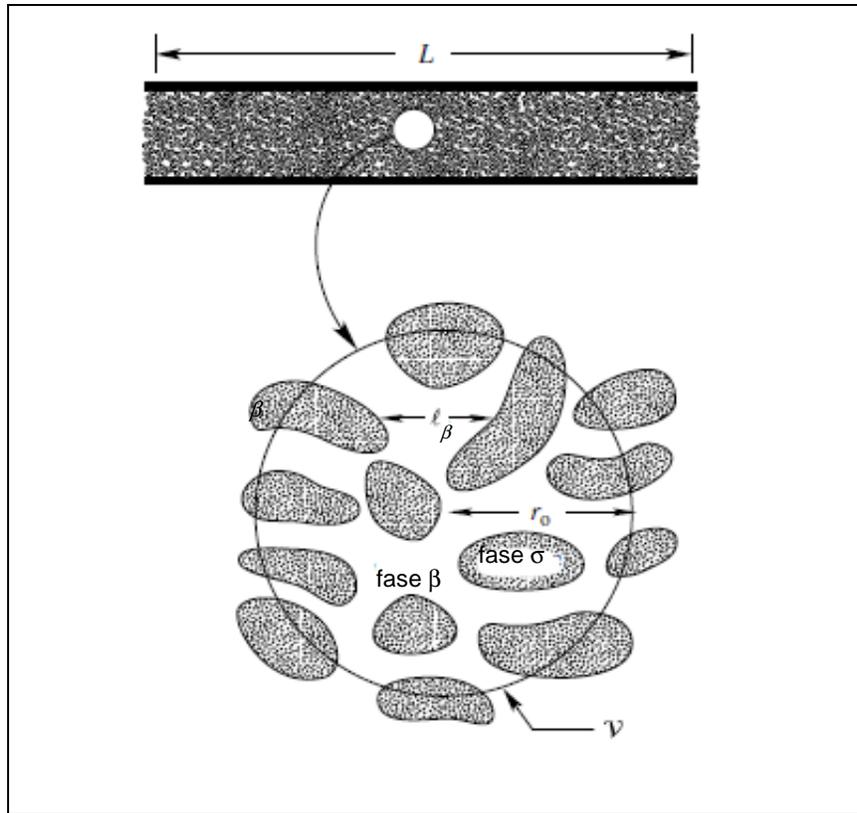


Figura 1.1 Volumen promediante

usado en la descripción y el desarrollo de procesos de transporte en los que aparecen varias fases por lo que es importante definirlos. El promedio superficial de la concentración en la fase β , C_{β} (puede ser cualquier otra función ψ) se define como

$$\langle C_\beta \rangle = \frac{1}{V} \int_{V_\beta} \psi_\beta dV$$

y el promedio intrínseco de una fase β como

$$\langle C_\beta \rangle^\beta = \frac{1}{V_\beta} \int_{V_\beta} \psi_\beta dV$$

Estas dos cantidades se relacionan de acuerdo a

$$\langle C_\beta \rangle = \varepsilon_\beta \langle C_\beta \rangle^\beta$$

en la que ε_β es la fracción de volumen de la fase β definida explícitamente como

$$\varepsilon_\beta = \frac{V_\beta}{V}$$

y

$$V = V_\beta + V_\sigma$$

Normalmente estamos más interesados en el gradiente de la propiedad promediada más que en el promedio del gradiente de dicha propiedad debido a que en las ecuaciones de transporte aparece el primero. Para intercambiar integración y diferenciación usamos el teorema del promedio espacial ([1],[20],[26]) expresado como

$$\langle \nabla \psi_\beta \rangle = \nabla \langle \psi_\beta \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \psi_\beta dA$$

en el que ψ_β es cualquier función asociada con la fase β . Aquí $A_{\beta\sigma}$ representa el área interfacial contenida en el volumen promediante. $\mathbf{n}_{\beta\sigma}$ representa el vector normal unitario que apunta desde la fase β hacia la fase σ .

1.3 Definición del Problema

El proceso de difusión másica en un sistema de dos fases σ y β está descrito por el siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales parciales y condiciones de frontera en términos de las concentraciones puntuales C_β y C_σ de las fases β y σ , respectivamente.

$$\frac{\partial C_\beta}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{D}_\beta \nabla C_\beta) \quad \text{en } V_\beta \quad (1.1)$$

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathcal{D}_\beta \nabla C_\beta = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathcal{D}_\sigma \nabla C_\sigma \quad \text{en } A_{\beta\sigma} \quad (1.2)$$

$$-\mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathcal{D}_\sigma \nabla C_\sigma = P(C_\sigma - K_{eq} C_\beta) \quad \text{en } A_{\beta\sigma} \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial C_\sigma}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{D}_\sigma \nabla C_\sigma) \quad \text{en } V_\sigma \quad (1.4)$$

$$C_\beta = F(\mathbf{r}, t) \quad \text{en } \mathcal{H}_{\beta e} \quad (1.5)$$

$$C_\sigma = G(\mathbf{r}, t) \quad \text{en } \mathcal{H}_{\sigma e} \quad (1.6)$$

$$C_\beta = \mathcal{F}_\beta(\mathbf{r}_\beta), \quad C_\sigma = \mathcal{F}_\sigma(\mathbf{r}_\sigma), \quad t = 0 \quad (1.7)$$

La fase sólida está identificada como la fase σ , mientras que la fase dispersa como la fase β . Las concentraciones locales puntuales en las fases σ y β se denotan como C_σ y C_β , respectivamente. $A_{\beta\sigma}$ representa el área interfacial entre las dos fases dentro del volumen promediante. $\mathcal{H}_{\beta e}$ y $\mathcal{H}_{\sigma e}$ son las áreas de

entradas y salidas de las fases β y σ , respectivamente con el entorno macroscópico (esto se ilustra en la Figura 1.2). $\mathbf{n}_{\beta\sigma}$ es el vector unitario normal desde la superficie de la fase β apuntando hacia la fase σ . En la condición de frontera dada por la ecuación (1.3), P representa la permeabilidad de la fase σ y K_{eq} el coeficiente de distribución en el equilibrio. Es importante mencionar que esta formulación del problema de difusión no tiene restricciones en cuanto al número de dimensiones involucradas, es decir, es completamente tridimensional.

En el método del promedio volumétrico asociamos un volumen promediante V con cada punto en el espacio y este volumen se usa para definir concentraciones promedio en términos de C_σ y C_β y de esta forma realizar una homogenización espacial de las ecuaciones (1.1) y (1.4). El promedio de la ecuación (1.4) lo formamos de la siguiente manera

$$\frac{1}{V} \int_{V_\sigma} \frac{\partial C_\sigma}{\partial t} dV = \frac{1}{V} \int_{V_\sigma} \nabla \cdot (\mathcal{D}_\sigma \nabla C_\sigma) dV \quad (1.8)$$

Usando la concentración promedio intrínseca de fase, definida por

$$\langle C_\sigma \rangle^\sigma = \frac{1}{V_\beta} \int_{V_\sigma} C_\sigma dV \quad (1.9)$$

junto con el teorema del promediado espacial [1], [20],[26] y la descomposición de Gray para definir la desviación espacial local de la concentración, \tilde{C}_σ [8]

$$C_\sigma = \langle C_\sigma \rangle^\sigma + \tilde{C}_\sigma \quad (1.10)$$

nos permite expresar la ecuación (1.8) como

$$\epsilon_{\sigma} \frac{\partial \langle C_{\sigma} \rangle^{\sigma}}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ \epsilon_{\sigma} \mathcal{D}_{\sigma} \left[\nabla \langle C_{\sigma} \rangle^{\sigma} + \frac{1}{V_{\sigma}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \tilde{C}_{\sigma} dA \right] \right\} + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathcal{D}_{\sigma} \nabla C_{\sigma} dA \quad (1.11)$$

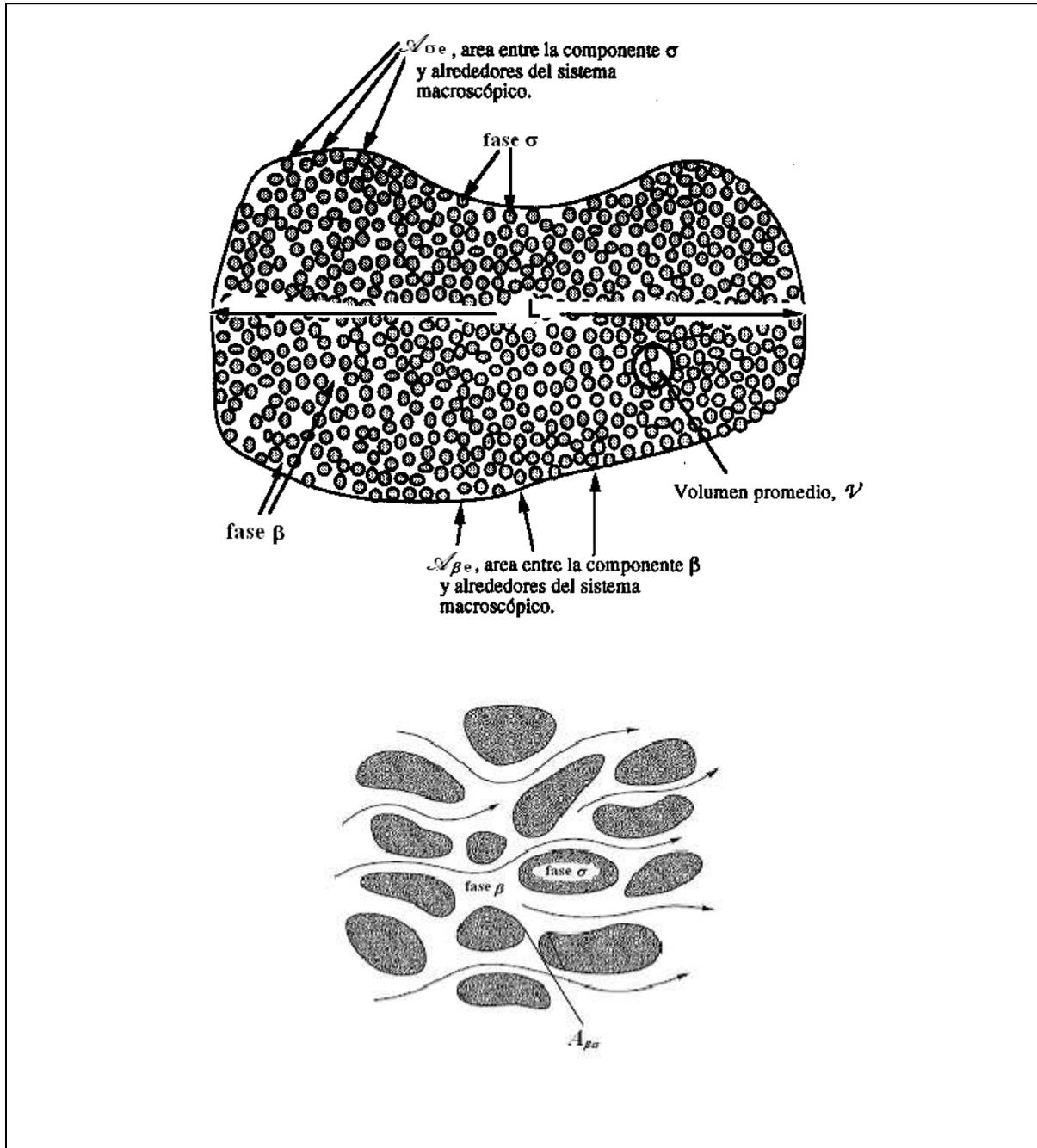


Figura 1.2 Localización del área interfacial entre las fases σ y β , $A_{\beta\sigma}$, así como del área de cada fase con el entorno macroscópico, $\mathcal{A}_{\beta e}$ y $\mathcal{A}_{\sigma e}$.

El resultado análogo para C_β está dado por

$$\varepsilon_\beta \frac{\partial \langle C_\beta \rangle^\beta}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ \varepsilon_\beta \mathcal{D}_\beta \left[\nabla \langle C_\beta \rangle^\beta + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{C}_\beta dA \right] \right\} + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathcal{D}_\beta \nabla C_\beta dA \quad (1.12)$$

Sumando las ecuaciones (1.11) y (1.12) obtenemos el modelo de una ecuación

$$\frac{\partial \{C\}}{\partial t} = \mathbf{D}_{\text{eff}} : \nabla \nabla \{C\} \quad (1.13)$$

que representa el transporte en ambas fases en términos de la nueva variable dependiente

$$\{C\} = \frac{1}{K_{\text{eq}}} \varepsilon_\sigma \langle C_\sigma \rangle^\sigma + \varepsilon_\beta \langle C_\beta \rangle^\beta \quad (1.14)$$

Esta nueva concentración se conoce como la concentración promedio ponderada por la constante de distribución.

El tensor $\nabla \nabla \{C\}$ es simétrico, de tal manera que únicamente la parte simétrica del tensor de difusividades contribuye al flux difusivo. La difusividad efectiva, \mathbf{D}_{eff} , está definida por

$$\frac{\mathbf{D}_{\text{eff}}}{\mathcal{D}_\beta} (\varepsilon_\sigma K_{\text{eq}} + \varepsilon_\beta) = (\varepsilon_\sigma \bar{K} + \varepsilon_\beta) \mathbf{I} + \frac{\bar{K}}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{g} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{f} dA \quad (1.15)$$

y \bar{K} por

$$\bar{K} = \frac{\mathcal{D}_\sigma K_{\text{eq}}}{\mathcal{D}_\beta} \quad (1.16)$$

Los detalles de la derivación de la ecuación que define el tensor de difusividad

efectiva se encuentran en [13], [15], y [25].

El valor teórico del tensor de difusividad efectivo se obtiene al resolver el siguiente problema de cerradura para los vectores \mathbf{f} y \mathbf{g} .

$$\nabla^2 \mathbf{f} = \mathbf{0} \quad \text{en } V_\beta \quad (1.17)$$

$$\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{f} = \tilde{\kappa} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{g} + (\tilde{\kappa} - 1) \mathbf{n}_{\beta\sigma} \quad \text{en } A_{\beta\sigma} \quad (1.18)$$

$$-\mathbf{n}_{\sigma\beta} - \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \nabla \mathbf{g} = \frac{1}{\alpha} (\mathbf{g} - \mathbf{f}) \quad \text{en } A_{\beta\sigma} \quad (1.19)$$

$$\nabla^2 \mathbf{g} = \mathbf{0} \quad \text{en } V_\sigma \quad (1.20)$$

$$\mathbf{f} = \mathbf{F}(\mathbf{r}) \quad \text{en } \mathcal{H}_{\beta e} \quad (1.21)$$

$$\mathbf{g} = \mathbf{G}(\mathbf{r}) \quad \text{en } \mathcal{H}_{\sigma e} \quad (1.22)$$

Aquí, α se define como la relación entre la difusividad de la fase dispersa y la permeabilidad

$$\alpha = \frac{\mathcal{D}_\sigma}{P}$$

Se volverá a referirse a este problema en el capítulo 3.

Capítulo 2.

Solución de Ecuaciones Diferenciales Parciales

Elípticas Usando el Método de Elemento Finito

La mayoría de los ingenieros y científicos que estudian fenómenos físicos están involucrados con dos tareas principales: (1) la formulación matemática de los procesos físicos y, (2) el análisis numérico del modelo matemático. La formulación matemática de un proceso físico requiere de un conocimiento sólido en las materias relacionadas y, más frecuentemente, de ciertas herramientas matemáticas. Esta formulación resulta en enunciados matemáticos, frecuentemente ecuaciones diferenciales que relacionan cantidades de interés para el entendimiento y/o el diseño de procesos físicos. La solución de estas ecuaciones por métodos exactos de análisis representa un esfuerzo formidable y, en muchos casos, no es posible llegar a ella. En tales situaciones, los métodos de análisis aproximados proporcionan medios alternativos para encontrar soluciones. Entre éstos, el método de diferencias finitas y los métodos variacionales (entre éstos el método de elemento finito) son los más usados [18]. Los varios métodos variacionales difieren entre ellos en la elección de la forma integral usada, las funciones peso y/o las funciones de aproximación. Todos ellos tienen la desventaja de que para problemas con dominios arbitrarios, las funciones de aproximación son difíciles de construir.

En el método de diferencias finitas, las derivadas de una ecuación diferencial se aproximan por cocientes diferencia, que involucran los valores de la solución en puntos discretos de una malla del dominio. Las ecuaciones algebraicas resultantes se resuelven imponiendo las condiciones de frontera para los valores de la solución en los puntos de la malla.

2.1 Descripción del Método de Elemento Finito

Existe una gran variedad de fenómenos físicos (en química, electromagnetismo, mecánica de sólidos, mecánica de fluidos, etc.) que se pueden describir en términos de ecuaciones en derivadas parciales, mismas que se pueden resolver usando el método de elemento finito.

La esencia del método consiste en calcular valores aproximados de la solución deseada (temperaturas, esfuerzos, presión, velocidad, campo magnético, etc.). Estos valores son calculados en algunos puntos del dominio de interés llamados nodos. A partir de este conjunto de valores es posible obtener valores de la solución en cualquier posición; éste paso se basa en el uso de funciones de interpolación características elegidas para esta tarea. Todos estos cálculos requieren, como un primer paso, la construcción de una malla del dominio donde el problema está definido a fin de definir los nodos.

Como una presentación tentativa de los principios básicos del método del elemento finito, elegimos un problema muy simple

$$-\nabla^2 u = p \quad \text{en } \Omega \quad (2.1)$$

$$u = 0 \quad \text{en } \Gamma \quad (2.2)$$

Una formulación mejor adaptada, llamada formulación variacional o formulación débil, se deriva a partir de la formulación anterior, escrita en términos de ecuaciones en derivadas parciales, y se puede escribir como sigue:

Encontrar $u \in V$ tal que

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx \, dy = \int_{\Omega} p v \, dx \, dy \quad (2.3)$$

donde V es el espacio de funciones admisibles y v es *una función prueba*.

En seguida, este problema continuo es reemplazado por un problema aproximado. En la práctica, la solución explícita del problema continuo, en general no es posible. Esto nos conduce a investigar soluciones aproximadas usando el método del elemento finito; éste consiste en construir un subespacio V_h , de dimensión finita, subespacio de V y la definición de u_h , una aproximación a la solución u , donde u_h es la solución del siguiente problema

Encontrar $u_h \in V_h$ tal que

$$\int_{\Omega} \nabla u_h \cdot \nabla v_h \, dx \, dy = \int_{\Omega} p v_h \, dx \, dy \quad (2.4)$$

Se puede demostrar que este problema tiene una solución única, u_h , y que la convergencia de u_h a la solución u está directamente relacionada a la manera en que las funciones v_h del espacio V_h aproximan a las funciones v del espacio V , y por lo tanto a la manera en que el espacio V_h sea definido.

2.1.1 Aspectos a considerar para la implementación de un código del método de elemento finito

En la solución de una ecuación diferencial por medio de un método variacional (como el método de elemento finito) la ecuación diferencial se rescribe en la forma de una integral ponderada equivalente y, luego, se asume que la solución aproximada (u_h) sobre el dominio es una combinación lineal de funciones de aproximación elegidas apropiadamente, ϕ_j , y de coeficientes indeterminados, C_j ,

$\sum_j c_j \phi_j$. Los coeficientes C_j se determinan de manera que satisfagan el enunciado

integral equivalente de la ecuación diferencial original. El método del elemento finito proporciona un procedimiento sistemático para la derivación de las funciones de aproximación sobre subregiones del dominio, lo que representa una ventaja sobre los demás métodos para el tratamiento de problemas que involucran dominios con geometrías complejas como el que nos ocupa. El método contiene tres características básicas. (1) el dominio del problema con geometría compleja se representa como una colección de subdominios con geometría sencilla (generalmente triángulos y rectángulos), llamados elementos finitos; (2) las funciones de aproximación se deducen sobre cada elemento finito usando la idea básica de que cualquier función continua se puede representar por una combinación lineal de polinomios algebraicos y; (3) las relaciones algebraicas entre los coeficientes indeterminados (valores nodales) se obtienen satisfaciendo las ecuaciones gobernantes en el sentido de su forma integral ponderada equivalente sobre cada elemento. De esta manera, el método de elemento finito

se puede ver como una aplicación, elemento a elemento, de los métodos de residuos ponderados. En él, las funciones de aproximación se toman como polinomios algebraicos y los parámetros indeterminados representan los valores de la solución en un número finito de puntos preseleccionados, llamados *nodos*, sobre la frontera y en el interior del elemento. Las funciones de aproximación se deducen usando conceptos de la teoría de interpolación y, por eso, se han llamado *funciones de interpolación*. Adicionalmente, se encuentra que el grado de las funciones de interpolación depende del número de nodos en el elemento y del orden de la ecuación diferencial que se está resolviendo.

El rasgo más distintivo del método de elemento finito es que podemos dividir un dominio dado en un conjunto de subdominios sencillos, llamados *elementos finitos*. Cualquier forma geométrica que permita el cálculo de la solución o su aproximación, o que proporcione las relaciones necesarias entre los valores de la solución en puntos seleccionados (nodos) del subdominio, califica como un elemento finito. Otras características del método incluyen la búsqueda de aproximaciones continuas de la solución (funciones de aproximación) sobre cada elemento en términos de valores nodales y, el ensamblado de los elementos imponiendo la continuidad inter elemento de la solución y el balance de fuerzas inter elemento.

Este último paso es crítico para los propósitos del presente trabajo ya que en general, el ensamblado de los elementos finitos está sujeto a las condiciones de frontera y/o iniciales y, las ecuaciones discretas asociadas con la malla de elementos finitos se resuelven sólo después de que estas condiciones se han

impuesto.

2.1.2 Funciones de interpolación

En este trabajo únicamente consideramos elementos triangulares para la discretización de los dominios bajo estudio. Para este caso, las funciones de aproximación son de la forma

$$U^e(x, y) = c_1 + c_2x + c_3y \quad (2.5)$$

que contiene tres términos linealmente independientes y es lineal en x y en y . Las constantes c_i deben escribirse en términos de los valores nodales de U^e , para esto, se identifican tres puntos o nodos en el elemento Ω^e mismos que definen de forma única la geometría del elemento. Para un elemento triangular lineal, estos tres nodos son sus vértices.

Aunque el procedimiento de escribir las constantes de la ecuación (2.5) en términos de los valores nodales de U^e (es decir, de u_1^e , u_2^e , y u_3^e donde los subíndices 1,2 y 3 se refieren a los vértices del elemento triangular) es bien conocido, vale la pena repasarlo en aras de ser claros.

Dado que la ecuación (2.5) es válida en todo el elemento Ω^e , lo es en particular en cada uno de los vértices del triángulo, es decir,

$$U^e(x_i^e, y_i^e) = u_i^e, \quad i = 1,2,3 \quad (2.6)$$

donde (x_i^e, y_i^e) son las coordenadas globales de los tres vértices del triángulo Ω^e .

La ecuación (2.6) representa un sistema lineal de ecuaciones en las incógnitas c_i ,

c_2 y c_3

$$\left. \begin{aligned} u_1 &= u_1(x_1, y_1) = c_1 + c_2x_1 + c_3y_1 \\ u_2 &= u_2(x_2, y_2) = c_1 + c_2x_2 + c_3y_2 \\ u_3 &= u_3(x_3, y_3) = c_1 + c_2x_3 + c_3y_3 \end{aligned} \right\} \text{ en } \Omega^e \quad (2.7)$$

en notación vectorial,

$$\mathbf{A}\mathbf{c}=\mathbf{u}$$

cuya solución es

$$\mathbf{c}=\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}=\frac{1}{2A_e}\begin{bmatrix} \alpha_1u_1+\alpha_2u_2+\alpha_3u_3 \\ \beta_1u_1+\beta_2u_2+\beta_3u_3 \\ \gamma_1u_1+\gamma_2u_2+\gamma_3u_3 \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

donde \mathbf{A}^{-1} está dada por

$$\mathbf{A}^{-1}=\frac{1}{2A_e}\begin{bmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 \\ \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 \\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

En las ecuaciones anteriores

$2A_e$ es el determinante de la matriz \mathbf{A}

A_e es el área del elemento triangular

$$\alpha_i = x_j y_k - x_k y_j$$

$$\beta_i = y_j - y_k$$

$$\gamma_i = -(x_j - x_k)$$

$i \neq j \neq k$, i, j y k permutan en orden natural

Sustituyendo los valores de c_i en la ecuación (2.5) se obtiene

$$U^e(x, y) = \sum_{i=1}^3 u_i^e \psi_i^e(x, y) \quad (2.8)$$

donde ψ_i^e son las funciones de interpolación lineales para el elemento triangular

$$\psi_i^e(x, y) = \frac{1}{2A_e} (\alpha_i^e + \beta_i^e x + \gamma_i^e y), \quad i=1,2,3 \quad (2.9)$$

con las siguientes propiedades

$$\psi_i^e(x_j^e, y_j^e) = \delta_{ij} \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (2.10)$$

$$\sum_{i=1}^3 \psi_i^e = 1 \quad \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \psi_i^e}{\partial x} = 0 \quad \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \psi_i^e}{\partial y} = 0 \quad (2.11)$$

2.2 Generación de una Malla de Elemento Finito

El método de elemento finito requiere como primer paso la construcción de una malla del dominio donde el problema está definido con la finalidad de definir los nodos. Esta es una parte importante de esta simulación y ha probado ser delicada cuando se consideran dominios con geometría compleja. Más aún, la calidad de los resultados numéricos está ligada fuertemente a la calidad de la malla correspondiente [28].

Esta etapa del preprocesamiento (cabe recordar que la solución de un problema por el método del elemento finito consta de tres fases: preprocesamiento de los datos, procesamiento y posprocesamiento de los resultados) es muy importante en el sentido de que la generación de una malla válida en un dominio con una geometría compleja no es una operación trivial y puede ser muy caro en términos del tiempo requerido. Por otro lado, es crucial crear una malla que esté bien adaptada a las propiedades físicas del problema bajo consideración ya que la calidad de la solución calculada está fuertemente relacionada a la calidad de la malla.

En la práctica, la malla es un conjunto que consiste de un número finito de segmentos para problemas en una dimensión, segmentos, triángulos y cuadriláteros en problemas en dos dimensiones y, todos los anteriores más tetraedros, pentaedros y hexaedros en tres dimensiones.

La malla debe cubrir el dominio Ω tan exactamente como sea posible. Cuando Ω

no es un dominio poligonal (o poliédrico) la malla sólo será una partición aproximada del dominio.

En este trabajo se usaron dominios poligonales, por lo que la malla generada cubre el dominio exactamente. La malla construida es una de tipo estructurada. Esto quiere decir que la conectividad es del tipo (i, j, k) , es decir, que si los índices de un nodo dado son (i, j, k) los del vecino a la izquierda serán $((i-1), j, k)$ y los del vecino de la derecha $((i+1), j, k)$. A este tipo de conectividad también se conoce como uno del tipo diferencias finitas.

Una malla debe contener toda la información útil cuando se consideren las diferentes etapas del cálculo numérico, debe incluir

- información geométrica, que consiste de la descripción de la malla, i.e., que la cubierta geométrica del dominio sea tan exacta como sea posible.
- la descripción de toda la información previamente usada en la construcción de los elementos, es decir, la historia,
- debe ser compatible con la interpolación elegida a fin de poder definirla (tipo de interpolación, número de nodos por elemento, la lista de estos nodos y su localización)
- los valores contenidos en la malla deben permitir la definición de características físicas de materiales, cargas aplicadas, fuentes, etc., así como las condiciones de frontera esenciales (localización de los valores impuestos)

Para asegurar estos objetivos, la representación interna de una malla debe

permitir encontrar rápidamente cualquier valor para calcular cualquier cantidad de interés a partir de la información contenida. Una malla es, por lo tanto, un conjunto de valores y tablas de valores que contienen la lista de elementos geométricos que componen la malla.

Para cada elemento se debe conocer la siguiente información.

- naturaleza del elemento: segmento, triángulo, cuadrilátero, etc.
- historia del elemento: un elemento está formado por caras, lados (orillas) y vértices,
estos rubros se han generado a partir de datos que deben ser accesibles (por ejemplo, qué vértices están sobre una frontera determinada)
- la lista de los vértices de los elementos
- la conectividad y la topología del elemento (la descripción de sus lados y caras por sus vértices)
- el número y la lista de sus nodos
- las coordenadas de sus vértices
- los atributos físicos del elemento –subdominio o número de material

Por ejemplo, para los siguientes elementos vecinos pertenecientes a fases diferentes, (Figura 2.1) sus características aparecen listadas en la tabla adjunta.

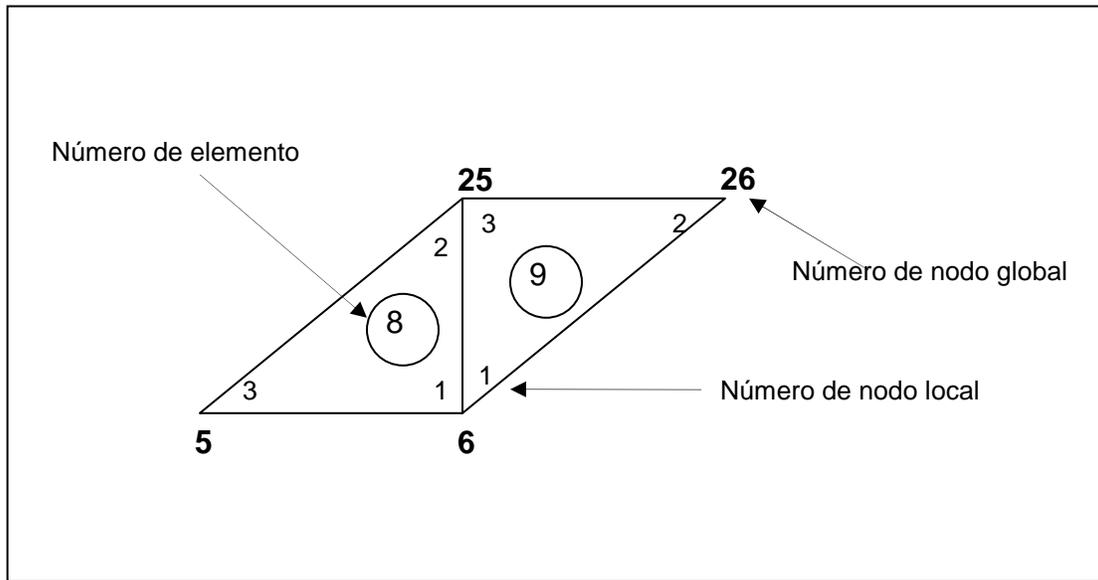


Figura 2.1 Características de dos elementos típicos pertenecientes a dominios diferentes

No. de elemento	vértice 1	vértice 2	vértice 3	¿C.F. natural?	¿Elemento interfacial?	fase
8	6	25	5	0	1	1
9	6	26	25	0	1	2

Tabla 2.1 Características de dos elementos típicos pertenecientes a dominios diferentes

Así, el elemento número 8 tiene los vértices numerados en forma natural 6, 25 y 5, sus fronteras no contienen una condición de frontera natural, pertenece a la fase 1 y es un elemento interfacial (uno de sus lados tiene como vecino a un elemento de otra fase).

Nosotros generamos las mallas en forma semiautomática. Usamos el programa MESH escrito en FORTRAN para

- 1) generar y numerar los elementos triangulares y, a cada elemento
- 2) asignarle un número de nodo global a cada uno de sus vértices,
- 3) asignarle número de nodo local a cada uno de sus vértices y
- 4) generar las coordenadas (x,y) globales de cada nodo.

Completamos la información de cada elemento asignándole manualmente

- 5) si alguno de sus lados contiene una condición de frontera natural.
- 6) el número de fase a la que pertenece,
- 7) su pertenencia o no a una frontera interfacial y

De esta manera, la malla está constituida por dos arreglos, uno conteniendo las coordenadas (x,y) de cada nodo global y otro la información de cada elemento. Un ejemplo de un archivo típico de una malla se halla en el apéndice.

2.2.1 Generación de la malla para una celda con geometría compleja

A continuación se muestra la manera en que se generó una malla de elemento finito. La forma de usar MESH es la siguiente. Se debe proporcionar un archivo de lectura con las siguientes características

Línea 1:	200 201	No. de elementos	No. de nodos
Línea 2:	11	No. de líneas por leerse	
Línea 3:	1 11 1 0 0	0.5	0 0.8
	Primer número de nodo global		
	Ultimo número de nodo global		

Incremento en el número de nodo en la línea leída

Coordenada global x del nodo 1 en la línea

Coordenada global y del nodo 1 en la línea

Coordenada global x del último nodo en la línea

Coordenada global y del último nodo en la línea

Relación de la longitud del primer elemento a la del último elemento
en la línea

(la línea 3 se repite 11 veces)

Línea 4: 20 No. de renglones de elementos por leerse en la malla

Línea 5: 2 20 2 1 3 1 2 13

Primer número de elemento del renglón

Ultimo número de elemento del renglón

Incremento de número de elemento en el renglón

Incremento de número de nodo global en el renglón

Número de nodos de cada elemento

Arreglo de conectividad del primer elemento en el renglón (3
números)

(la línea 5 se repite 20 veces)

MESH arroja la malla de la Figura 2.2

La Figura 2.4 muestra una parte del archivo generado por el programa MESH correspondiente a la malla de la Figura 2.3. El número de elemento lo da el número de renglón consecutivo, mientras que el número de nodo local (1, 2 y 3) lo da la posición en la columna correspondiente. Por ejemplo, el elemento número 1 tiene como vértices a los nodos globales (13, 12, 1) siendo el nodo 13 su vértice número 1, el 12 su vértice número 2 y el nodo 1 su vértice número 3.

La segunda parte del archivo contiene las coordenadas (x, y) de cada nodo en forma consecutiva. Así, el primer nodo tiene coordenadas (0,0), el segundo (0.04444, 0), el tercero (0.09012, 0), etc.

	1	2	3
1	13	12	1
2	1	2	13
3	14	13	2
4	2	3	14
5	15	14	3
6	3	4	15
7	16	15	4
8	4	5	16
9	17	16	5
10	5	6	17
11	18	17	6
12	6	7	18
13	19	18	7
14	7	8	19
14	20	19	8
1	.00000	.00000	
2	.04444	.00000	
3	.09012	.00000	
4	.13704	.00000	
5	.18519	.00000	
6	.23457	.00000	
7	.28519	.00000	
8	.33704	.00000	
9	.39012	.00000	
10	.44444	.00000	
11	.50000	.00000	
12	.00000	.05625	
13	.05417	.05747	
14	.10741	.05867	
15	.15972	.05984	
16	.21111	.06100	
17	.26157	.06214	
18	.31111	.06325	
19	.35972	.06434	
20	.40741	.06542	
21	.45417	.06647	
22	.50000	.06750	

Figura 2.4 Vista parcial del archivo generado por MESH

La Figura 2.5 muestra la modificación realizada al archivo generado por el programa MESH, ésta consistió en la adición de tres columnas a la primera parte del archivo y que tienen el siguiente significado. La columna 4 indica si alguno de sus lados contiene una condición de frontera natural, el cero indica que no. La columna 5 indica el número de fase a la que pertenece el elemento; los elementos numerados del 1 al 8 pertenecen a la fase 2 mientras que los elementos del 9 al 15 pertenecen a la fase 1.

Por último, la columna 6 identifica aquellos elementos que contienen algún lado en la interfase; los elementos 8 y 9, se observa, son colindantes.

	1	2	3	4	5	6
1	13	12	1	0	2	0
2	1	2	13	0	2	0
3	14	13	2	0	2	0
4	2	3	14	0	2	0
5	15	14	3	0	2	0
6	3	4	15	0	2	0
7	16	15	4	0	2	0
8	4	5	16	0	2	1
9	17	16	5	0	1	1
10	5	6	17	0	1	0
11	18	17	6	0	1	0
12	6	7	18	0	1	0
13	19	18	7	0	1	0
14	7	8	19	0	1	0
15	20	19	8	0	1	0
	.00000	.00000				
	.04444	.00000				
	.09012	.00000				
	.13704	.00000				
	.18519	.00000				
	.23457	.00000				
	.28519	.00000				
	.33704	.00000				
	.39012	.00000				
	.44444	.00000				
	.50000	.00000				
	.00000	.05625				
	.05417	.05747				
	.10741	.05867				
	.15972	.05984				
	.21111	.06100				
	.26157	.06214				
	.31111	.06325				
	.35972	.06434				
	.40741	.06542				
	.45417	.06647				
	.50000	.06750				

Figura 2.5 Vista parcial del archivo modificado manualmente generado por MESH

2.3 Software Comercial de Elemento Finito

El primer software comercial de elemento finito apareció en 1964. Lo desarrolló la empresa Control Data Corporation para un ambiente de tiempo compartido. No estaban disponibles los preprocesadores (generadores de mallas) de tal manera que los ingenieros tenían que preparar los datos elemento por elemento y nodo por nodo. Una tarjeta perforada representaba cada elemento y cada nodo. Únicamente se podía resolver problemas lineales; sin embargo representó un avance en la complejidad de los problemas que podían manejarse en tiempos razonables. Más tarde, el software de elemento finito podía comprarse o rentarse para ejecutarse en computadoras corporativas. Típicamente la computadora corporativa había sido comprada para procesar datos financieros, de tal manera que la disponibilidad de la computadora por los ingenieros estaba restringida tal vez a las noches o fines de semana. La introducción de las estaciones de trabajo en 1980 trajo varias ventajas importantes. Las gráficas interactivas fueron prácticas y se logró la disponibilidad de computadoras poderosas para resolver problemas. Finalmente, la introducción de computadoras personales suficientemente poderosas para correr programas de elemento finito provee una manera efectiva de resolver problemas.

Hoy en día, disponemos de cientos de paquetes de programas comerciales de donde elegir. Unos pocos de ellos dominan el mercado. Es difícil hacer comparaciones puramente sobre la base del método de elemento finito ya que las compañías de software están diversificadas. Datos de Daratech sugieren que las

compañías listadas en la tabla 2.2 son los generadores dominantes de software de elemento finito de propósito general. Elegir entre uno de estos o de otros proveedores involucra un conjunto complejo de criterios que usualmente incluyen: versatilidad de análisis, facilidad de uso, eficiencia, costo, soporte técnico, entrenamiento y la facilidad de adaptación para resolver un problema particular de un usuario.

Al contrario de los primeros días, ahora podemos usar herramientas computacionales de diseño (CAD) para generar geometrías complejas a nivel de componente o de ensamblado. Podemos, con algunas restricciones, generar automáticamente elementos y nodos únicamente indicando la densidad nodal deseada, Ahora se dispone de software que trabaja en conjunto con los elementos finitos para generar estructuras de forma, tamaño y topología óptimas. El análisis no lineal que incluye el contacto, deflexiones grandes y comportamiento no lineal de los materiales ahora se conducen rutinariamente [18].

Compañía	Producto	Sitio web
Hibbitt, Jarlsson & Sorensen	ABAQUS	www.hks.com
Ansys, Incorporated	ANSYS	www.ansys.com
COMSOL Multiphysics	COMSOL	www.comsol.com
Structural Data Research Corp.	SDRC-Ideas	www.sdrc.com
Parametric Technology, Inc.	RASNA	www.ptc.com
MSC Software Corp.	MSC/NASTRAN	Mscsoftware.com

Tabla 2.2 Compañías líderes de software comercial de elemento finito

Capítulo 3.
Predicción de Difusividades Efectivas

En este capítulo usamos el método de elemento finito para resolver el problema planteado en el capítulo 1: el cálculo del coeficiente de difusividad efectivo resolviendo el problema de cerradura. Este cálculo se realizó para el caso en el que la resistencia interfacial es despreciable (esto implica hacer $\alpha = 0$ en la ecuación (1.19)). Para esto, procedemos a la discretización de los dominios que seleccionamos para la posterior solución del problema mediante el método de elemento finito. Como estrategia, primero se resolvió el problema en dominios de dos fases con geometría sencilla, esto sirvió para hacer una comparación de los resultados obtenidos en esta tesis contra los obtenidos en otro trabajo [15], donde se emplea un método de solución diferente. A continuación se resolvió el problema para el sistema con geometría más complicada usando una celda con una geometría semejante a la mostrada en la Figura 2.3.

3.1 Definición del problema

Se procederá a calcular coeficientes de difusividad efectivos empleando la ecuación (1.14) que se reproduce abajo

$$\frac{\mathbf{D}}{\mathcal{D}_\beta}{}^{\text{eff}}(\varepsilon_\sigma K_{eq} + \varepsilon_\beta) = (\varepsilon_\sigma \bar{k} + \varepsilon_\beta) \mathbf{I} + \frac{\bar{k}}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{g} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{f} dA \quad (1.15)$$

donde las variables \mathbf{f} y \mathbf{g} están dadas por el siguiente problema de valores a la frontera

$$\nabla^2 \mathbf{f} = \mathbf{0} \quad \text{en } V_\beta \quad (1.17)$$

$$\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{f} = \tilde{\kappa} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{g} + (\tilde{\kappa} - 1) \mathbf{n}_{\beta\sigma} \quad \text{en } A_{\beta\sigma} \quad (1.18)$$

$$-\mathbf{n}_{\sigma\beta} - \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \nabla \mathbf{g} = \frac{1}{\alpha'} (\mathbf{g} - \mathbf{f}) \quad \text{en } A_{\beta\sigma} \quad (1.19)$$

$$\nabla^2 \mathbf{g} = \mathbf{0} \quad \text{en } V_\sigma \quad (1.20)$$

$$\mathbf{f} = \mathbf{F}(\mathbf{r}) \quad \text{en } \mathcal{H}_{\beta e} \quad (1.21)$$

$$\mathbf{g} = \mathbf{G}(\mathbf{r}) \quad \text{en } \mathcal{H}_{\sigma e} \quad (1.22)$$

Para el caso en que la resistencia interfacial es despreciable, la condición (1.18) se modifica a la siguiente forma.

$$\mathbf{g} = \mathbf{f} \quad (1.19)'$$

Las condiciones frontera (1.20) y (1.21) pueden remplazarse por las siguientes condiciones de periodicidad [3], [25] que describen el dominio como uno espacialmente periódico

$$\mathbf{f}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{f}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.1)$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{g}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.2)$$

Aquí \mathbf{r} representa el vector de posición y \mathbf{l}_i los tres vectores unitarios que se necesitan para describir el medio periódico en el espacio. Para predecir los componentes del tensor de difusividad efectiva primero se tiene que seleccionar una celda unitaria que sea representativa de la estructura del sistema de dos

fases. Aquí, el concepto de celda unitaria se refiere a una unidad que se repite y que al hacerlo, reproduce el sistema macroscópico.

3.2 Caso unidimensional

Para el caso de la difusión sólo en la dirección x , el problema anterior se plantea en una celda unitaria vertical muy larga (Figura 3.1).

El problema se convierte en el siguiente

$$\frac{\partial^2 g}{\partial x^2} = 0 \quad \text{en } V_\sigma \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 0 \quad \text{en } V_\beta \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \kappa \frac{\partial g}{\partial x} + (\kappa - 1) \mathbf{n}_x \quad \text{en } x = x_1 \quad (3.5)$$

$$g = f \quad \text{en } x = x_1 \quad \text{si } \alpha = 0 \quad (3.6)$$

$$g = 0 \quad \text{en } x = 0 \quad (3.7)$$

$$f = 0 \quad \text{en } x = 1 \quad (3.8)$$

Resolviendo las ecuaciones (3.10) y (3.4) con las condiciones (3.7) y (3.8)

$$g = A x + B$$

$$f = C x + D$$

$$\text{en } x=0, \quad 0 = B$$

$$\text{en } x=1, \quad 0 = C + D$$

por lo tanto,

$$g = Ax \quad \text{y} \quad f = C(x-1)$$

Ahora, sustituyendo las condiciones (3.5) y (3.6), obtenemos el sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} x_1 A + (1-x_1) C &= 0 \\ -\kappa A + C &= (\kappa-1) \end{aligned}$$

que se resuelve para A y C

$$A = \frac{-(1-\kappa)(1-x_1)}{-x_1 - \kappa(1-x_1)} \quad \text{y} \quad C = \frac{x_1(1-\kappa)}{-x_1 - \kappa(1-x_1)}$$

o

$$A = \frac{-(1-\kappa)\varepsilon_\beta}{-\varepsilon_\sigma - \kappa\varepsilon_\beta} \quad \text{y} \quad C = \frac{\varepsilon_\sigma(1-\kappa)}{-\varepsilon_\sigma - \kappa\varepsilon_\beta}$$

por lo que

$$g = \frac{(1-\kappa)\varepsilon_\beta}{\varepsilon_\sigma + \kappa\varepsilon_\beta} x \quad \text{y} \quad f = \frac{\varepsilon_\sigma(1-\kappa)}{\varepsilon_\sigma + \kappa\varepsilon_\beta} (1-x) \quad (3.9)$$

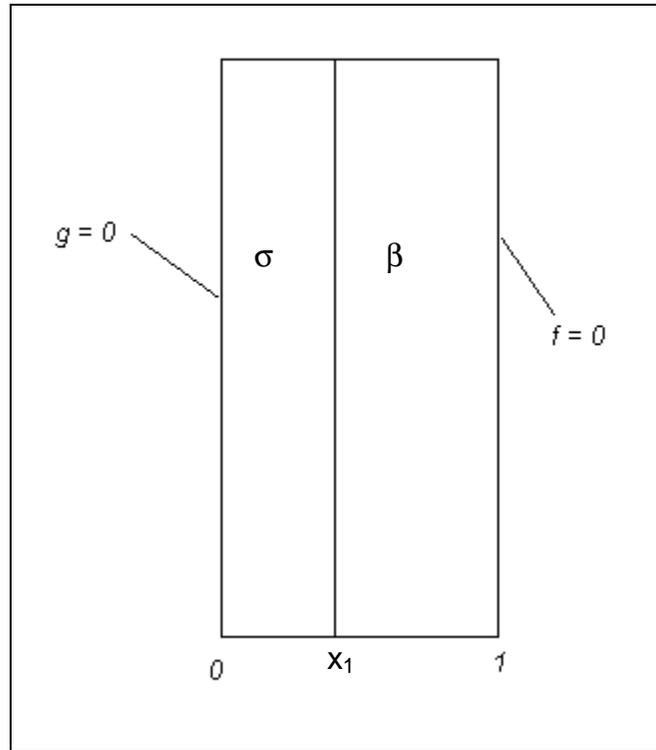


Figura 3.1 Celda para difusión unidimensional

3.3 Caso bidimensional con geometrías sencillas

Para geometrías de este tipo la difusión es isotrópica en el plano xy por lo que sólo es necesario resolver para los componentes x de los vectores \mathbf{f} y \mathbf{g} . El problema queda definido entonces para la celda (a) de la Figura 3.2 por el siguiente conjunto de ecuaciones

$$\frac{D_{xx}}{\mathcal{D}_\beta} (\varepsilon_\sigma K_{eq} + \varepsilon_\beta) = (\varepsilon_\sigma \bar{k} + \varepsilon_\beta) + \frac{\bar{k}}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} -n_x g_x dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} -n_x f_x dA \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial^2 f_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f_x}{\partial y^2} = 0 \quad \text{en} \quad V_\beta \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial^2 g_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 g_x}{\partial y^2} = 0 \quad \text{en} \quad V_\sigma \quad (3.12)$$

y las condiciones de frontera establecidas sólo para un cuarto de celda.

$$\frac{\partial f_x}{\partial x} = \bar{\kappa} \frac{\partial g_x}{\partial x} + (\bar{\kappa} - 1) \quad \text{en} \quad x = \frac{a}{2}, \quad 0 \leq y \leq \frac{b}{2} \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial f_x}{\partial x} = \bar{\kappa} \frac{\partial g_x}{\partial x} \quad \text{en} \quad y = \frac{b}{2}, \quad 0 \leq x \leq \frac{a}{2} \quad (3.14)$$

$$g_x = f_x \quad \text{en} \quad x = \frac{a}{2}, \quad 0 \leq y \leq \frac{b}{2} \quad (3.15)$$

$$g_x = f_x \quad \text{en} \quad y = \frac{b}{2}, \quad 0 \leq x \leq \frac{a}{2} \quad (3.16)$$

Esto es válido si usamos las condiciones de simetría y antisimetría siguientes.

Condiciones de simetría

$$\frac{\partial f_x}{\partial y} = 0 \quad \text{en} \quad y = 0, \quad \frac{l_b}{2} \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial g_x}{\partial y} = 0 \quad \text{en} \quad y = 0 \quad (3.18)$$

Condiciones de antisimetría

$$f_x = 0 \quad \text{en} \quad x = 0, \quad \frac{l_a}{2} \quad (3.19)$$

$$g_x = 0 \quad \text{en} \quad x = 0 \quad (3.20)$$

a y b son las dimensiones de la partícula de la fase σ , tal como se muestra en la Figura 3.2 (a). l_a y l_b son las dimensiones de las celdas unitarias en la Figura 3.2. El problema determinado por las ecuaciones (3.11) – (3.12) con las condiciones (3.13) – (3.16) y (3.17) - (3.20) se resolvió usando las celdas unitarias mostradas en la Figura 3.2. Los resultados se presentan en el siguiente capítulo.

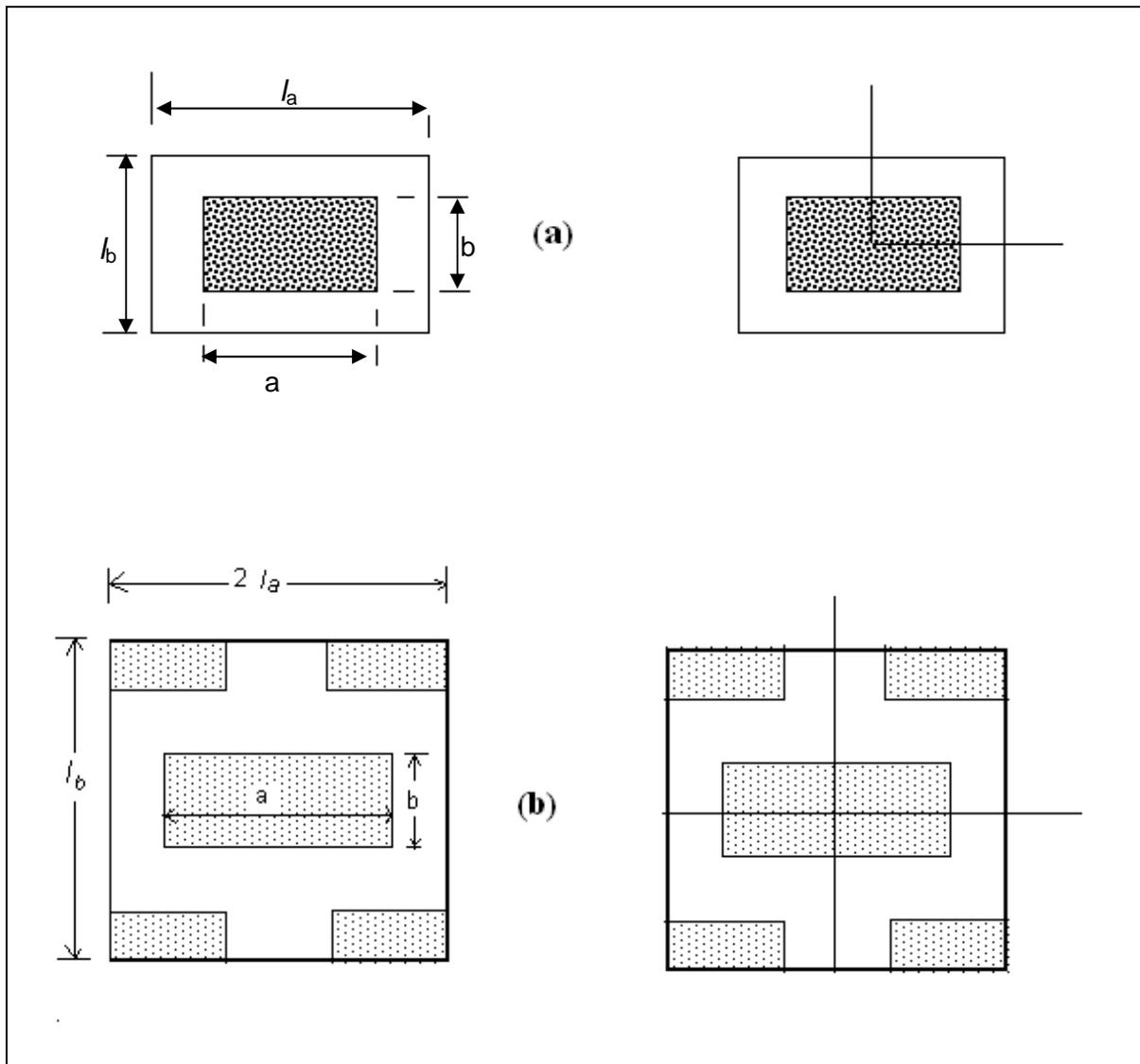


Figura 3.2 Celdas unitarias para los modelos de la Figura 3.3

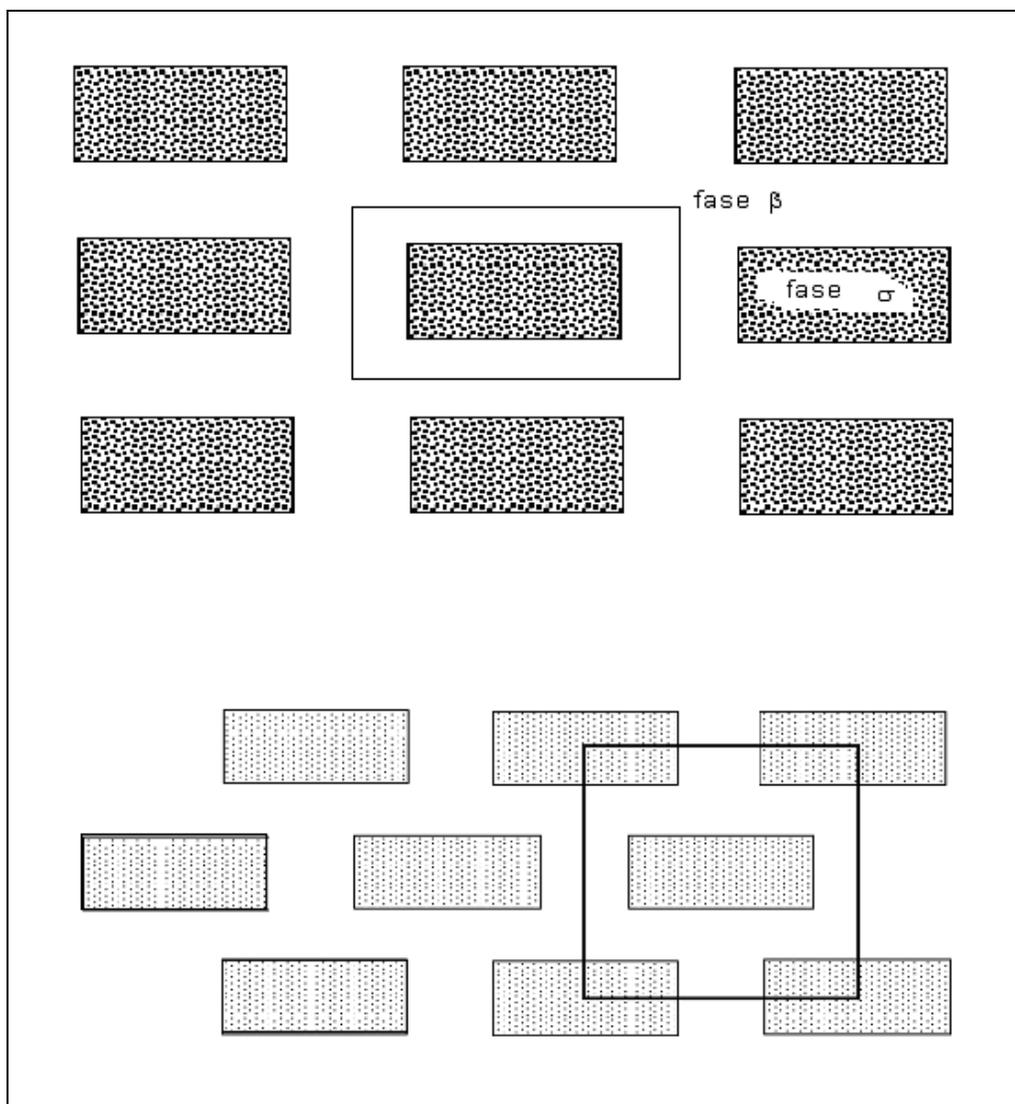


Figura 3.3 Modelos de arreglos regulares de paralelepípedos mostrando una celda unitaria del medio espacialmente periódico

3.4 Caso bidimensional con geometrías complejas

Debido a limitaciones computacionales, otros estudios teóricos previos se han restringido a geometrías simples. Sin embargo, es importante notar que la complejidad asociada al tipo de geometría no es una limitante del método del promedio volumétrico. Por ejemplo, sistemas tan complejos como el mostrado en la Figura 3.4 pueden ser tratados. La Figura 3.4 es una ampliación de una celda representativa de la Figura 3.5, la cual muestra una reconstrucción de una fotografía tomada de microscopio electrónico de un sistema celular compuesto de glóbulos rojos empacados.

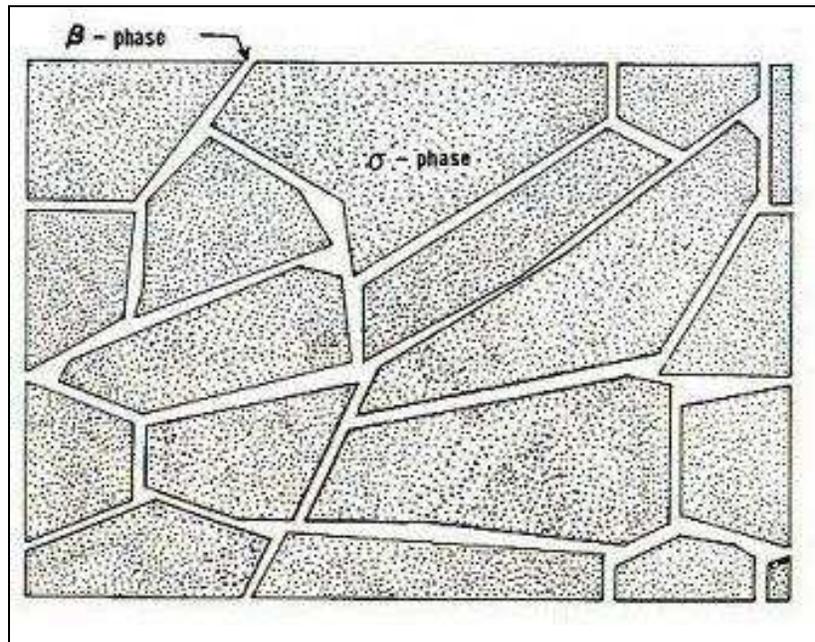


Figura 3.4 Celda unitaria para el medio espacialmente periódico mostrado en la Figura 3.5. La figura muestra glóbulos rojos en fase extracelular

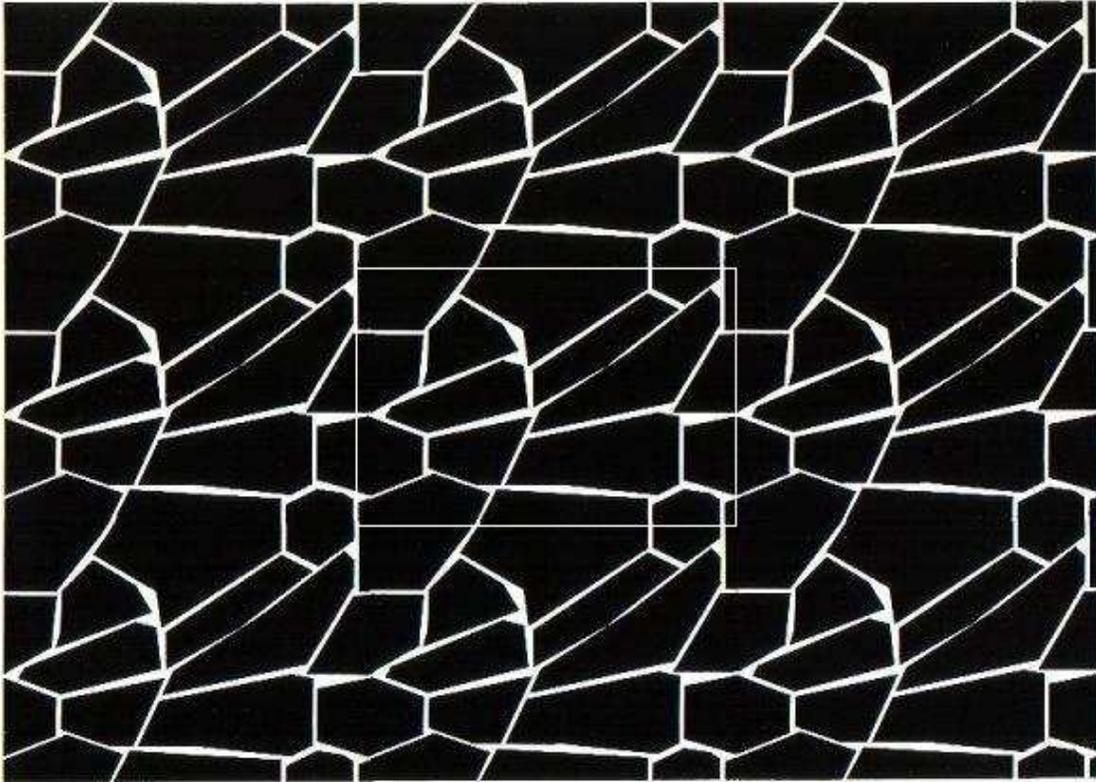


Figura 3.5 Fotografía modificada de glóbulos rojos empaçados

Resolver el problema equivalente al formulado por las ecuaciones (3.11) – (3.20) para un medio espacialmente periódico como el de las Figuras 3.4 y 3.5 sigue requiriendo de un gran esfuerzo computacional. Por esta razón, nosotros aproximamos el medio representado por las Figuras 3.4 y 3.5 por el medio espacialmente periódico de la Figura 3.6 y calculamos coeficientes de difusividad efectivos resolviendo el problema usando el método de elemento finito. Los resultados se discuten en el siguiente capítulo.

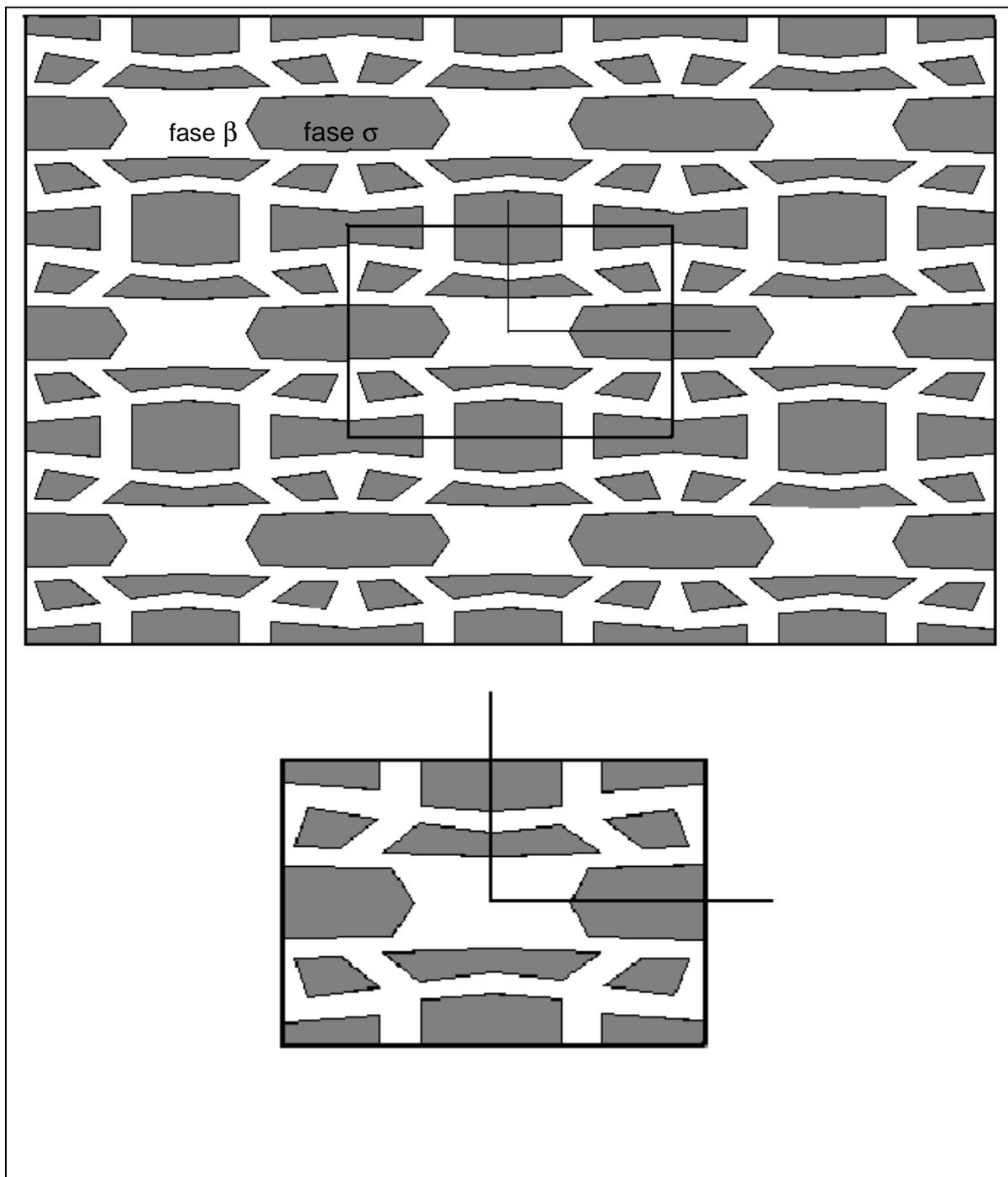


Figura 3.6 Medio espacialmente periódico mostrando una celda unitaria

Capítulo 4.
Resultados y Discusión

En este capítulo presentamos como resultados de este trabajo los coeficientes de difusividad efectivos calculados usando una celda unitaria con la geometría mostrada en la Figura 4.2. Éstos se comparan con los resultados arrojados usando las geometrías más sencillas de la Figura 4.1 para mostrar el efecto de la geometría de la celda sobre la predicción del coeficiente de difusividad efectivo. Para el caso de los cálculos con las celdas de la Figura 4.1, también se hace una comparación entre los resultados obtenidos con el método de elemento finito (MEF) usado en este trabajo y los de Ochoa Tapia [15], obtenidos por medio del método de diferencias finitas (MDF).

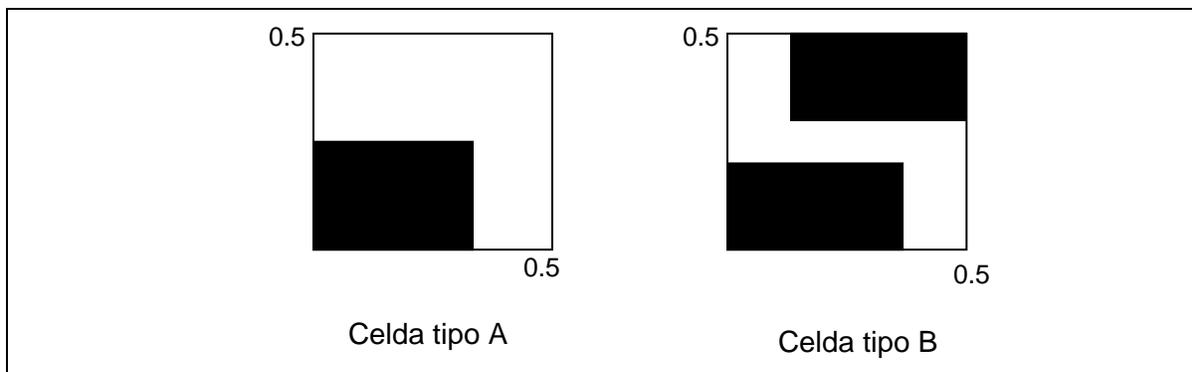


Figura 4.1 Celdas a las que se hace referencia en las Figuras 4.3 – 4.5

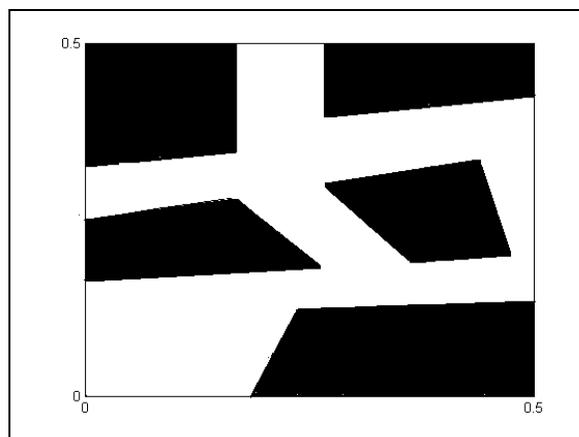


Figura 4.2 Celda con geometría compleja

4.1 Discusión de los resultados

En las Tablas 4.1 y 4.2 se muestran los valores de la componente D_{xx} del tensor de difusividad efectiva en forma adimensional definido por

$$D^* = \frac{D_{xx}}{\mathcal{D}_\beta} (\varepsilon_\sigma K_{eq} + \varepsilon_\beta)$$

Estos datos fueron calculados como se describe en el capítulo anterior usando el método de elemento finito (MEF) para el caso en que la fracción volumétrica de la fase continua (fase β) es 0.64 y 0.36, respectivamente. También se muestra en las Tablas 4.1 y 4.2 una comparación con los valores obtenidos a partir de la solución del modelo con el método de diferencias finitas (MDF).

Los resultados se muestran en forma gráfica, en las Figuras 4.3 y 4.4, como la componente adimensional de D_{xx} , D^* , en función de κ ,

$$\kappa = \frac{\mathcal{D}_\sigma}{\mathcal{D}_\beta} K_{eq}$$

donde κ es la relación modificada de las permeabilidades de la fase dispersa (fase σ) a la de la fase β para una celda tipo A (ver Figura 4.1). Cada curva tiene como parámetro a la fracción volumétrica de la fase β . Al mismo tiempo, se muestra en forma tabular una comparación entre los valores calculados con el MEF y los calculados con el MDF. Todos los casos reportados en las Figuras y Tablas son para un valor de $\alpha = 0$, esto es, para el caso en el que la permeabilidad de la

membrana tiende a infinito. Por otro lado, valores de κ pequeños indican que la permeabilidad de la fase σ es menor o mucho menor que la de la fase β .

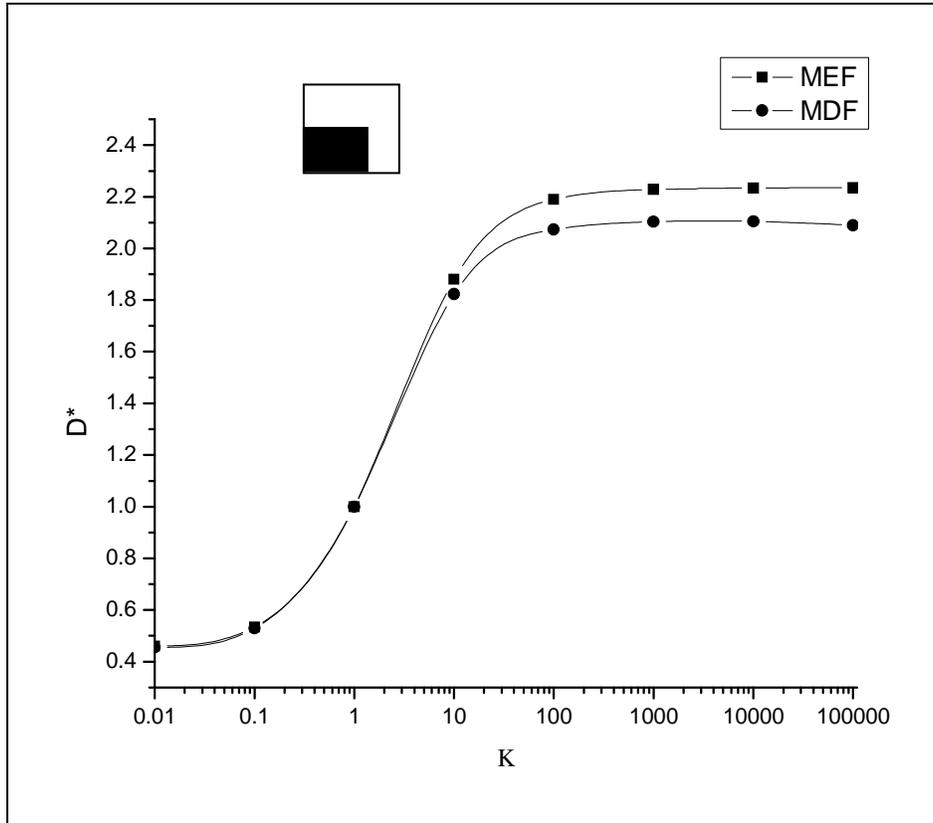


Figura 4.3 Comparación de los valores de D^* calculados por los métodos de elemento finito (MEF) y por diferencias finitas (MDF) para la celda mostrada con $\varepsilon_\beta = 0.64$

$\bar{\kappa}$	D^* ($\alpha = 0$)		
	MEF	MDF	% de error
0.01	0.4607	0.4550	1.2527
0.10	0.5341	0.5290	0.9641
1.0	1.0	1.0	0.0
10.0	1.8806	1.8230	3.1596
100.0	2.1894	2.0730	5.6151
1000.0	2.2288	2.1030	5.9819
10^4	2.2330	2.1050	6.0808
10^5	2.2347	2.0900	6.9234

Tabla 4.1 Comparación de los valores de D^* calculados por los métodos de elemento finito (MEF) y por diferencias finitas (MDF) para una celda con $\varepsilon_\beta = 0.64$ (Figura 4.3)

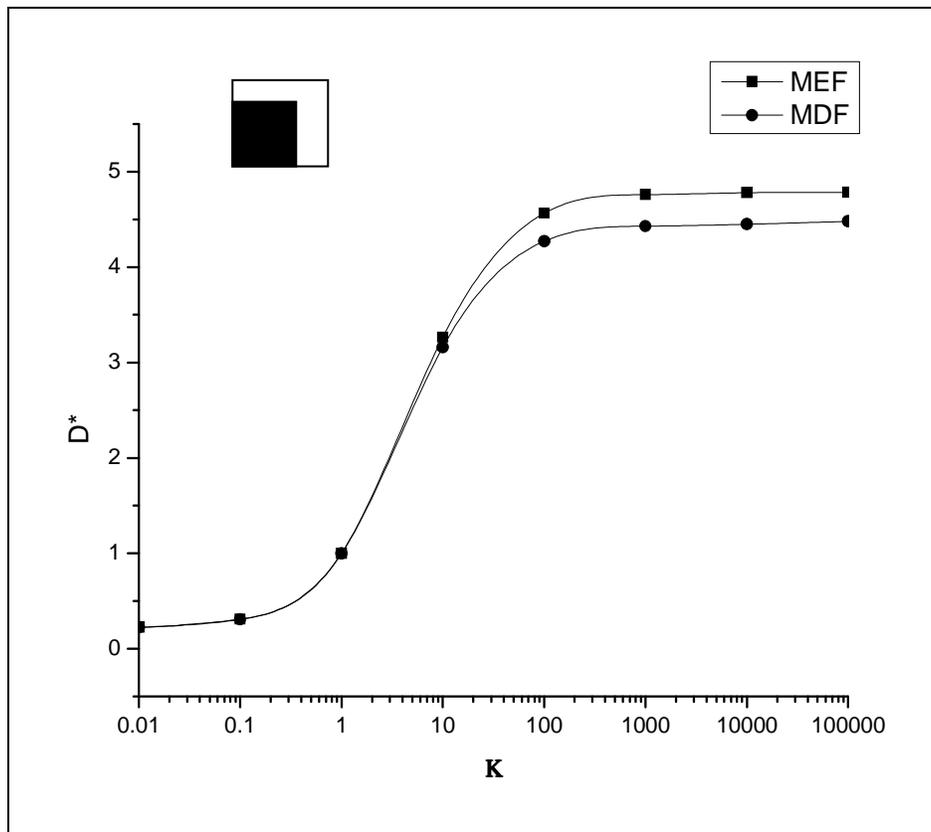


Figura 4.4 Comparación de los valores de D^* calculados por los métodos de elemento finito (MEF) y por diferencias finitas (MDF) para la celda mostrada con $\varepsilon_\beta = 0.36$

\bar{K}	$D^* (\alpha = 0)$		
	MEF	MDF	% de error
0.01	0.2245	0.2220	1.1261
0.10	0.3099	0.3070	0.9446
1.0	1.0	1.0	0.0
10.0	3.2645	3.1580	3.3724
100.0	4.5649	4.2710	6.8813
1000.0	4.7610	4.4300	7.4718
10^4	4.7815	4.4500	7.4494
10^5	4.7822	4.4790	6.7694

Tabla 4.2 Comparación de los valores de D^* calculados por los métodos de elemento finito (MEF) y por diferencias finitas (DF) para una celda con $\varepsilon_\beta = 0.36$ (Figura 4.4)

La Figura 4.3 también muestra, más allá de las diferencias en los valores numéricos arrojados por los métodos numéricos empleados, que el cálculo de D_{xx} es sensible a la fracción volumétrica de la fase β , aumentando el valor de D_{xx} a medida que ε_{β} disminuye.

En la Figura 4.5 se presenta el comportamiento de D^* como función de κ para diferentes valores de ε_{β} , para la celda tipo B. Estos resultados también se muestran en la Tabla 4.3

Por otro lado, una comparación entre las gráficas de las Figuras 4.3 y 4.4 con las de la Figura 4.5 muestra que el cálculo de D_{xx} es sensible al modelo del medio elegido, A o B. Se presenta una comparación tabular para el mismo valor de ε_{β} en la tabla 4.3

Finalmente se presentan en la Figura 4.6 y la tabla 4.4 los resultados para el medio de la Figura 3.6 usando la celda con geometría compleja mostrada en la Figura 4.2 así como una comparación de los resultados obtenidos para tres tipos diferentes de celdas unitarias (Figura 4.8). En esta última figura se aprecia una ligera desviación de la curva calculada para geometrías complejas con respecto del comportamiento típico que venían mostrando las curvas calculadas para geometrías más regulares. Esto puede deberse a factores que van desde el método numérico elegido para hacer los cálculos, la forma de las funciones de interpolación usadas (lineales) y la forma de los elementos finitos (triángulos) hasta posibles errores numéricos o de programación.

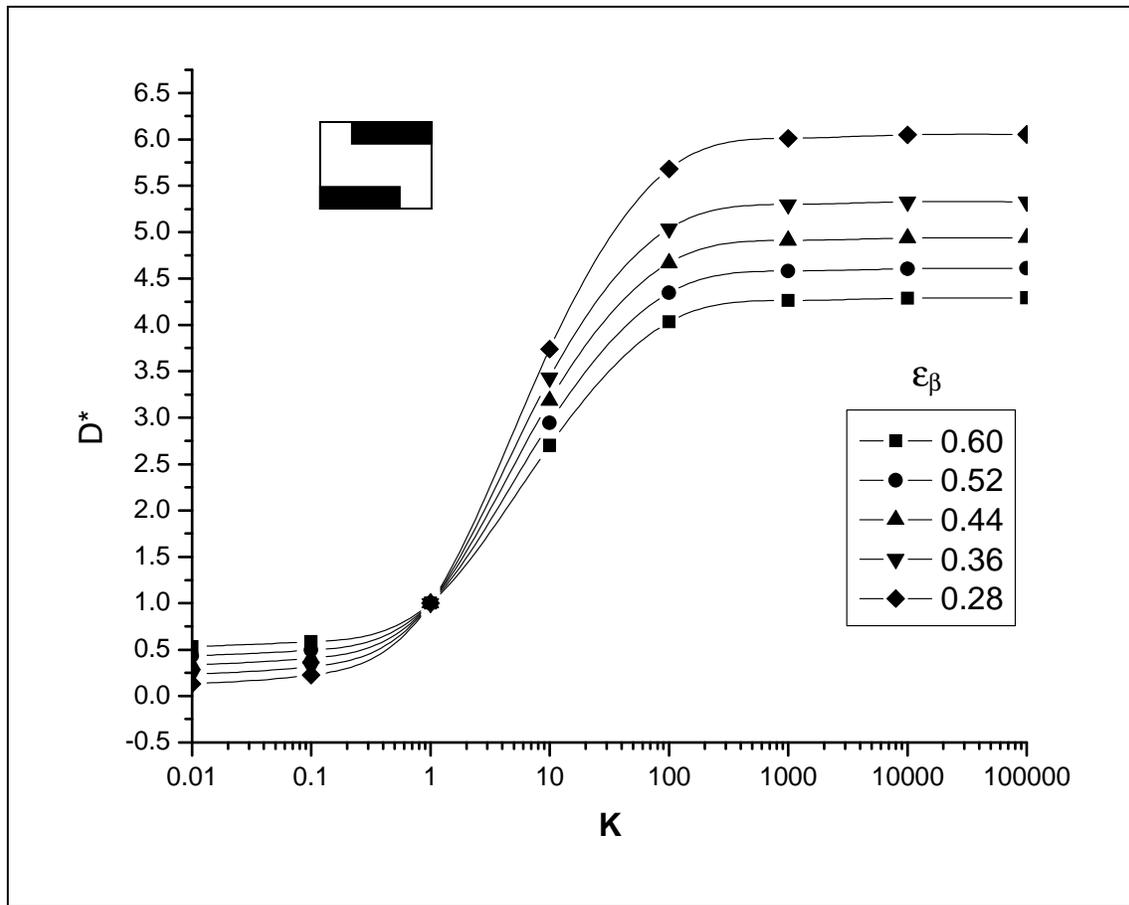


Figura 4.5 Comparación de los valores de D^* calculados por el método de elemento finito (MEF) en función de \bar{K} para la celda B mostrada y en función del parámetro ϵ_β

\bar{K}	D^* ($\alpha = 0$)				
	ϵ_β				
	0.6	0.52	0.44	0.36	0.28
0.01	0.5327	0.4339	0.3345	0.2340	0.1303
0.10	0.5836	0.4958	0.4074	0.3179	0.2259
1.0	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
10.0	2.6993	2.9438	3.1833	3.4313	3.7386
100.0	4.0312	4.3470	4.6676	5.0389	5.6812
1000.0	4.2630	4.5816	4.9091	5.2983	6.0124
10^4	4.2879	4.6065	4.9348	5.3257	6.0482
10^5	4.2910	4.6081	4.9376	5.3272	6.0543

Tabla 4.3 Comparación de los valores de D^* calculados por el método de elemento finito (MEF) en función de \bar{K} para la celda mostrada en la Figura 4.5 y en función del parámetro ϵ_β

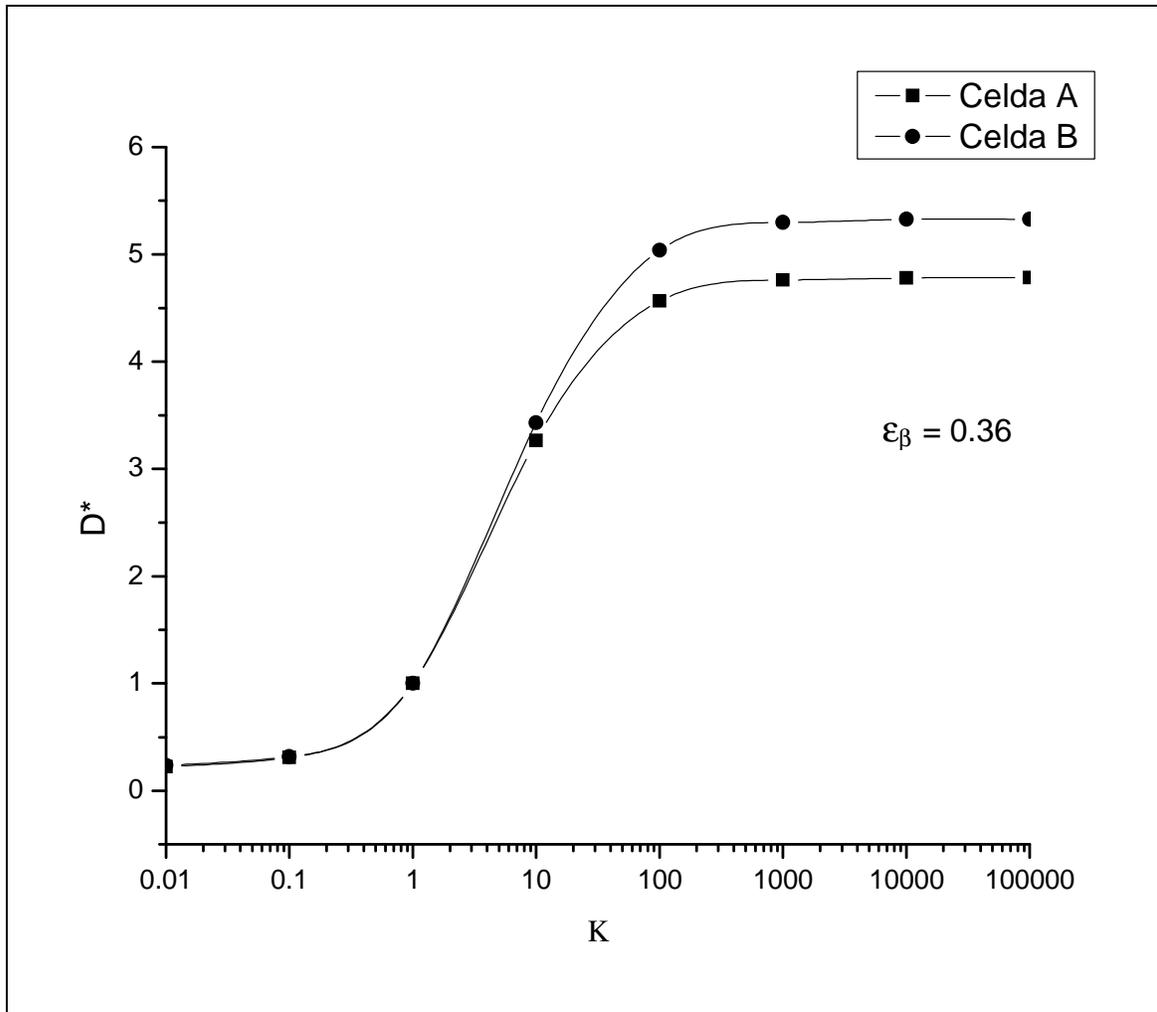


Figura 4.6 Comparación del D^* calculado para dos celdas diferentes. $\epsilon_{\beta} = 0.36$ para ambas celdas (MEF)

\bar{K}	$D^* (\epsilon_{\beta} = 0.36)$	
	Celda A	Celda B
0.01	0.2245	0.2340
0.10	0.3099	0.3179
1.0	1.0	1.0000
10.0	3.2645	3.4313
100.0	4.5649	5.0389
1000.0	4.7610	5.2983
10^4	4.7815	5.3257
10^5	4.7822	5.3272

Tabla 4.4 Comparación tabular de valores de D^* calculado para dos tipos de celdas diferentes. $\epsilon_{\beta} = 0.36$ para ambas celdas (MEF)

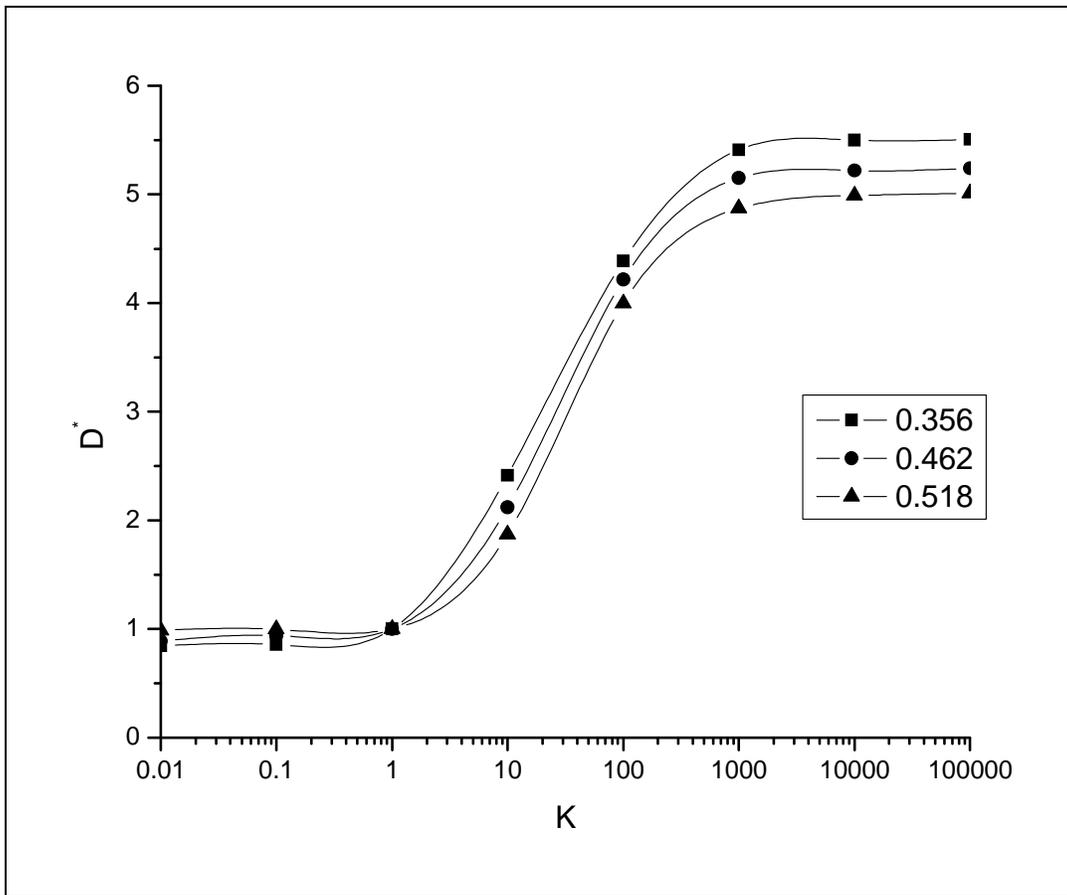


Figura 4.7 Resultados para la celda con geometría compleja mostrada en la Figura 4.2 para diferentes valores de ϵ_{β} .

$D^* (\alpha = 0)$			
\bar{k}	ϵ_{β}		
	0.356	0.462	0.518
0.01	0.8418	0.8890	0.9882
0.10	0.8574	0.9391	0.9981
1.0	1.0	1.0	1.0
10.0	2.4140	2.1211	1.8734
100.0	4.3841	4.2153	3.9964
1000.0	5.4100	5.1502	4.8715
10^4	5.5022	5.2222	4.9971
10^5	5.5050	5.2413	5.0128

Tabla 4.5 Resultados correspondientes a la Figura 4.7

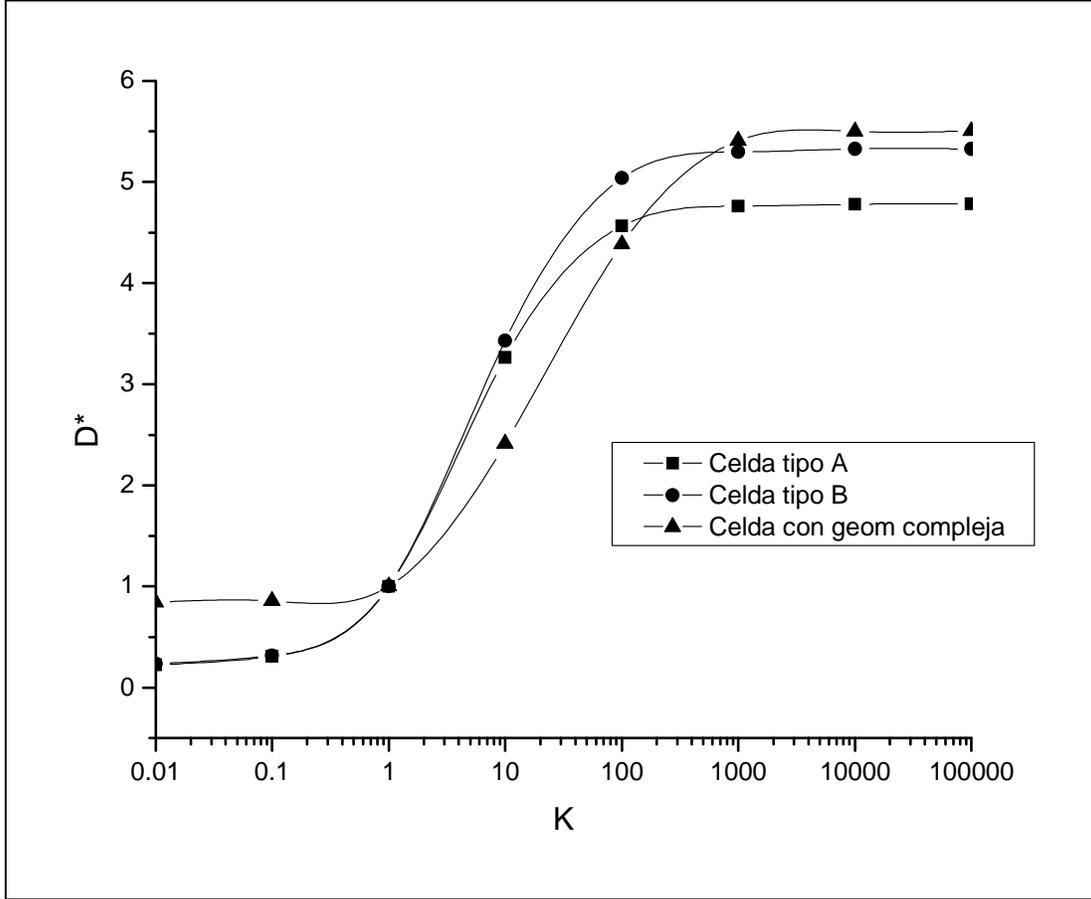


Figura 4.8. Comparación de los resultados obtenidos para tres tipos de celda unitaria ($\epsilon_\beta = 0.36$) (MEF)

Conclusiones

La formulación matemática del problema fue implementada usando el método del promedio volumétrico (MPV). El problema de cerradura que surge fue resuelto para modelos de medios porosos espacialmente periódicos usando el método de elemento finito (MEF).

Se desarrolló un código de elemento finito que permitió atacar y resolver un sistema de dos ecuaciones diferenciales parciales simultáneas acopladas.

La solución numérica del problema permitió la determinación de las variables de cerradura, \mathbf{f} y \mathbf{g} , usadas para predecir valores del coeficiente de difusividad efectivo para el sistema de dos fases.

Se mostró la concordancia de los resultados obtenidos en este trabajo mediante el MEF con los obtenidos por el método de diferencias finitas para el caso de geometrías bidimensionales sencillas, para el caso en los que $\alpha = 0$. Esto es, nuestros cálculos no consideraron resistencia interfacial.

Se presentaron los resultados de esta tesis mostrando los cálculos realizados usando una celda de un medio con geometría compleja, con los de una celda de las mismas dimensiones con una geometría más sencilla para un mismo valor de fracciones de la fase β , ϵ_β , mostrándose el comportamiento similar entre los mismos.

Finalmente, debemos decir que este trabajo presenta el cálculo de coeficientes efectivos en un medio representando por una geometría compleja. A pesar de las

limitaciones encontradas en esta tesis, los resultados deben servir como referencia para trabajos futuros que en la misma dirección.

Los procesos en los que se presenta el proceso de difusión de masa son muchos y variados. Por ejemplo, la difusión de oxígeno, azúcares y proteínas que tiene lugar en la sangre. Otro ejemplo es el transporte a través de membranas, que puede algunas veces producir separaciones físicas y químicas a bajo costo, de ahí que el conocimiento de valores del coeficiente de difusividad efectivo sea un reto y una motivación para trabajo futuro.

Quedan pendientes, a mi parecer, algunas tareas complementarias a la línea de investigación que hemos seguido. Una de ellas es la obtención de datos experimentales en nuestros laboratorios para compararlos directamente con los obtenidos a partir del método del promedio volumétrico. La utilización de un software comercial para análisis de elemento finito es otra tarea pendiente. Cabe señalar que aún cuando se encuentre disponible una herramienta como esta última, su uso es oscuro y nada fácil si no se conocen los principios sobre los que están contruidos.

Bibliografía

- [1] Anderson, T.B. and Jackson, R. A fluid mechanical description of fluidized beds. *Ind. Eng. Chem. Fundam.* 6: 527–538, 1967.
- [2] Carberry J., Chemical and catalytic reaction engineering, *Mc-Graw Hill*, USA. 1976.
- [3] Carbonell, R. G., and Whitaker, S., Heat and Mass Transfer in Porous Media en Fundamentals of Transport in Porous Media, Bear, J. and Yavuz, M. Editors. *NATO ASI Series*, No. 82, Martinus Nijhoff Publ. 1984 pp.121-198
- [4] Crapiste, G.H., Rotstien, E. and Whitaker, S. A General Closure Scheme for the Method of Volume Averaging, *Chem. Eng. Sci.*, **41** (5), 227-235, 1986.
- [5] Crapiste, G.H., Whitaker, S. and Rotstien, E., Drying of Cellular Material-I. A Mass Transfer Theory, *Chem. Eng. Sci.*, **43** (5), 2919-2928, 1988.
- [6] Engels, F. Dialectics of Nature. Progress Publishers, Moscow, 1974
- [7] Fogler H. S., Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas, tercera edición, Pearson educación, México. 2001
- [8] Gray, W.G., 1975. A derivation of the equations for multiphase transport. *Chem. Eng. Sci.*, **30**, 229-233, 1975
- [9] Hill, Jr., Ch. G. An Introduction to Chemical Engineering Kinetics & Reactor Design, John Wiley & Sons, U.S.A. 1977
- [10] Latapí S. Pablo, Conferencia Magistral al recibir el Doctorado Honoris Causa de la Universidad Autónoma Metropolitana, 2007
- [11] Marx, C. y Engels, F. Manifiesto del Partido Comunista. Editorial Progreso Moscu, 1978

- [12] Nozard, I., Carbonell, R. G., and Whitaker, S., Heat Conduction in Multiphase Systems I. Theory and Experiment for Two-phase Systems, *Chem. Eng. Sci.*, **40**, 843-855, 1985.
- [13] Ochoa-Tapia, J. A., Stroeve, P., and Whitaker, S., Diffusion and Reaction in Cellular Media, *Chem. Eng. Sci.*, **41** (12), 2999-3013, 1986.
- [14] Ochoa-Tapia, J. A., Stroeve, P., and Whitaker, S., Diffusive Transport in Two-phase Media: Spatially Periodic Models and Maxwell's Theory for Isotropic and Anisotropic Systems, *Chem. Eng. Sci.*, **49** (5), 709-726, 1994.
- [15] Ochoa-Tapia, J. A., Diffusion and Reaction in Heterogeneous Media, Ph. D. Thesis, University of California, Davis. 1987
- [16] Philibert, Jean, One and a Half Century of Diffusion: Fick, Einstein, before and beyond, *Diffusion Fundamentals*, **2**, 2005
- [17] Pinder, George F. Gray, William G., Essentials of Multiphase Flow and Transport in Porous Media, John Wiley & Sons, 2008.
- [18] Reddy, J. N., An Introduction to the Finite Element Method, 2nd Ed. McGraw-Hill Int. Ed. 1993.
- [19] Ryan, D., Carbonell, R. G., and Whitaker, S., A Theory of Diffusion and Reaction in porous Media, *AIChE Symposium Series*, **77**, No. 202, 46-62, 1981.
- [20] Slattery, J.C. Flow of viscoelastic fluids through porous media. *AIChE J.* **13**: 1066–1071, 1967.

- [21] Ulson de Souza, A. A. and Whitaker, S. The Modeling of a Textile Drying Process Utilizing the Method of Volume Averaging, *Brazilian Journal of Chem. Eng.*, **20**(4) 445-453, 2003
- [22] Whitaker, S., Improved Constraints for the Principle of Local Thermal Equilibrium, *IECh. Res.* **30**, 983-977, 1991
- [23] Whitaker, S., The Role of the Species Momentum Equation in the Analysis of the Stefan Diffusion Tube, *IECh. Res.* **30**, 978-983, 1991
- [24] Whitaker, S., Theory and Applications of Transport in Porous Media: The Method of Volume Averaging. Kluwer Academic, 1999.
- [25] Whitaker, S., Transport Processes with Heterogeneous Reaction en Concepts and Design of Chemical Reactors. Edited by Whitaker, S. and Casano, A.E. 1-94, 1986
- [26] Whitaker, S. Diffusion and dispersion in porous media. *AIChE J.* 13: 420–427, 1967.
- [27] Whitaker S., Fundamental principles of heat transfer, Krieger Publishing Company, USA, 1983
- [28] White, R. E., An Introduction to the Finite Element Method with Applications to Nonlinear Problems, John Wiley & Sons, 1985.
- [29] Wood, B. D. and Whitaker, S., Multi-species Diffusion and Reaction in Biofilms and Cellular Media, *Chem. Eng. Sci.*, **55**, 3397-3418, 2000.
- [30] Wood B., Quintard M., Whitaker S., Calculation of effective diffusivities for biofilms and tissues, *Biotechnology and bioengineering*, **77**, 495-516, 2002

[31] Wood B., Whitaker S., Multi-species diffusion and reaction in cellular media,
Chem. Eng. Sci., **55**, 3397-3418. 2000