



REVISTA TÉCNICA

DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA

Una Revista Internacional Arbitrada
que está indizada en las publicaciones
de referencia y comentarios:

- SCOPUS
- Compendex
- Chemical Abstracts
- Metal Abstracts
- World Aluminium Abstracts
- Mathematical Reviews
- Petroleum Abstracts
- Current Mathematical Publications
- MathSci
- Revenct
- Materials Information
- Periódica
- Actualidad Iberoamericana

UNIVERSIDAD DEL ZULIA



REVISTA TÉCNICA
DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA

Hacia los 130 años de creación de la Universidad del Zulia

"Buscar la verdad y afianzar los valores trascendentales", misión de las universidades en su artículo primero, inspirado en los principios humanísticos. Ley de Universidades 8 de septiembre de 1970.

Relationship between effective diffusivity and structural parameters of unconsolidated, two-dimensional porous media

Juan Primera^{1,2}, * , Hugo Bohórquez² 

¹Departamento de Ciencias Agrícolas. Facultad de Ingeniería Agrícola. Universidad Técnica de Manabí. Ecuador

²Departamento de Física, Facultad Experimental de Ciencias, Universidad del Zulia, Venezuela.

* Autor de correspondencia: jprimera@utm.edu.ec; juan.primera2009@gmail.com

<https://doi.org/10.22209/rt.ve202020n2a08>

Recepción: 21/02/2020 | Aceptación: 28/05/2020 | Publicación: 31/07/2020

Abstract

Various studies confirm the relationship between the diffusivity of a substance and the structural parameters of a porous medium. However, no general relationships have been established, being its determination an open problem. For these reasons, and due to the importance of knowledge of mass transfer processes in porous media, an approach to this problem is obtained in this work. To do this, there were computationally generated and characterized biphasic porous media with spatial periodicity, formed by ordered and disorderly dispersed disks on a flat surface. Then, the effective diffusivity was calculated, from the spatial averaging of the second Fick's Law on a representative elemental volume (VER) of such media. Finally, relationships were established between it and the structural parameters, showing that porosity is the most influential parameter in effective diffusivity, followed by the shape of the dispersing particle. The results obtained are consistent with previous experimental and theoretical results, which confirms the established conclusions.

Keywords: Effective diffusivity; porous media; structural parameters; averaging volume.

Relación entre la difusividad efectiva y los parámetros estructurales de medios porosos no consolidados, bidimensionales

Resumen

Diversos estudios confirman la relación entre la difusividad de una sustancia y los parámetros estructurales de un medio poroso. Sin embargo, no se han establecido relaciones generales, siendo su determinación un problema abierto. Por tales razones, y por la importancia del conocimiento de los procesos de transferencia de masa en medios porosos, se obtiene en este trabajo un acercamiento a este problema. Para ello, se generaron computacionalmente y caracterizaron medios porosos bifásicos con periodicidad espacial, formados por discos dispersos ordenada y desordenadamente sobre una superficie plana. Luego, se calculó la difusividad efectiva, a partir del promediado espacial de la segunda Ley de Fick sobre un volumen elemental representativo (VER) de tales medios. Por último, se establecieron relaciones entre ésta y los parámetros estructurales, mostrándose que la porosidad es el parámetro más influyente en la difusividad efectiva, seguida de la forma de la partícula dispersante. Los resultados obtenidos concuerdan con resultados experimentales y teóricos previos, lo cual confirma las conclusiones establecidas.

Palabras clave: difusividad efectiva; medios porosos; parámetros estructurales; promediado volumétrico.

Introducción

El flujo difusivo, es uno de los fenómenos de transporte fundamentales en la naturaleza [1]. En medios porosos, materiales heterogéneos formados por una fase sólida con espacios vacíos llamados poros [2, 3], la difusión es uno de los procesos decisivos en la transferencia de masa. La difusión en medios porosos es un campo de estudio de extensas áreas de la ciencia y la tecnología, convirtiéndose en tema de verdadera importancia interdisciplinaria.

Varios estudios confirman la relación entre la difusividad de una sustancia y las propiedades estructurales de un medio poroso, como la porosidad, la superficie específica, el tamaño de poro y la Distribución de Tamaño de Poro (DTP) [2-8]. Sin embargo, no se han establecido relaciones generales, siendo la determinación de tal relación un problema abierto. El estudio de modelos simples permite analizar controladamente la conexión entre las diferentes variables que intervienen en el fenómeno de interés, convirtiéndose en una alternativa para abordar el problema.

En este trabajo se ha pretendido un acercamiento a este problema usando modelos de medios porosos no consolidados, bidimensionales, donde una fase es un sólido constituido por partículas planas dispersas en forma ordenada y desordenada o aleatoria, generados computacionalmente, determinándose en primer lugar, los parámetros estructurales antes mencionados, y en segundo lugar, determinándose la difusividad efectiva, a partir del promediado espacial de la segunda Ley de Fick de la difusión, usándose el Método del Promediado Volumétrico (MPV) [1, 2, 9-19], trabajando para ello sobre un Volumen Elemental Representativo (VER) de un medio poroso, el cual se define como el volumen más pequeño para el cual las fluctuaciones del valor de la propiedad estudiada se hacen mínimos.

En el método MPV las ecuaciones resultantes, válidas a escala macroscópica, se obtienen a partir de las ecuaciones puntuales válidas a nivel de los poros, y son similares a las empleadas para medios homogéneos. Además, permite establecer modelos predictivos para determinar los coeficientes de las ecuaciones, en este caso la difusividad efectiva de la sustancia difundida, a partir del conocimiento de la geometría del medio [9-17].

Metodología

Generación de los Medios Porosos

Se generaron dos tipos de medios porosos: ordenados y desordenados; compuestos por una fase sólida dispersa (fase σ) representada por partículas planas (cuadrados o discos), y por una fase no sólida o fluida continua (fase β) representada por los poros que quedan entre las partículas. Ambos medios son periódicos, formados

por la repetición espacial de una celda unitaria. En los ordenados, la celda unitaria es de forma cuadrada de lado ℓ (en unidades arbitrarias, 1u.a.), la fase sólida discontinua es un cuadrado de lado ℓ_σ centrado en la celda (Figura 1a), o un disco de diámetro ℓ_σ (Figura 1b).

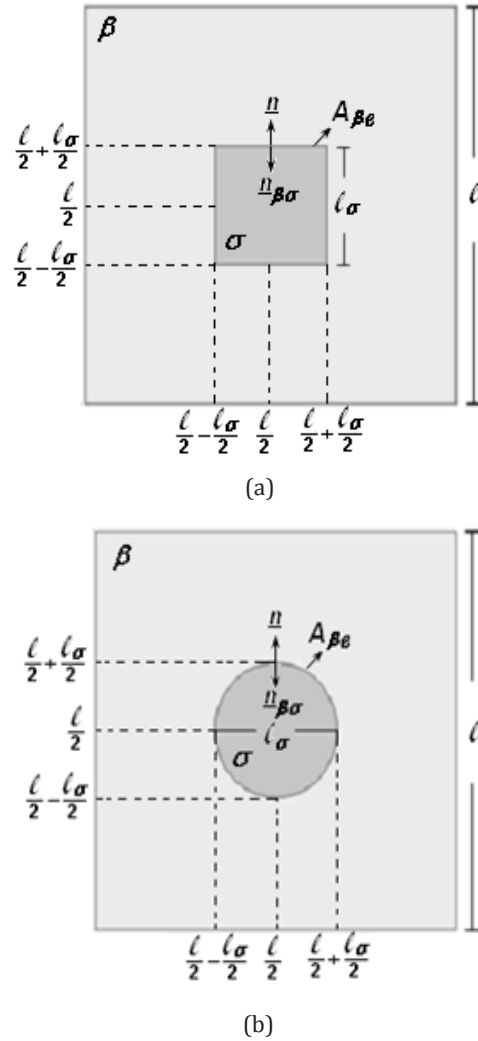


Figura 1. Celda unitaria de un medio ordenado (a) centrada por un cuadrado y (b) centrada por un círculo.

En los desordenados, las celdas unitarias de lado ℓ (a determinar según el VER) fueron generadas usando el Método de Absorción Aleatoria Secuencial, (RSA por sus siglas en inglés, *RandomSequentialAbsorption*), en el cual, se van agregando discos de diámetro ℓ_σ cuya posición de los centros (a, b) son generadas al azar, y se colocan en cantidad hasta alcanzar la porosidad deseada [3, 5]. como puede observarse en la Figura 2.

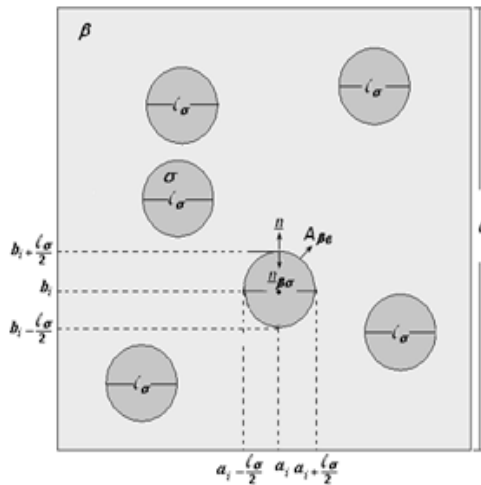


Figura 2. Celda unitaria de un sistema desordenado.

Caracterización de los Medios Porosos

En todos los casos, la porosidad fue calculada, aplicando la ecuación siguiente:

$$\phi = \frac{V_h}{V} \quad (1)$$

Con V_h el volumen hueco, y V el volumen total, siendo un modelo en 2D, los volúmenes se sustituyen por el área. La superficie específica fue calculada aplicando la expresión:

$$S_v = \frac{A_s}{V} \quad (2)$$

A_s es el área de la superficial de la partícula; siendo un modelo en 2D dicha área se sustituye por el perímetro mostrado por la fase sólida. El diámetro equivalente, la Distribución de Tamaños de Poros (DTP) y el promedio de poro fueron obtenidos, en los medios ordenados, usando el Método de Circunscripción de Cuadrados, el cual consiste en introducir cuadrados de tamaños máximos en los distintos espacios porosos. Los espacios entre los poros son llamados gargantas de poros. [5].

En el caso de los medios desordenados, se utilizó el Método de Triangulación, desarrollado por Primera y colaboradores [20], técnica numérica que no considera una morfología *a priori* para el poro.

El diámetro equivalente de poro, definido como el diámetro de un círculo de igual área a la superficie s_i del poro medido, fue calculado a partir de la expresión:

$$D_e = 2\sqrt{\frac{s_i}{\pi}} \quad (3)$$

Y el diámetro promedio de poro, mediante la expresión:

$$D_{prom} = \frac{\sum_{i=1}^{n_i} f_i D_i}{\sum_{i=1}^{n_i} f_i} \quad (4)$$

Tomando la frecuencia relativa $f_i = n_i/n_t$ de cada tamaño de superficie de poros s_i y diámetro D_i , donde n_i es el número de veces que un poro de superficie s_i es encontrado [20]. La distribución de tamaño de poro (DTP), se construyó con la frecuencia relativa de aparición.

Cálculo Computacional del Tensor de Difusividad Efectiva

En los medios planos, la difusividad efectiva $\overline{\overline{D}}_{ef}$, toma la forma matricial [11-17]:

$$\overline{\overline{D}}_{ef} = \begin{bmatrix} (D_{ef})_{xx} & 0 \\ 0 & (D_{ef})_{yy} \end{bmatrix} \quad (5)$$

Además, si el medio es isotrópico con respecto a la difusión: $(D_{ef})_{xx} = (D_{ef})_{yy}$

Según el MPV [9, 11-12, 14, 17], el tensor de difusividad efectiva de una especie química difundida en un medio poroso bifásico periódico, está dado por la ecuación siguiente:

$$\overline{\overline{D}}_{ef} = D(\overline{\overline{l}} + \overline{\overline{\tau}}) \quad (6)$$

Expresión obtenida al aplicarse dicho método a la ecuación puntual que describe la difusión de una especie química en la fase fluida β (2^{da} Ley de Fick) [2]:

$$\frac{\partial c_\beta}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (D \vec{\nabla} c_\beta), \text{ en } V_\beta \quad (7)$$

Donde D es la difusividad de la especie química difundida y c_β la concentración de la misma.

Y $\overline{\overline{\tau}}$ el tensor de tortuosidad, que está dado por la ecuación:

$$\overline{\overline{\tau}} = \frac{1}{V_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \vec{n}_{\beta\sigma} \vec{f} dA \quad (8)$$

Donde \vec{f} es llamada función de mapeo, con $\vec{n}_{\beta\sigma}$ un vector normal a la superficie de la partícula. Para calcular la difusividad efectiva se debe resolverse el problema de valor en la frontera para \vec{f} , dado por [9, 11-12, 14, 17]:

$$\begin{cases} \nabla^2 \vec{f} = 0 & , \text{ en } V_\beta & (9) \\ \vec{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \vec{f} = -\vec{n}_{\beta\sigma} & , \text{ en } A_{\beta\sigma} & (10) \\ \vec{f}(\vec{r}) = \vec{f}(\vec{r} + n_i \vec{l}_i) & & (11) \\ \langle \vec{f} \rangle^\beta = 0 & & (12) \end{cases}$$

Los problemas de valor en la frontera para la función de mapeo, fueron resueltos numéricamente, usando el método de los elementos finitos.

Resultados y Discusión

Medios Porosos Ordenados. Parámetros Estructurales

Para los medios no consolidados, la superficie específica es ligeramente mayor, para partículas de igual superficie, en las partículas cuadradas, esto se observa para todo el rango de porosidad. Con respecto al diámetro equivalente de poro, se observó que es mayor en los medios centrados por círculos que en los centrados por cuadrados, para todas las porosidades (Figura 3a), este resultado es de esperar en tanto que una misma cantidad de materia está mejor empaquetada en un círculo (menor perímetro) que, en un cuadrado dejando entonces –para la misma porosidad- poros más grandes. Para el diámetro promedio encontramos el mismo comportamiento, salvo para porosidades menores a 0,43, valor donde esta tendencia se invierte (Figura 3b)

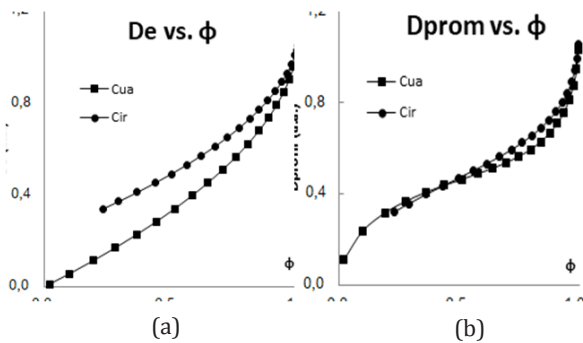


Figura 3. (a) Diámetro equivalente de poro vs. Porosidad (b) Diámetro promedio de poro vs Porosidad (medios ordenados).

Difusividad Efectiva vs Parámetros Estructurales

La Figura 4 permite comprobar un resultado generalmente anticipado intuitivamente, que la difusividad efectiva del medio aumenta cuando aumenta la porosidad. (Figura 4a)

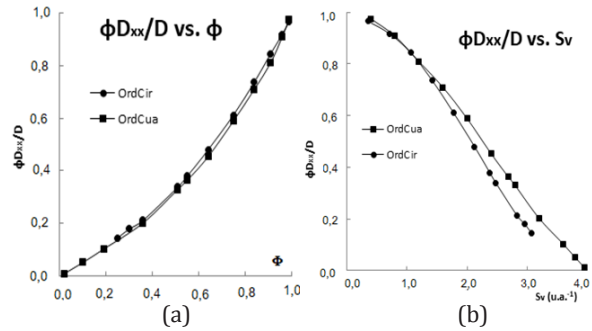


Figura 4. (a) Difusividad efectiva adimensional vs Porosidad (b) Difusividad efectiva adimensional vs Superficie específica (ordenados).

Esta tendencia general está de acuerdo con los resultados encontrados en la literatura [9, 17]. No obstante, es de resaltar que la difusividad efectiva adimensional en los sistemas con círculos es mayor que en los sistemas con cuadrados, pero este comportamiento se invierte para porosidades menores a 0,43. Este comportamiento muestra relación directa con el comportamiento de diámetros promedio de poro (Figura 3b). Para el caso de la difusividad efectiva adimensional en relación con la superficie específica, suponemos que la disminución observada está relacionada realmente con una disminución del tamaño de poros, siendo que este aumento de la superficie específica viene dado por el aumento de tamaño de la partícula dentro de la celda unitaria, lo que redundaría en una disminución tanto del Diámetro equivalente como del Diámetro promedio, y de la porosidad.

Medios Porosos Desordenados. Parámetros Estructurales

Puesto que, en este tipo de medios el tamaño de la celda unitaria tiene un efecto directo sobre los parámetros estructurales, previamente se encontró el volumen elemental representativo (VER) para el cálculo de los parámetros estructurales y la difusividad efectiva. Para ello, usando discos de radio 4, 8 y 12 u.a., se varió el tamaño de las celdas introduciéndose la mayor cantidad posible de discos, caso este donde la convergencia en función del tamaño del sistema se mostró más tardía. Se encontró que para celdas con discos de radio 4 u.a., los valores medidos se estabilizaron a partir de una longitud de celda de 80 u.a., para discos 8 u.a. la estabilidad se encontró a partir de una longitud de celda de 100 u.a. y para discos 12 u.a. a partir de 140 u.a.

En la Figura 5a se observa que la porosidad disminuye al aumentar la densidad “n” de partículas dentro de la

celda unitaria (o número de partículas por celda), aunque a menor tamaño de partícula, el número de las mismas dentro de la celda es mayor para una misma porosidad. A los efectos de la porosidad los tres sistemas desordenados son equivalentes, sólo se diferencian en la escala, lo cual se manifiesta al normalizar la densidad de partículas por el cociente del área de partículas (A_{par}) entre el área de las celdas (A_{celda}), colapsando las tres curvas en una sola (Figura 5b)

En la Figura 6a se presentan las DTP para los sistemas desordenados, pero se ha normalizado la frecuencia de aparición de los tamaños de poro por el "n" número de partículas y el diámetro equivalente por el diámetro de las partículas (D_{par}), colapsando en una sola curva. En la Figura 6b, se muestra el diámetro equivalente de poro por unidad de diámetro de partícula de un medio desordenado, observándose al comparar con la Figura 3a, que el diámetro equivalente normalizado es mayor en los medios desordenados para todo el rango de porosidad.

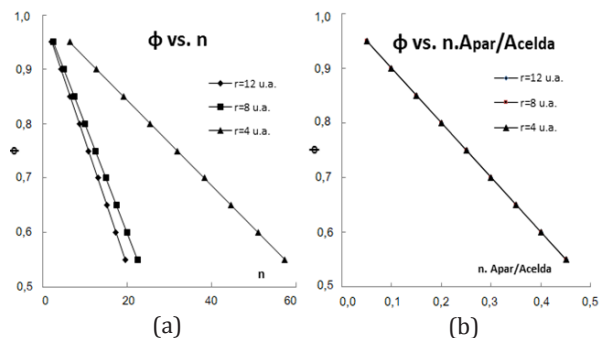


Figura 5. (a) Porosidad vs. Cantidad de partículas, y (b) Porosidad vs. Cantidad de partículas (normalizada) (para medios desordenados).

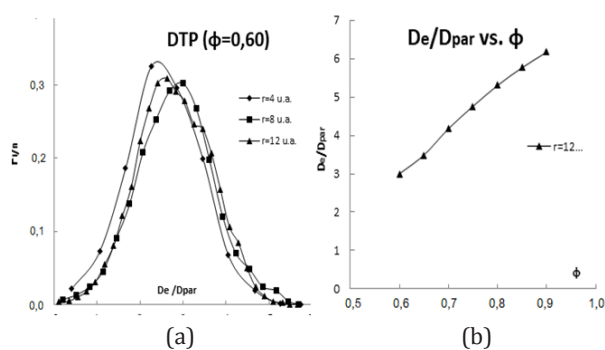


Figura 6. Para medios desordenados. (a) DTP (normalizada) (b) Diámetro equivalente de poro (normalizado) vs. Porosidad.

Difusividad Efectiva vs. Parámetros Estructurales

En la Figura 7a, se muestra la difusividad efectiva adimensional por la porosidad en función de la porosidad para todos los medios estudiados. En la Figura 7b se observa una comparación de la curva de difusividad efectiva adimensional en función de la porosidad, para los sistemas desordenados estudiados en el presente trabajo, y para sistemas desordenados e isotrópicos respecto al proceso de difusión presentados en la literatura [9-17]

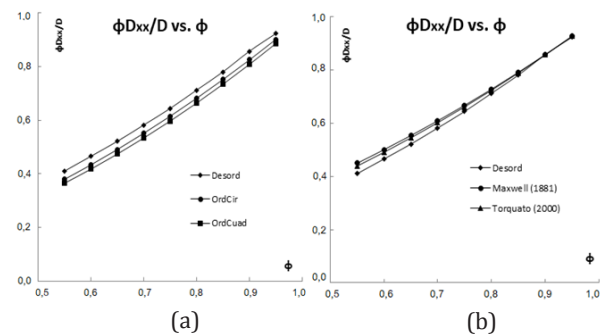


Figura 7. (a) Difusividad efectiva adimensional por porosidad vs. porosidad

(b) Difusividad efectiva adimensional por porosidad vs. Porosidad para medios aleatorios, comparación con datos experimentales.

Se observa que, a mayor porosidad mayor difusividad efectiva. En las Figuras 3a y 5b se observó que en los sistemas desordenados el diámetro equivalente por unidad de diámetro de partícula es mayor en los sistemas desordenados que en los ordenados, dando cuenta esto del mayor valor de difusividad que se observa en los sistemas desordenados (Figura 6a). La concordancia entre la curva de difusividad efectiva adimensional por la porosidad en función de la porosidad, para los sistemas desordenados estudiados en el presente trabajo, y para sistemas desordenados e isotrópicos respecto al proceso de difusión presentados en la literatura [9-17] (Figura 6b) valida el método propuesto en el presente trabajo.

Conclusiones

La metodología propuesta permitió establecer las relaciones entre los parámetros estructurales y la difusividad efectiva, concordando los resultados obtenidos con los reportados en trabajos previos para sistemas porosos equivalentes.

Se demostró la relación de proporcionalidad directa entre la difusividad efectiva y la porosidad, evidenciando adicionalmente que esta última es el

parámetro geométrico que hace variar en mayor proporción la difusividad efectiva.

Se determinó que el tipo de partículas, el tamaño promedio de poro, así como la DTP, juegan un papel importante en la determinación de la difusividad efectiva.

Agradecimientos

Esta investigación fue realizada en el marco de los proyectos AP-C1-2018-ICB0005 y VAC-CC-0648-13, financiados por la Universidad Técnica de Manabí, en Ecuador, y la Universidad del Zulia, en Venezuela, respectivamente.

Referencias Bibliográficas

- [1] Bir R. B., Stewart W. E. Y. y Lightfoot E. N.: «Fenómenos de transporte». Reverté S.A., México D.C. (México), 1996.
- [2] Bear J.: "Dynamic Of Fluid In Porous Media". American Elsevier, New York (Usa), 1972.
- [3] Torquato S.: "Random Heterogeneous Materials: Microstructure And Macroscopic Properties", Editorial Springer, USA, 2002.
- [4] Currie J. A.: "Gaseous diffusion in porous media. Part 1: A non-steady state method" British Journal of Applied Physics, Vol. 11, (1960) 314-317.
- [5] Dullien F. A. L.: "Porous Media: Fluid Transport and Pore Structure", Academic Press Inc., 2^{da} Ed., Londres, (2000).
- [6] Qian Z., Jian X. B., Yang B. Y.: "Research on the effective gas diffusion coefficient in dry porous media embedded with a fractal-like tree network", Physica A, Vol. 392, (2013) 1557-1566.
- [7] René H., Janett P., Heiko H., Karl H. H.: "Diffusion of oriented particles in porous media", Physics Letters, Vol. A377, (2013) 2840-2845.
- [8] Qiang M., Zhenqian Ch.: "Numerical study on gas diffusion in isotropic and anisotropic fractal porous media (gas diffusion in fractal porous media)", International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 79, (2014) 925-929.
- [9] Whitaker S. A.: "Diffusion and dispersion in porous media", Am. Inst. Chem. Eng., Vol. 13, (1967) 420-426.
- [10] Gray W. G., y Lee P. C. Y.: "On the theorems for local volume averaging of multiphase systems", Int. J. Multiphase, Vol. 3, (1977) 333-340.
- [11] Ryan D.; Carbonell R. G. y Whitaker, S. A.: "A theory of diffusion y reaction in porous media", Am. Inst. Chem. Eng., Vol. 77, (1981) 46-62.
- [12] Ochoa J. A., Stroeve P. y Whitaker S.: "Diffusion and reaction in cellular media", Chem. Enging. Sci. Vol. 41, (1986) 2999-3013.
- [13] Ochoa J. A., Whitaker S. y Stroeve P.: "Determination of cell membrane permeability in concentrated cell ensembles", Biophys., Vol. 52, (1987) 763-774.
- [14] Kim J. H., Ochoa J. A. y Whitaker S.: "Diffusion in anisotropic media", Transport in Porous Media, Vol. 2, (1987) 327-356.
- [15] Wood B. y Whitaker S.: "Diffusion and reaction in biofilms", Chem. Enging. Sci., Vol. 53, (1998) 397-425.
- [16] Valdés, F.; Ochoa, J. A. Y Álvarez, J.: "Diffusive mass transport in the fluid porous medium inter-region: Closure problem solution for the one-domain approach". Chem. Enging. Sci., Vol. 62, (2007) 6054-6068.
- [17] Borges Da Silva E. A., Souza D. P. y Ulson Da Souza A. A.: "Prediction of effective diffusivity tensors for bulk diffusion with chemical reactions in porous media", Brazilian Journal Of Chemical Engineering, Vol. 24, (2007) 47-60.
- [18] Liang W, Lian-Ping W, Zhaoli G. y Jianchun M.: "Volume-averaged macroscopic equation for fluid flow in moving porous media International", Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 82, (2015) 357-368.
- [19] Yang C., Huang R., Lin y Qiu T.: "Volume averaging theory (VAT) based modelling for longitudinal mass dispersion in structured porous medium with porous particles", Chemical Engineering Research and Design (2019).
- [20] Primera J., Hasmy A. y Woignier T.: "Numerical Study of Pore Size Distribution in Gels", Journal of Sol-Gel Science and Technology, Vol. 26, (2003) 1-5.



UNIVERSIDAD
DEL ZULIA

REVISTA TECNICA

DE LA FACULTAD DE INGENIERIA
UNIVERSIDAD DEL ZULIA

Volumen Especial, 2020, No. 2, pp. 04 - 110 _____

*Esta revista fue editada en formato digital y publicada en Julio de 2020, por el **Fondo Editorial Serbiluz**, Universidad del Zulia. Maracaibo-Venezuela*

www.luz.edu.ve
www.serbi.luz.edu.ve
www.produccioncientifica.org