



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE
MÉXICO**

**PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS
QUÍMICAS**

**SIMULACIÓN DE FLUIDOS NO NEWTONIANOS EN PRESENCIA
DE MEDIOS POROSOS**

TESIS
PARA OPTAR POR EL GRADO DE

DOCTOR EN CIENCIAS

PRESENTA

ING. JOSÉ LUIS VELÁZQUEZ ORTEGA



TUTORA: DRA. SUEMI RODRÍGUEZ ROMO AÑO: 2009



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

AGRADECIMIENTOS

A los miembros del jurado, Dr. Orest Pizio, Dr. Vladislav Khartchenko, Dr. Luis Emilio Orgaz Baqué, Dr. Luis Alberto Vicente Hinestroza y Dr. Héctor Domínguez Castro, por sus valiosos comentarios y sugerencias sobre la tesis.

A mis amigos de la FESC: Gilberto Amaya, Ricardo Paramont, María Eugenia Velázquez, Dr. Ernesto Moreno, Dr. Ricardo Gaitán, Dulce María, Abraham Méndez, Roberto Díaz y Oscar Ibañez. Gracias por compartir algunos momentos en mi vida.

Gracias a todas las personas que de alguna u otra forma contribuyeron en la realización de esta tesis.

Gracias al CONACYT por el apoyo otorgado para la realización de esta tesis.

A la UNAM, por permitirme ser parte de esta gran institución.

A la Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán, por las instalaciones prestadas durante el desarrollo de esta tesis, y en especial al Centro de Investigaciones Teóricas.

DEDICATORIAS

A mi madre, Tomasa Ortega Domínguez, gracias por darme la vida que es el tesoro más valioso. Gracias por ser mi motor e inspiración en mi vida.

A mis sobrinas, Janeth y Patricia, gracias por todo el apoyo incondicional que siempre me han brindado.

A Leydi Rubí Pérez Vera, gracias pequeña por estar en todo momento conmigo.

A la memoria de uno de los grandes, Dr. Vladimir Tchijov, gracias por compartir sus experiencias y conocimientos, por la confianza y por aquellos momentos en que tuvimos largas pláticas, en las cuales conocí al ser humano. Gracias por su amistad.

A mi tutora, Dra. Suemi Rodríguez Romo, gracias por su amistad, por haber confiado en mí y por compartir su experiencia y conocimiento.

CONTENIDO

Resumen	iv
Lista de cuadros	v
Lista de tablas	vi
Lista de figuras	vii
Capitulo 1. Introducción	1
Capitulo 2. Flujo de fluidos a través de medios porosos	8
2.1 Enfoque macroscópico del flujo de un fluido.....	8
2.2 Ecuación de continuidad.....	9
2.3 Ecuación de movimiento.....	11
2.3.1 Formulación Euleriana.....	11
2.3.2 Formulación Lagrangiana.....	12
2.4 Tipos de fluidos y regímenes de flujo.....	14
2.5 Medio poroso.....	19
2.5.1 Modelos de permeabilidad.....	24
2.5.2 Factores de fricción en lechos empacados.....	25
2.6 Referencias.....	28
Capitulo 3. Redes de Boltzmann	30
3.1 Bases de la teoría cinética y la ecuación Clásica de Boltzmann	30
3.2 Función de distribución de equilibrio y teorema H.....	35
3.3 El método de redes de Boltzmann.....	38
3.3.1 La Ecuación General de Redes de Boltzmann.....	41
3.4 Referencias.....	43

Capítulo 4. Simulación de fluidos de ley de potencia a través de medios porosos y sus aplicaciones	45
4.1 Validación del modelo. Solución analítica de la ecuación de movimiento para un fluido de la potencia.....	46
4.2 Fluidos No Newtonianos a través de medios porosos.....	51
4.3 Simulación en torres empacadas con soluciones de almidón de sagu (Metroxylon sagu) con Lattice Boltzmann.....	61
4.4 Distribuciones de Permeabilidad Local efectiva para Fluidos No-Newtonianos con Lattice Boltzmann.....	74
4.4.1 Introducción.....	74
4.4.2 Características de algunos tipos de suelos.....	75
4.4.3 Distribuciones de Permeabilidades efectiva locales para medios porosos generados arbitraria y aleatoriamente....	78
4.4.4 Predicción de distribuciones de probabilidad a través de permeabilidades efectivas.....	91
4.5 Referencias.....	96
Conclusiones.....	99
Apéndices.....	101
Apéndice A: Obtención de la ecuación de redes de Boltzmann a partir de la ecuación de Boltzmann.....	101
Apéndice B: Obtención de la ecuación de Navier-Stokes a partir de la ecuación de redes de Boltzmann.....	111
Referencias.....	119

Artículos publicados

INDICE DE CUADROS

2.1	Ejemplos de algunas aplicaciones de los medios porosos en diferentes áreas del conocimiento.....	22
-----	--	----

INDICE DE TABLAS

4.1	Valores de n y k publicados por Mohd. Nurul ^[10]	54
4.2	Comparación de los valores de n experimentales y los obtenidos en las simulaciones para una porosidad de 64.84%.....	56
4.3	Valores numéricos de las α'_s que aparecen en la ecuación (4.13), para cinco porosidades diferentes.....	58
4.4	Ejemplos de algunos suelos y sus porosidades ^[19]	75
4.5	Valores del promedio del error relativo para los índices de consistencia (n) obtenidas con el modelo propuesto para algunas porosidades.....	80
4.6	Mejor distribución de probabilidad para permeabilidad con simulaciones LBM para fluidos Newtonianos y no Newtonianos	93

INDICE DE FIGURAS

2.1	Campo de velocidades no homogéneo atravesando las caras del elemento de volumen.....	10
2.2	Elemento de volumen de control en las inmediaciones de un campo de velocidades para la realización de los balances de flujo de momento lineal y obtención de la ecuación de movimiento de un fluido.....	12
2.3	Esquema general de los tipos de fluidos.....	14
2.4	Relación entre el esfuerzo y la rapidez de deformación para fluidos Newtonianos y no Newtonianos.....	17
2.5	Tomografía digitalizada de una arena.....	19
2.6	Porosidad efectiva de un medio poroso, representada por la línea continua	20
2.7	Micrografía de barrido electrónico de una diatomea.....	21
2.8	Permeámetro de Darcy.....	23
2.9	Comportamiento de la caída de presión en función del número de Reynolds en Lechos empacados.....	26
3.1	Direcciones permitidas para el movimiento de partículas. (a) Modelo D2Q9, (b) Modelo D2Q15.....	39
3.2	Representación de los momentos para cada dirección del modelo D2Q9.....	40
3.3	Etapa de Propagación de las funciones de distribución a sus siguientes nodos vecinos (modelo D2Q9).....	40
4.1	Flujo de un fluido no Newtoniano a través de un canal rectangular.....	47
4.2	Perfiles de velocidad con LBGK.....	50

4.3	Perfiles de velocidad con Solución Analítica.....	50
4.4	Medios porosos generados arbitrariamente (las figuras del lado derecho representan la corriente de fluido).....	52-53
4.5	Log flux de la velocidad vs Log fuerza para los cinco medios porosos, utilizando los datos experimentales reportados por Nurul y colaboradores.....	55
4.6	Valores de n experimentales y obtenidos en las simulaciones con LBGK para porosidades de 64.84, 66.60, 68.75, 70.11 y 71.87%.....	57
4.7	Superficies de respuesta para estimar la permeabilidad modificada en función de la concentración y la temperatura de algunas porosidades, con el modelo propuesto	58
4.8	Medios porosos generados aleatoriamente con porosidades de 64.84, 66.65, 68.69, 70.28 y 71.87%.....	59-60
4.9	Diagrama de flujo. Programa de cómputo para el modelo propuesto.....	61
4.10	Lecho empacado utilizado para la simulación con redes de Boltzmann.....	62
4.11	Medio poroso: porosidad 71.87 %, a) arbitrario y b) aleatorio. Porosidad 68.75%, c) arbitrario y d) aleatorio.....	63-64
4.12	Datos de ERB y superficies suavizadas para un fluido no Newtoniano ($n = 0.529$), en un medio poroso generado en forma arbitraria. a) Velocidad, b) tensor de esfuerzos de corte y c) presiones.....	64-65
4.13	Datos de ERB y superficies suavizadas para un fluido no Newtoniano ($n = 0.529$), en un medio poroso generado en forma aleatoria. a) Velocidad, b) tensor de esfuerzos de corte y c) presiones.....	65-66
4.14	Caída de presión en función del número de Reynolds Generalizado.....	69
4.15	Factor de fricción en función del número de Reynolds Generalizado.....	70

4.16	Esfuerzos en las paredes para algunos medios porosos utilizados. Arbitrarios (64.84, 66.60 y 68.75%), Aleatorio (68.69 y 71,87%)....	71-72
4.17	Esfuerzos en las paredes para dos medios porosos. Arbitrario y determinista con porosidad de 71.87% con un valor de $n = 0.529$	73
4.18	Ejemplos de algunos medios porosos aleatorios utilizados para la validación del modelo propuesto con porosidades de 10.20, 20.84 y 30.83%, en cada uno de ellos se realizaron tres repeticiones.....	80-81
4.19	Bandas de Permeabilidad para cinco medios porosos deterministas con porosidades de 64.84, 66.60, 68.75, 70.11 y 71.87% , con fuerzas de presión de $0.001E-3$, $0.002E-3$ y $0.003E-3$ (aquí solamente se muestran con tres fuerzas de presiones), para un fluido Pseudoplástico ($n = 0.529$).....	82-84
4.20	Bandas de permeabilidad para un medios poroso aleatorio con porosidad de 47.4%, con fuerzas de presión de $0.001E-3$ y $0.003E-3$ para fluidos Pseudoplástico ($n = 0.529$) y Newtoniano. Para el caso de dilatante ($n = 2.0$), con fuerzas de $0.003E-3$ y 0.01 (aquí solamente se muestran con dos fuerzas de presión).....	85
4.21	Bandas de permeabilidad para un medios poroso aleatorio con porosidad de 51.91%, con fuerzas de presión de $0.001E-3$ y $0.003E-3$ para fluidos Pseudoplástico ($n = 0.529$) y Newtoniano. Para el caso de dilatante ($n = 2.0$), con fuerzas de $0.003E-3$ y 0.01 (aquí solamente se muestran con dos fuerzas de presión).....	86
4.22	Bandas de permeabilidad para un medio poroso arbitrario con porosidad de 68.75%, con fuerzas de presión de $0.001E-3$, $0.002E-3$ y $0.003E-3$ para fluidos Pseudoplástico ($n = 0.529$) y Newtoniano. Para el caso de dilatante ($n = 2.0$), con fuerzas de $0.003E-3$, $0.002E-1$ y 0.01 (aquí solamente se muestran con tres fuerzas de presiones, para los casos anteriores).....	87
4.23	Bandas de permeabilidad para un medio poroso aleatorio con porosidad de 68.69%, con fuerzas de presión de $0.001E-3$, $0.002E-3$ y $0.003E-3$ para fluidos Pseudoplástico ($n = 0.529$) y Newtoniano. Para el caso de dilatante ($n = 2.0$), con fuerzas de $0.003E-3$, $0.002E-1$ y 0.01 (aquí solamente se muestran con tres fuerzas de presiones, para los casos anteriores).....	88

4.24	Bandas de permeabilidad para un medio poroso arbitrario con porosidad de 71.87%, con fuerzas de presión de 0.001E-3, 0.002E-3 y 0.003E-3 para fluidos Pseudoplástico (n = 0.529) y Newtoniano. Para el caso de dilatante (n = 2.0), con fuerzas de 0.003E-3, 0.002E-1 y 0.01 (aquí solamente se muestran con tres fuerzas de presiones, para los casos anteriores).....	89
4.25	Bandas de permeabilidad para un medio poroso aleatorio con porosidad de 71.87%, con fuerzas de presión de 0.001E-3, 0.002E-3 y 0.003E-3 para fluidos Pseudoplástico (n = 0.529) y Newtoniano. Para el caso de dilatante (n = 2.0), con fuerzas de 0.003E-3, 0.002E-1 y 0.01 (aquí solamente se muestran con tres fuerzas de presiones, para los casos anteriores).....	90
4.26	Distribución de probabilidad para permeabilidad con porosidad de 47.37% y n = 2.0.....	94
4.27	Distribución de probabilidad para permeabilidad con porosidad de 68.69% y n = 1.0.....	94
4.28	Distribución de probabilidad para permeabilidad con porosidad de 71.87% y n = 0.529.....	95

RESUMEN

Durante muchos años se han desarrollado investigaciones en el área del transporte de fluidos en medios porosos, en vista de las innumerables aplicaciones industriales que tiene. Entre éstas se pueden citar la ingeniería de yacimientos de agua (acuíferos), de petróleo y de gas, los procesos de separación (como por ejemplo la adsorción), diseño de reactores químicos, sistemas geofísicos y geotérmicos, ingeniería de polímeros, enfriamientos de equipos electrónicos, diseño y análisis de intercambiadores de calor tipo regeneradores, entre otros. Ya que los medios porosos son de gran importancia en diversas áreas, y hoy en día se presentan diferentes técnicas para abordar problemas de los mismos, tales como diferencias finitas, elemento finito y método de Montecarlo, y en los últimos años los métodos denominados gases en redes, es como nos motivo a trabajar en el comportamiento de los mismos.

En este trabajo se realizó la simulación de fluidos no Newtonianos a través de medios porosos, utilizando la ley de Darcy modificada y la ecuación de Darcy en función de viscosidad aparente, aplicando la ecuación de Redes de Boltzmann (RB), en dos tipos medios porosos generados de forma arbitraria y aleatoria. Se presenta una propuesta para realizar simulaciones en lechos empacados, en los medios porosos antes citados, en los cuales se obtienen variables tales como, campos de flujo, distribuciones de velocidad, distribuciones de esfuerzo de corte, distribuciones de presión, permeabilidades, factores de fricción, números de Reynolds y esfuerzos de corte. Además de realizar predicciones con las ecuaciones de Ergun y Blake-Kozeny. Así mismo, se correlacionó el efecto aleatorio, la porosidad y la permeabilidad con los parámetros reológicos de fluidos no Newtonianos, para los que obtuvimos predicciones de distribuciones de probabilidad. Las cuales son de gran importancia en diferentes áreas de interés científico.

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

El movimiento de fluidos puede tener una variedad de formas tanto para flujos simples, como puede ser el flujo de un fluido a través de una tubería en régimen laminar o bien para flujos más complejos, tales como sistemas biológicos, alimentarios y flujos turbulentos, entre otros. De igual forma, el flujo de un fluido en un medio poroso es un fenómeno común en la naturaleza, y en muchos campos de la ciencia y la ingeniería. El interés que encierra el estudio del flujo en un medio poroso estriba en la relación directa que mantiene con los procesos industriales, tales como las explotaciones petrolíferas (desplazamiento del petróleo, deficiencia de la recuperación, modificación de la porosidad, desplazamiento y equilibrio de la interfase, etc.), recuperación de aceite, ciencia de materiales, el secado industrial, el filtrado químico, estudio de movimiento de contaminantes en el suelo, hidráulica de captaciones de agua, etc.^[1] El objetivo de esta tesis es realizar simulaciones de fluidos no Newtonianos, también conocidos como fluidos de la potencia ó fluidos de Ostwald-de Waele, en presencia de medios porosos para obtener resultados originales que expliquen el comportamiento de algunas variables tales como velocidad; permeabilidad; caídas de presión; usando el método de redes de Boltzmann.

[1]

En el caso de la teoría de la dinámica de los fluidos, ésta puede ser desarrollada desde dos puntos de vista: el microscópico y el macroscópico. En el primero, la estructura molecular del medio es tomada en cuenta explícitamente. Cabe mencionar que los fluidos, al igual que el resto de la materia, están compuestos de moléculas. Cualquier teoría que intentara predecir los movimientos individuales de esta gran cantidad de moléculas sería extremadamente compleja. Sin embargo existen áreas del conocimiento que estudian la materia desde un punto de vista microscópico, ejemplos son la *teoría cinética de los gases* y la *mecánica estadística*, las cuales tratan el movimiento de las moléculas en términos de grupos estadísticos (promedios), es decir desde un enfoque estadístico, en lugar de considerar moléculas individuales. Para el enfoque macroscópico, en éste no se toma en cuenta explícitamente la estructura molecular del medio, solamente se consideran las propiedades “gruesas” de la materia. Las propiedades físicas del medio se miden directamente por medio de instrumentos.^[2,3] Una alternativa para resolver problemas de la dinámica de fluidos, son los métodos que aparecieron a principios de los 70's, denominados “gases en redes”.

En lo que concierne al método de redes de Boltzmann, éste tiene sus orígenes en los autómatas celulares, el primer esfuerzo para simular sistemas de flujo de fluidos fue la realizada en 1973 por Hardí, Pomeau, y de Pazzis (*HPP*)^[4], los cuales introdujeron el modelo que lleva sus iniciales “*HPP*”. En este modelo, todas las partículas tienen unidad de masa y velocidad, las partículas son restringidas a viajar en direcciones $\vec{e}_i, i = 1, \dots, 4$ de una rejilla cuadrada. Una variable Boleana es utilizada para indicar la presencia o la ausencia de una partícula de fluido en cada sitio de rejilla en una dirección dada. Una regla de exclusion es aplicada, es por esto, que solamente a una partícula se le permite viajar en cada dirección a lo largo del eslabón por etapa. Cuando varias partículas llegan a un sitio, estas colisionan de acuerdo a reglas de colisión pre establecidas en el modelo. La colisión es gobernada por la conservación de la masa y momentum. Si no se presentara dicha colisión, entonces las partículas continuarían su viaje en línea recta. El modelo *HPP* es absolutamente estable, pero presenta falta de isotropía en algunos términos tensoriales involucrados en la ecuación de Navier-Stokes.

Así mismo, los resultados del modelo no recuperan las ecuaciones de Navier-Stokes (NSE) en el nivel macroscópico. Esta deficiencia es debido al inadecuado grado de simetría rotacional de la rejilla cuadrada^[5]. En 1986, Frisch, Hasslacher, y Pomeau^[6] descubrieron que las NSE pueden ser recobradas usando una rejilla hexagonal. Su modelo es conocido como el modelo FHP. Este modelo es similar al HPP, solo que las partículas con masa y velocidad unitaria se mueven en los vértices de una rejilla hexagonal discreta. Una variable Boleana es usada en cada dirección de la rejilla para indicar la presencia o la ausencia de una partícula en esa dirección. Las partículas son actualizadas en cada paso de tiempo, ya sea por colisión o fluyendo hacia su siguiente nodo vecino, según sea el caso. Las colisiones de las partículas son determinadas por una prescripción de reglas de colisión que contienen todos los posibles estados de colisiones. Este modelo presenta dos problemas principales, la presencia de ruido estadístico y la incapacidad para simular flujos en tres dimensiones.

El método de redes de Boltzmann se basa en conceptos de la teoría cinética de los gases. Es un método que mediante el uso de rejillas discretas y la ecuación de Boltzmann, apoyados por herramientas computacionales, ha servido para simular una gran cantidad de fenómenos físicos. Las ecuaciones de Navier-Stokes no son resueltas directamente, sino recobradas como consecuencia. El problema es obtener las funciones de distribución de partículas, $f_i(x, t)$ y a partir de ellas obtener variables observables como la viscosidad, la caída de presión y el número de Reynolds. En forma general, el método de redes de Boltzmann, consiste principalmente de dos operaciones, la primera operación es denotar el avance de partículas a los siguientes sitios vecinos de la rejilla. La segunda operación, es para simular los choques de las partículas. Una de las ventajas más importantes es que el método es completamente paralelizable y local; se tiene simplicidad al programar y la capacidad para incorporar modelos interaccionantes^[7,8]. En este método se incorporan condiciones de frontera y geometrías complejas.

El método de Redes de Boltzmann (RB), hoy en día se considera como una nueva y efectiva técnica numérica para la solución de ecuaciones de flujo de fluidos, transporte de calor y masa.^[7] El método ha demostrado habilidad para la simulación de sistemas hidrodinámicos^[9-13], sistemas magnetohidrodinámicos^[14], fluidos multifásicos y multicomponentes^[15], incluyendo suspensiones^[16], y emulsiones^[17], flujos químicamente reactivos^[18], y flujos multicomponentes a través de medios porosos^[19], entre otros. Además, la técnica de redes de Boltzmann se ha llevado a diversas áreas del conocimiento como es el campo de la medicina, en la cual se estudia el comportamiento de flujos sanguíneos para la creación de prótesis valvulares, apoyándose en la dinámica de fluidos^[20]. Otra interesante aplicación se refiere a la migración de células quimiotácticas, para éste caso se propuso un modelo probabilístico en una dimensión espacial, utilizando una ecuación de transporte generalizada llevado a cabo por Rivero^[21] y la misma migración de células propuesta por Alt^[22] utilizando el modelo de RB, en tales casos se tienen respuestas similares, para dicha migración.

En el presente trabajo se abordaron los siguientes aspectos, en el capítulo 2, “Flujo de fluidos a través de medios porosos”, se aborda el tema de flujo de fluidos desde un punto de vista macroscópico y las ecuaciones de continuidad y movimiento utilizadas más comúnmente. Además de hablar de algunos tipos de fluidos con aplicaciones industriales. Por otra parte, se toman aspectos concernientes a medios porosos, importancia y aplicaciones de ellos. El capítulo 3: “Redes de Boltzmann”, se presenta la teoría del método de redes de Boltzmann, para lo cual se efectúa una revisión breve de los aspectos fundamentales de la teoría cinética y la ecuación clásica de Boltzmann, así como la solución de esta última, y la importancia del teorema H en dicha solución. Además de describir el método de redes de Boltzmann. Es importante mencionar que esta parte de la tesis se enlaza con los apéndices A y B, en los cuales se presenta la física y la matemática que encierra el método de redes de Boltzmann. En el apéndice A, se muestra la obtención de la ecuación de redes de Boltzmann a partir de la ecuación clásica de Boltzmann, y en B se presenta la recuperación de la ecuación de Navier-Stokes a partir de la ecuación de redes de Boltzmann. En lo que respecta al capítulo 4, se presentan los resultados de las simulaciones realizadas en el proyecto de doctorado con un modelo propuesto de redes de Boltzmann. Primeramente se presentan

resultados con este último, y se realiza la validación con la solución analítica de las ecuaciones de movimiento para fluidos Newtonianos y no Newtonianos. También se presentan resultados de los fluidos antes mencionados a través de medios porosos generados de forma arbitraria y aleatoria, ésta última con el método del Box- Muller. En este capítulo además se presentan los resultados de la aplicación de la simulación de redes de Boltzmann en torres empacadas; así como la aplicación de las redes de Boltzmann en diferentes tipos de suelos para la obtención de distribuciones de permeabilidad local efectiva para los dos tipos de fluidos ya mencionados. En lo que respecta a los apéndices; en uno de ellos se muestra la obtención de la ecuación de redes de Boltzmann a partir de la ecuación clásica de Boltzmann, y el otro presenta la recuperación de la ecuación de Navier-Stokes a partir de la ecuación de redes de Boltzmann.

Referencias

- [1] Eiyad Ahmad Moh'd Abu Nada, M.S., *Lattice Boltzmann simulation of complex fluid systems in porous media*, PhD Thesis, New Mexico State University, May 2001.
- [2] G. Hauke. *An introduction to fluid mechanics and transport phenomena. Fluid mechanics and its applications*. Springer, 2008.
- [3] I. N. Ivchenko, S. K. Loyalka and R. V. Tompson, Jr. *Analytical methods for problems of molecular transport*. The Netherlands, Springer, 2007.
- [4] J. Hardy, Y. Pomeau and O. de Pazzis. Time evolution of a two-dimensional model system I: invariant states and time correlation functions. *Journal of Mathematical Physics*. 14(12):1746-1759, 1973.
- [5] D. A. Wolf-Gladrow. *Lattice Gas Cellular Automata and lattice Boltzmann models*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2000.
- [6] U. Frisch, B. Hasslacher and Y. Pomeau. Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equations. *Physical Review Letter*, 56:1505-1508, 1986.
- [7] S. Chen, G. Doolen and K. Eggert, *Lattice Boltzmann versatile tool for multiphase, fluid dynamics and other complicated flows*. Los Alamos Science. 20, 100-111, 1994.
- [8] S. Chen, S. P. Dawson, G. D. Doolen, D. R. Janecky and A. Lawniczak. Lattice methods and their applications to reacting systems. *Comput. Chem. Eng.* 19(6-7): 617-646, 1995.
- [9] G. R. Mc Namara and G. Zannetti. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. *Physical Review Letter*. 61(20): 2332-2335, 1998.
- [10] F. J. Higuera and J. Jiménez. Boltzmann approach to the lattice gas simulations. *Europhysics Letters*. 9(7): 663-668, 1989.
- [11] Y. H. Qian, D. d'Humieres and P. Lallemand. Lattice BGK models for the Navier-Stokes equations. *Europhysics Letters*. 17(6): 479-484, 1992.
- [12] G. D. Doolen. *Lattice Gas Methods for partial Differential Equations*. Addison-Wesley, Redwood City. CA, 1990.
- [13] R. Benzi, S. Succi and M. Vergassola. The lattice-Boltzmann equation: theory and applications. *Physics Report*. 222(3): 145-197, 1992.
- [14] J. L. Lebowitz, S.A. Orszag, and Y.H. Qian. Special issue on lattice-based models and related topics, *J. Stat. Phys.* 81, 10, 1995.

- [15] S. Chen, H. Chen, D. Martínez and W. Matthaeus. Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics, *Physical Review Letter*. 67(27): 3776-3779, 1991.
- [16] X. Shan and H. Chen. Lattice Boltzmann model for simulating flow with multiple phases and components. *Physical Review. E*. 47(3): 1815-1819, 1993.
- [17] A. J. C. Ladd. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation Part 1: Theoretical Foundation. *J. Fluid. Mech.* 271, 285-339, 1994.
- [18] B. M. Boghosian, P. V. Coveney and A. N. Emerton. A Lattice-Gas Model of Microemulsion. *Proc. R. Soc. Ser. A* 452, 1221-1250, 1996.
- [19] S. Chen, S. P. Dawson, G. D. Doolen, D. R. Janecky and A. Lawniczak. Lattice methods and their applications to reacting systems. *Comput. Chem. Eng.* 19(6-7): 617-646, 1995.
- [20] R. Landaeta, M. Herrera and M. Cerrolaza. *Avances recientes en bioingeniería (Investigación y Tecnología Aplicada)*. Sociedad Venezolana de Métodos Numéricos (SVMN), Julio 1997.
- [21] M. A. Rivero, R. T. Tranquillo, B. M. Helen and D. A. Lauffenburger. Transport models for chemotactic cell populations based on individual cell behavior. *Chem. Eng. Sci.* 44(12): 2881-2897, 1989.
- [22] W. Alt. Biased random walk models for chemotaxis and related diffusion approximations. *J. Math. Biol.* 9(2): 147-177, 1980.

CAPÍTULO 2

**FLUJO DE FLUIDOS A TRAVÉS DE MEDIOS
POROSOS**

2.1. Enfoque Macroscópico del Flujo de un Fluido

Las moléculas de un gas están separadas por regiones vacías cuyas dimensiones lineales son mucho mayores que las de las moléculas mismas. Pero incluso en un líquido, en el cual las moléculas están estrechamente empaquetadas, la masa dista mucho de estar distribuida uniformemente en el espacio. Otras magnitudes, además de la masa, tienen también distribuciones espaciales altamente no uniformes en la escala microscópica.

Sin embargo, en muchas aplicaciones de interés práctico, tan sólo interesa el comportamiento de la materia en una escala macroscópica. Este es el caso de la *mecánica de fluidos*, y gracias a ello se puede ignorar la estructura molecular de la materia cuando se describe su movimiento.

La hipótesis básica de la mecánica de fluidos consiste en suponer que en escala macroscópica, un fluido se comporta como si estuviera dotado de una estructura perfectamente continua, esto es, que magnitudes como la masa, la cantidad de movimiento y la energía, asociadas con la materia contenida en un volumen del fluido, se consideran uniformemente distribuidas en éste volumen (en lugar de estar concentradas en una pequeña fracción de éste, como realmente ocurre). A este enfoque se le denomina “*Hipótesis del Continuo*”. El significado de esta hipótesis dice que es

posible asignar valores definidos de las propiedades del fluido a un punto, y que los valores de esas propiedades son funciones continuas de la posición y del tiempo. Una forma de determinar si el supuesto de medio continuo es aceptable, es a través del número de Knudsen (λ/l), el cual se define como el cociente entre la trayectoria libre media λ (distancia promedio que una molécula recorre antes de chocar con otra molécula) y una longitud característica l ; es decir, si $l \gg \lambda$ el modelo de medio continuo es aceptable. En otras palabras, el número de Knudsen deberá ser mucho más pequeño que la unidad, para que la hipótesis del continuo sea válida.^[1-4]

2.2. Ecuación de Continuidad

La conservación de masa es el principio básico del movimiento de los fluidos, la cual requiere que cuando el fluido está en movimiento, se mueva de manera que la masa se conserve^[5].

Una manera de obtener la ecuación de continuidad, es considerar un elemento de volumen fijo en el espacio, dentro del campo de velocidades de un fluido (ver figura 2.1), al cual se le aplica un balance de materia, obteniendo

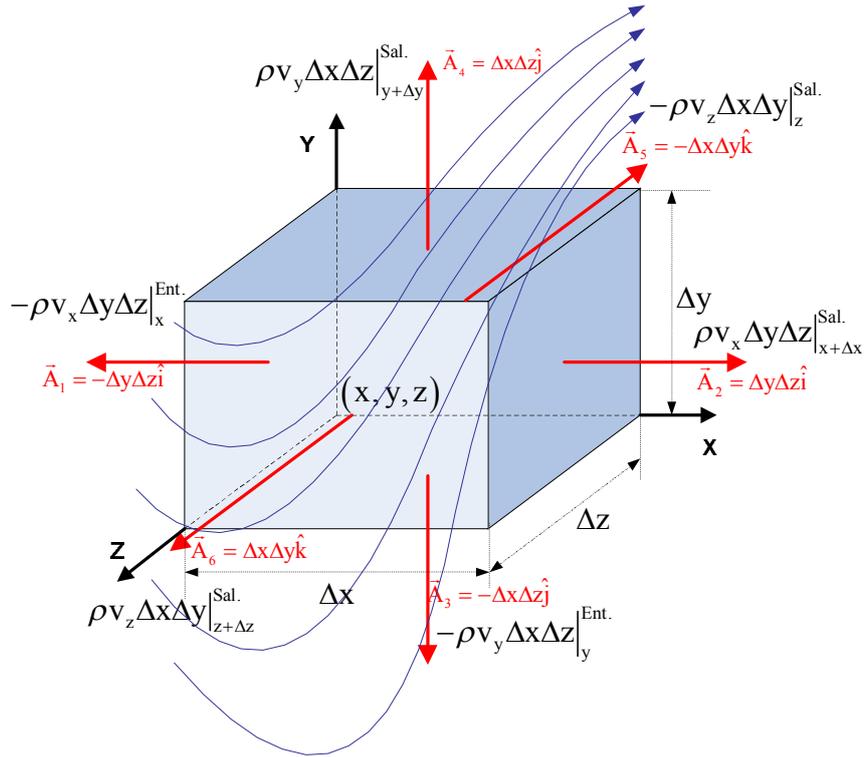


Figura 2.1 Campo de velocidades no homogéneo atravesando las caras del elemento de volumen.

$$\frac{d\phi_{\rho\vec{v}}}{dV} = -\nabla \cdot \rho\vec{v} = \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (2.1)$$

Flujo de (entradas - salidas), de masa por unidad de volumen asociadas a una corriente de fluido que se mueve con velocidad, y que atraviesa un elemento de volumen de control tomado en las inmediaciones de un campo de flujo

Variación de la masa por unidad de volumen con respecto al tiempo

La segunda igualdad corresponde a la **ecuación de continuidad** escrita en forma diferencial, y puede ser escrita en forma integral como

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint \rho dV + \iiint \nabla \cdot \rho\vec{v} dV = 0. \quad (2.2)$$

La integral de volumen puede transformarse en una integral de superficie mediante el teorema de Gauss para obtener

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\text{Vol}} \rho dV + \oiint \rho\vec{v} \cdot d\vec{A} = 0. \quad (2.3)$$

Las ecuaciones de continuidad son cinemáticas ya que describe el movimiento de un cuerpo sin considerar las causas que lo producen.

2.3. Ecuación de Movimiento

El físico matemático suizo Leonhard Euler escribió un artículo en 1758, en el cual reportaba la expresión matemática que había deducido para el flujo ideal de un fluido, entendiéndose esto como el movimiento de un fluido incompresible de viscosidad despreciable, libre de fricción. Casi un siglo más tarde, el físico francés Jean Pierre Lagrange, obtuvo una ecuación más completa, en la que se consideraban los efectos viscosos del fluido, y por lo tanto, la fricción. La expresión matemática que obtuvo fue mejorada poco tiempo después por dos científicos europeos (Navier y Stokes) casi en forma simultánea, que introdujeron a la ecuación de Lagrange un término de aceleración adicional, el que corresponde a la variación de la velocidad del fluido cuando se modifica el área de flujo.

2.3.1. Formulación Euleriana

El método de descripción Euleriano consiste en elegir un elemento de volumen de control fijo en el espacio, con coordenadas específicas respecto a un sistema de referencia previamente seleccionado, y caracterizar los cambios de distribución de velocidad, presión, temperatura, concentración, etc., que ocurren dentro del elemento de volumen en función del tiempo. Al utilizarlo, las propiedades del fluido en movimiento quedan descritas en función de las coordenadas espacio-temporales.

El balance sobre una superficie envolvente (ΔV) con los flujos de entrada y salida de cantidad de movimiento por mecanismo molecular y convectivo; así como, las fuerzas externas que tienden a hacer que el fluido se desplace, las cuales pueden ser volumétricas (como la atracción gravitacional) y las superficiales (como la presión) se muestra en la figura 2.2.

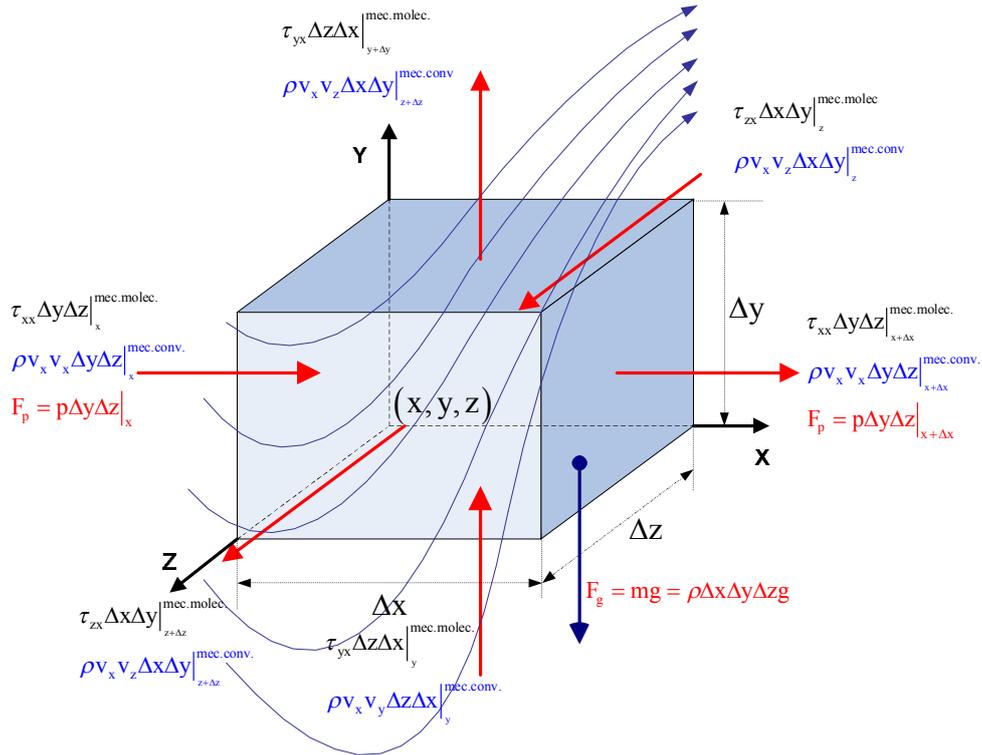


Figura 2.2 Elemento de volumen de control en las inmediaciones de un campo de velocidades para la realización de los balances de flujo de momento lineal y obtención de la ecuación de movimiento de un fluido

La expresión vectorial de la ecuación de balance de momento lineal en un fluido en medio continuo, la cual corresponde a la ecuación de Movimiento en formulación Euleriana es

$$\begin{array}{ccccccc}
 -\nabla \cdot \vec{\tau} & -\nabla \cdot \rho \vec{v} \vec{v} & -\nabla \vec{P} & + & \rho \vec{g} & = & \frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} \\
 \text{Flujos de entrada-salida} & \text{Flujos de entrada-salida} & \text{Vector gradiente de} & & \text{Fuerzas} & & \text{Rapidez de acumulación} \\
 \text{de momento por unidad} & \text{de momento por unidad} & \text{presión, y corresponde} & & \text{gravitacionales} & & \text{de momento por unidad} \\
 \text{de volumen, transportado} & \text{de volumen, transportado} & \text{a la diferencia de fuerzas} & & \text{que actúan sobre} & & \text{de volumen.} \\
 \text{por mecanismo molecular.} & \text{por mecanismo convectivo.} & \text{de presión por unidad de} & & \text{el fluido.} & & \\
 & & \text{volumen de un punto a} & & & & \\
 & & \text{otro en el espacio.} & & & &
 \end{array}$$

(2.4)

2.3.2. Formulación Lagrangiana

El punto de vista Lagrangiano consiste en la fragmentación del fluido en sistemas de masa fija y la caracterización de las coordenadas de posición \vec{r} , velocidad

\vec{v} , y aceleración \vec{a} , de cada uno de ellos a medida que transcurre el tiempo, es decir, se utiliza una técnica descriptiva que va siguiendo a los elementos identificables de masa (tal como en la mecánica de partículas). La parte práctica de este enfoque, consiste en la idea de seguir el movimiento de masas de flujo a lo largo del campo de flujo, y observar cómo se acelera y deforma en el campo de velocidades, describiendo esto desde un sistema de referencia que se mueve con la velocidad del fluido.

La ecuación vectorial diferencial que corresponde a la *formulación Lagrangiana de la ecuación de movimiento* es

$$\rho \left[\begin{array}{l} \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} \\ \text{Aceleración del fluido} \\ \text{por cambios de velocidad} \\ \text{local con respecto al tiempo} \\ \text{"aceleración temporal"} \end{array} + \begin{array}{l} \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} \\ \text{Aceleración del fluido} \\ \text{por cambios de velocidad} \\ \text{con respecto a la posición} \\ \text{en el campo de flujo.} \end{array} \right] = \begin{array}{l} -\nabla \cdot \vec{\tau} \\ \text{Fuerzas viscosas} \\ \text{por unidad de volumen} \\ \text{que actúan en el interior} \\ \text{del fluido.} \end{array} - \nabla \vec{P} \begin{array}{l} \text{Gradiente de presión} \\ \text{por unidad} \\ \text{de volumen.} \end{array} + \rho \vec{g} \begin{array}{l} \text{Fuerzas} \\ \text{gravitacionales por} \\ \text{unidad de volumen} \\ \text{(peso del fluido)} \end{array} \quad (2.5)$$

En un fluido Newtoniano, el esfuerzo viscoso es proporcional a la relación de deformación de corte (relación de deformación angular). Los esfuerzos pueden expresarse en términos de gradientes de velocidad y las propiedades del fluido en coordenadas rectangulares como sigue:

$$\begin{aligned} \tau_{xy} = \tau_{yx} &= \mu \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial y} \right), & \tau_{yz} = \tau_{zy} &= \mu \left(\frac{\partial v_z}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial z} \right), & \tau_{zx} = \tau_{xz} &= \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right) \\ \tau_{xx} = \tau_{xx} &= -p - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{v} + 2\mu \frac{\partial v_x}{\partial x}, & \tau_{yy} = \tau_{yy} &= -p - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{v} + 2\mu \frac{\partial v_y}{\partial y} \\ \tau_{zz} = \tau_{zz} &= -p - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{v} + 2\mu \frac{\partial v_z}{\partial z}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

donde p es la presión termodinámica local.

Si las expresiones anteriores se introducen en las ecuaciones diferenciales de movimiento (ecuación 2.6), se obtiene

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \rho \left[\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right] = \mu \nabla^2 \vec{v} - \nabla \vec{P} + \rho \vec{g}. \quad (2.7)$$

La expresión 2.7 es conocida como la ecuación de Navier-Stokes en formulación vectorial, y en conjunto corresponde a la aplicación de la segunda ley de Newton de la mecánica clásica al movimiento del fluido.

En el caso de fluidos sin fricción ($\mu = 0$), la ecuación de movimiento (2.7) se reducen a la ecuación de Euler,

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \rho \vec{g} - \nabla \bar{P}. \quad (2.8)$$

Las ecuaciones de movimiento son dinámicas, esto es, estudia el movimiento teniendo en cuenta las causas que lo producen. [5-9]

2.4. Tipos de Fluidos y Regímenes de flujo

Un fluido se define como una sustancia que se deforma continuamente bajo la aplicación de esfuerzos cortantes.

Existen básicamente tres tipos de fluidos desde el punto de vista de la dinámica de fluidos, los cuales se les denomina Newtonianos, no-Newtonianos y Viscoelásticos.

Un esquema general que muestra los tipos de fluidos es el siguiente:

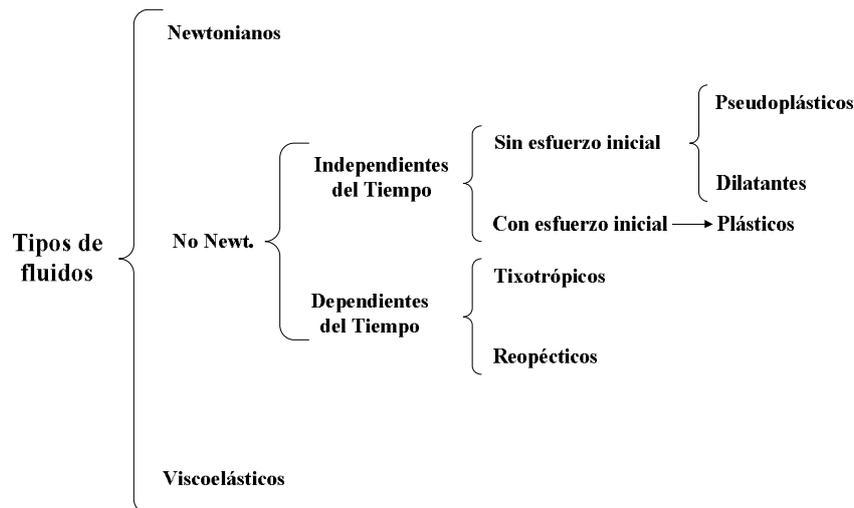


Figura 2.3 Esquema general de los tipos de fluidos

La ley de Newton de la viscosidad establece que la fuerza de cizalla o de corte por unidad de área es proporcional al gradiente de la viscosidad, dicha ley puede ser expresada de la siguiente forma

$$\sigma = \mu \left(-\frac{dv}{dr} \right), \quad (2.9)$$

donde

σ = Esfuerzo de corte o de cizalla [=] Pa

$\frac{dv}{dr} = \dot{\gamma}$ = velocidad de deformación [=] s^{-1}

μ = coeficiente de viscosidad [=] Pa · s.

Nota: unidades en el Sistema Internacional (SI).

Los fluidos que satisfacen la ecuación (2.9) se les llama *fluidos Newtonianos*. La experiencia práctica demuestra que los gases y líquidos homogéneos no polimerizados se comportan como fluidos Newtonianos. La viscosidad de los materiales Newtonianos es independiente del gradiente de velocidad y, para una sustancia determinada, es solo función de la temperatura y de la presión.

Sin embargo, existen muchas sustancias que no se comportan de acuerdo con la ley de Newton; este tipo de fluidos se denominan *no-Newtonianos*. En éste tipo de fluidos, la viscosidad es función de la temperatura, la presión y del gradiente de velocidad. La mayor parte de los materiales no-Newtonianos son sustancias altamente viscosas, tales como polímeros, tinta de imprenta, pastas de cemento, leche condensada, mermeladas de frutas, mieles finales de la industria azucarera, masas de confituras, etc.

La relación entre el esfuerzo cortante y la velocidad de deformación no es lineal para estos fluidos; además de diferenciarse en dependientes e independientes del tiempo.

Fluidos independientes del tiempo. A temperatura y presión constantes, la viscosidad de estos materiales varía con el gradiente de velocidad de distintas maneras. Además, estos fluidos se pueden clasificar dependiendo de si tienen o no esfuerzo inicial, es decir, si necesitan un mínimo valor de esfuerzo cortante para que el fluido se ponga en movimiento. De acuerdo con esto, los líquidos y las pastas no-Newtonianas pueden ser clasificados de la forma siguiente:

Fluidos Pseudoplásticos. Son aquellos líquidos cuya viscosidad disminuye con el incremento del gradiente de velocidad; estos comienzan a fluir tan pronto como se les

aplica un esfuerzo cortante. La mayoría de los fluidos no-Newtonianos pertenecen a esta categoría e incluyen las soluciones o fusiones de polímeros, las grasas, las suspensiones de almidón, la mayonesa, ciertos fluidos biológicos, las suspensiones de detergentes, los medios de dispersión de algunos productos farmacéuticos y las pinturas. Por lo general pueden representarse mediante una ecuación exponencial, que suele llamarse ecuación de Ostwald-de Waele

$$\sigma = k \left(-\frac{dv}{dr} \right)^n \quad (n < 1), \quad (2.10)$$

donde

σ = Esfuerzo de corte o de cizalla [=] Pa

$\frac{dv}{dr} = \dot{\gamma}$ = velocidad de deformación [=] s⁻¹

k = índice de consistencia [=] Pa · sⁿ

n = índice de comportamiento al fluido [=] adimensional.

Para estos fluidos, en lugar del coeficiente de viscosidad, se utiliza frecuentemente un coeficiente de viscosidad aparente $\mu_{\text{aparente}} = k(\dot{\gamma})^{n-1}$, la cual disminuye al aumentar el esfuerzo cortante.

Fluidos Dilatantes. En estos líquidos, la viscosidad aumenta con el incremento del gradiente de velocidad. Al igual que los Pseudoplásticos, también comienzan a fluir a penas para valores de $\sigma > 0$.

Estos fluidos son mucho menos comunes que los Pseudoplásticos. Para caracterizarlos, puede aplicarse la expresión (2.10), pero para valores de $n > 1$. Algunas soluciones dilatantes son la harina de maíz y la azúcar en solución, arena de playa húmeda, almidón en agua, silicato de potasio en agua y varias soluciones que contengan concentraciones elevadas de polvo en agua.

Fluidos con esfuerzo inicial. Plásticos de Bingham. Son materiales que poseen una estructura determinada, por lo que, para que se comporten como un fluido, es necesario romper esa estructura. Por esta razón, estos materiales comienzan a fluir para un valor de $\sigma > \sigma_0$, donde σ_0 es el esfuerzo cortante inicial que se requiere aplicar para destruir la estructura. Entre éstos fluidos están la margarina, las mezclas de chocolate, las grasas,

los jabones, las suspensiones de granos en agua, la pulpa de madera y los lodos de desecho. Su modelo reológico es de la siguiente forma

$$\sigma = \sigma_0 + \mu_1 \dot{\gamma} \quad \text{para} \quad |\sigma| > \sigma_0, \quad (2.11)$$

donde

μ = viscosidad cinemática [=] Pa·s.

Otro tipo de fluido que entra en esta clasificación son los Casson.

La figura siguiente muestra la relación entre el esfuerzo de corte (σ) y la rapidez de deformación cortante ($\dot{\gamma}$).

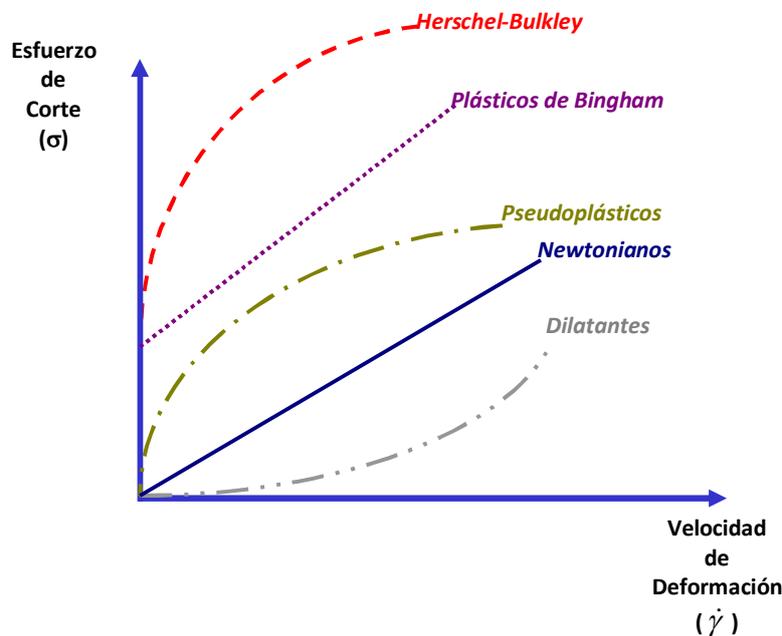


Figura 2.4 Relación entre el esfuerzo y la rapidez de deformación para fluidos Newtonianos y no Newtonianos

Fluidos dependientes del tiempo. Existen sustancias no Newtonianas que, al ser sometidas a un gradiente de velocidad constante durante un periodo de tiempo, sus viscosidades cambian en el tiempo. Este es el caso de los materiales tixotrópicos, en los que la viscosidad disminuye con el tiempo, ejemplos típicos de estos fluidos son: las pinturas, el yogur, las tintas de impresión, la salsa de tomate, algunos aceites del petróleo, el nylon, etc. Por otra parte existen los fluidos reopécticos, en los que, por el contrario, la viscosidad aumenta con el tiempo. Existen pocos fluidos de este tipo. Algunos ejemplos son: el yeso y la arcilla bentonítica, entre otros.

Regímenes de flujo. El flujo de un fluido a velocidades bajas, donde las capas de fluido parecen desplazarse unas sobre otras sin remolinos o turbulencias, se llama flujo laminar. A velocidades altas, donde se forman remolinos que imparten al fluido una naturaleza fluctante, se llama flujo turbulento. La existencia de flujo laminar y turbulento puede visualizarse con facilidad por medio de las investigaciones Oswald Reynolds, quien demostró que los dos regímenes antes mencionados en tuberías, dependen del diámetro de tubería, de la densidad, la viscosidad del fluido y de la velocidad del flujo.

El número de Reynolds para un fluido Newtoniano, puede ser calculado de la siguiente manera

$$\text{Re} = \frac{Dv\rho}{\mu}, \quad (2.12)$$

donde

Re = número de Reynolds = adimensional

D = diámetro = m

ρ = densidad = kg/m³

μ = viscosidad = Pa · s.

Para el caso de fluidos no-Newtonianos, se utiliza el Reynolds generalizado

$$\text{Re}_{\text{generalizado}} = \frac{D^n v^{2-n} \rho}{8^{n-1} k} \left(\frac{4n}{3n+1} \right)^n, \quad (2.13)$$

donde

Re_{gen} = Reynolds generalizado [=] adimensional

ρ = densidad [=] kg/m³

v = velocidad promedio [=] m/s

k = índice de consistencia [=] Pa · sⁿ

n = índice de comportamiento al fluido [=] adimensional.

Para el caso de un fluido incompresible, cuando el número de Reynolds es menor a 2100 el flujo es laminar. Por otra parte, para valores superiores a 10000, el flujo será turbulento. [10-13]

2.5. Medio Poroso

Un medio poroso es un material que consiste en una estructura o matriz sólida que contiene espacios o huecos interconectados, considerando que la fase sólida es rígida o presenta una deformación despreciable. La interconexión de los huecos o poros permite que exista el flujo de uno o más fluidos a través del material. Para este caso, se presentan dos situaciones que son:

Flujo en fase simple. Consiste de un fluido simple, el cual llena o satura los huecos.

Flujo bifásico. El cual consiste de la presencia de un gas y un fluido compartiendo el espacio vacío del medio poroso.

Un sólido que contiene huecos o vacíos, conectados o no conectados entre sí, dispersos entre ellos de una manera regular o aleatoria puede ser clasificado como material poroso, aunque existen otros tipos de casos.

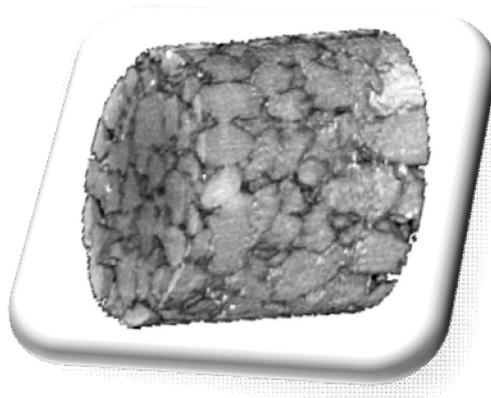


Fig. 2.5 Tomografía digitalizada de una arena

A las entidades huecas se les ha denominado, en forma artificial, como: poros, huecos, antros, cavidades, u oquedades. La *International Union of Pure and Applied Chemistry* (IUPAC) ha recomendado la siguiente clasificación de poros de acuerdo a la amplitud d del hueco en cuestión: microporos ($d < 2\text{nm}$), mesoporos ($2\text{nm} < d < 50\text{nm}$) y macroporos ($d > 50\text{nm}$). Los microporos, a su vez, presentan dos subgrupos llamados ultramicroporos ($d < 0.7\text{nm}$) y supermicroporos ($0.7 < d < 2\text{nm}$).

Es importante distinguir entre dos tipos de poros o espacios vacíos, uno que forma una fase continua dentro del medio poroso, llamado “interconectado” o espacio del poro “efectivo”, y el otro que consiste de poros o vacíos “aislados” o “no interconectados” dispersos sobre el medio, los huecos del espacio del poro son llamados

espacios del poro total. Por otra parte, los espacios o poros no interconectados no pueden contribuir al transporte de materia a través del medio poroso. Solamente contribuirá el espacio del poro efectivo o interconectado.

Dos de las propiedades que se asocian con la mecánica de fluidos a través de lechos porosos son la porosidad y la permeabilidad.

Porosidad. La cual se define como la fracción del volumen total del material ocupado por vacíos o huecos. El símbolo empleado usualmente para este parámetro es ε . La ecuación (2.14), expresa lo dicho anteriormente

$$\varepsilon = \frac{V_p}{V_B} = \frac{\text{Volumen de huecos}}{\text{Volumen total}}. \quad (2.14)$$

Debido a que la porción de volumen total no ocupada por poros, es ocupada por los granos sólidos o matriz del material, se tiene que

$$1 - \varepsilon = \frac{V_s}{V_B} = \frac{\text{Volumen de sólidos}}{\text{Volumen total}}. \quad (2.15)$$

Normalmente se definen dos clases de porosidad, *absoluta ó total* y *porosidad efectiva*. La primera, corresponde a la fracción de espacios vacíos con respecto al volumen de bulto sin importar la conexión de poros. La segunda, es aquella fracción del volumen de bulto constituida por poros interconectados. Ocurre en muchas rocas naturales, tal como en la lava volcánica, la cual presenta una alta *porosidad total* pero esencialmente no presenta *porosidad efectiva*.

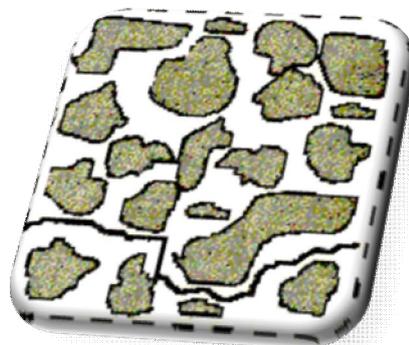


Fig. 2.6 Porosidad efectiva de un medio poroso, representada por la línea continua.

Los medios porosos se clasifican en naturales y sintéticos. En los primeros, la distribución y forma de los poros es generalmente irregular, mientras que en los sintéticos, la distribución y forma son uniformes. Ejemplos de los medios porosos naturales son: arena de playa; madera; granos y cereales en almacenamiento a granel; subsuelo (en estudios geotérmicos, edafológicos y de difusión de contaminantes); masa para panificación, paredes celulares, etc., mientras que entre los medios porosos sintéticos se tienen los lechos empacados de reactores catalíticos; materiales de aislamiento y empaque; materiales de construcción, etc.



Fig. 2.7 Micrografía de barrido electrónico de una diatomea.

Muchas operaciones industriales en las áreas de ingeniería química, bioquímica, metalúrgica entre otras, involucran el paso de un fluido a través de un lecho empacado con partículas sólidas para obtener áreas de contacto interfacial fluido-sólido o un buen mezclado del fluido. Algunos ejemplos típicos de aplicaciones que involucran a tales sistemas incluyen reacciones heterogéneas con catalizador y cromatográficas, sistemas de filtración, torres empacadas de absorción y destilación, columnas para el intercambio de iones, filtros empacados, migración de desechos radiactivos a través del suelo y muchas otras. ^[14-17]

Otras aplicaciones importantes de los medios porosos en algunas áreas científicas se muestran en el cuadro 1

<i>Área</i>	<i>Aplicaciones</i>
<i>Bioingeniería</i>	Estudio del transporte de metabolitos a través de membranas celulares, diseño de bioreactores para fermentación en estado sólido, desarrollo de biocatalizadores, etc.
<i>Ingeniería de Alimentos</i>	Estudio de la cinética de secado, cálculo de sistemas de refrigeración, diseño de procesos de esterilización. En estos casos, un enfoque moderno es considerar a los alimentos como medios porosos, con el fin de estimar sus propiedades termodinámicas.
<i>Geomecánica</i>	Estudios de transporte de contaminantes en suelos, dinámica de los yacimientos de arena, carbón, sal, etc., diseño de túneles, estudios edafológicos, etc.
<i>Industria Petrolera</i>	Propiedades de yacimientos petrolíferos, extracción de petróleo por percolación por gravedad, remediación de zonas contaminadas mediante surfactantes o con extracción con vapor.

Cuadro 2.1 Ejemplos de algunas aplicaciones de los medios porosos en diferentes áreas del conocimiento.

Permeabilidad. Puede ser definida, como una medida cuantitativa de la facilidad con la cual un fluido se transporta a través de un medio poroso. Cuando solo depende de la naturaleza intrínseca del sólido, se trata de un medio isótropo y esta propiedad es un escalar. Por otro lado, cuando también depende de la naturaleza geométrica del sólido (propiedades direccionales de los poros), se trata de un medio anisótropo y la permeabilidad se convierte en un tensor simétrico de segundo orden. ^[15]

La base de la teoría del flujo de fluidos a través de un medio poroso está fundamentada en una experiencia muy simple que desarrolló Darcy en 1856, en la ciudad francesa de Dijón. El ingeniero Henry Darcy fue encargado del estudio de la red de abastecimiento de agua a la ciudad. Debía diseñar filtros de arena para purificar el agua, así que se interesó por los factores que influían en el flujo del agua a través de los materiales arenosos.

El experimento de Darcy puede reproducirse en un equipo comúnmente llamado *permeámetro*, el cual consiste de un recipiente de sección constante por el que se hace circular agua, a este recipiente se le conecta en uno de sus extremos un depósito elevado de nivel constante. En el otro extremo se regula el caudal de salida mediante un grifo que en cada experimento mantiene el caudal también constante. Finalmente, se mide la altura de la columna de agua en varios puntos.

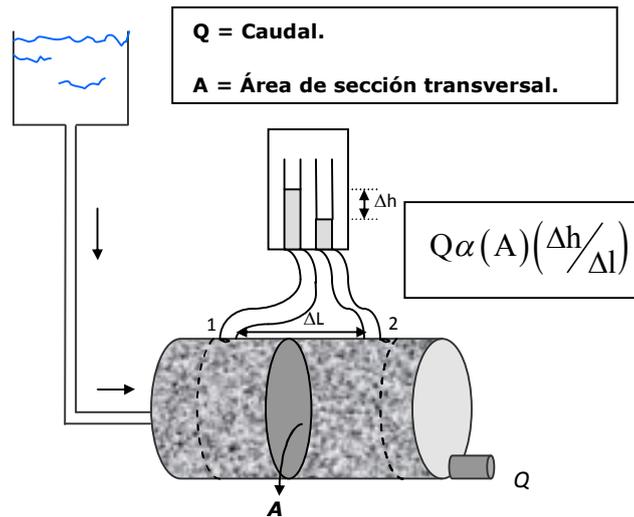


Fig. 2.8 Permeámetro de Darcy

Henri Darcy publicó una expresión obtenida a partir de sus experimentos, la cual describe la velocidad media de flujo de un fluido homogéneo en régimen laminar, que pasa a través de un lecho poroso isotrópico [16]:

$$v = -\frac{K}{\mu} \left(\frac{dp}{dx} - \rho g \right), \quad (2.16)$$

en donde K es la *permeabilidad* del medio poroso, la cual tiene dimensiones de L^2 . [18]

Aunque la naturaleza de la ley de Darcy es empírica, Greenkorn (1983) describe que dicha ley es equivalente a las ecuaciones de Navier-Stokes, por lo que se emplea como ecuación de movimiento de un fluido a través de medios porosos y una de sus aplicaciones prácticas es el estudio de operaciones de filtración. En forma tridimensional, la ecuación de Darcy toma la forma siguiente:

$$\vec{v} = -\frac{\vec{K}}{\mu} (\nabla \bar{P} - \rho \vec{g}), \quad (2.17)$$

La ley de Darcy evita la dificultad de representar el perfil de velocidad puntual por la introducción de una velocidad promedio definida como el cociente del flujo volumétrico a través de una sección dada del medio poroso. En un flujo unidimensional,

la velocidad promedio se conoce como velocidad aparente o velocidad superficial ^[19]. En la postulación de la ley de Darcy se han hecho varias consideraciones tales como: los efectos inerciales se han ignorado y las pérdidas por fricción se han balanceado solamente con la caída de presión y las fuerzas volumétricas, flujo saturado, fluido homogéneo, isótropo e incompresible. Por lo tanto, esta ley es sólo válida para pequeñas velocidades de flujo ^{[15], [19]}. Una desventaja original de la ley de Darcy, es que no requiere de la condición de la velocidad en las fronteras del medio poroso (paredes que lo contienen), lo cual hace que dicha ley sea únicamente válida lejos de estas fronteras. Con base en lo anterior se han publicado una serie de modificaciones a la ley de Darcy, algunas de las cuales se comentan a continuación.

2.5.1. Modelos de permeabilidad

La filtración puede ser descrita matemáticamente de muchas formas. La forma más sencilla es la antes mencionada en la ecuación (2.16) por Darcy para fluidos Newtonianos. Para el caso de fluidos no-Newtonianos que siguen la ley de la potencia una expresión utilizada es la siguiente

$$K = \frac{k\dot{\gamma}^{n-1}\bar{v}}{\nabla P}, \quad (2.18)$$

donde K es la permeabilidad, k es el índice de consistencia, n índice de comportamiento al fluido, \bar{v} la velocidad del fluido, $\dot{\gamma}$ velocidad de deformación y ΔP es la caída de presión.

Un modelo propuesto por Kozeny-Carman para el proceso de filtración es la siguiente

$$K = \frac{1}{K_0 S_0^2} \frac{\varepsilon^3}{(1-\varepsilon)^2}, \quad (2.19)$$

donde K_0 es la constante de Kozeny, S_0 factor de forma, y ε la porosidad media. El factor de forma es encontrado a partir de la siguiente expresión

$$S_0 = \frac{\text{área superficial de la fase sólida}}{\text{volumen de la fase sólida}}. \quad (2.20)$$

Resultados obtenidos de trabajos experimentales, Ergun propone una relación para diferentes factores de forma, para el caso de la filtración en la que están involucrados sólidos de forma cilíndricos

$$K = \frac{(S_0 d)^2 \varepsilon^3 g_c}{150(1-\varepsilon)^2}. \quad (2.21)$$

En la ecuación anterior d es el diámetro de los cilindros y g_c constante gravitacional. [20-22]

2.5.2. Factores de fricción en lechos empacados

El flujo de fluidos a través de lechos empacados con partículas es frecuente en diferentes ámbitos. Son frecuentes en la industria los equipos que cuentan con lechos empacados, a través de los cuales se mueven uno o varios fluidos, tal como sucede en el secado, humidificación, absorción, destilación y en los reactores empacados.

Por ejemplo; en la industria química ocurre en los convertidores de SO_2 - SO_3 , en la reducción en altos hornos; en la industria alimentaria, en las torres de secado de legumbres; en química analítica, en el flujo de un gas a través de una columna de un cromatógrafo, etc.

Las pérdidas de presión que sufre un fluido al pasar a través de un lecho empacado están relacionadas con los números de Reynolds mediante fórmulas del tipo

$$\frac{2\Delta P g_c D_p}{v^2 \rho L} = \phi(N_{Re}). \quad (2.22)$$

En la ecuación anterior, ΔP es la caída de presión debida a la fricción.

Experimentalmente se ha encontrado que el comportamiento de la caída de presión en los lechos empacados al aumentar la velocidad es la siguiente N_{Re}

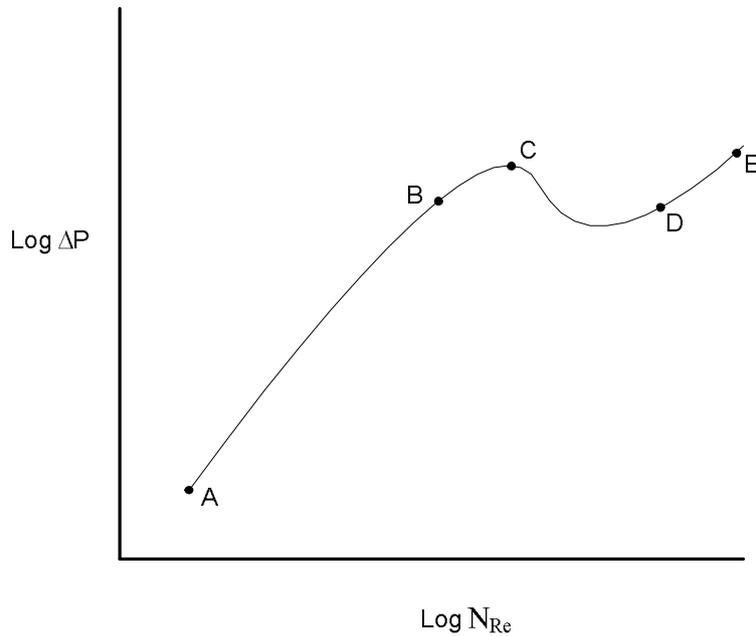


Figura 2.9 Comportamiento de la caída de presión en función del número de Reynolds en Lechos empacados.^[23]

Entre los puntos A y B de la figura 2.9, el lecho es estable y la caída de presión y el Reynolds están dados por

$$\frac{\Delta P}{\rho} = f \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \frac{L v_0^2}{D_p g_c} \quad (2.23)$$

Para flujo laminar, si el número de Reynolds está por debajo de la unidad se tiene

$$f = \frac{150}{Re}, \quad (2.24)$$

en donde

$$Re = \frac{D_p v_0 \rho}{(1-\varepsilon) \mu} \quad (2.25)$$

Al sustituir la ecuación (2.25) y (2.24) en (2.23) obtenemos una expresión utilizada a menudo en lechos empacados, la cual es la denominada ecuación de “Blake-Kozeny”

$$\Delta P = \frac{150\mu v_0}{D_p^2} \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3}. \quad (2.26)$$

Es importante destacar la enorme sensibilidad de la pérdida de carga con la porosidad. Así, si la porosidad del lecho cambia de 0.5 a 0.6 la pérdida de carga se reduce 2.7 veces.

Para régimen altamente turbulento (Re mayor que 10^4), se utiliza la ecuación de "Burke-Plummer":

$$\Delta P = \frac{1.75\mu\rho v_0^2}{D_p} \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3}. \quad (2.27)$$

La suma de las ecuaciones (2.26) y (2.27) conduce a la ecuación de “Ergun”:

$$\Delta P = \frac{150\mu v_0}{D_p^2} \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} + \frac{1.75\mu\rho v_0^2}{D_p} \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3}. \quad (2.28)$$

En la que

$$f = \frac{150}{Re} + 1.75. \quad (2.29)$$

Para elevadas velocidades de flujo el primer término de la ecuación (2.28) se vuelve despreciable frente al segundo y se obtiene la ecuación de "Burke-Plummer", mientras que para bajas velocidades es el segundo término el que se vuelve despreciable y tiende a cumplirse la ecuación de "Blake-Kozeny".^[23-26]

Referencias

- [1] J. R. Welty, C. E. Wicks and R. E. Wilson. *Fundamentals of momentum, heat and mass transfer*. Wiley, New York. 2000.
- [2] M. C. Potter and D. C. Wiggert. *Mechanics of fluids*, Prentice Hall, New Jersey. 1997.
- [3] A. Samano and M. Sen, *Mecánica de fluidos, energía y ecología*. Universidad de Norte Dame (E.E.U.U.), 1980.
- [4] J. Gratton. *Introducción a la mecánica de fluidos*. Buenos Aires, 2002.
- [5] A. J. Smits. *A physical introduction to fluid mechanics*, Wiley, New York, 2003.
- [6] R. W. Fox and A. T. Mc Donald. *Introduction to fluid mechanics*. McGraw-Hill, 1995.
- [7] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Fluid Mechanics*. 2nd edition, Pergamon Press, London, 1987.
- [8] Li Shi Lou. *Lattice-gas automata and lattice Boltzmann equations for two-dimensional hydrodynamics*. PhD Thesis, Georgia Institute of Technology, April, 1993.
- [9] P. K. Kundu. *Fluid mechanics*. Elsevier Academic Press, 2004.
- [10] R. P. Chhabra and J. F. Richardson. *Non-Newtonian flow in the process industries*. Butterworth-Heinemann, 1999.
- [11] D. A. Siginer, K. D. De and R. P. Chhabra. *Advances in the flow and rheology of non-Newtonian fluids*. Elsevier, Part B, 1999.
- [12] T. T. Romeo, *Fundamentals of food process engineering*. Third Edition, Springer, 2007.
- [13] H. Yamaguchi. *Engineering fluid mechanics*. Springer, 2008.
- [14] I. H. Jiménez. *Modelamiento matemático de los procesos de transferencia de momentum, calor y masa en medios porosos*. PhD Thesis. UAMI, 1999.
- [15] R. A. Greenkorn. *Flow Phenomena in Porous Media*. Marcel Dekker Inc. N.Y., 1983.
- [16] D. A. Nield and A. Bejan. *Convection in porous media*. Springer-Verlag, USA, 1992.

- [17] M. A. Hernández, J. A. Velasco, F. Rojas, V. H. Lara, M. A. Salgado and V. Tamariz. Evaluación de mesoporos y caracterización de arcillas del estado de Puebla, México. *Rev. Int. Contam. Ambient.* 19(4): 183 – 190, 2003.
- [18] L. E. Sissom and D. R. Pitts. *Elements of transport phenomena*. McGraw-Hill Book Co., 1972.
- [19] B. Gebhart, Y. Jaluria, R.L. Mahajan and B. Sammakia. *Buoyancy-induced flows and transport*. Hemisphere Publishing Co. New York, N.Y., 1988.
- [20] Z. Kembtowski and M. Michniewicz. A new look at the laminar flow of power law fluids through granular beds. *Rheol. Acta.* 18, 730- 739, 1979.
- [21] R. P. Chhabra, J. Comiti and I. Machač. Flow of non-Newtonian fluids in fixed and fluidised beds. *Chemical Engineering Science.* 56 (1): 1-27, 2001.
- [22] C. J. Geankoplis. *Transport process unit operations*. Prentice Hall, 1992.
- [23] B. A. Valiente. *Problemas de flujo de fluidos*. Limusa, 1998.
- [24] O. Rahli, L. Tadrist, M. Miscevic and R. Santini. Fluid flow through randomly packed monodisperse fibers: The Kozeny-Carman parameter analysis. *J. Fluids Eng.* 119 (1): 188-192, 1997.
- [25] H. Freund, T. Zeiser, F. Huber, E. Klemm, G. Brenner, F. Durst and G. Emig. Numerical simulations of single phase reacting flows in randomly packed fixed-bed reactors and experimental validation. *Chemical Engineering Science.* 58(3-6): 903-910, 2003.
- [26] S. Mauran, L. Rigaud and O. Coudevylle. Application of the Carman–Kozeny correlation to a high-porosity and anisotropic consolidated medium: The compressed expanded natural graphite. *Transport in Porous Media*, 43, 355–376, 2001.

CAPÍTULO 3

REDES DE BOLTZMANN

3.1 Bases de la Teoría Cinética y la Ecuación Clásica de Boltzmann

Como se menciona en el capítulo 1, para la solución de problemas complejos de dinámica de fluidos, existen tradicionalmente dos tipos de enfoques: el primero, de tipo macroscópico, el cual parte de un nivel desde un punto de vista continuo, con el planteamiento de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, como por ejemplo las ecuaciones de Navier-Stokes para flujo incompresible, y la utilización de técnicas numéricas para su solución. El segundo enfoque denominado microscópico se fundamenta principalmente en la teoría cinética de los gases y la mecánica estadística. En contraste a la aproximación del medio continuo, la teoría cinética asume que un fluido está constituido de un gran número de moléculas, y el movimiento de ellas obedece a la mecánica de Newton. Resolver directamente el sistema, implicaría tener muchos grados de libertad, que son del orden del número de Avogadro (10^{23}), lo cual resulta imposible. Sin embargo, el objetivo no es estudiar el movimiento individual de las moléculas que constituyen el fluido, lo que interesa es el comportamiento colectivo de estos sistemas. Por lo que, una descripción estadística es inevitable ^[1]. Algo que resulta aceptable en la teoría cinética es utilizar en su lugar, *funciones de distribución de partícula*. Para tal caso, basta definir una función de densidad de partícula en el espacio fase $n(\vec{r}, \vec{v}, t)$ que depende únicamente de la posición de la partícula y de su velocidad como

$$n(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3r d^3v = \text{número esperado de partículas en } d^3r \text{ alrededor de } \vec{r} \text{ con velocidad} \quad (3.1) \\ \text{en } d^3v \text{ alrededor de } \vec{v} \text{ en el tiempo } t.$$

Esta función contiene toda la información que se requiere normalmente para la descripción de los procesos. Integrando $n(\vec{r}, \vec{v}, t)$ sobre la velocidad, se obtiene la densidad de partícula ($N(\vec{r}, t) d^3r = \text{número esperado de partículas en } d^3r \text{ alrededor de } \vec{r} \text{ en el tiempo } t$)

$$N(\vec{r}, t) = \int d^3v n(\vec{r}, \vec{v}, t). \quad (3.2)$$

Al normalizar $n(\vec{r}, \vec{v}, t)$ se obtiene una **función de distribución de probabilidad** o **función de densidad** con una normalización unitaria ($\int d^3v f(\vec{r}, \vec{v}, t) = 1$) [2], [3]

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = \frac{n(\vec{r}, \vec{v}, t)}{N(\vec{r}, t)}. \quad (3.3)$$

Es importante mencionar que, tanto la densidad del fluido “ ρ ”, la velocidad “ \vec{u} ”, así como la energía interna “ e ” pueden encontrarse por medio de la función de distribución f por medio de la conservación de esas cantidades, de la forma siguiente

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}, t) &= \int m f(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{v} \\ \rho(\vec{r}, t) \vec{u}(\vec{r}, t) &= \int m \vec{c} f(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{v} \\ \rho(\vec{r}, t) e(\vec{r}, t) &= \frac{1}{2} \int m u_0^2 f(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{v}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

donde m es la masa molecular y u_0 es una velocidad peculiar $\vec{u}_0 = \vec{c} - \vec{u}$, la velocidad de la partícula con respecto al flujo del fluido. La energía interna es ($e = 3k_B T/2m$), donde T es la temperatura y k_B es la constante de Boltzmann.

Un fluido puede considerarse como un medio continuo cuando el fluido es denso; esto es, que las partículas se encuentran muy cercanas no dejando espacio entre

ellas, en tal caso las ecuaciones fundamentales que gobiernan la evolución del fluido son del tipo de Navier-Stokes (NS).

Por otro lado, en un fluido real, las partículas interactúan fuertemente y continuamente. En un gas rarificado, las partículas se mueven más tiempo como partículas libres, excepto cuando ocurren colisiones de cuerpo binarias. Cuando el número de Knudsen (ver capítulo uno) no es suficientemente pequeño, el fluido puede ser considerado como un flujo de un gas rarificado; por el contrario, cuando el número de Knudsen es pequeño, el fluido podría considerarse como un medio continuo, como ya se ha mencionado.

El método de RB se basa en la aproximación del fluido como un gas rarificado (ó gas diluido) de partículas. Tal gas rarificado puede ser descrito por la ecuación de Boltzmann que fue derivada por vez primera en 1872 por Ludwig Boltzmann^[4]. Las ecuaciones de NS pueden ser derivadas de la ecuación de Boltzmann en un cierto límite. Como se vio anteriormente, una descripción estadística de un sistema puede ser realizada en términos de la función de distribución $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$, donde $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ es definida de tal forma que $f(\vec{r}, \vec{v}, t)d\vec{r}d\vec{v}$ es el número de moléculas a tiempo t situada entre \vec{r} y $\vec{r} + d\vec{r}$ y que tiene velocidades en el rango $\vec{v} \rightarrow \vec{v} + d\vec{v}$.



La derivación e la ecuación de Boltzmann puede realizarse, considerando un gas en el que actúa una fuerza externa \vec{F} y además asumiendo que inicialmente no ocurren colisiones entre las moléculas del gas. A tiempo dt la velocidad \vec{v} de cualquier molécula cambiará a $\vec{v} + Fdt$ y su posición \vec{r} irá a $\vec{r} + \vec{v}dt$.

Entonces el número de moléculas $f(\vec{r}, \vec{v}, t)d\vec{r}d\vec{v}$ es igual al número de moléculas $f(\vec{r} + \vec{v}dt, \vec{v} + \vec{F}dt, t + dt)d\vec{r}d\vec{v}$, que puede ser expresado como

$$f(\vec{r} + \vec{v}dt, \vec{v} + \vec{F}dt, t + dt)d\vec{r}d\vec{v} - f(\vec{r}, \vec{v}, t)d\vec{r}d\vec{v} = 0. \quad (3.5)$$

Sin embargo, si ocurren colisiones entre las moléculas, estas se pueden ser representadas como la diferencia neta, entre el número de moléculas $f(\vec{r} + \vec{v}dt, \vec{v} + \vec{F}dt, t + dt)d\vec{r}d\vec{v}$ y el número de moléculas $f(\vec{r}, \vec{v}, t)d\vec{r}d\vec{v}$. Esto puede

escribirse como $\Omega(f)d\vec{r}d\vec{v}dt$ donde $\Omega(f)$ es el operador de colisión. Esto da como resultado la siguiente ecuación que describe la evolución de la función de distribución:

$$f(\vec{r} + \vec{v}dt, \vec{v} + \vec{F}dt, t + dt)d\vec{r}d\vec{v} - f(\vec{r}, \vec{v}, t)d\vec{r}d\vec{v} = \Omega(f)d\vec{r}d\vec{v}dt. \quad (3.6)$$

Dividiendo la ecuación (3.6) por $d\vec{r}d\vec{v}dt$ y tomando el límite cuando $dt \rightarrow 0$, se obtiene la ecuación de Boltzmann

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_\alpha \frac{\partial f}{\partial r_\alpha} + F_\alpha \frac{\partial f}{\partial v_\alpha} = \Omega(f). \quad (3.7)$$

El primer término del lado izquierdo de la ecuación (3.7) es la razón de tiempo de cambio de f , el segundo término es el cambio debido a la variación de la velocidad y el tercer término es el cambio de f debido a la fuerza de cuerpo F_α que influye en la velocidad de la molécula. El término del lado derecho es conocido como el término de colisión, el cual representa la colisión o encuentro de la molécula considerada con otras moléculas en el campo de flujo. Cualquier solución de la ecuación de Boltzmann requiere de una expresión para el término de colisión $\Omega(f)$. La complejidad del mismo, lleva a la búsqueda de modelos más simples de los procesos de colisión, para facilitar el análisis matemático. Tal vez el modelo de colisión más conocido sea el propuesto en forma simultánea por Bhatnager, Gross y Krook y Welander^[5] y se conoce como el modelo **BGK**:

$$\Omega_{\text{BGK}}(f) \approx \nu [f^{\text{eq}}(\vec{v}) - f(\vec{r}, \vec{v}, t)]. \quad (3.8)$$

Aquí ν es un parámetro ajustable y $f^{\text{eq}}(\vec{r}, \vec{v}, t)$ es la distribución de equilibrio termodinámico local (la cual se explicará en la siguiente sección). Algunas veces se refiere a este modelo como la aproximación de “tiempo de relajamiento único”, ya que en ausencia de dependencia espacial, implicará que $f(t) \rightarrow f^{\text{eq}}(\vec{v})$ de modo exponencial en tiempo como $\exp(-\nu t)$. Este modelo conserva propiedades importantes

del término de colisión de la ecuación de Boltzmann. Por ejemplo, satisface el **teorema H** y obedece las leyes de conservación de masa, momento y la energía (por tanto, conserva la estructura de las ecuaciones de la hidrodinámica); es decir, preserva los invariantes de colisión.

El término de colisión con el modelo BGK por lo general es escrito de la siguiente forma

$$\Omega_{\text{BGK}}(f) = \frac{f^{\text{eq}} - f}{\tau}. \quad (3.9)$$

Sin conocer la forma de $\Omega(f)$ varias propiedades pueden ser deducidas. Si durante la colisión se conserva masa, momento y energía, se requiere que

$$\int \begin{bmatrix} 1 \\ \vec{v} \\ v^2 \end{bmatrix} \Omega(f) d\vec{v} = 0. \quad (3.10)$$

Los términos $\psi_i, i = 0, \dots, 4$ donde $\psi_0 = 1, \psi_1 = v_1, \psi_2 = v_2, \psi_3 = v_3$ y $\psi_4 = v^2$ son frecuentemente llamados invariantes de colisión, ya que $\int \psi_i \Omega(f) d\vec{v} = 0$

Cualquier combinación lineal de los términos ψ_i son también invariantes de colisión.

En la teoría cinética ordinaria de un gas neutro, se considera la ecuación de Boltzmann con el término de colisión solamente para colisiones binarias y se desprecia la fuerza de cuerpo F_α . Esta ecuación simplificada de Boltzmann es ya una ecuación integro-diferencial no lineal, para la cual su solución resulta ser complicada para problemas prácticos de flujo. Sin embargo, la ecuación de Boltzmann sirve para dos aspectos importantes en el estudio de dinámica de fluidos. En primer lugar, la ecuación fundamental de mecánica de fluidos desde el punto de vista microscópico puede ser derivada de la ecuación de Boltzmann. Por una primera aproximación, se podría obtener las ecuaciones de Navier-Stokes a partir de la ecuación de Boltzmann. En segundo lugar, la ecuación de Boltzmann puede dar información acerca de los coeficientes de

transporte tales como el coeficiente de viscosidad, coeficiente de difusión y coeficiente de conductividad térmica. [6],[7]

3.2 Función de Distribución de Equilibrio y Teorema-H

La ecuación (3.6) con el término de colisión descrito anteriormente para el caso de colisiones binarias, no es lineal. Por tanto, la resolución es tarea difícil en todas las situaciones con excepción de las más triviales. No obstante, existe una solución de cierta importancia de la ecuación de Boltzmann que no es trivial, la cual se conoce como la *función de distribución Maxwelliana*. Para tal caso, la ecuación de Boltzmann presenta un comportamiento irreversible, y la función de distribución tiende hacia la distribución Maxwelliana, la cual representa la situación de un gas uniforme en estado estacionario.

Para la derivación de la función de distribución Maxwelliana, se hacen las siguientes suposiciones:

- (i) Ausencia de fuerzas externas F_α , y
- (ii) el estado del gas es uniforme, por lo que, la función de distribución $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ es independiente de las coordenadas espaciales \vec{r} , es decir, $f = f(\vec{v}, t)$.

Tomando en cuenta estas condiciones, la ecuación de Boltzmann (3.7) con término de colisión binaria es

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 2\pi \iint (\bar{f}f' - ff') g_0 b db dv'. \quad (3.11)$$

Donde se asume que la partícula es esféricamente simétrica, por lo que la integración con respecto al ángulo ε puede ser evaluado inmediatamente.

Por otra parte, si se define una *función H* tal que

$$H = \int f \cdot \ln f \cdot d\vec{v}. \quad (3.12)$$

La ecuación (3.12) puede diferenciarse con respecto al tiempo $\left[\frac{\partial H}{\partial t} = \int (1 + \ln f) \frac{\partial f}{\partial t} d\vec{v} \right]$, y de esta forma sustituir $\frac{\partial f}{\partial t}$ de la ecuación (3.11) para obtener

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 2\pi \iiint g_0 b (\bar{f}f' - ff') (\ln f + 1) db d\vec{v}' d\vec{v}. \quad (3.13)$$

Si se consideran las colisiones inversas; es decir, partículas con velocidades \vec{v} y \vec{v}' colisionando y moviéndose fuera, con velocidades $\bar{\vec{v}}$ y $\bar{\vec{v}}'$. El resultado de estas colisiones será

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 2\pi \iiint g_0 b (\bar{f}\bar{f}' - f\bar{f}') (\ln f' + 1) db d\bar{\vec{v}}' d\bar{\vec{v}}. \quad (3.14)$$

Ya que $d\vec{v}d\vec{v}' = d\bar{\vec{v}}d\bar{\vec{v}}'$. Sumando las ecuaciones (3.13) y (3.14), además de dividir por dos tenemos

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \pi \iiint g_0 b (\bar{f}\bar{f}' - f\bar{f}') [\ln f + \ln f' + 2] db d\vec{v}' d\vec{v}, \quad (3.15)$$

cambiando las variables $\vec{v} \leftrightarrow \bar{\vec{v}}$ y $\vec{v}' \leftrightarrow \bar{\vec{v}}'$ se obtiene

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \pi \iiint g_0 b (\bar{f}\bar{f}' - f\bar{f}') (-\ln \bar{f} - \ln \bar{f}' - 2) db d\bar{\vec{v}} d\bar{\vec{v}}'. \quad (3.16)$$

Ahora bien, si se suman las ecuaciones (3.15) y (3.16), además de dividir por dos tenemos

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\pi}{2} \iiint g_0 b (\bar{f}\bar{f}' - f\bar{f}') \left[\ln \frac{f\bar{f}'}{\bar{f}f'} \right] db d\vec{v}' d\vec{v}. \quad (3.17)$$

Se puede observar que $(\bar{f}\bar{f}' - f\bar{f}') \ln \left(\frac{f\bar{f}'}{\bar{f}f'} \right) \leq 0$ y todos los otros términos en el integrando de la ecuación (3.17) son positivos se tiene

$$\frac{\partial H}{\partial t} \leq 0. \quad (3.18)$$

La expresión anterior se conoce como el *teorema H* de Boltzmann e indica que H nunca puede incrementar. Ya que H no puede aumentar pero si tender a un límite, éste podría corresponder a la situación en que $\partial H/\partial t = 0$. Que es posible solamente, de acuerdo a la ecuación (3.17), si $(\bar{f}f' = ff')$. Esta condición se conoce como *balance detallado* y puede ser expresado equivalentemente como $(\ln \bar{f} + \ln \bar{f}' = \ln f + \ln f')$

Por tanto, si f^{eq} es la distribución de equilibrio, entonces $\ln f^{\text{eq}}$ es un invariante de colisión y puede ser de la forma $\left\{ \ln f^{\text{eq}} = \sum_i \alpha_i \psi_i \quad i = 0, 1, \dots, 4 \right\}$. Donde ψ_i son los invariantes de colisión (ecuación 3.10) y α_i son constantes. Esto puede reescribirse como

$$\ln f^{\text{eq}} = \ln(\alpha'_0) - \alpha'_4 \frac{1}{2} m \left\{ \left[v_1 - \left(\frac{\alpha'_1}{\alpha'_4} \right) \right]^2 + \left[v_3 - \left(\frac{\alpha'_3}{\alpha'_4} \right) \right]^2 \right\}, \quad (3.19)$$

donde $\alpha'_0 = \exp(\alpha_0)$, $\alpha'_1 = \alpha_1/m$, $\alpha'_2 = \alpha_2/m$, $\alpha'_3 = \alpha_3/m$ y $\alpha'_4 = 2\alpha_4/m$.

Con $\vec{V} = (\vec{v} - \vec{\alpha}')/\alpha'_4$ en la cual $\vec{\alpha}' = (\alpha'_1, \alpha'_2, \alpha'_3)$ se puede escribir como

$$f^{\text{eq}} = \alpha'_0 e^{-\alpha'_4 \frac{1}{2} m V^2}. \quad (3.20)$$

La ecuación (3.20) es la función de distribución de Maxwell para un gas y describe *el estado de equilibrio de la función de distribución f*. La forma de las constantes puede ser encontrada por la sustitución de la ecuación (3.20) en la ecuación (3.4) para dar la forma más común de la función de distribución de Maxwell

$$f^{\text{eq}} = \frac{\rho}{m} \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left[\frac{-m(\vec{v} - \vec{u})^2}{2k_B T} \right]. \quad (3.21)$$

El teorema H muestra que cualquier función de distribución f tiende hacia su estado de equilibrio f^{eq} para tiempos largos.

Para el caso de un sistema que no es uniforme, éste no está en equilibrio termodinámico y por consiguiente no puede obedecer la ley de distribución de velocidades de Maxwell. Sin embargo, si el “alejamiento del equilibrio” no es grande, puede considerarse con una aproximación muy buena, que todo volumen pequeño del mismo (pequeño en la escala macroscópica) está en equilibrio (considerada como un subsistema). Esto se debe a dos razones. Primero, que incluso porciones diminutas de un gas contienen un número muy grande de moléculas. Segundo, que el tiempo necesario para que se establezca el equilibrio dentro de un pequeño volumen es muy breve en comparación con el tiempo necesario para que los procesos de transporte logren establecer el equilibrio del pequeño volumen con el resto del sistema (esto es cierto siempre y cuando los gradientes de concentración, temperatura, etc. no sean demasiado grandes). En consecuencia, puede suponerse que existe *equilibrio termodinámico local* y por lo tanto la distribución de velocidades dentro de cualquier elemento de volumen (macroscópico) del medio es Maxwelliana, aunque la densidad, la temperatura y la velocidad macroscópica varíen de un punto a otro. ^[2,3,5-11]

3.3 El Método de Redes de Boltzmann

El Método de Redes de Boltzmann (MRB), en su forma más sencilla, consiste de una red (rejilla) discreta, cada sitio (nodo) de ésta rejilla, está representados por la función de distribución única a esos sitios. La cual es definida por la velocidad de una partícula y limitada a un grupo discreto de velocidades permitidas. Durante cada paso de tiempo discreto para la simulación, el movimiento o salto de partícula a sitios de rejilla próximos, a lo largo de su dirección de movimiento, puede ocurrir una colisión con otra partícula al llegar éstas al mismo sitio. El resultado de las colisiones se determina por medio de la solución de la ecuación cinética de Boltzmann para la nueva función de distribución de la partícula a ese sitio, y de esta forma se actualiza la función de distribución de la partícula ^{[12], [13]}. Específicamente, la función de distribución de la partícula en cada sitio $f_i(\vec{x}, t)$, se define como la probabilidad de encontrar una partícula

con velocidad de dirección \vec{e}_i , donde cada valor del subíndice i especifica cada una de las direcciones permitidas del movimiento. La figura 3.1 (a) muestra las direcciones permitidas para una rejilla en 2D y (b) en 3D.

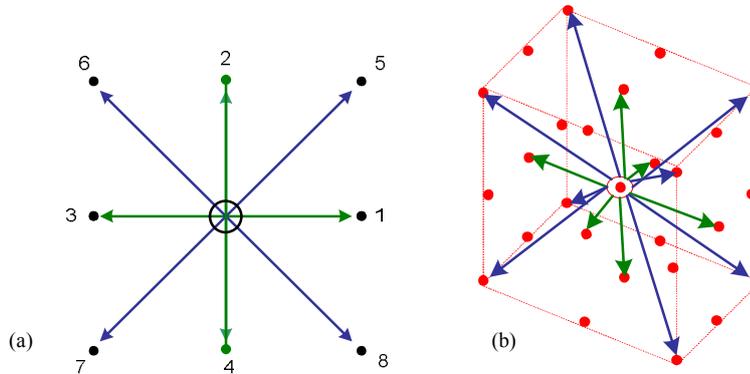
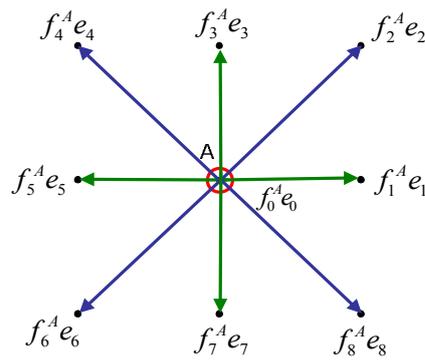


Fig. 3.1 Direcciones permitidas para el movimiento de partículas. (a) Modelo D2Q9, Modelo D2Q15.

En la figura anterior, se muestran las direcciones de los vectores de rejilla para un modelo D2Q9 (bidimensional con nueve direcciones de velocidad), de los cuales cuatro sitios corresponden a vecinos cercanos (derecha, izquierda, arriba y abajo). Otros cuatro puntos de los vectores de rejilla a lo largo de las caras diagonales de los siguientes sitios, a lo largo de estas diagonales. De esta manera las partículas pueden viajar en ocho direcciones para cada sitio de la rejilla. El círculo en el centro del cuadrado representa el vector \vec{e}_0 , el cual tiene un valor de cero y representa partículas que no tienen movimiento, es decir, partículas en reposo. Luego entonces, se tiene un total de nueve números reales que describen la función de distribución de la partícula para un sitio de rejilla.

El proceso de la propagación y colisión de partículas se da generalmente en dos etapas: la primera, es para denotar el avance de las partículas al siguiente sitio de rejilla a lo largo de las direcciones de movimiento, esto es para cada paso de tiempo Δt . El momento en dirección i en el sitio \vec{x} y tiempo t esta dado por $f_i(\vec{x}, t)\vec{e}_i$. La figura 3.2 ilustra el ejemplo de la distribución de momento en dos dimensiones.



$$\text{Momentum total al sitio de rejilla A} = \sum_{i=1}^B f_i^A e_i$$

Fig. 3.2 Representación de los momentos para cada dirección del modelo D2Q9.

La segunda etapa es para simular las colisiones de las partículas, la cual causa que estas se propaguen en direcciones diferentes en cada sitio de la rejilla. Las reglas se seleccionan de modo que se conserve energía total y momento en cada sitio de la rejilla.

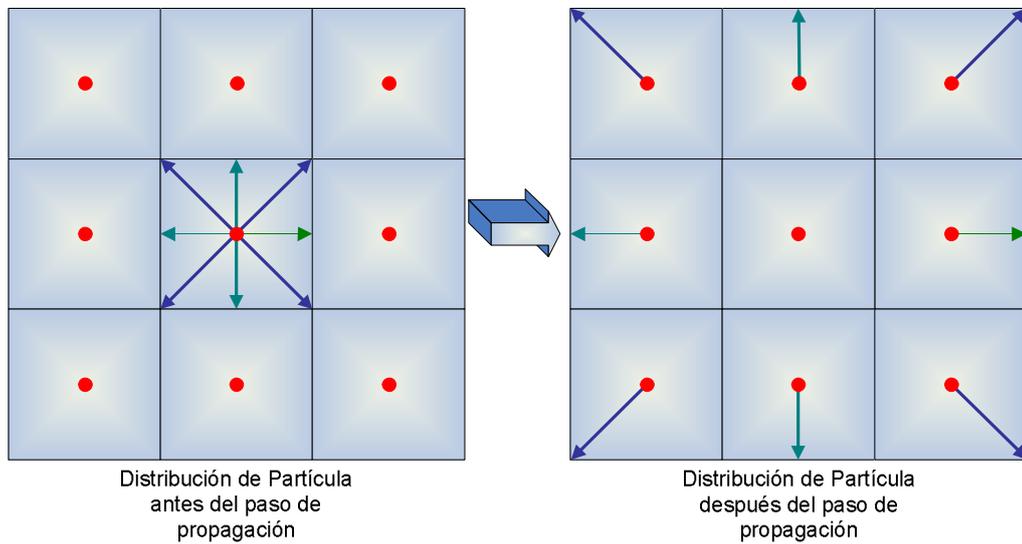


Fig. 3.3 Etapa de Propagación de las funciones de distribución a sus siguientes nodos vecinos (modelo D2Q9).

Para asegurar que las partículas tengan velocidades promedio igual a cero en las fronteras (paredes perpendiculares y paralelas al flujo), normalmente se proponen condiciones de frontera “bounce-back”. [14], [15]

3.3.1 La Ecuación General de Redes de Boltzmann

El modelo de Redes de Boltzmann (RB) puede ser descrito por medio de la siguiente ecuación

$$f_i(\bar{x} + \bar{e}_i, t+1) - f_i(\bar{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\bar{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\bar{x}, t)], \quad (3.22)$$

donde $f_i(\bar{x}, t)$ es la probabilidad de encontrar una partícula con velocidad \bar{e}_i en la posición \bar{x} y tiempo t . τ es el parámetro de relajación, el cual se relaciona con la viscosidad para simulaciones hidrodinámicas. $f_i^{\text{eq}}(\bar{x}, t)$ es la función de distribución de equilibrio, la elección de ésta es muy importante ya que de ella depende recobrar las ecuaciones de Navier Stokes [8]. La distribución de equilibrio utilizada en las simulaciones realizadas en el presente trabajo es (ver apéndice A para mayores detalles) [6, 16-20]

$$f_\alpha^{\text{eq}} = w_\alpha \rho \left\{ 1 + \frac{3(\bar{e}_\alpha \cdot \bar{u})}{c^2} + \frac{9(\bar{e}_\alpha \cdot \bar{u})^2}{2c^4} - \frac{3\bar{u}^2}{2c^2} \right\}. \quad (3.23)$$

La principal diferencia entre la ecuación (3.22) y la ecuación (3.7) de Boltzmann, es la estricta discretización del espacio fase (ver apéndice A para mayores detalles). En la ecuación anterior las variables tiempo y espacio son discretas, además en el espacio de velocidad solamente un número pequeño de valores son permitidos.

Las variables macroscópicas, densidad $\rho(\bar{x}, t)$ y velocidad $\bar{u}(\bar{x}, t)$ son definidas como momentos de la distribución de velocidad discreta $f_i(\bar{x}, t)$ como

$$\begin{aligned}\rho(\bar{x}, t) &= \sum_{i=1}^n f_i(\bar{x}, t) \\ \bar{u}(\bar{x}, t) &= \frac{\sum_{i=1}^n f_i(\bar{x}, t) \vec{e}_i}{\rho(\bar{x}, t)}.\end{aligned}\tag{3.24}$$

El modelo de RB utilizado en nuestras simulaciones es el D2Q9, el cual ha mostrado producir un correcto comportamiento hidrodinámico para un fluido incompresible y recobrar las ecuaciones de Navier Stokes (ver apéndice B para mayores detalles) en el límite de pequeños números de Mach y de Knudsen ^[21]. Con la viscosidad cinemática ν y presión del fluido p , dada por

$$\begin{aligned}\nu &= \frac{1}{3} \left(\tau - \frac{1}{2} \right), \\ p &= c_s^2 \rho,\end{aligned}\tag{3.25}$$

en la que c_s ($\sqrt{1/3}$) es la velocidad del sonido expresada en unidades de rejilla.

En forma general, los pasos básicos para el algoritmo del modelo de RB, consisten principalmente en

1. Con una densidad inicial y momento dados, calcular la función de distribución de equilibrio (3.23) y entonces igualar las funciones ($f_i^{\text{eq}} = f_i$)
2. Propagar a sus siguientes vecinos, utilizar la ecuación (3.22)
3. Calcular la nueva densidad y momento (ecuación 3.24)
4. Calcular la nueva función de distribución de equilibrio, y entonces ir al paso 2.

El algoritmo anterior en forma general, muestra una forma sencilla el uso de la ecuación de RB para la simulación de fluidos. ^[12, 22]

Referencias

- [1] L. S. Luo. *Lattice-gas automata and lattice Boltzmann equations for two-dimensional hydrodynamics*. PhD Thesis, Georgia Institute of Technology, April, 1993.
- [2] J. J. Duderstadt and W. R. Martin. *Transport theory*. Jonh Wiley & Sons, Inc., 1979.
- [3] F. Schwabl. *Statistical mechanics*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, New York, 2002.
- [4] S. Chapman and T. Cowling. *The mathematical theory of non-uniform gases*. Cambridge University of Edinburg, Edinburg. 1970.
- [5] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross and M. Krook. A model for collision processes in gases I: small amplitude processes in charged and neutral one-component system. *Phys. Rev.* 94(3): 511-525, 1954.
- [6] S-I. Pai. *Modern fluid mechanics*. Science Press; New York, Van Nostrand Reinhold Co., 1981.
- [7] B. J. Maxwell. *Lattice Boltzmann methods in interfacial wave modelling*. PhD Thesis, University of Edinburgh, 1997.
- [8] S. Succi. *The lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond*. Oxford University Press Inc., New York, 2001.
- [9] S. Succi. *Colloquium: Role of the H theorem in lattice Boltzmann hydrodynamic simulation*. *Rev. Mod. Phys.* 74(4): 1203-1220, 2002.
- [10] C. Cercignani. *The Boltzmann equation and its applications*. Springer-Verlag, New York, 1975.
- [11] J. L. Lebowitz and E. W. Montroll. *Nonequilibrium phenomena I: The Boltzmann equation*, Amsterdam, North-Holland Publishing Company, New York, 1983.
- [12] S. Chen and G. Doolen. Lattice Boltzmann method for fluid flows. *Ann. Rev. Fluid Mech.* 30: 329-364, 1998.
- [13] J. Wilke. *Cache optimizations for the lattice Boltzmann method in 2D*, PhD Thesis, Erlangen, March, 2003.
- [14] S. Chen, G. Doolen and K. Eggert, Lattice Boltzmann versatile tool for multiphase, fluid dynamics and other complicated flows. *Los Alamos Science.* 20: 100-111, 1994.

- [15] N. ThÄurey. *A single-phase free-surface lattice Boltzmann*. PhD Thesis, Erlangen, Jun, 2003.
- [16] D. P. Lockard, L. S. Luo, S. D. Milder and B. A. Singer. Evaluation of power flow for aerodynamic applications. *J. of Stat. Phys.* 107: 423-477, 2002.
- [17] X. He and L. S. Luo. Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier-Stokes equation. *Journal of Statistical Physics.* 88(3/4): 927-944, 1997.
- [18] P. J. Dellar. Bulk and shear viscosities in lattice Boltzmann equations. *Phys. Rev. E.* 64: 031203-1 - 031203-11, 2001.
- [19] X. He and L.S. Luo. Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *Phys. Rev. E.* 56(6): 6811-6817, 1997.
- [20] Eiyad Ahmad Moh'd Abu Nada, M.S., *Lattice Boltzmann simulation of complex fluid systems in porous media*, PhD Thesis, New Mexico State University, May 2001.
- [21] Y. H. Qian, D. d'Humieres and P. Lallemand. Lattice BGK models for the Navier-Stokes equations. *Europhys. Lett*, 17(6): 479, 1992.
- [22] B. D. Kandhai. *Large scale lattice Boltzmann simulations*. Academisch Proefschrift, 1999.

CAPÍTULO 4

**SIMULACIÓN DE FLUIDOS DE LA LEY DE POTENCIA A
TRAVÉS DE MEDIOS POROSOS Y SUS APLICACIONES**

En este capítulo, se muestran las propuestas y resultados de las simulaciones de fluidos no Newtonianos a través de medios porosos utilizando el método de Redes de Boltzmann (RB). Primeramente en la sección 4.1, se propone un nuevo parámetro de relajación en función de las variables reológicas n y k (índice de comportamiento al fluido e índice de consistencia respectivamente), para simular fluidos no Newtonianos. Los resultados obtenidos de las simulaciones mencionadas anteriormente, fueron comparados con los obtenidos con la solución analítica de las ecuaciones de Navier-Stokes, con la finalidad de ver que tan factible era nuestra propuesta. Posteriormente, en la sección 4.2, se realizaron simulaciones en medios porosos, implementando el método de RB para el caso de *Medios porosos arbitrarios* y *Medios porosos aleatorios*. En los primeros se insertaron bloques en forma arbitraria en la rejilla y en los últimos, se utilizó “el método de Box-Muller” que es un generador de números aleatorios. Para ambos casos se utilizó la ley de Darcy modificada para fluidos de la potencia. En estos medios se calcularon, campos de flujo, perfiles de velocidad, perfiles de presiones, perfiles de esfuerzos, caídas de presión, así como permeabilidades. Se elaboró un programa computacional para simular fluidos no Newtonianos a través de medios porosos, el cual resulta ser válido para porosidades que van del 10 al 70%, obteniendo un error máximo de 6.8% para porosidades del 10%. En la sección 4.3, se propone la simulación con el método de RB en torres empacadas con soluciones de almidón de

sago y en las cuales se pudo calcular variables tales como; el número de Reynolds generalizado, perfiles de velocidad, perfiles de esfuerzos, caídas de presión, permeabilidades, así como factores de fricción. Algunas de estas variables fueron comparadas con modelos utilizados ampliamente en la industria química, propuestos por Ergun y Blake-Kozeny. En lo que concierne a la sección 4.4, se presenta un enfoque para calcular bandas de distribuciones de permeabilidad, a partir del método de RB; para este punto se propone una expresión para la permeabilidad en función de la viscosidad aparente. Por último, en la sección 4.4, se correlaciono el efecto de la aleatoriedad, porosidad y permeabilidad con los parámetros reológicos de fluidos no Newtonianos, prediciendo distribuciones de probabilidad. Las cuales son de gran importancia en diferentes áreas de interés científico.

4.1 Validación del modelo. Solución analítica de la ecuación de movimiento para un fluido de la potencia

Los modelos que hacen uso de técnicas numéricas son utilizados para simular sistemas físicos, los cuales necesitan ser validados contra experimentos o resultados analíticos. En esta sección se deriva la solución analítica para un fluido Newtoniano y no Newtoniano (ley de potencia) de un flujo unidimensional dentro de un conducto rectangular.

Para obtener la solución analítica a partir de la ecuación de movimiento, se inicia el análisis con el paso de un fluido no Newtoniano a través de un canal rectangular (ver figura 4.1), el cual presenta un comportamiento de la ley de la potencia (fluido de Ostwald de Waele):

$$\sigma = k\dot{\gamma}^n, \quad (4.1)$$

donde

σ es el esfuerzo de corte [=] Pa

$\dot{\gamma}$ es la velocidad de deformación [=] s^{-1}

k es el índice de consistencia [=] $Pa \cdot s^n$

y “n” el índice de comportamiento al fluido [=] adimensional.

Note que en la ecuación anterior, si $n = 1$ y $k = \mu$ se obtiene la ecuación de la ley de la viscosidad de Newton para un fluido Newtoniano. Se puede suponer que el fluido circula en régimen laminar, en la que el ancho del conducto rectangular W es considerablemente mayor que el espesor B . El conducto está situado en posición horizontal. Otras suposiciones que se utilizan son: fluido isotérmico e incompresible en estado estacionario y flujo unidimensional.

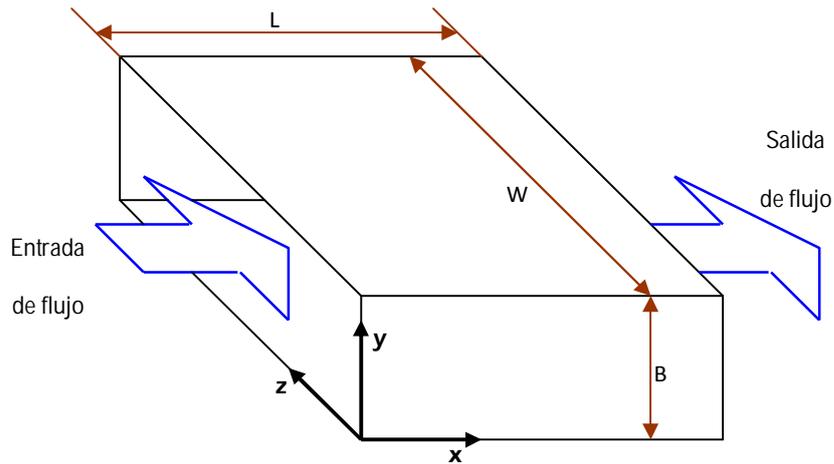


Figura 4.1 Flujo de un fluido no Newtoniano a través de un canal rectangular

El movimiento del flujo del fluido es gobernado por la ecuación macroscópica de Navier-Stokes, para el caso de un fluido no Newtoniano, se usa la ecuación de movimiento en formulación Lagrangiana (ver capítulo 1).

$$\rho \left[\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} \right] = -\nabla \vec{P} - \nabla \cdot \vec{\tau} + \rho \vec{g}. \quad (4.2)$$

La ecuación para el componente v_x a partir de la ecuación 4.2 es

$$\rho \left[\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right] = -\frac{\partial P}{\partial x} - \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) + \rho g_x. \quad (4.3)$$

Al eliminar algunos términos de acuerdo a las suposiciones hechas anteriormente; así como la observación del fenómeno a partir de la figura 4.1 se tiene

$$0 = -\frac{dP}{dx} - \frac{d\tau_{yx}}{dy}. \quad (4.4)$$

Resolviendo la ecuación 4.4, y tomando como condición límite $\tau_{yx} = 0; y = 32$ se tiene el siguiente perfil de esfuerzos

$$\tau_{yx} = \frac{\Delta P}{L}(32 - y). \quad (4.5)$$

Igualando el perfil de esfuerzos con la ley de la potencia ecuación (4.1), para un fluido no Newtoniano y tomando como condición límite a $v_x = 0; y = 1$ se obtiene el perfil de velocidades para un fluido no Newtoniano

$$v_x = \left(\frac{\Delta P}{kL}\right)^{\frac{1}{n}} \left(\frac{n}{n+1}\right) 31^{\frac{1}{n+1}} \left[1 - \left(\frac{32-y}{31}\right)^{\frac{1}{n+1}}\right]. \quad (4.6)$$

Una forma de adimensionalizar la ecuación 4.6 es simplemente dividirla por la velocidad media. Esta se define matemáticamente por el cociente entre el flujo volumétrico y el diferencial de área:

$$\bar{v} = \frac{Q}{A} \cong \frac{\iint \vec{v} \cdot d\vec{A}}{\iint d\vec{A}}. \quad (4.7)$$

Para el caso de un fluido que obedece a la ley de potencia, la velocidad media a partir de la ecuación (4.7) viene dada por

$$\bar{v} = \left(\frac{\Delta P}{kL}\right)^{\frac{1}{n}} \left(\frac{n}{n+1}\right) 31^{\frac{1}{n+1}} \left\{63 + \frac{1}{31^{\frac{1}{n+1}}} \left(\frac{n}{2n+1}\right) \left[-32^{\frac{1}{n+2}} - 31^{\frac{1}{n+2}}\right]\right\} \left(\frac{1}{63}\right). \quad (4.8)$$

Por lo que, la velocidad adimensional para un fluido No Newtoniano es, ^[1-4]

$$\frac{v_x}{\bar{v}} = \frac{(63) \left[1 - \left(\frac{32-y}{31} \right)^{\frac{1}{n}+1} \right]}{\left\{ 63 + \frac{1}{31^{\frac{1}{n}+1}} \left(\frac{n}{2n+1} \right) \left[-32^{\frac{1}{n}+2} - 31^{\frac{1}{n}+2} \right] \right\}}. \quad (4.9)$$

Una de las contribuciones del método que se presenta en este trabajo involucra una modificación del LBGK presentado por Aharonov and Rothman^[5], N. Rakotomalala^[6], E. Boek^[7], y S.P. Sullivan^[8], para fluidos no Newtonianos (Ostwald-de-Waele), el cual consiste en proponer al parámetro de tiempo de relajación τ contenido en la ecuación (3.22), en función de la viscosidad aparente que a su vez, involucra los parámetros reológicos n y k de manera que

$$\tau = \frac{1}{2} + 3k \left(\frac{dv_x}{dy} \right)^{n-1}. \quad (4.10)$$

Esta última ecuación es la que se introdujo en la ecuación (3.22), para las simulaciones con RB; además se utilizaron condiciones periódicas en la entrada y salida del fluido, así como condiciones de frontera “de rebote” en las paredes con un tamaño de rejilla de 64 x 64. Las simulaciones realizadas fueron para fluidos de la potencia con parámetros reológicos de $n = 0.33, 0.56, 1.0, 2.0$ y $k = 0.001, 0.005, 0.5, \text{ y } 10$ respectivamente. Estas, se efectuaron en una rejilla de 64 x 64 con una fuerza aplicada al fluido de 0.005, el estado estacionario fue alcanzado después de 30,000 pasos de tiempo. Los Perfiles adimensionales de velocidad con el método de RB y con solución analítica para las ENS se muestran en las figuras 4.2 y 4.3. La comparación de estos resultados presentan un error del 2%. Cabe mencionar que la máxima diferencia ocurre en las paredes del conducto, debido a la utilización de las de las condiciones de rebote.

Las simulaciones también se realizaron con una rejilla de 200 x 200, disminuyendo el porcentaje de error menor al 1%.

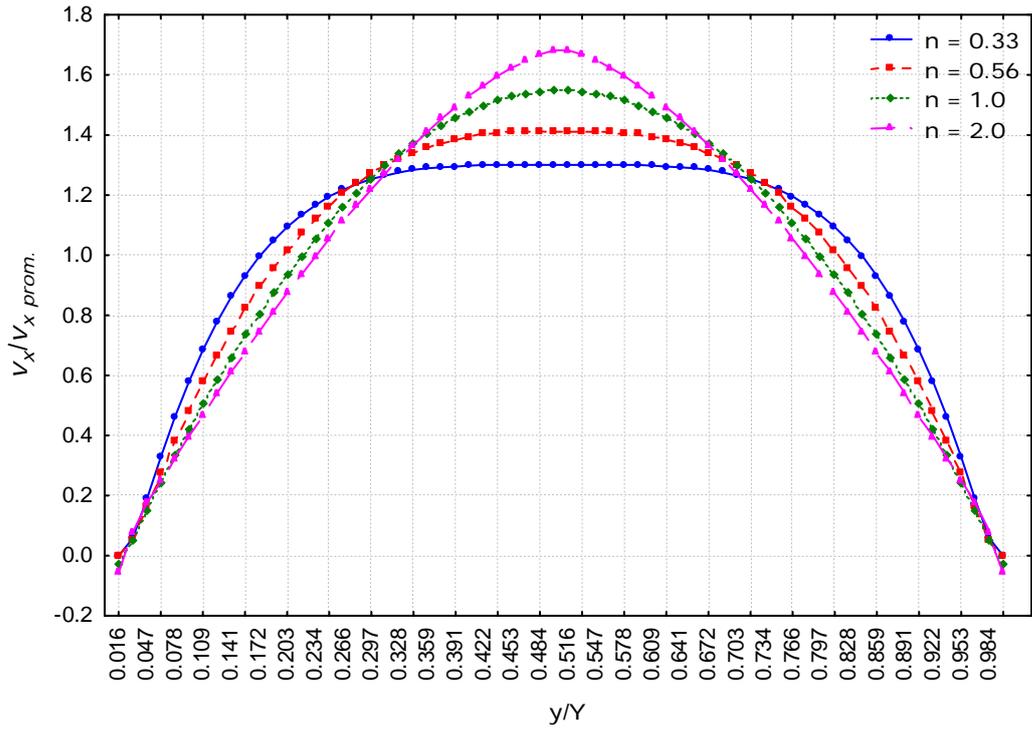


Fig. 4.2 Perfiles de velocidad con LBGK

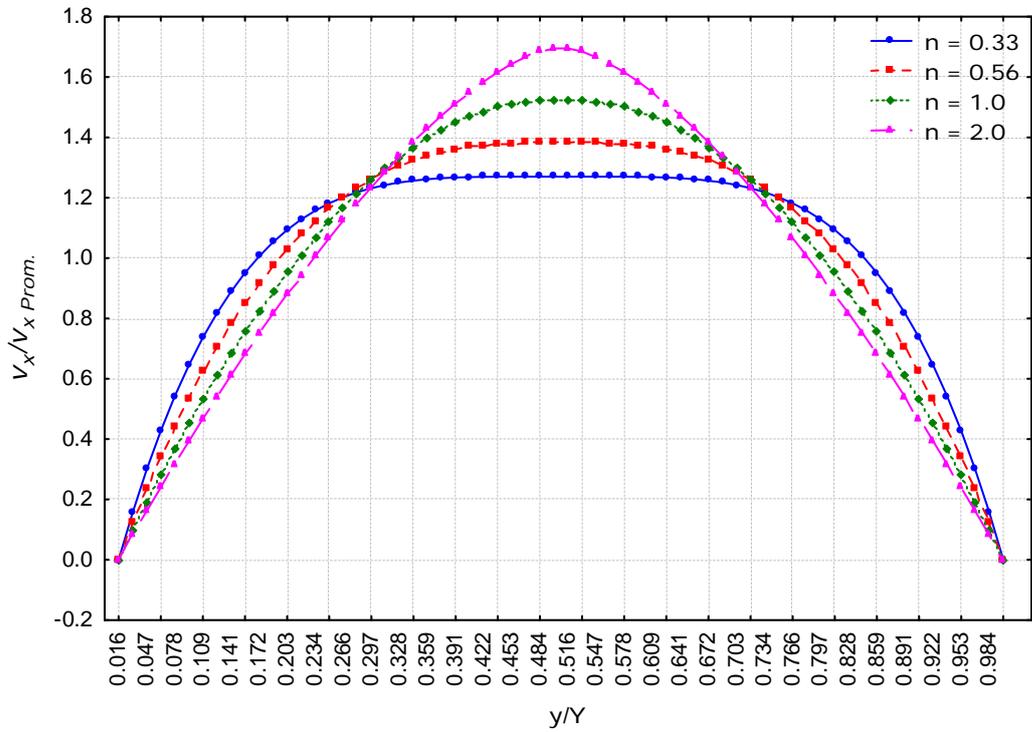


Fig. 4.3 Perfiles de velocidad con Solución Analítica

4.2 Fluidos no Newtonianos a través de medios porosos

Medio Poroso Arbitrario. Para simular el flujo de un fluido no Newtoniano del modelo de potencia o también conocido como de Ostwald de Waele, a través de un medio poroso se elaboró la metodología, así como la construcción de un programa computacional. Para este tipo de fluido (potencia) se utilizó la ley de Darcy modificada propuesta por Savins^[9]. La cual puede ser representada de la siguiente forma

$$q = CG^{\frac{1}{n}}, \quad (4.11)$$

en la cual

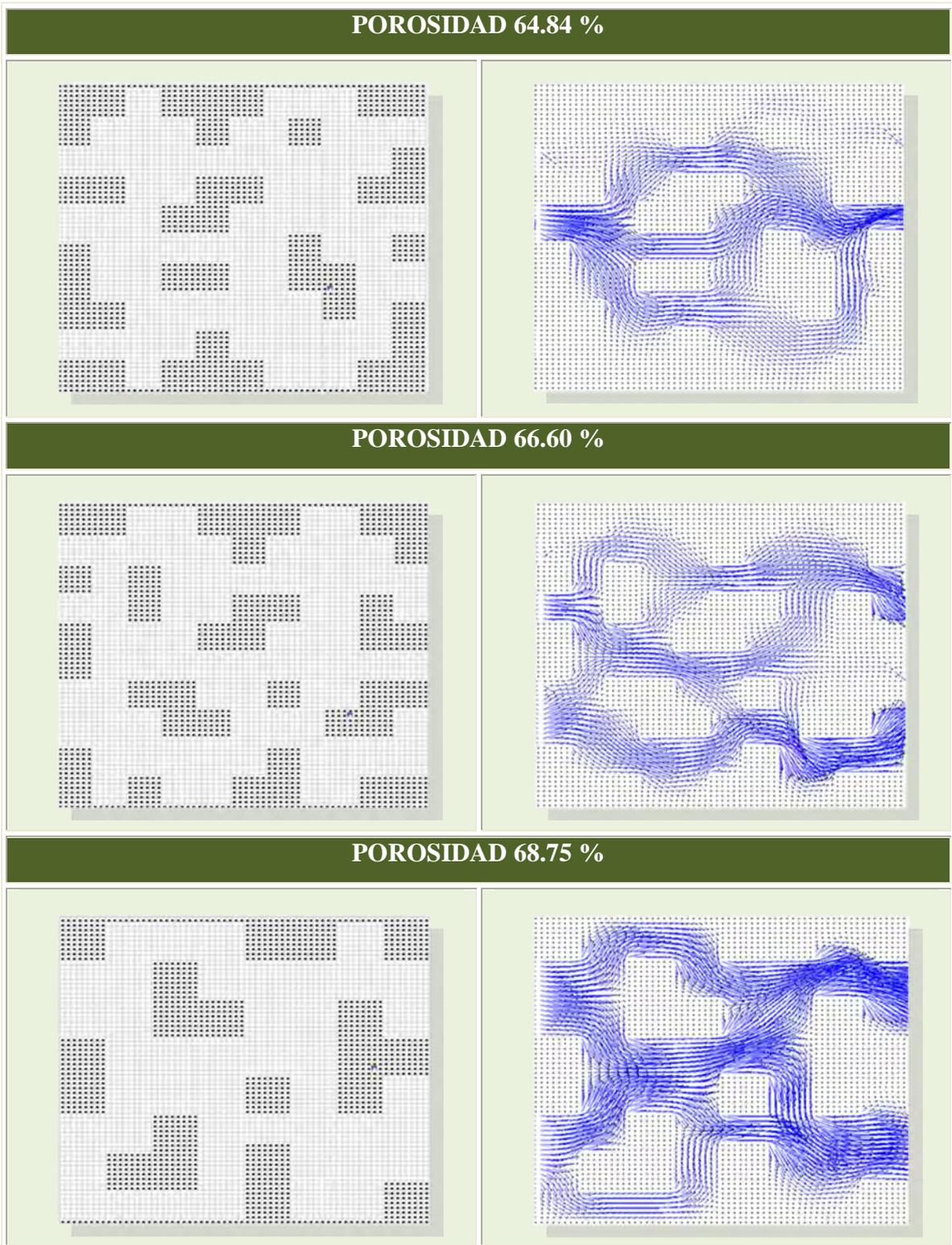
q = flux volumétrico [=] $m \cdot s^{-1}$

G = gradiente de presión [=] $kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$

C = constante que depende del fluido, así como del medio

n = índice de comportamiento al fluido [=] adimensional.

Para el valor de $n = 1$, la ecuación 4.11 se reduce a la bien conocida ley de Darcy. La simulación se realizó proponiendo cinco medios porosos generados arbitrariamente, esto con la finalidad de garantizar la percolación del fluido, en una red de 64×64 con porosidades de 64.84, 66.60, 68.75, 70.11 y 71.87%. La figura (4.4) muestra los medios porosos antes mencionados.



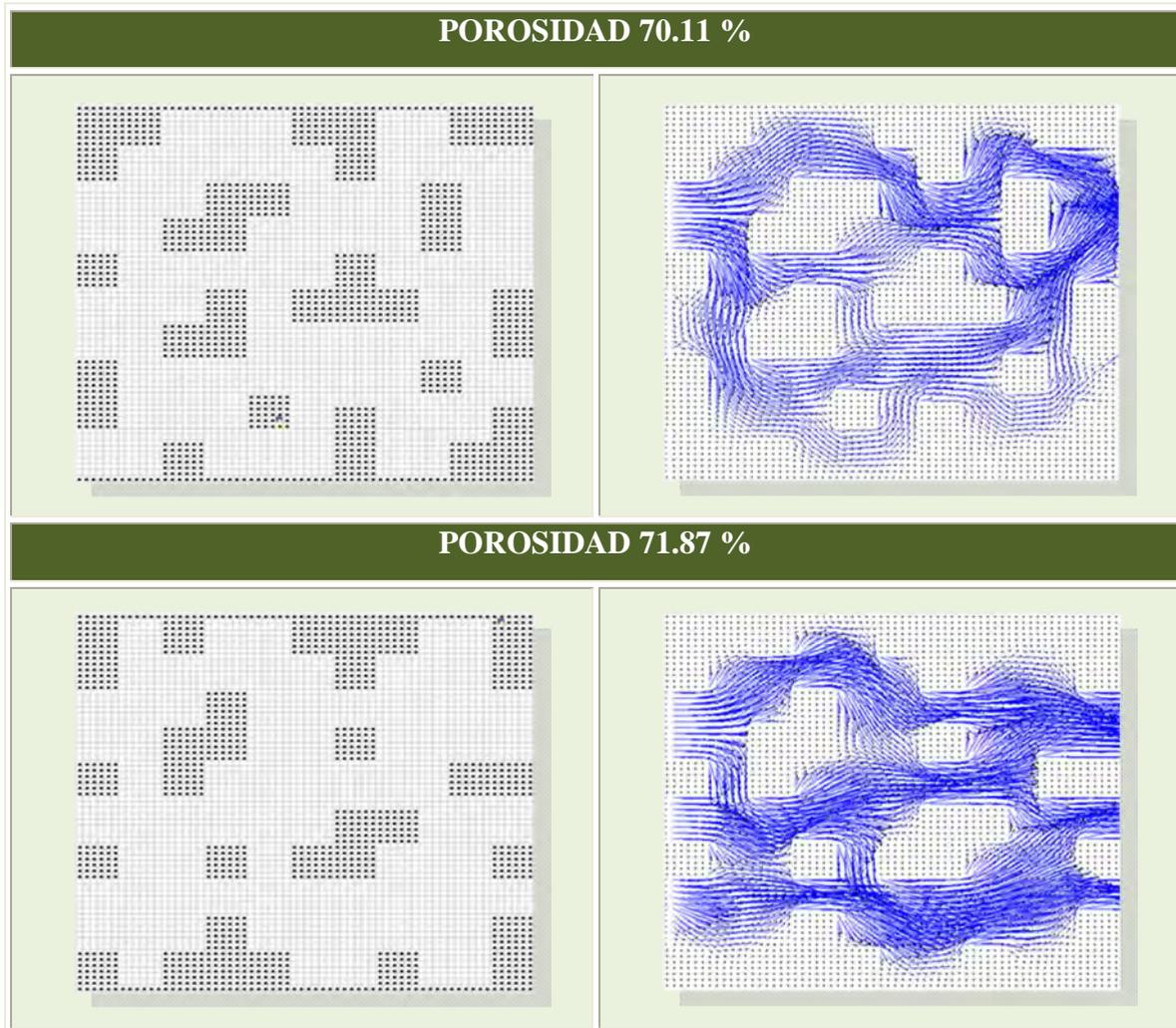


Figura 4.4 Medios porosos generados arbitrariamente (las figuras del lado derecho representa la corriente de fluido)

Para comprobar la validez de la ley de Darcy modificada en el modelo propuesto, la ecuación (4.11) se reescribe de la siguiente manera

$$q = \bar{v}\phi = C^*F^n \quad , \quad C^* = \frac{K^*}{k}, \quad (4.12)$$

donde

\bar{v} = velocidad promedio

F = fuerza de cuerpo

n = índice de comportamiento al fluido

k = índice de consistencia

K^* = permeabilidad modificada

Φ = porosidad.

La ecuación (4.12) puede ser graficada de tal forma que a partir de ésta, pueda obtenerse el valor de n (índice de comportamiento al fluido) microscópico; el cual es comparado con la n macroscópica establecida en el programa inicial. [5], [7]

Para comprobar la veracidad del modelo propuesto primeramente, se tomaron resultados experimentales de n y k publicados por Mohd. Nurul and Mohd. Azemi^[10], los cuales fueron obtenidos para una pasta tipo “sagu” a diferentes concentraciones y temperaturas, los resultados obtenidos por Nurul y colaboradores se muestran a continuación.

Temperatura (°C)	Concentración de pasta (g/100ml)	Índice de consistencia k (m Pa s ⁿ)	Índice de com. al fluido η	Coefficiente de correlación r^2	Temperatura (°C)	Concentración de pasta (g/100ml)	Índice de consistencia k (m Pa s ⁿ)	Índice de com. al fluido η	Coefficiente de correlación r^2
40	3.0	6.008	0.529	0.992	70	3.0	5.626	0.553	0.997
	3.5	6.274	0.515	0.991		3.5	5.973	0.526	0.996
	4.0	6.502	0.517	0.994		4.0	6.138	0.527	0.995
	4.5	6.685	0.517	0.994		4.5	6.319	0.526	0.996
	5.0	7.203	0.524	0.996		5.0	6.578	0.521	0.996
	5.5	7.427	0.524	0.997		5.5	6.392	0.511	0.997
50	3.0	5.873	0.537	0.995	80	3.0	5.523	0.559	0.995
	3.5	6.149	0.523	0.994		3.5	5.925	0.521	0.994
	4.0	6.329	0.528	0.995		4.0	6.090	0.521	0.991
	4.5	6.521	0.528	0.995		4.5	6.242	0.523	0.993
	5.0	6.990	0.522	0.999		5.0	6.428	0.523	0.996
	5.5	7.186	0.521	0.999		5.5	6.555	0.528	0.994
60	3.0	5.719	0.547	0.997	80	3.0	5.523	0.559	0.995
	3.5	6.097	0.532	0.997		3.5	5.925	0.521	0.994
	4.0	6.154	0.536	0.996		4.0	6.090	0.521	0.991
	4.5	6.330	0.540	0.994		4.5	6.242	0.523	0.993
	5.0	6.709	0.519	0.994		5.0	6.428	0.523	0.996
	5.5	6.983	0.498	0.997		5.5	6.555	0.528	0.994

Tabla 4.1 Valores de n y k publicados por Mohd. Nurul.^[10]

Con los valores contenidos en la tabla 4.1, se realizaron simulaciones con los cinco medios porosos antes mencionados y las cinco fuerzas de cuerpo ($F = 1.0 \times 10^{-6}$, 1.5×10^{-6} , 2.0×10^{-6} , 2.5×10^{-6} y 3.0×10^{-6}), con 30000 tiempos de paso, para todos los

casos dando un total de 750 experimentos. La figura 4.5 muestra la grafica del *Log flux de la velocidad vs. Log fuerza* para los cinco medios porosos arbitrarios.

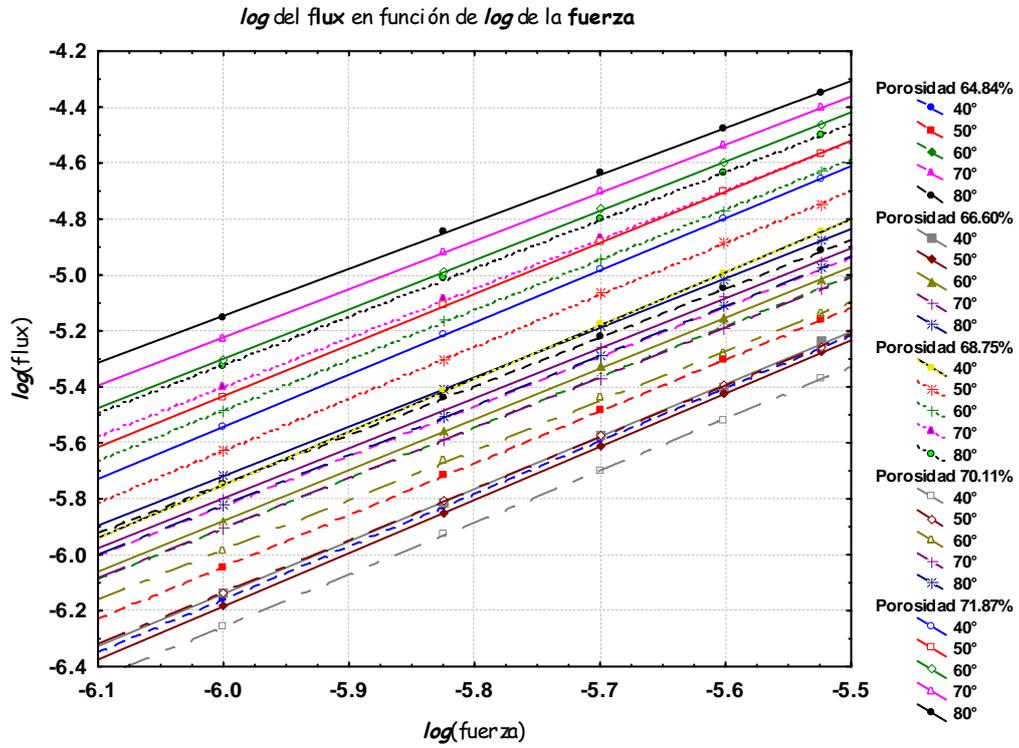


Figura 4.5 Log flux de la velocidad vs. Log fuerza para los cinco medios porosos, utilizando los datos experimentales reportados por Nurul y colaboradores^[10].

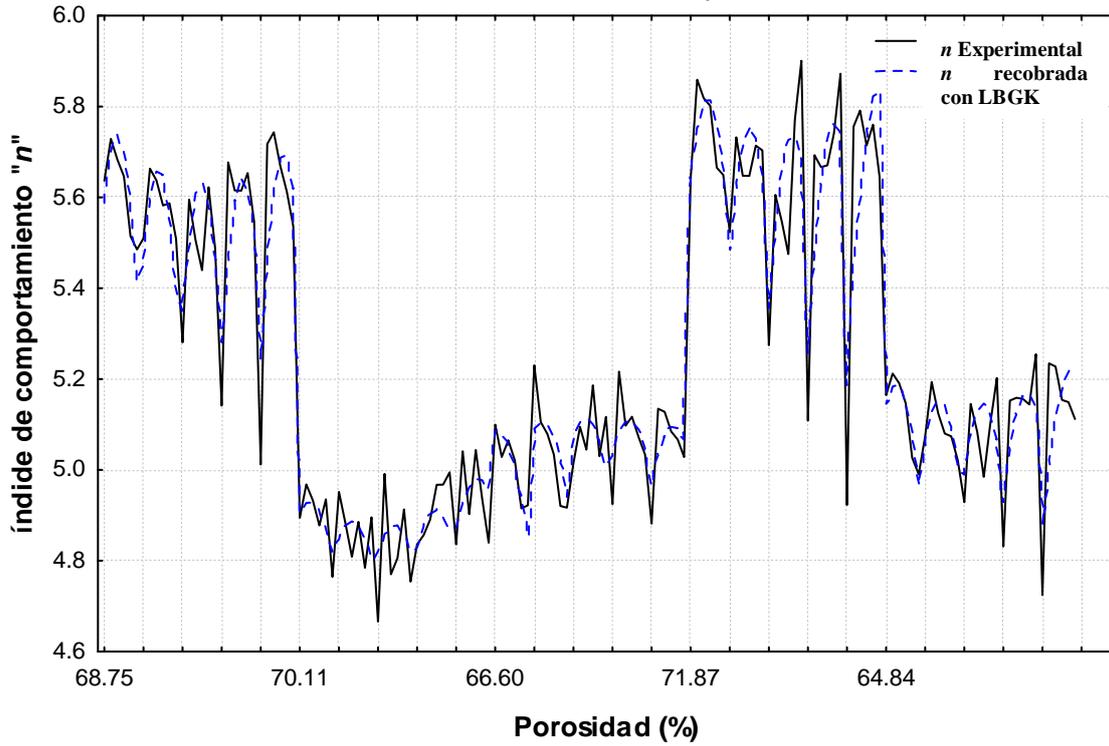
En la tabla 4.2 se muestran los valores de n obtenidos con las simulaciones y las comparaciones de estos valores con los reportados por Nurul, para el caso de una porosidad de 64.84%.

Porosidad %	Temperatura °C	Concentración g/100ml	Indice de comportamiento experimental (A)	Indice de comportamiento con LBGK (B)	$\frac{ (A - B) }{A} \times 100$ Error Relativo %
64.84	40	3.0	0.529	0.530	0.151
64.84	40	3.5	0.515	0.518	0.563
64.84	40	4.0	0.517	0.519	0.329
64.84	40	4.5	0.517	0.520	0.503
64.84	40	5.0	0.524	0.526	0.458
64.84	40	5.5	0.524	0.527	0.573
64.84	50	3.0	0.537	0.540	0.484
64.84	50	3.5	0.523	0.524	0.210
64.84	50	4.0	0.528	0.529	0.208
64.84	50	4.5	0.528	0.530	0.398
64.84	50	5.0	0.522	0.524	0.421
64.84	50	5.5	0.521	0.525	0.768
64.84	60	3.0	0.547	0.554	1.243
64.84	60	3.5	0.532	0.532	0.075
64.84	60	4.0	0.536	0.537	0.131
64.84	60	4.5	0.540	0.543	0.519
64.84	60	5.0	0.519	0.523	0.713
64.84	60	5.5	0.498	0.505	1.305
64.84	70	3.0	0.553	0.563	1.790
64.84	70	3.5	0.526	0.529	0.551
64.84	70	4.0	0.527	0.528	0.209
64.84	70	4.5	0.526	0.527	0.095
64.84	70	5.0	0.521	0.523	0.326
64.84	70	5.5	0.511	0.511	0.059
64.84	80	3.0	0.559	0.573	2.487
64.84	80	3.5	0.521	0.523	0.288
64.84	80	4.0	0.521	0.522	0.134
64.84	80	4.5	0.523	0.525	0.459
64.84	80	5.0	0.523	0.525	0.287
64.84	80	5.5	0.528	0.528	0.057

Tabla 4.2 Comparación de los valores de n experimentales y los obtenidos en las simulaciones para una porosidad de 64.84%

En la figura 4.6, se muestran todos los valores de las “n” experimentales y recobrados con LBGK para las simulaciones, con los cinco medios porosos deterministas.

Figura 4.6 Valores de n experimentales y obtenidos en las simulaciones con LBGK para porosidades de 64.84, 66.60, 68.75, 70.11 y 71.87%.



En los resultados obtenidos el error relativo que se tuvo entre los valores de los índices de comportamiento al fluido n experimentales y los n recuperados con las simulaciones fueron inferiores al 3% en promedio, para todos los casos con los cinco medios porosos arbitrarios propuestos. Todos los experimentos numéricos están en el rango de $Re < 1$ (Re es el número de Reynolds).^[5-7]

Así mismo, se obtuvo una expresión semi-empírica para la permeabilidad de la pasta de sago (Metroxylon sago) en función de las concentraciones y las temperaturas para los cinco medios porosos determinista. La expresión obtenida es la siguiente

$$\log\left(\frac{K_{\text{mod}}}{k}\right) = \alpha_0 + \alpha_c C + \alpha_T T + \alpha_{CT} CT + \alpha_{c^2} C^2 + \alpha_{T^2} T^2. \quad (4.13)$$

En la ecuación anterior $C^* = \left(\frac{K_{\text{mod}}}{k}\right)$.

En la tabla 4.3, se muestran los valores de las constantes encontradas para la expresión mostrada anteriormente.

Tabla 4.3 Valores numéricos de las α 's, que aparecen en la ecuación (4.13), para cinco porosidades diferentes

Porosidad	α_0	α_C	α_T	α_{CT}	α_{C^2}	α_{T^2}
64.84%	5.214	0.350	-2.91×10^{-2}	5.09×10^{-3}	7.35×10^{-2}	6.054×10^{-5}
66.60%	4.766	0.158	9.23×10^{-4}	3.32×10^{-3}	4.53×10^{-2}	1.154×10^{-5}
68.75%	4.917	0.949	-4.46×10^{-2}	5.47×10^{-3}	1.45×10^{-1}	1.629×10^{-4}
70.11%	5.166	0.219	-2.63×10^{-2}	1.71×10^{-3}	3.79×10^{-2}	1.689×10^{-4}
71.87%	5.384	0.737	-4.76×10^{-2}	6.48×10^{-3}	-1.17×10^{-1}	1.408×10^{-4}

En la figura 4.7 se presentan las estimaciones de las superficies de respuesta para algunos de los cinco medios porosos a partir de la ecuación 4.13

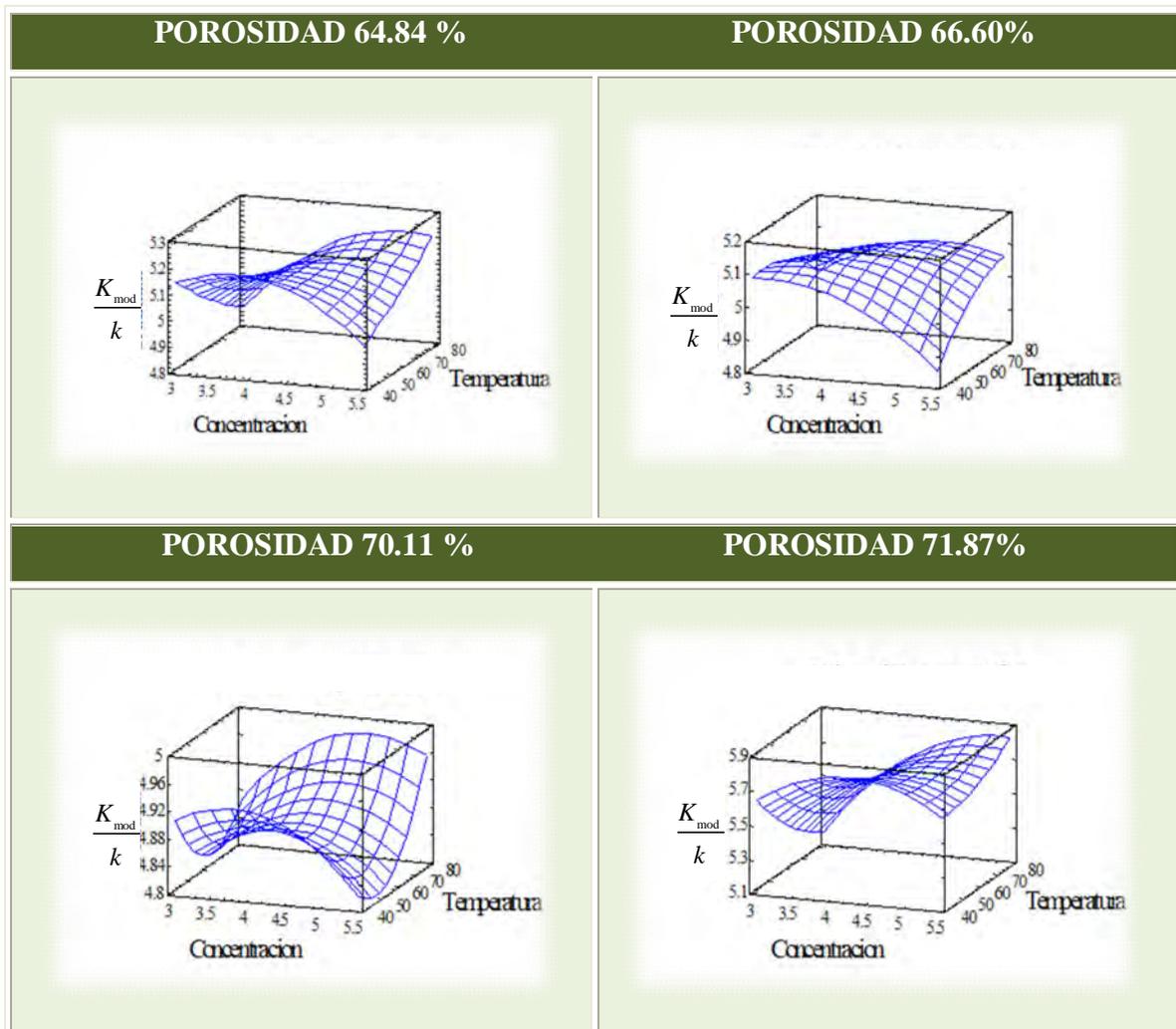
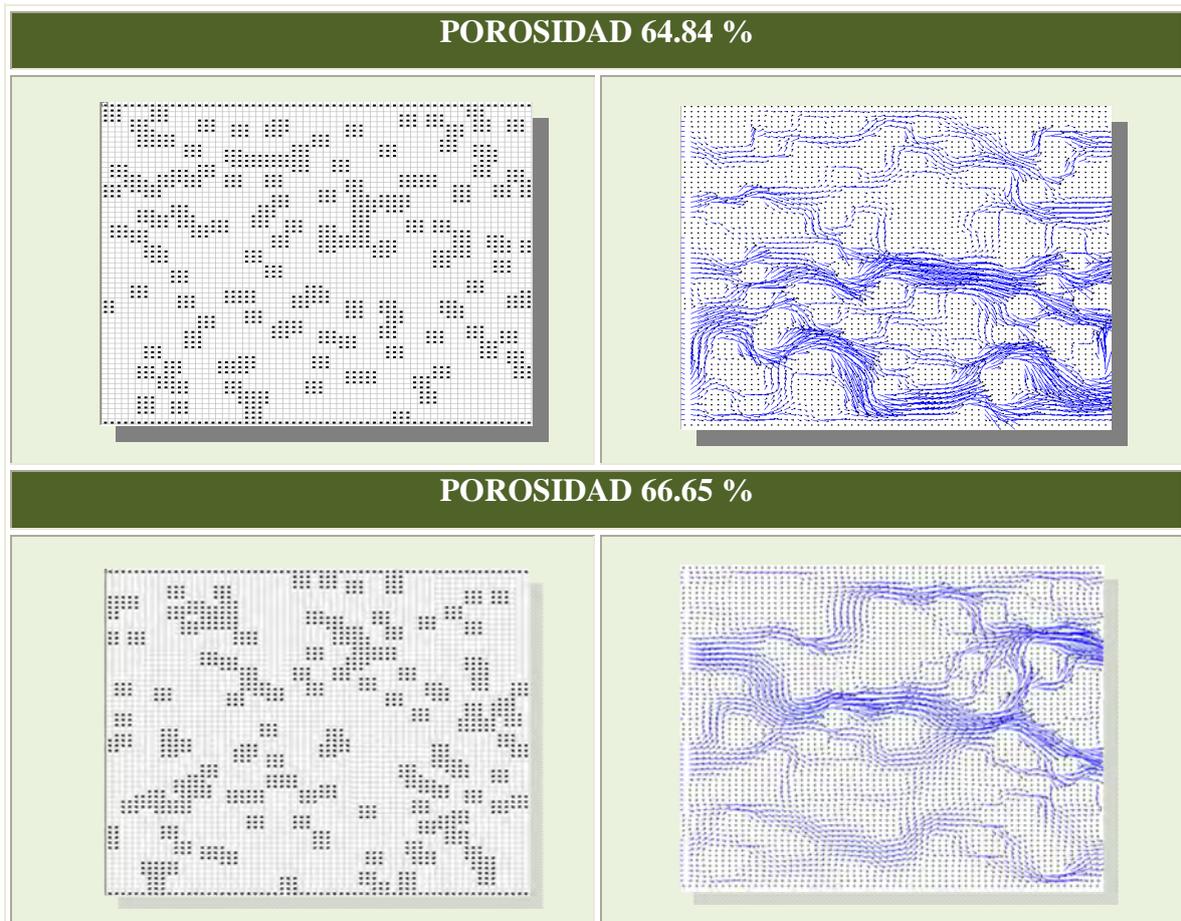


Figura 4.7 Superficies de respuesta para estimar la permeabilidad modificada en función de la concentración y la temperatura de algunas porosidades, con el modelo propuesto

Medio poroso aleatorio. También se realizó la simulación del flujo de un fluido no Newtoniano del modelo de potencia, a través de medios porosos aleatorios. Para este tipo de fluido (potencia) se utilizó la ley de Darcy modificada, ecuación (4.11). Los medios porosos creados usando un generador de números aleatorios, “el método de Box-Muller”. El cual consiste, en generar un par de números al azar con distribución normal estándar (con media $\mu = 0$ y varianza $\sigma^2 = 1$), por lo que se obtiene una fuente de números al zar uniformemente distribuidos. Este método comienza con dos variables aleatorias uniformes e independientes, u_0 y u_1 , sobre el intervalo de $[0,1)$.

En seguida se utilizan las siguientes transformaciones $[e = -2\ln(u_0) ; f = \sqrt{e} ; g_0 = \sin(2\pi u_1) ; g_1 = \cos(2\pi u_1) ; x_0 = f \times g_0 ; x_1 = f \times g_1]$ para generar dos muestras x_0 y x_1 , de una distribución Gaussiana $N(0,1)$.^{[11],[12]}

La simulaciones se realizaron en una red de 64×64 con porosidades de 64.84, 66.65, 68.69, 70.28 y 71.87%, y las fuerzas de cuerpo ($F = 1.0 \times 10^{-6}$, 1.5×10^{-6} , 2.0×10^{-6} , 2.5×10^{-6} y 3.0×10^{-6}), con 30000 tiempos de paso. La figura (4.8) muestra estos medios porosos



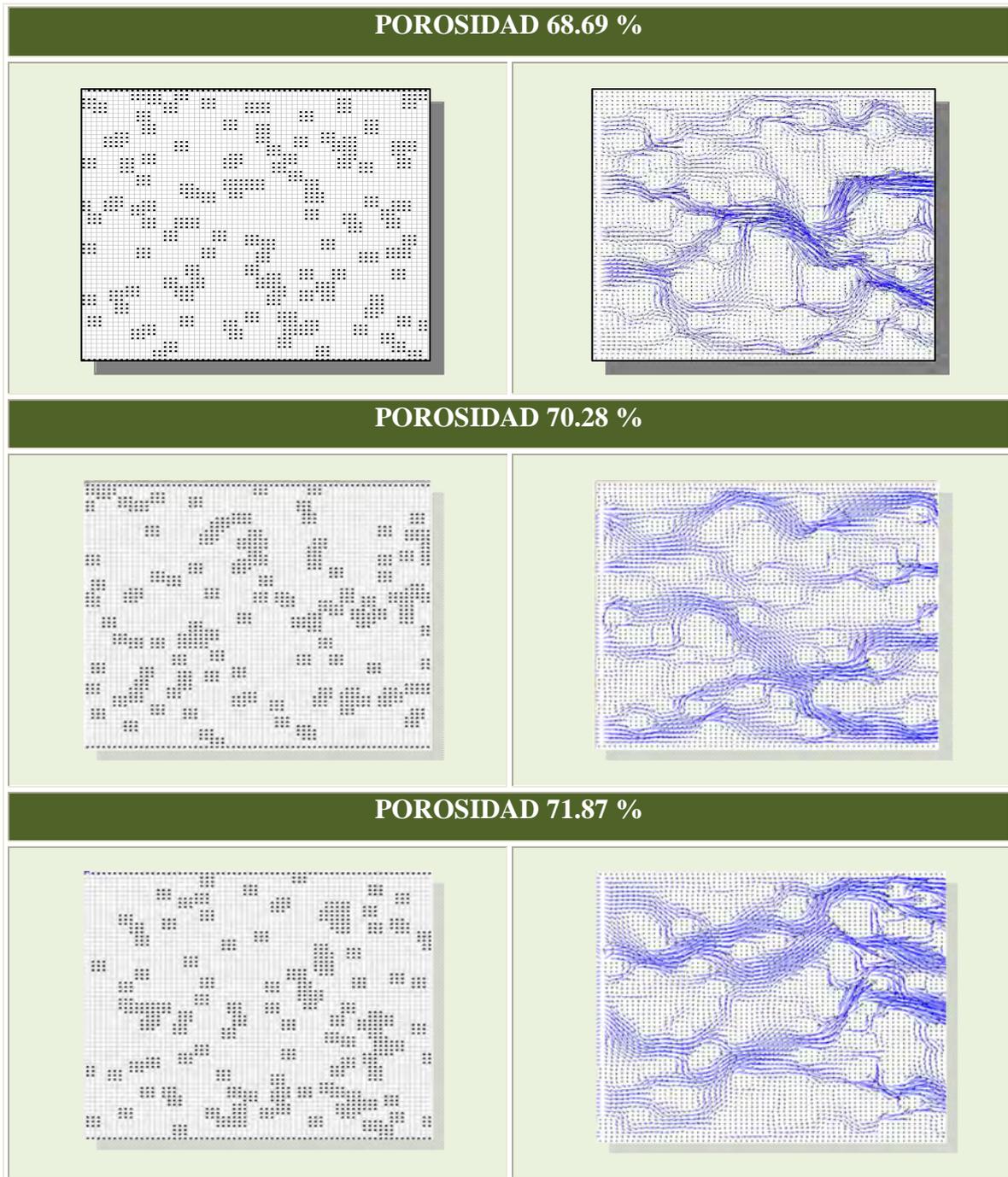


Figura 4.8 Medios porosos generados aleatoriamente con porosidades de 64.84, 66.65, 68.69, 70.28 y 71.87%

Para comprobar la validez de la ley de Darcy modificada en el modelo propuesto; así como las efectivas simulaciones en éste tipo de medios porosos, el procedimiento fue el mismo que se realizó para el caso de medios porosos arbitrarios, descrito en los párrafos anteriores.

4.3 Simulación en Torres Empacadas con soluciones de almidón de sago (Metroxylon sago) con Lattice Boltzmann

La caracterización hidrodinámica de fluidos No Newtonianos a través de medios porosos es un tema de importancia tecnológica para reactores de lecho empacado. La propuesta presentada en este trabajo se enfoca principalmente en el modelado en lechos empacados, el cual involucra el movimiento de fluidos No-Newtonianos a través de medios porosos con aplicaciones en reactores catalíticos de lecho fijo, adsorción de solutos, absorción simple, lecho de filtración, etc. En este trabajo, se presentan resultados de campos de velocidades, presión y esfuerzo en medios porosos bi-dimensionales para soluciones de “sago” experimentales. Además de investigar el efecto de la aleatoriedad, así como la permeabilidad y los esfuerzos de corte en las paredes. El modelo propuesto para un lecho empacado, se encuentra representado esquemáticamente en el diagrama de flujo de la figura (4.9).

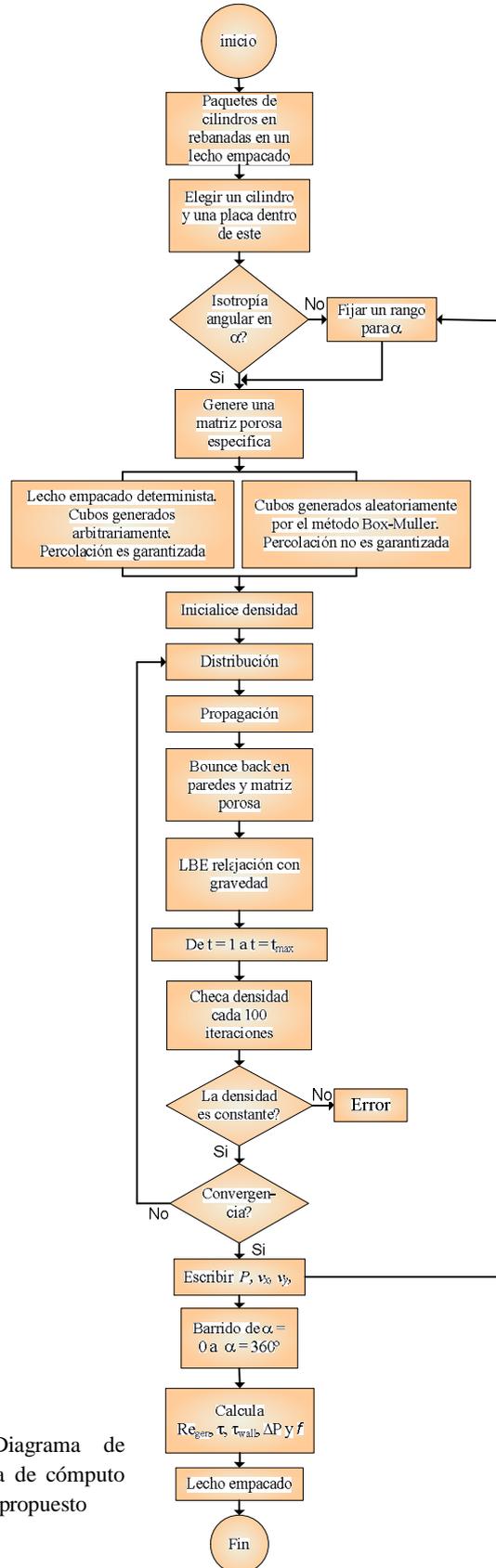


Figura 4.9 Diagrama de flujo. Programa de cómputo para el modelo propuesto

La metodología utilizada para ésta propuesta, consiste principalmente en dividir el flujo en un lecho empacado dentro de un paquete de cilindros, de los cuales se toma solamente uno para realizar el estudio. De este cilindro se tomó una placa, lo que nos lleva como consecuencia a reducir el problema al caso de un flujo No-Newtoniano en medio poroso en dos dimensiones, tal como se muestra en la figura (4.10).

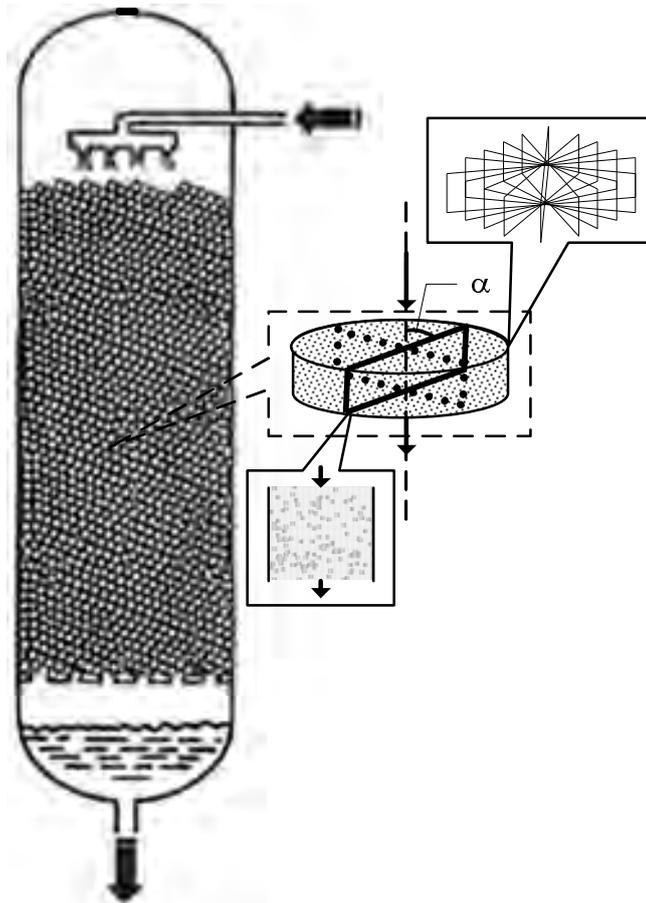
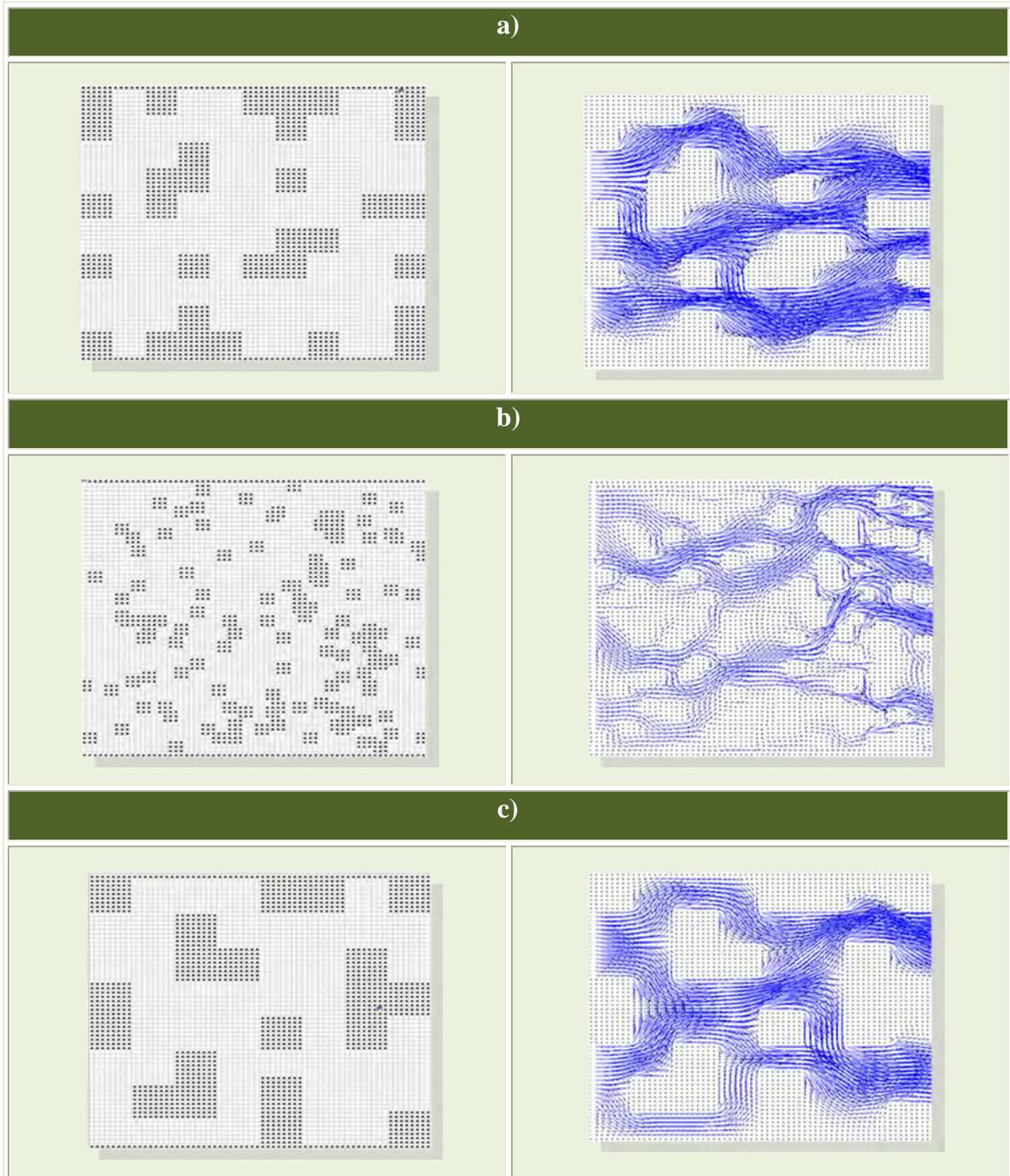


Figura 4.10 Lecho empacado utilizado para la simulación con redes de Boltzmann

Una de las ventajas de esta propuesta es que se pueden elegir una amplia variedad de medios porosos, aquí se propusieron ocho medios porosos, de los cuales cinco son aleatorios y tres medios porosos son al azar.

Por otra parte, para observar el efecto de la aleatoriedad, se estudiaron dos diferentes tipos de medios porosos, uno determinista y otro aleatorio con la misma porosidad (68.75% y 71.87%), ver figura 4.11. Para estos casos, patrones de flujo; velocidad, esfuerzos cortantes y campos de presión fueron calculados usando la

simulación con el modelo de RB, ver figura 4.12 y 4.13. Con respecto a las figuras anteriores, mostramos primeramente los datos numéricos “gruesos” seguido de sus correspondientes superficies suavizadas calculadas para cada caso. Las superficies suavizadas (usando “splines”) fueron construidas con la finalidad de estudiar diferentes bandas sobre regiones macroscópicas de baja (alta) presión, velocidad y esfuerzo de corte.



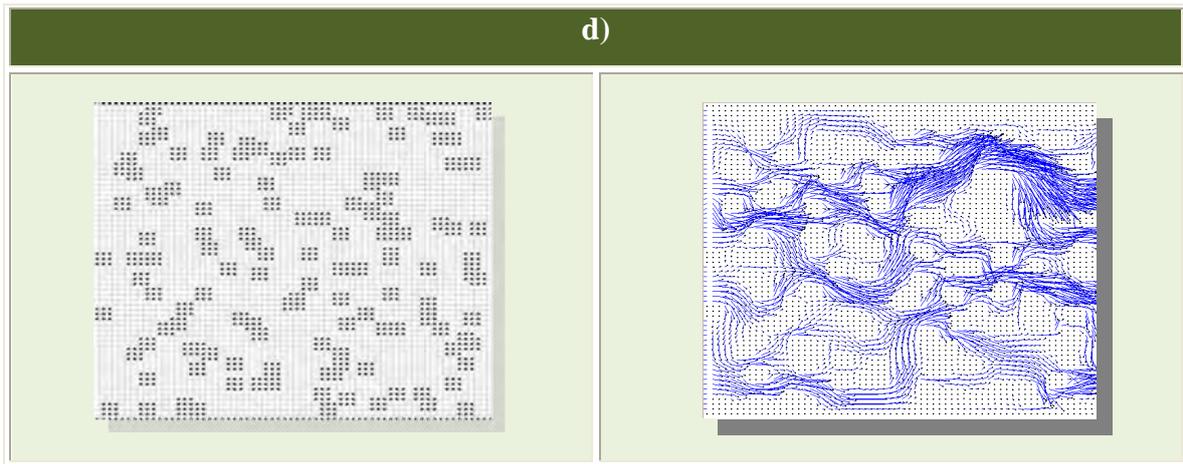
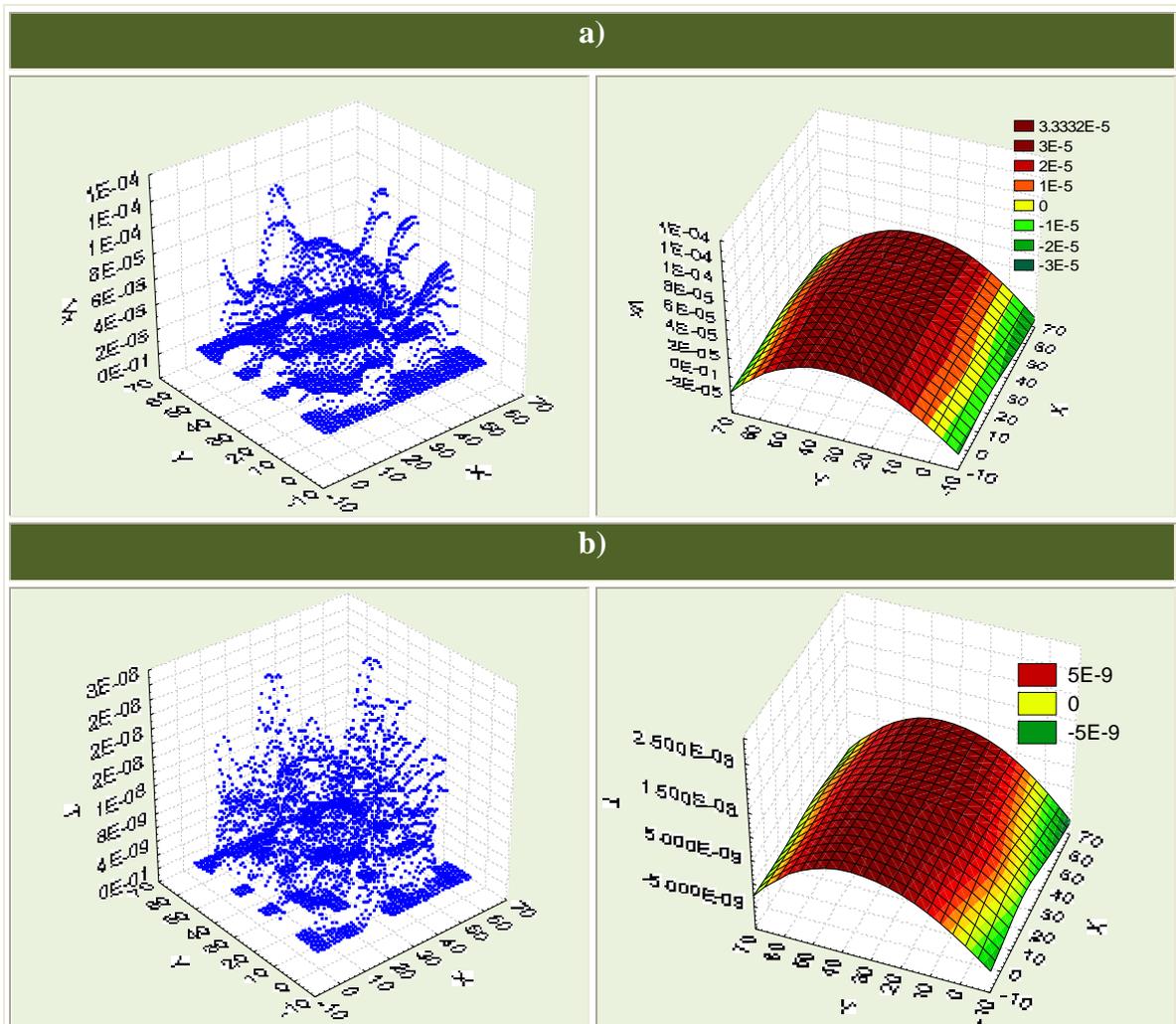


Figura 4.11 Medio poroso: porosidad 71.87 %, a) arbitrario y b) aleatorio. Porosidad 68.75%, c) arbitrario y d) aleatorio



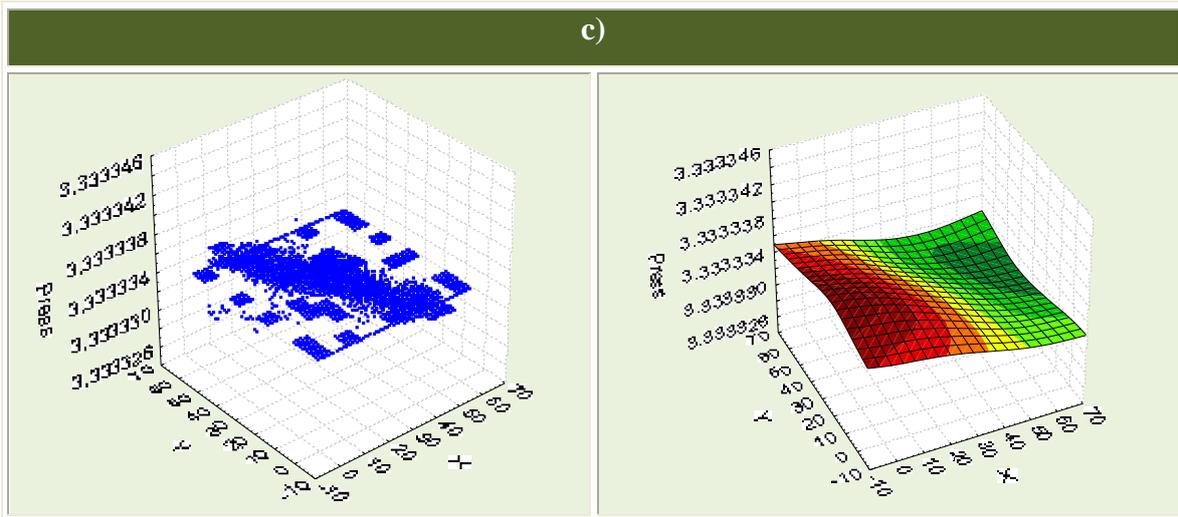
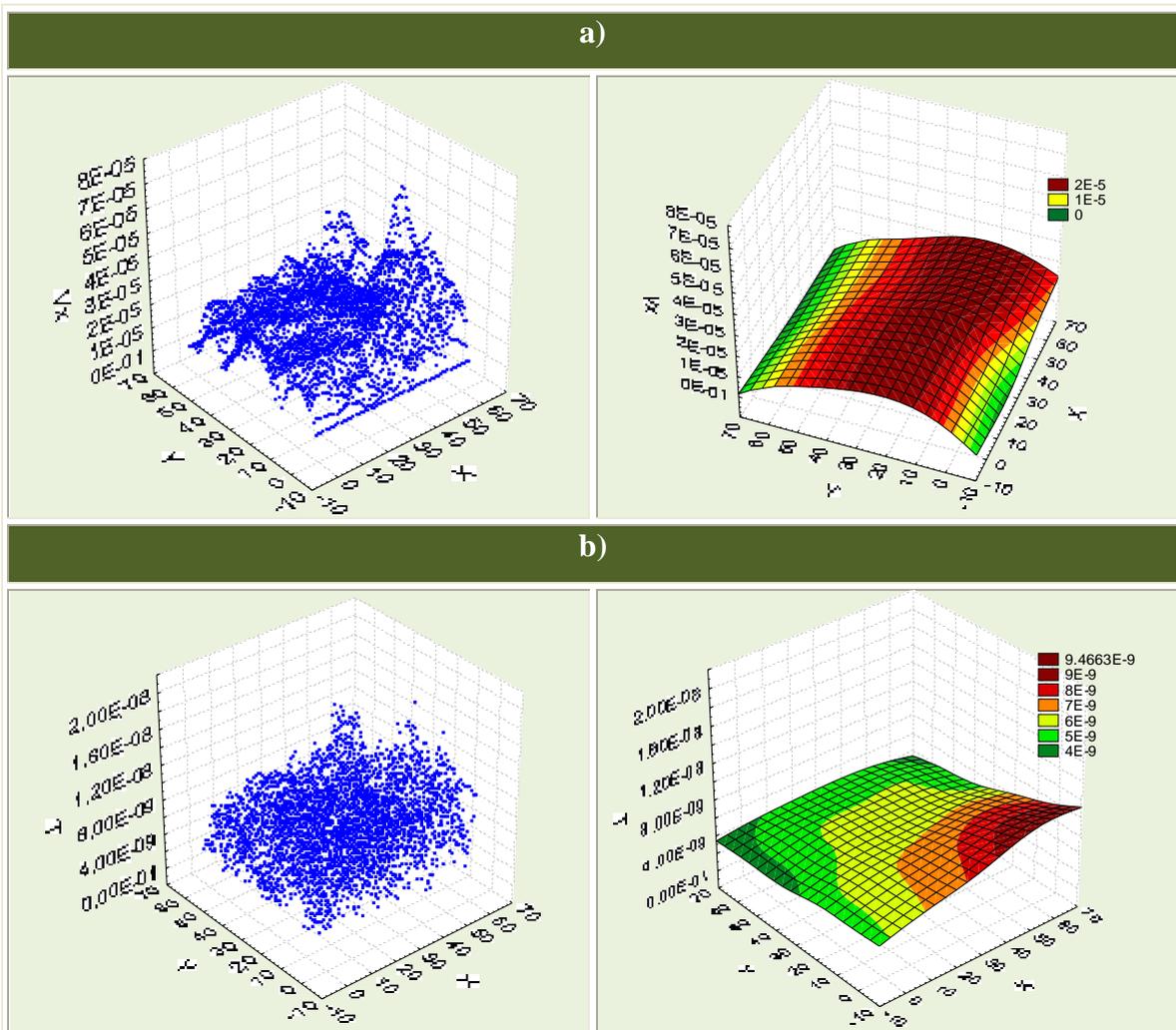


Figura 4.12 Datos de ERB y superficies suavizadas para un fluido no Newtoniano ($n = 0.529$ con porosidad de 71.87%), en un medio poroso generado en forma arbitraria. a) Velocidad, b) tensor de esfuerzos de corte y c) presiones



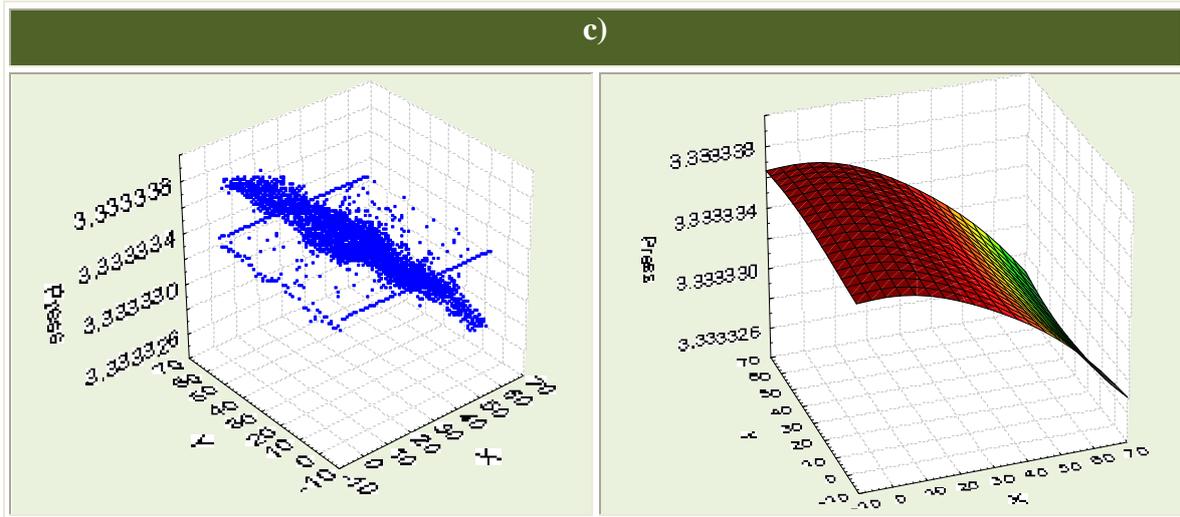


Figura 4.13 Datos de ERB y superficies suavizadas para un fluido no Newtoniano ($n = 0.529$ con porosidad de 71.87%), en un medio poroso generado en forma aleatoria. a) Velocidad, b) tensor de esfuerzos de corte y c) presiones.

Los lechos empacados son de gran importancia en áreas como la ingeniería química en donde la transferencia de masa, calor y momento juegan un papel muy importante. El material que se empaca en el lecho puede consistir de una variedad de empaques, como pueden ser esferas, partículas irregulares, cilindros o varios tipos de empaques comerciales. En las deducciones del flujo se usan ciertas relaciones geométricas para las partículas de los lechos empacados. La fracción vacía ε de un lecho empacado se define como

$$\varepsilon = \frac{\text{volumen de huecos en el lecho}}{\text{volumen total del lecho (huecos más solidos)}}. \quad (4.14)$$

La superficie específica de una partícula a_v en m^{-1} se define como

$$a_v = \frac{S_p}{V_p}, \quad (4.15)$$

donde S_p es el área superficial de una partícula en m^2 y V_p es el volumen de una partícula en m^3 . Para un lecho empacado de partículas que no son esféricas, el diámetro efectivo de las partículas D_p se define como

$$D_p = \frac{6}{a_v} \cdot \quad (4.16)$$

Puesto que $(1-\varepsilon)$ es la fracción de volumen de las partículas del lecho

$$a = a_v (1-\varepsilon) = \frac{6}{D_p} (1-\varepsilon), \quad (4.17)$$

donde “a” es la razón entre el área superficial total del lecho y el volumen total del lecho, es decir, volumen vacío más volumen de partículas en m^{-1} .

La velocidad intersticial promedio en el lecho empacado es “v’” y se relaciona con la velocidad superficial “v”, basada en el corte transversal del recipiente vacío, por medio de

$$v' = \varepsilon v. \quad (4.18)$$

El radio hidráulico para el flujo es

$$r_H = \frac{\text{área de corte transversal disponible para flujo}}{\text{perímetro mojado}} = \frac{\varepsilon}{a}, \quad (4.19)$$

que también puede definirse como

$$r_H = \frac{\varepsilon}{6(1-\varepsilon)} D_p. \quad (4.20)$$

El numero de Reynolds para un lecho empacado para el caso de un fluido Newtoniano puede definirse como

$$N_{Re} = \frac{2}{3(1-\varepsilon)} \frac{D_p v' \rho}{\mu}. \quad (4.21)$$

Y para el caso de un fluido no-Newtoniano de modelo de potencia se tiene el siguiente número de Reynolds generalizado

$$N_{Re_{gen}} = \frac{\left[\frac{2}{3} \frac{\varepsilon}{(1-\varepsilon)} D_p \right]^n \left(\frac{v'}{\varepsilon} \right)^{2-n} \rho}{k 8^{n-1} \left(\frac{3n+1}{4n} \right)^n}. \quad (4.22)$$

Por otra parte, la caída de presión para un fluidos Newtoniano en un lecho empacado se calcula a partir de la siguiente expresión

$$\Delta P = \frac{72 \mu v' \Delta L (1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3 D_p^2}. \quad (4.23)$$

La caída de presión en nuestro modelo para el caso de un fluido no-Newtoniano (Ostwald de Waele) es calculada de la siguiente manera^[13, 14]

$$\Delta P = \frac{24k \left(\frac{3n+1}{4n} \right)^n \Delta L}{\left[\frac{2\varepsilon}{3(1-\varepsilon)} D_p \right]} \left[\frac{12\bar{v}(1-\varepsilon)}{\varepsilon^2 D_p^2} \right]^n. \quad (4.24)$$

En la figura 4.14 se muestran resultados obtenidos para nuestras simulaciones de las caídas de presión en el lecho empacado, para medios porosos deterministas con porosidades de 68.75 y 71.87%, además se presentan medios porosos aleatorios con porosidades de 68.69 y 71.87%. En ambos casos se realizaron corridas con valores de $n = 0.529$ y 1.0

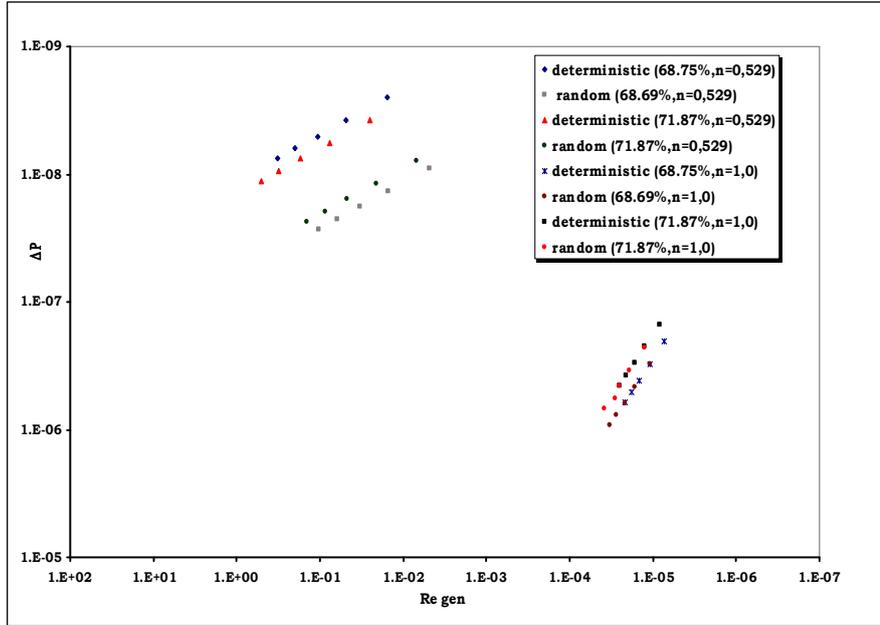


Figura 4.14 Caída de presión en función del número de Reynolds Generalizado.

Algunas relaciones semi-empíricas utilizadas en lechos empacados a nivel industrial que relacionan el factor de fricción y el número de Reynolds son las bien conocidas ecuación (4.25) de Ergun y la ecuación (4.26) de Blake-Kozeny. ^[13-15]

$$f = \frac{150}{Re}, \quad (4.25)$$

$$f = \frac{150}{Re} + 1.75. \quad (4.26)$$

Para el modelo propuesto, el factor de fricción (ecuación 4.27) fue calculado en función del número de Reynolds generalizado. En la figura (4.15) se muestra el resultado de nuestras simulaciones para medios porosos deterministas (porosidad de 68.75 y 71.87%) y aleatorios (porosidad de 68.69 y 71.87%) para valores de $n = 1.0$ y 0.529 , los cuales fueron comparados con las ecuaciones de Ergun y Blake-Kozeny.

$$f = \Delta P \frac{48}{4} \frac{\left[\frac{2}{3} \frac{\varepsilon}{(1-\varepsilon)} D_p \right]^{1-n} 8^{n-1}}{\left(\frac{\nu'}{\varepsilon} \right) \left[\frac{12(1-\varepsilon)}{\varepsilon D_p} \right]^n \rho} \quad (4.27)$$

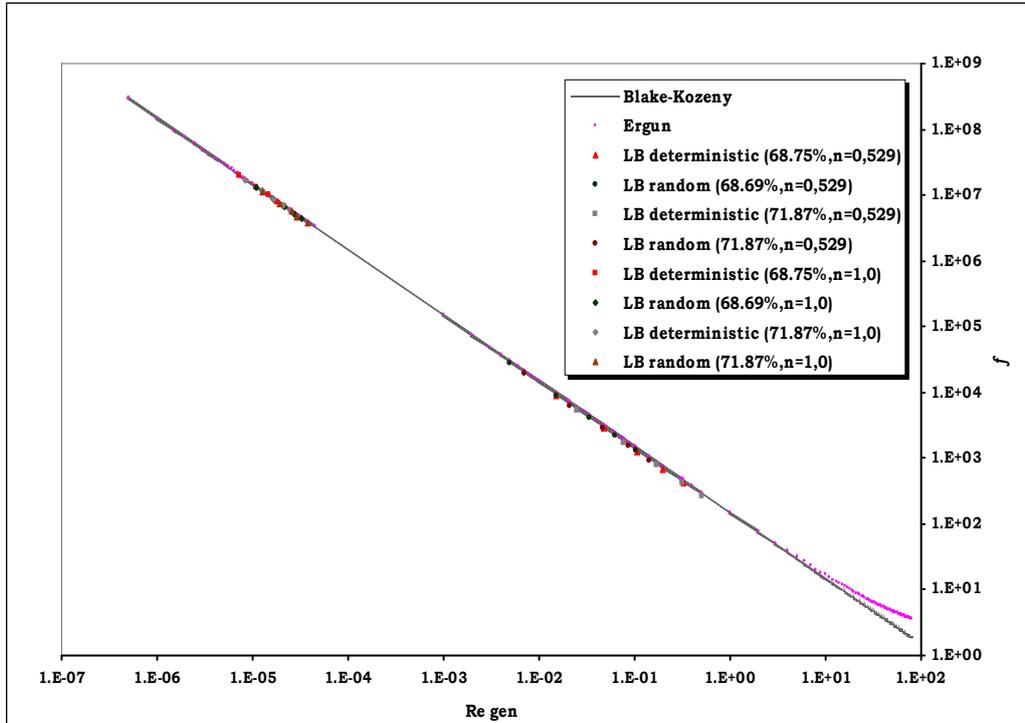
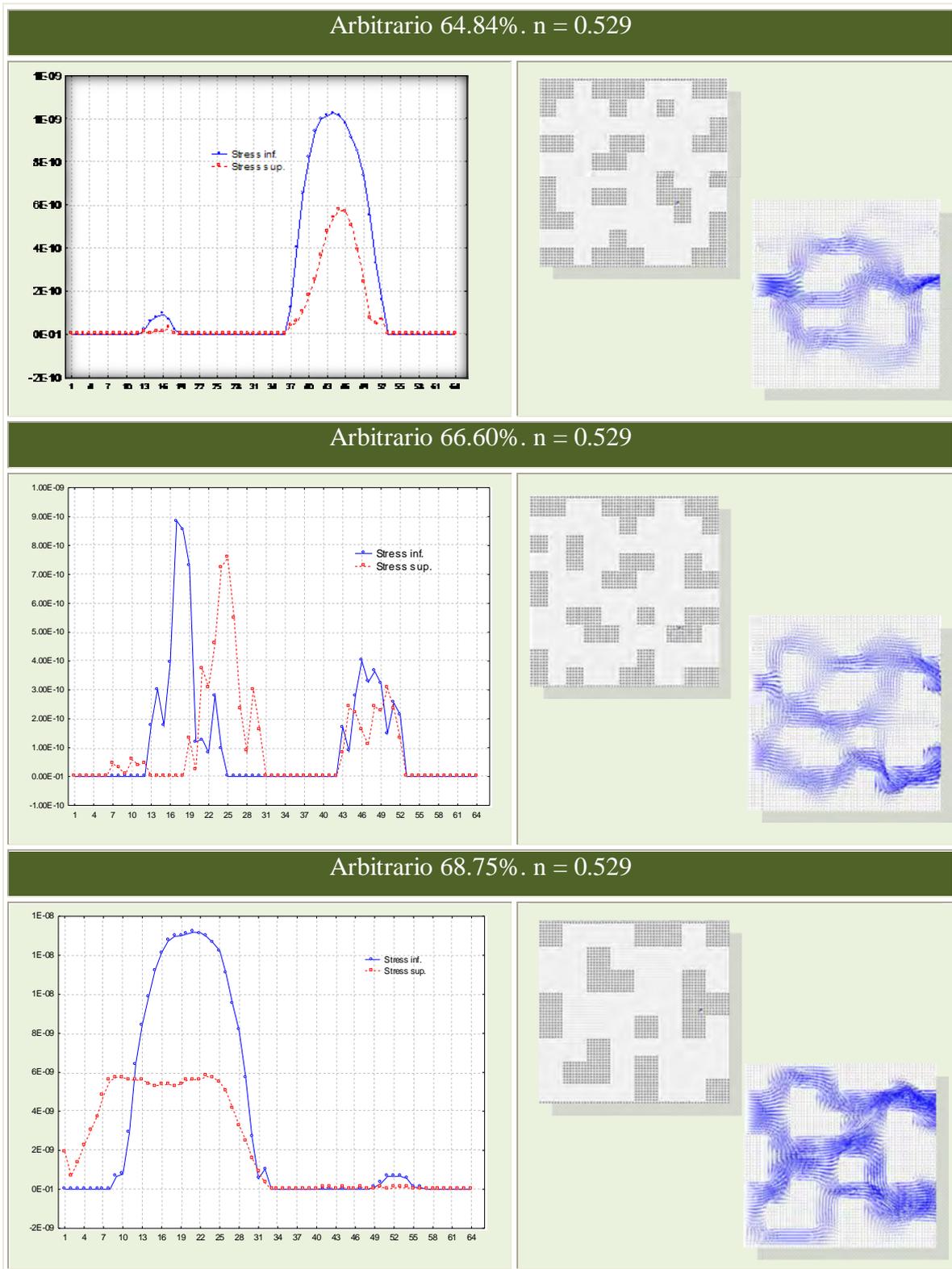


Figura 4.15 Factor de fricción en función del número de Reynolds Generalizado.

Así mismo, fueron calculados los esfuerzos en las paredes para los medios porosos deterministas y aleatorios con las porosidades antes señaladas y para valores de $n = 1.0$, 0.529 . Los resultados son presentados en la figura 4.16, para el caso de $n = 0.529$



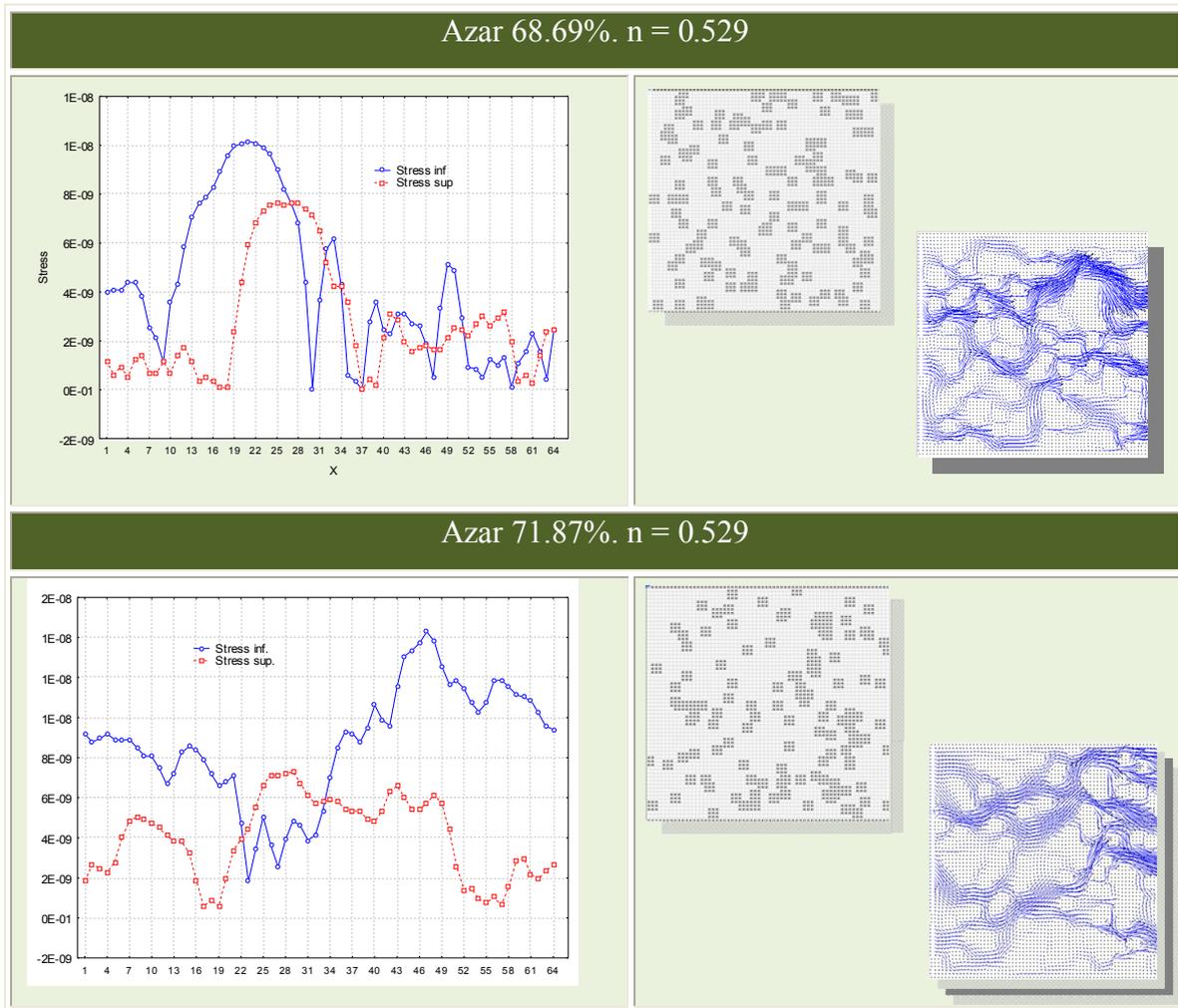


Figura 4.16 Esfuerzos en las paredes para algunos medios porosos utilizados. Arbitrarios (64.84, 66.60 y 68.75%), Aleatorio (68.69 y 71,87%)

En la figura (5.15) se muestra un comparativo de los esfuerzos en las paredes, para un medio poroso arbitrario y aleatorio para una porosidad de 71.87% con un valor de $n = 0.529$

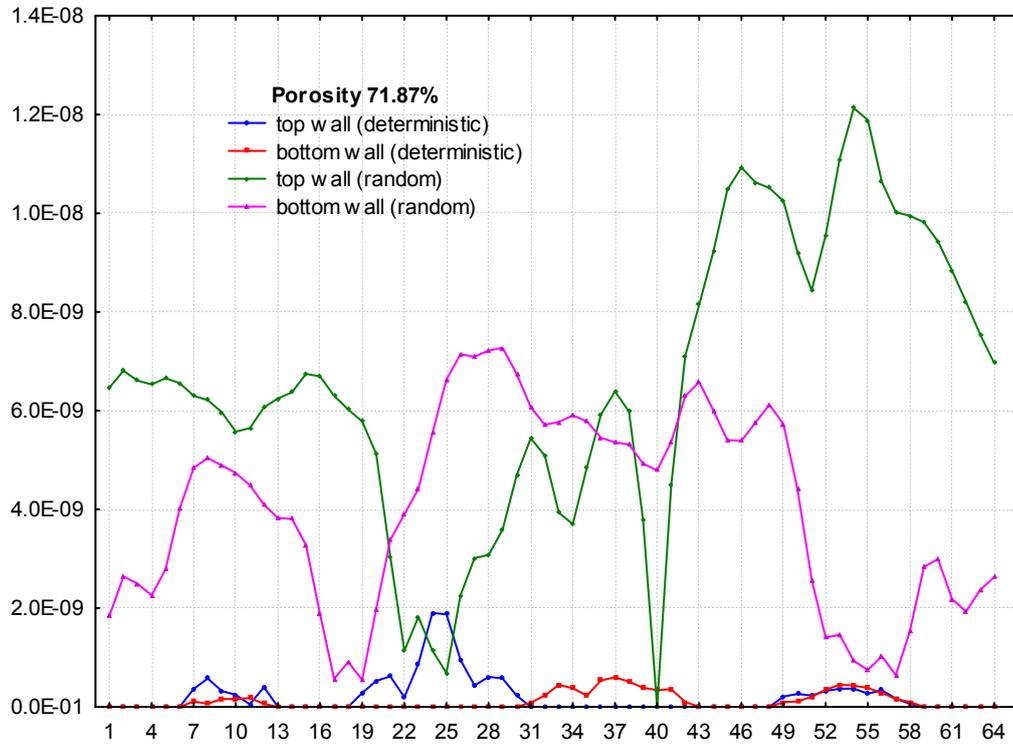


Figura 4.17 Esfuerzos en las paredes para dos medios porosos. Arbitrario y determinista con porosidad de 71.87% con un valor de $n = 0.529$

4.4 Distribuciones de Permeabilidad Local efectiva para fluidos no-Newtonianos con Lattice Boltzmann.

4.4.1 Introducción

Como se menciona en secciones anteriores, el flujo en medios porosos de fluidos no Newtonianos es un tema de gran interés en muchas áreas del conocimiento científico. Existen un gran número de materiales porosos; si vemos a nuestro alrededor podemos encontrar ejemplos de ellos; tales como el suelo, piedras agrietadas, las grandes formaciones geológicas de caliza, cerámica, agregados fibrosos, papel filtro e incluso una rebanada de pan, por mencionar algunos. La gran mayoría de estos medios, presentan una distribución compleja de los poros, en su mayoría en forma aleatoria.^[16]

Un caso particular es el estudio de fracturas hidráulicas en reservas naturales en la industria petrolífera, en el que se trata generalmente de fluidos complejos que presentan comportamiento no Newtoniano; teniendo interés en el aumento de la producción de petróleo, requiriendo reservorios con permeabilidades efectivas bajas.

Numerosos estudios han empleado métodos estocásticos para modelar flujo de aguas subterráneas a través de medios porosos del subsuelo, en los cuales se asume de forma eficaz, densidades de probabilidad de permeabilidad, con el uso de distribuciones normal^[17] y gamma^[18].

Mediciones de permeabilidad son difíciles de obtener en forma experimental cuando la disponibilidad de la muestra es restringida, las dimensiones son limitadas o más aun, cuando los materiales están poco consolidados. El método de Redes de Boltzmann ofrece una alternativa para estimar la permeabilidad en diferentes medios naturales (cuadro 1).

Suelo	Porosidad total (%)
Arcillas	40 a 60
Limos	35 a 50
Arenas finas, arenas limosas	20 a 50
Arena gruesa o bien clasificada	21 a 50
Grava	25 a 40
Shale intacta	1 a 10
Shale fraturada/alterada	30 a 50
Arenisca	5 a 35
Calizas, dolomías No carstificadas	0.1 a 25
Calizas, dolomías carstificadas	5 a 50
Tierras Diatomeas	81.45
Rocas ígneas y metamórficas sin fracturar	0.01 a 1
Rocas ígneas y metamórficas fracturadas	1 a 10

Tabla 4.4 Ejemplos de algunos suelos y sus porosidades ^[19]

Los experimentos presentados en este trabajo, involucran una serie de porosidades que se puede encontrar en diatomita, limo, zeolitas, arena y grava, entre otros.

4.4.2 Características de algunos tipos de suelos

La diatomita es una roca sedimentaria silícea terrosa producida por la depositación en el fondo marino de esqueletos de diatomeas, un alga microscópica unicelular, produciendo lo que hoy se conoce también como tierra de diatomeas. Posee una estructura única de baja densidad, alta capacidad de absorción, alta superficie específica y relativamente baja abrasión. Se la utiliza en la industria de los filtros por su calidad de estabilidad química. También se ha ampliado su uso en la industria de la construcción produciendo bloques livianos que han cumplido con las normas de calidad exigidas por la ley. Además es utilizada en la industria Cervecera y pintura.

En los vegetales, la tierra de diatomeas cumple un doble propósito: Sanitario y nutriente. Además de su efecto insecticida, las diatomeas aportan una gran riqueza mineral, a través del aporte natural de un gran número estos minerales aportados como

microelementos (oligoelementos). Estas sustancias son vitales para el metabolismo de los tejidos, ya que generalmente están ausentes en suelos empobrecidos o agotados por prácticas agrícolas intensivas.

Además de eliminar los parásitos y virus internos o externos, las diatomeas consiguen suplir carencias en las desmineralizadas tierras de cultivos. Las diatomeas son el medio más eficaz, inocuo y económico para combatir parásitos externos en animales domésticos. Se aplica directamente en polvo sobre el pelo del animal, valiéndose de una talquera común. También puede aplicarse en pisos, guardarropas, despensas y cualquier otro lugar que se desee proteger de insectos. Es de destacar su excelente resultado en el control definitivo de la vinchuca. A nivel de piojos, se los elimina eficazmente aplicando unos pocos gramos de diatomeas en el champú o en agua. ^[20, 21]

La caliza es una roca sedimentaria porosa formada por carbonatos, principalmente carbonato de calcio, permite el paso del agua, es decir, es una roca permeable. Cuando tiene alta proporción de carbonatos de magnesio se le conoce como dolomita. La roca caliza tiene una gran resistencia a la meteorización, eso ha permitido que muchas esculturas y edificios de la antigüedad tallados en dichas rocas hayan llegado hasta nosotros. El uso de las rocas calizas es muy extenso, su mayor utilización es en la construcción, si se calcina se puede producir cal viva, se utiliza en la fabricación del cemento, como grava y arena (fragmentada) en la elaboración del concreto. Materia prima para la industria del cemento Pórtland, cal hidratada, calcita, construcción, mármol, agricultura, agregados pétreos. El sahcab sirve como cemento natural, se emplea en el revestimiento de carreteras y mezclado con cal y arcilla es un buen cemento que fue usado en la construcción de antiguas ciudades mayas como Chichén, Uxmal, Kabah, Labná, etc. Generalmente lo que se utiliza del conglomerado son los clastos (roca caliza); los de menor tamaño son empleados como grava para la construcción en losas y pisos; los conglomerados más grandes son empleados para mamposterías y construcción de muros; además que en algunos casos se emplea como ornato en fachadas de casas. El uso de las rocas calizas es muy extenso. ^[22]

Las zeolitas se forman cuando la ceniza volcánica se deposita en lagos antiguos alcalinos. La interacción de la ceniza volcánica con las sales del agua de los lagos produjo la alteración de la ceniza produciendo distintos tipos de materiales de zeolita.

Las zeolitas naturales son un medio filtrante nuevo y muy bueno disponible para la filtración del agua. Ofrece un funcionamiento superior a los filtros de arena y carbón, con una calidad más pura y mayores tasas de rendimiento sin necesidad de altos requisitos de mantenimiento. Tiene muchas ventajas sobre la arena y puede ser directamente reemplazado por la arena en un filtro normal de arena.

Existen principalmente tres usos de zeolitas en industria: catálisis, separación de gas e intercambiador de iones. Además, las zeolitas se pueden usar en distintos pasos en el proceso de purificación y/o aireación; como material de soporte para bacterias; como medio filtrante para la extracción de sólidos y partículas en suspensión y la extracción de iones no deseados al mismo tiempo. En el este de Europa, Japón y Cuba, las zeolitas han sido usadas tradicionalmente en agricultura. Sobre un 5% añadido en raciones para ganado reduce emisiones de amonio y olores, mejora la utilización de alimentos, ayuda a la adsorción de mico-toxinas y elementos traza. Hace muchos años la NASA utilizaba zeolitas cargadas de nutrientes como fertilizantes para la liberación lenta de nutrientes.

[23]

Las arcillas son elementos estructurales del suelo que se utilizan desde hace muchos años como minerales industriales, con multitud de aplicaciones según sus propiedades. Son productos de alto valor añadido en el sector farmacéutico, como excipiente de medicamentos, en la industria petroquímica, como soporte de catalizadores, y en otros sectores, como aditivos para pinturas, betunes, construcción, cosmética, agricultura, etc.

En la industria mundial de la alimentación animal, el empleo de arcillas seleccionadas y procesadas en centros productivos está cada día más extendido. Clásicamente, las arcillas son reconocidas por sus propiedades tecnológicas como agentes fluidificantes y antiapelmazantes en las harinas, como lubricantes para mejorar el rendimiento de las prensas de granulación y como aglomerantes para reforzar la durabilidad de los gránulos. [24]

4.4.3 Distribuciones de Permeabilidades efectiva locales para medios porosos generados arbitraria y aleatoriamente

Otra de las contribuciones presentadas en el presente trabajo, es la propuesta de un modelo para la obtención de permeabilidades locales para diferentes medios porosos (generados arbitraria y aleatoriamente).

Para calcular la permeabilidad en el caso de un fluido Newtoniano, se parte de la bien conocida ley de Darcy abordada en el capítulo 2, la cual podemos escribir de la forma siguiente

$$K = \frac{\mu v}{\left(\frac{dP}{dx}\right)}, \quad (5.18)$$

donde:

K es la Permeabilidad [=] m^2

v es la velocidad [=] m/s

μ Viscosidad [=] Kg/ms

dP/dx es el gradiente de presión [=] $Pa/m = Kg/m^2s^2$

Para el caso de un fluido No-Newtoniano que obedece a la ley de Potencia, se puede utilizar la ecuación (5.18); pero escrita en función de la viscosidad aparente. Para un fluido Newtoniano normalmente se escribe en función de la viscosidad cinemática, la cual está dada por la siguiente relación

$$\mu_{app} = \frac{\sigma}{\left(\frac{dv_x}{dy}\right)}. \quad (5.19)$$

Es decir, el cociente del esfuerzo de corte y la velocidad de deformación. En el caso particular de un fluido que sigue el comportamiento de la ley de la Potencia la viscosidad aparente está dada por

$$\mu_{\text{app}} = \frac{\sigma}{\left(\frac{dv_x}{dy}\right)} = \frac{k \left(\frac{dv_x}{dy}\right)^n}{\left(\frac{dv_x}{dy}\right)} = k \left(\frac{dv_x}{dy}\right)^{n-1}. \quad (5.20)$$

En donde n y k son el índice de comportamiento al fluido y el índice de consistencia respectivamente. Por lo que la permeabilidad para el caso de un fluido no-Newtoniano puede escribirse como

$$K = \frac{\mu_{\text{app}} v}{\left(\frac{dP}{dx}\right)} = \frac{k \left(\frac{dv_x}{dy}\right)^{n-1} v}{\left(\frac{dP}{dx}\right)}, \quad (5.21)$$

en la que

K es la Permeabilidad [=] m^2

k es el índice de consistencia [=] $\text{N} \cdot \text{s}^n / \text{m}^2$

n índice de comportamiento al fluido [=] adimensional

v es la velocidad [=] m/s

dP/dx es el gradiente de presión [=] $\text{Pa/m} = \text{Kg/m}^2 \text{s}^2$

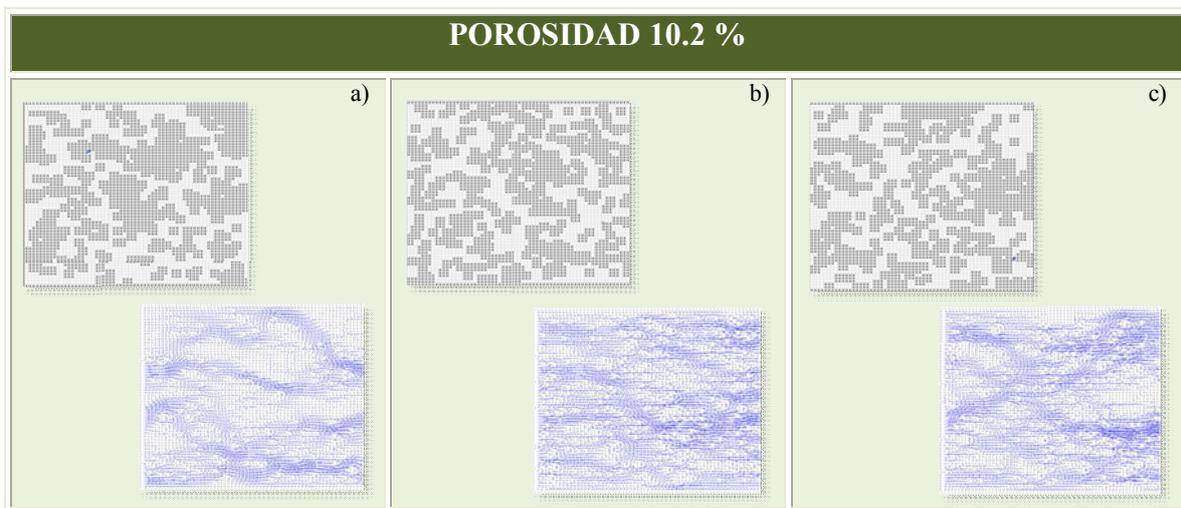
dV_x/dy es la velocidad de deformación [=] s^{-1}

Se estudiaron dos diferentes tipos de medios porosos: a) Medios porosos generados Arbitrariamente. En este caso, se propusieron un conjunto de medios porosos contruidos totalmente en forma arbitraria, garantizando la percolación del fluido, la construcción de canales de interconexión bien definidos, así como baja tortuosidad. b) medios porosos generados aleatoriamente. Éste medio se genero como ya se ha mencionado en la sección anterior por medio de una configuración aleatoria, a través del método Box –Muller.

En los medios mencionados anteriormente, se realizó una validación del modelo similar a la realizada en la sección 4.1 y 4.2, pero con un rango de porosidades (10 - 70%) con tres repeticiones, para obtener los límites de validez del sistema, obteniendo un error máximo de 6.8% para porosidades del 10%, ver tabla A . Algunos medios porosos aleatorios utilizados para estas validaciones se muestran en la figura 4.18.

Porosidad (%)	n Experimental	Promedio del error relativo (%)
10.18	0.529	6.8359
	1.0	0.0
	2.0	1.3514
20.84	0.529	3.8167
	1.0	0.0
	2.0	1.3514
30.82	0.529	2.9907
	1.0	0.0
	2.0	1.0457
47.37	0.529	2.3985
	1.0	0.0
	2.0	0.8065
51.91	0.529	1.5123
	1.0	0.0
	2.0	1.0101

Tabla 4.5 Valores del promedio del error relativo para los índices de consistencia (n) obtenidas con el modelo propuesto para algunas porosidades



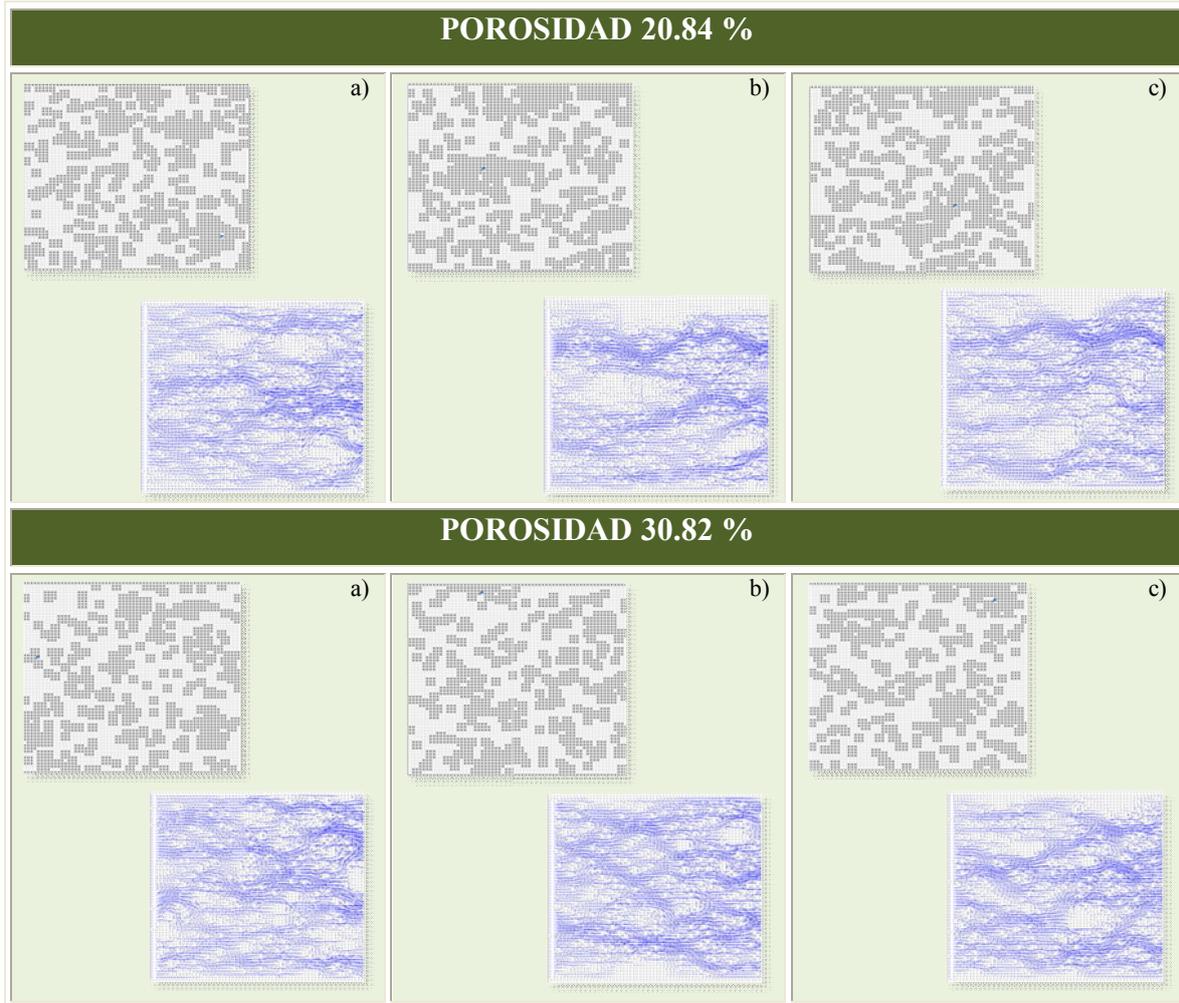
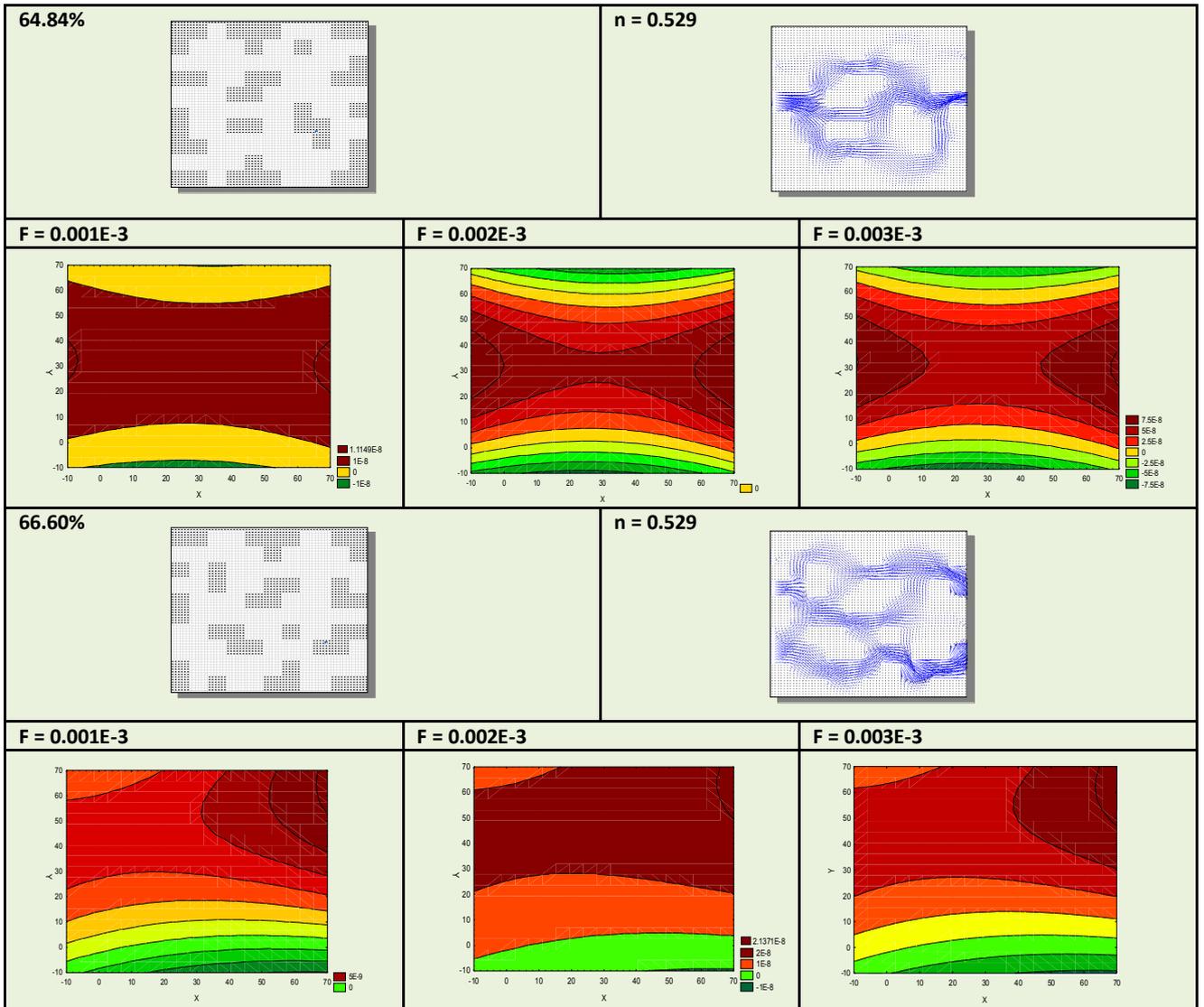
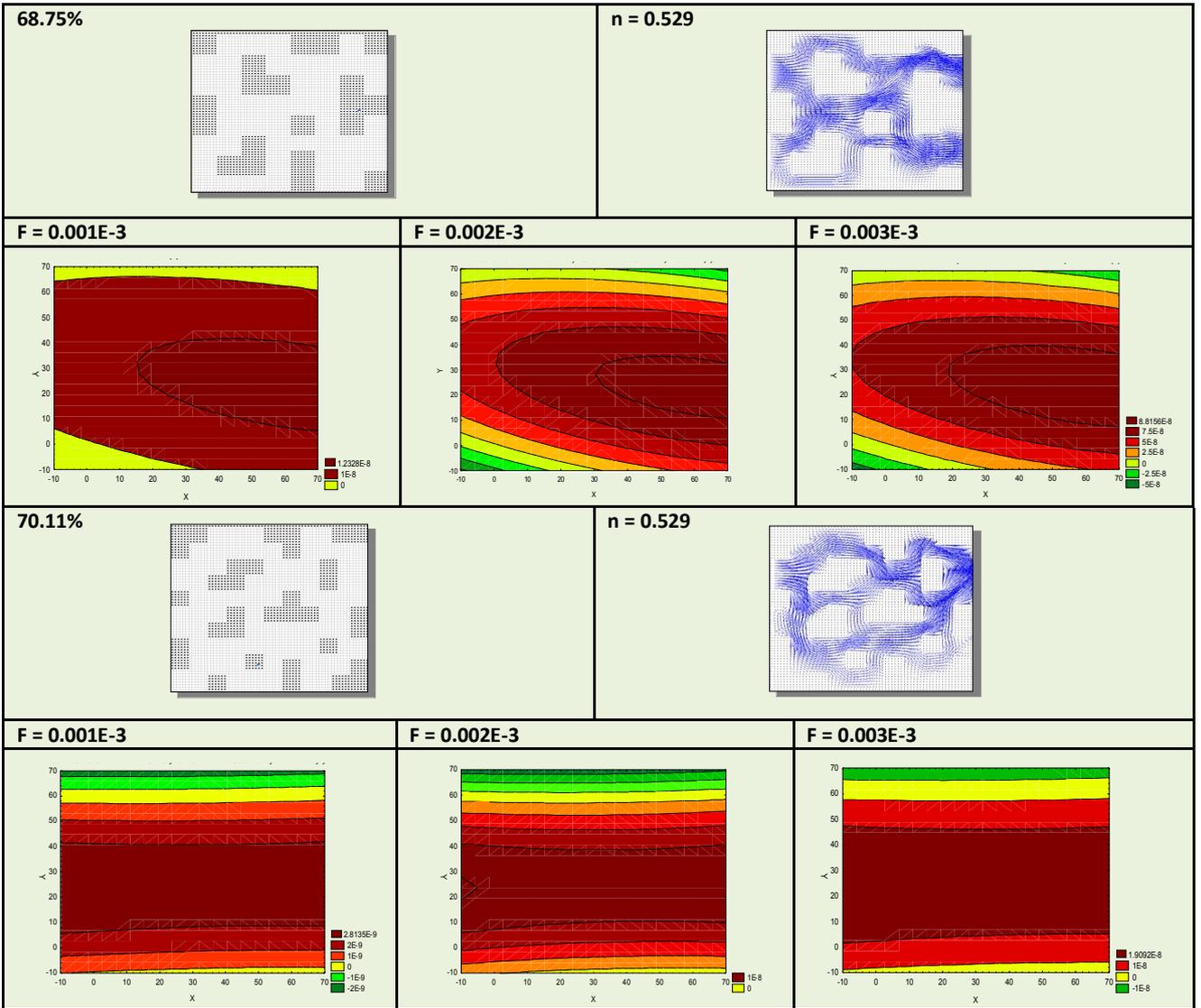


Figura 4.18 Ejemplos de algunos medios porosos aleatorios utilizados para la validación del modelo propuesto con porosidades de 10.20, 20.84 y 30.83%, en cada uno de ellos se realizaron tres repeticiones

Para el cálculo de la permeabilidad local, se utilizó la ecuación (5.22) en una red de 64×64 , los resultados se muestran en las figuras (4.19). En ésta, se realizó una simulación del paso de un fluido Pseudoplástico ($n = 0.529$) a través de medios porosos generados arbitrariamente con cinco porosidades (64.84, 66.60, 68.75, 70.11 y 71.87%), así como con cinco fuerzas de presión ($0.001E-3$, $0.0015E-3$, $0.002E-3$, $0.0025E-3$, $0.003E-3$).





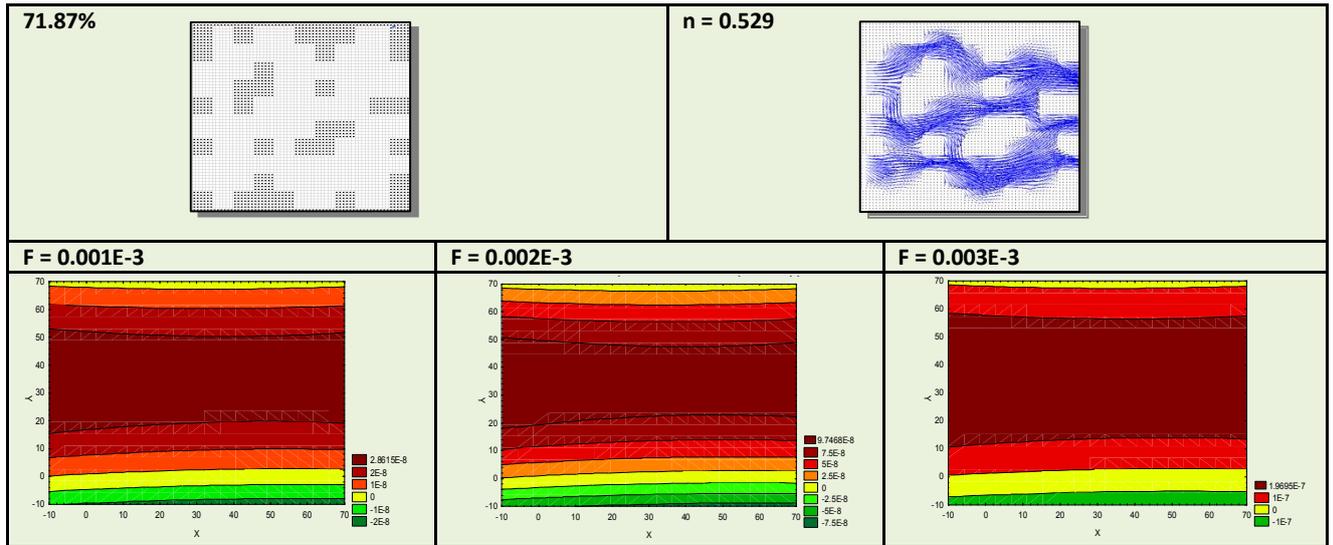


Figura 4.19 Bandas de Permeabilidad para cinco medios porosos deterministas con porosidades de 64.84, 66.60, 68.75, 70.11 y 71.87% , con fuerzas de presión de 0.001E-3, 0.002E-3 y 0.003E-3 (aquí solamente se muestran con tres fuerzas de presiones), para un fluido Pseudoplástico ($n = 0.529$).

En la figura 4.19 se observa que conforme se va incrementando el valor de la porosidad, el valor de la permeabilidad va en aumento; así mismo, para un incremento en el valor de la fuerza de presión en cada medio poroso, se presenta también un aumento en los valores de permeabilidad como era de esperarse.

Además, se realizaron simulaciones del paso de los siguientes fluidos: Pseudoplástico ($n = 0.529$); Newtoniano ($n = 1.0$) y Dilatante ($n = 2.0$) a través de medios porosos generados arbitrariamente; así como con medios porosos generados aleatoriamente. Para estos casos se manejaron cinco fuerzas de presión (Para $n = 0.529$ y 1.0 : $F = 0.001E-3$, $0.0015E-3$, $0.002E-3$, $0.0025E-3$ y $0.003E-3$. Con $n = 2.0$: $F = 0.003E-3$, $0.0025E-1$, $0.002E-1$, 0.015 , y 0.01). Como lo muestra las figuras 4.20 – 4.25.

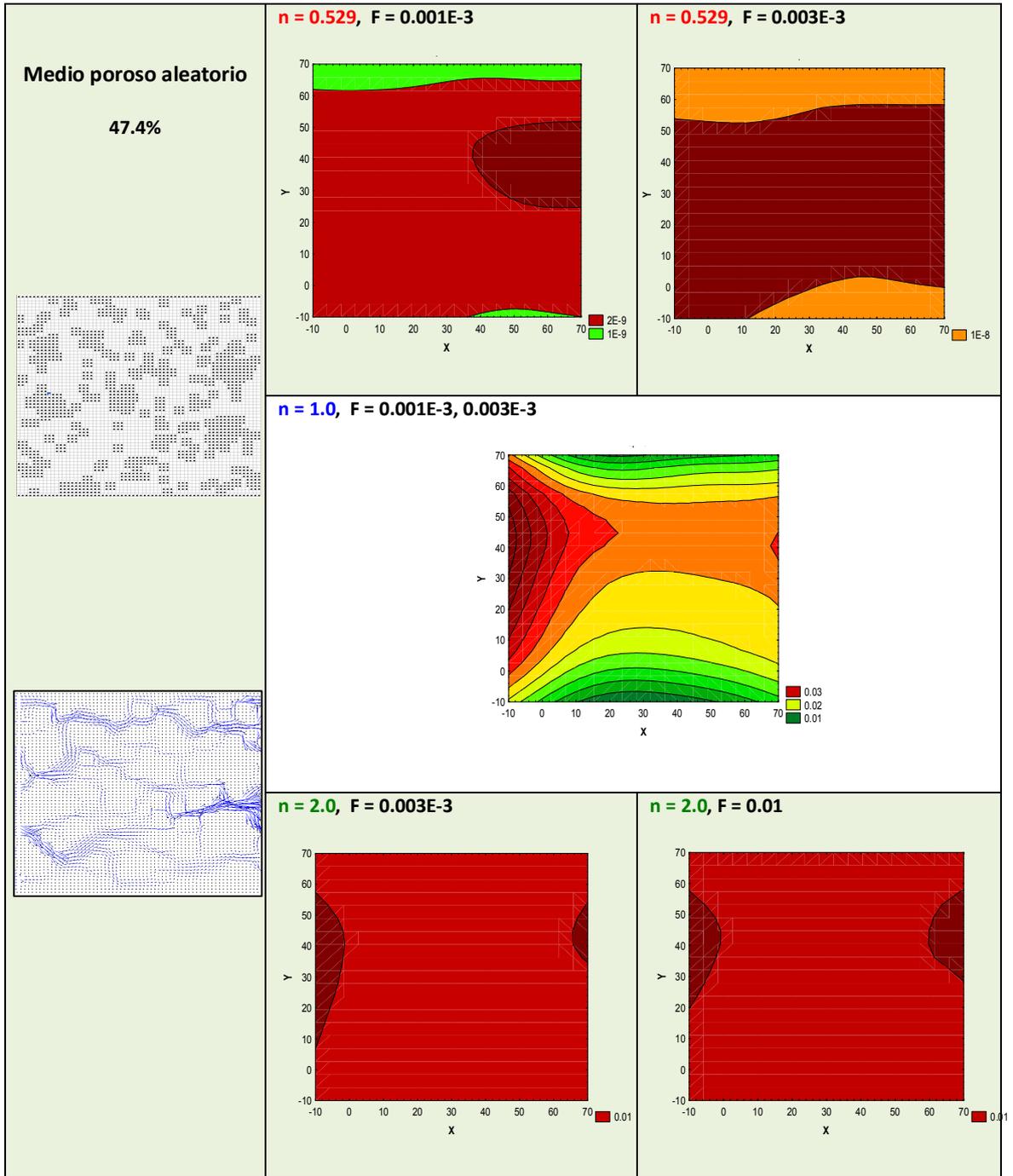


Figura 4.20 Bandas de permeabilidad para un medio poroso aleatorio con porosidad de 47.4%, con fuerzas de presión de 0.001E-3 y 0.003E-3 para fluidos Pseudoplástico ($n = 0.529$) y Newtoniano. Para el caso de dilatante ($n = 2.0$), con fuerzas de 0.003E-3 y 0.01 (aquí solamente se muestran con dos fuerzas de presión)

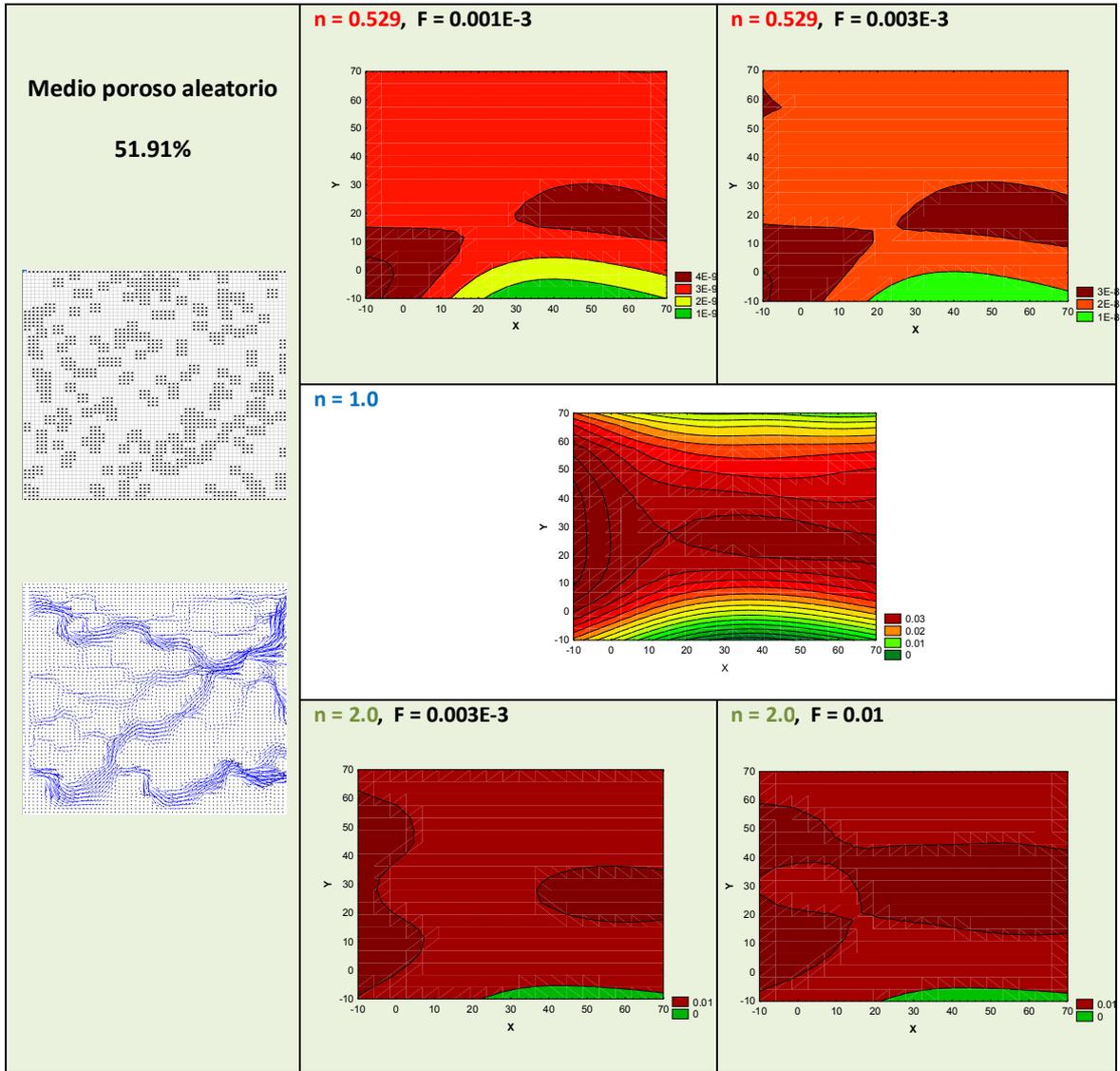


Figura 4.21 Bandas de permeabilidad para un medios poroso aleatorio con porosidad de 51.91%, con fuerzas de presión de 0.001E-3 y 0.003E-3 para fluidos Pseudoplástico ($n = 0.529$) y Newtoniano. Para el caso de dilatante ($n = 2.0$), con fuerzas de 003E-3 y 0.01 (aquí solamente se muestran con dos fuerzas de presión)

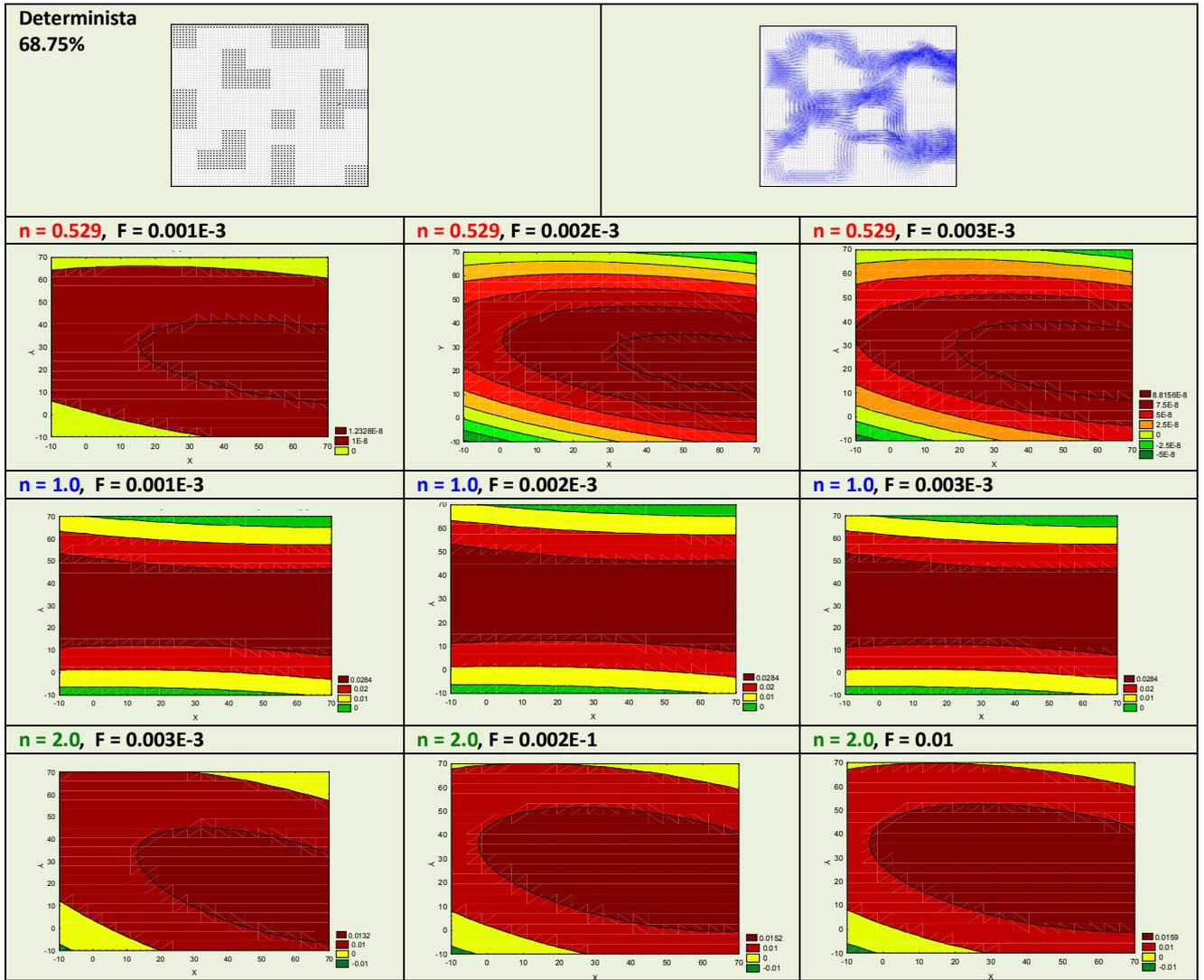


Figura 4.22 Bandas de permeabilidad para un medio poroso arbitrario con porosidad de 68.75%, con fuerzas de presión de 0.001E-3, 0.002E-3 y 0.003E-3 para fluidos Pseudoplástico ($n = 0.529$) y Newtoniano. Para el caso dilatante ($n = 2.0$), con fuerzas de 0.003E-3, 0.002E-1 y 0.01 (aquí solamente se muestran con tres fuerzas de presiones, para los casos anteriores)

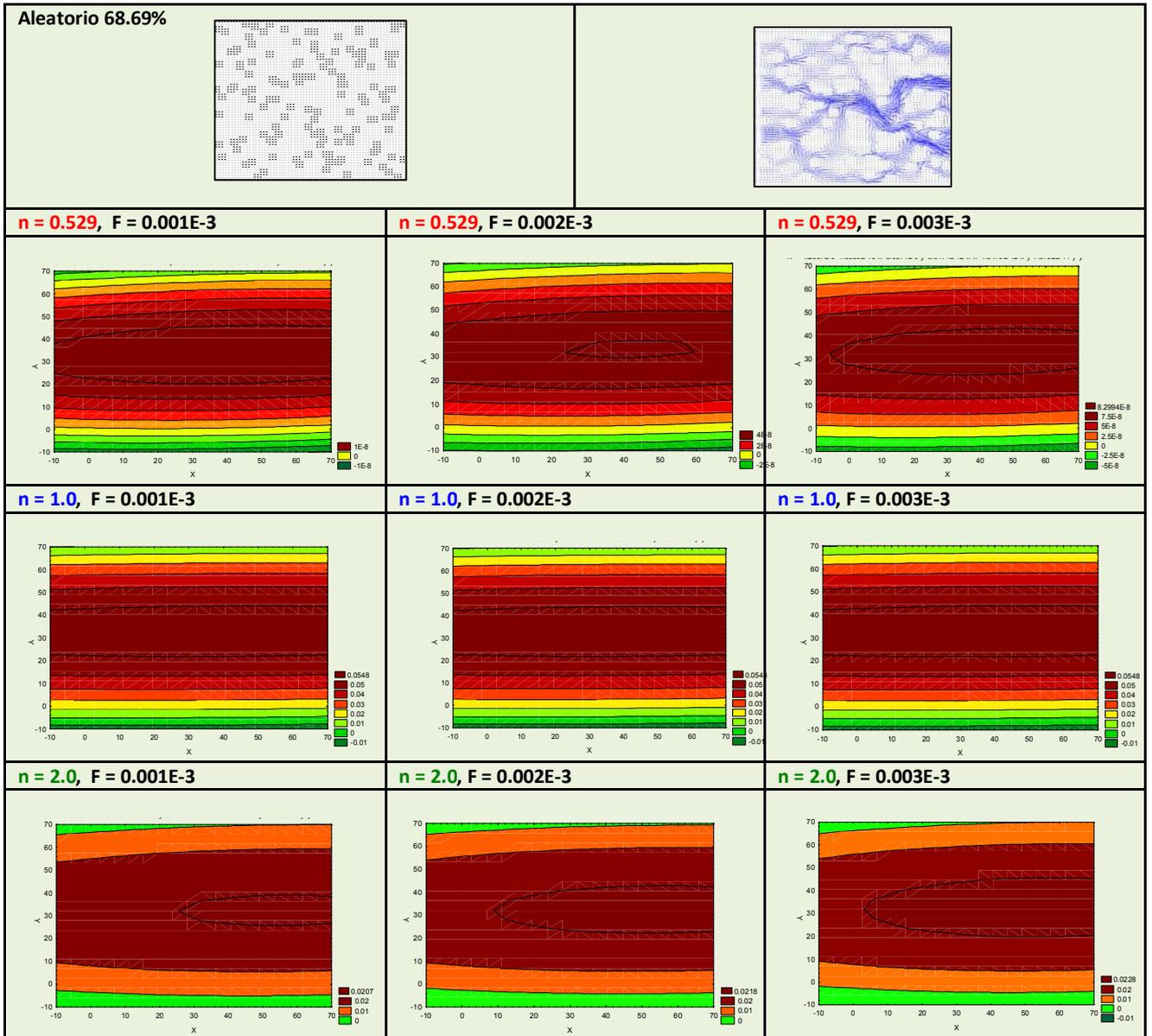


Figura 4.23 Bandas de permeabilidad para un medio poroso aleatorio con porosidad de 68.69%, con fuerzas de presión de 0.001E-3, 0.002E-3 y 0.003E-3 para fluidos Pseudoplástico ($n = 0.529$) y Newtoniano. Para el caso de dilatante ($n = 2.0$), con fuerzas de 0.003E-3, 0.002E-1 y 0.01 (aquí solamente se muestran con tres fuerzas de presiones, para los casos anteriores)

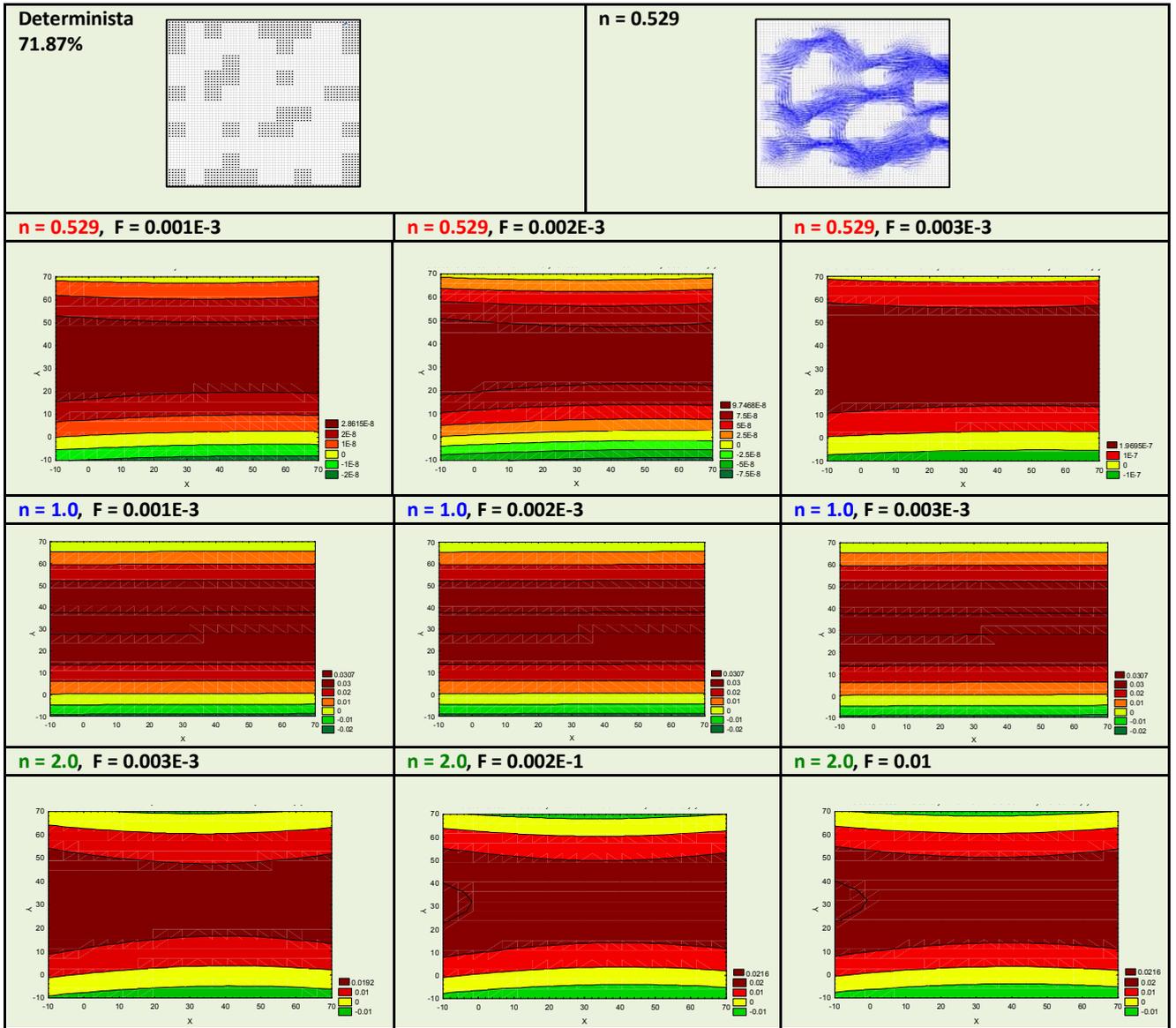


Figura 4.24 Bandas de permeabilidad para un medio poroso arbitrario con porosidad de 71.87%, con fuerzas de presión de 0.001E-3, 0.002E-3 y 0.003E-3 para fluidos Pseudoplástico (n = 0.529) y Newtoniano. Para el caso de dilatante (n = 2.0), con fuerzas de 0.003E-3, 0.002E-1 y 0.01 (aquí solamente se muestran con tres fuerzas de presiones, para los casos anteriores)

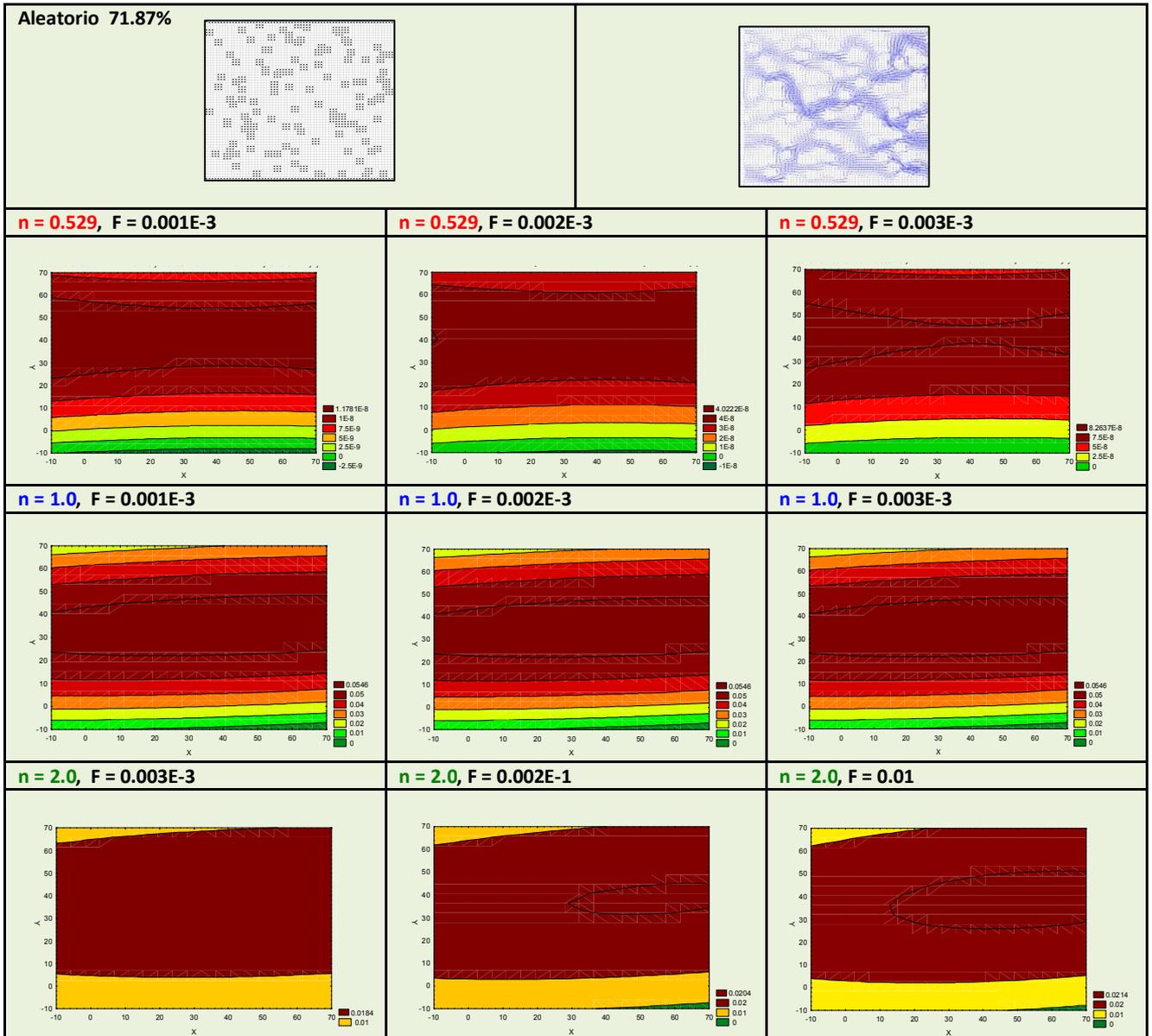


Figura 4.25 Bandas de permeabilidad para un medio poroso aleatorio con porosidad de 71.87%, con fuerzas de presión de 0.001E-3, 0.002E-3 y 0.003E-3 para fluidos Pseudoplástico ($n = 0.529$) y Newtoniano. Para el caso de dilatante ($n = 2.0$), con fuerzas de 003E-3, 0.002E-1 y 0.01 (aquí solamente se muestran con tres fuerzas de presiones, para los casos anteriores)

Se puede observar en las figuras 4.20 – 4.25, que para fluidos Newtonianos ($n = 1.0$), las bandas de permeabilidad son simétricas y además, no dependen de los gradientes de presión, como era de esperarse de acuerdo a la ley de Darcy; no siendo así, para el caso de fluidos no Newtonianos. Pero, para el caso de porosidades bajas, se presentan bandas anisotrópicas, figuras 4.20 y 4.21. También puede verse, que para fluidos pseudoplásticos ($n < 1.0$), el número de bandas de permeabilidad es mayor, que para el caso de fluidos dilatantes ($n > 1.0$). Así mismo, se forman “gargantas” al combinar aleatoriedad y presión alta, para un fluido pseudoplastico ($n = 0.529$), ver figura 4.25. Así pues, en estas bandas se puede observar el efecto que tiene la porosidad, la aleatoriedad, así como el tipo de fluido (Newtoniano $n = 1.0$, no Newtoniano $n = 0.529$, 2.0).

4.4.4 Predicción de distribuciones de probabilidad a través de permeabilidades efectivas

Se han empleado numerosos estudios de fluidos newtonianos del subsuelo a través de medios porosos aleatorios, con permeabilidades efectivas asumiendo funciones de densidad probabilística. Distribuciones de Permeabilidad efectiva se han utilizado para estudiar fenómenos geológicos para la tecnología del petróleo, por citar un ejemplo.

En este trabajo correlacionamos el efecto de la aleatoriedad, porosidad y permeabilidad con los parámetros reológicos de fluidos no newtonianos, prediciendo distribuciones de probabilidad. Lo cual nos lleva a una mejor comprensión de la heterogeneidad de los medios porosos utilizados en sistemas naturales. ^[17, 18]

Se han presentado datos en la literatura que muestran que en membranas de silicona, los valores de permeabilidad tanto de cafeína, así como de testosterona presentan tendencias a distribuciones normales. En cambio, en estudios con piel de cerdo, se han observado diferencias notables entre cada una de las drogas. Mientras que

para valores de permeabilidad con testosterona pueden igualarse a distribuciones normales, no así para datos de permeabilidad con cafeína, los cuales presentan tendencias a distribuciones log-normal. La simulación de fluidos no Newtonianos a través de medios porosos con el método de Lattice Boltzmann puede ser un primer acercamiento a la distribución de permeabilidad efectiva de soluciones de cafeína y la testosterona en membranas de silicona. [25]

Por otra parte, con el uso de distribuciones Weibull pueden utilizarse para determinar experimentalmente las tendencias en el tiempo de la velocidad de infiltración con bastante precisión [26]. Además, experimentos realizados en infiltración en rocas muestran que los flujos pueden establecerse a través de una distribución exponencial [27]. Así mismo, en el análisis de la heterogeneidad en medios porosos, ésta ha sido reportada por medio de distribuciones exponenciales para permeabilidades efectivas [28]. La distribución gamma ha sido utilizada como una representación estadística de superficies rugosas para flujos en medios porosos fracturados insaturados y distribuciones de tortuosidad en medios porosos [29, 30]. Y para el caso de Fenómenos hidrológicos completamente extremos, se ha visto que siguen el comportamiento de una distribución extrema. [31]

Otra contribución importante del presente trabajo, deriva del desarrollo de un nuevo acercamiento para calcular distribuciones de permeabilidad. Se desarrollaron experimentos para fluidos Newtonianos ($n = 1.0$) y no Newtonianos ($n = 0.529, 2.0$). En los siguientes casos:

- a) Medio poroso generado arbitrariamente, con porosidades de i) 68.75% y ii) 71.87%,
- b) Medios porosos generados aleatoriamente con porosidades de i) 68.69% y ii) 71.87%.

Aplicando un análisis de hipótesis nula sobre los datos para *i*) contraste de medias, *ii*) contraste de desviación típica, y *iii*) contraste de Kolmogorov. Obteniendo la mejor

distribución de permeabilidad para cada caso como se menciono anteriormente, la siguiente tabla se resume los resultados obtenidos

Medios porosos arbitrarios		Medios porosos aleatorios	
<i>Porosity 68.75%</i>	<i>Probability Distribution</i>	<i>Porosity 68.69%</i>	<i>Probability Distribution</i>
n = 0.529	Exponential	n = 0.529	Normal
n = 1.0	Normal	n = 1.0	Normal
n = 2.0	Gamma	n = 2.0	Gamma
<i>Porosity 71.87%</i>		<i>Porosity 71.87%</i>	
n = 0.529	Exponential	n = 0.529	Normal
n = 1.0	Weibull	n = 1.0	Normal
n = 2.0	Extreme	n = 2.0	Weibull
Medio poroso aleatorio			
<i>Porosity 47.37%</i>	<i>Probability Distribution</i>	<i>Porosity 51.91%</i>	<i>Probability Distribution</i>
n = 0.529	Normal	n = 0.529	Gamma
n = 1.0	Normal	n = 1.0	Normal
n = 2.0	Normal	n = 2.0	Gamma

Tabla 4.6. Mejor distribución de probabilidad para permeabilidad con simulaciones LBM para fluidos Newtonianos y no Newtonianos

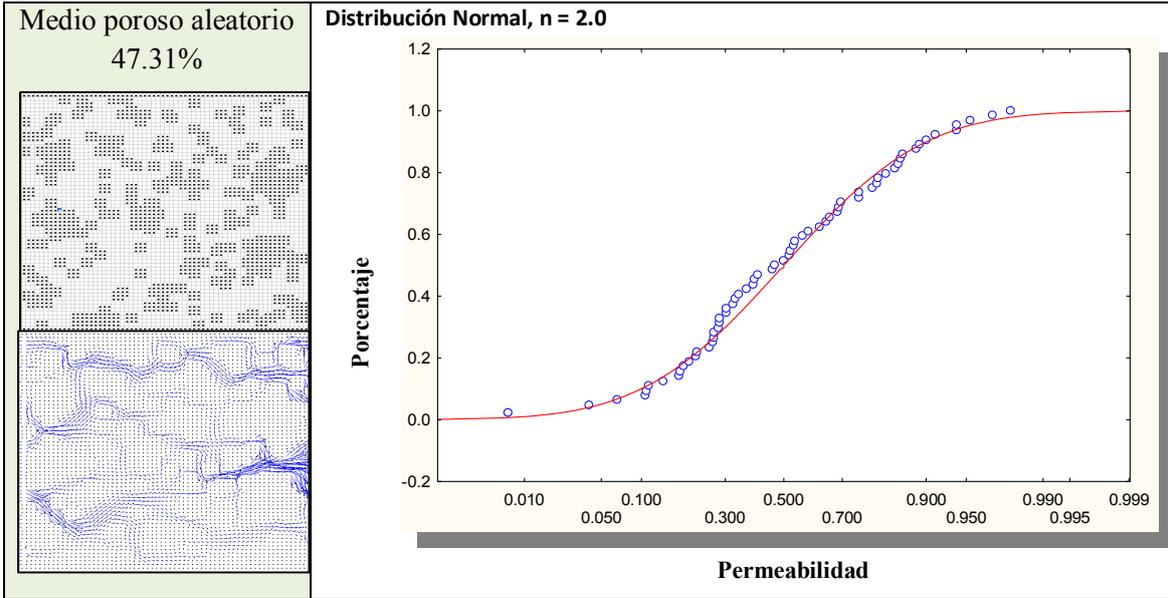


Figura 4.26 Distribución de probabilidad para permeabilidad con porosidad de 47.37% y $n = 2.0$

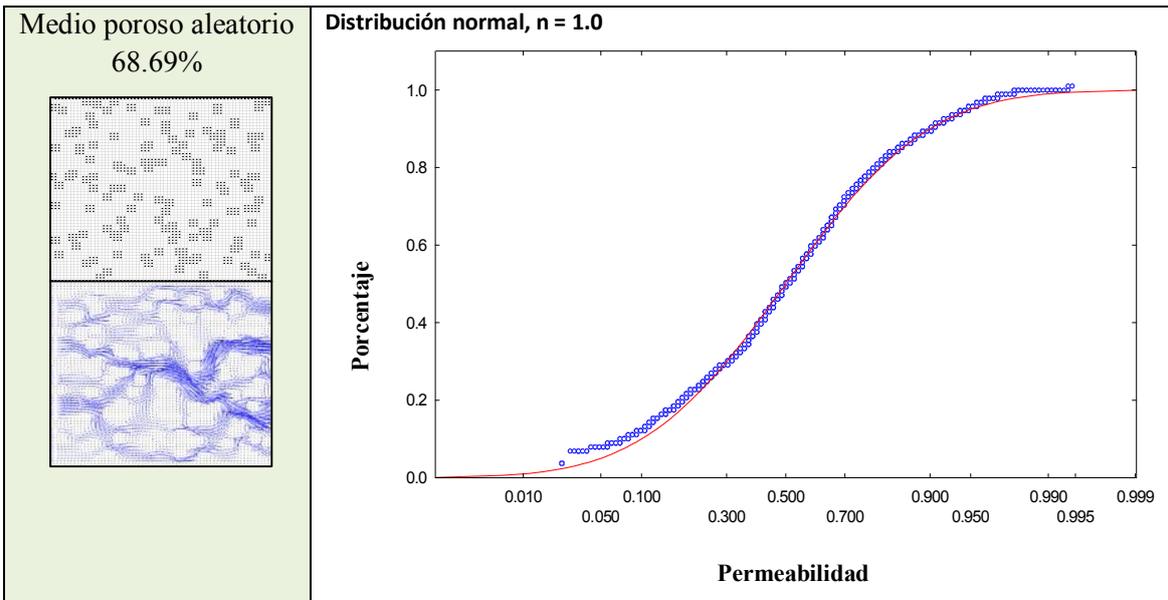


Figura 4.27 Distribución de probabilidad para permeabilidad con porosidad de 68.69% y $n = 1.0$

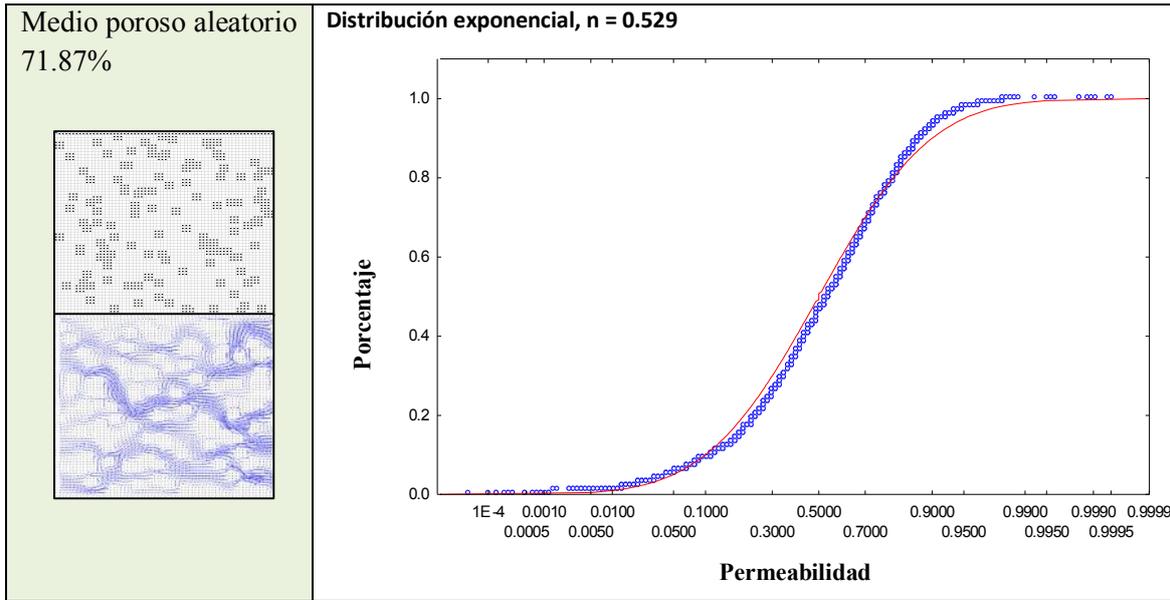


Figura 4.28 Distribución de probabilidad para permeabilidad con porosidad de 71.87% y $n = 0.529$

En las graficas 4.26 – 4.27, se presentan solamente algunos ejemplos de las distribuciones de probabilidad obtenidas.

De acuerdo a la tabla 3 se puede concluir que, para los experimentos realizados, se obtuvieron distribuciones normales principalmente para permeabilidad efectiva. Por otra parte, puede observarse que la aleatoriedad juega un papel importante. Por tanto, la irregularidad de canales geométricos en los medios cambia drásticamente la distribución de permeabilidad con una única excepción (medio poroso generado arbitrariamente con porosidad 68.75% y $n = 2.0$).

Referencias

- [1] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Fluid mechanics*. 2nd edition, Pergamon Press, London, 1987.
- [2] R. B. Bird, W. E. Stewart and E. N. Lightfoot. *Transport phenomena*. New York: Wiley, 1960.
- [3] R. P. Chhabra and J F. Richardson. *Non-Newtonian flow in the process industries*. Butterworth-Heinemann, 1999.
- [4] D. A. Siginer, D. De Kee and R. P. Chhabra. *Advances in the flow and rheology of Non-newtonian fluids, part B*. Elsevier, 1999.
- [5] E. Aharonov and D. H. Rothman. Non-Newtonian flow (through porous media): A lattice Boltzmann method. *Geophys. Res. Lett.* 20: 679-682, 1993.
- [6] N. Rakotomalala, D. Salin and P. Watzky. Simulations of viscous flows of complex fluids with a Bhatnagar, Gross and Krook lattice gas. *Phys. Fluids.* 8(11): 3200-3202, 1996.
- [7] E. S. Boek, J. Chin and P. V. Coveney. Lattice Boltzmann simulation of the flow of non-Newtonian fluids in porous media. *Int. J. Mod. Phys. B.* 17(1): 99-102, 2002.
- [8] S. P. Sullivan, L. F. Gladden and M. L. Johns. Simulation of power-law fluid flow through porous media using lattice Boltzmann techniques. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 133: 91-98, 2006.
- [9] J. G. Savins and A. B. Metzner. Radial (secondary) flows in rheogoniometric devices. *Rheologica Acta.* 9(3): 365-373, 1970.
- [10] I. M. Nurul, B. M. N. M. Azemi and D. M. A. Manan. Rheological behavior of sago (Metroxilon sago) starch paste. *Food Chemistry.* 64: 501-506, 1999.
- [11] P. E. Kloeden and E. Platen. *Numerical solution of stochastic differential equations*. Springer 1999.
- [12] E. R. Golder and J. G. Settle. The box-Muller method for generating pseudo-random normal deviates. *Applied Statistics.* 25 (1):12-20, 1976.

- [13] Ch. J. Geankoplis. *Transport Processes and Unit Operations*. Prentice Hall, 3^a Edition, 1993.
- [14] B. A. Valiente. *Problemas de flujo de fluidos*. Limusa, 1998.
- [15] O. Rahli, L. Tadrist, M. Miscevic and R. Santini. Fluid flow through randomly packed monodisperse fibers: The Kozeny-Carman parameter analysis. *J. Fluids Eng.* 119(1): 188-192, 1997.
- [16] T. F. Wong, R. H. C. Wong, K. T. Chau and C. A. Tang. Microcrack statistics, Weibull distribution and micromechanical modeling of compressive failure in rock. *Mechanics of Materials*. 38(7): 664-681, 2006.
- [17] N. Sitar, J. D. Cawfield and A. D. Kiureghian. First order reliability approach to stochastic analysis of subsurface flow and contaminant transport. *Water Resour Res.* 23(5):794-804, 1987.
- [18] R. A. Cooke, S. Mostaghimi and F. Woeste. Effect of hydraulic conductivity probability distribution on simulated solute leaching. *Water Env. Res.* 67(2):159-168, 1995.
- [19] L. Sanders. *A manual of field hydrogeology*. Prentice – Hall, 1998.
- [20] V. Ramos, H. Egüez, L. Ladines and P. Carrión. Perspectivas de la explotación y aplicación de tierra de diatomeas en la Península de Santa Elena. *Revista Tecnológica*. 17 (1), 2004.
- [21] E. C, Lartigue and C. E, Rossanigo. Evaluación insecticida y antihelmíntica de la tierra de diatomea en bovinos. *Veterinaria Argentina*, 209:660-674, 2004.
- [22] M. A. Guerrero, E. M. Alfaro and E. G. Font. Caracterización petrográfica y geoquímica de las calizas de la Sierra de Estepa (Sevilla) y evaluación de la calidad técnica como materiales de construcción. *Estudios geológicos*. 5-6 (51): 213-222, 1995.
- [23] P. Bosch and I. Schifter. *La zeolita. Una piedra que hierve*. Colección La Ciencia desde México. Fondo de Cultura Económica. México, Núm. 55, 1988.
- [24] C. A. Córdoba. "*Algunas propiedades fisicoquímicas en arcillas mexicanas*". Tesis Licenciatura, UNAM, México, 1988.

- [25] G. M. Khan, Y. Frum, O. Sarheed, G. M. Eccleston and V. M. Meidan. Assessment of drug permeability distributions in two different model skins. *International Journal of Pharmaceutics*. 303(1-2): 81-87, 2005.
- [26] B. Faybishenko, G. S. Bodvarsson and R. Salve. On the physics of unstable infiltration, seepage, and gravity drainage in partially saturated tuffs. *Journal of Contaminant Hydrology*. 62(3): 63-87, 2003.
- [27] T. K. Tokunaga, K. R. Olson and J. M. Wan. Infiltration flux distributions in unsaturated rock deposits and their potential implications for fractured rock formations. *Geophysical Research Letters*. 32(5): L05405, 2005.
- [28] G. B. Savioli, M. S. Bidner and P. M. Jacovkis. Statistical analysis of heterogeneities and their effect on build-up and drawdown tests. *Journal of Petroleum Science and Engineering*. 15(1): 45-55, 1996.
- [29] D. Or and M. Tuller. Flow in unsaturated fractured porous media: hydraulic conductivity of rough surfaces. *Water resources research*. 36(5): 1165-1177, 2000.
- [30] W. B. Lindquist, S. M. Lee, D. A. Coker, K. W. Jones and P. Spanne. Medial axis analysis of void structure in the three-dimensional tomographic images of porous media. *Journal of Geophysical research-solid earth*. 101(B4): 8297-8310, 1996.
- [31] A. G. López, T. Lebel and R. M. Zermeno. Space-time study of the pluviometric regime in southern Mexico. *Ing. Hidraul. Mex.* 20(1): 57-65, 2005.

CONCLUSIONES

En esta tesis se presenta la simulación de fluidos no Newtonianos a través de medios porosos, utilizando la ley de Darcy modificada y la ecuación de Darcy en función de viscosidad aparente, aplicando la ecuación de Redes de Boltzmann (RB) y se concluye que el método es capaz de simular correctamente fluidos pseudoplásticos, dilatante y Newtonianos en presencia de diferentes medios porosos. En éstos medios, se obtuvieron campos de flujo, distribuciones de velocidad, distribuciones de esfuerzo de corte, distribuciones de presión, permeabilidades y esfuerzos de corte en las paredes para diferentes matrices porosas; para medios generados arbitrariamente, así como medios aleatorios. Con el modelo propuesto se tienen predicciones de acuerdo con las ecuaciones empíricas basadas en datos experimentales; como son las ecuaciones de Ergun y Blake-Kozeny. Se constató que el método de RB es útil para la investigación de propiedades mesoscópicas de fluidos no Newtonianos (soluciones de almidón de sago), así como en lechos empacados.

Al observar las figuras 4.12 y 4.13, se concluye que se presenta una gran cantidad de fluctuaciones con una amplia gama de frecuencia de velocidad, principalmente en medios porosos deterministas, contrariamente a lo que sucede en los medios porosos aleatorios, en los cuales las fluctuaciones son pocas y la gama de frecuencias de velocidad son bajas.

Se encontró de nuestros resultados, que para bajas porosidades, el efecto aleatorio implica un aumento considerable en las caídas de presión, en el caso de fluidos pseudoplásticos. Tal efecto desaparece para fluidos Newtonianos.

En la figura 4.17, se puede ver que para medios porosos aleatorios (por ejemplo, 71.87%), en áreas con alto de esfuerzo de corte en la pared, pueden ser considerados como zonas fácilmente de limpiar. Por ejemplo, las zonas alrededor de los nodos 55 (pared superior) y 28 (pared inferior). Para el caso de medios porosos deterministas (por ejemplo, 71.87%),

todas las zonas de las paredes pueden como sucias. Por tanto, nuestro modelo es capaz de predecir el efecto aleatorio en el diseño del equipo. A través del procedimiento en la limpieza de superficies de equipos en los lugares de procesamiento, tenemos la oportunidad de reducir el número de pruebas necesarias de limpieza en prototipos.

Información adicional sobre las distribuciones de campo de flujo, pueden ser caracterizadas mediante el uso de nuestras simulaciones. Por ejemplo, en la figura 4.17, se observa que valores para pendientes descendentes se encuentran localizados alrededor de algunas áreas (por ejemplo, nodos $x = 17$ a $x = 19$ y $x = 52$ a $x = 58$ para pared inferior y $x = 22$ a $x = 25$ para la pared superior) en el caso de medios aleatorios, creando un potencial en el área de contra flujo en el sistema.

Por otra parte, llegamos a la conclusión de que la aleatoriedad, la porosidad, la ley de potencia de fluidos no-newtonianos, desempeñan un papel importante en la distribución de permeabilidad efectiva, obtenidos para experimentos con distribuciones normal, gamma, exponencial u otras. Nuestros resultados son presentados para rangos de porosidad de 47.4% a 71.9%. Aunque podemos utilizar nuestra propuesta para porosidades bajas del orden del 10%, pero entonces el error relativo promedio de n (comparando el valor experimental con el obtenidos por el método de RB) puede llegar a un máximo del 6,8% (para fluidos pseudoplásticos con $n = 0,529$).

En nuestras simulaciones se observó que los fluidos newtonianos siempre producen bandas simétricas e incluyen bandas de alta permeabilidad. Podemos observar que para fluidos pseudoplásticos ($n < 1$) las bandas de baja permeabilidad son más numerosas que en el caso de fluidos dilatantes ($n > 1$). La formación de gargantas son formadas al introducir aleatoriedad y alta porosidad, para el caso de fluidos pseudoplásticos. Adicionalmente aparece anisotropía para porosidades bajas. Además, los medios porosos arbitrarios siempre tienen claramente una tortuosidad pequeña en comparación con los medios porosos aleatorios. Por último, en este trabajo correlacionamos el efecto de la aleatoriedad, porosidad y permeabilidad con los parámetros reológicos de fluidos no newtonianos, prediciendo distribuciones de probabilidad. Las cuales son de gran importancia en diferentes áreas de interés científico. En consecuencia, se tiene que el método de RB es una alternativa viable para abordar problemas de flujo de fluidos a través de medios porosos.

APÉNDICES

APENDICE A: *OBTENCIÓN DE LA ECUACIÓN DE REDES DE BOLTZMANN A PARTIR DE LA ECUACIÓN DE BOLTZMANN.*

La ecuación de Boltzmann con el modelo BGK puede escribirse de la siguiente forma

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \nabla f = -\frac{1}{\lambda}(f - g). \quad (\text{A1})$$

En la ecuación (A1), $f \equiv f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ es la función de distribución de partícula única, $\vec{\xi}$ es la velocidad microscópica, λ es el tiempo de relajación debido a la colisión, y g es la función de distribución de Maxwell-Boltzmann (f^M). Es importante notar, que el término de colisión ha sido linealizado de acuerdo a la ecuación (3.8).

Propiedades hidrodinámicas del fluido, tales como la densidad ρ , velocidad \vec{u} y la temperatura T , pueden ser calculadas a partir de los *momentos* de la función f . Para cuantificar la temperatura del fluido, puede ser utilizada la densidad de energía ρe .^[1]

$$\rho = \int f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\vec{\xi}, \quad (\text{A2})$$

$$\rho \bar{u} = \int \xi f(\bar{x}, \bar{\xi}, t) d\bar{\xi}, \quad (\text{A3})$$

$$\rho \varepsilon = \int \frac{1}{2} (\bar{\xi} - \bar{u}) f(\bar{x}, \bar{\xi}, t) d\bar{\xi}. \quad (\text{A4})$$

Discretización del tiempo

La ecuación (A1) se formula en forma de una ecuación diferencial ordinaria (EDO)

$$\frac{df}{dt} + \frac{1}{\lambda} f = \frac{1}{\lambda} g, \quad (\text{A5})$$

Donde $\frac{d}{dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \bar{\xi} \cdot \bar{\nabla}$ es la derivada sustancial a lo largo de la velocidad microscópica $\bar{\xi}$. La ecuación (A5) como se mencionó anteriormente, es una EDO lineal de primer orden, la cual puede ser resuelta e integrada formalmente sobre un paso de tiempo δt .

Para tal efecto, utilizando el método del factor integrante se obtiene

$$f(\bar{x} + \bar{\xi} \delta_t, \bar{\xi}, t + \delta_t) = e^{-\delta_t/\lambda} \frac{1}{\lambda} \int_0^{\delta_t} e^{t'/\lambda} g(\bar{x} + \bar{\xi} t', \bar{\xi}, t + t') dt' + e^{-\delta_t/\lambda} f(\bar{x}, \bar{\xi}, t), \quad (\text{A6})$$

Asumiendo que δ_t es muy pequeña y g es una función local y además bastante suave, el término $g(\bar{x} + \bar{\xi} t', \bar{\xi}, t + t')$ puede ser aproximada con interpolación lineal para $0 \leq t' \leq \delta_t$:

$$g(\bar{x} + \bar{\xi} t', \bar{\xi}, t + t') = \left(1 - \frac{t'}{\delta_t}\right) g(\bar{x}, \bar{\xi}, t) + \frac{t'}{\delta_t} g(\bar{x} + \bar{\xi} \delta_t, \bar{\xi}, t + \delta_t) + O(\delta_t^2), \quad (\text{A7})$$

con dicha aproximación, y sustituyendo ésta en la ecuación (A6) se tiene

$$\begin{aligned}
f(\bar{x} + \bar{\xi}\delta_t, \bar{\xi}, t + \delta_t) = e^{-\delta_t/\lambda} \frac{1}{\lambda} \left[g(\bar{x}, \bar{\xi}, t) \int_0^{\delta_t} e^{t'/\lambda} dt' - \frac{g(\bar{x}, \bar{\xi}, t)}{\delta_t} \int_0^{\delta_t} e^{t'/\lambda} t' dt' + \right. \\
\left. + \frac{g(\bar{x} + \bar{\xi}\delta_t, \bar{\xi}, t + \delta_t)}{\delta_t} \int_0^{\delta_t} e^{t'/\lambda} t' dt' \right] + e^{-\delta_t/\lambda} f(\bar{x}, \bar{\xi}, t).
\end{aligned} \tag{A8}$$

Resolviendo las integrales que aparecen en (A8) y desarrollando algebra sobre la ecuación resultante se obtiene

$$\begin{aligned}
f(\bar{x} + \bar{\xi}\delta_t, \bar{\xi}, t + \delta_t) - f(\bar{x}, \bar{\xi}, t) = \left[e^{-\delta_t/\lambda} - 1 \right] \left[f(\bar{x}, \bar{\xi}, t) - g(\bar{x}, \bar{\xi}, t) \right] \\
+ \left[1 + \frac{\lambda}{\delta_t} \left(e^{-\delta_t/\lambda} - 1 \right) \right] \times \left[g(\bar{x} + \bar{\xi}\delta_t, \bar{\xi}, t + \delta_t) - g(\bar{x}, \bar{\xi}, t) \right].
\end{aligned} \tag{A9}$$

Realizando expansión de Taylor en $e^{-\delta_t/\lambda}$, en la ecuación (A9) se obtiene

$$\begin{aligned}
f(\bar{x} + \bar{\xi}\delta_t, \bar{\xi}, t + \delta_t) - f(\bar{x}, \bar{\xi}, t) = \left[1 + \left(-\frac{\delta_t}{\lambda} \right) + \frac{\delta_t^2}{\lambda^2} - 1 \right] \left[f(\bar{x}, \bar{\xi}, t) - g(\bar{x}, \bar{\xi}, t) \right] \\
+ \left[1 + \frac{\lambda}{\delta_t} \left(1 + \left(-\frac{\delta_t}{\lambda} \right) + \frac{\delta_t^2}{\lambda^2} - 1 \right) \right] \times \left[g(\bar{x} + \bar{\xi}\delta_t, \bar{\xi}, t + \delta_t) - g(\bar{x}, \bar{\xi}, t) \right].
\end{aligned} \tag{A10}$$

Despreciando los términos pequeños de orden $O(\delta_t^2)$ del lado derecho de la ecuación anterior, se obtiene la siguiente ecuación

$$f(\bar{x} + \bar{\xi}\delta_t, \bar{\xi}, t + \delta_t) - f(\bar{x}, \bar{\xi}, t) = -\frac{1}{\tau} \left[f(\bar{x}, \bar{\xi}, t) - g(\bar{x}, \bar{\xi}, t) \right]. \tag{A11}$$

En la ecuación (A11) $\tau \equiv \lambda/\delta_i$ es el tiempo de relajación; ésta ecuación es muy similar a la ecuación de redes de Boltzmann (3.22). Lo que hace falta para obtener la ecuación es la discretización del espacio de velocidades, así como una función de equilibrio g que sea consistente con las ecuaciones de Navier-Stokes (N-S). Por lo que, la ecuación (A11) es solamente la evolución de la función de distribución f con tiempo discreto. ^[1,2]

Aproximación de la Distribución de Equilibrio.

Un punto de suma importancia, es la obtención de la función de distribución de equilibrio, ya que como se mencionó en el párrafo anterior, de ella depende el poder recobrar de forma adecuadamente las ecuaciones de N-S. La distribución de Maxwell que se utiliza como la función de distribución de equilibrio g para una masa de partícula unitaria y “D” dimensiones es

$$g(\bar{u}) = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left[-\frac{(\bar{\xi} - \bar{u})^2}{2RT}\right], \quad (\text{A12})$$

esta ecuación puede expresarse de la siguiente forma

$$g(\bar{u}) = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{\bar{\xi}^2}{2RT}\right) \exp\left(\frac{\bar{\xi} \cdot \bar{u}}{RT} - \frac{\bar{u}^2}{2RT}\right). \quad (\text{A13})$$

La función “g” se expande a través de una serie de Taylor en \bar{u} hasta el tercer orden, y enseguida se eliminan éstos últimos

$$g(0, \bar{u}) = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{\bar{\xi}^2}{2RT}\right) \left\{ 1 + \frac{\bar{\xi} \cdot \bar{u}}{RT} + \frac{(\bar{\xi} \cdot \bar{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{\bar{u}^2}{2RT} \right\}. \quad (\text{A14})$$

Para el caso de velocidades pequeñas (o números de Mach pequeños), esta aproximación es bastante exacta.

Haciendo $g(0, \bar{u}) = f^{(eq)}$, obtenemos la siguiente ecuación, que será utilizada como la distribución de equilibrio local para las siguientes derivaciones ^[1-3]

$$f^{(eq)} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{\bar{\xi}^2}{2RT}\right) \times \left\{ 1 + \frac{(\bar{\xi} \cdot \bar{u})}{RT} + \frac{(\bar{\xi} \cdot \bar{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{\bar{u}^2}{2RT} \right\}. \quad (A15)$$

Discretización de las velocidades

Para la discretización de la velocidad, ésta irá de $-\infty$ a $+\infty$ para ambas direcciones “x” e “y” para el caso específico de un modelo bidimensional (D2Q9), que será el que se desarrollará en esta parte. Los momentos de la función de distribución de partícula son importantes, ya que de ello depende la consistencia que se tenga con las ecuaciones de N-S. Así mismo, en la discretización se conservará la isotropía, la cual es una de las propiedades más importante en la simetría de las ecuaciones de N-S; de este modo, la rejilla será invariante para rotaciones del problema.

Es importante mencionar que para un modelo isotérmico, se requiere únicamente el primer momento. Estos, pueden ser escritos a partir de la ecuación (A15) en dos dimensiones como

$$I = \int \psi(\bar{\xi}) f^{(eq)} d\bar{\xi} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \int \psi(\bar{\xi}) \exp\left(-\frac{\bar{\xi}^2}{2RT}\right) \times \left\{ 1 + \frac{(\bar{\xi} \cdot \bar{u})}{RT} + \frac{(\bar{\xi} \cdot \bar{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{\bar{u}^2}{2RT} \right\} d\bar{\xi}. \quad (A16)$$

La integral de la ecuación (A16) tiene la siguiente estructura $\int e^{-x^2} \psi(\bar{\xi}) dx$, en donde

$\psi(\vec{\xi})$ es la función de momento, que contiene potencias de los componentes de velocidad. Para recobrar el modelo D2Q9 para una rejilla cuadrada, se utiliza el sistema de coordenadas cartesiano y, por tanto $\psi(\vec{\xi})$ puede suponerse como

$$\psi_{m,n}(\vec{\xi}) = \xi_x^m \xi_y^n, \quad (\text{A17})$$

en la ecuación anterior, ξ_x y ξ_y son los componentes de “x” e “y” de la velocidad $\vec{\xi}$. Por lo que, la función de distribución de equilibrio para un modelo bidimensional (D = 2) es

$$f^{(\text{eq})} = \frac{\rho}{(2\pi RT)} \exp\left(-\frac{\vec{\xi}^2}{2RT}\right) \times \left\{ 1 + \frac{(\vec{\xi} \cdot \vec{u})}{RT} + \frac{(\vec{\xi} \cdot \vec{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{\vec{u}^2}{2RT} \right\}. \quad (\text{A18})$$

Ahora bien, para encontrar la integral de momentos mostrada en la ecuación (A16), se define $\zeta = \xi/\sqrt{2RT}$, por lo que $d\xi_x = \sqrt{2RT}d\zeta_x$, $d\xi_y = \sqrt{2RT}d\zeta_y$; sustituyendo estos términos en la ecuación (A16)

$$I = \int \psi(\vec{\xi}) f^{(\text{eq})} d\vec{\xi} = \frac{\rho}{(2\pi RT)} \int \xi_x^m \xi_y^n \psi(\vec{\xi}) \exp\left(-\frac{\vec{\xi}^2}{2RT}\right) \times \left\{ 1 + \frac{(\vec{\xi} \cdot \vec{u})}{RT} + \frac{(\vec{\xi} \cdot \vec{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{\vec{u}^2}{2RT} \right\} \sqrt{2RT}d\zeta_x \sqrt{2RT}d\zeta_y. \quad (\text{A19})$$

Después de realizar un desarrollo algebraico sobre la ecuación (A19) se llega al siguiente resultado

$$\begin{aligned}
I &= \int \psi_{m,n}(\vec{\xi}) f^{(eq)} d\vec{\xi} = \frac{\rho}{\pi} \sqrt{2RT}^{m+n} \int \zeta_x^m \zeta_y^n e^{-\zeta^2} \left(1 - \frac{\bar{u}^2}{2RT} \right) d\zeta_x d\zeta_y \\
&+ \int \zeta_x^m \zeta_y^n e^{-\zeta^2} \frac{2(\zeta_x u_x + \zeta_y u_y)}{\sqrt{2RT}} d\zeta_x d\zeta_y \\
&+ \int \zeta_x^m \zeta_y^n e^{-\zeta^2} \frac{(\zeta_x^2 u_x^2 + 2\zeta_x u_x \zeta_y u_y + \zeta_y^2 u_y^2)^2}{RT} d\zeta_x d\zeta_y.
\end{aligned} \tag{A20}$$

Puede observarse que I_i^m es m -ésimo momento de la función $e^{-\zeta^2}$. Los cuales, están dados por las siguientes expresiones

$$\int \zeta_x^m \zeta_y^n e^{-\zeta^2} \left(1 - \frac{\bar{u}^2}{2RT} \right) d\zeta_x d\zeta_y = \left(1 - \frac{\bar{u}^2}{2RT} \right) I_m I_n \tag{A21}$$

$$\text{donde} \quad I_m = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\zeta^2} \zeta_x^m d\zeta_x; \quad I_n = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\zeta^2} \zeta_y^n d\zeta_y$$

$$\int \zeta_x^m \zeta_y^n e^{-\zeta^2} \frac{2(\zeta_x u_x + \zeta_y u_y)}{\sqrt{2RT}} d\zeta_x d\zeta_y = \frac{2(u_x I_{m+1} I_n + u_y I_m I_{n+1})}{\sqrt{2RT}}, \tag{A22}$$

$$\begin{aligned}
&\int \zeta_x^m \zeta_y^n e^{-\zeta^2} \\
&\times \frac{(\zeta_x^2 u_x^2 + 2\zeta_x u_x \zeta_y u_y + \zeta_y^2 u_y^2)^2}{RT} d\zeta_x d\zeta_y \\
&= \frac{(u_x^2 I_{m+2} I_n + 2u_x u_y I_{m+1} I_{n+1} + u_y^2 I_m I_{n+2})}{RT}.
\end{aligned} \tag{A23}$$

Sustituyendo los momentos de las ecuaciones (A21-A23), en la ecuación (A20) se obtiene ^[1, 2, 4]

$$\begin{aligned}
I &= \int \psi_{m,n}(\vec{\xi}) f^{(eq)} d\vec{\xi} = \frac{\rho}{\pi} \sqrt{2RT}^{m+n} \left\{ \left(1 - \frac{\bar{u}^2}{2RT} \right) I_m I_n + \frac{2(u_x I_{m+1} I_n + u_y I_m I_{n+1})}{\sqrt{2RT}} \right. \\
&\left. + \frac{u_x^2 I_{m+2} I_n + 2u_x u_y I_{m+1} I_{n+1} + u_y^2 I_m I_{n+2}}{RT} \right\}.
\end{aligned} \tag{A24}$$

Para evaluar los momentos que aparecen en la ecuación (A24), se utiliza el método de integración numérica de la cuadratura Gaussiana. La ecuación de la *Cuadratura de Gauss-Hermite* es dada por

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) dx = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) + E_n, \quad (\text{A25})$$

donde e^{-x^2} es la función de peso, y $f(x)$ es un polinomio en x , (ejemplo $f(\zeta_x) = \zeta_x^m$). La integral sobre la multiplicación de estas dos funciones es aproximada por la suma sobre funciones evaluadas a los valores $x = x_j$ con los pesos w_j . Los valores x_i son también llamados abscisas. En total, son N abscisas y pesos. Para funciones semejantes a e^{-x^2} la cuadratura de Gauss-Hermite puede ser aplicada, que es correcta para W -polinomial, donde para este caso $W = e^{-x^2}$, hasta el orden $(2N-1)$. El orden de la cuadratura de Gauss-Hermite ha sido escogido de acuerdo al orden del momento-polinomial ψ . Aunque el modelo es isotérmico la energía debida a la temperatura ha sido mantenida constante. Por consiguiente, para un ψ de segundo orden, así como términos de segundo orden en el término $(\vec{\xi} \cdot \vec{u})$, los momentos de hasta cuarto orden deben ser integrados correctamente. Este requiere una cuadratura Gaussiana de tercer orden ($N = 3$):

$$I_m = \sum_{j=1}^3 w_j \zeta_j^m, \quad (\text{A26})$$

donde x_i son los ceros de $H_n(x)$, y los pesos son dados por ^[5]

$$w_i = -\frac{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}}{H_{n+1}(x_i) H_n'(x_i)} \quad (\text{A27})$$

$$E_n = \frac{n! \sqrt{\pi}}{2^n (2n)!} f^{(2n)}(\zeta) \quad \text{para } \zeta \in (-\infty, \infty).$$

El tercer orden de la fórmula de Hermite es óptimo a escoger para evaluar I_m para el propósito de derivar el modelo D2Q9 ^[1]. El tercer orden de la fórmula de Hermite es pues

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x. \quad (\text{A28})$$

La obtención de sus ceros o sus tres abscisas de la cuadratura se obtienen a partir de la ecuación (A28) igualada a cero ($8x^3 - 12x = 0$; $x = 0$; $x = \pm\sqrt{12/8} = \pm\sqrt{3/2}$). Por lo tanto sus ceros son ($\zeta_1 = -\sqrt{3/2}$; $\zeta_2 = 0$; $\zeta_3 = \sqrt{3/2}$). Y los coeficientes de peso están dados por la ecuación (A27), para nuestro modelo: $w_j = 2^4 3! \sqrt{\pi} / [H'_3(\zeta_j)]^2$ $j = 1, 2, 3$. En donde $H'_3(\zeta_j)$ toma los siguientes valores ^[5]

$$H'_3(x) = 24x^2 - 12; \quad H'_3(\zeta_1) = 24x^2 - 12 \Big|_{-\sqrt{3/2}} = 24; \quad H'_3(\zeta_2) = 24x^2 - 12 \Big|_0 = -12;$$

$$H'_3(\zeta_3) = 24x^2 - 12 \Big|_{\sqrt{3/2}} = 24$$

Por lo que, $w_1 = \sqrt{\pi}/6$; $w_2 = 2\sqrt{\pi}/3$; $w_3 = \sqrt{\pi}/6$.

Habiendo aplicado la cuadratura de Gauss-Hermite en la ecuación (A24), la función de momentos puede ser otra vez reducida ^[1]:

$$I = \frac{\rho}{\pi} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 w_i w_j \psi(\vec{\zeta}_{i,j}) \left\{ 1 + \frac{(\vec{\zeta}_{i,j} \cdot \vec{u})}{RT} + \frac{(\vec{\zeta}_{i,j} \cdot \vec{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{\vec{u}^2}{2RT} \right\}. \quad (\text{A29})$$

Donde $\vec{\zeta}_{i,j}$ es el vector dado por las abscisas de la cuadratura $\vec{\zeta}_{i,j} = (\sqrt{2RT})(\zeta_i, \zeta_j)^T$.

Como las dos sumas van sobre tres valores para cada i e j , entonces son un total de nueve posibles valores para $\vec{\zeta}_{i,j}$ y $w_i w_j$. Como se está utilizando un modelo isotérmico, la temperatura T no tiene relevancia física, y puede ser reemplazado por una constante $c = \sqrt{3RT}$. La velocidad del sonido $c_s = 1/\sqrt{3}$ en el modelo da $c_s^2 = c^2/3 = RT$. Los pesos, divididos por π dan ^[6]:

$$w_0 = w_2 w_2 = \frac{2\sqrt{\pi}}{3} \frac{2\sqrt{\pi}}{3} \frac{1}{\pi} = \frac{4}{9}; \quad w_{1,2,3,4} = w_1 w_2, w_2 w_1, w_3 w_2, w_2 w_3 = \frac{1}{9};$$

$$w_{5,6,7,8} = w_1 w_3, w_3 w_1, w_1 w_1, w_3 w_3 = \frac{1}{36}.$$

Cada componente de los vectores $\vec{\zeta}_{i,j}$ es cualquiera de los dos valores, ya sea 0 ó

$$\pm\sqrt{2RT}\sqrt{3/2} = \pm\sqrt{3RT} = c :$$

$$\vec{e}_0 = \zeta_{1,1} = (0,0)^T,$$

$$\vec{e}_{1,2,3,4} = \zeta_{1,2}, \zeta_{2,1}, \zeta_{3,2}, \zeta_{2,3} = (\pm 1, 0)^T c, (0, \pm 1)^T c,$$

$$\vec{e}_{5,6,7,8} = \zeta_{1,3}, \zeta_{3,1}, \zeta_{1,1}, \zeta_{3,3} = (\pm 1, \pm 1)^T c.$$

La estructura de la rejilla cuadrada es construida en el espacio físico, como muestra la figura (A1):

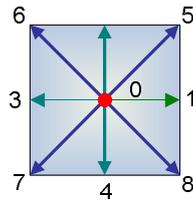


Fig.A.1 Grupo de velocidades discretas.

Con estas velocidades discretas, la ecuación (A29) da:

$$I = \sum_{\alpha=1}^9 W_{\alpha} \psi(\vec{e}_{\alpha}) f_{\alpha}^{\text{eq}}, \quad (\text{A30})$$

donde W_{α} puede ser identificado como $2\pi RT e^{\frac{\vec{e}_{\alpha}^2}{2RT}}$. Esto da la forma conocida de la función de distribución de equilibrio para cada una de las nueve velocidades y que es consistente para recobrar la ecuación de N-S ^[1]

$$f_{\alpha}^{\text{eq}} = w_{\alpha} \rho \left\{ 1 + \frac{3(\vec{e}_{\alpha} \cdot \vec{u})}{c^2} + \frac{9(\vec{e}_{\alpha} \cdot \vec{u})^2}{2c^4} - \frac{3\vec{u}^2}{2c^2} \right\}. \quad (\text{A31})$$

APENDICE B: OBTENCIÓN DE LA ECUACIÓN DE NAVIER-STOKES A PARTIR DE LA ECUACIÓN DE REDES DE BOLTZMANN

Uno de los problemas más populares en la teoría cinética, se ocupa de la derivación de las ecuaciones hidrodinámicas, esto es, bajo ciertas condiciones, la solución de $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ a una ecuación de transporte se acerca, de hecho, a una forma que se pueda relacionar directamente a una descripción continua o hidrodinámica. Es decir, bajo ciertas condiciones el proceso de transporte se acerca a un límite hidrodinámico. A pesar de que David Hilbert en 1911 fue el primero en probar la existencia de una clase de soluciones a la ecuación de Boltzmann (llamadas soluciones normales), que estaban determinadas completamente por los valores iniciales de las variables hidrodinámicas que corresponden a los invariantes de colisión (masa, momento y energía cinética), Sydney Chapman y por otra parte David Enskog en 1917 fueron los primeros en desarrollar un procedimiento sistemático para derivar las ecuaciones hidrodinámicas correspondientes (y sus correcciones de orden superior), para estas variables. A pesar de que se han propuesto diversos esquemas alternativos para generar soluciones aproximadas a la ecuación de Boltzmann (incluyendo el método de 13 momentos de Grad, las expansiones en polinomios generalizadas, funciones de distribución bimodal), el método de Chapman-Enskog sigue siendo el esquema más popular para la generalización de ecuaciones hidrodinámicas a partir de las ecuaciones cinéticas del tipo de Boltzmann. ^[7,8]

Expansión de Chapman-Enskog

Para mostrar que la ERB puede ser usada para describir el comportamiento de fluidos, las ecuaciones de NS son derivadas por un procedimiento llamado *expansión de Chapman-Enskog*, o *análisis multi-escala*. El dependerá del *numero de Knudsen*, que es como ya se ha mencionada en la primera parte de este capítulo, el cociente entre la *trayectoria libre media* y la *longitud característica*.

Para la derivación de la ecuación de NS, se divide la ecuación de Boltzmann en diferentes escalas para variables espacio y tiempo. Se basa en la expansión del parámetro ε para que el número de Knudsen sea usado. Generalmente la expansión es

truncada después de los términos de segundo orden. Para las variables temporales, se escoge la siguiente representación:

$$t = \varepsilon t_0 + \varepsilon^2 t_1. \quad (\text{B1})$$

El tiempo t representa la relajación local que es muy rápida en un fluido debido a colisiones. Es importante mencionar, que los procesos de difusión son de la escala de tiempo t_l . Aquí solamente una expansión espacial es considerada, la cual puede verse en la siguiente expansión de primer orden:

$$\vec{x} = \varepsilon \vec{x}_1. \quad (\text{B2})$$

Esto se debe al hecho de que tanto la advección; así como la difusión, se consideran similares en escala espacial " x_l ". Por tanto, la representación del operador diferencial es similar

$$\frac{\partial}{\partial x_\alpha} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \quad ; \quad \frac{\partial}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial t} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t}. \quad (\text{B3})$$

Para una expansión consistente, se necesita el término de segundo orden en el espacio. Las ecuaciones de momento de f son expandidas directamente a una sumatoria de la forma siguiente

$$f = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n f^n. \quad (\text{B4})$$

Además, se asume que la dependencia del tiempo de f es causada solamente por las variables ρ , \bar{u} y T .

El análisis para recobrar la ecuación de N-S comienza a partir de la ecuación de redes de Boltzmann

$$f_i(\bar{x} + \bar{e}_i, t+1) - f_i(\bar{x}, t) = -\frac{1}{\tau} (f_i(\bar{x}, t) - f_i^{eq}(\bar{x}, t)). \quad (B5)$$

Primeramente se realiza una expansión de Taylor del lado izquierdo de la ecuación anterior

$$f_i(\bar{x} + \bar{e}_i, t+1) - f_i(\bar{x}, t) = f_i(\bar{x}, t) + \left(e_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} + (1) \frac{\partial}{\partial t} \right) f_i(\bar{x}, t) + \frac{1}{2!} \left(e_{i\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} + (1) \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 f_i(\bar{x}, t) + \dots - \left[f_i(\bar{x}, t) + \left((0) \frac{\partial}{\partial x_\alpha} + (0) \frac{\partial}{\partial t} \right) f_i(\bar{x}, t) + \frac{1}{2!} \left((0) \frac{\partial}{\partial x_\alpha} + (0) \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 f_i(\bar{x}, t) + \dots \right].$$

Simplificando y adicionando el lado derecho de la ecuación (B5) se tiene

$$f_i(\bar{x} + \bar{e}_i, t+1) - f_i(\bar{x}, t) = \left[(\partial_t + e_{i\alpha} \partial_\alpha) + \frac{1}{2} (\partial_t + e_{i\alpha} \partial_\alpha)^2 \right] f_i(\bar{x}, t) + \dots = -\frac{1}{\tau} [f_i(\bar{x}, t) - f_i^{eq}(\bar{x}, t)], \quad (B6)$$

donde $\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}$, $\partial_\alpha = \frac{\partial}{\partial x_\alpha}$.

A continuación se introduce la técnica *multi-escala* (Expansión de *Chapman-Enskog*)

$$\partial_t = \varepsilon \partial_{t_0} + \varepsilon^2 \partial_{t_1}, \quad \partial_\alpha = \varepsilon \partial_\alpha \dots \dots \dots (B7) \quad \frac{\partial f}{\partial t} = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n \frac{\partial^{(n)} f}{\partial t} \Rightarrow \partial_t f = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n \partial_t^{(n)} f$$

$$f_i = f_i^{(0)} + \varepsilon f_i^{(1)} + \varepsilon^2 f_i^{(2)} + \dots \dots \dots (B8) \quad f = \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^n f_n$$

haciendo

$$f_i^{(0)} = f_i^{(eq)} \dots \dots \dots (B9)$$

$$\sum_{i=0}^b f_i^{(1)} = 0; \quad \sum_{i=0}^b f_i^{(1)} e_{i\alpha} = 0$$

$$\sum_{i=0}^b f_i^{(2)} = 0; \quad \sum_{i=0}^b f_i^{(2)} e_{i\alpha} = 0 \dots \dots \dots (B10)$$

donde ε es un número muy pequeño. [1, 4, 8, 9]

Aplicando (B7) y (B8) en la ecuación (B6) tenemos:

$$\left\{ \left[(\varepsilon \partial_{t_0} + \varepsilon^2 \partial_{t_1}) + (e_{i\alpha}) \right] + \frac{1}{2} \left[(\varepsilon \partial_{t_0} + \varepsilon^2 \partial_{t_1}) + (e_{i\alpha}) \right]^2 \right\} (f_i^{(0)} + \varepsilon f_i^{(1)} + \varepsilon^2 f_i^{(2)}) = -\frac{1}{\tau} (f_i^{(0)} + \varepsilon f_i^{(1)} + \varepsilon^2 f_i^{(2)} - f_i^{(eq)}). \quad (\text{B11})$$

Se puede observar que el primer orden en ε en la ecuación (B11) es:

$$\varepsilon (\partial_{t_0} + e_{i\alpha}) f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} \varepsilon f_i^{(1)}. \quad (\text{B12})$$

La densidad total de las f_i y el momento es dados por

$$\sum_i f_i = \rho; \quad \sum_i f_i e_{i\alpha} = \rho u_\alpha. \quad (\text{B13})$$

Sumando sobre i ambos lados de la ecuación (B12), además de aplicar las ecuaciones (B10) y (B13) en (B12), se obtiene

$$\partial_{t_0} \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) = 0. \quad (\text{B14})$$

La Ecuación anterior es análoga a la de continuidad ($\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{u} = 0$).

En seguida, se multiplica por $e_{i\alpha}$, además de sumar sobre i la ecuación (B12)

$$\partial_{t_0} \sum_i f_i^{(0)} e_{i\alpha} + \partial_\alpha \sum_i f_i^{(0)} e_{i\alpha} e_{i\beta} = -\frac{1}{\tau} \sum_i f_i^{(1)} e_{i\beta}, \quad (\text{B15})$$

$$\Rightarrow \partial_{t_0} \rho u_\beta + \partial_\alpha \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = 0. \quad (\text{B16})$$

Es importante mencionar que para el modelo de 9-bits, las propiedades del tensor utilizadas son las siguientes

$$\sum_i f_i^{(0)} = \rho, \quad (\text{B17.a})$$

$$\sum_i \bar{e}_{i\alpha} f_i^{(0)} = \rho u_\alpha, \quad (\text{B17.b})$$

$$\sum_i \bar{e}_{i\alpha} \bar{e}_{i\beta} f_i^{(0)} = \frac{1}{3} c^2 \rho \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta, \quad (\text{B17.c})$$

$$\sum_i \bar{e}_{i\alpha} \bar{e}_{i\beta} \bar{e}_{i\gamma} f_i^{(0)} = \frac{1}{3} c^2 \rho (\delta_{\alpha\beta} u_\gamma + \delta_{\beta\gamma} u_\alpha + \delta_{\gamma\alpha} u_\beta). \quad (\text{B17.d})$$

Tomando (B17.c) y aplicando (B10) y (B13) a la ecuación (B16) se obtiene

$$\partial_{t_0} \rho u_\beta + \partial_\alpha \rho u_\alpha u_\beta = -\partial_\alpha \frac{c^2}{3} \rho \delta_{\alpha\beta}, \quad (\text{B18})$$

$$\text{O bien } \partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta \rho u_\alpha u_\beta = -\partial_\alpha p. \quad (\text{B19})$$

La ecuación (B19) es la bien conocida como la ecuación de *Euler* para un fluido sin viscosidad. Donde $p = (1/3)c^2 \rho$.

Para el caso de la hidrodinámica de un líquido con viscosidad, ésta puede ser derivada considerando “ ε^2 ”, partiendo de la ecuación (B11) se tiene

$$(\partial_{t_0} + e_{i\alpha} \partial_\alpha) f_i^{(1)} + \left[\partial_{t_i} + \frac{1}{2} (\partial_{t_0} + e_{i\alpha} \partial_\alpha)^2 \right] f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)}, \quad (\text{B20})$$

de (B12) despejamos $f_i^{(0)}$ para tener

$$f_i^{(0)} = -\frac{f_i^{(1)}}{\tau} \frac{1}{(\partial_{t_0} + e_{i\alpha})}. \quad (\text{B12'})$$

Sustituyendo (B12') en (B20)

$$\partial_{t_i} f_i^{(0)} + (\partial_{t_0} + e_{i\alpha} \partial_\alpha) \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) f_i^{(1)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)}. \quad (\text{B21})$$

Sumando sobre i y aplicando (B10) y (B13) en la ecuación (B21) obtenemos

$$\partial_{i_1} \rho = 0. \tag{B22}$$

Multiplicando $e_{i\alpha}$ y entonces sumando sobre i ambos lados de (B21) y tomando (B10) así como (B13)

$$\partial_{i_1} \rho u_\beta + \partial_\alpha \sum_i e_{i\alpha} e_{i\beta} f_i^{(1)} \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) = 0, \tag{B23}$$

$$\text{que es } \partial_{i_1} \rho u_\beta + \partial_\alpha \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = 0, \tag{B24}$$

$$\text{donde } \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \left(\sum_i e_{i\alpha} e_{i\beta} f_i^{(1)}\right), \tag{B25}$$

la ecuación anterior se puede escribir como $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} / \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) = \left(\sum_i e_{i\alpha} e_{i\beta} f_i^{(1)}\right)$, (B25')

de la ecuación anterior $f_i^{(1)}$ puede evaluarse a partir de (B12) de la siguiente forma
 $f_i^{(1)} = -\tau (\partial_{i_0} + e_{i\alpha}) f_i^{(0)} \dots\dots\dots$ (B12')

Sustituyendo (B12') en (B25') obtenemos

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} / \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) = \sum_i e_{i\alpha} e_{i\beta} \left[-\tau (\partial_{i_0} + e_{i\alpha} \partial_\alpha) f_i^{(0)}\right]. \tag{B26}$$

O bien $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} / \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) = -\tau \left(\partial_{i_0} \sum_i e_{i\alpha} e_{i\beta} f_i^{(0)} + \partial_\alpha \sum_i e_{i\alpha} e_{i\beta} e_{i\gamma} f_i^{(0)}\right)$. (B27)

Utilizando (B17c - B17d) y aplicándolo sobre (B27) se tiene

$$\begin{aligned}
 \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} / \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) &= -\tau \left(\partial_{t_0} \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} + \partial_\alpha \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} \right), \\
 \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} / \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) &= -\tau \left\{ \partial_{t_0} \left(\frac{1}{3} c^2 \rho \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta \right) + \partial_\alpha \left[\frac{1}{3} c^2 \rho (\delta_{\alpha\beta} u_\gamma + \delta_{\gamma\alpha} u_\beta + \delta_{\beta\gamma} u_\alpha) \right] \right\}, \quad (\text{B28}) \\
 \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} / \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) &= -\tau \delta_{\alpha\beta} \partial_{t_0} \rho \frac{1}{3} c^2 - \tau \rho \frac{1}{3} c^2 \partial_{t_0} \delta_{\alpha\beta} - \tau \partial_{t_0} (\rho u_\alpha u_\beta) - \tau \frac{1}{3} c^2 \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma (\rho u_\gamma) \\
 &\quad - \tau \frac{1}{3} c^2 \partial_\alpha (\rho u_\beta) - \tau \frac{1}{3} c^2 \partial_\beta (\rho u_\alpha).
 \end{aligned}$$

De (B15) se tiene que $\partial_{t_0} \rho \frac{1}{3} c^2 = -\frac{1}{3} c^2 \partial_\gamma (\rho u_\gamma)$ Sustituyendo éste término en la ec. (B28)

$$\begin{aligned}
 \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} / \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) &= \tau \delta_{\alpha\beta} \frac{1}{3} c^2 \partial_\gamma (\rho u_\gamma) - \tau \partial_{t_0} (\rho u_\alpha u_\beta) - \tau \delta_{\alpha\beta} \frac{1}{3} c^2 \partial_\gamma (\rho u_\gamma) \\
 &\quad - \tau \frac{1}{3} c^2 \partial_\alpha (\rho u_\beta) - \tau \frac{1}{3} c^2 \partial_\beta (\rho u_\alpha), \quad (\text{B29}) \\
 \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} / \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) &= -\tau \partial_{t_0} (\rho u_\alpha u_\beta) - \tau \frac{1}{3} c^2 \rho (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha).
 \end{aligned}$$

El término $\partial_{t_0} (\rho u_\alpha u_\beta)$ en la ecuación (B29) puede desarrollarse para dar

$$\partial_{t_0} (\rho u_\alpha u_\beta) = -\frac{1}{3} c^2 (u_\beta \partial_\alpha \rho + u_\alpha \partial_\beta \rho). \quad (\text{B30})$$

Recordando que la ecuación de continuidad de continuidad en notación vectorial es

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0. \quad (\text{B31})$$

La ecuación de momento para el primer orden en ε viene dada por

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\Pi^{(0)} + \Pi^{(1)}) = 0. \quad (\text{B32})$$

En donde

$$\partial_{t_0} \rho u_\beta + \partial_\alpha \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = 0. \Rightarrow \text{Ec. de Euler} \quad (\text{B33})$$

$$\partial_{t_0} \rho u_\beta + \partial_\alpha \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} + \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = 0. \text{ Ec. de Navier - Stokes} \quad (\text{B34})$$

Sustituyendo (B30) en (B29) obtenemos

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} / \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) = -\tau \left[-\frac{1}{3} c^2 (u_\beta \partial_\alpha \rho + u_\alpha \partial_\beta \rho) \right] - \tau \frac{1}{3} c^2 \rho (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha). \quad (\text{B35})$$

Para un fluido incompresible $\rho = \text{cte.}$

$$\therefore \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = -\left(\tau - \frac{1}{2}\right) \frac{1}{3} c^2 \rho (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha). \quad (\text{B36})$$

Si ahora sustituimos (B36) en (B34):

$$\partial_{t_0} \rho u_\beta + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha p + \left(\tau - \frac{1}{2}\right) \frac{1}{3} c^2 \rho (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha). \quad (\text{B37})$$

En la ecuación anterior $\nu = \frac{1}{3} \left(\tau - \frac{1}{2}\right) c^2$ es la viscosidad cinemática.

$$\therefore \partial_t \rho u_\alpha + u_\beta \partial_\beta u_\alpha = -\frac{1}{\rho} \partial_\alpha p + \nu \nabla^2 u_\alpha. \text{ Ec. Navier-Stokes.}^{[1, 4, 10]} \quad (\text{B38})$$

Referencias

- [1] X. He and L. S. Luo. Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *Physical Review E*. 56(6):6811-6817, 1997.
- [2] B. J. Maxwell. *Lattice Boltzmann methods in interfacial wave modelling*. PhD Thesis, University of Edinburgh, 1997.
- [3] J. Wilke. *Cache Optimizations for the Lattice Boltzmann Method in 2D*. PhD Thesis, Erlangen, 2003.
- [4] N. ThÄurey. *A single-phase free-surface lattice Boltzmann*. PhD Thesis, Erlangen, 2003.
- [5] P. J. Davis and P. Rabinowitz. *Methods of numerical integration*. Academic Press, 2^a Sub edition, Jun 1984.
- [6] Y. H. Qian, D. d’Humières and P. Lallemand. Lattice BGK models for the Navier-Stokes equations. *Europhys. Lett.* 17(6): 479 - 484, 1992.
- [7] J. James and R. William, *Transport Theory*, Jonh Wiley & Sons, Inc., 1979.
- [8] C. Cercignani. *The Boltzmann Equation and Its Applications*, Springer-Verlag New York Berlin Heidelberg, 1988.
- [9] J. L. Lebowitz and E. W. Montroll. *Nonequilibrium Phenomena I. The Boltzmann Equation*. North-Holland Publishing Company, 1993.
- [10] X. He and L. S. Luo. Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier-Stokes equation. *Journal of Statistical Physics*. 88(3/4): 927-944, 1997.

LATTICE-BOLTZMANN SIMULATION OF SAGO (METROXYLON SAGU) STARCH SOLUTIONS IN POROUS MEDIA

Luis Velázquez-Ortega* and Suemi Rodríguez-Romo

CIT-FESC, Universidad Nacional Autónoma de México, Apdo. Postal 142, Cuautitlán Izcalli, Edo. de Méx., 54750 México

From rheological experiments in gelatinized sago starch solution already reported in the literature and a Lattice-Boltzmann simulation, we provide some insight into the understanding of the non-Newtonian fluid dynamics of sago-starch-type solutions in porous media. In this paper, permeability and wall shear stress in arbitrarily generated and randomly generated porous media are predicted in the range of the modified Darcy's law. Additional results on flow paths, velocity, shear-stress tensor, and pressure fields are provided. We prove that our LBE model for sago starch solutions reproduces Blake-Kozeny and Ergun laws. The model presented in this paper is intended to be used for simulating packed beds.

À partir d'expériences rhéologiques dans des solutions d'amidon de sagou gélatinisé publiées antérieurement dans la littérature scientifique, ainsi qu'une simulation de type réseau de Boltzmann, nous apportons de nouveaux éléments pour comprendre la dynamique des fluides non newtoniens des solutions du type amidon de sagou en milieu poreux. Dans cet article, la perméabilité et la contrainte de cisaillement en milieu poreux produit arbitrairement et aléatoirement sont prédites dans la gamme de la loi de Darcy modifiée. Des résultats additionnels sur les trajectoires d'écoulement, la vitesse, le tenseur de contrainte de cisaillement et les champs de pression sont fournis. Nous prouvons que le modèle LBE pour des solutions d'amidon de sagou reproduit les lois de Blake-Kozeny et Ergun. Le modèle présenté dans cet article est destiné à la simulation des lits garnis.

Keywords: lattice-Boltzmann; porous media, wall shear stress, permeability, sago starch

INTRODUCTION

Hydrodynamic characterization of non-Newtonian fluids through porous media is a topic of practical technological importance for packed bed reactors (Freund et al., 2005), fixed bed regeneration (Zhang and Ren, 2003), and blood flow (Artoli et al., 2004; Ouared and Chopard, 2005), among others. We are concerned with the analysis of packed bed models focused on the motion of non-Newtonian fluids through a rigid porous medium with applications in chemical engineering and equipment design. We study pressure, velocity, and shear fields in a number of two-dimensional porous media for sago starch solutions. The effect of randomness on these fields is also researched. In addition, permeability and wall shear stress are analyzed.

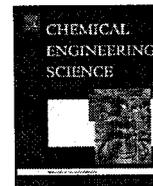
The study of pressure changes across a packed column as a function of flow rate is important when designing a pump for a specific fluid in order to reduce the costs of the system, but also to maintain optimal operating conditions and to maximize production. From the existence of a mesoscopic pressure field with a uniform gradient, transfer coefficients are found as a function of

the porous structure (Liapis, 2005). From LBE, pressure fields are obtained in this paper for non-Newtonian solutions in a number of porous media.

The velocity field is necessary for modelling the structure and the flow within a packed bed. Furthermore, back flow, stagnant volumes, and regions with high gradients of single velocity components can be detected. Actually, the fluctuating component of the velocity field is important in order to understand the irreversibility nature of dispersions (Khrapitchev and Callaghan, 2003). We research these topics for pseudoplastic solutions and an LBE model.

We also study permeability in order to understand the dependence of bed permeability on the local void fraction, which can be used to scale up models for maldistributions on a scale

* Author to whom correspondence may be addressed.
E-mail address: siulj@servidor.unam.com
Can. J. Chem. Eng. 86:667-675, 2008
© 2008 Canadian Society for Chemical Engineering
DOI 10.1002/cjce.20081



Local effective permeability distributions for non-Newtonian fluids by the lattice Boltzmann equation

Luis Velázquez-Ortega*, Suemi Rodríguez-Romo

Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán, Universidad Nacional Autónoma de México. Apdo. Postal 142, Cuautitlán Izcalli, Edo. de Méx. 54740, México

ARTICLE INFO

Article history:

Received 17 March 2008
Received in revised form 19 November 2008
Accepted 27 February 2009
Available online 9 March 2009

PACS:

05.10–a
05.60–k
47.11+j
47.15–x
47.50.+d

Keywords:

Lattice Boltzmann
Local effective permeability distributions
Non-Newtonian fluids
Porous media
Packed beds
Randomness

ABSTRACT

Effective permeability of porous media in subsurface environments (or packed beds in reactors, for instance) is subject to potentially large uncertainties due to heterogeneity of natural systems. We present a lattice Boltzmann method (LBM) to study the flow of single-phase non-Newtonian fluids by using a power law effective viscosity in different bidimensional porous media; arbitrarily and randomly generated. Macroscale-equivalent local effective permeability distributions and permeability bands at core scale are predicted.

Our final goal is to propose a method for constructing core predictions from data obtained in thin samples of porous media, especially for non-Newtonian fluids (contaminated aquifers, petrochemicals and oil, for instance) whenever experiments are costly or just not available.

© 2009 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

Flow through porous media has been a topic of longstanding interest in many areas of science and engineering. Besides, flow behavior of non-Newtonian fluids is of high interest to a broad range of disciplines in both science and technology. In particular, the oil field industry is interested in fluids for applications such as hydraulic fracturing to increase oil production from reservoirs with a low natural effective permeability. These are generally complex fluids which show non-Newtonian behavior. Because of the nature of the application, the flow of such complex fluids in porous media is extremely important to the industry. Numerous studies have employed stochastic methods to model groundwater flow in subsurface porous media by assuming effective permeability probability density, including the use of normal (Sitar et al., 1987) and gamma distributions (Cooke et al., 1995). Similar studies have been performed in packed beds for chemical reactors whenever the kinetics is followed by rheological parameters, for instance.

Permeability measurements are difficult to obtain when sample availability is restricted, dimensions are limited, or materials are poorly consolidated. For instance, in subsurface cores of ground containing thin, tabular compaction bands (CB), all three challenges can arise. Lattice Boltzmann methods for estimating permeability from thin sections provides an alternative. Applied to natural grounds (see Table 1) the estimates can be used to capture the range of both matrix and CB permeability from a single, representative thin section. The technique also provides a tool for estimating permeability anisotropy due to bed bands in grounds (see the bands obtained in this paper, from Figs. 3–9, for examples). Our results can be invaluable for subsurfaces with natural porous media equivalent to the ones presented in this paper; since pervasive arrays of compaction bands in grounds have been shown to be capable of exerting substantial fluid, flow effects at scales relevant to aquifer and reservoir management.

Our system uses porous matrix in 2-D or 3-D models whenever the third dimension is very small compared to the other two dimensions, and where the velocity component along the third dimension is zero. The use of 2-D simulations allows reducing significantly the computational cost of the calculation; this has been done in the form of pseudo 2-D capillary networks (Venturoli and Boek, 2006).

* Corresponding author. Tel.: +525558711704.

E-mail address: siluf@servidor.unam.mx (L. Velázquez-Ortega).